Anderson-Lokalisierung ^{und} Hochfrequenzinduzierte Polarisation

von

ultrakalten Neutronen

Christina Stellmach

INAUGURAL - DISSERTATION

zur Erlangung der Doktorwürde

der Naturwissenschaftlich-Mathematischen Gesamtfakultät

> der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

vorgelegt von Dipl.-Phys. Christina Stellmach aus Bernkastel a.d. Mosel

Tag der mündlichen Prüfung: 2. Dezember 1998

Anderson-Lokalisierung ^{und} Hochfrequenzinduzierte Polarisation

von

ultrakalten Neutronen

Gutachter: Prof. Dr. Dirk Dubbers

Priv. Doz. Dr. Klaus Jungmann

Abstracts:

Im Rahmen von Untersuchungen an Metall-Isolator-Übergängen schlug Anderson im Jahre 1958 einen völlig neuen Mechanismus vor. Dieser Mechanismus sollte nicht eine Folge spezieller Eigenschaften von Elektronen sein, sondern bei der diffusiven Ausbreitung aller Wellen, d.h. klassischer Wellen und quantenmechanischer Teilchen, auftreten: Bewegt sich eine Welle durch ein stark kohärent streuendes ungeordnetes Medium, so kehrt sie mit hoher Wahrscheinlichkeit immer wieder zu ihrem Ausgangspunkt zurück. Für ein klassisches, durch das Random-walk-Modell beschriebenes Teilchen, ist dieser Prozeß extrem unwahrscheinlich. In der Wellen- und Quantenmechanik jedoch interferieren alle möglichen Streupfade. Die konstruktive Interferenz von jedem geschlossenen Streupfad mit seinem zeitumgekehrten Partner erhöht die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten eines geschlossenen Weges. Dieser sogenannte Lokalisierungseffekt wurde bereits mit Elektronen, Licht und akustischen Wellen nachzuweisen versucht. Ein eindeutiger Nachweis ist bisher jedoch aufgrund von komplizierten Wechselwirkungen der Teilchen bzw. Wellen mit dem ungeordneten Medium nicht gelungen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Frage nach möglicher Anderson-Lokalisierung von ultrakalten Neutronen in verschiedenen stark diffus streuenden Pulverproben mit verschwindend geringer Absorption, z.B. Ruß, Diamant, Al₂O₃, SiO₂, MgO, untersucht.

Im zweiten Teil der Arbeit wird ein weiteres quantenmechanisches Phänomen, die vollständige und verlustfreie Polarisation von ultrakalten Neutronen durch induzierte Emission bzw. Absorption von Photonen, beschrieben. In einem statischen Magnetfeldgradienten spalten die kinetischen Energienieveaus der Neutronen auf, sodaß sich die beiden Spinzustände unterschiedlich schnell durch das Feld bewegen. Durch geschickte Abstimmung dieses konstanten und eines zusätzlich eingestrahlten hochfrequenten Magnetfeldes ist es uns gelungen, einen ursprünglich unpolarisierten Strahl zu ca. 44 % zu polarisieren.

While studying metal-insolator transitions in 1958 Anderson proposed an entirely new mechanism. This mechanism does not rely on the special properties of the electron but applies to all waves, classical waves and quantum mechanical particles. Propagating waves in a diffusive scattering medium have a high probability for returning to its origin according to this mechanism. For a classical particle undergoing random motion this process is highly improbable. In the quantum mechanical description all possible paths interfere. This leads to a greater weight for closed loops where the time reversed counterparts interfere constructively. This so-called localization effect has already been searched for with electrons, light and acoustic waves. Clear-cut evidence has not been found due to complicated interactions of the particles or waves in disordered media. In this work we tried to discover the effect with ultra-cold neutrons in different diffusive scattering powder samples with negligible absorption (e.g. carbon black, diamond, Al_2O_3 , SiO_2 , MgO).

In the second part of this work another quantum-mechanical experiment, the loss-free polarization of ultra-cold neutrons by induced absorption or emission is described. The energy of the two spin states of the neutrons split and the times of flight differ while passing through a constant magnetic field. Starting with an initially unpolarized beam we achieved a polarization of ca. 44 % by tuning this constant field and an additionally applied high frequency field.

Inhaltsverzeichnis

1	Ein	Einleitung						
2	Ult	Ultrakalte Neutronen						
	2.1	Ultrakalte Neutronen						
		2.1.1	Allgemeine Eigenschaften	7				
		2.1.2	Die UCN-Quelle	10				
3	And	lerson	-Lokalisierung	13				
	3.1	Das A	nderson-Modell	13				
		3.1.1	Metall-Isolator-Übergang	16				
		3.1.2	Quantenmechanische und klassische Lokalisierung	17				
	3.2	Ander	son-Lokalisierung als Interferenzeffekt	19				
		3.2.1	Kohärente Rückstreuung	21				
		3.2.2	Theorie der klassischen Diffusion	24				
		3.2.3	Renormierung der Diffusion	30				
		3.2.4	Experimente zur Anderson-Lokalisierung	32				
	3.3	Streuu	ing von ultrakalten Neutronen	38				
		3.3.1	Elastische Streuung	39				
		3.3.2	Inelastische Streuung und Absorption	45				
	3.4	Ander	son-Lokalisierung von ultrakalten Neutronen	47				
		3.4.1	Die Proben	47				
		3.4.2	Elastische Streuung ultrakalter Neutronen in der Probe	51				
	3.5	Das E	$\mathbf{x} \mathbf{p} \mathbf{r} \mathbf{i} \mathbf{m} \mathbf{e} \mathbf{n} \mathbf{t}$	66				
		3.5.1	Der experimentelle Aufbau	66				
		3.5.2	Die Flugzeitmessung	67				
		3.5.3	Der Detektor	69				
		3.5.4	Die Präparation der Proben	71				
		3.5.5	Das Magnetfeld	72				

A	\mathbf{Der}	Zeite	ntwicklungsoperator	115					
5	Zus	amme	nfassung	113					
	4.4	Zusan	nmenfassung und Ausblick	112					
	4.3	Exper	imentelle Ergebnisse	110					
		4.2.2	Die erreichbare Polarisation	109					
		4.2.1	Der experimentelle Aufbau	102					
	4.2	Das E	$\mathbf{x} \mathbf{p} \mathbf{r} \mathbf{i} \mathbf{m} \mathbf{e} \mathbf{n} \mathbf{t}$	102					
		4.1.2	Hochfrequenzinduzierte Polarisation	97					
		4.1.1	Konventionelle Polarisatoren	95					
	4.1	Polari	sation ultrakalter Neutronen	95					
4	Hochfrequenzinduzierte Polarisation								
		3.7.3	Erste Experimente	93					
		3.7.2	Die kohärente Rückstreuung	92					
		3.7.1	Die Invarianz unter Zeitumkehrtransformation	91					
	3.7	Zeitun	nkehrinvarianz in der kohärenten Rückstreuung	91					
		3.6.3	Transmission diffus streuender Medien	82					
		3.6.2	Transmission der Substrate	78					
		3.6.1	Flugzeitmessung ultrakalter Neutronen	74					
	3.6 Experimentelle Ergebnisse								

Kapitel 1

Einleitung

Neutronen haben einige Eigenschaften, die sie zu einem idealen Werkzeug zahlreicher Forschungsgebiete machen. Nach dem Dualitätsprinzip der Quantentheorie lassen sich Neutronen sowohl als Teilchen als auch als Welle betrachten, sodaß Beugungsexperimente mit Neutronen analog zur Röntgenstrukturanalyse die Auflösung submikroskopischer Strukturen ermöglichen und somit ergänzende Informationen über den Aufbau der Materie liefern. Die Wellenlänge von Neutronen ist durch ihre kinetische Energie bestimmt. Deshalb werden an Neutronenquellen von Forschungseinrichtungen die entstehenden sehr hochenergetischen Neutronen in verschiedenen Moderatoren abgebremst um eine Anpassung von Energie und Wellenlänge der Neutronen an die Größe der interessierenden Struktur zu ermöglichen.

Eigenschaften der Neutronen selbst lassen sich am besten an *ultrakalten*, d.h. mit Geschwindigkeiten von 5-15 m/s ultra-langsamen, Neutronen (<u>U</u>ltra <u>Cold N</u>eutrons (UCNs)) untersuchen. Aufgrund ihrer niedrigen Energie von wenigen hundert neV werden ultrakalte Neutronen von den meisten Materialien unter nahezu beliebigen Einfallswinkeln reflektiert, sodaß sie sich in Flaschen speichern und langezeit beobachten lassen. Beispielsweise läßt sich in einem derartigen Speicherexperiment die Lebensdauer des Neutrons mit hoher Genauigkeit bestimmen.

Darüberhinaus stellen ultrakalte Neutronen ideale Modellteilchen der Quantentheorie dar. Im Bereich ihrer Energie und Wellenlänge treten subtile Effekte der Quantenphysik klarer zutage als in anderen Systemen, in denen sie aufgrund störender Effekte von Ladung und komplexer Wechselwirkung nur schwer nachzuweisen sind.

Im Rahmen dieser Arbeit sollen zwei derartige Effekte der Quantenphysik mit ultrakalten Neutronen experimentell untersucht werden.

Der erste Teil der Arbeit beschäftigt sich mit dem Phänomen der Andersonlokalisierung, einem Wellen-Interferenz-Effekt, der im Jahre 1958 von P.W. Anderson [5] postuliert wurde, bisher jedoch experimentell nicht eindeutig nachgewiesen werden konnte: In einem ungeordneten stark elastisch streuenden Medium wird die Ausbreitung einer klassischen Welle oder eines quantenmechanischen Teilchens eines bestimmten Wellenlängenbereichs dadurch gehemmt, daß sie mit großer Wahrscheinlichkeit immer wieder zu ihrem Ausgangspunkt zurückkehren.

Im klassischen Irrflugmodell ('Random-Walk'), das die Ausbreitung einer klassischen Billardkugel in einem ungeordneten, isotrop streuenden Medium beschreibt, ist diese Rückkehrwahrscheinlichkeit beliebig klein. Die Wahrscheinlichkeit, daß sich ein Teilchen von Punkt A nach Punkt B bewegt, ist im Rahmen der klassischen Statistik durch die Summe aller Möglichkeiten auf verschiedenen Wegen von A nach B zu gelangen gegeben. Die Wahrscheinlichkeit, daß eine *Welle* von Punkt A nach B gelangt, entspricht dem Betragsquadrat der Überlagerung aller Wellenamplituden und damit nicht allein der Summe aller einzelnen Möglichkeiten, da Wellen im Gegensatz zu klassischen Billardkugeln miteinander interferieren. Vorausgesetzt, daß alle einzelnen Streuprozesse rein elastisch und kohärent sind, ist die Interferenz der Welle, die einen geschlossenen Streupfad durchläuft, mit ihrem zeitumgekehrten Partner, d.h. der Welle, die den gleichen Weg in umgekehrter Richtung durchläuft, immer konstruktiv. Dies führt zu einer Erhöhung der Intensität der Welle bzw. der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des quantenmechanischen Teilchens am Ausgangspunkt um einen Faktor zwei gegenüber der Rückkehrwahrscheinlichkeit einer klassischen Billardkugel. Erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Ausgangspunkt bedeutet jedoch, daß sich Wellen und quantenmechanische Teilchen im stark elastisch streuenden Medium nicht fortbewegen, sondern in einem begrenzten Raumbereich des Mediums bleiben, was als *Lokalisierung* bezeichnet wird.

Die Größe dieses Effekts hängt vom Verhältnis der Wellenlänge zur mittleren freien Weglänge der Welle im streuenden Medium ab. Da im Rahmen der Quantentheorie jeder im Bereich der Unschärferelation 'geschlossene' Weg zu konstruktiver Interferenz der Welle führt, kann dieser auch als *kohärente Rückstreuung* bezeichnete Mechanismus sogar zu einem Phasenübergang, charakterisiert durch einen völligen Zusammenbruch der Diffusion, führen.

Als Wellen-Interferenz-Phänomen, das einzig auf starker elastischer Streuung einer Welle in einem ungeordneten Medium beruht, sollten derartige Lokalisierungseffekte in zahlreichen Prozessen der Physik auftreten. Denken wir neben der elektrischen Leitung in verunreinigten Metallen oder dotierten Halbleitern nur an die Ausbreitung des Sonnenlichts in einer Wolke, die Ausbreitung einer Wasserwelle in einem steinigen Flußbett, die Ausbreitung akustischer Wellen in einem Gebäude oder im Wald oder die Streuung von Radiowellen an Plasmafluktuationen in der Ionosphäre. Ein Zusammenbruch der Wellenausbreitung würde hier dazu führen, daß eine Wolke für den entsprechenden Wellenlängenbereich des Sonnenlichts undurchsichtig wäre und bestimmte Bänder von Radiofrequenzen die Ionosphäre nicht durchdringen könnten. Bereiche von Schallfrequenzen blieben in verwinkelten Gebäuden oder im Wald unter Umständen unhörbar. Nie vermeidbare Inhomogenitäten bei der Materialherstellung könnten zu Lokalisierungszentren für Schwingungen werden und damit zu starkem Materialstreß und Materialbrüchen führen. Andererseits könnte diese Andersonlokalisierung von Wellen genutzt werden um ungewollte Schwingungen, beispielsweise in Turbinen oder Rädern, gezielt zu dämpfen ([8],[43]).

Neben der Wellennatur von Teilchen setzt das Phänomen der Andersonlokalisierung die Invarianz der auftretenden Streuprozesse gegenüber Zeitumkehrtransformation voraus. Ein experimenteller Nachweis der Andersonlokalisierung würde daher nicht nur einen interessanten Interferenzeffekt der Quantenphysik sichtbar machen, sondern auch eine Untersuchung der Zeitumkehrinvarianz der relevanten Wechselwirkungen ermöglichen.

Nach einer Einführung in die Erzeugung und Eigenschaften von ultrakalten Neutronen in Kapitel 2 werden in Kapitel 3.1 und 3.2 zunächst die Theorie der Andersonlokalisierung und einige bereits durchgeführte Experimente vorgestellt. Die elastische Streuung von ultrakalten Neutronen im allgemeinen wird in Kapitel 3.3, speziell in den von uns ausgewählten Proben in Kapitel 3.4 behandelt, bevor in Kap 3.5 und 3.6 das Experiment, erste experimentelle Untersuchungen und Ergebnisse beschrieben werden.

Der zweite Teil der Arbeit beschäftigt sich mit der Hochfrequenzinduzierten Polarisation von ultrakalten Neutronen. Ein unpolarisierter Neutronenstrahl besteht bezüglich eines äußeren Magnetfeldes zunächst aus 50 % Neutronen mit 'Spin-Up'- und 50 % mit 'Spin-Down'. Einen Neutronenstrahl, der nur eine Spinkomponente enthält, bezeichnet man als polarisiert. Während konventionelle Polarisationsmethoden die gewünschte Spinrichtung der Teilchen aus einem unpolarisierten Strahl herausfiltern und damit immer zu einem Intensitätsverlust von mindestens 50% der Neutronen führen, ist es aufgrund der Wechselwirkung von Neutronen mit einem Magnetfeld möglich mithilfe einer geeigneten Überlagerung eines statischen Magnetfeldes und eines Hochfrequenzfeldes einen zunächst unpolarisierten Strahl eines schmalen Energiebandes vollständig und verlustfrei zu polarisieren. In der Magnetfeldregion wird dabei jede Spinkomponente gerade so weit gedreht, daß nach Verlassen des Magnetfeldes *alle* Spins in die gleiche Richtung zeigen. Da nämlich sowohl die Energie ultrakalter Neutronen und deren Zeeman-Aufspaltung im statischen Magnetfeld als auch die Lamorfrequenz und die Frequenz des oszillierenden Magnetfeldes von der gleichen Größenordnung sind, koppelt der Spin sehr stark an diese Felder. Die entstehende Polarisation ist somit eine Folge von induzierter Absorption bzw. Emission von Spin-1-Feldquanten, d.h. im erweiterten Sinne von 'Photonen', was auch als *Optisches Pumpen* von ultrakalten Neutronen bezeichnet werden kann.

In Kap 4.1 wird das Auftreten der hochfrequenzinduzierten Polarisation im Rahmen der klassischen Quantenmechanik als Lösung der Operator-Schrödingergleichung für den entsprechenden Zeitentwicklungsoperator des Systems behandelt. In Kap 4.2 und 4.3 werden das Experiment und erste Ergebnisse vorgestellt.

In Kap 5 folgt eine Zusammenfassung der Ergebnisse dieser Arbeit und ein Ausblick auf mögliche Erweiterungen der Experimente.

Kapitel 2

Ultrakalte Neutronen

2.1 Ultrakalte Neutronen

Die Experimente mit ultrakalten Neutronen wurden am Hochflußreaktor (HFR) des Instituts Laue-Langevin (ILL) in Grenoble (Frankreich) durchgeführt. In Abb.2.1 befindet sich in der linken unteren Bildecke die Reaktorkuppel des Instituts. Ein Ausschnitt des Ringbeschleunigers der benachbarten ESRF (Electron Synchrotron Radiation Facility) ist ebenfalls zu erkennen.

Das ILL verfügt derzeit über die intensivste nutzbare UCN-Quelle der Welt [23].



Abbildung 2.1: Institut Laue-Langevin: Hochflußreaktor in Grenoble, Frankreich

Abb.2.2 zeigt schematisch den Aufbau des Reaktors.

Im Reaktorkern (1) aus niedrig angereichtertem Uran werden bei der Spaltung von Urankernen Neutronen mit Energien von einigen MeV und Geschwindigkeiten von etwa einem zehntel der Lichtgeschwindigkeit freigesetzt. Mit Hilfe eines Regelstabes (2) unterhalb des Reaktorkerns wird die thermische Leistung des Reaktors konstant auf 58 MW gehalten. Zur Kühlung des Brennstabs und zur Moderation der Neutronen ist der Reaktorkern von schwerem Wasser (D₂O) umgeben, das seinerseits in einem Kühlkreislauf unter Wärmeaustausch mit leichtem Wasser gekühlt wird. Zur biologischen Abschirmung des Reaktorkerns gegenüber der Außenwelt befindet sich der D₂O-Tank in einem mit leichtem Wasser gefüllten Becken.



Abbildung 2.2: Aufbau des Reaktors

Durch Stöße mit dem auf Zimmertemperatur (300 K) befindlichen schweren Wasser D₂O werden die Neutronen moderiert. Bereits nach wenigen (etwa 15) Stößen steht das Neutronen'gas' im thermischen Gleichgewicht mit dem Moderator, sodaß die Energieverteilung dieser thermischen Neutronen durch eine der Temperatur von 300 K entsprechende Maxwellverteilung mit einem Maximum bei einer Energie von 25 meV, d.h. einer Geschwindigkeit von 2.2 km/sec, gegeben ist.

Nach dieser ersten Moderation steht ein Fluß von ca. 10¹⁵ thermischen Neutronen pro Sekunde zur Verfügung, der z.T. direkt in Experimenten genutzt, z.T. in folgenden Moderatoren weiter abgebremst bzw. gezielt beschleunigt wird.

• In der sogenannten *heißen Quelle*, bestehend aus einem Graphitblock bei einer Temperatur von 2400 K, wird ein Teil der thermischen Neutronen durch Stöße beschleunigt. Das Energiespektrum dieser *heißen* Neutronen hat ein Maximum bei ca. 206 meV, entsprechend einer Geschwindigkeit von ca. 6.3 km/s.

• In zwei sogenannten kalten Quellen, bestehend aus flüssigem Deuterium bei einer Temperatur von 25 K, werden Neutronen durch Stöße abgebremst. Je nach Gestalt des mit Deuterium gefüllten Gefäßes unterscheiden sich die Energieverteilungen der kalten Neutronen, welche sich hier nicht im thermischen Gleichgewicht mit dem Moderator befinden. Die vertikale kalte Quelle erzeugt ein untermoderiertes Spektrum, bestehend aus zwei überlagerten Maxwellverteilungen bei mittleren Temperaturen von 40 bzw. 100 K.

Sehr kalte Neutronen mit einer mittleren kinetischen Energie von $\bar{E} \simeq 10 \,\mu\text{eV}$ ($\bar{v} \simeq 50 \,\text{m/s}$, T $\simeq 150 \,\text{mK}$) und ultrakalte Neutronen mit Energien von $\bar{E} \simeq 100 \,\text{neV}$ ($\bar{v} \simeq 5 \,\text{m/s}$, T $\simeq 2 \,\text{mK}$) können nicht mehr durch weitere Abkühlung in Moderatoren gewonnen werden. Sie werden aus dem Spektrum kalter Neutronen extrahiert. Dabei werden einige wesentliche Eigenschaften von Neutronen, insbesondere von ultrakalten, ausgenutzt, die im folgenden kurz zusammengestellt werden.

2.1.1 Allgemeine Eigenschaften

Ultrakalte Neutronen mit Energien von wenigen 100 neV verhalten sich wie ein diffusives Gas der entsprechenden Temperatur $T \simeq 2$ mK. Sie bewegen sich mit Geschwindigkeiten von maximal 20 m/s, d.h. maximal 70 km/h, sodaß man ihnen joggend, mit dem Fahrrad, oder zumindest ganz bequem mit dem Auto folgen kann.

Als massives, neutrales Kernteilchen unterliegt das Neutron allen Wechselwirkungen mit Ausnahme der elektrischen.

Starke Wechselwirkung: Aufgrund seiner geringen kinetischen Energie kann ein ultrakaltes Neutron fast keinen Festkörper mehr durchdringen, sondern wird an dessen Oberfläche reflektiert. Die dafür verantwortliche starke Wechselwirkung zwischen Nukleonen kann durch einen Potentialtopf einer Tiefe von $V_o \simeq -40$ MeV und einer Reichweite von $a_o \simeq 2$ fm beschrieben werden (siehe Kap 3.3). Da die De-Broglie-Wellenlänge ultrakalter Neutronen mit $\lambda \sim 10 - 100$ nm dem $10^7 - 10^8$ -fachen der Reichweite der starken Wechselwirkung mit einem einzelnen Kern entspricht, 'sehen' UCNs im Gegensatz zu thermischen Neutronen mit De-Broglie-Wellenlängen von wenigen Ådie einzelnen Kerne eines Festkörpers nicht. Nach E.Fermi [19] spüren sie ein über alle Kerne gemitteltes homogenes Potential, das sogenannte effektive Fermipotential, an dem sie wie Licht in der geometrischen Optik reflektiert bzw. gebrochen werden. Dem effektiven Fermipotential der meisten Elemente entspricht ein Brechungsindex n < 1, sodaß UCNs an diesen wie Licht an einem optisch dünneren Medium totalreflektiert werden, wenn die zur Oberfläche senkrechte Komponente ihrer Geschwindigkeit einen materialspezifischen kritischen Wert v_{cr} nicht überschreitet. Die einzigen Ausnahmen bilden Wasserstoff und Titan mit Brechungsindizes n > 1. Da sich die Brechungsindizes aller Materialien nur wenig von Eins unterscheiden, kann zwar die Phasengeschwindigkeit von Neutronen im Medium geringfügig größer sein als im Vakuum, die Gruppen- und damit die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Neutronen ist jedoch immer kleiner. Die effektiven Fermipotentiale aller gängigen Materialien betragen ca. 50 bis 300 neV, sind also vergleichbar mit der kinetischen Energie ultrakalter Neutronen, sodaß diese auch unter sehr großen Einfallswinkeln totalflektiert werden. Dadurch wird es möglich sie in Rohren zu leiten und in Gefäßen zu speichern (siehe Abb.2.3).

Natürlich lassen sich auch schnellere Neutronen in Rohren leiten, solange ihre zur Rohrwand senkrechte Geschwindigkeitskomponente die kritische Geschwindigkeit des Rohrmaterials nicht überschreitet, d.h. solange der Neutronenstrahl hinreichend parallel zu einem möglichst wenig gekrümmten *Neutronenleiter* verläuft. Auf diese Weise können thermische



Abbildung 2.3: Ultrakalte Neutronen lassen sich in Rohren leiten und in Flaschen speichern.

und kalte Neutronen mithilfe von Neutronenleitern in außerhalb des Reaktorgebäudes befindliche Experimentierhallen geführt werden, wo sich an jedem dieser Leiter mehrere Experimentierplätze befinden. Durch eine leichte Krümmung der Leiter wird erreicht, daß den Experimenten die direkte Sicht auf den Reaktorkern genommen wird, wodurch der Untergrund an ebenfalls im Reaktorkern freiwerdender Gammastrahlung stark unterdrückt wird. Lediglich Experimente mit *heißen* Neutronen müssen möglichst nahe am Reaktor durchgeführt werden.

Schwache Wechselwirkung: Aufgrund der schwachen Wechselwirkung ist das freie Neutron nicht stabil, sondern zerfällt mit einer Halbwertszeit von $\tau_{\beta} = (886.7 \pm 1.9)$ sec in einem β -Zerfall

$$n \longrightarrow p + e^- + \overline{\nu_e}$$

unter Freisetzung einer Energie von 782 keV. Für unsere (Strahl-)Experimente mit UCNs ist die endliche Lebensdauer des freien Neutrons jedoch unerheblich, weshalb hier nicht weiter auf die schwache Wechselwirkung eingegangen werden soll.

Gravitation: Im Gravitationsfeld der Erde

 $V_q = m_N g h$

hat das Neutron mit einer Masse von $m_N = (939.485 \pm 0.051)$ MeV / $c^2 \simeq 1.6749 \cdot 10^{-27}$ kg eine potentielle Energie von $V_g = 102.4$ neV / m ·h[m].

Für thermische Neutronen mit kinetischen Energien von einigen meV entspricht dies einer potentiellen Energie von $V_g \simeq 10^{-6} E_{kin}$ und ist damit vernachlässigbar klein. Ein ultrakaltes Neutron mit einer kinetischen Energie von $E_{kin} = 102.4$ neV entsprechend einer Geschwindigkeit von v = 4.43 m/sec kann jedoch gegen das Gravitationspotential der Erde nur einen Meter steigen, bevor es zur Umkehr gezwungen wird und hinunterfällt. Ein mit v = 5 m/sec horizontal startendes UCN beschreibt im Gravitationsfeld eine Wurfparabel und ist nach einem Meter Flugstrecke bereits um $\Delta h \sim 20$ cm gefallen.

Magnetische Wechselwirkung: Mit einem Magnetfeld wechselwirkt das Neutron aufgrund seines magnetischen Moments $\vec{\mu} = \gamma \cdot \vec{S}$, das mit einem gyromagnetischen Verhältnis von $\gamma = -183.25 \text{ MHz/T}$ an seinen Spin $\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$ koppelt. Die Wechselwirkungsenergie eines magnetischen Moments mit einem äußeren Magnetfeld beträgt $V_m = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ und hängt damit von der relativen Spinstellung des Neutrons zum Magnetfeld ab. Ein unpolarisierter Neutronenstrahl besteht in einem äußeren Magnetfeld aus einer inkohärenten Mischung von 50 % Neutronen mit zum Magnetfeld parallelem (spin Up) und 50 % mit antiparallelem Spin (spin Down). Die Wechselwirkung der Neutronen mit dem Magnetfeld führt zu einer Zeeman-Aufspaltung der kinetischen Energie von $\Delta E_{kin} = 2\mu B \simeq 120 neV/T$ (Abb.2.4a). Neutronen mit antiparallelem Spin. Dieser Effekt ist als longitudinaler Stern-Gerlach-Effekt bekannt. Während die Zeeman-Aufspaltung in Magnetfeldern von einigen Tesla nur einen Bruchteil der kinetischen Energie von thermischen Neutronen ausmacht, ist sie für ultrakalte Neutronen von der gleichen Größenordnung wie deren kinetische Energie, sodaß Neutronen mit zum Magnetfeld parallelem Spin sogar von diesem reflektiert werden können (siehe Abb.2.4b).



Abbildung 2.4: Die Zeeman-Aufspaltung der kinetischen Energie im Magnetfeld kann wie im Fall b zur Reflexion einer Spinkomponente durch das Magnetfeld führen.

Ein senkrecht zum Magnetfeld polarisiertes Neutron führt unabhängig von seiner kinetischen Energie eine Lamorpräzession mit der Kreisfrequenz

$$\omega_L = 183.25 \text{ MHz/T} = 183.25 \text{ Hz/}\mu\text{T}$$

aus. Im Erdmagnetfeld von ca. 50 μT beispielsweise präzediert ein Neutron mit der Kreisfrequenz $\omega=9.15$ kHz, entsprechend einer Frequenz von $\nu=\omega/2\pi=1.46$ kHz .

Die Wechselwirkung des Neutronenspins mit den Kernspins magnetischer Materialien wird als magnetische Streuung bezeichnet und kann ebenso wie die starke Wechselwirkung durch ein effektives Potential beschrieben werden (siehe Kap.3.3).

2.1.2 Die UCN-Quelle

Sehr kalte und ultrakalte Neutronen werden nicht mehr durch weitere Moderation, sondern durch Extraktion aus dem Spektrum kalter Neutronen gewonnen, indem sie zu einem Anteil von ca. 10⁻¹¹ vorhanden sind. Durch entsprechend stark gekrümmte horizontale Neutronenleiter, an deren Innenwänden nur hinreichend kalte Neutronen reflektiert werden, könnten sie relativ einfach aus dem Spektrum kalter Neutronen extrahiert werden. Aufgrund ihrer geringen Energie und der im Gravitationsfeld gekrümmten Flugbahnen treffen ultrakalte Neutronen jedoch relativ häufig auf die Leiterwände, was zu hohen Verlusten in langen Leitern führt. Ein weiteres Problem stellt die geringe Reichweite ultrakalter Neutronen in Luft dar. UCNs werden von Wasserstoff stark inkohärent inelastisch gestreut, wobei sie in einem Streuprozeß bereits thermische Energie erlangen. Vom Stickstoff der Luft werden sie stark absorbiert, sodaß die mittlere freie Weglänge von UCNs an der Atmosphäre nur wenige Zentimeter beträgt. Der gesamte Weg ultrakalter Neutronen aus der kalten Quelle zum Experiment müßte daher bei dieser sogenannten *horizontalen Extraktion* evakuiert werden, was unvermeidbar zu vielen Vakuumfenstern und damit zu weiteren hohen Verlusten führen würde.



Abbildung 2.5: Die Turbine

Effektiver als diese horizontale ist daher die am ILL verwirklichte vertikale Extraktion von UCNs in zwei Schritten: Aus der kalten Quelle führt ein leicht gekrümmter Neutronenleiter auf eine ca. 13 Meter höher liegende Plattform (siehe Abb.2.2). Bei diesem Anstieg gegen das Erdgravitationsfeld verlieren Neutronen die kinetische Energie $\Delta E_{kin} \simeq 1.3 \,\mu\text{eV}$. Neutronen, die die kalte Quelle mit zu geringen kinetischen Energien verlassen, erreichen die Plattform nicht. Neutronen höherer Energie können der Krümmung des Strahlrohrs nicht folgen, da ihr Einfallswinkel auf die reflektierenden Oberflächen zu groß ist. Sie verlassen den Neutronenleiter und erreichen die Plattform ebenfalls nicht.

Die die Plattform erreichenden sehr kalten Neutronen (<u>V</u>ery <u>Cold N</u>eutrons) haben eine mittlere kinetische Energie von 13 μ eV, entsprechend einer Temperatur von ca. 150 mK und einer Geschwindigkeit von ca. 50 m/sec. Da sie den Reaktor mit etwas höherer Energie verlassen, führt ihr Transport durch die Neutronenleiter zu geringeren Verlusten als in der horizontalen Extraktion, sodaß die Energieverteilung der die Plattform erreichenden Neutronen dem niederenergetischen Anteil des Maxwellspektrums kalter Neutronen nahezu entspricht.

Ein Teil der sehr kalten Neutronen wird direkt in einem Experiment genutzt. Der andere Teil gelangt in eine von A.Steyerl [53] entwickelte und gebaute Turbine (siehe Abb.2.5). Diese besteht im Wesentlichen aus einem Schaufelrad mit einem Durchmesser von 1.7 m, welches mit 690 leicht gekrümmten mit Nickel beschichteten Spiegeln im Abstand von 7.7 mm besetzt ist. Ähnlich der Turbine eines Wasserkraftwerks dreht sich das Schaufelrad in Richtung des Stroms der einfallenden Neutronen mit einer Geschwindigkeit von ca. 230 Umdrehungen pro Minute, was einer Bahngeschwindigkeit $V_T \simeq 25$ m/sec am Ort der Spiegel entspricht. Die mit der höheren mittleren Geschwindigkeit von $\overline{v_N} \simeq 50$ m/s eintreffenden Neutronen werden im Schnitt bis zu 10 Mal zwischen den Spiegeln hin-und herreflektiert bevor sie die Turbine verlassen. Im mit der Geschwindigkeit V_T der Turbine rotierenden Bezugssystem erreichen die Neutronen die Turbine mit $v'_{N,in} = v_N - V_T$ und werden mit $v'_{N,ref} = V_T - v_N$ reflektiert. Im Laborsystem verlassen sie die Turbine mit $v'_{N,out} = (V_T - v_N) + V_T = 2V_T - v_N \simeq 0$. Die Verteilung der Eingangsgeschwindigkeiten und Auftreffwinkel der Neutronen führen zu einer Geschwindigkeitsverteilung der die Turbine verlassenden ultrakalten Neutronen von $v_N \sim 0 - 20$ m/s mit einem Intensitätsma-

Wellenlänge	Energie	Geschwindigkeit	Höhe [m]	Magnetfeld [T],	Temperatur
(nm)	[neV]	[m/s]	im Gravitationsfeld	das zu	[mK]
			der Erde	Polarisation führt	
10.	8194.0	39.63	80.05	135.9	95.1
20.	2048.5	19.81	20.01	34.0	23.7
30.	910.4	13.21	8.89	15.1	10.6
40.	512.1	9.91	5.00	8.5	5.9
50.	327.7	7.93	3.20	5.4	3.8
60.	227.6	6.61	2.22	3.8	2.6
70.	167.2	5.66	1.63	2.8	1.9
80.	128.0	4.95	1.25	2.1	1.5
90.	101.2	4.40	0.99	1.7	1.2
100.	81.9	3.96	0.80	1.4	0.95
110.	67.7	3.63	0.66	1.1	0.78
120.	56.9	3.30	0.55	0.9	0.66

Tabelle 2.1: Charakteristische Eigenschaften von ultrakalten Neutronen

ximum bei $v_N \simeq 12$ m/s, entsprechend einer Wellenlänge von $\lambda_N \sim 35$ nm. Aufgrund des sehr großen Luftwiderstandes des laufenden Schaufelsrades und der kurzen Reichweite von UCNs in Luft wird die Turbine unter Vakuum ($p \simeq 10^{-6}$ mbar) betrieben. Ein Aluminiumfenster trennt das Vakuumgefäß von den Experimenten. Das kritische Potential von Aluminium sorgt daher für einen Cut-off des im Experiment zur Verfügung stehenden Wellenlängenspektrums bei einer kritischen Wellenlänge von $\lambda_{cr} (Al) \simeq 123$ nm, entsprechend einer Geschwindigkeit von $v_{cr} (Al) \simeq 3.2$ m/s. Abb. 2.6 zeigt ein mithilfe der später noch diskutierten Flugzeitmethode bestimmtes Wellenlängenspektrum ultrakalter Neutronen, wie es im Experiment zur Verfügung steht. In Tabelle 2.1 sind die erwähnten charakteristischen Eigenschaften von UCNs zusammengestellt.



Abbildung 2.6: Wellenlängenspektrum ultrakalter Neutronen am Testleiter der UCN-Quelle (ILL)

Kapitel 3

Anderson-Lokalisierung

3.1 Das Anderson-Modell

Im Rahmen der quasiklassischen Bloch-Theorie beruht die elektrische Leitfähigkeit eines ideal geordneten Metallgitters auf der Bewegung von (quasi-)freien Elektronen im nur teilweise besetzten Leitungsband. Inelastische Stöße der Elektronen mit den um ihre Ruhelage schwingenden Atomen des Metallgitters führen zu einer Abnahme der Leitfähigkeit mit zunehmender Temperatur des Metalls. Bei sehr tiefen Temperaturen von typischerweise T < 10 K wird die inelastische freie Weglänge der Elektronen im Metallgitter dagegen fast beliebig groß. Die elektrische Leitfähigkeit bleibt nur noch durch die Wechselwirkung der Elektronen untereinander begrenzt.

In stark ungeordneten Metallen jedoch nimmt die elektrische Leitfähigkeit bei tiefen Temperaturen rapide ab und es tritt ein Metall-Isolator-Übergang auf. Dieser läßt sich auch im Rahmen einer erweiterten Bloch-Boltzmann - Theorie, die kleine Störungen in der Kristallstuktur inform von Gitterfehlern oder Fremdatomen berücksichtigt, nicht mehr vollständig erklären. Infolge starker Unordnung ist das System bei tiefen Temperaturen mesoskopisch. Während die elastische Transportweglänge l_{el} der Elektronen im ideal geordneten Kristallgitter unendlich lang ist, kann sie im ungeordneten System kleiner als die inelastische freie Weglänge l_{in} werden. Ein derartiges System der Ausdehnung L mit $l_{el} < L < l_{in}$ bezeichnet man als mesoskopisch. Im Gegensatz zum ideal geordneten Kristallgitter haben hier elastische Stoßprozesse der Elektronen einen entscheidenden Einfluß auf die elektrische Leitfähigkeit. Es treten Interferenzeffekte sich diffusiv ausbreitender Teilchen wellen auf, die nicht mehr durch inelastische Prozesse gestört und damit von vorneherein vernachlässigt werden können. Die elektrische Leitfähigkeit ist nicht mehr durch dissipative Prozesse aufgrund inelastischer Streuung, sondern durch die endliche Transmissionswahrscheinlichkeit einer Welle durch ein ungeordnetes stark streuendes Medium begrenzt.

In die Theorie dieses Quantentransports, den man sich vorstellen kann als ein quantenmechanisches Hüpfen zwischen erlaubten Eigenzuständen des Systems, fließen Modellvorstellungen der statistischen Mechanik und der Quantenmechanik ein. Die Unordnung manifestiert sich in einer Verteilung von Wechselwirkungspotentialen, die als statistisch angenommen und durch ihren Ensemblemittelwert $\overline{V(r)}$ und die Varianz $\overline{V(r)V(r')}$ charakterisiert wird. Infolge dessen lassen sich makroskopische Größen wie die elektrische Leitfähigkeit nur noch als Ensemblemittelwert mit zugehöriger Fluktuation angeben. Ist ein System ergodisch, so stimmt dieser Ensemblemittelwert mit dem Erwartungswert des entsprechenden quantenmechanischen Operators überein:

$$\overline{V(r)} = \langle V(r) \rangle$$
 und $\overline{V(r)V(r')} = \langle V(r)V(r') \rangle.$

Im Jahre 1958 schlug P.W. Anderson [5] ein Modell zur Beschreibung derartiger Transportprozesse vor, welches unter dem Namen 'Nearest Neighbour Tight Binding Model ' bekannt geworden ist. Diesem Modell liegt zunächst ein regelmäßiges Gitter von Atomen j zugrunde. Die Einteilchenenergie eines Elektrons am Gitterpunkt j beträgt ϵ_j . In einem geordneten Gitter bilden diese Einteilchenenergien sogenannte Energiebänder und die elektronische Leitfähigkeit wird durch das Bändermodell, d.h. die innerhalb nur teilweise besetzter Bänder freie Bewegung von Elektronen, beschrieben. In zweiter Quantisierung lautet der entsprechende Hamilton - Operator

$$H = \sum_{j} \epsilon_j c_j^+ c_j + \sum_{i,j} t_{ij} c_i^+ c_j.$$

 c_j^+ und c_j bezeichnen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Elektronen am Gitterplatz j, t_{ij} sind die sogenannten 'Hopping '- Matrixelemente, die die Wahrscheinlichkeit für ein Elektron sich vom Gitterplatz j auf den Gitterplatz i zu bewegen, beschreiben. Dabei werden die t_{ij} nur für benachbarte Gitterplätze als von Null verschieden angenommen (nearest neighbour tight binding). In einem ungeordneten Metall können sowohl die Energien ϵ_j an den Gitterpunkten j als auch die Hopping-Matrixelemente t_{ij} als statistisch verteilte Größen angenommen werden. Die Suche nach den Eigenzuständen des Hamiltonoperators für das ungeordnete System besteht dann in der Diagonalisierung einer Matrix aus Zufallsvariablen bzw. der entsprechenden Mittelung über ein Ensemble aus beliebig vielen Zufallsmatrizen.

Mit diesem Modell gelangte P.W. Anderson zu folgendem Ergebnis:

Während in geordneten Gittern die Eigenzustände der Elektronen räumlich ausgedehnt sind, führt hinreichend starke Unordnung des Gitters zu *lokalisierten* Eigenzuständen. Die Einhüllenden der zugehörigen Wellenfunktionen werden räumlich begrenzt an einem Lokalisierungszentrum und fallen zu größeren Entfernungen hin typischerweise exponentiell über eine charakteristische *Lokalisierungslänge* ξ_{loc} ab, was zu einer ebenfalls expontiell abfallenden Transmissionswahrscheinlichkeit von Elektronen durch das Gitter führt. Abb. 3.1 zeigt die Intensitätsverteilung von Elektronen als Funktion der Unordnung im Metall, wie sie von S. Yoshino [60] numerisch berechnet wurde. W/V beschreibt die relative Breite der angenommenen Verteilung von Wechselwirkungspotentialen V und ist damit ein Maß für die Unordnung des betrachteten Systems: zunehmende relative Breite bedeutet zunehmende Unordnung.



Abbildung 3.1: Anderson-Lokalisierung von elektronischen Zuständen als Folge starker Unordnung im Metall [60]

Je stärker die Unordnung im Metall ist, desto wahrscheinlicher wird das Auftreten derartig lokalisierter Zustände. Während Zustände in der Mitte des Leitungsbandes nach wie vor ausgedehnt sind, können Zustände am Rand bei zunehmender Unordnung lokalisiert sein. Die Unordnung erzeugt also mögliche Zustände in der Energielücke des entsprechenden geordneten Systems. Nach einem Argument von N.F.Mott [38] können bei ein und derselben Energie lokalisierte und ausgedehnte Zustände nicht koexistieren, da sie sofort miteinander mischen würden. In der Nähe der Bandränder gibt es daher sehr scharfe sogenannte Mobilitätskanten E_{M1} und E_{M2} der Energieverteilung, die Bereiche lokalisierter von denen ausgedehnter Zustände trennen (Abb.3.2).



Abbildung 3.2: Mobilitätskanten an den elektronischen Bandrändern eines schwach ungeordneten Systems

Mit zunehmender Unordnung rücken die Mobilitätskanten weiter in die Bänder hinein, bis sie aneinander anschließen: ab einem kritischen Grad der Unordnung sind alle Elektronenzustände lokalisiert und es kann kein Transport mehr stattfinden. Der Übergang von ausgedehnten zu lokalisierten Eigenzuständen in einem ungeordneten System ist ein Phasenübergang 2.Art und hat große Ähnlichkeiten mit der Bildung von gebundenen Zuständen. Bis heute gibt es noch keine analytische Theorie, die eine Aussage über die Lage der Mobilitätskanten in Abhängigkeit von der Stärke der Unordnung ermöglicht. Es werden jedoch sehr umfangreiche und aufwendige numerische Simulationen durchgeführt um die Lage der Kanten und das Verhalten der Eigenfunktionen in der Umgebung der Kanten zu untersuchen [17].

Nachdem dieses Modell der Anderson-Lokalisierung nach seiner Veröffentlichung im Jahre 1958 zunächst mangels geeigneter experimenteller Untersuchungsmöglichkeiten wenig Beachtung fand, zeigt es seit den siebziger Jahren seine enorme Bedeutung und Tragweite nicht nur für elektronische Systeme, sondern auch für klassische Wellentransportphänomene.

3.1.1 Metall-Isolator-Übergang

In einem Metall tragen bei sehr tiefen Temperaturen von typischerweise T < 10 K nur quasifreie Elektronen mit Energien nahe der Fermienergie zur Leitfähigkeit bei. Wechselwirkungen der Elektronen mit Gitterphononen können ausgeschlossen werden, sodaß die elektrische Leitfähigkeit eines ideal geordneten Metalls mit abnehmender Temperatur zunimmt. Zunehmende Unordnung des Atomgitters führt jedoch zu einem Phasenübergang des Systems mit ausgedehnten zu einem System mit lokalisierten Elektroneneigenzuständen und damit zu einem Metall-Isolator-Übergang als Funktion der Unordnung.

Experimentell wurde dieser Phasenübergang an zahlreichen Systemen variabler Unordnung inform von Legierungen variierter Zusammensetzung oder Halbleitern verschieden starker Dotierung untersucht und ein entscheidender Einfluß der Unordnung auf die Leitfähigkeit bestätigt. Abb.3.3 zeigt beispielsweise eine von Rosenbaum et. al. [45] veröffentlichte Messung eines Metall-Isolator-Übergangs des Systems Au_xGe_{1-x} als Funktion von x, d.h. bei Variation der Zusammensetzung von Gold und Germanium.



Abbildung 3.3: Metall-Isolator-Übergang von $\operatorname{Au}_x \operatorname{Ge}_{1-x}$ als Funktion von x [45]

Da Elektronen sowohl mit dem Atomgitter als auch untereinander komplexen, sich gegenseitig beeinflussenden Wechselwirkungen unterliegen, könnten jedoch auch andere Mechanismen wie Elektronen-Bandstruktrur-Effekte,

Elektron-Elektron-Wechselwirkungen, Excitonenanregungen und Elektronentrapping durch Phononen zu diesem Übergang führen, sodaß der Einfluß der Anderson-Lokalisierung nicht immer zweifelsfrei erkennbar ist.

Elektronen-Bandstruktur-Effekte beispielsweise können zum sogenannten Mott-Übergang führen. Die elektronischen Zustände isolierter Atome sind zunächst räumlich begrenzt, sodaß weit genug voneinander entfernte Atome von voneinander isolierten Elektronenhüllen umgeben sind. Elektronenwellenfunktionen sich einander nähernder Atome werden einander überlappen und Energiebänder ausbilden, innerhalb derer sich Elektronen quasifrei bewegen können. Erhöhung der Dichte von Atomen eines Systems kann somit zu einem Isolator-Metall-Übergang führen. Im Inneren des Planeten Jupiter z.B., der überwiegend aus unveränderter Solarmaterie mit Wasserstoff und Helium als häufigste Elemente besteht, wird Wasserstoff bei 0.77 Jupiterradien aufgrund des dort herschenden hohen Drucks und der hohen Dichte als metallisch angenommen. Ebenso kann ein Metall-Isolator-Übergang in einem Mehrkomponenten-System, sei es einer Legierung oder einem dotierten Halbleiter, unter

Umständen als Mott-Übergang interpretiert werden. Ist die Konzentration einer Beimischung beispielsweise nur hinreichend groß, so können die Elektronenwellenfunktionen der entsprechenden Atome miteinander überlappen und sogenannte Subbänder ausbilden, in denen sich Elektronen frei bewegen.

In einem solch komplexen System von einander gegenseitig beinflussenden Wechselwirkungen wie dem elektronischen System ist es daher nicht immer möglich einen Metall-Isolator-Übergang eindeutig auf den Mechanismus der Anderson-Lokalisierung zurückzuführen.

3.1.2 Quantenmechanische und klassische Lokalisierung

Da die Anderson-Lokalisierung von Elektronen ein Wellentransportphänomen ist, das einzig auf starker elastischer Streuung einer Welle in einem ungeordneten Medium beruht, sollten analoge Lokalisierungseffekte bei der Ausbreitung beliebiger, auch klassischer Wellen in entsprechenden stark streuenden Medien auftreten. Daher wird seit anfang der siebziger Jahre nach Anderson-Lokalisierung vor allem von Licht und Phononen gesucht, wobei sich besonders Untersuchungen mit Licht sowohl experimentell als auch theoretisch als außerordentlich fruchtbar erwiesen hat. Photonen zeigen untereinander und mit Phononen keine Wechselwirkung, sodaß 'Störffekte', die das Auftreten von Anderson-Lokalisierung vortäuschen, zunächst ausgeschlossen werden können. Während Wechselwirkungen von Elektronen mit Gitterphononen nur bei sehr tiefen Temperaturen unterdrückt werden können, können Lokalisierungsexperimente mit Licht daher auch bei Zimmertemperatur durchgeführt werden. Zudem ermöglicht die Verwendung von Laserlicht und hochauflösenden optischen Nachweismethoden detaillierte Beobachtungen der räumlichen und zeitlichen Entwicklung der Lichtwelle.

Trotz der weitreichenden Analogie von quantenmechanischen Teilchenwellen und Licht zeigen sie einen wesentlichen Unterschied, der für den eindeutigen Nachweis eventueller Anderson-Lokalisierung von Licht von Bedeutung ist:

Ein Elektron in einem Leitungsband wird durch die Schrödingergleichung

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m^*}\vec{\nabla}^2 + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

mit der effektiven Masse m^* des Elektrons beschrieben. Die Elektronzustandsdichte $\rho(E)$ des schwach ungeordneten Gitters hat die in Abb.3.2 skizzierte Form. Je nach der Potentialtiefe der Störstellen kann sich diese Verteilung zu niedrigeren Energien verschieben und es entstehen 'gebundene' Zustände, die sogenannten Urbach-Zustände, die ebenfalls zu einer Mobilitätskante führen (Abb. 3.4a). Sie entsprechen gebundenen Zuständen in den durch Unordnung entstandenen Potentialtöpfen des Gitters und sind damit keine im Sinne von P.W.Anderson lokalisierten Zustände. Erst für stärkere Unordnung verschiebt sich dann die Mobilitätskante zu positiven Energien und repräsentiert einen echten Anderson-Übergang, wie in Abb.3.4b dargestellt.



Abbildung 3.4: Urbach-Zustände von Elektronen in ungeordneten Systemen

Analog dazu wird die Ausbreitung von Licht der Frequenz ω in einem dielektrischen Medium mit

einer fluktuierenden Dielektrizitätskonstanten $\epsilon(x) = \epsilon_o + \epsilon_{fluct}(x)$ durch die Wellengleichung

$$-\vec{\nabla}^2 \vec{E} + \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \vec{E}) - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{fluct}(x) \vec{E} = \epsilon_o \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}$$

beschrieben. Für nichtmetallische Streumedien mit positiver Dielektrizitätskonstanten ist der Energieeigenwert $\epsilon_o \frac{\omega^2}{c^2}$ immer positiv. Für kleine Energien verschwindet hier auch das Streupotential $\frac{\omega^2}{c^2}\epsilon_{fluct}(x)$, sodaß Zustände niedriger Energie immer ausgedehnt sind und es keine zu den elektronischen Urbach-Zuständen analogen gebundenen Zustände gibt, die das Auftreten von Anderson-Lokalisierung 'vortäuschen' können. Zustände sehr hoher Energie sind ebenfalls ausgedehnt unabhängig vom Grad der Unordnung. Echte Anderson-Lokalisierung von Licht kann schon bei schwacher Unordnung in einem Frequenzfenster zwischen diesen beiden Extrema auftreten (Abb 3.5).



Abbildung 3.5: Energetische Zustandsdichte von Photonen im ungeordneten System

3.2 Anderson-Lokalisierung als Interferenzeffekt

Zu Beginn dieses Jahrhunderts wurde die Ausbreitung von Wellen in ungeordneten stark elastisch streuenden Medien mit dem einfachen Modell der diffusen Ausbreitung von Wellen*intensitäten* beschrieben. Welleneigenschaften und damit mögliche Interferenzeffekte wurden von vorneherein vernachlässigt. Man betrachtete lediglich den Irrflug von harten, auf voneinander unabhängigen Wegen elastisch gestreuten 'Billiardkugeln'. Gerechtfertigt wurde dieses Modell durch die zufällige und regellose Anordnung der Streuzentren. Wenn überhaupt treten Interferenzen in einem ungeordneten Medium scheinbar nur zufällig auf. Bewegt sich eine (Teilchen-) Welle von einem Punkt A zu einem Punkt B im Medium, so entspricht nach R.Feynman die Intensität der Welle bzw. die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des quantenmechanischen Teilchens am Punkt B dem Absolutquadrat der kohärenten Summe der Amplituden $A_j(B)$ über alle möglichen Streupfade j der Welle von A nach B (Abb.3.6a). Verschiedene Streupfade $i \neq j$ haben im allgemeinen beliebig unterschiedliche Längen, sodaß Partialwellen auf verschiedenen Streupfaden Punkt B mit beliebig verschiedenen Phasen erreichen. Dies führt zu regellos und zufällig erscheinenden Interferenzen zwischen den Partialwellen verschiedener Pfade.

$$I_{AB}(B) = |\sum_{j} A_{j}(B)|^{2} = \sum_{j} |A_{j}(B)|^{2} + \sum_{i \neq j} A_{i}(B)A_{j}^{*}(B)$$



Abbildung 3.6: a: Streupfade von A nach B b: Specklemuster

Durchstrahlt man z.B. eine ungeordnete stark streuende Substanz mit Laserlicht, dessen Wellenlänge von derselben Größenordnung wie die typischen Abstände der Streuzentren im Medium ist, so erscheinen die in Abb.3.6b gezeigten Intensitätsfluktuationen um eine mittlere Intensität, die sogenannten *Specklemuster*. Analog zu den Braggreflexen an geordneten Kristallen gestreuten Lichts enthalten die Specklemuster Informationen über die Positionen der einzelnen Streuzentren und werden deshalb auch als 'fingerprints' des speziellen ungeordneten Systems bezeichnet. Im Mittel über ein Ensemble 'gleichartiger' Systeme, welches sich z.B. durch Rotation eines Systems relativ zum einfallenden Licht simulieren läßt, verschwinden jedoch diese Fluktuationen und es bleibt eine konstante mittlere gestreute Intensität. Das Interesse an diesen zufällig erscheinenden Specklemustern war daher zunächst sehr gering. Faszinierender waren die Möglichkeiten, die sich der Untersuchung von regelmäßigen Kristallen und der Auflösung von subkristalliner Struktur boten. Bis P.W.Anderson 1958 [5] das in Kap.3.1 erläuterte Modell der Lokalisierung von Elektronen als Folge von Unordnung im Material vorschlug, nach dem Elektronen als Wellen an Störstellen stark elastisch gestreut werden. Sind diese Störstellen regellos angeordnet, so sollten sich im Mittel über ein Ensemble gleichartiger Systeme auch hier jegliche Interferenzeffekte herausmitteln. Eine ganz besondere Interferenz jedoch überdauert diese Mittelung und führt zu räumlicher Lokalisierung der Welle. Kehrt nämlich eine Welle auf ihrem Weg durch ein stark elastisch streuendes Medium zu ihrem Ausgangspunkt zurück, so tragen zur Intensität an diesem Punkt auch die zu den geschlossenen Streupfaden jeweils zeitumgekehrten Partner bei (Abb.3.7).



Abbildung 3.7: Streupfade von Anach A

Wird die Welle rein elastisch und kohärent gestreut, so haben Paare zeitumgekehrter Wellenzüge am Punkt B = A immer die gleiche Phase und interferieren immer konstruktiv. Dies gilt für alle geschlossenen Streupfade, sodaß die von einem Punkt des Mediums auf den gleichen Punkt zurückgestreute Intensität das Zweifache der inkohäherenten mittleren Intensität beträgt. Die Intensität der Welle bzw. die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens ist am Ausgangspunkt seiner Diffusion durch das Medium erhöht, wodurch das Fortschreiten der Welle gehemmt wird (*schwache Lokalisierung*). Ist die Unordnung im Medium 'hinreichend' groß, so bricht der Wellentransport völlig zusammen - die Welle ist dann stark lokalisiert.

$$I_{AA}(A) = |\sum_{j} A_{j}(A)|^{2} = \sum_{j} |A_{j}(A)|^{2} + \sum_{i=-j} A_{i}(A)A_{-j}^{*}(A) = 2 \cdot \overline{I_{AB}(B)}$$

Nach einem Argument von A.F. Joffe und A.R.Regel [27] bricht der Wellentransport dann zusammen, wenn die elastische Transportweglänge l_{tr} der Welle im streuenden Medium vergleichbar mit ihrer Wellenlänge ist, genauer gesagt, wenn die Unschärfe des Wellenvektors l_{tr}^{-1} vergleichbar mit dem Wellenvektor $2\pi/\lambda$ selbst ist [36]. Die Transportweglänge bezeichnet die Weglänge, nach der die Ausbreitung der Welle isotrop ist, und beträgt im allgemeinen ein Vielfaches der elastischen freien Weglänge l_{el} der Welle zwischen zwei Stößen. Nur für sogenannte *isotrope* Streuung gilt $l_{tr} = l_{el}$.

Das sogenannte Joffe-Regel-Kriterium für den Phasenübergang lautet also

$$l_{tr} \simeq \lambda/2\pi$$
 .

Voraussetzung für das Auftreten von Andersonlokalisierung als Interferenzeffekt zeitumgekehrter Wellen'paare' ist, wie auch für das Auftreten von Bragg-Reflexen am geordneten Kristall, die Kohärenz der Welle, d.h. der Erhalt der Phaseninformation, über die gesamte Länge des Streupfades. Der einzelne Streuprozeß muß daher rein elastisch und kohärent sein. Inkohärente Streuung und inelastische Streuung führen zum Verlust von Phaseninformation und damit zur Auslöschung von Interferenzen.

3.2.1 Kohärente Rückstreuung

Erste experimentelle Hinweise, daß derartige Interferenzphänomene zeitumgekehrter Wellenpaare in ungeordneten Systemen tatsächlich signifikant auftreten, zeigten im Jahre 1984/85 mit Licht durchgeführte Streuexperimente [35], in denen wässrige Suspensionen von submikroskopischen Polystyrolkugeln mit Laserlicht vergleichbarer Wellenlänge bestrahlt und die *reflektierte* Lichtintensität beobachtet wurde (siehe Abb.3.8).



Abbildung 3.8: Experimenteller Aufbau zur Kohärenten Rückstreuung von Licht [35]

Das Ergebnis dieser Messungen war eine in direkter Rückwärtsrichtung um nahezu einen Faktor zwei im Vergleich zur mittleren Intensität außerhalb der Rückwärtsrichtung erhöhte Intensität (Abb.3.9). Dieser Effekt wird als *kohärente Rückstreuung* bezeichnet [36].

Unter der Annahme isotroper Vielfachstreuung von Licht in einer Suspension von harten Kugeln mit Radius R entspricht die elastische freie Weglänge $l_{el} (= l_{tr})$ dem mittleren Abstand d = 2R zwischen zwei Kugeln. Ist die Dicke der Probe L viel größer als diese elastische Transportweglänge, so ist bereits im Rahmen des klassischen Random-Walk Modells der Diffusion die Wahrscheinlichkeit für ein Teilchen ein stark streuendes Medium diffusiv zu durchqueren wesentlich kleiner als die Wahrscheinlichkeit zur Eintrittsfläche zurückzukehren. Die Reflexionswahrscheinlichkeit liegt nahe bei 1. Startund Endpunkt der Diffusion liegen mit hoher Wahrscheinlichkeit in der Eintrittsoberfläche. Der mittlere Abstand zwischen Start- und Endpunkt des Random Walk beträgt < $r^2 >= s \cdot l_{tr}$, wobei s die Gesamtlänge des Weges im Medium ist. Direkt in Rückwärtsrichtung, d.h.



Abbildung 3.9: Kohärente Rückstreuung

unter einem Winkel von $\theta = 0$ zur Einfallsrichtung der Welle, interferieren Partialwellen auf allen zeitumgekehrten Paaren von Pfaden konstruktiv (siehe Abb. 3.8). Mit zunehmendem Streuwinkel bekommen diese Paare einen Phasenunterschied $\delta = \Delta \cdot k = 2\pi \sin(\theta) \frac{r}{\lambda}$ und tragen nicht mehr vollständig konstruktiv zur rückgestreuten Intensität bei. Die kürzesten relevanten Streupfade sind die der Zweifachstreuung mit einer Länge von l_{tr} , sodaß der charakteristische, maximale Winkel für konstruktive Beiträge und damit die Breite des Rückstreukonus' etwa λ/l_{tr} beträgt. Aus dieser Breite läßt sich daher bei bekannter Wellenlänge λ die Transportweglänge l_{tr} des verwendeten Lichts im Medium experimentell bestimmen. Im hier erwähnten Experiment ergibt sich eine Transportweglänge von $l_{tr} \simeq 2 \,\mu$ m bei einer Wellenlänge des verwendeten Argon - Laserstrahls von $\lambda = 0.514 \,\mu$ m.

Das Joffe-Regel-Kriterium wird hier mit

 $l_{tr} \simeq 20 \cdot \lambda / 2\pi$

nicht erfüllt. Da dieser kohärente Rückstreueffekt jedoch eindeutig auf Interferenz zeitumgekehrter Wellenpaare beruht, gilt er als Vorläufer der Anderson-Lokalisierung und wird auch als schwache Lokalisierung bezeichnet ([7],[1]). Er tritt in einem Bereich von $\lambda/l_{tr} \sim 0.1 - 1$ auf, wobei die Breite des Rückstreukonus durch λ/l_{tr} und die rückgestreute Intensität durch $(\lambda/l_{tr})^2$ bestimmt ist ([57],[2]).

Das Verhältnis λ/l_{tr} ist somit ein Maß für die Stärke der Streuung. Sie bestimmt nicht nur die Effizienz der im Bereich von $\lambda/l_{tr} \sim 0.1 - 1$ auftretenden kohärenten Rückstreuung, sondern auch über diesen Bereich hinaus die Stärke der Streuung allgemein.

Ist $\lambda/l_{tr} \gg 1$, d.h. $\lambda \gg l_{tr}$, so ist die Streusträrke des Mediums und damit der Effekt der kohärenten Rückstreuung sehr klein und beeinflußt Reflexion und Transmission der Welle nur sehr wenig. Auf der lokalen Skala von Weglängen einiger Wellenlängen erscheint das ungeordnete System als ein homogenes effektives Medium, denn die Anordnung der Streuzentren liegt unter der 'Auflösungsgrenze' der Welle. Die Welle breitet sich im Medium nahezu geradlinig aus und wird nur an den Grenzflächen zwischen zwei verschiedenen Medien gebrochen. Die Ausbreitung kann mithilfe der geometrischen Optik beschrieben werden (siehe Abb.3.10).



Abbildung 3.10: $\lambda/l_{tr} \gg 1$

Ist $\lambda/l_{tr} \ll 1$, d.h. $\lambda \ll l_{tr}$, so bewegt sich die Welle wie auf klassischen Trajektorien zwischen den Streuzentren hindurch, wobei sie bei jedem Stoß nur sehr wenig abgelenkt wird. Man bezeichnet diese Streuung als *Kleinwinkelstreuung*, die Welle breitet sich auch hier auf Weglängen einiger Wellenlängen praktisch geradlinig aus (siehe Abb.3.11).



Abbildung 3.11: $\lambda/l_{tr} \ll 1$

Erst auf der Skala einiger Transportweglängen ist in beiden Fällen die Betrachtung des Mediums als homogen nicht mehr gültig. Auch wenn die einzelnen Streuprozesse schwach sind, so ist nach der Transportweglänge l_{tr} die Ausbreitung der Welle isotrop und kann mithilfe der klassischen Diffusionstheorie des 'Random Walk' beschrieben werden (siehe Abb.3.12). Gelangt die Transportweglänge l_{tr} in die Größenordnung der Wellenlänge, d.h. $\lambda/l_{tr} < 1$ bzw $\lambda < l_{tr}$, so nimmt die kohärente Rückstreuung bereits merklich zu, bis der Wellentransport nach dem Joffe-Regel-Kriterium bei $\lambda/l_{tr} \sim 2\pi$ aufgrund der starken Lokalisierung der Welle völlig zusammenbricht.



Die quantitative Beschreibung der Wellenausbreitung in stark streuenden ungeordneten Systemen unter Berücksichtigung von Interferenzeffekten ist analytisch bisher nicht möglich, sondern erfordert umfangreiche numerische Simulationen ([59], [17], [52]). Es gibt jedoch sehr fruchtbare Ansätze zum qualitativen Verständnis dieser Prozesse zum einen im Rahmen einer Renormierungstheorie der klassischen Diffusion, zum anderen im Rahmen der Theorie von Phasenübergängen. Die klassische Diffusionstheorie liefert einen direkteren Zusammenhang mit der experimentell zugänglichen Größe der Transmissionswahrscheinlichkeit einer Welle durch ein Medium und wird deshalb im folgenden Kapitel kurz dargestellt. Sie liefert ferner eine Aussage über die Rückkehrwahrscheinlichkeit und führt damit zu einer skalenabhängigen Renormierung der Diffusion, auf die jedes Experiment zur Anderson-Lokalisierung sensitiv sein sollte. Unter diesem Gesichtspunkt wird in Kap.3.2.4 ein Einblick in bereits durchgeführte Experimente gegeben, bevor im weiteren Verlauf der Arbeit auf die Möglichkeiten von Experimenten mit Neutronen ausführlicher eingegangen wird.

3.2.2 Theorie der klassischen Diffusion

In der klassischen Diffusionstheorie wird nicht die Bewegung von einzelnen Teilchen, sondern das räumliche und zeitliche Verhalten der Gesamtheit aller Teilchen, des sogenannten *Teilchendiffusionsfeldes* oder *Teilchenfeldes* in einem Streumedium verfolgt. Unter einigen einfachen Annahmen wird eine Teilchenbilanz aufgestellt, die zu einer Diffusiongleichung vom Fick'schen Typ, d.h. einer Kontinuitätsgleichung der Form

$$\vec{j} = -D \cdot \vec{\nabla} \Phi$$

führt: die Stromdichte \vec{j} ist proportional zum Gradienten des Flusses Φ , die Proportionaliltätskonstante D wird als *Diffusionskoeffizient* oder *Diffusionskonstante* bezeichnet.

Ein Teilchenfeld wird durch die Dichte $n(\vec{r}, \vec{\Omega}, v)$ von Teilchen mit Geschwindigkeit v am Ort \vec{r} im Raumwinkel $\vec{\Omega}$ beschrieben. Von einer möglichen Zeitabhängigkeit der gesamten Teilchenzahldichte wird im folgenden abgesehen. Die Integration des differentiellen Teilchenflusses

$$F(\vec{r},\vec{\Omega},v) = n(\vec{r},\vec{\Omega},v) \cdot v$$

über alle Geschwindigkeiten ergibt den Vektorfluß $F(\vec{r}, \vec{\Omega}) = n(\vec{r}, \vec{\Omega}) \cdot \overline{v}$, weitere Integration über den Raumwinkel den Gesamtfluß am Ort \vec{r}

$$\Phi(\vec{r}) = \int_{4\pi} F(\vec{r}, \vec{\Omega}) \, d\Omega = n(\vec{r}) \cdot \overline{v}$$

Mithilfe des differentiellen Teilchenflusses läßt sich im Innern des Streumediums, weit entfernt von jeder Grenzfläche, eine Teilchenbilanz aufstellen. Die Teilchenzahldichte $n(\vec{r}, \vec{\Omega}, v)$ der in einem Volumenelement dV am Ort \vec{r} befindlichen Teilchen mit Geschwindigkeiten zwischen v und v + dv kann sich aus folgenden Gründen ändern:

- 1. Fluß von Teilchen aus dem Volumenelement
- 2. Verlust durch Absorption und Streuung in andere Richtungen oder Geschwindigkeitsintervalle
- 3. Gewinn durch Streuung aus anderen Richtungen und Geschwindigkeitsintervallen
- 4. Entstehung von Teilchen aus in dV befindlichen Quellen.

Werden die Teilchen nur elastisch gestreut, d.h. ändern sie ihre Geschwindigkeit während der Diffusion nicht, und entstehen in der Probe keine neuen Teilchen, so lautet die entsprechende stationäre und energieunabhängige Bilanzgleichung:

$$\frac{\delta n\left(\vec{r},\vec{\Omega},v\right)}{\delta t} = \frac{1}{v} \frac{\delta F\left(\vec{r},\vec{\Omega},v\right)}{\delta t}$$
$$= -\underbrace{\nabla \vec{\Omega} \cdot F\left(\vec{r},\vec{\Omega},v\right)}_{1.} - \underbrace{\sum_{t} \cdot F\left(\vec{r},\vec{\Omega},v\right)}_{2.} + \underbrace{\int_{4\pi} d\vec{\Omega'} \sum_{s} \left(\vec{\Omega'},\vec{\Omega}\right) \cdot F\left(\vec{r},\vec{\Omega'},\vec{v}\right)}_{3.}$$
$$= 0$$

 $\Sigma_s = \Sigma_{el}$ bezeichnet den makroskopischen elastischen Streuquerschnitt, Σ_a den makroskopischen Absorptionsquerschnitt und Σ_t den totalen Wirkungsquerschnitt $\Sigma_t = \Sigma_s + \Sigma_a$ der Probe. Im Innern des Streumediums, weit entfernt von jeder Grenzfläche, ist es sinnvoll den Vektorfluß nach Kugelfunktionen zu entwickeln. Hat er eine Vorzugsrichtung \vec{x} und ist rotationssymmetrisch um diese Achse, hängt also nur von x und dem Winkel ϑ zwischen Ausbreitungs- und Vorzugsrichtung ab, so kann er als Summe von Legendre-Polynomen dargestellt werden. Ist die Struktur der streuenden Substanz isotrop, so hängt der mikroskopische Streuquerschnitt nur vom Streuwinkel zwischen Einfalls- und Ausfallsrichtung ab und auch der makroskopische Streuquerschnitt $\Sigma_s(\vartheta'\phi',\vartheta\phi) = \Sigma_s(\cos\vartheta_0)$ kann nach Kugelfunktionen entwickelt werden. Werden beide Entwicklungen nach dem zweiten Glied abgebrochen, so ergeben sich aus der Teilchenbilanzgleichung nach Integration über den Winkel ϑ eine Kontinuitätsgleichung

$$\frac{dj}{dx} + (\Sigma_t - \Sigma s)\Phi = \frac{dj}{dx} + \Sigma_a \Phi_o = 0$$

und eine Diffusionsgleichung vom Fick'schen Typ für die Teilchenstromdichte

$$j = -\frac{1}{3(\Sigma_t - \Sigma_s \overline{\cos \vartheta_0})} \frac{d\Phi}{dx} = -\frac{1}{3(\Sigma_s (1 - \overline{\cos \vartheta_0}) + \Sigma_a)} \frac{d\Phi}{dx} = -D\frac{d\Phi}{dx}$$

Die Diffusionskonstante

$$D = \frac{1}{3(\Sigma_s(1 - \cos\vartheta_0) + \Sigma_a)}$$

erhält bei schwacher Absorption ($\Sigma_a \ll \Sigma_s$) die einfachere Form

$$D = \frac{1}{3(\Sigma_s(1 - \overline{\cos\vartheta_0}))} = \frac{l_s}{3(1 - \overline{\cos\vartheta_0})} \equiv \frac{l_{tr}}{3}$$

 l_{tr} ist die sog. Transportweglänge, die neben der elastischen freien Weglänge $l_s = l_{el}$ den mittleren Streuwinkel $\cos \vartheta_0$ enthält. Nur für isotrope Streuung ($\cos \vartheta_0 = 0$) sind Transportweglänge und elastische freie Weglänge identisch. Für sehr kleine mittlere Streuwinkel ($\cos \vartheta_0 \simeq 1$) divergiert die Transportweglänge und folglich auch die Diffusionskonstante. Für den makroskopischen Streuquerschnitt gilt

$$\Sigma_s \left(1 - \overline{\cos \vartheta_0}\right) = n \int_0^\pi \sigma_s(\vartheta) (1 - \cos \vartheta) d\vartheta ,$$

wobei σ_s der Streuquerschnitt für den Einzelstoß ist.

Die hier dargestellte Näherung, in der sowohl die Entwicklung des Teilchenflusses als auch die Entwicklung des makroskopischen Streuquerschnitts nach Kugelfunktionen nach dem zweiten Glied abgebrochen wird, wird als *elementare Diffusionstheorie* bezeichnet. Die Kontinuitätsgleichung und die Fick'sche Beziehung ergeben kombiniert die *elementare Diffusionsgleichung* im quellenfreien Raum:

$$-D\frac{d^2\Phi}{dx^2} + \Sigma_a\Phi = 0$$

Mit der *Diffusionslänge* $L_D = \sqrt{\frac{D}{\Sigma_a}} = \sqrt{\frac{l_{trl_a}}{3}}$, die einer Relaxationslänge des Teilchenfeldes im Medium entspricht, läßt sie sich auch in der Form

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} - \frac{1}{L_D^2}\Phi = 0$$

schreiben. Die entsprechende Gleichung für die Teilchenzahldichte n(x) enthält die modifzierte Diffusionskonstante

$$D = \frac{l_{tr}\overline{v}}{3},$$

die das mittlere Abstandsquadrat des Teilchens nach Diffusion vom Ausgangspunkt nach der Zeit t in Einheiten von cm^2/sec angibt. Streng genommen gilt die elementare Diffusionsgleichung nur im Innern eines Streumediums und nicht an dessen Grenzflächen. Denn an Grenzflächen z.B. zum Vakuum oder einem stark absorbierenden Medium werden keine Teilchen in das Medium zurückgestreut, sodaß hier die Flußverteilung stark anisotrop ist und höhere Terme der Entwicklung nach Kugelfunktionen mitberücksichtigt werden müssen. 'Im Innern des Mediums' bedeutet hier in einem Abstand von mindestens l_{tr} von der Grenzfläche.

Klassische Diffusion durch eine Scheibe

Die allgemeine Lösung der elementaren Diffusionsgleichung

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} - \frac{1}{L_D^2}\Phi = 0$$

für den Fluß durch ein Streumedium mit zwei Grenzflächen, d.h. eine Scheibe endlicher Dicke und unendlicher Ausdehnung ergibt unter Berücksichtigung von Randbedingungen an den Grenzflächen für die Transmission $T = j_{trans}/j_{in}$

$$T = 0.71 \cdot \frac{l_{tr}}{L}$$

Im Rahmen der klassischen Diffusionstheorie ist also die Transmission eines Teilchenstromes durch eine diffus streuende Probe der betrachteten Geometrie direkt proportional zu Transportweglänge l_{tr} und umgekehrt proportional zur Dicke L der Probe. Der Herleitung dieser Beziehung findet sich in der Literatur [16].

Die klassische Rückkehrwahrscheinlichkeit

Legt ein quantenmechanisches Teilchen bzw. eine Welle in einem streuenden Medium einen geschlossenen Weg zu seinem Ausgangspunkt zurück, so interferieren die Partialwellen zeitumgekehrter Paare von Streupfaden immer konstruktiv und führen zu einer erhöhten Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens bzw. Intensität der Welle am Ausgangspunkt, der sogenannten Anderson-Lokalisierung. Das klassische Bild der Vielfachstreuung, das Irrflugmodell oder Random-Walk-Modell der klassischen Diffusion, liefert eine Information über die klassische Rückkehrwahrscheinlichkeit einer vielfachgestreuten Billardkugel zu ihrem Ausgangspunkt \vec{r}_A . Diese läßt sich empirisch auf den semiklassischen Bereich erweitern und gibt somit ein Maß für die Änderung der Diffusionskonstanten und damit der Transmission der Welle aufgrund kohärenter Rückstreueffekte in einem ungeordneten stark streuenden Medium. Die Diffusionskonstante D als Proportionalitätskonstante der Kontinuitätsgleichung

$$\vec{j}(\vec{r}) = -D \cdot \vec{\nabla} n(\vec{r})$$

für die Stromdichte $\vec{j}(\vec{r})$ und die Teilchenzahldichte $n(\vec{r})$ am Ort \vec{r} ist gegeben durch $D = \frac{l_{tr}v}{3}$ und gibt an, um welchen mittleren Abstand r sich ein Teilchen nach der Zeit t vom Ausgangspunkt r = 0 (t = 0) entfernt hat.

Im eindimensionalen Medium gilt

$$\overline{r^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} r^2 n(r,t) dr = D \cdot t ,$$

im Medium beliebiger Dimension d entsprechend

$$\overline{r^2} = \overline{r_1^2 + \ldots + r_d^2} = \overline{r_1^2} + \ldots + \overline{r_d^2} = d \cdot D \cdot t .$$

Die Teilchenzahldichte am Ortrzur Zeitt ist somit

$$n(r,t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{d/2}} e^{-r^2/4Dt}$$

Ist die Streuung isotrop, d.h. entspricht die Transportweglänge l_{tr} der elastischen freien Weglänge $l_{tr} = l_{el}$, so folgt mit

$$D = \frac{l_{el}v}{3} = \frac{l_{el}s}{3t} = \frac{N_{el}l_{el}^2}{3t}$$
für die Teilchenzahldichte nach N_{el} Stößen im Abstand r vom Ausgangspunkt:

$$n(r, N_{el}) = \frac{1}{\left(\frac{4\pi}{3}N_{el}l_{el}^2\right)^{d/2}} e^{-r^2/\frac{4}{3}N_{el}l_{el}^2}$$

und schließlich für die Wahrscheinlichkeit das Teilchen nach N_{el} Stößen im Abstand r vom Ausgangspunkt zu finden (Abb 3.13)

$$p(r, N_{el}) = 4\pi r^2 \cdot n(r, N_{el})$$
 .

0.4

0.3

0.2

0.1

0.0

0

3

Wahrscheinlichkeit

Mit größter Wahrscheinlichkeit befinden sich die Teilchen nach N_{el} Stößen in einem Abstand

$$R = 2\sqrt{\frac{N_{el}}{3}}l_{el} \sim \sqrt{N_{el}}l_e$$

vom Ausgangspunkt. Für nichtisotrope Streuung, d.h. $l_{tr} = m \cdot l_{el}$, gilt mit der entsprechend skalierten Stoßzahl $N_{tr} = N_{el}/m$

$$R = 2\sqrt{\frac{N_{tr}}{3}}l_{tr} \sim \sqrt{N_{tr}}l_{tr} \,.$$

Die Wahrscheinlichkeit das Teilchen nach der Zeit t klassischer Diffusion durch das Medium wieder



9 12 15 18 21 24 27 30

6

Anzahl der Stöße:

3

---- 20

..... 100

Abbildung 3.13: Wahrscheinlichkeitsverteilung

in der Umgebung seines Startpunktes, d.h. bei bei kleinen r, zu finden erfordert also sehr kurze Transportweglängen l_{tr} und nimmt mit zunehmender Anzahl der Stöße N_{tr} ab.

$$p(0',t) \sim \frac{1}{(4\pi Dt)^{d/2}} = \frac{1}{(\frac{4\pi}{3}N_{tr}l_{tr}^2)^{d/2}}$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß das Teilchen irgendwann zu einer Zeit t > 0 zum Ausgangspunkt zurückkehrt, ergibt sich durch Integration über die Zeit im Grenzfall $T \rightarrow \infty$

$$p(0') \sim \lim_{T \to \infty} \int_{t_0}^T \frac{dt}{t^{d/2}} \sim \begin{cases} \sqrt{t} & d = 1\\ \ln t & d = 2\\ \frac{1}{\sqrt{t}} & d = 3 \end{cases}$$

Im Limes $T \to \infty$ divergiert die Wahrscheinlichkeit für d = 1, 2. In einem hinreichend ausgedehnten ein- oder zweidimensionalen Medium kehrt die Welle mit Sicherheit zum Ausgangspunkt zurück. Schon im Rahmen der klassischer Diffusionstheorie sind damit alle Zustände eines Teilchens im unendlich ausgedehnten ein- oder zweidimensionalen Medium 'lokalisiert'. Da diese Lokalisierung des Teilchens nicht auf Interferenzen von Teilchenwellen beruht, spricht man hier jedoch noch nicht von echter Anderson-Lokalisierung. Im dreidimensionalen Medium verschwindet die klassische Rückkehrwahrscheinlichkeit für große Zeiten T, sodaß alle Zustände ausgedehnt sind.

Die semiklassische Rückkehrwahrscheinlichkeit



Abbildung 3.14: Semiklassische Rückkehrwahrscheinlichkeit

Im semiklassischen Bild der Ausbreitung eines quantenmechanischen Teilchens [28] entspricht jede Trajektorie einem Schlauch mit der Ortsunschärfe $\lambda/2\pi$ entsprechendem Durchmesser um die klassische Trajektorie (siehe Abb. 3.14). Der Ausgangs-'Punkt' der Welle wird zu einem Ausgangsorts-'Bereich' $\vec{r}_A \pm \Delta \vec{r}$, in dem Teilwellen zeitumgekehrter Pfade auch mit einer Phasendifferenz $\delta \Phi \neq$ 0 noch teilweise konstuktiv interferieren. Bezeichnet $\psi(0)$ die Wellenfunktion am Startpunkt A , so lautet die Wellenfunktion $\psi(L)$ am Punkt B nach der Weglänge L

$$\psi(L) = e^{i\Phi(L)}\psi(0)$$

und die Wellenfunktion für den entsprechenden zeitumgekehrten Weg

$$\psi'(L) = e^{i\Phi'(L)}\psi'(0)$$

Jede Teilwelle erhält auf ihrem Weg durch die Probe eine Phase $\Phi^{(')}(L)$, die bei rein elastischer Streuung allein durch die Propagationsphase gegeben ist. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens am Punkt B nach der zurückgelegten Weglänge L ergibt sich aus der Überlagerung beider Teilwellen

$$I(L) = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(L) + \psi'(L)) \right|^{2}$$

= $\frac{1}{2} ((e^{i\Phi(L)} + e^{i\Phi'(L)})(e^{-i\Phi(L)} + e^{-i\Phi'(L)})) |\psi(0)|^{2}$
= $(1 + \cos(\Phi(L) - \Phi'(L))) |\psi(0)|^{2}$
= $(1 + \cos \delta \Phi) |\psi(0)|^{2}$.

Unter der Voraussetzung rein elastisch kohärenter Streuung ist die Phasendifferenz zwischen zueinander zeitumgekehrten Wegen $\delta \Phi = 0$, wenn Start- und Endpunkt exakt am gleichen Ort liegen. Die Intensität ist an diesem Punkt um einen Faktor zwei gegenüber der mittleren Intensität $\bar{I} = I(0) = |\psi(0)|^2$ erhöht. Liegen Start- und Endpunkt nicht exakt am gleichen Ort, so haben auch die zueinander zeitumgekehrten rein elastisch kohärent gestreuten Wellen eine Phasendifferenz $\delta \Phi \neq 0$. In Abb. 3.15a bezeichnen \vec{k}_i, \vec{k}_f die Wellenvektoren der ein- bzw auslaufenden Welle und $\vec{k'}_i, \vec{k'}_f$ die entsprechenden Wellenvektoren der zeitumgekehrten Welle, wobei für Zeitumkehrung gilt

$$ec{k}_i = ec{k'}_f$$

 $ec{k}_f = ec{k'}_i$

Für elastische Streuung gilt weiterhin

$$k_i^{(')} = k_f^{(')}$$

Der zwischen beiden Wellen bestehende Gangunterschied $\Delta = \Delta_1 + \Delta_2$ führt unter der Annahme, daß die Streuung zylindersymmetrisch um die Verbindungsachse $\vec{\delta}$ von Start- und Endpunkt erfolgt und damit vom Azimutwinkel unabhängig ist, zu einer Phasendifferenz

$$\delta \Phi = \delta \Phi_1 + \delta \Phi_2 = k_i \Delta_1 + k_f \Delta_2 = (\vec{k}_i + \vec{k}_f) \vec{\delta} = k_i \delta \cos \vartheta_i + k_f \delta \cos \vartheta_f$$

und einer Intensität

$$\frac{I(L)}{I(0)}(\vec{\delta}, \vec{k}_i, \vec{k}_f) = 1 + \cos((\vec{k}_i + \vec{k}_f)\vec{\delta}) \,.$$

Da unter beliebigen Winkeln ϑ_i und ϑ_f mögliche Teilwellen zur Gesamtintensität beitragen und keine Korrelation zwischen Ein- und Ausfallswinkel vorausgesetzt wird, muß über alle möglichen Ein- und Ausfallswinkel getrennt gemittelt werden:

$$\frac{I(L)}{I(0)}(k,\delta) = 1 + \overline{\overline{\cos(\vec{k}_i + \vec{k}_f)\vec{\delta}}^{\vartheta_i}}$$

Daraus ergibt sich für das Intensitätsverhältnis im Abstand δ vom Ausgangspunkt

$$\frac{I(L)}{I(0)}(k,\delta) = 1 + \frac{\sin^2 k\delta}{(k\delta)^2}.$$

Der Bereich möglicher Phasendifferenzen zwischen zeitumgekehrten Wegen, die zu erhöhter Inten-



Abbildung 3.15: a: Phasendifferenz zwischen zeitumgekehrten Wellenpaaren b: Verstärkung der Rückstreuung

sität und damit zu Lokalisierung der Welle führen, hängt vom Produkt $k \cdot \delta$, d.h. vom Verhältnis der Wellenlänge zum räumlichem Abstand zwischen Start-und Endpunkt ab (siehe Abb.3.15b). Jeder innerhalb der Unschärfe $\lambda/2\pi$ der Teilchenwelle 'geschlossene' Weg führt zu teilweise konstruktiver Interferenz und damit zu erhöhter Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Ausgangspunkt. Die relative Änderung der klassischen Diffusionskonstanten D_0 aufgrund kohärenter Rückstreuung ist damit proportional zur Querschnittsfläche des um die klassische Trajektorie gedachten Schlauchs mit Durchmesser $\lambda/2\pi$, der den Bereich der Unschärfe wiedergibt ([28],[29]).

$$\frac{\delta D}{D_0} \sim -p('0') \sim -\int_{t_o}^{\tau_\phi} \frac{\lambda^2 dt}{(D \cdot t)^{d/2}}$$

Da die Rückkehr einer Welle zu ihrem Ausgangspunkt nur dann zu Anderson-Lokalisierung und damit zu einer Abnahme des Diffusionskoeffizienten führt, wenn die Phasenkohärenz der Welle noch nicht durch inkohärente Prozesse verloren gegangen ist, darf hier nicht wie im klassischen Fall über beliebig lange Zeiten, sondern nur bis $t_{max} = \tau_{\phi}$ integriert werden. τ_{ϕ} ist die Phasenkohärenzzeit, d.h. die Zeit, über die die Ausbreitung der Welle kohärent ist. Sie entspricht der Zeit, die die Welle im Medium diffundiert ohne durch inkohärente Effekte ihre Phaseninformation zu verlieren oder aber maximal der Zeit, bis sie das Ende der Probe erreicht hat. Als Funktion der entsprechenden Kohärenzlänge $L_{\phi} = \sqrt{D\tau_{\phi}}$ gilt

$$\frac{\delta D}{D_0} \sim \begin{cases} \frac{L_{\phi}}{\lambda} & d = 1\\ \frac{\lambda}{l_{tr}} \ln \frac{L_{\phi}}{l_{tr}} & d = 2\\ \left(\frac{\lambda}{l_{tr}}\right)^2 \left(1 - \frac{l_{tr}}{L_{\phi}}\right) & d = 3 \end{cases}$$

Die Kohärenzlänge spielt somit in jeder Dimension eine entscheidende Rolle. Im eindimensionalen Medium ist sie die einzige entscheidende Größe für das Auftreten von Anderson-Lokalisierung. Unabhängig von der Stärke der Unordnung bricht in unendlich langen, nicht inkohärent streuenden Drähten die Diffusion aufgrund von kohärenter Rückstreuung zusammen. Im Gegensatz dazu spielen im zwei- und dreidimensionalen Medium neben der Kohärenzlänge L_{ϕ} die durch die Unordnung beeinflußte Transportweglänge l_{tr} und die Wellenlänge λ des diffundieren Teilchens eine Rolle. Im zweidimensionalen Medium bricht jedoch im Grenzfall unendlicher Kohärenzlänge L_{ϕ} die Diffusion auch im semiklassischen Bild zusammen. Im dreidimensionalen Medium hingegen muß selbst bei unendlicher Kohärenzlänge nicht zwingend Anderson-Lokalisierung auftreten. Hier wird das Verhalten des Diffusionskoeffizienten ganz wesentlich durch das Verhältnis $\frac{1}{L_{r}}$ bestimmt, wobei die dieser Betrachtung zugrundeliegende klassische Diffusionstheorie strenggenommen nur für $\lambda/l_{tr} \ll 1$ gilt. Die mit zunehmender Wellenlänge zunehmende Transportweglänge jedoch führt dazu, daß auch innerhalb der Unschärfe der Welle geschlossene Wege mit geringerer Wahrscheinlichkeit auftreten, sodaß diese semiklassische Rückkehrwahrscheinlichkeit nicht monoton mit zunehmender Wellenlänge zunimmt. Der Phasenübergang zur starken Lokalisierung läßt sich nur als Grenzfall dieser Diffusionstheorie betrachten. Extrapolation der Diffusionskonstanten für $\lambda/l_{tr} \rightarrow 1$ führt jedoch zu dem gleichen kritischen Verhalten wie es numerische Simulationen starker quantenmechanischer Vielfachstreuung zeigen: Mit zunehmender Wellenlänge wird die Ortsunschärfe der Welle und damit die Möglichkeit zur Anderson-Lokalisierung größer, bis nach dem Joffe-Regel-Kriterium die Wellenausbreitung bei der Wellenlänge $\lambda = 2\pi \cdot l_{tr}$ vollständig zusammenbricht.

3.2.3 Renormierung der Diffusion

Die klassische Diffusionstheorie berücksichtigt zunächst keine bei der Ausbreitung von Wellen auftretenden Interferenzeffekte. Doch auch wenn Interferenzeffekte eine entscheidende Rolle spielen und nicht von vorneherein vernachlässigt werden dürfen, behält die Theorie der klassischen Diffusion im Bereich schwacher Streuung ihre Gültigkeit, wenn der Diffusionskoeffizient D unter Berücksichtigung der Rückkehrwahrscheinlichkeit der Welle modifiziert wird [24]. Ein solcher Diffusionskoeffizient darf nicht länger allein durch lokale Eigenschaften wie Ausbreitungsgeschwindigkeit und Transportweglänge der Welle bestimmt sein, sondern muß makroskopische Kohärenzeigenschaften der gesamten, von der Welle durchströmten Probe enthalten. Dazu läßt sich eine sogenannte Kohärenzlänge ξ_{coh} definieren, innerhalb derer signifikante Interferenzeffekte auftreten (siehe Abb.3.16). Weiter als diese Kohärenzlänge voneinander entfernte Streuzentren tragen weniger zur Korrektur der Diffusion durch Interferenz bei als näher beieinanderliegende.

Der Diffusionskoeffizient wird damit abhängig von der Längenskala Λ , auf der beobachtet wird,

$$D(\Lambda) = \frac{v \cdot l_{tr}}{3} \left(\frac{l_{tr}}{\xi_{coh}} + \frac{l_{tr}}{\Lambda} \right) \,.$$

Im Bereich $\Lambda \ll l_{tr}$ ist die Ausbreitung der Welle wie die eines klassischen Teilchens ballistisch, auf Längenskalen $l_{tr} < \Lambda \ll \xi_{coh}$ quasiklassisch diffusiv mit

$$D = \frac{v \cdot l_{tr}}{3}$$

Im Bereich $l_{tr} \ll \Lambda \leq \xi_{coh}$ wird die Ausbreitung der Welle als Folge von kohärenter Rückstreuung subdiffusiv mit einem skalenabhängigen Diffusionskoeffizienten

$$D(\Lambda) \simeq \frac{v l_{tr}}{3} \cdot \frac{l_{tr}}{\Lambda}$$

Auf Längenskalen $\Lambda \gg \xi_{coh}$ nimmt die Welle ihre diffusive Fortbewegung mit einer reduzierten Diffusionskonstanten

$$D = \frac{vl_{tr}}{3} \cdot \frac{l_{tr}}{\xi_{coh}}$$

wieder auf.



Abbildung 3.16: Renormierung der klassischen Diffusion

Im Übergangsbereich von schwacher zu starker Lokalisierung nimmt die Transmission gemäß dem in Kap.3.1 dargestellten Anderson-Modell exponentiell mit der Dicke Λ der Probe ab, wobei die Kohärenzlänge ξ_{coh} in die von P.W. Anderson definierte Lokalisierungslänge ξ_{loc} übergeht [6] :

$$l_{tr} \ll \xi_{coh} \ll \Lambda \quad T \sim \frac{(l_{tr} - l_{tr,c})^2}{\Lambda^2} e^{-\frac{\Lambda}{\xi_{coh}}}$$

Eine selbstkonsistente Theorie, die zwischen schwacher ($\lambda/l_{tr} \ll 1$) und starker ($\lambda/l_{tr} \sim 1$) kohärenter Rückstreuung interpoliert, wurde von Vollhardt und Wölfe [24] vorgeschlagen. In drei Dimensionen ergibt sich daraus für die Kohärenzlänge:

$$|\xi_{coh} \sim |\lambda - \lambda_c| \sim \frac{l^2}{|l_{tr} - l_{tr,c}|}$$

wobei λ_c die der Mobilitätskante entsprechende Wellenlänge und $l_{tr,c}$ die zugehörige Transportweglänge ist.

Bei Annäherung an die Mobilitätkante divergiert die Kohärenzlänge $\xi_{coh} \sim \frac{l^2}{|l_{tr}-l_{tr,c}|}$, sodaß der Diffusionskoeffizient und die Transmission verschwinden. Die Welle bleibt als Folge von starker kohärenter Rückstreuung im Medium stecken und ist damit stark lokalisiert.

Auch die klassische Transmission $T = \frac{l_{tr}}{\Lambda}$ durch eine Scheibe der Dicke Λ läßt sich mithilfe dieser renormierten Diffusionskonstanten verallgemeinern:

$$T = \frac{l_{tr}}{\Lambda} = \frac{3D}{v\Lambda} = \frac{l_{tr}}{\Lambda} \left(\frac{l_{tr}}{\xi_{coh}} + \frac{l_{tr}}{\Lambda} \right)$$

Im Bereich $l_{tr} \ll \Lambda \leq \xi_{coh}$, d.h. im Bereich schwacher kohärenter Rückstreuung, der auch als Bereich von Quantendiffusion bezeichnet wird, zeigt die Transmission somit ein deutlich anderes Verhalten als in den Bereichen klassischer Diffusion $\Lambda \ll \xi_{coh}$ und $\Lambda \ll \xi_{coh}$:

$$l_{tr} \ll \Lambda \leq \xi_{coh} \quad T \sim \frac{l_{tr}^2}{\Lambda^2}$$
$$l_{tr} \ll \xi_{coh} \ll \Lambda \quad T \sim \frac{l_{tr}^2}{\Lambda \xi_{coh}}$$

3.2.4 Experimente zur Anderson-Lokalisierung

Da es bisher keine streng analytische Theorie der Vielfachstreuung von Wellen bzw. Quantenteilchen gibt, liegen der Beschreibung der Anderson-Lokalisierung vor allem qualitative statistische Betrachtungen zugrunde ([54],[49],[50],[11],[33]). Neben diesen Argumenten stützen sich Voraussagen über das Auftreten schwacher Lokalisierung und des Phasenübergangs vor allem auf sehr umfangreiche und komplexe numerische Simulationen ([59],[17],[52]), sodaß hier experimentelle Untersuchungen wesentlich zum Verständnis der Effekte betragen.

Während kohärente Rückstreuung und auch schwache Lokalisierung experimentell nachgewiesen wurden, ist ein eindeutiger und zweifelsfreier experimenteller Nachweis des Phasenübergangs zur starken Lokalisierung bisher nicht gelungen. Metall-Isolator-Übergänge in elektronischen Systemen scheinen zwar mit Unordnung im Material korreliert zu sein, die vielfältigen und komplexen Wechselwirkungen der Elektronen untereinander und mit dem Atomgitter lassen jedoch auch andere Erklärungen neben dem Mechanismus der Anderson-Lokalisierung zu. Auch in den zahlreichen Experimenten mit anderen, nicht so komplex wechselwirkenden Wellen, wie z.B. Licht, Mikrowellen [12] oder Phononen [54], stellen die Phasenkohärenz der Welle zerstörende Prozesse ein großes Hindernis dar. Schon für das Auftreten kohärenter Rückstreuung bzw. schwacher Lokalisierung ist eine Voraussetzung, daß die Phasenkohärenzlänge L_{Φ} der Welle in der Probe möglichst groß ist. Diese Kohärenz wird durch inkohärente und inelastische Streuprozesse zerstört. Ferner führt eventuell auftretende Absorption der Welle im Medium im allgemeinen ebenfalls zu einer exponentiellen Abnahme der Transmission als Funktion der Probendicke, was den eindeutigen Nachweis von eventuell auftretender starker Lokalisierung erschwert.

Neben diesen 'äußeren' Bedingungen stellt auch das eigentliche Kriterium für das Auftreten von Anderson-Lokalisierung, nämlich das Joffe-Regel-Kriterium [27] an das Verhältnis von Wellen- und Transportweglänge $\lambda/2\pi \simeq l_{tr}$, ein intrinsisches Problem sowohl der theoretischen Beschreibung als auch der experimentellen Untersuchung dar. In diesem Bereich von Wellen- und Transportweglänge gilt die Näherung unabhängiger Streuprozesse der Welle an den einzelnen Zentren nicht mehr. Es treten kohärente Effekte der Streuung an vielen Zentren auf, sodaß die Transportweglänge stark von der Struktur des Mediums abhängt. Auch ein maximal ungeordnetes System zeigt in Abhängigkeit von der Dichte der Streuzentren mindestens noch eine Nahordnung, die zu einer Modifizierung der Transportweglänge l_{tr} führt. Anderson-Lokalisierung ist somit kein Effekt unkontrollierter Unordnung sondern folgt aus einem subtilen Zusammenspiel von Ordnung und Unordnung ([54],[37]). Nach theoretischen Rechnungen ([48],[52]) könnten diese Effekte aufgrund der Nahordnung unter Umständen in einem Gemisch zweier oder mehrerer Komponenten verhindert werden, was bisher jedoch experimentell nicht bestätigt werden konnte.

Lokalisierung von Elektronen

Wie in Kap 3.1.2 bereits diskutiert wurde, führt in einem elektronischen System auftretende Anderson-Lokalisierung zu einem Metall-Isolator-Übergang, der allerdings auch auf andere Mechanismen zurückgeführt werden kann. Es gibt jedoch eindeutige Hinweise auf schwache Lokalisierung von Elektronen. Beispielsweise wurden Time-of-Flight-Experimente mit Elektronen in stark streuenden Medien durchgeführt und die Abnahme des Diffusionskoeffizienten und damit der Geschwindigkeit des Wellentransports nachgewiesen ([9],[10]). Desweiteren bietet die Wechselwirkung von Elektronen mit einem Magnetfeld theoretisch eine Möglichkeit, die Zeitumkehrinvarianz des Systems durch Anlegen eines äußeren Magnetfeldes zu zerstören und damit das Auftreten von Anderson-Lokalisierung in zweidimensionalen Systemen gezielt zu unterbinden [4]. Breiten sich nämlich *Elektronen* in einem Magnetfeld aus, so verursacht dieses eine Phasendifferenz zwischen zeitumgekehrten Teilwellen, die auf der Wechselwirkung der Elektronenladung e mit dem Vektorpotential $\vec{A} = \vec{\nabla} x \vec{B}$ beruht. Bezeichnet $\phi(L)$ bzw $\phi'(L)$ die Propagationsphase $\phi(L) = \vec{k} \vec{s}$ bzw $\phi(L)' = \vec{k}' \vec{s}'$, dann lauten die Wellenfunktionen der zeitumgekehrten Teilwellen nach der Weglänge L

$$\psi_e(L) = e^{\phi(L) + \frac{ie}{\hbar c} \oint d\vec{s} \vec{A}(s)} \psi(0)$$
$$\psi'_e(L) = e^{\phi'(L) - \frac{ie}{\hbar c} \oint d\vec{s} \vec{A}(s)} \psi(0)$$

Selbst wenn Start- und Endpunkt der Diffusion räumlich identisch sind, d.h. $\phi(L) = \phi(L)'$, erhalten zeitumgekehrte Teilwellen im Magnetfeld unterschiedliche Phasen. Die entstehende Phasendifferenz entspricht der Aharonov-Bohm-Phase

$$\delta \Phi = 2 \frac{ie}{\hbar c} \oint d\vec{s} \vec{A}(s))$$

sodaß die Intensität am Endpunkt nach der Weglänge L

$$I(L) = (1 + \cos \delta \Phi) |\phi(0)|^2 = (1 + \cos(2\frac{ie}{\hbar c} \oint d\vec{s} \vec{A}(s))) |\psi(0)|^2$$

beträgt. Die Ausbreitung von Elektronen in einem mesoskopischen System mit äußerem Magnetfeld hat jedoch sehr vielfältige Effekte zur Folge, die derzeit im Rahmen von Untersuchungen zum integralen Quanten-Hall-Effekt intensiv diskutiert werden [34], sodaß auf diese Weise bisher keine eindeutigen Aussagen über das Auftreten von Anderson-Lokalisierung möglich sind.

Lokalisierung von Licht

Neben den in Kap.3.2.1 erwähnten Experimenten zur kohärenten Rückstreuung von Licht wurden auch hier Time-of-Flight-Experimente mit nahezu monochromatischen Picosekunden-Laserpulsen durch stark streuende Medien durchgeführt und tatsächlich Hinweise auf eine Abnahme des Diffusionskoeffizienten und damit der Geschwindigkeit des Wellentransports als Funktion der Probendicke Λ beobachtet ([55],[3],[15],[20]). Starke Lokalisierung, d.h. starke Streuung von Licht, erfordert eine große Dielektrizitätskonstante des streuenden Materials, die nach dem gängigen Modell der Dielektrika jedoch immer mit starker Absorption verknüpft zu sein scheint. Ein weiteres Problem stellt auch hier die Joffe-Regel-Bedingung selbst dar, da sie in einer gegebenen Probe, wenn überhaupt, nur in einem relativ schmalen Wellenlängenband von Licht erfüllt werden kann (siehe Abb.3.17a).

Licht im Vergleich zur Größe der Streuzentren langer Wellenlänge unterliegt der Rayleigh-Streuung mit einem Wirkungsquerschnitt von $\sigma \sim \lambda^{-4}$ pro Streuzentrum. Mit zunehmender Wellenlänge nimmt somit die elastische freie Weglänge mit $l_{el} \sim \lambda^4$ zu und entfernt sich immer mehr von der Joffe-Regel-Bedingung. Im Vergleich zur Korngröße a kurzwelliges Licht unterliegt der Mie-Streuung, welche mit abnehmender Wellenlänge abnimmt und auch hier zu einer Zunahme der Transportweglänge führt. Obwohl im Bereich $a \simeq \lambda$ sogenannte Mie-Resonanzen auftreten, die zu einer Vergrößerung des Wirkungsquerschnitts auf bis zu $\sigma \simeq 6\pi a^2$ führen, kann auch in diesem Bereich das Joffe-Regel-Kriterium nur sehr schwer erfüllt werden, da kohärente Streuprozesse zu einer Vergrößerung der Transportweglänge führen.

Darüberhinaus führen kohärente Streuprozesse dazu, daß sich in einem geordneten Gitter nur Wellen bestimmter Wellenlängen, die sogenannten Blochwellen, ausbreiten können, was zu Energielücken im bisher als kontinuierlich angenommenen Photonenspektrum in einem dielektrischen Medium führt. Läßt man eine kleine Störung des regelmäßigen Gitters zu, so führt dies zu sogenannten 'pseudogaps' in der Zustandsdichte, die im Vergleich zu den Energielücken des regelmäßigen Gitters breiter und nicht so tief sind (Abb.3.17b). Derartige Energielücken infolge kohärenter Streuung führen analog zu den Urbach-Zuständen an den Bandrändern des elektrischen Leiters zu



Abbildung 3.17: a: Joffe-Regel-Kriterium für Photonen b: Pseudogaps für Photonen

lokalisierten Zuständen von Photonen mit $\omega^2/c^2 \leq E_c$, die jedoch nichts mit einer Lokalisierung im Sinne von P.W.Anderson zu tun haben.

Ende des letzten Jahres (1997) wurden experimentelle Ergebnisse veröffentlicht [56], die Hinweise auf starke Lokalisierung von Licht geben könnten. In diesem Experiment wurde die Abhängigkeit der Transmission von Licht durch Schichten aus GaAs-Pulvern verschiedener Korngröße als Funktion der Schichtdicke untersucht. GaAs ist ein Halbleiter mit indirekter Bandlücke, sodaß Absorption von Licht der verwendeten Energie, die gerade der Mitte der Bandlücke entspricht, theoretisch ausgeschlossen werden kann. Da die Lage der Bandlücke eine Funktion der Temperatur im Halbleiter ist, wurde durch eine Messung der Transmission von Licht fester Wellenlänge als Funktion der Temperatur des Halbleiters experimentell gezeigt, daß die Transmission bei Raumtemperatur maximal ist. Mithilfe von Reflexionsmessungen des Lichts an der gegebenen Probe wurde aus der Breite des Rückstreukonus' die jeweilige Transportweglänge des Lichts in der Probe bestimmt. In Abhängigkeit von der Korngröße beobachteten sie ein Transmissionsverhalten von Licht als Funktion der Probendicke, welches dem in den in Kap. 3.2.3 beschriebenen Bereichen von klassischer Diffusion, Quantendiffusion und starker Lokalisierung entspricht. Da GaAs ein sehr komplexes System darstellt, welches in der Halbleiterforschung intensiv untersucht wird, gibt es jedoch auch andere bekannte Effekte, die zu dem beobachteten Transmissionsverhalten führen könnten, sodaß auch hier noch kein eindeutiger und zweifelsfreier experimenteller Nachweis von Anderson-Lokalisierung vorliegt.

Ein äußeres Magnetfeld würde die Zeitumkehrinvarianz der Ausbreitung von polarisiertem Licht zerstören, da es eine Drehung der Polarisationsrichtung bewirkt, die als Faraday-Rotation bekannt ist. Vielfachstreuung von zunächst polarisiertem Licht führt zwar zu Depolarisierung, jeder durch Interferenzen entstehende Specklepunkt der transmittierten Intensität hat jedoch wegen der vollständig kohärenten Ausbreitung des Lichts durch die Probe einen eigenen wohldefinierten Polarisationszustand. In starken Magnetfeldern sollten kohärente Rückstreuung und Lokalisierung somit gezielt unterdrückt werden können, sodaß eine stark streuende Probe mit großem Faraday-Effekt ein ideales, bisher jedoch vergeblich gesuchtes Medium zum Nachweis von Anderson-Lokalisierung wäre [36].

Lokalisierung von Neutronen

Neutronen haben im Vergleich zu Elektronen, Licht und Phononen einige vorteilhafte Eigenschaften in Bezug auf die Möglichkeit eines Nachweises von Anderson-Lokalisierung: Bei den in Experimenten mit freien Neutronen typischen Dichten wechselwirken sie nicht miteinander und werden von einigen Materialien nur sehr schwach absorbiert oder inkohärent gestreut. Die Joffe-Regel-Bedingung $l_{tr} \sim \lambda/2\pi$ könnte bei der Streuung ultrakalter Neutronen mit De-Broglie-Wellenlängen von $\lambda \simeq 10-100$ nm an kommerziell erhältlichen Pulvern von beispielsweise Kohlenstoff mit Korngrößen ähnlicher Größenordnung erfüllt werden. Der Brechungsindex fast aller Elemente (mit Ausnahme von Wasserstoff und Titan) ist für Neutronen kleiner als Eins ist, sodaß ultrakalte Neutronen aufgrund ihrer niedrigen kinetischen Energie unter fast beliebigem Einfallswinkel totalreflektiert werden. Sie werden folglich sehr stark elastisch gestreut ohne stark absorbiert zu werden, sodaß ihre Phasenkohärenzlänge als sehr lang angenommen werden kann, was eine gute Voraussetzung für das Auftreten von Anderson-Lokalisierung sein sollte. Die in Kap. 3.4.2 durchgeführten Berechnungen der Transportweglänge von UCNs in derartigen Medien zeigen, daß jedoch auch hier kohärente Effekte aufgrund von Vielfachstreuung einen entscheidenden Einfluß auf die Stärke der Streuung haben.

Ein äußeres Magnetfeld führt im Falle der Vielfachstreuung von Neutronen nicht zu einer Zerstörung der Zeitumkehrinvarianz. Als ungeladene Teilchen erhalten Neutronen im Gegensatz zu Elektronen im Magnetfeld keine Aharonov-Bohm-Phase. Neutronen wechselwirken mit einem Magnetfeld allein aufgrund ihres magnetischen Moments. Die Wellenfunktion eines unpolarisierten Teilchens in der Basis der Eigenfunktionen des äußeren Magnetfeldes lautet nach der Weglänge L

$$\psi(L) = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(L) \\ \psi_{\downarrow}(L) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\Phi_{\uparrow}(L)} & 0 \\ 0 & e^{i\Phi_{\downarrow}(L)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(0) \\ \psi_{\downarrow}(0) \end{pmatrix} = U(L)\psi(0)$$

und die entsprechende zeitumgekehrte Wellenfunktion

$$\psi'(L) = \begin{pmatrix} \psi'_{\uparrow}(L) \\ \psi'_{\downarrow}(L) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\Phi'_{\uparrow}(L)} & 0 \\ 0 & e^{i\Phi'_{\downarrow}(L)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi'_{\uparrow}(0) \\ \psi'_{\downarrow}(0) \end{pmatrix} = U'(L)\psi(0),$$

wobei $\psi_{\uparrow,\downarrow}^{(')}(0,L)$ die Wellenfunktion für die zum Magnetfeld parallele 'Spin Up' (↑) bzw. antiparallele 'Spin Down' (↓) Spinkomponente am Startpunkt 0 bzw nach der Weglänge L bezeichnet. Die potentielle Energie eines Spin 1/2 - Teilchens im Magnetfeld B beträgt

$$V_m = \vec{\mu} \vec{B}$$

und führt zu einer Zeeman-Aufspaltung der beiden kinetischen Energieniveaus von

$$\Delta E_{kin} = 2\mu B$$

und damit in einem longitudinalen Magnetfeld zu einem longitudinalen Stern-Gerlach-Effekt: Die Spin-Down-Komponente gewinnt kinetische Energie, die Spin-up-Komponente wird durch das Magnetfeld abgebremst bzw reflektiert, wenn ihre kinetische Energie kleiner ist als ihre potentielle Energie im Magnetfeld. Die Wellenzahl der Neutronen ändert sich im Magnetfeld gemäß

$$k = k_0 \cdot \sqrt{1 - \frac{V_m}{E_0}},$$

wobei E_0 , k_0 die Gesamtenergie bzw. die Wellenzahl des Neutrons außerhalb des Magnetfeldes bezeichnet. Von einem unpolarisierten Strahl werden im Magnetfeld 50 % der Neutronen gemäß

$$k_{\downarrow} = k_0 \cdot \sqrt{1 + \frac{2m\mu B}{\hbar^2 k_0^2}}$$

beschleunigt und 50 % gemäß

$$k_{\uparrow} = k_0 \cdot \sqrt{1 - \frac{2m\mu B}{\hbar^2 k_0^2}}$$

abgebremst bzw reflektiert. Die Phase $\Phi_{\uparrow(\downarrow)}(L)$ ist damit eine Funktion des Momentes μB



Abbildung 3.18: Erhöhung der Intensität aufgrund kohärenter Rückstreuung im Magnetfeld

$$\Phi_{\uparrow(\downarrow)}(L) = \phi(L) \cdot \sqrt{1 - (+)\frac{2m\mu B}{\hbar^2 k_0^2}}$$

Da unter Zeitumkehrtransformation sowohl der Spin als auch das äußere Magnetfeld ihr Vorzeichen ändern, erhalten zeitumgekehrte Paare von Wellenfunktionen keine Phasendifferenz allein aufgrund eines Magnetfeldes.

$$\Phi_{\uparrow(\downarrow)}'(L) = \phi'(L) \cdot \sqrt{1 - (+) \frac{2m(-\mu)(-B)}{\hbar^2 k_0^2}}$$

Die Intensität nach der Weglänge L ist im Magnetfeld

$$I(L) = \frac{1}{2} \left((1 + \cos \delta \Phi_{\uparrow}) |\psi_{\uparrow}(0)|^2 + (1 + \cos \delta \Phi_{\downarrow}) |\psi_{\downarrow}(0)|^2 \right),$$

wobei die Phasendifferenz

$$\delta\Phi_{\uparrow(\downarrow)}(L) = \delta\phi_{\uparrow(\downarrow)}(L)\sqrt{1-(+)\frac{2m\mu B}{\hbar^2 k_0^2}}$$

durch das Magnetfeld lediglich einen multiplikativen Faktor erhält, der auf der spinabhängigen Änderung des Wellenvektors $k = 2mE_{kin}/\hbar$ im Magnetfeld beruht (Abb. 3.18). Mit $|\psi_{\uparrow}(0)|^2 = |\psi_{\downarrow}(0)|^2$ und $I(0) = |\psi_{\uparrow}(0)|^2 + |\psi_{\downarrow}(0)|^2 = 2|\psi_{\uparrow}(0)|^2 = 2|\psi_{\downarrow}(0)|^2$ folgt

$$\frac{I(L)}{I(0)}(k,\delta) = 1 + \frac{1}{2} \frac{\sin^2 k_{\uparrow} \delta}{(k_{\uparrow} \delta)^2} + \frac{1}{2} \frac{\sin^2 k_{\downarrow} \delta}{(k_{\downarrow} \delta)^2} \,.$$

Für ein in Richtung des Magnetfeldes polarisiertes Neutron mit $|\psi_{\downarrow}(0)|^2 = 0$ und $I(0) = |\psi_{\uparrow}(0)|^2$ ergibt sich entsprechend

$$\frac{I(L)}{I(0)}(k,\delta) = 1 + \frac{\sin^2 k_{\uparrow}\delta}{(k_{\uparrow}\delta)^2}$$

Die Wechselwirkung eines senkrecht zum Magnetfeld polarisierten Neutrons wird durch das entsprechende Moment $\vec{\mu} \times \vec{B}$ beschrieben, welches sein Vorzeichen unter Zeitumkehrtransformation ebenfalls nicht ändert, sodaß ein Magnetfeld auch hier die Zeitumkehrinvarianz der Ausbreitung nicht zerstört.

Ein Magnetfeld bewirkt jedoch eine deutliche Wellenlängenänderung von ultrakalten Neutronen, sodaß die Untersuchung der Transmission in einem veränderbaren äußeren Magnetfeld über einen sehr großen Wellenlängenbereich möglich wird.

3.3 Streuung von ultrakalten Neutronen

Neutronen werden vor allem aufgrund ihrer starken und magnetischen Wechselwirkung mit den Atomkernen in Materie gestreut. Ein Beitrag der schwachen Wechselwirkung kann in diesem Zusammenhang zunächst vernachlässigt werden. Im wesentlichen werden dabei vier Kategorien von Streuprozessen unterschieden [22], [25], [46]:

- Kohärente elastische Streuung
- Inkohärente elastische Streuung
- Kohärente inelastische Streuung
- Inkohärente inelastische Streuung

Als *elastisch* wird eine Wechselwirkung bezeichnet, bei der kein Energieaustausch zwischen den streuenden Teilchen stattfindet. Die wechselwirkenden Partner ändern bei der Streuung nur die Richtung ihrer Fortbewegung, nicht aber ihre Energie, während sie bei einer *inelastischen* Wechselwirkung Energie austauschen.

Die Definition der Kohärenz der Streuung von Neutronen unterscheidet sich etwas von der in der Lichtoptik üblichen. In der Optik wird ein Streuprozeß als kohärent bezeichnet, wenn die Phaseninformation der Welle dabei erhalten bleibt, d.h. wenn ungestreute und gestreute Welle eine feste Phasenbeziehung zueinander haben. In diesem Sinne ist die Streuung eines Neutrons an einem einzelnen Nukleon immer kohärent, denn dabei geht die Phaseninformation nie verloren. In der Neutronenstreuung beschreibt Kohärenz jedoch immer die Phasenbeziehung der an verschiedenen Zentren gestreuten Wellen zueinander. Bereits bei der Wechselwirkung von Neutronen mit einem Atomkern handelt es sich um Vielfachstreuung an vielen Nukleonen. Diese Wechselwirkung mit einem Atomkern ist ebenfalls immer kohärent. Streuen jedoch die einzelnen Kerne eines Materials verschieden, sei es weil sie verschiedene Isotope sind oder weil ihre Kernspins unterschiedlich ausgerichtet sind, dann streut das Material als ganzes *inkohärent*. Ist das Material unmagnetisch und isotopenrein, bzw. streuen die einzelnen Isotope nur sehr wenig unterschiedlich, so streut das Material als ganzes *kohärent*.

Im folgenden soll etwas ausführlicher auf die *kohärent elastische* Streuung eingegangen werden, da prinzipiell nur sie zu Anderson-Lokalisierung von Neutronen in ungeordneten Medien führen kann. Sie allein erhält die Phasenkohärenz der Welle, während diese bei inelastischen und inkohärenten Streuprozessen verloren geht. Vielfachstreuung unter realen Bedingungen ist sehr kompliziert und kann nur noch numerisch berechnet werden. Unter einigen vereinfachenden Bedingungen kann sie jedoch zumindest in den Grenzfällen der Streuung an unabhängigen Streuzentren einerseits und der Streuung an sehr dichtliegenden kurzreichweitigen Streuzentren andererseits analytisch behandelt werden.

3.3.1 Elastische Streuung

Allgemeine Streutheorie der elastischen Einzelstreuung

Die Grundannahmen dieser Theorie der Einzelstreuung [39] entsprechen der Fraunhofer-Näherung in der Optik:

Ein Teilchen komme aus dem Unendlichen in den räumlich begrenzten Wechselwirkungsbereich eines Streuzentrums, werde an diesem gestreut und im Unendlichen weit außerhalb dieses Wirkungsbereichs detektiert. Außerhalb des Wechselwirkungsbereichs bewege sich das Teilchen kräftefrei. Das Streuzentrum selbst bleibe dabei in Ruhe, d.h. es sei entweder sehr schwer oder chemisch gebunden, sodaß kein Energieübertrag stattfindet.

Die elastische Wechselwirkung des Teilchens als Welle mit dem Steuzentrum wird durch ein reelles Wechselwirkungspotential V(r) und die Dispersionsrelation $\omega(\vec{k})$ beschrieben. Das Potential wird im allgemeinen als kugelsymmetrisch und im Fall der starken Wechselwirkung als kurzreichweitig angenommen, erfüllt also die Bedingung

$$r \cdot V(r)
ightarrow 0$$
 für $r
ightarrow \infty$.

Aus der Winkel- und Intensitätsverteilung der gestreuten Welle lassen sich Rückschlüsse auf das Wechselwirkungspotential und die zugrundeliegende Beschaffenheit des Streuzentrums ziehen. Umgekehrt läßt sich bei bekanntem Wechselwirkungspotential die Winkel- und Intensitätsverteilung, der differentielle Wirkungsquerschnitt und damit die elastische freie Weglänge l_{el} und die Transportweglänge l_{tr} der im Medium gestreuten Welle in der Näherung unabhängiger Streuzentren berechnen.

Ein einlaufendes Teilchen wird durch ein Wellenpaket

$$\psi(\vec{r},t) = \int d^3k \hat{\psi}(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega(\vec{k})t)}$$

repräsentiert, welches sich mit der Gruppengeschwindigkeit $v_g = \frac{d\omega(k)}{dk}$ auf das Streuzentrum zu bewegt. Ein Wellenpaket ist als Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung kein Eigenzustand des kräftefreien Hamilton-Operators. Es besitzt deshalb weder einen scharfen Impuls noch eine scharfe Energie. Die räumliche transversale und longitudinale Ausdehnungen Δb_t und Δb_l sind Maße für die Ortsunschärfe des Teilchens. Damit die spezielle Struktur des Wellenpaketes den Streuvorgang nicht allzu sehr beeinflußt, sollte das Paket die Streuzone mit Radius R vollständig überdecken, d.h. es sollte gelten

$$R << \Delta b_t, \Delta b_l$$
 .

Ferner sollte die De-Broglie-Wellenlänge λ des Paketes kleiner sein als die Ortsunschärfe, damit Energie und Impuls noch hinreichend gut definiert sind um ein Fortschreiten der Welle zu beschreiben. Die Ortsunschärfe sollte jedoch auch nicht beliebig groß sein, damit auch der Ort des entsprechenden Teilchens noch hinreichend gut definiert ist. Die Gesamtwellenfunktion des Streuproblems setzt sich zusammen aus einer ins Streuzentrum einlaufenden Welle $\psi_o(\vec{r})$ und einer gestreuten Welle $\phi_s(\vec{r})$

$$\psi(ec{r})=\psi_{o}(ec{r})+\psi_{s}(ec{r})$$
 .

Ist der einzelne Streuprozeß schwach, so setzt sich die Welle des auslaufenden Teilchens $\psi_s(\vec{r})$ aus zwei Anteilen zusammen: einem über das Streuzentrum hinweg nahezu ungestört fortschreitenden Wellenpaket $\psi_o(\vec{r})$ und einem gestreuten Anteil, der sich aus nach allen Richtungen hin auslaufenden Kugelwellen zusammensetzt (siehe Abb.3.19).

Die Lösung dieses zeitabhängigen Streuproblems ist mathematisch sehr kompliziert. Jedes Wellenpaket läßt sich jedoch als Überlagerung von ebenen Wellen unterschiedlicher Frequenzen betrachten, wobei die ebene Welle ein Energieeigenzustand des kräftefreien, zeitunabhängigen Hamilton-Operators ist. Die Amplitudenfunktion $\hat{\psi}(\vec{k})$ des Wellenpaketes sorgt für die räumliche Begrenzung



Abbildung 3.19: Quantenmechanische Streuung einer Teilchenwelle an einem kugelsymmetrischen Potential

der Teilchenwelle. Der Streuprozeß selbst kann im Detail sehr kompliziert sein. Ist er jedoch auf einen sehr kleinen Wechselwirkungsbereich beschränkt, außerhalb dessen sich die Welle kräftefrei bewegt, und interessieren wir uns für die Wellenfunktion und deren Intensitätverteilung nur weit weg vom Streuzentrum, so läßt sich der Streuprozeß auf ein zeitunabhängiges Problem reduzieren. Sowohl die einlaufende als auch die auslaufende Welle verhalten sich asymptotisch im Unendlichen wie ebene Wellen, wobei Interferenzen zwischen beiden vernachlässigt werden können.

Die Symmetrie des im einfachsten Fall betrachteten Zentralpotentials $V(\vec{r}) = V(r)$ legt die Darstellung des Streuprozesses in Kugelkoordinaten und die Entwicklung der Wellenfunktion nach Kugelfunktionen, die sogenannte Partialwellenzerlegung, gemäß dem Ansatz

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} R(r) Y_{lm}(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{u_l(r)}{r} P_l(\cos \theta)$$

nahe. Das Streuproblem reduziert sich damit auf eine formal einfache, eindimensionale radiale Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r)\right)u(r) = Eu(r),$$

die ein Teilchen der Masse m im effektiven Zentralpotential

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

beschreibt. Man bezeichnet den zweiten Summanden als Zentrifugalbarriere, die in jedem Fall abstoßend ist und quadratisch mit dem Abstand vom Kraftzentrum abnimmt. Die ebene Welle als asymptotische Lösung des betrachteten Streuproblems im Unendlichen hat in dieser Partialwellenzerlegung nach Kugelfunktionen die Form

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta),$$

wobei sich die Besselfunktionen $j_l(kr)$ und folglich auch die ebene Welle für große Entfernungen r vom Streuzentrum wie die Überlagerung von ein- und auslaufenden Kugelwellen verhalten

$$j_l(kr) \longrightarrow_{r \to \infty} \frac{1}{2ikr} \left(e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right) = \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{l\pi}{2}) \to 0,$$

sodaß sich die Entwicklung der ebenen ungestörten Welle nach Partialwellen auch in der Form

$$\psi_{o}(\vec{r}) = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{r} \frac{1}{k} i^{l} (2l+1) \sin(kr - \frac{l\pi}{2}) P_{l}(\cos\theta)$$

schreiben läßt. Unter der Annahme eines kurzreichweitigen Potentials verhält sich die gestreute Welle asymptotisch ebenfalls wie eine ebene Welle und der Einfluß des speziellen Potentials manifestiert sich im Unendlichen in einer Phasenverschiebung δ_l , der sogenannten *Streuphase* der *l*-ten Partialwelle:

$$\psi_s(\vec{r}) \longrightarrow \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{r} \alpha_l \sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l) P_l(\cos\theta)$$

Damit die Wellenfunktion $\psi(r)$ im gesamten Raum endlich und quadratintegrabel bleibt, muß sie zwei Randbedingungen erfüllen:

$$\lim_{r \to 0} r\psi(\vec{r}) = 0$$
$$\lim_{r \to \infty} r\psi(\vec{r}) = 0$$

Die Streuphasen δ_l werden mithilfe dieser Randbedingungen und des speziellen Potentials festgelegt. Die starke Wechselwirkung von Nukleonen läßt sich durch ein derartiges kurzreichweitiges Potential, in einfachster Form durch einen sphärischen Potentialtopf endlicher Tiefe, beschreiben. Der experimentell beobachtbare Einfluß der Streuung auf die Wellenfunktion des Teilchens entspricht anschaulich der Summe der Wechselwirkungen der einzelnen Partialwellen mit dem Streuzentrum. Zu einer eher 'makroskopischen', d.h. über alle Partialwellen summierenden, Beschreibung des Streuprozesses, gelangt man mithilfe eines anderen, aber analogen, Ansatzes, nach dem die gestreute Welle $\psi_s(\vec{r})$ im Unendlichen die Form

$$\psi_s(\vec{r}) \longrightarrow (r \to \infty) f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

hat, wobei die Streuamplitude $f(\theta)$ die gesamte Information über das streuende Potential enthält. Durch den Vergleich dieser beiden asymptotischen Ansätze ergibt sich für die Streuamplitude

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta).$$

Bei Kenntnis der Streuphasen δ_l kann somit eine über alle Drehimpulsbeiträge summierende winkelabhängige Streuamplitude $f(\theta)$ berechnet werden. Die experimentell beobachtbare Größe des Streuprozesses ist der Bruchteil der in einen bestimmten Winkel θ gestreuten Teilchenzahl, der sogenannte differentielle Wirkungsquerschnitt

$$d\sigma(\theta) = \frac{\text{Zahl der unter dem Winkel } \theta \text{ gestreuten Teilchen}}{\text{Zahl der einlaufenden Teilchen}}.$$

Unter Vernachlässigung von Interferenzen zwischen ein- und auslaufenden Wellen ist die einlaufende Stromdichte

$$\vec{j}_o = n_o \frac{\hbar}{2mi} (\psi_o^*(\vec{r}) \nabla \psi_o(\vec{r}) - \psi_o(\vec{r}) \nabla \psi_o^*(\vec{r})) = n_o \frac{\hbar \vec{k}_o}{m}$$

und die gestreute Stromdichte

$$\vec{j}_s = n_o \frac{\hbar}{2mi} (\psi_s^*(\vec{r}) \nabla \psi_s(\vec{r}) - \psi_s(\vec{r}) \nabla \psi_s^*(\vec{r})) = n_o \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\theta)|^2}{r^2} \vec{e_r}$$

Damit erhält der differentielle Wirkungsquerschnitt die einfache Form

$$d\sigma(\theta) = rac{ec{j}_s \cdot dec{\Omega}}{|ec{j}_o|} = |f(\theta)|^2 d\Omega,$$

ist vollständig durch die Streuamplitude bestimmt und hat die Dimension einer Fläche, die üblicherweise in der Einheit barn (1barn $= 10^{-24}$ cm²) angegeben wird. Der differentielle Wirkungsquerschnitt kann experimentell bestimmt werden und liefert direkte Informationen über das Wechselwirkungspotential. Umgekehrt kann bei Kenntnis des Wechselwirkungspotentials die Winkelverteilung der gestreuten Teilchen vorausberechnet werden. Integration über den gesamten Raumwinkel ergibt dann den totalen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta$$

Elastische Streuung am einzelnen Kern

Die elastische Wechselwirkung eines Neutrons mit einem einzelnen Nukleon kann durch einen sphärischen Potentialtopf der Tiefe $V_o = -40$ MeV mit Radius R = 2 fm beschrieben werden [22]. Das Potential eines Kerns aus mehreren Nukleonen behält die gleiche Tiefe; es ändert sich lediglich der Radius. Die Wellenfunktion hat die Form

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r},$$

wobei die Streuamplitude durch das Wechselwirkungspotential und die Randbedingungen an die Wellenfunktion bestimmt ist und direkt zum differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2$$

führt. Im Falle der Streuung von UCNs mit Wellenlängen von $\lambda \sim 10 - 100$ nm an einem Kernpotential mit $R \sim 2$ fm $\sim (10^{-8} - 10^{-7}) \cdot \lambda_{ucn}$ findet nur s-Wellen-Streuung statt, d.h. nur die Partialwelle l = 0, die sogenannte s-Welle, wird gestreut.



Dies läßt sich im semiklassischen Bild der Streuung anschaulich verstehen (Abb. 3.20): Ein Teilchen, das im Abstand d am Zentrum vorbeifliegt, hat diesbezüglich den klassischen Drehimpuls l = mvd. Dieser ist gleich dem quantenmechanischen Drehimpuls \hbar (l = 1), wenn $d \sim \hbar/mv = \lambda$. Ist die Wellenlänge λ des Teilchens sehr viel größer als die Reichweite R des Wechselwirkungspotentials, d.h.

$$kR = \frac{2\pi R}{\lambda_B} \ll 1,$$

Abbildung 3.20: s-Wellen-Streuung

so passiert ein Teilchen mit quantemechanischem Dre-

himpuls l=1 das Zentrum weit außerhalb der Reichweite des Wechselwirkungspotentials und wird folglich nicht gestreut. Die s-Wellen-Streuung ist räumlich isotrop, d.h. winkelunabhängig, sodaß die Streuamplitude $f(\theta) = -a$ eine Konstante ist. Das Vorzeichen ist Definition. Im Grenzfall sehr niedriger Teilchenenergien, d.h. im Grenzfall $k \to 0$, tritt bei allen Streuprozessen nur s-Wellestreuung auf und die Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ läßt sich schreiben als

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} = 1 - a/r.$$

Sie erfüllt die Randbedingung $\psi(R) = 0$ an die Wellenfunktion für Streuung an einer harten Kugel mit Radius R = a. Die Streuung eines Teilchens am betrachteten Potential verhält sich also für kleine Teilchenenergien wie die Streuung an einer harten Kugel mit Radius a

$$V(r) = \begin{cases} \infty \iff r < a \\ 0 \iff r > a \end{cases}$$

Die Konstante a wird daher als Streulänge des Zentrums bezeichnet. Sie ist abhängig vom Wechselwirkungspotential. Im Falle der Streuung von Neutronen am Kern aufgrund der starken Wechselwirkung ist sie element- und isotopenabhängig und bei obiger Vorzeichenkonvention für fast alle Materialien bis auf sehr wenige positiv (a > 0), d.h. diese Wechselwirkung ist im allgemeinen repulsiv. Wasserstoff und Titan stellen mit negativen Streulängen (a < 0) eine Ausnahme dar und scheinen das Neutron anzuziehen. Für höhere Neutronenenergien liegt keine reine s-Wellenstreuung vor und das exakte Streuproblem wird sehr kompliziert. Die Reichweite des Wechselwirkungspotentials wird zwar als räumlich begrenzt angenommen, die potentielle Energie der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung ist jedoch sehr groß im Vergleich zur Energie des Neutrons selbst, sodaß die Wellenfunktion des Neutrons im Bereich der Wechselwirkungszone sehr stark verändert wird. Wird sie außerhalb nur sehr wenig geändert und interessiert man sich nur für das Verhalten der Wellenfunktion weit außerhalb der Wechselwirkungszone, so behält der Formalismus der allgemeinen Streutheorie seine Gültigkeit. In der Nähe des Streuzentrums gilt sie streng genommen nicht. Nach einer Idee von E.Fermi [19] kann jedoch das kurzreichweitige starke Kernpotential V(r) durch ein schwächeres Kastenpotential längerer Reichweite

$$U(r) = \begin{cases} -U_o \iff r < \rho \\ 0 \iff r > \rho \end{cases}$$

ersetzt werden, welches für große Abstände vom Streuzentrum äquivalente Lösungen wie das wirkliche Kernpotential liefern und so 'schwach' sein soll, daß das gesamte Streuproblem störungstheoretisch behandelt werden kann. In erster Born'scher Näherung kann die Streuung schließlich als reine s-Wellenstreuung an einem hierzu äquivalenten δ -Potential, dem sogenannten effektiven Fermipotential

$$U_F(r) = \frac{2\pi\hbar^2 a}{\mu} \delta^{(3)}(\vec{r})$$

beschrieben werden, wobei der reduzierten Masse von Neutron und Kern entspricht. Ist die Streuung am wirklichen Potential reine s-Wellenstreuung, so liefert das Fermipotential die korrekte Lösung des Streuproblems. Ein Nukleon am Ort $\vec{r_n}$ erzeugt dann eine Streuwelle

$$\psi_{sc}(\vec{r}) = -\frac{a}{|\vec{r} - \vec{r_n}|} e^{ik|\vec{r} - \vec{r_n}|} e^{i\vec{k}\vec{r_n}}$$

Elastische Streuung an einem System von Kernen

In Materie sind die einzelnen streuenden Kerne gebunden und die Streulänge des einzelnen Kerns muß durch eine sogenannte gebundene Streulänge

$$a_B = \frac{m}{\mu}a$$

mit der Masse des Neutrons m und der reduzierten Masse von Neutron und Kern μ ersetzt werden [22]. Das effektive Fermipotential eines Systems von Kernen an Orten i lautet:

$$U_F(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_i a_B^{(i)} \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{R_i})$$

Da im allgemeinen immer von Streuung an gebundenen Kernen die Rede ist, wird der Index *B* normalerweise und im folgenden weggelassen. Die Streulänge *a* eines gegebenen Kerns ist isotopenabhängig und variiert mit der relativen Spinstellung von Neutron und Nukleon, sodaß der differentielle Wirkungsquerschnitt eines unpolarisierten Isotopengemischs immer dem Mittelwert über alle auftretenden Wirkungsquerschnitte entspricht:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \overline{|\sum_{i} f_i(\theta)|^2} = \overline{|\sum_{i} a_i e^{i\vec{Q}\vec{R}_i}|^2} = \sum_{i,j} \overline{(a_i^*a_j)} e^{i\vec{Q}(\vec{R}_j - \vec{R}_i)},$$

wobei $\vec{Q} = \vec{k_0} - \vec{k_f}$ der Impulsübertrag bei der Streuung ist. Sind Kernspins und Isotope im Material völlig zufällig verteilt, so tritt keine Korrelation zwischen den Streulängen a_i verschiedener Kerne auf und die Streuung am Gesamtsystem von Kernen entspricht der Summe von unabhängigen Einzelstreuungen. Im allgemeinen läßt sich die elastische Streuung von Neutronen an einem beliebig zusammengesetzten System von Kernen zerlegen in einen kohärenten und einen inkohärenten Anteil. Der kohärente Anteil beschreibt die Streuung an einem Potential, das durch den Mittelwert der auftretenden Streulängen gegeben ist, unter Berücksichtung der relativen Phasen der an verschiedenen Kernen gestreuten Wellen. Er kann aufgrund einer räumlichen Struktur, die sich in dem Term $|\sum_{i} e^{i\vec{Q}\vec{R}_i}|^2$ niederschlägt, stark fluktuieren. Für $\vec{Q}\vec{R}_i = 2\pi n$ hat er Maxima, die z.B. im regelmäßigen Atomgitter zu den bekannten Bragg- Peaks in der gestreuten Intensität führen. Der inkohärente Anteil beschreibt die Streuung an einem Potential, das durch die mittlere quadratische Abweichung, d.h. die Fluktuation der einzelnen Streulängen von einem Mittelwert, verursacht wird. Die Isotopen- und Spinabhängigkeit der Streulänge a ist für viele Materialien sehr klein. Die Streuung am Wasserstoff z.B. ist jedoch aufgrund der Spinabhängigkeit stark inkohärent. Die Lösung der Schrödingergleichung mit diesem effektiven Fermipotential eines Systems von Kernen, das aus einer Summe von δ -Potentialen jedes einzelnen Kerns entspricht, besteht aus einer einfallenden und der Uberlagerung aller gestreuten Wellen. Die exakte Behandlung dieses Vielfachstreuproblems ist sehr schwierig und nur numerisch möglich. Unter der Annahme, daß inkohärente Streuung vernachlässigbar ist und die Welle nur sehr schwach kohärent gestreut wird, kann die Ausbreitung der Welle im Gesamtsystem von Kernen durch eine 'makroskopische' Wellengleichung

$$(\nabla^2 + k_o^2)\psi(\vec{r}) = 4\pi a_c n(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

in einem homogenen Medium mit dem Brechungsindex

$$n_B(\vec{r}) = \sqrt{1 - \frac{4\pi a_c n(\vec{r})}{k_o^2}}$$

beschrieben werden. Diese Wellengleichung läßt sich auch in der Form einer Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + k_o^2) \psi(\vec{r}) = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} a_c n(\vec{r}) \psi(\vec{r})$$

für ein Teilchen der Masse m in einem effektiven Potential

$$U_F(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} a_c n(\vec{r})$$

darstellen. Die Streulänge a_c wird als kohärente Streulänge bezeichnet. Sie wird experimentell bestimmt und ist für alle Elemente und deren Isotope tabelliert [47]. Unter der genannten Voraussetzung, daß der einzelne Streuprozeß die Gesamtwellenfunktion nicht stark ändert, läßt sich die starke Wechselwirkung eines Neutrons mit Materie als einem System von Kernen also durch ein effektives homogenes Potential $U_F(\vec{r})$ beschreiben, das dem über das Volumen gemittelten Fermipotential der einzelnen Kerne entspricht.

Ist die De-Broglie-Wellenlänge der einfallenden Teilchen wesentlich größer als die Reichweite der untersuchten Einzelpotentiale der Kerne, so ist die Bedingung der schwachen Einzelstreuung immer erfüllt. UCNs sehen also jedes Material als ein homogenes Medium, solange es keine Strukturen in der Größenordnung ihrer Wellenlänge hat. Die Transmission ultrakalter Neutronen durch eine homogene Folie der Dicke d, kann als quantenmechanische Transmission einer Welle durch einen effektiven Potentialberg der Form

$$V(r) = \begin{cases} 0 \iff r < 0\\ \frac{2\pi\hbar^2}{m} [a_c n(\vec{r})] \iff 0 < r < d\\ 0 \iff r > d \end{cases}$$

beschrieben werden. Mit Ausnahme von Titan und Wasserstoff ist dieses effektive Potential für alle Materialien positiv, wirkt also repulsiv, und hat einen Brechungsindex kleiner als eins, der dazu führt, daß Neutronen unter hinreichend kleinen Einfallswinkeln zu diesem Potential totalreflektiert werden. Nicht zu vernachlässigende inkohärente Streuung kann durch ein imaginäres effektives Potential beschrieben werden (Kap.3.3.2.).

Magnetische Streuung

Sind die Kernspins eines magnetischen Materials ausgerichtet, so führt dies zu einer Anderung sowohl der kohärenten als auch der inkohärenten Streuung von polarisierten Neutronen durch das Material. Diese Streuung wird als magnetische Streuung bezeichnet. Die Änderung der kohärenten Streulänge eines polarisierten gegenüber einem unpolarisierten Material wird als magnetische Streulänge a_m bezeichnet. Sie wird ebenfalls experimentell bestimmt und ist tabelliert [47]. Je nach der relativen Spinstellung von Neutron und Kernen sehen Neutronen das Material als einen unterschiedlich hohen effektiven Potentialberg

$$V_{\text{eff}} = V_F \pm V_m$$

Da sowohl das effektive Fermipotential V_F als auch das magnetische Potential V_m von der Größenordnung der kinetischen Energie ultrakalter Neutronen ist, wirken magnetische Materialien, z.B. in Form durchmagnetisierter Eisenfolien, als Polarisatoren für UCNs [42]. In unseren Streuexperimenten zur Anderson-Lokalisierung verwenden wir nur unmagnetische Materialien, um eine Änderung der Transmission von UCNs in Abhängigkeit eines äußeren Magnetfeldes aufgrund dieser magnetischen Streuung auszuschließen.

3.3.2 Inelastische Streuung und Absorption

Inelastische Streuung

Im allgemeinen befindet sich das streuende Material im thermischen Gleichgewicht mit seiner Umgebung, sodaß sich die Atome bewegen bzw. um ihre Ruhelage im gebundenen System schwingen. Im Gegensatz zur rein elastischen Wechselwirkung von Neutronen mit ruhenden Kernen wird bei der (inelastischen) Wechselwirkung mit einem derartigen System Energie übertragen. Ultrakalte Neutronen befinden sich in einem weit niedrigeren kinetischen Energiezustand als Materie bei Zimmertemperatur, sodaß inelastische Streuung immer zu einer Energiezunahme der UCNs führt. In einem regelmäßigen Festkörper schwingen alle Kerne in Phase. Streuen die Kerne kohärent, so kann die Streuung nur dann zu einem Energieübertrag führen, wenn das Neutron an ein Gitterphonon koppelt. Die Wahrscheinlichkeit für diesen kohärent inelastischen Streuprozess ist daher durch die Besetzung der Phononenzustände des Gitters und die Energie der Neutronen bestimmt. Aufgrund der niedrigen Energie ultrakalter Neutronen ist das Auftreten kohärent inelastischer Prozesse vernachlässigbar. Die Streuung von UCNs an einem System von überwiegend kohärent streuenden Kernen ist in guter Näherung rein elastisch, weshalb hier auf eine Darstellung der relativ komplizierten inelastischen Streutheorie von Neutronen verzichtet wird. Weit effektiver als die kohärent inelastische ist die inkohärent inelastische Streuung von UCNs an stark inkohärent streuenden Materialien, wie z.B. Wasserstoff, wobei ein ultrakaltes Neutron bereits bei einem einzigen Stoß thermische Energie erlangt. Dieser Prozeß wird auch als 'upscattering' bezeichnet.

Absorption

Unter Emission eines γ -Quants kann ein Neutron, während es sich in der Nähe des Wechselwirkungspotentialtopfs eines Kerns befindet, in einen gebundenen Zustand des Kerns übergehen; es wird absorbiert. Die Absorptionswahrscheinlichkeit eines Neutrons hängt neben seiner eigenen Energie stark von der Zusammensetzung des Kerns, d.h. vom Material ab.

	σ_a [barn]	σ_i/σ_c	a_c [fm]	$U_c [\mathrm{neV}]$	$\lambda_c \; [m nm]$	$v_c [m/s]$
Al	50.82	5.5×10^{-3}	3.449	53.8	123	3.21
SiO_2	37.7	3.7×10^{-4}	15.756	94.2	92,9	4.25
Graphit	0.77	1.8×10^{-3}	6.65	194.1	64.7	6.1
Diamant	0.77	1.8×10^{-3}	6.65	302.9	51.8	7.62
Al_2O_3	101.78	1.6×10^{-3}	24.31	149.3	74	5.35
MgO	13.86	1.0×10^{-2}	11.178	156.1	72.2	5.47
Ni	987.8	3.9×10^{-1}	10.3	246.9	57.4	6.88
Cu	831.6	7.3×10^{-2}	7.118	171.9	68.79	5.74
Be	1.67	2.3×10^{-4}	7.79	249.8	57.1	6.92
Ti	1339.8	1.9	-3.438	-51.6	imaginär	imaginär
Fomblin				100.1	90	4.38
Stahl	563.2	3.5×10^{-2}	9.45	200.5	65.83	6.2

Tabelle 3.1: Wirkungsquerschnitte und kritische Größen einiger Elemente

Die Wirkungsquerschnitt für inkohärente Streuung und Absorption sind ebenfalls experimentell zu bestimmende Größen und finden sich in Tabellen [47]. In Tabelle 3.3.2 sind die entsprechenden Werte einiger für uns interessanter Substanzen zusammengestellt. Der Absorptionsquerschnitt σ_a ist für eine Neutronengeschwindigkeit von 10 m/s angegeben. σ_i/σ_c gibt das Verhältnis von inkohärentem zu kohärentem Streuquerschnitt an. a_c ist die kohärente Streulänge, U_c das effektive Fermipotential bei einer Dichte unter Normalbedingungen, λ_c und \mathbf{v}_c die entsprechende kritische Wellenlänge bzw. Geschwindigkeit für Neutronen.

Das imaginäre Kernpotential

Sowohl inkohärente Streuung als auch Absorption von ultrakalten Neutronen durch Materie kann als Wechselwirkung mit einem imaginären effektiven Kernpotential iW beschrieben werden. Das allgemeine Kernpotential der zeitabhängigen Schrödinger - Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi$$

hat damit die Form V = U-iW. Ist das Potential rein reell, findet also weder Absorption noch inkohärente Streuung statt, so folgt aus der Schrödinger-Gleichung die Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte ρ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \vec{j} = 0.$$

Ein nichtverschwindender Imaginärteil des Potential resultiert in einem Verlust der Wahrscheinlichkeitsdichte, d.h. die Wahrscheinlichkeitsdichte nimmt exponentiell mit der Aufenthaltszeit tdes Teilchens im Wirkungsbereich des imaginären Potentials ab

$$\rho(t) = \rho_o e^{-2Wt/\hbar}.$$

Mit $W = \frac{\hbar}{2} \sum_{i} N_i \sigma^i_{abs+inc} v_i$ entspricht dies dem empirischen Ausdruck für die Transmission einer absorbierenden Substanz $T = \frac{I}{I_o} e^{(\sum_{i} N_i \sigma^i_{abs+inc} d)}$. Mit dem Imaginärteil der effektiven Streulänge

$$\Im(a) = \left(\frac{\sigma_{abs+inc}k}{4\pi}\right)$$

der inkohärente Streuung und Absorption beschreibt, lautet das effektive Kernpotential

$$U = V - iW = \frac{2\pi\hbar^2}{m} N(\Re(a) - i\Im(a)),$$

wobei der Realteil der effektiven Streulänge $\Re(a)$ der kohärenten Streulänge a_c entspricht.

3.4 Anderson-Lokalisierung von ultrakalten Neutronen

3.4.1 Die Proben

Damit Anderson-Lokalisierung einer Welle in einem ungeordneten, stark streuenden Medium auftreten kann, muß die Phasenkohärenz der Welle trotz Vielfachstreuung erhalten bleiben, d.h. das Medium muß stark elastisch kohärent streuen, darf jedoch nicht inelastisch oder inkohärent streuen oder stark absorbieren. Kohlenstoff in Form handelsüblicher Pulver erfüllt diese Bedingungen sehr gut. Aufgrund seines hohen effektiven Fermipotentials streut er ultrakalte Neutronen stark kohärent elastisch, während inkohärente, inelastische Streuung und Absorption vernachlässigbar sind. Auch einige Oxide wie z.B. Al₂O₃, SiO₂ oder MgO könnten trotz etwas niedrigerer Fermipotentiale möglicherweise zu Anderson-Lokalisierung von UCNs führen. Die Transportweglänge l_{tr} von UCNs in einem Pulver entspricht nach einer ersten Abschätzung unter der Annahme reiner s-Wellen-Streuung dem mittleren Abstand zweier Streuzentren, also mindestens dem Durchmesser 2R der Streuzentren selbst. Das Joffe-Regel-Kriterium könnte somit in einem Pulver erfüllt werden, dessen Korngröße von der Größenordnung der Wellenlänge ultrakalter Neutronen, d.h. $R \sim 5 - 50$ nm, ist. Die Berechnung der Transportweglänge $l_{tr}(\lambda)$ ultrakalter Neutronen in diesen Medien unter Berücksichtigung höherer Drehimpulse und kohärenter Effekte aufgrund von schwacher Vielfachstreuung wird in Kap.3.4.2 ausführlich behandelt.

Kohlenstoff

Kohlenstoff ist in Form von etwa hundert verschiedenen Industrierußen und fast ebenso vielen verschiedenen Diamantpulvern mit Korngrößen im Nanometerbereich kommerziell erhältlich. Ferner läßt er sich in Form von Fullerenen und Fulleriten in vielfältigen Strukturen und Größen im Labor herstellen.

Ruß:

Der angebotenen Produktvielfalt an Industrierußen liegt eine große und sehr differenzierte Nachfrage aus den unterschiedlichsten Anwendungsbereichen zugrunde [14]. Ruß wird zur Verstärkung von Kautschuk in der Herstellung von Reifen und anderen technischen Gummiartikeln, zur Pigmentierung von Lacken, Druckfarben und Papier und in der Elektroindustrie zur Herstellung von Leiterfasern, Elektroden und Batterien eingesetzt. Jede dieser Anwendungen stellt spezifische Ansprüche an die Eigenschaften des Rußes wie Reinheit, Korngröße und -form, Oberflächenbeschaffenheit usw., weshalb Industrieruße auch grob in Gummi-, Pigment- und Leitfähigkeitsruße eingeteilt werden, die sich schon in ihren Herstellungsprozessen unterscheiden. Bei Verbrennungen als Nebenprodukt anfallende Ruße können diesen Ansprüchen nicht genügen, weshalb in allen Herstellungsverfahren von Industrierußen Kohlenwasserstoffe, z.B. Erdöl, Steinkohleteerdestillat oder Erdgas, thermisch oder thermischoxidativ unter kontrollierten Bedingungen in die Elemente Kohlenstoff und Wasserstoff gespalten werden. Je nach Herstellungsverfahren werden verschiedene Rußtypen unterschieden. Abb.3.24 zeigt Verteilungskurven der Durchmesser von Primärteilchen der verschiedenen Rußtypen.

Der sogenannte Gasruß entsteht mit Primärteilchengrößen von 10-30 nm. Da die Gasrußerzeugung an Luft stattfindet, sind die einzelnen Körner mit sauerstoffhaltigen Oberflächengruppen besetzt. Aufgrund der Bedeutung dieser Ruße mit sauren Oberflächengruppen als Pigmentruß für die Lack- und Druckfarbenindustrie wird die Mehrzahl der Gasruße durch weitere Oxidation mit NO₂, HNO₃ oder O₃ nachbehandelt und fast ausschließlich als Pigmentruß verwendet.

Das Primärteilchenspektrum von sogenanntem *Flammruß* reicht von 60 bis über 200 nm. Flammruß wird in zwei Typen, einem Gummiruß und einem Pigmentruß hergestellt und angeboten.



Abbildung 3.21: Korngrößenverteilung verschiedener Rußtypen [14]

Acetylenruß wird in einem thermischen Spaltverfahren erzeugt. Die entstehenden Teilchen haben Größen von 30 bis 40 nm, wobei ihre Gestalt im Gegensatz zu der von Gas- und Flammruß merklich von der Kugelgestalt abweicht. Acetylenruße sind sehr rein und werden hauptsächlich als Leitfähigkeitsruße eingesetzt.

Die in allen Verfahren durch mehrfaches Abkühlen und Filtern aus Gasen abgeschiedenen Ruße bilden relativ feste sphärisch dreidimensional verzweigte Aggregate, die sogenannten 'Rußmoleküle'. An der Oberfläche dieser Moleküle nicht nachbehandelten Rußes befinden sich Rückstände aus den Rohstoffen bzw. Beiprodukte der Herstellung, wie z.B. einige Kohlenwasserstoffe und sauerstoffhaltige Gruppen, aber auch Stickstoff, Schwefel und in sehr geringen Mengen einige Metalle.



Abbildung 3.22: a. Elektronen- bzw. b. Rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen von Flammruß [14]

Aufgrund ihrer hohen Adsorptionsfähigkeit können Ruße beim Lagern Feuchtigkeit aufnehmen. Insbesondere oxidativ nachbehandelte Ruße enthalten daher einen höheren Feuchtigkeitsgehalt als in der Elementanalyse angegeben. Zur leichteren Handhabbarkeit für den Verbraucher werden Rußmoleküle in verschiedenen Verfahren in grobkörnigere Aggregate überführt. Gummiruße werden in einem Naßgranulier-Verfahren mit Wasser geperlt und anschließend getrocknet. Pigmentruße werden überwiegend nur verdichtet und als Pulverruße abgepackt oder in einem Trockengranulier-Verfahren in Perlform gebracht. Das Granulat wird vom Hersteller durch die Angabe einer Perlgrößenverteilung und einer Perlhärte charakterisiert.

Diese relativ detaillierte Darstellung der Rußproduktion soll verdeutlichen, daß wir in unserer Streuprobe unter Umständen nicht allein mit Streuzentren der angegebenen Korngröße rechnen dürfen, sondern Aggregatbildung, Vorhandensein von Perlen und Verklumpen des Rußes aufgrund von Feuchtigkeit berücksichtigen müssen. Ferner können wasserstoffhaltige Rückstände an den Oberflächen der Körner UCNs inkohärent inelastisch streuen bzw. absorbieren und damit die Phasenkohärenz der Neutronen in der Probe zerstören. Für unsere Streuexperimente wählten wir einige Flamm- und Gasruße verschiedener Korngrößen von der Firma Degussa. Acetylenruß wurde aufgrund des relativ hohen Gehalts an Wasserstoff nicht verwendet.

Diamant:

Diamantpulver sind ebenfalls in vielen Varianten, die sich in Herstellung, Korngröße und Gestalt der Körner unterscheiden, erhältlich [13]. Hier wird primär zwischen natürlichem und synthetischem Diamant unterschieden. Das aus Naturdiamant gewonnene Pulver enthält im Gegensatz zum synthetisch hergestellten keinerlei aus gebrauchten Diamantwerkzeugen zurückgewonnenes Material und ist daher besonders rein. Diamantpulver wird zum Schleifen und Polieren verwendet. Je nach Anforderung der speziellen Anwendung werden Pulver mit schafkantiger oder eher runder Gestalt, rein oder mit Metallumhüllung, in verschiedenen Korngrößen hergestellt. Für unsere Streuexperimente wählten wir aufgrund der gewünschten Reinheit Naturdiamantpulver verschiedener Korngrößen von der Firma DeBeers.





Abbildung 3.23: a. Elektronen- bzw. b. Rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen von Diamantpulver [13]

Fullerene und Fullerite:

Als Fullerene bezeichnet man große, ausschließlich aus Kohlenstoff bestehende Moleküle mit in sich geschlossener polyedrischer Struktur [30]. Das kleinste stabile Fulleren, das von der Firma Höchst in größeren Mengen hergestellt werden kann, ist C_{60} , bestehend aus 60 Kohlenstoffatomen. Das Molekül hat die Struktur eines Fußballs. Einschließlich der Elektronenhülle hat es einen Durchmesser von 1nm. Das für die Streuung von Neutronen relevante Gerüst der Atomkerne hat einen Durchmesser von 7 Å. Das nächst größere stabile Fulleren ist das C_{70} , dessen Gestalt eher der des amerikanischen Footballs gleicht.

Mit größerer, nahezu beliebiger Anzahl von Kohlenstoffatomen schließen sich weitere Fullerenstrukturen wie die sogenannten Nano-Tubes und Nano-Onions an [31]. Nano-Tubes sind Röhren aus Kohlenstoffatomen mit Durchmessern von ca 1nm und Längen bis zu 1 μ m. Mehrere geschlossene Strukturen wie Zwiebelschalen ineinander geschachtelt bezeichnet man als Nano-Onions. Nano-Onions und Nano-Tubes entstehen in geringen Mengen als Beiprodukt bei der Herstellung von C₆₀ und C₇₀ durch Widerstandsheizung von Graphit in konventionellen Kohlenstoff-Aufdampfanlagen.

Die sogenannten Fullerite sind aus C_{60} und C_{70} bestehende Kristallite [32]. Sie wachsen in verdünnter Benzollösung, wobei hier auch Lösungsmittel in die Kristallite eingebaut werden. Lösungsmittelfreie Kristallite lassen sich durch Sublimation des Materials aus der Dampfphase züchten. Fullerite können in nahezu beliebiger Größe bis zu 0.5 mm gezüchtet werden.



Abbildung 3.24: Fulleren C₆₀ [30]



Abbildung 3.25: Fullerite in verschiedenen Kristallitgrößen [32]

Durch Verdampfung von Fullerenen können dünne Schichten erzeugt werden, die je nach Verdampfungstemperatur, Druck einer eventuellen Edelgasatmosphäre, Substratmaterial und -temperatur polykristalline Strukturen verschiedener Größen aufweisen [21]. Die Erzeugung und Untersuchung von Fullerenen, Fulleriten und Fullerenschichten ist seit den achtziger Jahren zu einem eigenständigen sehr umfangreichen und komplizierten Forschungsgebiet geworden, wobei bisher nur C₆₀ kommerziell erhältlich ist. Prinzipiell bieten Fullerene und Fullerite jedoch weitere Möglichkeiten Streuzentren definierter Größe im Nanometerbereich aus sehr reinem Kohlenstoff experimentell zu realisieren.

\mathbf{Oxide}

Bei der Verbrennung von Magnesium in einer Bunsenbrennerflamme bei einer Temperatur von ca. $1500^{\circ}C$ entsteht MgO, welches sich inform von quaderförmigen Kristalliten der Größe 20-150 nm auf jedem Substrat abscheidet [26]. Die Kristallite bilden eine sehr gleichmäßige polykristalline Schicht, die sichtbares Licht stark diffus streut, weshalb auf diese Weise erzeugte Schichten auch als diffuse Reflexionsstandards verwendet werden. SiO₂ mit einer mittleren Korngröße von 10 nm und Al₂O₃ mit 50 nm erhielten wir von der Firma Mant. An der Oberfläche von Oxiden können sich unter Umständen Hydroxidschichten ausbilden, sodaß auch hier mit einem Anteil von stark inelastisch streuendem Wasserstoff zu rechnen ist.

3.4.2 Elastische Streuung ultrakalter Neutronen in der Probe

Elastische Streuung am einzelnen Korn

Die Wechselwirkung eines ultrakalten Neutrons mit Materie als Folge elastischer Streuung an den Kernen kann durch die Wechselwirkung mit einem effektiven, über alle Kerne mittelnden, Fermipotential eines homogenen Mediums beschrieben werden (siehe Kap 2.3). Jedes einzelne Korn eines Pulvers wird somit durch ein Potential

$$U(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} [a \cdot n(\vec{r})]$$

mit der Streulänge a und der Teilchenzahldichte $n(\vec{r})$ repräsentiert. Elektronenmikroskopische Aufnahmen der Streuproben (siehe Kap.3.4.1) zeigen, daß die einzelnen Körner beliebig unregelmäßige Gestalt haben. Im Mittel über hinreichend viele Körner beliebiger Gestalt läßt sich die Streuung an einem Korn jedoch als Streuung an einer Kugel, d.h. einem sphärischen Potentialberg, dessen Durchmesser der mittleren Korngröße entspricht, beschreiben.

Unter der Annahme eines aus dem Unendlichen in den räumlich eng begrenzten Wechselwirkungsbereich des Potentials kommenden ultrakalten Neutrons kann die elastische Streuung an einem einzelnen Korn der Probe wie die Streuung eines thermischen Neutrons an einem einzelnen Kern mithilfe der Partialwellenzerlegung beschrieben werden. Danach gilt für den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k,\theta)|^2$$

mit der Streuamplitude

$$f(k,\theta) = \frac{1}{k} \sum_{i} (2l+1)e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos(\theta),$$

wobei die Streuphasen δ_l durch das Potential und die Randbedingungen an die Wellenfunktion mit dem Ansatz

$$\psi(\vec{r}) \sim \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) P_l(\cos \theta)$$

bestimmt sind. Anders als bei der Streuung von UCNs an einzelnen Kernen müssen jetzt auch höhere Drehimpulse (l > 0) berücksichtigt werden, da die Bedingung für reine s-Wellenstreuung eines Teilchens mit der Wellenlänge λ am Korn der Größe 2R, nämlich $\lambda \gg R$, nicht mehr erfüllt ist. Die Lösung des Streuproblems für ein ultrakaltes Neutron an einem Korn seiner Wellenlänge vergleichbarer Größe 2R besteht daher in der vollständigen Lösung der radialen Schrödingergleichung für die Wechselwirkung einer Welle mit einem quantenmechanischen dreidimensional sphärischen Potentialberg der Form

$$V(r) = \begin{cases} \frac{2\pi\hbar^2}{m} [an(\vec{r})] = V_o \iff r < R\\ 0 \iff r > R \end{cases}$$

deren allgemeine Lösung eine Linearkombination von sphärischen Bessel- und Neumannfunktionen j_l und n_l ist.

$$j_l(z) = (-z)^l \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^l \frac{\sin z}{z}$$
$$n_l(z) = (-z)^l \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^l \frac{\cos z}{z}$$

Mit der Forderung, daß $R_l(r)$ im Nullpunkt regulär bleibt, und den üblichen Stetigkeitsbedingungen an die Wellenfunktion und ihre Ableitung an der Stelle r = R ergibt sich für die Streuphasen δ_l als Funktion der Neutronenwellenzahl k_i innerhalb des Potentialbereichs bzw. k_0 außerhalb, und der KorngrößeR

$$\tan \delta_l = \frac{k_1 j_l'(k_1 R) j_l(k_0 R) - k_0 j_l'(k_0 R) j_l(k_1 R)}{k_1 n_l'(k_1 R) j_l(k_0 R) - k_0 j_l'(k_0 R) n_l(k_1 R)}$$

Dieser Ausdruck sieht kompliziert aus, läßt sich jedoch numerisch auswerten. Da die Wellenzahl für Neutronenenergien $E < V_R$ imaginär wird, müssen die Fälle $E > V_R$ und $E < V_R$ unterschieden werden. Die Lösung $R_l(r)$ enthält für $E < V_R$ Besselfunktionen imaginären Arguments $j_l(i\kappa_1 r)$, die sich durch die reellen Funktionen $I_l(\kappa_1 r) = i^{-l} j_l(i\kappa_1 r)$ ersetzen lassen. Mithilfe dieser Streuphasen δ_l lassen sich die Streuamplitude $f(\theta)$ und der differentielle Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ für die Streuung eines ultrakalten Neutrons an einem einzelnen Korn der Probe berechnen. Integration des differentiellen Wirkungsquerschnittes über den gesamten Raumwinkel ergibt den totalen Wirkungsquerschnitt für elastische Streuung

$$\sigma_{el} = \int_{4\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

Mit der mittleren Streuzentrendichte n läßt sich die *mittlere freie Weglänge* für elastische Streuung, d.h. die Weglänge des Neutrons zwischen zwei elastischen Streuprozessen, berechnen:

$$l_{el} = \frac{1}{n\sigma_{el}}$$

Der makroskopische Wirkungsquerschnitt der klassischen Diffusionstheorie für elastische Streuung lautet

$$\Sigma_{el} = \int_0^{\pi} \sigma_{el}(\theta) (1 - \cos \theta) d\theta \quad \text{mit} \quad 2\pi \sin \vartheta \cdot \frac{d\sigma_{el}}{d\Omega},$$

woraus sich die Transportweglänge des Neutrons in einer Probe mittlerer Streuzentrendichte n ergibt:



Abbildung 3.26: Makroskopischer Streuquerschnitt von Diamantpulver der Korngröße R=5nm



Abbildung 3.27: Makroskopischer Streuquerschnitt von Diamantpulver der Korngröße R=5nm

In der Näherung voneinander unabhängiger Streuzentren hängt somit der makroskopische Wirkungsquerschnitt und auch die Transportweglänge l_{tr} eines Neutrons in der Probe vom Kornradius R, der Höhe des Streupotentials V_o und der Energie des Neutrons E ab. Da Partialwellen höherer Drehimpulse vorzugsweise in Vorwärtsrichtung gestreut werden, beträgt die Transportweglänge von UCNs in der Probe einige Vielfache der elastischen freien Weglänge. Die Abbildungen 3.26 und 3.27 zeigen Ergebnisse dieser Rechnungen am Beispiel der Streuung von UCNs in Diamantpulvern verschiedener Korngrößen. Wie erwartet beeinflussen Partialwellen höherer Ordnung den makroskopischen Wirkungsquerschnitt für elastische Streuung vor allem dann, wenn die betrachtete Korngröße im Bereich der UCN-Wellenlänge liegt. Partialwellen höherer Drehimpulse als die angegebenen tragen im interessierenden Wellenlängenbereich nicht relevant zum Wirkungsquerschnitt bei, sodaß sie bei der folgenden Berechung der freien Weglängen und der Transportweglängen nicht berücksichtigt wurden. Zur Berechnung der Transportweglängen in Abb.3.28 und Abb.3.29 wurde angenommen, daß die Packungsdichte der Streuzentren in einem Pulver 50% der Packungsdichte hexagonal dichtester Kugelpackung entspricht. Als Packungsdichte p bezeichnet man das Verhältnis des von den Körnern eingenommenen Volumens zum Gesamtvolumen der Probe. Befinden sich in einem Würfel mit Kantenlänge a N Streuzentren mit dem jeweiligen Eigenvolumen V_K , so ist die Packungsdichte

$$p := \frac{N \cdot V_K}{a^3}.$$

Die Abbildungen enthalten neben den so bestimmten Transportweglängen weiterhin die dem Joffe-Regel-Kriterium entsprechende Transportweglänge, bei der der Phasenübergang zur starken Lokalisierung auftreten sollte.



Abbildung 3.28: Transportweglänge von UCNs in Diamantpulvern verschiedener Korngrößen (Packungsdichtep=0.37)



Abbildung 3.29: Transportweglänge von UCNs in Pulvern verschiedener Materialien (Packungsdichtep=0.37)

Kinematische Streutheorie der schwachen Vielfachstreuung

Die Annahme voneinander unabhängiger Streuzentren, die zu den im vorigen Kapitel berechneten Transportweglängen führt, gilt nur im klassischen Grenzfall sehr kurzer Neutronenwellenlänge. Nur dann wird das Neutron wie eine Billardkugel gemäß dem klassischen Irrflugmodell (random walk) zwischen den Körnern hin-und hergestreut. Dieser klassische Grenzfall berücksichtigt jedoch keinerlei Interferenzeffekte der im Medium vielfachgestreuten Welle und ist darum nicht geeignet ein möglicherweise zu Andersonlokalisierung der Welle führendes System zu beschreiben. Im entgegengesetzten Grenzfall im Vergleich zur Korngröße sehr langer Wellenlänge 'sieht' ein ultrakaltes Neutron ein über alle Streuzentren gemitteltes Potential ebenso wie es bereits über alle einzelnen Kernpotentiale mittelt.

Sind jedoch Wellenlänge des Neutrons und Korngröße von vergleichbarer Größe, so spielen quantenmechanische Interferenzen zwischen den gestreuten Teilwellen eine entscheidende Rolle, was ja auch die Grundvoraussetzung für das Auftreten von Andersonlokalisierung ist. Im geordneten Kristall treten derartige Interferenzeffekte in Form der bekannten Bragg-Reflexe auf. Diese und auch entsprechende in ungeordneten Festkörpern und Flüssigkeiten auftretende Effekte lassen sich mithilfe der kinematischen Streutheorie schwacher Vielfachstreuung beschreiben [41]. Eine einlaufende ebene Welle wird an vielen Streuzentren der Probe in Kugelwellen mit unterschiedlicher Amplitude und Phase gestreut, die miteinander interferieren. Die auf jedes Streuzentrum einlaufende Welle wird dabei als ebene Welle angenommen, sodaß dieses Modell nur für schwache Vielfachstreuung



Abbildung 3.30: Zweifachstreuung einer Welle

gültig sein kann. Bei starker Vielfachstreuung wird die Welle durch jeden Streuprozeß so stark geändert, daß die Annahme der auf jedes Streuzentrum treffenden gleichen ebenen Welle nicht mehr zutrifft und das Problem nur noch numerisch gelöst werden kann. Somit darf auch das Modell der kinematischen Streutheorie nur als Annäherung an den Fall der starken Vielfachstreuung verstanden werden.

Die Grundannahmen der kinematischen Streutheorie sind zunächst ähnlich denen der Theorie der Einzelstreuung: Ein einlaufendes Teilchen, repräsentiert durch ein Wellenpaket, werde an einem kurzreichweitigen Streuzentrum gestreut und das gestreute Teilchen nachgewiesen. Der Abstand zwischen Quelle des Teilchens und Probe und der Abstand zwischen Probe und Beobachter seien hinreichend groß, sodaß sowohl der einlaufende divergente Teilchenstrahl am Ort der Probe als auch die auslaufende Kugelwelle am Ort des Beobachters als ebene Welle angesehen werden können.

Die einlaufende ebene Welle

$$\psi_i = A e^{i(\vec{k_o} \vec{R} - i\omega_o t)}.$$

die an einem Korn am Ort \vec{R} der Probe elastisch gestreut wird, erzeugt eine auslaufende Kugelwelle

$$\psi_s = \frac{A}{|\vec{R}'|} f_K(k,\theta) e^{i(\vec{k}\,\vec{R}' - i\omega\,t)}$$

mit $\omega = \omega_o$ am Ort $\vec{R'}$ des Beobachters. $f_K(k,\theta)$ ist die Streuamplitude des einzelnen Korns, wie sie in Kap. 3.4.2 berechnet wurde, wobei θ der Winkel zwischen Einfalls- und Ausfallsrichtung der Welle ist und als Streuwinkel bezeichnet wird.

Wird die Welle an zwei Körnern gestreut, so emittiert jedes Korn eine Kugelwelle, und die den Beobachter im Abstand R' erreichende Wellenfunktion ist eine Überlagerung zweier Kugelwellen

$$\psi_s = f_K(k,\theta) \frac{A}{|\vec{R'}|} \left[e^{i\vec{k}\vec{R'}} + e^{i(\vec{k}\vec{R'}+\delta)} \right] e^{-i\omega_o t}$$

mit der Phasendifferenz $\delta = \vec{r}(\vec{k} - \vec{k_o}) = \vec{r}\vec{s}$ und dem Streuvektor $\vec{s} = \vec{k} - \vec{k_o}$ (siehe Abb.3.30). Bezüglich eines beliebigen Aufpunktes außerhalb der beiden Körner haben beide Kugelwellen eine Phase

$$\psi_s = f_K(k,\theta) \frac{A}{|\vec{R'}|} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R'}} [e^{i\vec{s}\cdot\vec{r_1}} + e^{i\vec{s}\cdot\vec{r_2}}] e^{-i\omega_o t}.$$

Entsprechend erzeugt ein Ensemble von Körnern an den Orten r_n im Abstand R' die Wellenfunktion

$$\psi_s = f_K(k,\theta) \frac{A}{|\vec{R'}|} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R'}} \sum_n e^{i\vec{s}\cdot\vec{r_n}} e^{-i\omega_o t}$$

d.h. die Streuamplitude eines Ensembles von Streuzentren entspricht der Summe über die Streuamplituden $f_K(k, \theta)$ aller einzelnen Körner unter Berücksichtigung der Phasen der gestreuten Wellen

$$f_{ges}(k,\theta) = f_K(k,\theta) \sum_n e^{i\vec{s}\vec{r_n}} = f_K(k,\theta) f_{struk}.$$

Der Faktor f_{struk} enthält die Phaseninformation der im Ensemble an verschiedenen Zentren gestreuten Teilwellen. Die in eine bestimmte Richtung $\theta = \theta(\vec{R}, \vec{R'})$ gestreute Intensität ergibt sich damit zu

$$I(\theta) \sim |f_{ges}(k,\theta)|^2 = \left| f_K(k,\theta) \sum_n e^{i\vec{s}\cdot\vec{r_n}} \right|^2 = |f_K(k,\theta)|^2 \cdot \left| \sum_{m,n} e^{i\vec{s}\cdot(\vec{r_m}-\vec{r}n)} \right|.$$

Wenn die Welle bei den einzelnen Streuprozessen ihre Phaseninformation beibehält, d.h. wenn die Streuzentren sich weder bewegen noch inkohärent streuen, besitzt die Streuung der Welle am Gesamtsystems somit kohärente Eigenschaften. Geht die Phaseninformation bei den einzelnen Streuprozessen verloren, so entspricht die gesamte gestreute Intensität wie in der klassischen Diffusionstheorie, die mögliche Interferenzen von vorneherein vernachlässigt, der inkohärenten Summe der an den einzelnen Körnern gestreuten Intensitäten

$$I_{inc}(\theta) \sim |f_{ges}(k,\theta)|^2 = N|f_K(k,\theta)|^2$$

Die Kohärenz der Streuung am Gesamtsystem wird also durch den die Phaseninformation enthaltenen Term

$$S_{lq} = \sum_{m,n} e^{i\vec{s}(\vec{r}_m - \vec{r}n)}$$

beschrieben, der deshalb auch als Strukturfaktor des Systems bezeichnet wird. Der Strukturfaktor charakterisiert die von Gesamtsystem gestreute Intensität und beinhaltet damit eine Art Mittelung über die Beiträge der einzelnen Streuzentren unter Berücksichtigung der erhaltenen Phaseninformation. Die Position der einzelnen Streuzentren der speziellen Probe ist irrelevant. S_{lq} wird durch die für ein Ensemble charakteristische Nah- bzw. Fernordnung bestimmt und beschreibt damit eine Vielzahl von gleichartigen Proben. Somit bleibt der Strukturfaktor S_{lq} im Gegensatz zu f_{struk} auch dann erhalten, wenn sich die einzelnen Streuzentren beispielsweise in einer Flüssigkeit bewegen, vorausgesetzt diese Bewegung ist hinreichend langsam, sodaß keine inelastische Streuung auftritt, die die Phasenkohärenz der Welle zerstört. Die Doppelsumme $\sum_{m,n} e^{i\vec{s}(\vec{r}_m - \vec{r}n)}$ kann zunächst in eine Teilsumme über m = n, die die Autokorrelationen der einzelnen Streuzentren beschreibt und die gesamte Anzahl N der Körner ergibt und eine Teilsumme über $m \neq n$, die die Verteilung der Streuzentren im Ensemble widerspiegelt, aufgespalten werden:

$$S_{lq} = N + \sum_{m \neq n} e^{i\vec{s}(\vec{r}_m - \vec{r}_n)} \,.$$

Desweiteren kann die Summe über alle Streuzentren in ein Integral über deren Anzahldichte n(r)überführt werden:

$$f_{struk}(\vec{s}) = \sum_{n} e^{i\vec{s}\cdot\vec{r_n}} \longrightarrow \int n(\vec{r}) e^{i\vec{s}\cdot\vec{r}} d^3r \,.$$

Der die Verteilung der Körner wiedergebende Anteil des Strukturfaktors S_{lq} ähnelt dann einer dreidimensionalen Fouriertransformierten der Dichtefluktuation im System

$$S_{lq}(\vec{s}) = N + \sum_{m \neq n} e^{i\vec{s}(\vec{r}_m - \vec{r}_n)} \longrightarrow N + \int (n(\vec{r}) - n_o) e^{i\vec{s}\vec{r}} d^3r \equiv N + \int (g(\vec{r}) - 1) e^{i\vec{s}\vec{r}} d^3r.$$

Die Paarkorrelationsfunktion

$$g(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{n(\vec{r})}{n_o} \iff \vec{r} \neq \vec{0} \\ 0 \iff \vec{r} = \vec{0} \end{cases}$$

ist ein Maß für das Verhältnis von lokaler zu über das Ensemble gemittelter Teilchenzahldichte, welche die Autokorrelation der Streuzentren nicht enthält. Normiert auf die Anzahl N von Streuzentren in der Probe lautet der Strukturfaktor

$$\hat{S}_{lq}(s) = S_{lq}(s)/N = 1 + n_o \int (g(\vec{r}) - 1)e^{i\vec{s}\cdot\vec{r}}d^3r$$
.

Dieses Integral läßt sich unter den in unseren Proben gegebenen Bedingungen vereinfachen. Unter der Annahme rein elastischer Streuung (siehe Abb.3.31) ändert sich nur die Richtung des Wellenvektors \vec{k} , nicht aber dessen Betrag, sodaß gilt

$$s = 2k\sin\frac{\theta}{2}$$

Ferner läßt sich ein völlig ungeordnetes System durch eine spärisch symmetrische Anzahldichteverteilung der Streuzentren repräsentieren. Damit läßt sich das dreidimensionale Integral auf ein eindimensionales Integral der Form

$$f_{struk}(k,\theta) = \int_0^\infty 4\pi r^2 n(r) \frac{\sin sr}{sr} dr$$

reduzieren, und der Strukturfaktor erhält die relativ einfache Form

Ś

$$\hat{S}_{lq}(k,\theta) = 1 + n_o \int_0^\infty 4\pi r^2 (g(r) - 1) \frac{\sin sr}{sr} dr$$

Mit dem durch diesen Strukturfaktor modifizierten differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{el,mod}} = |f_{ges}(k,\theta)|^2 = |f_K(k,\theta)|^2 S_{lq}(k,\theta)$$

bzw. dem entsprechenden makroskopischen Wirkungsquerschnitt

$$\Sigma_{el,mod} = \int_0^\pi |f_K(k,\theta)|^2 |S_{lq}(\theta)| \sin(\theta) (1 - \cos\theta) d\theta$$

ergibt sich für die Transportweglänge

$$l_{tr,mod} = \frac{1}{\overline{n} \cdot \Sigma_{el,mod}}$$

 \overline{n} bezeichnet die mittlere Anzahldichte von Streuzentren in der Probe. Diese modifizierte Transportweglänge enthält neben der Energie des Neutrons und dem streuenden Einzelpotential jetzt auch die räumliche Verteilung der Streuzentren und damit die 'Struktur' des Mediums, die sich in einer Nah- bzw. Fernordnung äußert. D.h. mithilfe des Strukturfaktors lassen sich kohärente Streueffekte der gesamten Probe aufgrund von Interferenzen der an den einzelnen Zentren gestreuten Welle zumindest in der Näherung schwacher Vielfachstreuung beschreiben.



Abbildung 3.31: Der Streuvektor s der elastischen Streuung

Die Strukturfunktion ungeordneter Systeme

Die räumliche Verteilung der Streuzentren n(r) und damit die Struktur der Probe geht über die Paarkorrelationsfunktion

$$g(r) = \frac{n(r)}{n_0}$$

in die Strukturfunktion

$$\hat{S}_{lq} = 1 + n_o \int_0^\infty 4\pi r^2 (g(r) - 1) \frac{\sin sr}{sr} dr$$

und damit in den differentiellen Wirkungsquerschnitt für elastische Streuung von Neutronen in der gesamten Probe ein. In einem unendlich ausgedehnten regelmäßigen Kristallgitter herscht perfekte Fernordnung, sodaß sowohl die Paarkorrelationsfunktion als die entsprechende Strukturfunktion durch ein Gitter von δ -Funktionen gegeben ist. Die Strukturfunktion beschreibt direkt die bekannten Bragg-Peaks der gestreuten Intensität im Impulsraum. Führt man in einem derartigen regelmäßigen Gitter durch Verschieben einzelner Streuzentren zunehmende Unordnung ein, so äußert sich dies in einer Verbreiterung der δ -Peaks in der zugehörigen Paarkorrelationsfunktion. Mit zunehmendem Abstand r vom Aufatom wächst diese Verbreiterung bis die Paarkorrelationsfunktion bei großen Abständen der eines homogenen Mediums mittlerer Teilchenzahldichte n_o entspricht. In einem solchen Medium herscht nur noch eine Nahordnung. Der Grad der Unordnung im Medium spiegelt sich qualtitativ in der Breite dieser Maxima in der Paarkorrelationsfunktion und damit in der Reichweite auftretender Nahordnung wieder. Mit dem sogenannten Unordnungsparameter α lautet ein Ansatz für die Paarkorrelationsfunktion eines ungeordneten dreidimensionalen Systems

$$g_{\alpha}(\vec{r}) = \sum_{i \neq 0} \frac{1}{\pi^{3/2}} \frac{1}{\alpha^3 r^3} e^{-\frac{(\vec{r} - \vec{R}_i)^2}{\alpha^2 r^2}}$$

der das geordnete Gitter mit $\alpha = 0$ und Streuzentren an den Orten $\vec{R_l}$ enthält und zu einer Strukturfunktion der in Abb 3.32 dargestellten Form in Abhängigkeit von der Unordnung führt. Ein stark ungeordnetes System läßt sich nicht mehr mit diesem Modell eines schwach ungeordneten Kristallgitters beschreiben. Hier ist die Reichweite eventuell auftretender Nahordnung allein durch die Packungsdichte p der Streuzentren bestimmt. Mit wachsender Packungsdichte nimmt die Reichweite der Nahordnung zu, denn der Grenzfall der dichtesten Kugelpackung mit p = 0.74 kann nur in einem ideal geordneten System unendlicher Fernordnung mit entweder fcc- oder hcp- Struktur realisiert werden. Da eine analytische Beschreibung der Unordnung als Funktion der Packungsdichte praktisch unmöglich erscheint, erzeugen wir mithilfe von Monte-Carlo-Simulationen ungeordnete Medien verschiedener Packungsdichten von kugelförmigen Streuzentren mit definierten Radien R und bestimmen die zugehörigen Paarkorrelationsfunktionen $g(\vec{r})$ und Strukturfunktionen $\hat{S}_{lq}(k, \theta)$ numerisch.



Abbildung 3.32: Paarkorrelations- und Strukturfunktion von flüssigem Argon bei T=85 K; bestimmt mithilfe von Neutronenstreuung [58]

Monte-Carlo-Simulationen stark ungeordneter Medien



Abbildung 3.33: Zweidimensionales ungeordnetes System

Mithilfe eines Random-Generators werden nacheinander die Positionen \vec{r} der einzelnen Kugeln in einem vorgegebenen Probenvolumen gewürfelt, wobei sich die Kugeln räumlich nicht überschneiden dürfen. Der Einfachheit wird angenommen, daß alle Kugeln gleich groß seien. Wird jede neu hinzukommende Kugel auf räumliche Uberschneidung mit allen zuvor positionierten überprüft, so steigt die Rechenzeit des Computers mit der Anzahl der Kugeln im Volumen exponentiell an. Darum wählen wir ein Probenvolumen, welches wesentlich kleiner als die wirkliche Probe, jedoch größer als die Reichweite der Nahordnung ist, und setzen dieses periodisch zu einer beliebig großen Probe fort. Um eine im Mittel gleichmäßige Anzahldichte von Streuzentren über die gesamte Probe zu erreichen, muß das Ziel der periodischen Fortsetzbarkeit schon bei der Festlegung der Positionen im Teilvolumen berücksichtigt werden, da sonst die Grenzflächen der Teilvolumina im mittel zu dicht

besetzt werden. Die Paarkorrelationsfunktion g(r) des auf diese Weise generierten Systems kann durch Abzählen der Streuzentren in gegebenem Abstand $r \pm \Delta r$ von einem zufällig ausgewählten Aufatom und Normierung auf das entsprechende differentielle Kugelschalenvolumen $\int_{r-\Delta r}^{r+\Delta r} 4\pi r^2 dr$ ermittelt werden (siehe Abb.3.33). Da das System räumlich isotrop und invariant unter Translation ist, kann über die Paarkorrelationsfunktionen mehrerer zufällig ausgewählter Aufatome gemittelt werden, wodurch statistische Schwankungen wesentlich reduziert werden.



Abbildung 3.34: Numerisch bestimmte Paarkorrelationsfunktionen ungeordneter Systeme verschiedener Packungsdichten

Abb.3.34 zeigt mit dieser Methode (1) ermittelte Paarkorrelationsfunktionen ungeordneter Systeme verschiedener Packungsdichten. Die Paarkorrelationsfunktionen zeigen selbst für ein System relativ geringer Packungsdichte ein deutliches Maximum bei dem Abstand, der dem Durchmesser der Streuzentren entspricht. Die nicht miteinander wechselwirkenden Kugeln ordnen sich also bevorzugt dicht nebeneinander an, da dann die Entropie des Systems maximal ist. Zunächst würde man erwarten, daß der mittlere Abstand bei gegebener Packungsdichte der am häufigsten auftretende ist. Dies trifft jedoch nur für langreichweitig wechselwirkende Streuzentren zu.



Abbildung 3.35: Paarkorrelationsfunktion eines ungeordneten Systems hoher Packungsdichte

Ein System mit einer Packungsdichte größer als etwa 50 % der dichtesten Kugelpackung, d.h. p > 0.4, läßt sich mit Hilfe dieser Methode nicht mehr in vertretbarer Rechenzeit erzeugen. Die Anzahl der Rechenschritte, die benötigt werden um in einem relativ dichten Medium noch einen freien Platz hinreichender Größe für eine hinzukommende Kugel zu finden, divergiert. Dichtere Systeme von Streuzentren erzeugen wir darum durch Verschieben von Kugeln, die zunächst in einem regelmäßigen Gitter angeordnet wurden. Für eine zufällig ausgewählte Kugel wird mithilfe des Random-Generators ein Einheitsvektor für die Richtung, in die sie geschoben werden soll, bestimmt. Im Bereich bis zum Auftreffen auf die nächste in dieser Richtung im Weg liegende Kugel wird ein Wert für die Länge der Strecke gewürfelt, um die sie verschoben wird. Abhängig von der Packungsdichte werden die Kugeln so lange gegeneinander verschoben bis sich die entsprechende Paarkorrelationsfunktion nicht mehr sichtbar ändert. Unter der Annahme, daß dann maximal mögliche Unordnung des Systems erreicht ist, hat die zugehörige Paarkorrelationsfunktion die in Abb 3.35 gezeigte Form. Der Vergleich der Paarkorrelationsfunktionen eines Systems, das sowohl mit der ersten als auch mit der zweiten be-

schriebenen Methode erzeugt wurde, zeigt einen wesentlichen Unterschied (Abb. 3.36). Die zweite Methode führt im Vergleich zur ersten verstärkt dazu, daß Kugeln im nächst möglichen Abstand beeinander liegen. Dieser Effekt ist in der Physik ungeordneter Systeme wie Flüssigkeiten und Gläser als Cache-Effekt bekannt und ist rein statistischer Natur. Wechselwirken die einzelnen Kugeln nicht miteinander, so scheint deren Bewegung zunächst in alle Raumrichtungen gleich wahrscheinlich zu sein. Je näher die Kugeln jedoch beieinander liegen, desto stärker wird deren Bewegung eingeschränkt. Gelangt also eine Kugel in die Nähe einer oder mehrerer anderer, so wird die Wahrscheinlichkeit sich von diesen wieder zu entfernen einfach dadurch verringert, daß sie 'im Weg liegen' und die Bewegung in bestimmte Raumrichtungen verhindern. Somit können die in den beiden Methoden erzeugten ungeordneten Systeme als Grenzfälle des wirklich experimentell realisierten angesehen werden.

Mithilfe der auf diese Weise ermittelten Paarkorrelationsfunktionen lassen sich die zugehörigen Strukturfunktionen berechnen. Das Ergebnis dieser Rechnungen ist in Abb 3.37 für die oben beschriebenen Systeme zusammengestellt.

Sowohl die Paarkorrelationsfunktion als auch die Strukturfunktion eines stark ungeordneten Mediums lassen sich in einen Anteil, der durch die konstante *mittlere* Dichte gegeben ist und einen Anteil, der von den Dichte*fluktuationen* herrührt, zerlegen. Da die Paarkorrelationsfunktion die Autokorrelation des Streuzentrums nicht enthält, läßt sich der Anteil der konstanten mittleren Teilchenzahldichte durch eine Stufenfunktion beim Durchmesser des einzelnen Streuzentrums beschreiben. Die Strukturfunktion des Gesamtsystems ist in Abb. 3.37 jeweils als durchgezogene Kurve dargestellt. Gestrichelt ist die Strukturfunktion angedeutet, die allein vom Anteil der Stufenfunktion herrührt. D.h. allein die endliche Ausdehnung jedes einzelnen Streuzentrums bestimmt den Verlauf der Strukturfunktion über weite Teile des Impulsübertrages s. Für sehr kleine Impulsüberträge geht die Strukturfunktion gegen Null, sodaß auch der Streuquerschnitt der gesamten Probe für im Vergleich zur Korngröße lange Wellenlängen verschwindet. Die Welle sieht ein homogenes Medium mittlerer Dichte, in dem sie nicht gestreut wird, sondern sich geradlinig mit



Abbildung 3.36: Paarkorrelationsfunktionen auf verschiedene Weise erzeugter ungeordneter Systeme gleicher Packungsdichte

dem Wellenvektor ausbreitet, der ihrem Wellenvektor im über die Probe gemittelten Fermipotential entspricht. Da die Theorie der schwachen Vielfachstreuung nur die Wellenausbreitung im Medium beschreibt, enthält sie die Brechung der Welle an den Grenzflächen der (endlich ausgedehnten) Probe nicht, sodaß diese bei der Berechnung der Transmission zusätzlich berücksichtigt werden muß. Für sehr große Impulsüberträge, d.h. für im Vergleich zur Korngröße kurze Wellenlängen, wird die Strukturfunktion konstant Eins, d.h. der Streuquerschnitt der gesamten Probe ist hier durch die Summe der Streuquerschnitte der einzelnen Zentren gegeben. Dies entspricht dem klassischen Grenzfall unabhängiger Einzelstreuprozesse. Im übrigen Wellenlängenbereich wird der Streuquerschnitt der gesamten Probe durch die endliche Ausdehnung der Streuzentren und die Fluktuation der Anzahldichte im Volumen bestimmt. Abhängig von der *Struktur* des Mediums kann der Streuquerschnitt der gesamten Probe sehr stark variieren. Hier wird bereits deutlich, daß die Transportweglänge und damit auch die Transmission der Welle durch das Medium stark von der Struktur der speziellen Probe abhängen, was den Nachweis einer Veränderung derselben als Folge von Lokalisierungseffekten erschwert, da man die spezielle Struktur eines ungeordneten Mediums im allgemeinen nicht genau genug kennen wird.



Abbildung 3.37: Numerisch bestimmte Strukturfunktionen ungeordneter Systeme verschiedener Packungsdichten
Die modifizierte Transportweglänge

Im Vergleich zum klassischen Grenzfall unabhängiger Streuprozesse an den einzelnen Zentren können kohärente Effekte schwacher Vielfachstreuung in Abhängigkeit von der Energie der Neutronen und der Struktur der Probe sowohl zu einer Reduzierung als auch zu einer Vergrößerung des tatsächlichen Streuquerschnitts führen.



Abbildung 3.38: Elastischer Streuquerschnitt für UCNs in Diamantpulver: a. Einzelstreuung, b: Vielfachstreuung

Abb 3.38 zeigt den modifizierten makroskopischen Wirkungsquerschnitt im Vergleich zum entsprechenden Wirkungsquerschnitt aufgrund unabhängiger Einzelstreuprozesse am Beispiel von Diamantkugeln mit Radius R = 50 nm im interessierenden Wellenlängenbereich ultrakalter Neutronen. Beide Wirkungsquerschnitte sind als Funktion der Wellenlänge im Vakuum aufgetragen. Bei der Berechnung des modifizierten Wirkungsquerschnitts wurde berücksichtigt, daß längerwellige UCNs das System als ein homogenes Medium mittlerer Dichte betrachten. Aufgrund des entsprechend gemittelten Fermipotentials

$$\overline{V}_{Med} = pV_0$$

können sich daher nur Wellen ausbreiten, deren Wellenlänge im Vakuum kürzer als die zugehörige kritische Wellenlänge $\overline{\lambda_{cr}}_{Med}$ ist, wobei deren Wellenlänge *im* Medium entsprechend modifiziert wird.

$$\lambda_{\mathrm{Med}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\lambda_{\mathrm{Vak}}} - \frac{1}{\lambda_{cr}}\mathrm{Med}}}}$$

 V_o bezeichnet das Fermipotential des einzelnen Streuzentrums, p die Packungsdichte derselben in der Streuprobe. Abb. 3.39 und 3.40 zeigen die auf diese Weise berechneten Tranportweglängen von UCNs in verschiedenen Streumedien in Abhängigkeit des Materials, der Korngröße und der Packungsdichte. Das Joffe-Regel-Kriterium $l_{tr} = 2\pi/\lambda$ für den Phasenübergang stellt jetzt eine Bedingung an die durch kohärente Effekte modifizierte Transportweglänge und die Wellenlänge des Neutrons *im* Medium dar und ist wieder als gestrichelte Linie angedeutet.

Streuproben mit relativ kleiner Korngröße von R = 5 nm scheinen praktisch unabhänigig von deren Potential aufgrund der betrachteten kohärenten Effekte schwacher Vielfachstreuung als Kandidaten für möglicherweise auftretende Anderson-Lokalisierung von ultrakalten Neutronen auszuscheiden. Der makroskopische Streuquerschnitt von Pulvern mit Korngröße R = 25 nm oder R = 50nm wird erwartungsgemäß weniger durch Struktureffekte beinflußt. Jedoch verschiebt sich hier der Phasenübergang zu *im* Medium unendlich großer Wellenlänge, sodaß inkohärente Effekte von Streuung und Absorption, die die Phasenkohärenz zerstören und damit Lokalisierung verhindern, unter Umständen nicht mehr zu vernachlässigen sind. Die Transportweglänge von UCNs in Al₂O₃-Pulver mit Korngröße R = 25 nm und auch in Diamantpulver der Korngrößen R = 25 nm und



Abbildung 3.39: Modifzierte Transportweglänge von UCNs in SiO₂- und Al₂O₃-Pulver

R=50nm bei Packungsdichten von etwa 50% dichtester Kugelpackung ist jedoch im mittleren Wellenlängenbereich ultrakalter Neutronen ($\lambda\sim40-70$ nm) nur um einen Faktor 2 bis 3 länger als von A.F. Joffe und A.R. Regel für den Phasenübergang gefordert, sodaß hier Effekte schwacher Lokalisierung auftreten sollten. Die Reduzierung der Transportweglänge der klassischen Diffusionstheorie aufgrund von kohärenter Rückstreuung und schwacher Lokalisierung (Kap.3.2.3) ist in der Theorie schwacher Vielfachstreuung nicht enthalten, könnte jedoch in unseren Proben einen Phasenübergang zu starker Lokalisierung von ultrakalten Neutronen ermöglichen.



Abbildung 3.40: Modifzierte Transportweglänge von UCNs in Diamant-Pulver verschiedener Korngrößen und Packungsdichten

3.5 Das Experiment

Ziel erster Experimente zur Anderson-Lokalisierung von ultrakalten Neutronen ist die Untersuchung der wellenlängenabhängigen Transmission durch verschiedene stark diffus streuende Materialien und die Bestimmung der entsprechenden Transportweglänge. Mithilfe eines äußeren Magnetfeldes kann das zur Verfügung stehende Wellenlängenspektrum von UCNs gezielt verändert und somit die Transmissionsmessung an der gleichen Probe in der gleichen Apparatur auf einen größeren Wellenlängenbereich erweitert werden.

3.5.1 Der experimentelle Aufbau

Das Vakuumgefäß der Turbine hat vier Ausgänge für ultrakalte Neutronen, sodaß hier im Prinzip vier Experimentierplätze zur Verfügung stehen. Aus Intensitätsgründen wurde zwischen drei der vier Ausgänge ein Shutter installiert, sodaß der Fluß ultrakalter Neutronen von $\Phi_{\rm ucn} \simeq 5 \cdot 10^4 s^{-1} cm^{-2}$ immer nur an einen dieser drei Experimentierplätze gelangt. Hier werden darum vorwiegend die bereits erwähnten Speicherexperimente durchgeführt, die keinen kontinuierlichen Fluß von Neutronen benötigen. Unsere Experimente wurden am sogenannten Testleiter der Turbine durchgeführt. An diesem Leiter steht ein geringerer Fluß von $\Phi_{\rm ucn} \simeq 5 \cdot 10^3 s^{-1} cm^{-2}$ zur Verfügung, was uns bei unseren Experimenten, wie wir sehen werden, einige statistische Probleme bereitet. Der Teststrahl bietet jedoch den Vorteil eines kontinuierlichen Neutronenstrahls.

Das ILL stellt für UCNs geeignete Neutronenleiterelemente beliebiger Länge mit speziellen Anschlußflanschen zur Verfügung. Diese Strahlrohre bestehen aus Edelstahl mit einem relativ hohen effektiven Fermipotential für Neutronen, welches einer kritischen Geschwindigkeit von $v_{cr} = 6.2$ m/sec entspricht. Die Innenwände der Leiter sind elektropoliert, sodaß UCNs an dieser sehr glatten Fläche im wesentlichen spekular und nur mit einer Wahrscheinlichkeit von wenigen promille diffus reflektiert werden. Die Rohre haben einen Innendurchmesser von $d_i = 67$ mm, einen Außendurchmesser vom $d_a = 70$ mm, und werden mit speziellen, sehr einfach zu handhabenden Verbindungsflanschen mit Außen-Vitondichtungen untereinander, mit dem Vakuumgehäuse der Turbine und dem entsprechend konstruierten eigenen Vakumgefäß des Experiments verbunden.

Zwischen dem 100μ m dicken Aluminiumfenster an jedem Ausgang der Turbine und den Apparturen für die Experimente ist ein elektronisch kontrollierter Shutter installiert. Der Zwischenraum zwischen Shutter und Turbinenfenster wird zusammen mit der Apparatur evakuiert. Erst wenn der Druck in der Apparatur einen Schwellenwert von etwa 10^{-2} mbar unterschreitet, läßt sich dieser Shutter öffnen, sodaß Neutronen in die Apparatur gelangen. Ein Druck von 10^{-2} mbar kann bei einem eventuellen Vakuumeinbruch durch das Turbinenfenster von den Turbopumpen des Turbinengefäßes problemlos abgepumpt werden und stellt vergleichsweise niedrige vakuumtechnische Anforderungen an die Apparaturen der Experimente. Der Fluß von ultrakalten Neutronen am Ort des Experiments ist bei diesem Vakuum bereits maximal.

3.5.2 Die Flugzeitmessung

Das Wellenlängenspektrum der UCNs wird mithilfe einer Time Of Flight (TOF)-Messung bestimmt. Dazu wird der zunächst kontinuierliche Neutronenstrahl mithilfe eines Choppers gepulst und die Zeit Δt gemessen, die die einzelnen Neutronen dieses Pulses benötigen um eine gegebene Strecke Δs zurückzulegen. Daraus läßt sich deren Geschwindigkeit $v = \frac{\Delta s}{\Delta t}$ bzw deren De-Broglie Wellenlänge $\lambda = \frac{h}{m \cdot v} = \frac{h}{m \Delta s} \cdot \Delta t$ bestimmen. Die einfachste Apparatur zur Durchführung von Flugzeitmessungen besteht aus einem Chopper und einem Detektor; die Flugstrecke Δs ist gegeben durch den Abstand zwischen beiden (Abb. 3.41).



Abbildung 3.41: Experimenteller Aufbau zur Flugzeitmessung

Der Chopper besteht im Wesentlichen aus einer Scheibe mit einem Loch, die sich mit konstanter Frequenz senkrecht zum Strahl dreht und nur dann Neutronen durchläßt, wenn sich das Loch gerade im Strahlengang befindet.

Eine solche Anordnung erzeugt zu einer Startzeit $t_0 = 0$ einen Puls, der Neutronen aller aus der Turbine kommenden Geschwindigkeiten enthält. Auf der Flugstrecke wird dieser Puls breiter und unterschiedliche schnelle Neutronen erreichen den Detektor zu unterschiedlichen Zeiten t_1 (Abb. 3.42). Der Detektor wird mit einer Vielkanalkarte ausgelesen, sodaß zu verschiedenen Zeiten eintreffende Neutronen in verschiedene Kanäle einsortiert werden. Die Kanalbreite entspricht einem (fast) beliebig einstellbaren Flugzeitintervall. Eine am Chopper befindliche Lichtschranke gibt der Vielkanalkarte ein Startsignal, wenn der Chopper gerade maximal geöffnet ist, sodaß die Registrierung in verschiedene Kanäle der Karte die direkte Information über die Flugzeit der Neutronen und damit über deren Geschwindigkeit und Wellenlänge beinhaltet.

Die Zeitauflösung einer solchen Flugzeitmessung ist durch die relative Verbreiterung des Pulses auf der Flugstrecke gegeben. Ist t_c die Öffnungszeit des Choppers, also die Breite des Startpulses und τ_s die Breite des Pulses nach der Flugstrecke s, dann ist die zeitliche Auflösung gegeben durch

$$\frac{\Delta t}{t} = \frac{t_c}{\tau_s} = \frac{t_c}{s \left(\frac{1}{v_{min}} - \frac{1}{v_{max}}\right)},$$



Abbildung 3.42: Methode der Flugzeitmessung

wobei $v_{min}(v_{max})$ die kleinste (größte) Geschwindigkeit der Neutronen im Strahl ist.

Die Auflösung läßt sich jedoch allein durch Verlängerung der Flugstrecke nicht beliebig steigern, da zwei im Zeitabstand T_c aufeinanderfolgende Neutronenpulse 'ineinanderlaufen', sobald die langsamsten Neutronen eines Pulses von den schnellsten des folgenden Pulses eingeholt werden, d.h. wenn

$$t_c + \frac{s}{v_{min}} = T_c + \frac{s}{v_{max}}$$

Eine längere Flugstrecke s erfordert daher gleichzeitig eine höhere Drehfrequenz $1/T_c$ bzw. eine kleinere Öffnung des Choppers, was unweigerlich zur Abnahme der transmittierten Intensität führt. Aus Intensitätgründen wurde im Experiment ein Chopper mit einer Öffnung von 10 % des Gesamtumfangs, d.h. einer Winkelöffnung von 36°, verwendet, sodaß die theoretisch maximal erreichbare Zeitauflösung bei 10% liegt. Er wurde bei einer Drehfrequenz von $\nu_c = 4.5$ Hz betrieben, sodaß aufeinanderfolgende Pulse nach einer Flugstrecke von $s_{max} \simeq 0.7$ m ineinanderlaufen (Abb. 3.43). Bei der gewählten Flugstrecke der Länge $s \simeq 0.66$ m beträgt die Auflösung $\frac{\Delta t}{t} \simeq 11$ %.



Abbildung 3.43: Zeitauflösung der Flugzeitmessung



Abbildung 3.44: Der Zwei-Scheiben-Chopper

Das mit diesem Chopper erreichte relativ schlechte Verhältnis von Intensität und Auflösung beruht zum Teil auf der ungünstigen Dreiecksform des vom Chopper erzeugten Neutronenpulses. Mithilfe einer zweiten Scheibe mit einer größeren Öffnung, die sich mit entsprechend höherer Frequenz in entgegengesetzter Richtung zur ersten dreht, läßt sich ein schmalerer Startpuls mit steileren Flanken erzeugen. Durch Hinzufügen einer zweiten Scheibe mit fünfmal größerer Öffnung, die sich mit fünffacher Frequenz in entgegengesetzter Richtung drehte (Abb. 3.44), wurde im Experiment eine Zeitauflösung von $\frac{\Delta t}{t} \simeq$ 7 % erreicht. Abb 3.45 zeigt die gemessene Öffnungsfunktion dieses 2-Scheiben-Choppers. Hierzu lief der Chopper mit einer Frequenz von $\nu_c = 2.5 \cdot 10^{-3}$ Hz = 0.15

U/min sehr langsam, sodaß die über alle Geschwindigkeiten integrierte Intensität als Funktion der Chopperstellung gemessen wurde.



Abbildung 3.45: Gemessene Öffnungsfunktion des Zwei-Scheiben-Choppers

3.5.3 Der Detektor

Zum Nachweis der Neutronen verwenden wir einen von A.Oed [40] entwickelten und gebauten Helium-Microstreifen-Detektor. Neben der Ortsauflösung, die wir in unseren Experimenten nicht einsetzten, ermöglicht dieser Detektor eine sehr gute Nachweiseffizienz bei sehr gutem Signal-Untergrund-Verhältnis. Der Grund dafür liegt in seiner Konstuktionsweise:

Der Detektor besteht im wesentlichen aus einer mit einem Gasgemisch gefüllten etwa 20 mm tiefen Vakuumkammer, in der sich in einem Abstand von 15mm hinter dessen Eintrittsfenster eine Mikrostreifenplatte befindet (siehe Abb.3.46).



Abbildung 3.46: Microstrip-Detektor [40]

Der Nachweis von Neutronen basiert auf der Kernreaktion

$$^{3}\text{He} + ^{1}\text{n} \rightarrow ^{3}\text{H} + ^{1}\text{p} + 764 \text{keV}$$

im ³He enthaltenden Gasgemisch. Der beim Einfang eines Neutrons durch einen ³He-Kern enstehende ⁴He-Kern zerfällt sofort in ein Triton ³H und ein Proton ¹p unter Freisetzung einer Energie von 764 keV. Die entstehenden Kerne werden in entgegengesetzter Richtung isotrop in das De-



Abbildung 3.47: MSGC-Detektor: Pulshöhenspektren bei verschiedenen He-Partialdrücken

tektorvolumen emittiert. Aufgrund der Impuls-und Energierhaltung transportiert das Triton 1/4, das Proton 3/4 der freiwerdenden Energie.

Die Mikrostreifenplatte besteht aus einer Glasplatte, auf die photolithographisch eine Anordnung von parallelen einander abwechselnden Kathoden- und Anodenstreifen aufgebracht ist. Wird zwischen diesen Streifen, die mit einer Breite von 10 μ m und einem Abstand von 200 μ m sehr dicht nebeneinander angeordnet sind, eine Spannung von $U \sim 600$ V angelegt, so entsteht in deren unmittelbarer Umgebung ein sehr starkes elektrisches Feld mit starkem Gradienten, dessen Ausläufer bis zum Detektorfenster reichen und hier ein quasi homogenes Führungsfeld erzeugen. Spannungen von mehr als ca 660 V führen zur materiellen Zerstörung der Mikrostreifenstruktur. In diesem Führungsfeld werden die entstandenen Kerne Triton und Proton auf die Mikrostreifenplatte zu beschleunigt. Im starken Gradientenfeld in der Nähe der Elektroden ionisieren sie Moleküle des im Gasgemisch neben ³He enthaltenen sogenannten Zählgases und lösen somit eine Lawine weiterer Ionisation durch die entstandenen Gasionen (Gasverstärkung) aus. Eine weitere Komponente des Gasgemischs, das sogenannte Quenchgas, verhindert, daß sich eine selbstständige Gasentladung entfacht. Es sorgt dafür, daß die Gasverstärkung räumlich und zeitlich begrenzt bleibt, sodaß die Information über den Ort des nachgewiesenen Neutrons innerhalb einer Ortsauflösung von etwa 1mm erhalten und die Totzeit des Detektors auf 1 bis 2 μ s begrenzt bleibt. Die an den Elektroden abgezogenen Elektronen werden über einen ladungsempfindlichen hochohmigen Vorverstärker detektiert, sodaß die gemessene Spannung direkt proportional zur Energie der ionisierenden Kerne ³H und ¹p ist. Um das Verhältnis von Signal zu Untergrund zu verbessern werden die Signale durch einen Hauptverstärker mit einer relativ großen Shapingtime von ca 10 μ s verstärkt, was zu einer größeren Totzeit führt. Bei der geringen Intensität von UCNs spielt jedoch das Verhältnis von Signal zu Untergrund eine wichtigere Rolle als die Totzeit. Als Zähl- und Quenchgas werden im allgemeinen verschiedenste Gase eingesetzt, wobei Gase mit hohem Molekulargewicht besonders effektiv ionisiert werden. Ein Gas mit hohem Atomgewicht jedoch absorbiert die in einem Reaktor allgegenwärtige Gamma-Strahlung sehr effektiv, was zu einem hohen Untergrund im Nachweis von Neutronen führt. Ideale Zähl- und Quenchgase bestehen daher aus großen Molekülen leichter Atome, da sie gleichzeitig hohe Nachweiswahrscheinlichkeit für Neutronen und geringe Gamma-Empfindlichkeit gewährleisten können. Der von uns verwendete Detektor enthielt CF4, welches gleichzeitig als Zähl-und Quenchgas diente. Die mittlere freie Weglänge von Neutronen im Detektor und damit deren Nachweiswahrscheinlichkeit hängt neben der Energie der Neutronen vom Partialdruck des ³He-Anteils im Gasgemisch ab. Die Nachweiseffizienz höherenergetischer Neutronen wächst mit dem Partialdruck des ${}^{3}He$ -Gases. Zum Nachweis von UCNs ohne 'Untergrund' von schnelleren Neutronen eignen sich daher Gasgemische mit vergleichsweise niedrigem ³He-Anteil.

Abb. 3.47 zeigt mit einem Mikrostreifendetektor am UCN-Strahl gemessene Pulshöhenspektren bei verschiedenen ${}^{3}He$ -Partialdrücken. Sie enthalten alle einen niederenergetischen Peak, der von im Reaktor allgegenwärtiger Gammastrahlung und von elektronischem Rauschen herrührt. Ist dieser

Peak hinreichend vom übrigen Spektrum getrennt, so lassen sich derartige Untergrundsignale leicht elektronisch herausfiltern. Um die Totzeit des Detektors möglichst gering zu halten kann der Detektor dennoch mit Blei gegen Gammastrahlung abgeschirmt werden. Zu höhere Energie hin folgen drei weitere Peaks, die vom beim Neutroneneinfang entstandenen Triton, Proton und von der Summe beider Teilchen herrührt. Nur eines der beiden Teilchen wird z.B. dann nachgewiesen, wenn das Neutron so dicht hinter dem Eintrittsfenster des Detektors eingefangen wurde, daß eines der beiden entstehenden Teilchen den Detektor wieder verläßt ohne Gasmoleküle zu ionisieren. Da die mittlere Eindringtiefe in den Detektor mit zunehmender Energie der Neutronen ansteigt, treten die beiden Peaks einzelner Triton und Protonkerne vorzugsweise beim Nachweis ultrakalter Neutronen auf. Der ideale Detektor für ultrakalte Neutronen weist ultrakalte Neutronen mit möglichst hoher Effizienz nach und ist für thermische Neutronen, die zum Teil aus der Reaktorhalle aus allen Richtungen und zum Teil durch die Turbine und das Strahlrohr auf den Detektor treffen, praktisch durchsichtig, was sich durch eine geeignete Wahl des ³He-Partialdrucks annähernd erreichen laßt. Gegen den 'Untergrund' thermischer Neutronen aus der Reaktorhalle läßt sich der Detektor zudem mit Borcarbid (B₄C) abschirmen.

3.5.4 Die Präparation der Proben

Um die Transmission von UCNs durch ein Medium zu messen, bringen wir dieses in einem speziellen Probenhalter befestigt senkrecht zum Neutronenstrahl außerhalb der Flugstrecke im Leiter an. Somit messen wir immer die Geschwindigkeit der Neutronen außerhalb der Probe. Der Probenhalter wird gegen Verrutschen beim Evakuieren und Belüften mithilfe von Klemmschrauben im Leiter fixiert. Als Substrat für die zu untersuchenden Pulverproben dient eine dünne Folie oder eine Scheibe eines homogenen Materials mit möglichst niedrigem Fermipotential und möglichst schwacher Absorption. Es eignen sich Aluminiumfolien oder auch reine Quarzfenster, wobei letztere den Vorteil bieten, eine optische Kontrolle der aufgetragenen Schicht z.B. auf eventuell vorhandene Löcher mit einem Durchlicht-Mikroskop zu ermöglichen. Technisch am einfachsten scheint es zunächst zu sein, das Pulver gleichmäßig auf einem waagerechten Träger zu verteilen und die wellenlängenabhängige Transmission mithilfe einer Flugzeitmessung auf einer senkrechten Flugstrecke zu bestimmen. Da die Gravitationskraft aber dann direkt an der zu messenden Geschwindig-



Abbildung 3.48: Wellenlänge von UCNs in Fomblin

keitskomponente angreift, werden sehr komplizierte Korrekturen der TOF-Messung nötig, weshalb wir uns für einen waagerechten Aufbau der Apparatur entschieden haben, was die Präparation einiger Proben erschwert, da sie nun senkrecht fixiert werden müssen.

Die durch Verbrennung von Mg erzeugten polykristallinen MgO-Schichten und die aufgedampften Fullerenschichten haften auf ihren Substraten so gut, daß sie problemlos in jeder gewünschten Orientierung angebracht werden können. Eine gleichmäßig dicke Schicht der in Pulverform vorliegenden Materialien läßt sich durch Einklemmen des Pulvers zwischen zwei Substraten erreichen, wobei hierzu aufgrund der größeren Formstabilität nur Quarzsubstrate in Frage kommen. Auf diese Weise lassen sich Proben der Oxide und Mischungen von Oxiden untereinander und mit Kohlenstoffpulvern herstellen. Schichten von Diamantpulver allein lassen sich auf diese Weise jedoch, wahrscheinlich aufgrund der sehr kantigen Gestalt der einzelnen Körner, nicht präparieren. Diamantpulver wurden daher mit Fomblin, einem fluorierten Öl, gemischt, sodaß die entstehende zähe Masse auch auf einem senkrecht angebrachten Träger haftet. Aufgrund seiner Zusammensetzung (C,F,O) ist sowohl Absorption als auch inkohärente und inelastische Streuung von ultrakalten Neutronen durch Fomblin zu vernachlässigen. Zudem hat Fomblin ein relativ niedriges Fermipotential für Neutronen entsprechend einer kritischen Geschwindigkeit von 4.3 m/sec und ist damit nur für die langsamsten UCNs undurchlässig. Fomblin als Lösungsmittel bietet uns weiterhin die Möglichkeit die Konzentration der Streuzentren und damit die mittlere freie Weglänge für elastische Streuung von UCNs in einer solchen Probe zu variieren.

Durch das Fomblin wird der Kontrast der Brechungsindizes von Streuzentren und Umgebung und damit die Streustärke der Probe zunächst kleiner, jedoch werden auch die Wellenlängen λ' der Neutronen in Fomblin gemäß

$$\lambda' = \left(\lambda_o^{-2} - \lambda_{cr,F}^{-2}
ight)^{-1/2}$$

größer, sodaß wir auf diese Weise einen effektiv größeren Wellenlängenbereich untersuchen können (Abb. 3.48). Abb.3.49a zeigt die Transportweglänge, Abb.3.49b die modifizierte Transportweglänge von UCNs in einem Gemisch von Diamantpulver der mittleren Korngröße R=50 nm und Fomblin mit einer Packungsdichte von p=1/8. Die Dicke unserer Proben bekannter Dichte bestimmten wir über deren Masse.



Abbildung 3.49: a: Transportweglänge, b: modifzierte Transportweglänge von UCNs in einem Gemisch von Diamantpulver und Fomblin, p=1/8

3.5.5 Das Magnetfeld

Das Wellenlängenspektrum der Neutronen variieren wir am Ort der Probe durch Anlegen eines longitudinalen Magnetfeldes, welches durch eine supraleitende Spule erzeugt wird. Diese Spule hat eine Länge von ca. 30 cm, einen Innendurchmesser von 8 cm, einen Außendurchmesser von 13 cm und wird in flüssigem Helium bei einer Temperatur von 4 K betrieben. Bei einem Strom von bis zu 56 A kann sie ein Magnetfeld von bis zu 7 T erzeugen. Das Gehäuse, in dem sich die Spule befindet, hat eine zur Spulenachse longitudinale warme Bohrung mit einem Radius von 2.5 cm, sodaß der Innenraum der Spule, der Ort des Magnetfeldes, auch während des Betriebs des Magneten zugänglich ist. Der komplette Magnet ist ein Standardprodukt, und wird von uns PERKINO genannt.

Das Innenrohr der warmen Bohrung, durch das im Experiment ultrakalte Neutronen diffundieren

sollen, wurde durch ein elektropoliertes Edelstahlrohr ersetzt. Mithilfe eines Übergangsstücks auf die Normflansche vom ILL kann der Magnet mit dem übrigen Neutronenleiter direkt verbunden werden. Damit sich die zur Achse des Leiters longitudinale Geschwindigkeitskomponente der Neutronen an diesem Übergang nicht ändert, wurde kein kontinuierlicher Übergang in Form eines konisch zulaufenden Rohrelements sondern eine einfache Stufe zwischen den verschiedenen Querschnittsflächen von Magnet und Neutronenleiter gewählt, obwohl diese bei einem Flächenverhältnis von 1:2 zu einem Intensitätsverlust von etwas mehr als 50% der Neutronen führt.

Die Stärke des Magnetfeldes läßt sich auf wenige mT genau bestimmen indem man den in der Spule fließenden Strom, der vor dem Übergang in den 'persistent mode' dem in den Zuleitungen fließenden Strom entspricht, über den Spannungsabfall an einem Präzisionsshunt entsprechend genau bestimmt. Zur Kontrolle wurde das Magnetfeld jedoch auch über eine an der Außenwand des Gefäßes befestigte Hallsonde gemessen, welche zuvor mithilfe einer zweiten Hallsonde auf das Innenfeld geeicht wurde. Da Hallsonden im allgemeinen sehr temperaturempfindlich sind und sich die Temperatur der Wände eines Heliumbadgefäßes mit dem aktuellen Stand flüssigen Heliums im Gefäß trotz Vakuumschild ändert, kann diese Messung nur ein grobes Maß für das Magnetfeld, jedoch sicherlich kein Maß für dessen Langzeitstabilität sein. Daß das Magnetfeld von PERKINO zeitlich sehr stabil ist, wissen wir aus Spinrotationsmessungen, die Inhalt des vierten Kapitels dieser Arbeit sind. Die Homogenität des Magnetfeldes über den Querschnitt der warmen Bohrung beträgt in der Mitte der Spule 10⁻³, sodaß wir im Rahmen der in diesem Kapitel beschriebenen Messungen von einem zeitlich konstanten und homogenen Magnetfeld ausgehen können.

3.6 Experimentelle Ergebnisse

3.6.1 Flugzeitmessung ultrakalter Neutronen

Die Winkelverteilung

Über die Messung der Flugzeit der Neutronen können wir nur die zur Strahlachse parallele Komponente der Geschwindigkeit bestimmen. Ultrakalte Neutronen bewegen sich jedoch nicht inform eines gebündelten 'Strahls', sondern diffundieren durch das Strahlrohr wie ein Gas. Unter der Annahme, daß sie die Turbine mit isotroper Winkelverteilung verlassen, ändert sich die Verteilung beim Durchströmen des Strahlrohrs wellenlängenabhängig. Während Neutronen mit Geschwindigkeiten kleiner als der kritischen Geschwindigkeit des Edelstahls ($v_{cr} = 6.2$ m/sec) ihre isotrope Winkelverteilung beibehalten, werden schnellere Neutronen nur unter hinreichend flachem Einfallswinkel durch die Leiterwände reflektiert.

Soll die mithilfe der TOF-Methode bestimmte Geschwindigkeit der absoluten entsprechen, so muß die Divergenz des Neutronenstrahls durch Blenden eingeschränkt werden. Als Blende für ultrakalte Neutronen dient ein Stück Kunstoffrohr, welches in das Strahlrohr hineingeschoben wird. Kunststoff enthält hinreichende Mengen an Wasserstoff, der UCNs sehr effektiv inelastisch streut. Die in einem einzigen Stoß mit Wasserstoff auf thermische Geschwindigkeit beschleunigten und in alle Raumrichtungen gestreuten Neutronen werden von den Edelstahlrohren nicht mehr reflektiert und verlassen das Experiment. Da der Detektor auf thermische Neutronen wenig empfindlich ist, werden auch die in Strahlrichtung gestreuten thermischen Neutronen nur mit sehr geringer Effizienz nachgewiesen.

Unter Vernachlässigung des Einflusses der Gravitation auf die Flugbahn ultrakalter Neutronen und unter der Annahme ideal reflektierender Leiterwände führt die winkelabhängige Reflexionswahrscheinlichkeit des Strahlrohrs für schnellere Neutronen mit Geschwindigkeit v zu einem Cut-Off in der Winkelverteilung beim kritischen Winkel $\theta_{cr} = \arcsin\left(\frac{v_{cr}}{v}\right)$, während UCNs mit $v < v_{cr}$ ihre isotrope Verteilung beibehalten. Unter diesen Bedingungen läßt sich die Wirkung eines Kunststoffrohrs als Blende analytisch berechnen. Für ein Kunstoffrohr mit einer Länge von 12 cm und einem Innendurchmesser von 47 mm, wie wir es verwendet haben, ergibt sich im Bereich isotroper Ausbreitung, d.h. im Geschwindigkeitsbereich unterhalb von $v_{cr} = 6.2$ m/sec, eine Transmission von ca. 4% der ursprünglichen Intensität. zu kürzeren Wellenlängen hin steigt sie abhänigig von der ursprünglichen Winkelverteilung auf ca. 20% an.

Der Untergrund

Neben der in Kap.3.5.3 diskutierten Empfindlichkeit des Detektors auf Gammastrahlung und thermische Neutronen aus der Reaktorhalle tritt speziell bei Flugzeitmessungen ein weiterer, im apparativen Aufbau selbst begründeter Untergrund auf.

Bereits die Messung der Chopperöffnungsfunktion (Abb 3.50) zeigt, daß der Untergrund, der von Neutronen herrührt, bei geöffnetem Shutter größer ist als der Hallenuntergrund bei geschlossenem Shutter. Die zeitliche Struktur des Untergrundes zeigt, daß selbst eine zwei Millimeter dicke Chopperscheibe aus Aluminium oder PVC nicht hundertprozentig undurchlässig für die aus der Turbine kommenden Neutronen zu sein scheint. Werden die Scheiben mit einer Mischung von Gd₂O₃ und Araldit beschichtet, so läßt sich dieser Untergrund auf $n_U \sim 10^{-4}$ Neutronen pro Sekunde reduzieren. Da er aufgrund des großen Absorptionsquerschnitts von Gadolinium nur von schnellen Neutronen herrühren kann, führt er bei der Flugzeitmessung zu einem zeitunabhängigen Untergrund, auf den relativ einfach korrigiert werden kann.



Abbildung 3.50: Gemessene Chopperöffnungsfunktion

Ein zeitabhängiger Untergrund von ultrakalten Neutronen in der Flugzeitmessung läßt sich bei niedrigerer Chopperfrequenz direkt messen, da hier zwischen den einzelnen Neutronenpulsen genügend Zeit verstreicht, in der eigentlich keine UCNs im Detektor erwartet würden. Das bei einer Chopperfrequenz von $\nu_{\rm Ch} = 1.5$ Hz gemessene Flugzeitspektrum zeigt in logarithmischer Darstellung (Abb.3.51b) einen nach dem eigentlichen Puls am Detektor eintreffenden zweiten Neutronenpuls dessen Intensität wenige Prozent der maximalen Intensität des Hauptpulses beträgt.



Abbildung 3.51: Wellenlängenspektrum bei niedriger Chopperfrequenz

Aufgrund seiner Flugzeit würde dieser zweite Puls einer Neutronengeschwindigkeit von $v \simeq 1.5$ m/sec entsprechen. Derartig langsame Neutronen können jedoch aufgrund der zwei Aluminiumfenster mit einer kritischen Geschwindigkeit von $v_{cr} = 3.2$ m/s am Turbinenausgang und am Detektoreingang nicht nachgewiesen werden, sodaß es sich um nur scheinbar so langsame UCNs handeln kann. UCNs mit Geschwindigkeiten von $v \simeq 4.5$ m/sec , die jeweils einmal am Detektorfenster und am Chopper reflektiert werden, würden die Flugstrecke dreimal zurücklegen, bevor sie nachgewiesen werden, und könnten somit zu diesem zweiten Puls führen. Diese Vermutung wird dadurch erhärtet, daß die relative Intensität des zweiten Pulses abnimmt, wenn sich auf der Flugstrecke zwischen Chopper und Detektor eine Blende befindet (Abb. 3.52). Ultrakalte Neutronen mit Geschwindigkeiten von $v \simeq 4.5$ m/sec unterliegen zahlreichen Reflexionen im Leiter, sodaß sie die Flugstrecke mit entsprechend geringerer Wahrscheinlichkeit dreimal zurücklegen können, wenn sich dort ein Kunstoffrohr befindet. Dieser jetzt nur noch sehr schwache Puls führt in einer bei einer Chopperfrequenz von $\nu_C = 4.5$ Hz durchgeführten Flugzeitmessung zu einem nahezu



wellenlängenunabhängigen Untergrund. Bei der Auswertung unserer Daten werden wir darum der Einfachheit halber immer nur einen wellenlängenunabhängigen Untergrund berücksichtigen.

Abbildung 3.52: Untergrund der TOF-Messung

Die Zeitauflösung der Flugzeitmessung

Die Zeitauflösung einer Flugzeitmessung ist zunächst prinzipiell durch die Größe der Chopperöffnung begrenzt. Darüber hinaus kommt es zu einer weiteren, wellenlängenabhängigen Reduzierung der Zeitauflösung, wenn sich die gemessene Komponente der Geschwindigkeit in der Apparatur zeitlich ändert. In einem rein spekular reflektierenden horizontalen Neutronenleiter ist dies nicht der Fall. Werden ultrakalte Neutronen jedoch im Leiter mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit nicht spekular, sondern diffus reflektiert, so ändert sich auch die gemessene axiale Komponente ihrer Geschwindigkeit. Da die mögliche Anzahl von Reflexionen im Leiter mit zunehmender Wellenlänge zunimmt, nimmt hier auch die Reduzierung der Zeitauflösung aufgrund diffuser Reflexion im Leiter entsprechend zu. Diese zusätzliche Abnahme der Zeitauflösung läßt sich mithilfe von TOF-Messungen mit einem äußeren Magnetfeld untersuchen. Ein longitudinaler Magnetfeldgradient führt zu einer Zeeman-Aufspaltung der Neutronenenergie und damit zu einem longitudinalen Stern-Gerlach-Effekt: Das ursprüngliche Spektrum unpolarisierter Neutronen (Abb.3.53a) spaltet sich im Magnetfeld in zwei Komponenten auf: Neutronen mit zum Magnetfeld antiparallelem Spin ('Spin-Down') werden beschleunigt, Neutronen mit parallelem Spin ('Spin-Up') abgebremst bzw. reflektiert, wenn ihre kinetische Energie kleiner ist als ihre potentielle Energie im Magnetfeld (Abb.3.53b). Beim Verlassen des Magnetfeldes kehren sich die Verhältnisse um, sodaß sich die beiden Komponenten wieder überlagern, wobei dem ursprünglichen Spektrum jetzt der Anteil der vom Magnetfeld reflektierten Spin-Up-Neutronen fehlt (Abb.3.53c).



Abbildung 3.53: Änderung des Wellenlängenspektrums ultrakalter Neutronen in einem Magnetfeld von B=7T

Division eines mit Magnetfeld gemessenen Flugzeitspektrums durch ein entprechend ohne Magnetfeld gemessenes zeigt direkt die Wirkung des Feldes, das eine sehr scharfe Kante im Spektrum erzeugt. Der theoretisch erwartete Verlauf der Kurve ist in Abb.3.54 für ein Magnetfeld von B=7T gezeigt. Durch einen Fit dieser - mit der Chopperöffnungsfunktion gefalteten - Stufe an die gemessenen Daten läßt sich das Magnetfeld lediglich mit einer Genauigkeit von 10% bestimmen (Abb. 3.55). Wie bereits vermutet ist die Zeitauflösung der TOF-Methode schlechter als aufgrund der Chopperöffnung erwartet, wobei die Abweichung mit zunehmender Wellenlänge der Neutronen zunimmt.



Abbildung 3.54: Transmission von UCNs durch ein Magnetfeld von B=7T



Abbildung 3.55: Gemessene Transmission von UCNs durch verschiedene Magnetfelder

3.6.2 Transmission der Substrate

Transmission ohne äußeres Magnetfeld

Die Wechselwirkung von ultrakalten Neutronen mit einer Folie homogenen Materials wird durch eine quantenmechanische Potentialwand entsprechender Dicke und dem effektiven Fermipotential entsprechender Höhe beschrieben, wobei elastische Streuung durch einen Realteil, Absorption und inelastische Streuung inform eines Imaginärteils berücksichtigt werden. Das Potential lautet

$$U = V_F - iW = \frac{2\pi\hbar^2}{m}n[\Re(a) - i\Im(a)]$$

mit der elastischen Streulänge $\Re(a) = a_{el}$ und der imaginären Streulänge

$$\Im(a) = \frac{(\sigma_{abs} + \sigma_{inel})k}{4\pi}$$

Das Produkt $(\sigma_{abs} + \sigma_{inel}) \cdot k$ ist im Bereich 'normaler Absorption' ohne Resonanzen wellenlängenunabhängig, sodaß die für thermische Neutronen tabellierten Werte direkt übernommen werden können ([47]). Für die Wellenzahl k im Medium gilt

$$k = \sqrt{k_0^2 + 4\pi n \cdot (i\Im(a) - \Re(a))}$$

 k_0 ist die entsprechende Wellenzahl im Vakuum.



Abbildung 3.56: Theoretisch erwartete Transmission von UCNs durch ein Quarzsubstrat

zeitunabhängigem Untergrund in den Daten.

Der Anteil der durch die Folie transmittierten Neutronen ist durch die bekannte Transmission einer Welle durch ein absorbierendes Kastenpotential

$$T = \left| \frac{2k}{k_0 + k} \right| e^{-d \cdot \Im(k)} \left| \frac{2k_0}{k_0 + k} \right|$$

gegeben und hat als Funktion der Wellenlänge $\lambda_o = 2\pi/k_o$ beispielsweise für ein Quarzsubstrat der Dicke d = 0.5 mm mit den angegebenen Tabellenwerten reeller und imaginärer Streulängen die in Abb 3.56 durchgezogen gezeichnete Form. Die gestrichelte Kurve zeigt die entsprechende mit der gemessenen Chopperöffnungsfunktion gefaltete

Funktion, die gepunktete schließlich den erwarteten Kurvenverlauf unter Berücksichtigung von

Abb 3.57 zeigt die entsprechende Messung und das Ergebnis eines Fits, bei dem als Fitparameter multiplikative Faktoren (fre, fim) in den Streulängendichten $(\Re(a) \cdot n, \Im(a) \cdot n)$ und ein Untergrundparameter angesetzt wurden. Abb 3.57a. zeigt das Ergebnis eines Fits über den gesamten Wellenlängenbereich ultrakalter Neutronen. Das Ergebnis ist ein deutlich größerer Imaginärteil der Streulängendichte als theoretisch für die entsprechenden Materialien zu erwarten ist. Neben Verunreinigungen können auch leichte strukturelle Inhomogenitäten mit Ausdehnungen in der Größenordnung der UCN-Wellenlänge eine Ursache dafür sein. Ferner kann aber auch die mit zunehmender Neutronenwellenlänge deutlich abnehmende Zeitauflösung der TOF-Methode (Kap.3.6.1) zu einem systematischen Fehler in der experimentellen Bestimmung der imaginären Streulängendichte führen, was sich bei langen Wellenlängen in einer deutlichen Verbreiterung der erwarteten Transmissionskante bei der kritischen Wellenlänge des Substrats zeigt. Daher wurden



Abbildung 3.57: Messungen und Fitergebnisse der Transmission von UCNs durch ein Quarzsubstrat

alle weiteren Transmissionsmessungen in einem kleineren Wellenlängenbereich gefittet. Die folgende Abb. 3.58 zeigt entsprechende Messungen und Fitergebnisse einer Aluminiumfolie der Reinheit 99.999% von der Firma Good Fellow, einer Standard-Aluminiumfolie und einer speziellen Aluminiumfolie, die am ILL als Turbinen- und Detektorfenster eingesetzt wird.



Abbildung 3.58: Messungen und Fitergebnisse der Transmission von UCNs durch verschiedene Alumiumfolien

Transmission mit äußerem Magnetfeld

Die Transmission von unpolarisierten UCNs durch unmagnetische Substanzen sollte sich als Funktion der Wellenlänge im Medium in einem äußeren Magnetfeld nicht ändern. Dies gilt sowohl für homogene Materialien wie z.B. unsere Substrate als auch für stark streuende ungeordnete Medien, in denen möglicherweise Andersonlokalisierung auftritt. Im Magnetfeld ändert sich lediglich die Ausbreitungsgeschwindigkeit von UCNs, sodaß sich durch Anlegen eines Magnetfeldes am Ort der Probe die Gültigkeit der angenommene Theorie der Transmission in einem erweiterten Welenlängenbereich überprüfen und gegebenenfalls modifizieren läßt. Abb. 3.59 zeigt den Aufbau des TOF-Experiments mit Magnetfeld. Die Probe befindet sich etwa in der Mitte des Perkinorohrs, da dort das longitudinale Magnetfeld die höchste Homogenität von 10^{-3} aufweist. Aufgrund der Zeeman-Aufspaltung $\Delta E = 2\mu B$ der kinetischen Energie im Magnetfeld werden 50 % der Neutronen gemäß

$$k_{(o)}^{+} = \sqrt{k_{(o)}^{2} + \frac{2m\mu B}{\hbar^{2}k_{0}^{2}}}$$

beschleunigt und 50 % gemäß

$$k_{(o)}^{-} = \sqrt{k_{(o)}^{2} - \frac{2m\mu B}{\hbar^{2}k_{0}^{2}}}$$



Abbildung 3.59: Experimenteller Aufbau zur Transmissionsmessung im Magnetfeld

abgebremst bzw reflektiert, wenn $k_{(o)} < \sqrt{\frac{2m\mu B}{\hbar^2 k_0^2}}$, sodaß die Transmission durch eine im Magnetfeld befindliche Probe durch

$$T(k_0, k) = 0.5 \cdot T(k_a^+, k^+) + 0.5 \cdot T(k_a^-, k^-)$$

gegeben ist. Die Wirkung des Magnetfeldes läßt sich wie in Kap.2.6.1. durch Division der mit und ohne Magnetfeld gemessenen Spektren herausstellen, wobei auch hier zu beachten ist, daß die Bestimmung der Neutronenwellenlänge außerhalb des Magnetfeldes erfolgt.



Abbildung 3.60: Wirkung eines äußeren Magnetfeldes auf die Transmission von UCNs durch ein Quarzsubstrat

Der theoretisch erwartete Verlauf ist in Abb 3.60 für ein Magnetfeld von B=4 T exemplarisch dargestellt. Gestrichelt ist das entsprechende Verhalten bei gleichem Magnetfeld, jedoch ohne Probe, angedeutet. Absorption und quantenmechanische Reflexion von Neutronen durch das Substrat führen zunächst dazu, daß die Stufe verschoben und weniger scharf ist, als in der entsprechenden Kurve ohne Probe. Zudem nimmt zu längeren Wellenlängen hin die Zählrate in Anwesenheit eines Magnetfeldes am Ort der Probe stark zu und zeigt einen Pol bei der kritischen Wellenlänge des Substrats. Hier handelt es sich um im Magnetfeld beschleunigte Neutronen, die als solche das Substrat besser bzw überhaupt erst durchdringen können.



Abbildung 3.61: Gemessene Wirkung eines äußeren Magnetfeldes auf die Transmission von UCNs durch ein Quarzsubstrat

Abb 3.61 zeigt entsprechende Messungen an einem Herasilsubstrat in verschieden starken Magnetfeldern. Aufgrund der wellenlängenabhängigen Auflösung und des Untergrundes im Bereich langer Wellenlängen tritt in den Messungen kein wirklicher Pol bei der kritischen Wellenlänge des Substrats auf. Ein deutlicher Anstieg der Intensität ist jedoch in jedem Fall zu beobachten. Im Rahmen der Meßgenauigkeit unter Berücksichtigung der beschränkten Wellenlängenauflösung kann somit die angenommene Theorie der Transmission von Neutronen durch ein homogenes Substrat auf dem gesamten betrachteten Wellenlängenbereich als gültig angenommen werden.

3.6.3 Transmission diffus streuender Medien

Transmission ohne äußeres Magnetfeld

Nach den vorangegangenen Untersuchungen zur Methode der Flugzeitmessung selbst und der darauf beruhenden Bestimmung der wellenlängenabhängigen Transmission ultrakalter Neutronen durch ein homogenes Medium sollen nun entsprechende Messungen an stark diffus streuenden Medien vorgestellt werden. In einem solchen Medium ändert sich die Ausbreitungsrichtung von UCNs ständig. Die Transmission hängt nicht wie die eines homogenen Mediums allein von der axialen Komponente sondern von der Absolutgeschwindigkeit bzw. -wellenlänge der Neutronen ab. Da wir mit der TOF-Methode jedoch nur die axiale Komponente messen können sind ab sofort zwei Blenden im Strahlaufbau – eine vor und eine hinter der Probe – erforderlich. Somit werden nur Neutronen nachgewiesen, deren Ausbreitungsrichtung sowohl vor als auch nach der Probe hinreichend achsenparallel ist, während sie sich innerhalb des streuenden Mediums beliebig ändert (siehe Abb.3.62).





Abbildung 3.62: Experimenteller Aufbau zur Bestimmung der Transmission von UCNs durch eine stark streuende Probe

Im folgenden wird die Transmission ultrakalter Neutronen durch ein streuendes Medium als Funktion der axialen Komponente ihrer Wellenlänge betrachtet. Die Probe wurde im Strahlrohr so orientiert, daß die von links aus der Turbine kommenden Neutronen zuerst durch die Probe diffundieren bevor sie auf das Herasilsubstrat treffen (Abb 3.63).

Im Medium diffus gestreute UCNs werden aufgrund ihres möglicherweise großen Einfallswinkels auf das Herasilsubstrat von diesem teilweise in das Medium zurückreflektiert. Sie diffundieren wiederum in das Medium, kehren jedoch mit großer Wahrscheinlichkeit zurück, treffen wiederholte Male auf das Substrat treffen und werden nur dann transmittiert, wenn sie hinreichend senkrecht auf dessen Oberfläche treffen. Das Substrat wirkt in diesem Fall zusätzlich als Richtungsfilter.

Unter dieser Annahme ergibt sich für die Transmission der gesamten Probe

$$T = t_m \cdot t_s + t_m \cdot r_s \cdot r_m \cdot t_s + t_m \cdot r_s \cdot r_m \cdot r_s + t_m \cdot r_s \cdot r_m \cdot t_s + \dots + \dots + \dots + \dots + t_m t_s \cdot \sum_{i=0}^{\infty} (r_s \cdot r_m)^i = t_m t_s \cdot \frac{1}{1 - r_s r_m}$$



diffus streuendes Medium



 t_m bezeichnet die Transmission von UCNs durch das streuende Medium, $r_m = 1 - t_m$ die entsprechende Reflexion, d.h. die Rückkehrwahrscheinlichkeit diffus gestreuter Teilchen im Medium. t_s bezeichnet die Transmission und r_s die Reflexion von UCNs durch das Substrat.

Die theoretische Transmission t_m eines streuenden Mediums der Dicke d aufgrund klassischer Diffusion unter Berücksichtigung kohärenter Effekte schwacher Vielfachstreuung läßt sich mithilfe der in Kap.3.4.2 berechneten Transportweglänge l_{tr} zu $t_m = 0.71 \cdot l_{tr}/d$ bestimmen.

Sowohl die Transmission t_s als auch die Reflexion r_s von UCNs durch das Substrat läßt sich unter der Annahme, daß die Oberfläche des Substrats auf der Skala von UCN-Wellenlängen ideal glatt ist und daher rein spekular reflektiert, berechnen. Die Reflexion an der Rückseite des Quarzsubstrats beträgt nur einige promille und ist damit vernachlässigbar klein. Mehrfachreflexionen im Innern des Quarzsubstrats können aufgrund der im Vergleich zur Wellenlänge der UCNs großen Dicke des Substrats vernachlässigt werden. Unter der Annahme einer isotropen Winkelverteilung von UCNs in der Probe hat die Transmission durch das Substrat mit den in Kap.3.6.2 bestimmten Streulängendichten und die Reflexion an dessen Oberfläche die in Abb 3.64 gezeigte Form.



Abbildung 3.64: Berechnete Transmission und Reflexion von UCNs durch ein Quarzsubstrat der Dicke 0.5mm

Die Änderung des Brechungsindex an den Grenzflächen Vakuum-Medium, Medium-Substrat und Substrat-Vakuum hat neben einer Änderung der Absolutgeschwindigkeit von UCNs auch eine Änderung der Ausbreitungsrichtung zur Folge. Diese Änderung ist an der Grenzfläche Substrat -Vakuum größer ist als an der Grenzfläche Medium - Substrat, was eine leichte Kollimation der Neutronenausbreitung in axiale Richtung zur Folge hat. Sowohl der Effekt der Vielfachreflexion durch das Substrat als auch der Effekt der Kollimation durch die auftretenden Brechungsindexnterschiede nimmt mit zunehmender Wellenlänge der Neutronen zu, sodaß wir eine Verstärkung der Intensität langwelliger im Vergleich zu kurzwelligen Neutronen erwarten.



Die Transmission einer diffus streuenden Probe einschließlich des Substrates und der darauffolgenden Blende unter Berücksichtigung aller genannten Effekte läßt sich somit unter obigen Annahmen berechnen. Abb 3.65 zeigt das Ergebnis für eine isotrop streuende Probe der Transmission $t_m = 0.71 l_{tr}/d \equiv 1$. Sie zeigt deutlich die erwartete Verstärkung längerer Wellenlängen gegenüber kürzeren.

Abbildung 3.65: Transmission von UCNs isotroper Winkelverteilung durch das Substrat mit nachfolgender Blende

Abb. 3.66 zeigt Transmissionsmessungen von UCNs durch verschiedene Proben. Es wurde jeweils das mit der gesamten Probe einschließlich Substrat gemessene Wellenlängenspektrum durch ein ausschließlich mit dem leeren Probenhalter gemessenes geteilt.



Abbildung 3.66: Gemessene Transmission von UCNs durch ungeordnete Systeme

Die Dicke der SiO₂- und Al₂O₃ / SiO₂- Proben stimmt in einem weiten Wellenlängenbereich nahezu mit der unter Berücksichtigung kohärenter Effekte schwacher Vielfachstreuung berechneten Transportweglänge von UCNs in dieser Probe überein. Daher entspricht das Transmissionsspektrum weitgehend dem in Abb. 3.65 dargestellten Transmissionsspektrum eines isotropen Neutronenstrahls durch ein leeres Herasilfensters mit anschließender Blende, was durch die Messungen weitestgehend bestätigt wird. Da für derart dünne Proben die Diffusionstheorie nicht gilt, läßt sie keine quantitativen Aussagen über den genauen Verlauf des Spektrums zu.

Die Diamant / SiO₂ - Probe zeigt eine höhere Transmission als in Abb. 3.65 für eine isotrop streuende Probe mit $t_m \equiv 1$ berechnet, sodaß diese Probe wahrscheinlich nicht isotrop streut. UCNs verlassen die Probe bevorzugt in Vorwärtsrichtung, sodaß die Transmission auf die bisher dargestellte Weise, die eine isotrope Winkelverteilung der UCNs nach Diffusion durch die Probe voraussetzt, nicht berechnet werden kann. Ebenso hohe Transmission zeigte eine MgO- und eine C_{60} -Aufdampfschicht und Schichten von Flammruß gemischt mit Fomblin.



Abbildung 3.67: Transmission durch eine Diamantprobe

Abb. 3.67 zeigt eine Messung der Transmission von UCNs durch ein Gemisch von Diamantpulver und Fomblin im Volumenverhältnis 1/8. Die Dicke der Schicht betrug ca. 50 μ m. Die berechnete modifzierte Transportweglänge von UCNs in dieser Probe beträgt über den gesamten Wellenlängenbereich von UCNs $l_{tr} \sim (0.02 - 0.1) \cdot d$ (siehe Kap 3.5.4). Daher erwarten wir, daß ultrakalte Neutronen diese Proben mit isotroper Winkelverteilung verlassen, und die Transmission wie oben dargestellt berechnet werden kann. Mit

$$t_m = 0.71 \cdot \frac{l_{tr}}{d} \simeq 0.02 - 0.1$$

ergibt sich eine theoretisch erwartete Gesamttransmission durch die Probe einschließlich der nachfolgenden Blende von $T \sim 10^{-4}$ bis 10^{-3} . Die Messung zeigt jedoch eine um ein bis zwei Größenordnungen höhere Transmission. Da alle auf diese Weise betrachteten Messungen an Diamantpulver und auch an Gasruß ähnliche Diskrepanzen zeigen, muß es sich um einen prinzipiell auftretenden, bisher nicht berücksichtigten Effekt handeln.

Eine Möglichkeit wäre, daß bei der Präparation der Proben Löcher entstehen, deren Größe unterhalb der Auflösung eines Lichtmikroskops von typischerweise einigen hundert Nanometern liegt. Wird das Pulver mit Fomblin gemischt, so können zudem beim Rühren Luftbläschen entstehen, die sich unter Vakuum einen Weg durch die Schicht nach außen bahnen und dabei einen für Neutronen durchlässigen Kanal hinterlassen, den wir mit dem Lichtmikroskop ebenso wenig ausmachen können. Der Versuch obige Theorie unter der Berücksichtigung möglicherweise auftretender Löcher in der diffus streuenden Schicht über einen Fit an die Daten anzupassen zeigt das in Abb. 3.68 als durchgezogene Kurve eingezeichnete Ergebnis. Ein Flächenanteil von Löchern von ca 1.5% der gesamten Fläche der Probe kämen somit als mögliche Ursache für die unerwartet hohe Transmission infrage. Eventuell auftretende Löcher führen zunächst zu einem konstanten Offset in der gemessenen Transmission. Desweiteren wird die mittlere Dichte bzw. die effektive Dicke der Probe durch die Löcher entsprechend reduziert. Ein entsprechender Fit ergibt jedoch eine effektive Dicke von weniger als 30% der wahren Dicke, was folglich nicht allein auf Löcher in der Probe zurückgeführt werden kann. Die unerwartet hohe Transmission läßt sich somit nicht allein auf die aufgrund der Löcher reduzierte mittlere Dichte der Streuzentren im Medium erklären.

Die Interpretation der Transmissionsspektren erfordert möglicherweise eine genauere Kenntnis der Winkelverteilung ultrakalter Neutronen im Experiment unter Berücksichtung der im Erdgravitationsfeld gekrümmten Neutronenbahnen. Ferner ist es möglich, daß ein Beitrag von diffuser



Abbildung 3.68: Transmission von UCNs durch die Probe mit eventuellen Löchern

Reflexion und Absorption aufgrund einer Rauhigkeit zur bisher als rein spekular angenommenen Reflexion der Neutronenleiter zu einer scheinbar geänderten Transmission der Probe führt. Da sich diese Effekte nicht mehr analytisch berechnen lassen, wird im folgenden Kapitel eine Monte-Carlo-Simulation vorgestellt, mit der versucht wird, den Einfluß dieser Effekte zu erfassen.

Monte-Carlo-Simulation

Da weder das Spektrum der Absolutgeschwindigkeiten noch die Winkelverteilung ultrakalter Neutronen am Ausgang der Turbine bekannt ist, wurde folgender Ansatz gewählt. Der Anstieg der Neutronen im gekrümmten Leiter, der aus dem Reaktorbecken zur Turbine führt, ändert die spektrale Verteilung der Neutronen nicht, sondern verschiebt sie aufgrund der Energieerhaltung im Gravitationsfeld nur zu niedrigeren Energien. Aufgrund von Phasenraumargumenten ändert sich auch die spektrale Dichte nicht. Es findet lediglich eine Repopulation des Anteils ultrakalter Neutronen in der Maxwellverteilung der Neutronen im Reaktor statt.



Abbildung 3.69: Modellspektrum der die Turbine verlassenden UCNs

Der Schwanz der Maxwellverteilung ist bei niedrigen Energien durch $f(\lambda) \sim \lambda^{-5}$ gegeben. Die Schaufeln der Turbine sind mit ⁵⁸Ni beschichtet, welches eine kritische Wellenlänge von 50 nm hat, sodaß Neutronen mit Wellenlängen $\lambda > 50$ nm unter allen Winkeln reflektiert werden. Die Intensität von Neutronen kürzerer Wellenlängen wird durch den gekrümmten Leiter und auch die Turbinenschaufeln winkelabhängig reduziert, sodaß genaue Berechnungen der Intensität am Ausgang der Turbine die genaue Winkelverteilung der Neutronen an jedem Ort erfordern. Für unsere Zwecke scheint die

lassenden UCNs te der Form $f_K(\lambda) \sim \frac{1}{e^{\frac{\lambda_K - \lambda}{T}} + 1}$ gegebene Intensitätsverteilung von Neutronen mit Wellenlängen $\lambda < 50$ nm zunächst angemessen. λ_K gibt die Lage, die 'Temperatur' T eine Verbreiterung der Abschneidekante an. Da die isotrope Winkelverteilung der aus dem Moderator kommenden Neutronen zwar durch den vertikalen Leiter geändert, durch die Turbine aber hinreichend gut reproduziert wird, nehmen wir eine durch das Lambert'sche Strahlungsgesetz $I \sim \cos \vartheta$ beschriebene isotrope Winkelverteilung der Neutronen mit einer Wellenlängenverteilung

$$f_F(\lambda) \sim \frac{1}{e^{\frac{\lambda_F - \lambda}{T}} + 1} \cdot \lambda^{-5}$$

am Ausgang der Turbine an (Abb.3.69), wobei die Parameter λ_F und T durch den Vergleich der Simulation mit den Meßdaten bestimmt werden müssen.

Ausgehend von diesem Anfangsspektrum werden die im Gravitationsfeld der Erde gekrümmten Trajektorien der UCNs durch das Strahlrohr mit runder Querschnittsfläche zunächst unter der Annahme rein spekularer Reflexionen berechnet. Um einen direkten Vergleich mit den Flugzeitmessungen zu ermöglichen, wird auch hier die Verteilung der Intensität am Ende des Strahlrohrs als Funktion der axialen Wellenlängenkomponente berechnet. Ebenso wird die von dieser Komponente abhängige Transmission der Aluminiumfolien am Ausgang der Turbine und am Detektoreingang berechnet. Unter Berücksichtigung der verschiedenen Strahlrohrdurchmesser von PERKI-



Abbildung 3.70: TOF-Spektrum am Ende des leeren Strahlrohrs

NO und dem übrigen Leiter läßt sich das entsprechende gemessene Wellenlängenspektrum bei geeigneter Wahl der Parameter der Fermikante mit ausreichender Genauigkeit reproduzieren (siehe Abb.3.70).

Ein Vergleich des Spektrums von Absolutwellenlängen der UCNs am Anfang des Strahlrohrs (Abb.3.69) mit dem erwarteten TOF-Spektrum am Ende des Strahlrohrs (Abb.3.71) zeigt eine scheinbare Verbreiterung des TOF-Spektrums.

Mithilfe der TOF-Methode aufgrund ihrer Flugzeit als langwellig identifizierte Neutronen können jedoch in Wirklichkeit solche kürzerer Wellenlänge sein, deren Ausbreitungsrichtung nicht rein achsial ist, sondern eine nicht zu vernachlässigende Radialkomponente hat. Aus diesem Grunde wurden im Experiment wie bereits erwähnt Kunstoffrohre als Blenden in den Strahlengang eingeführt. Unter der Annahme, daß auf die Blende treffende UCNs nicht nachgewiesen werden, wurde das mit einer solchen Blende erwartete Wellenlängenspektrum simuliert.

Das Ergebnis unterscheidet sich signifikant

0.4 Transmission von UCNs durch eine Blende 0.3 Transmission 0.2 0.1 Dater 0.0 Monte-Carlo-Simulation -0.1 40 80 100 12060 Wellenlänge λ [nm]

Abbildung 3.71: Transmission von UCNs durch eine Blende

vom entsprechenden gemessenen Spektrum. Neben der unter Umständen unzutreffenden Annahme einer isotropen Winkelverteilung der Neutronen am Turbinenausgang könnte eine nicht zu vernachlässigende Rauhigkeit, strukturelle Inhomogenität oder auch einfach Verunreinigung der Neutronenleiter zu diffuser Reflexion, inkohärenter Streuung oder Absorption von Neutronen an den Leiteroberflächen führen. Wird das Transmissionsverhalten einer isotrop streuenden Probe mit T = 1 unter der Annahme rein spekular reflektierender Neutronenleiter simuliert, so ergibt der Vergleich mit dem gemessenen Verhalten eine Transmission der Probe von nahezu 50%, was wiederum auf eine wesentlich größere Transportweglänge von UCNs in der Probe als erwartet schließen läßt. Die zu Begin dieses Kapitels berechnete Zunahme der Transmission mit der Wellenlänge der UCNs aufgrund von Vielfachreflexion am Substrat wurde in dieser Simulation nicht berücksichtigt, da auch in den betrachteten Daten kein derartiges Verhalten zu beobachten ist. Dies könnte an einer jetzt nicht mehr zu vernachlässigenden Absorption von UCNs durch die Probe aufgrund ihrer im Fomblin längeren Wellenlänge liegen (siehe Kap. 3.5.4).



Abbildung 3.72: Transmission durch Diamantpulver mit Korngröße 100nm in Fomblin (p=1:8)

Abhängig von der angenommenen Winkelverteilung am Ausgang der Turbine und dem angenommenen Reflexions- und Absorptionsverhalten der Neutronenleiter, die sich zudem von Rohrelement zu Rohrelement unterscheidet, lassen sich nahezu beliebige Verteilungen der achsialen Wellenlängenkomponente simulieren, sodaß es an diesem Punkt unmöglich erscheint im Rahmen dieses Experiments quantitative Aussagen über die Transportweglänge ultrakalter Neutronen in einer diffus streuenden Probe zu treffen.

Möglichkeiten zur Verbesserung

Um von der tatsächlichen Winkelverteilung am Ausgang der Turbine unabhängig zu sein, könnte man an dieser Stelle einen bekannten diffusen Streuuer einführen, sodaß ultrakalte Neutronen mit einer definierten isotropen Winkelverteilung in den Neutronenleiter diffundieren.

Anstelle der elektropolierten Edelstahlrohre zeigen Titanrohre mit einer Fomblinölschicht ein deutlich besseres Reflexionsverhalten. Ein gleichmäßiger Olfilm stellt eine perfekt glatte Spiegeloberfläche dar und wird am besten durch kontinuierliches Drehen der Titanrohre erzeugt (Abb.3.73). Das Prinzip ähnelt den in der Astronomie teilweise eingesetzten sich ständig drehenden Quecksilberoberflächen als Parabolspiegel. Fomblin hat zwar ein deutlich niedrigeres effektives Fermipotential als Edelstahl, führt damit jedoch nur zu der von uns sowieso erwünschten Divergenzeinschränkung des ultrakalten Neutronenstrahls. Titan hat eine negative elastische Streulänge, sodaß durch die Fomblinschicht gelangende UCNs mit Sicherheit in das Titanrohr eindringen und dort absorbiert werden, jedoch nur zu einem zu vernachlässigenden Anteil an seiner relativ rauhen Oberfläche reflektiert werden. Dieses Prinzip eines idealen Neutronenleiters für UCNS wurde an einem ca. 2 m langen Teilstück getestet und zeigt tatsächlich den erwarteten Erfolg (Abb.3.74). Um diese Methode auf der ganzen Länge des Leiters einzusetzen, bedarf es noch einiger technischer Verbesserungen.

UCN



Abbildung 3.73: Titan-Strahlrohr mit Fomblin-Film



Abbildung 3.74: Vergleich verschiedener Neutronenleiter

Um das Problem der Probenpräparation zu umgehen, das vor allem durch die gewünschte vertikale Positionierung der Probe im horizontalen Neutronenleiter gegeben ist, ist die horizontale Lage sicherlich zu bevorzugen. Um die in einem vertikalen Neutronenleiter entstehende Wellenlängenverschiebung aufgrund der Gravitation zu vermeiden, die zu zusätzlichen Komplikationen in der Berechnung der Neutronenausbreitung führt, sollte jedoch der Strahlengang grundsätzlich horizontal bleiben und nur auf wenigen Zentimetern am Ort der Probe vertikal sein. Gleichmäßiges Rütteln des Substrats mit einer Pulverschicht verhindert zusätzlich die Bildung von Klumpen und Löchern und gewährleistet eine Probenschicht gleichmäßiger Dicke. Bei der Wahl der Probenpulver muß die Verteilung der Korngrößen bekannt sein und sichergestellt werden, daß sich keine Konglomerate bilden. Ferner muß sichergestellt werden, daß die Probe rein ist. Sie darf keinen Wasserstoff enthalten, weder in gebundener Form noch inform von Feuchtigkeit.

Hat man alle diese den experimentellen Aufbau betreffenden Probleme gelöst, so bleibt die Frage nach der Winkelverteilung ultrakalter Neutronen nach Diffusion durch die Probe. Nur wenn diese wirklich isotrop ist, kann mithilfe von Flugzeitmessungen unter Umständen eine Aussage über die tatsächliche Transportweglänge der UCNs in der Probe getroffen werden. Dazu müßte die Winkelverteilung jedoch in einer unabhängigen Messung bestimmt werden.

Ein weiteres grundlegendes Problem ist die Intensität ultrakalter Neutronen im Experiment. Die gesamte nachgewiesene Intensität, die in unserem bisherigen Aufbau mit einer diffus streuenden Probe der Transmission T = 1 zu erwarten ist, beträgt ca. 4 n/sec. Die klassische Transmission einer Probe mit der nach dem Joffe-Regel-Kriterium gewünschten Transportweglänge von $l_{tr} \sim \lambda/2\pi \sim 10$ nm für ultrakalte Neutronen der Wellenlänge $\lambda \sim 60$ nm beträgt bereits bei einer Dicke von $d \sim 600$ nm nur noch $T \simeq 0.71 \cdot \frac{l_{tr}}{d} = 7.1$ %, entsprechend einer gemessenen Intensität von 17 Neutronen pro Minute, sodaß es kaum möglich ist hinreichende Statistik für den eindeutigen Nachweis einer Abweichung der Transmission als Folge von Anderson-Lokalisisierung in diesem Experiment zu erreichen.

3.7 Zeitumkehrinvarianz in der kohärenten Rückstreuung

3.7.1 Die Invarianz unter Zeitumkehrtransformation

Allgemeine Prinzipien der relativistischen Feldtheorie erfordern die Invarianz aller Wechselwirkungen unter der kombinierten Transformation von Ladungs-, Paritäts- und Zeit-umkehr (CPT). Eine experimentell direkt zugängliche Signatur von CPT-Invarianz ist die Gleichheit von Masse und Lebensdauer eines Teilchens und seines Antiteilchens. Die kleinste obere Grenze für eine Invarianz unter CPT-Transformation ist bisher durch Messungen der Massendifferenz von K^0 und \overline{K}^0 zu

$$\left| m_{K^0} - m_{\overline{K}^0} \right| / m_{average} < 10^{-18}$$

gegeben, sodaß die CPT-Invarianz im allgemeinen als erfüllt angenommen wird. Unter der Voraussetzung, daß alle Wechselwirkungen invariant unter CPT-Transformation sind, sind CP und T-Verletzung äquivalent. Hinweise auf mögliche CP- oder T-Verletzung geben bisher vorallem Messungen am Kaon-System. Zum Beispiel tritt beim semileptonischen Zerfall von K_L^0 ein Ungleichgewicht zwischen der Wahrscheinlichkeit verschiedener Zerfallskanäle auf

$$\left[\Gamma \left(K_L^0 \to \pi_- e^+ \nu_e \right) - \Gamma \left(K_L^0 \to \pi_+ e^- \overline{\nu_e} \right) \right] / sum = (0.333 \pm 0.014) \%$$

$$\left[\Gamma \left(K_L^0 \to \pi_- \mu^+ \nu_\mu \right) - \Gamma \left(K_L^0 \to \pi_+ \mu^- \overline{\nu_\mu} \right) \right] / sum = (0.304 \pm 0.025) \%$$

Desweiteren wurden Unterschiede in der Zerfallswahrscheinlichkeit von K_L^0 und K_S^0 in Pionen beobachtet:

$$|\eta_{00}| = \left| A \left(K_L^0 \to 2\pi_0 \right) / A \left(K_S^0 \to 2\pi_0 \right) \right| = (2.275 \pm 0.019) \cdot 10^{-3} |\eta_{+-}| = \left| A \left(K_L^0 \to \pi_{+}\pi_{-} \right) / A \left(K_S^0 \to \pi_{+}\pi_{-} \right) \right| = (2.285 \pm 0.019) \cdot 10^{-3}$$

Darüberhinaus werden etliche andere Prozesse, die wie der Kaon-Zerfall auf der schwachen Wechselwirkung beruhen, aber auch solche, denen die starke oder elektromagnetische Wechselwirkung zugrunde liegt, untersucht. Experimente zur schwachen Wechselwirkung bestehen vorwiegend in der Suche nach von Null verschiedenen Dipolmomenten elementarer Teilchen wie $e, p, n, \mu, \tau, \Lambda$, was sowohl eine P- als auch eine T-Verletzung bedeuten würde. Die empfindlichsten Experimente sind derzeit die Suche nach einem elektrischen Dipolmoment von Neutron und Elektron, die die kleinsten oberen Grenzen angeben, damit jedoch noch keine endgültige Aussage über ein Auftreten von P-/T-Verletzung erlauben.

EDM (n) <
$$0.97 \cdot 10^{-25} e \cdot cm$$

EDM (e) < $(0.18 \pm 0.16) \cdot 10^{-26} e \cdot cm$

Auch der Zerfall des Neutrons $n \longrightarrow p + e^- + \overline{\nu_e}$ kann Aufschluß über eine Verletzung der Zeitumkehrinvarianz geben. Die die schwache Wechselwirkung beschreibenden Konstanten der Axial- und Vektor-Kopplung g_A und g_V werden im allgemeinen als reelle Größen angesehen. Haben sie jedoch einen nichtverschwindenden Imaginärteil, so wäre eine auftretende Phasendifferenz zwischen g_A und g_V ein Hinweis auf eine Verletzung der Zeitumkehrinvarianz in der schwachen Wechselwirkung. Ferner wäre ein von Null verschiedener Tripelkorrelationskoeffizient D, der die relative Spinausrichtung der entstehenden Teilchen beschreibt, eine eindeutige Signatur eines zeitumkehrverletzenden Prozesses. Mithilfe von Untersuchungen eines Zerfallsprozesses von η wird derzeit eine obere Grenze für die Wahrscheinlichkeit eines Auftretens von C-Verletzung in der elektromagnetichen Wechselwirkung angegeben.

$$\Gamma\left(\eta \to \mu^+ \mu^- \pi^0\right) / \Gamma\left(\eta \to all\right) < 5 \cdot 10^{-6}$$

Schließlich wird in einer Reihe von Prozessen der starken und elektromagnetischen Wechselwirkung nach einer Verletzung der Zeitumkehrinvarianz gesucht.

3.7.2 Die kohärente Rückstreuung

Die genaue Vermessung der überhöhten Reflexion aufgrund kohärenter Rückstreuung einer Welle bzw eines Teilchens kann Informationen über eine eventuelle Verletzung der Zeitumkehrinvarianz der der speziellen Streuung zugrundeliegenden Wechselwirkung geben, wobei ein auftretender Effekt durch die Vielfachstreuung verstärkt würde. Während die Streuung von Licht auf elektromagnetischer Wechselwirkung beruht, könnte die Vielfachstreuung von Neutronen somit Informationen über zeitumkehrverletzende Eigenschaften der starken Wechselwirkung geben.

Im folgenden soll zunächst die Größe des zu erwartenden Effekts abgeschätzt werden.



Abbildung 3.75: Kohärente Rückstreuung

Eine Welle werde nach Eintritt in ein ungeordnetes stark diffus streuendes System N mal gestreut bevor sie an ihre Entrittsfläche zurückkehrt (Abb.3.75). Die in der Zeit vorwärts laufende Welle habe nach Diffusion durch das streuende Medium die Amplitude A, die durch das Produkt der Amplituden V_i an jedem der N Streuzentren iauf ihrem Weg gegeben ist

$$A \sim \prod_N V_i$$

Erhält die Welle bei jedem Streuprozeß infolge einer Verletzung der Zeitumkehrinvarianz eine zusätzliche Phase, was auch durch eine Amplitudenänderung v_i ausgedrückt werden kann, so wird dieser Effekt durch die N-fache Streuung im Medium verstärkt.

$$A \sim \prod_{N} (V_i + v_i)$$

Der Einfachheit sei zunächst angenommen,

daß sowohl die Amplitude V der Welle als auch deren Änderung v aufgrund einer Verletzung der Zeitumkehrinvarianz an jedem Streuzentrum gleich sei. Dann ergibt sich für die Amplitude A der Welle nach N Streuprozessen

$$A \sim (V+v)^{N} = \sum_{n}^{N} {\binom{N}{n}} v^{n} V^{N-m} \simeq V^{N} + NvV^{N-1} + \frac{1}{2}N^{2}v^{2}V^{N-2} + \dots$$

Entsprechend gelte für die zeitumgekehrte Welle

$$A' \sim (V-v)^N = \sum_{n=1}^{N} \binom{N}{n} (-1)^n v^n V^{N-m} \simeq V^N - Nv V^{N-1} + \frac{1}{2} N^2 v^2 V^{N-2} + \dots$$

Die Intensität der Welle nach N Streuprozessen ergibt sich damit zu

$$I \sim \frac{1}{2} (A + A')^2 \simeq \frac{1}{2} \left(2V^N + N^2 v^2 V^{N-2} \right)^2 = \frac{1}{2} \left[2V^N \left(1 + \frac{1}{2} N^2 \frac{v^2}{V^2} \right) \right]^2 \simeq A^2 \left(1 + N^2 \frac{v^2}{V^2} \right)$$

Obwohl die daraus folgende Korrektur der kohärent rückgestreuten Intensität eine Korrektur zweiter Ordnung darstellt, kann die N-malige Streuung der Welle im Medium zu einer Verstärkung des Effekts gegenüber der Untersuchung von Einzelprozessen führen. Maximale Verstärkung der Korrektur wird dabei durch eine maximale Anzahl von kohärenten Streuprozessen erreicht. Die folglich möglichst langen Wege der Welle im Medium tragen vor allem in einem kleinen Winkelbereich um die Einfallsrichtung zur rückgestreuten Intensität bei, sodaß die deutlichste Korrektur in der Spitze des Rückstreupeaks sichtbar werden sollte. Ein Effekt der Größenordnung $\frac{v}{V} \sim 10^{-3}$ würde sich unter der Annahme einer maximalen Anzahl von kohärenten Streuprozessen von $N \sim 100$ in einer Korrektur der kohärent rückgestreuten Intensität von

$$\frac{\delta I}{I} \sim N^2 \left(\frac{v}{V}\right)^2 \sim 1\%$$

äußern.

3.7.3 Erste Experimente

Abb 3.76 zeigt zunächst den experimentellen Aufbau, mit dem erste Experimente zur kohärenten Rückstreuung von UCNs durchgeführt wurden. Der 'halbdurchlässige Spiegel' wird durch einen Reflexionschopper, bestehend aus einem Flügelrad mit zwei nickelbeschichteten Flügeln, realisiert, welcher bei einer Frequenz von ca. 6 Hz betrieben wird.

Befindet sich einer der Flügel im Strahlengang, so werden auftreffende UCNs auf die Probe gelenkt. Wenn sich die von der Probe zurückgestreuten UCNs auf dem Weg zum Detektor befinden, hat sich der Flügel aus dem Strahlengang bewegt, sodaß sie ungehindert passieren können. Da dieser Reflexionschopper in seiner Funktion als 'halbdurchlässiger Spiegel' den Strahl pulst, liefert ein zeitaufgelöster Nachweis der UCNs im Detektor zusätzlich Information über deren Flugzeit und damit deren Energie, sodaß die kohärente Rückstreuung ohne vorherige Selektion wellenlängenabhängig untersucht werden kann.



Abbildung 3.76: Experimenteller Aufbau zur Untersuchung der kohärenten Rückstreuung von UCNs

Erste Messungen zur kohärenten Rückstreuung von UCNs scheiterten am Mangel einer geeigneten Möglichkeit zur ortsauflösenden Detektion ultrakalter Neutronen. Sowohl eine Imageplate als auch ein mit einer CCD-Kamera ausgelesener ZnS-Szintillator zeigten eine zu große Empfindlichkeit auf im Reaktor allgegenwärtige Gammastrahlung, die weder ausreichend abgeschirmt noch nachträglich in den Daten diskriminiert werden konnte. Aufgrund der sehr geringen zur Verfügung stehenden Intensität von ultrakalten Neutronen besteht daher Bedarf an einer möglichst untergrundfreien Detektion bei guter Ortsauflösung auf einer hinreichend großen Fläche.

Im Rahmen einer weiteren Doktorarbeit wird in der Arbeitsgruppe von Prof. D.Dubbers derzeit ein geeigneter ortsauflösender Detektor für kalte und ultrakalte Neutronen entwickelt, sodaß es vielleicht möglich wird auf dieser Basis weitere Experimente zur kohärenten Rückstreuung und auch zur Andersonlokalierung von ultrakalten Neutronen durchzuführen.

Kapitel 4

Hochfrequenzinduzierte Polarisation

4.1 Polarisation ultrakalter Neutronen

4.1.1 Konventionelle Polarisatoren

Neutronen wechselwirken mit einem äußeren Magnetfeld aufgrund ihres magnetischen Moments $\vec{\mu} = \gamma \cdot \vec{S}$, das mit einem gyromagnetischen Verhältnis von $\gamma = -183.25$ MHz/T an ihren Spin $\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$ koppelt. In einem statischen Magnetfeld hat das Neutron als Spin-1/2-Teilchen zwei mögliche Eigenzustände, sodaß ein unpolarisierter Neutronenstrahl als inkohärente Mischung von 50 % Neutronen mit zum Magnetfeld parallelem (Spin Up) und 50 % mit antiparallelem Spin (Spin Down) beschrieben werden kann. Die Zeeman-Aufspaltung ihrer kinetischen Energie im Magnetfeld $\Delta E_{kin} = 2\mu B =: E_M$ führt dazu, daß die Spin-Up-Komponente aufkosten ihrer kinetischen an potentieller Energie $E_M/2 = \mu B$ gewinnt, sodaß sie beim Eintritt in das Magnetfeld abgebremst wird. Die Spin-Down-Komponente verliert die gleiche potentielle Energie und wird beschleunigt. Die unterschiedlich schnelle Ausbreitung der beiden Spinkomponenten im Magnetfeld ist als longitudinaler Stern-Gerlach-Effekt bekannt. Ist die potentielle magnetische Energie $E_M/2$ größer als die kinetische Energie E_o der Neutronen außerhalb des Magnetfeldes, so kann die Spin-Up-Komponente nicht in das Magnetfeld eindringen, sondern wird reflektiert, und der verbleibende transmittierte Anteil des ursprünglich unpolarisierten UCN-Strahls ist Spin-Down-polarisiert.

Diese spinabhängige Wechselwirkung von Neutronen mit einem äußeren Magnetfeld führt auch zur spinabhängigen Wechselwirkung von Neutronen mit den Kernspins eines magnetischen Materials, welche als magnetische Streuung bezeichnet wird. Sind die Kernspins im Material unkorreliert zueinander in beliebige Richtungen ausgerichtet, so sehen ultrakalte Neutronen im Mittel keinen Beitrag eines magnetischen Potentials zum effektiven Fermipotential des Materials, das von kohärent elastischer Streuung mit den Kernen herrührt:

$$V_{\text{eff}}(\vec{r}) = V_F(\vec{r}) + 0 = \frac{2\pi\hbar^2}{m} [a_c \cdot n(\vec{r})] + 0.$$

Sind die Kernspins jedoch ausgerichtet, so enthält das Gesamtpotential einen spinabhängigen Beitrag aufgrund der jetzt kohärenten magnetischen Wechselwirkung der UCNs mit den Kernspins. Das gesamte effektive Potential lautet dann

$$V_{\text{eff}}(\vec{r}) = V_F(\vec{r}) \pm V_m(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} [(a_c \pm a_m) \cdot n(\vec{r})].$$

Das magnetische Potential V_m entspricht der Differenz des effektiven Potentials einer Gesamtheit von ausgerichteten Kernspins zum Potential des entsprechenden Materials, in dem die Kernspins zufällig orientiert sind. Die dadurch definierten magnetischen Streulängen a_m einzelner Materialien sind ebenso wie die kohärent elastischen Streulängen a_c experimentelle Größen und finden sich in Tabellen [47].

Die spinabhängige Wechselwirkung von Neutronen mit magnetischen Materialien wurde erstmals von Pendlebury et. al. [42] ausgenutzt um ultrakalte Neutronen zu polarisieren. Die Kernspins eines magnetischen Materials, welches in einer dünnen Schicht präpariert wird, lassen sich während der Präparation oder auch nachträglich in einem äußeren Magnetfeld vollständig ausrichten. Das Gesamtpotential einer solchen Schicht für Neutronen ist spinabhängig, sodaß sich hiermit ein UCN-Strahl eines bestimmten Wellenlängenbereichs zu ca. 90 % polarisieren läßt. Da alle magnetischen Materialien ultrakalte Neutronen verhältnismäßig stark absorbieren, werden sie üblicherweise in einer relativ dünnen Schicht (bis zu 10 μ m) aufgebracht. Zudem ist aus energetischen Gründen die Magnetisierung solch einer dünnen Schicht stabiler als die des entsprechenden Festkörpers, sodaß sie auch ohne äußeres Magnetfeld erhalten bleiben kann. Im Experiment hat sich jedoch gezeigt, daß auch in diesen dünnen Folien die Ausrichtung der Spins ohne Anwesenheit eines äußeren Magnetfeldes teilweise verlorengeht. Sind die verbleibenden Weiss'schen Bezirke (kleine Bereiche, in denen die Spins ausgerichtet sind) größer als die Wellenlänge ultrakalter Neutronen, so sehen diese zwar lokale Magnetfelder, die zu Reflexion von UCNs, nicht jedoch zu einer effektiven Polarisation des Strahls führen. Deshalb wurden diese Folien im Experiment immer in einem Joch von zwei Permamentmagneten gehalten, dessen Magnetfeld in der Ebene der Folie lag und etwa 200 μ T betrug.

Ein intrinsischer Nachteil dieser *konventionellen* Methode ultrakalte Neutronen zu polarisieren ist ihre Wirkung als Spinfilter. Die gewünschte Spinrichtung wird aus dem unpolarisierten Strahl ausselektiert, die andere herausgefiltert, was zu einem Verlust von 50 % der Gesamtintensität führt. Unser im folgenden beschriebenes Experiment soll zeigen, daß es prinzipiell möglich ist mithilfe einer geeigneten Magnetfeldkonfiguration einen ursprünglich unpolarisierten Strahl ultrakalter Neutronen vollständig und verlustfrei zu polarisieren. Während eine Spinkomponente des unpolarisierten Strahls ihre Orientierung beibehält, wird die entgegengesetzte gerade um 180° gedreht, sodaß der UCN-Strahl die Magnetfeldkonfiguration vollständig polarisiert verläßt, ohne daß eine Spinkomponente aus dem Strahl herausgefiltert wurde.

4.1.2 Hochfrequenzinduzierte Polarisation

Die Zeeman-Aufspaltung der kinetischen Energie im Magnetfeld $\Delta E_{kin} = \vec{\mu} \cdot \vec{B}$ führt allgemein dazu, daß sich Neutronen mit entgegengesetzt orientierten Spins in der Magnetfeldregion unterschiedlich schnell fortbewegen. Senkrecht zum Magnetfeld polarisierte Neutronen führen eine Lamorpräzession mit der Kreisfrequenz $\omega = \gamma B$ aus, d.h. ihr Spin rotiert um die Richtung des Magnetfeldes.

In der Überlagerung eines homogenen statischen Magnetfeldes B_o und eines senkrecht dazu rotierenden Feldes $B_1(t)$ rotiert der Neutronenspin um das resultierende Feld, was zu beliebig komplizierten Bewegungen des Spins führt. Rotiert das B_1 -Feld jedoch mit der Lamorfrequenz des Neutronenspins im statischen B_o -Feld, so 'sieht' das Neutron nur noch ein statisches B_1 -Feld senkrecht zu seinem Spin, um das es mit der sogenannten Rabi-Frequenz

$$\omega_R = \gamma B_1$$

präzediert. Ist das zeitlich veränderliche B_1 -Feld räumlich begrenzt, so hängt die Präzessionsphase, d.h. der Winkel, um den sich der Neutronenspin dreht, von dessen Aufenthaltszeit im B_1 -Feld ab. Im statischen B_o -Feld verschieden orientierte Spins bewegen sich unterschiedlich schnell und werden folglich im rotierenden B_1 -Feld um unterschiedliche Winkel gedreht. Durch geschickte Wahl des Magnetfeldes B_o und des Magnetfeldintegrals $\int B_1(t) l dt$ ist es möglich, daß die beiden im statischen B_o -Feld zueinander antiparallelen Spinkomponenten sich im räumlich begrenzten Hochfrequenzfeld $B_1(t)$ jeweils gerade so weit drehen, daß sie beim Verlassen desselben in dieselbe Richtung weisen und ein Neutronenstrahl definierter Geschwindigkeit somit zu 100 % polarisiert ist.

Quantenmechanische Beschreibung des Spins im Magnetfeld

Die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Zustandes ψ wird durch die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = H(t)\psi(\vec{r},t)$$

mit dem Hamiltonoperator $H(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(t)$ bestimmt. Sie läßt sich allgemein mithilfe des Zeitentwicklungsoperators $U_{(t,t_o)}$ beschreiben

$$\psi(t) = U_{(t,t_o)}\psi(t_o) \quad ,$$

für den die Operator-Schrödingergleichung

$$i\hbar U(t,t_o) = HU(t,t_o)$$

gilt, in der der Hamiltonoperator zeitunabhänigig ist. Die potentielle Energie V(t) eines magnetischen Moments in einem zeitlich veränderlichen Magnetfeld B(t) ist durch

$$V(t) = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}(t)$$

gegeben. Die Wechselwirkung eines Spins mit einem Magnetfeld ist unabhängig von seiner kinetischen Energie. Diese bestimmt lediglich die Aufenthaltsdauer des Spins in einem räumlich begrenzten Magnetfeld, sodaß zunächst ein ruhender Spin im zeitabhängigen Magnetfeld betrachtet werden kann. Der Hamiltonoperator lautet dann

$$H(t) = V(t) = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}(t)$$

mit dem magnetischen Moment $\vec{\mu} = \gamma \cdot \vec{S} = \gamma \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$. Die Komponenten des Spins \vec{S} sind durch die Pauli-Spinmatrizen $\sigma_{x,y,z}$ definiert

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \left[\left(\begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{cc} 0 & -i \\ i & 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array} \right) \right],$$

sodaß der Hamiltonoperator die allgemeine Form

$$H = \gamma \frac{\hbar}{2} \left(\begin{array}{cc} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{array} \right)$$

hat. Besteht das Magnetfeld in einer Überlagerung eines konstanten B_o -Feldes in z-Richtung und eines senkrecht dazu in der xy-Ebene rotierenden Hochfrequenzfeldes $B_1(t)$, so ergibt sich mit

$$\vec{B}(t) = (B_1 \cos(\omega t), B_1 \sin(\omega t), B_o)$$

für den Hamiltonoperator

$$H(t) = \gamma \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}(t) = \gamma \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} B_o & B_1 e^{-i\omega t} \\ B_1 e^{i\omega t} & -B_o \end{pmatrix}.$$

Der Zeitentwicklungsoperator U(t) des Spins im Laborsystem lautet

$$U(t) = U^{rot}(t)U_{rot}(t) = \begin{pmatrix} \left(\cos\left(\frac{\omega_2}{2}t\right) - ig\sin\left(\frac{\omega_2}{2}t\right)\right)e^{-i\frac{\omega}{2}t} & -ic\sin\left(\frac{\omega_2}{2}t\right)e^{-i\left(\frac{\omega}{2}t - \phi\right)} \\ -ic\sin\left(\frac{\omega_2}{2}t\right)e^{i\left(\frac{\omega}{2}t - \phi\right)} & \left(\cos\left(\frac{\omega_2}{2}t\right) + ig\sin\left(\frac{\omega_2}{2}t\right)\right)e^{i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix}.$$

Die Frequenz

$$\omega_2 = \sqrt{(\gamma B_o - \omega)^2 + (\gamma B_1)^2} = \sqrt{d^2 + (\gamma B_1)^2}$$

entspricht der Kreisfrequenz der Spinrotation im gesamten im rotierenden Koordinatensystem effektiv wirkenden Magnetfeld. Die Abkürzungen

$$g = \frac{\gamma B_0 - \omega}{\omega_2}$$
 und $c = \frac{\gamma B_1}{\omega_2}$

entsprechen dem Anteil des statischen bzw. des Hochfrequenzfeldes am im rotierenden Koordinatensystem effektiv wirkenden Magnetfeld. Eine mathematische Herleitung dieses Zeitentwicklungsoperators befindet sich im Anhang A. Mithilfe dieses Operators U(t) läßt sich die zeitliche Entwicklung eines Zustandes $\psi(t)$ oder auch eines Zustandsgemischs $\rho(t)$ vollständig beschreiben.

$$\psi(t) = U_{(t,t_o)}\psi(t_o) \quad ; \quad \rho(t) = U_{(t,t_o)}\rho(t_o)$$

Für die interessierende Größe des Experiments, nämlich die Polarisation P_z eines Strahls in z-Richtung nach Einwirkung des HF-Feldes über eine Zeit τ , ergibt sich

$$P_z = \langle \sigma_z \rangle = \psi_{t=0}^* U_{(\tau)}^* \sigma_z U_{(\tau)} \psi_{t=0} .$$

Ist der Strahl beispielsweise zum Zeitpunkt t = 0 Spin-Up-polarisiert, so gilt mit der Rabi-Phase $\Phi_R = \omega_R \tau = \gamma B_1 \tau$

$$\psi_{(t=0)} = \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} \implies P_z = \frac{\beta^2 + \cos\left(\gamma B_1 \tau \sqrt{1+\beta^2}\right)}{1+\beta^2} = \frac{\beta^2 + \cos\left(\Phi_R \sqrt{1+\beta^2}\right)}{1+\beta^2}$$

Der sogenannte Detuning -Parameter

$$\beta = \frac{\gamma B_o - \omega}{\gamma B_1}$$

gibt das Verhältnis des im mit der Frequenz ω rotierenden Koordinatensystem nicht wegtransformierten B_o -Feldanteils zu B_1 an und ist damit ein direktes Maß für die relative Verstimmung der HF-Frequenz gegenüber der Lamorfrequenz des Spins im statischen B_o -Feld. Die Polarisation P_z zeigt als Funktion der Frequenz des HF-Feldes ein Resonanzverhalten: Bei der Lamorfrequenz des Spins im statischen B_o -Feld $\omega = \omega_L = \gamma B_o$ wird $\beta = 0$ und die Polarisation mit

$$P_z(\beta = 0) = \cos\left(\Phi_R\right)$$
maximal und allein durch die Rabi-Phase Φ_R gegeben. In unserem Strahlexperiment entspricht die Einwirkzeit τ des Hochfrequenzfeldes auf den Neutronenspin der Durchflugszeit des Neutrons mit der Geschwindigkeit v durch die räumlich begrenzte HF-Feldregion der Länge L

$$\tau = \frac{L}{v} = \frac{Lm}{p} = \frac{Lm\lambda}{h} = \frac{Lm}{\sqrt{2mE_{kin}}}$$

Ein zum Zeitpunkt t=0 unpolarisierter UCN-Strahl besteht im statischen B_o -Feld aus einer inkohärenten Mischung von 50 % Spin-Up- und 50 % Spin-Down-polarisierten Neutronen. Damit läßt sich die Polarisation des Strahls nach der Einwirkung des HF-Feldes als inkohärente Überlagerung der zeitlichen Entwicklungen der Polarisation beider Anteile darstellen, wobei sich die Einwirkzeit τ des HF-Feldes für die beiden Spinkomponenten unterscheidet. Mit $\Phi_R^0 = \gamma B_1 L \sqrt{m/2E_{kin}}$ und den Rabi-Phasen für die beiden Spinkomponenten

$$\Phi_R^{\uparrow} = \frac{\Phi_R^0}{\sqrt{1 - E_M/2E_o}} \quad ; \quad \Phi_R^{\downarrow} = \frac{\Phi_R^0}{\sqrt{1 + E_M/2E_o}}$$

ergibt sich für die Polarisation

$$P_z = \frac{\frac{1}{2}\cos\left(\Phi_R^{\uparrow}\sqrt{1+\beta^2}\right) - \frac{1}{2}\cos\left(\Phi_R^{\downarrow}\sqrt{1+\beta^2}\right)}{1+\beta^2}$$

Diese zeigt als Funktion der Frequenz des HF-Feldes das gleiche Resonanzverhalten wie die Entwicklung eines ursprünglich polarisierten Strahls: Bei der Lamorfrequenz des Spins im statischen B_o -Feld $\omega = \omega_L = \gamma B_o$ wird $\beta = 0$ und die Polarisation mit

$$P_{z}(\beta=0) = \frac{1}{2}\cos\left(\Phi_{R}^{\dagger}\right) - \frac{1}{2}\cos\left(\Phi_{R}^{\downarrow}\right)$$

maximal. Im Resonanzfall ist die Gesamtpolarisation allein durch die Rabi-Phasen Φ_R^{\uparrow} und Φ_R^{\downarrow} der Komponenten Spin-Up und Spin-Down, d.h. für eine feste kinetische Energie E_{kin} der Neutronen durch die Magnetfeldstärke B_o und das Hochfrequenzfeldintegral $\int_L B_1 ldl$ gegeben. Ein zur Zeit t = 0 unpolarisierter Strahl geht durch die Wechselwirkung mit dem HF-Feld in eine inkohärente Mischung von vier möglichen Endzuständen über (Abb.4.1).

$$n_{u}(E_{k0}, 0) \rightarrow n_{u}(E_{k0} - E_{M} / 2, E_{M} / 2)$$

$$w(u \Rightarrow u)$$

$$n_{u}(E_{k0} - E_{M} / 2, E_{M} / 2) \rightarrow n_{u}(E_{k0}, 0)$$

$$n_{d}(E_{k0} - E_{M} / 2, -E_{M} / 2) \rightarrow n_{d}(E_{k0} - E_{M} , 0)$$

$$w(u \Rightarrow d)$$

$$w(d \Rightarrow d)$$

$$n_{d}(E_{k0} + E_{M} / 2, -E_{M} / 2) \rightarrow n_{d}(E_{k0}, 0)$$

$$n_{d}(E_{k0} + E_{M} / 2, -E_{M} / 2) \rightarrow n_{d}(E_{k0}, 0)$$

$$n_{d}(E_{k0} + E_{M} / 2, -E_{M} / 2) \rightarrow n_{d}(E_{k0}, 0)$$

$$w(d \Rightarrow u)$$

$$w(d \Rightarrow u)$$

 ∇B_0 B_1 ∇B_0

 $\omega_{B_1} = \gamma B_0$

Abbildung 4.1: Mögliche Endzustände der Spins nach Verlassen des Magnetfeldes

Deren Beiträge zur Endpolarisation sind durch die energetischen Verhältnisse an den Übergängen zwischen B_o -Feld und magnetfeldfreiem Raum gegeben (siehe Abb.4.2). Die Spin-Down-Komponente gewinnt beim Eintritt in das B_o -Feld kinetische Energie und wird beim Austritt auf ihre urspüngliche Enerige abgebremst, bzw. nach einem π -Spin-Flip ein zweites Mal beschleunigt, sodaß sie auf jeden Fall durch die Magnetfeldkonfiguration gelangt und zur Endpolarisation beiträgt. Die Spin-Up-Komponente mit der kinetischen Energie E_o gewinnt beim Eintritt in das B_o -Feld die potentielle Energie $E_{pot} = E_M/2$, die ihr als kinetische Energie verloren geht. Beim Austritt aus dem B_o -Feld erhält sie ihre ursprüngliche kinetische Energie zurück. Wurde sie durch das HF-Feld in den Spin-Down-Zustand geflippt, so wird sie beim Austritt aus dem B_o -Feld ein zweites Mal abgebremst. D.h. ein ursprünglicher Spin-Up-Zustand mit $E_o < E_M/2$ wird beim Eintritt in das Magnetfeld reflektiert und trägt nicht zur Endpolaristion des Strahls bei. Der Anteil des ursprünglichen Spin-Up-Zustandes mit $E_M/2 < E_o < E_M$, der durch das HF-Feld in den Spin-Down-Zustand überführt wird, wird am Ende der B_o -Feldregion reflektiert und trägt auch nicht zur Endpolaristion des Strahls bei.



Abbildung 4.2: Mögliche Endzustände der Spins nach Verlassen des Magnetfeldes

In Resonanz ergibt sich damit für die Übergangswahrscheinlichkeiten W zwischen den reinen Spinzuständen 'Spin-Up' und 'Spin-Down' aufgrund der Rabi-Oszillation:

$$W_{\uparrow\uparrow} = \cos^2 \frac{\Phi_R^{\uparrow}}{2} \iff E_o > E_M/2$$
$$W_{\uparrow\downarrow} = \sin^2 \frac{\Phi_R^{\uparrow}}{2} \iff E_o > E_M$$
$$W_{\downarrow\downarrow} = \cos^2 \frac{\Phi_R^{\downarrow}}{2}$$
$$W_{\downarrow\uparrow} = \sin^2 \frac{\Phi_R^{\downarrow}}{2}$$

Die Polarisation P_z eines UCN-Strahls ist durch die Wahrscheinlichkeiten $W_{\uparrow}, W_{\downarrow}$ für das Auftreten beider Spin-Zustände zu

$$P_z = W_{\uparrow} - W_{\downarrow}$$

gegeben, und lautet für die oben unterschiedenen Energiebereiche:

$$P_{z} = \frac{1}{2} \left(\cos^{2} \frac{\Phi_{R}^{\uparrow}}{2} - \sin^{2} \frac{\Phi_{R}^{\uparrow}}{2} \right) - \frac{1}{2} \left(\cos^{2} \frac{\Phi_{R}^{\downarrow}}{2} - \sin^{2} \frac{\Phi_{R}^{\downarrow}}{2} \right) = \frac{1}{2} \left(\cos \Phi_{R}^{\uparrow} - \cos \Phi_{R}^{\downarrow} \right) \iff E_{o} > E_{M}$$

$$P_{z} = \frac{\cos^{2} \frac{\Phi_{R}}{2} + \sin^{2} \frac{\Phi_{R}}{2} - \cos^{2} \frac{\Phi_{R}}{2}}{\cos^{2} \frac{\Phi_{R}}{2} + \sin^{2} \frac{\Phi_{R}}{2} + \cos^{2} \frac{\Phi_{R}^{\downarrow}}{2}} = \frac{1 + \cos \Phi_{R}^{\uparrow} - 2 \cos \Phi_{R}^{\downarrow}}{3 + \cos \Phi_{R}^{\uparrow}} \iff E_{M}/2 < E_{o} \le E_{M}$$

$$P_z = \sin^2 \frac{\Phi_R^*}{2} - \cos^2 \frac{\Phi_R^*}{2} = -\cos \Phi_R^{\downarrow} \qquad \Longleftrightarrow E_o \le E_M/2$$

- $E_o > E_M$: Alle UCNs passieren die Magnetfeldkonfiguration, sodaß der Strahl unabhängig von seiner Polarisation immer die volle ursprüngliche Intensität behält.
- $E_M/2 < E_o \leq E_M$: Ursprüngliche Spin-Up-Neutronen werden am Potential des statischen Magnetfeldes nur dann reflektiert, wenn sie im HF-Feld in den Spin-Down-Zustand übergehen, sodaß die Intensität eines nach Einwirkung des HF-Feldes Spin-Up-polarisierten Strahls die volle Intensität, ein Spin-Down-polarisierter Strahl dagegen nur die halbe Intensität des ursprünglich unpolarisierten Strahls besitzt.
- $E_o \leq E_M/2$: Ursprüngliche Spin-Up-Zustände werden am Potential des statischen Magnetfeldes reflektiert, sodaß die Polarisation das Strahls nach Einwirkung des HF-Feldes der eines ursprünglich Spin-Down-polarisierten Strahls entspricht, wobei die Intensität die Hälfte der Intensität des ursprünglich unpolarisierten Strahls beträgt.

Abb. 4.3 zeigt für den interessantesten Fall, $E_o > E_M$, die Polarisation als Funktion des Energieverhältnisses E_M/E_o und der Rabi-Phase $\Phi_R^o/2\pi$, bzw. entsprechend als Funktion der Feldstärken des statischen Magnetfeldes B_o und des HF-Feldes B_1 für eine feste kinetische Energie E_o und definierten Wirkungsbereichs des Hochfrequenzfeldes L.



Abbildung 4.3: Polarisation nach Verlassen der Magnetfeldregion

Das Verschwinden des Gradienten der Polarisation bezüglich E_M und Φ_R^o liefert die notwendige Bedingung für die Extremwerte der Polarisation, nämlich

 $\Phi_R^{\uparrow} = n\pi \quad ; \quad \Phi_R^{\downarrow} = m\pi \quad ; \quad n > m \quad ; \quad n, m \in N \quad \forall \quad E_o > E_M \, .$

Mit Hilfe der zweiten Ableitung lassen sich Minima, Maxima und Sattelpunkte der Polarisation bestimmen:

$$\begin{array}{ll} n = \text{gerade} &, & m = \text{ungerade} & \Longrightarrow & P_z = 1 \\ n = \text{ungerade} &, & m = \text{gerade} & \Longrightarrow & P_z = -1 \\ n, m = \text{gerade} & \text{oder} & n, m = \text{ungerade} & \Longrightarrow & \text{Sattelpunkt} & P_z = 0 \end{array}$$

Wird also z.B. die Spin-Up-Komponente eines Strahls beliebig oft um 2π geflippt, die Spin-Down-Komponente dagegen um ein ungeradzahliges Vielfaches von π , so befinden sich beide Komponenten nach Verlassen des HF-Feldes im Spin-Up-Zustand und der Strahl hat die Polarisation P = 1. Entsprechendes gilt für die Entstehung der Endpolarisation P = 0 bzw. P = -1. Jedem Paar (n,m) entspricht eine Magnetfeldkonfiguration mit

$$E_M = \frac{n^2 - m^2}{n^2 + m^2} \cdot 2E_o \quad ; \quad \Phi_R^o = n\pi \sqrt{\frac{2m^2}{n^2 + m^2}} \, .$$

4.2 Das Experiment

Das Experiment wurde ebenfalls am Testleiter der UCN-Quelle am Institut-Laue-Langevin in Grenoble durchgeführt. Ziel des Experiments ist zu zeigen, daß es prinzipiell möglich ist einen zunächst unpolarisierten UCN-Strahl mit Hilfe einer geeigneten Magnetfeldkonfiguration vollständig und verlustfrei zu polarisieren. Zudem wird gezeigt, daß der damit verbundene Austausch von Photonen sichtbar zu einer Verschiebung der Energie der ultrakalten Neutronen führt.

In Kapitel 4.1.2 wurde eine theoretische Beschreibung der hochfrequenzinduzierten Polarisation unter idealen Bedingungen, d.h. für eine feste Neutronenenergie E_0 und ideal homogene Magnetfelder, dargestellt. Im realen Experiment wird die erreichbare Polarisation jedoch sowohl durch eine endliche Breite der Energieverteilung und eine Divergenz des Neutronenstrahls als auch durch Inhomogenitäten der Magnetfelder begrenzt. Um im Experiment maximal mögliche Polarisation zu erreichen, muß der experimentelle Aufbau daher zunächst die Selektion eines schmalen Wellenlängenbandes aus dem viel zu breiten Spektrum der die Turbine verlassenden ultrakalten Neutronen ermöglichen. Ferner muß für eine hinreichende Homogentiät des B_o -Feldes im Bereich der Hochfrequenzspule und eine geringe Variation des von den Neutronen gesehenen Wegintegrals des Hochfrequenzfeldes $\int_L B_1 l dl$ gesorgt werden.

Abb. 4.4 zeigt schematisch den Aufbau des Experiments, die einzelnen Komponenten werden im folgenden genauer beschrieben. Am Ende des Kapitels wird die im Experiment erreichbare Polarisation unter den tatsächlichen Bedingungen, d.h. unter Berücksichtigung sowohl der endlichen Breite des selektierten Wellenlängenbandes als auch der Inhomogenitäten des statischen B_o -Feldes und des HF-Feldintegrals berechnet und mit ersten Meßergebnissen verglichen.

4.2.1 Der experimentelle Aufbau

Aus dem Wellenlängenspektrum der die Turbine verlassenden ultrakalten Neutronen wird zunächst mithilfe eines Energieselektors ein geeignetes Wellenlängenband ausselektiert, welches dann in die Magnetfeldkonfiguration gelangt. Die Polarisation des transmittierten Strahls wird mithilfe eines Spinflippers und eines konventionellen Analysators, der in Kap.4.1.1 bereits kurz beschrieben wurde, bestimmt. Der nachfolgende Chopper und die definierte Flugstrecke zum Detektor ermöglichen eine Bestimmung der longitudinalen Geschwindigkeitskomponente der UCNs.



Abbildung 4.4: Experimenteller Aufbau zur Messung der hochfrequenzinduzierten Polarisation von UCNs

Der Energieselektor

Der verwendete Energieselektor [44] besteht im wesentlichen aus einem zylinderförmigen Vakuumgefäß aus Edelstahl mit einem Durchmesser von ca. 50 cm und einem absorbierenden Deckel, dessen Höhe Δh über dem Zylinderboden variiert werden kann. Dieses Gefäß wird in einer definierten Höhe h über dem eigentlichen Neutronenstrahl positioniert. In seinem Boden befinden sich zwei Löcher mit Durchmessern von 68 mm, sodaß es über zwei gekrümmte Neutronenleiterelemente mit dem übrigen Strahlaufbau verbunden werden kann. Die aus der Turbine kommenden Neutronen werden durch die gekrümmten Rohre senkrecht nach oben geleitet. UCNs mit zu geringer kinetischer Energie $E_o < mgh$ können gegen das Gravitationsfeld der Erde nicht weit genug ansteigen um das Vakuumgefäß zu erreichen. UCNs mit zu hoher kinetischer Energie treffen mit großer Wahrscheinlichkeit auf den Deckel des Gefäßes und werden dort absorbiert. Die Gesamtenergie der verbleibenden Neutronen liegt somit im Bereich $E_{tot} = [mgh; mg(h + \Delta h)]$ entsprechend einer kinetischen Energie von $E_{kin} = [0; mg\Delta h]$. Fallen sie im Gravitationsfeld wieder auf die ursprüngliche Strahlhöhe zurück, so liegt ihre kinetische Energie im gewünschten Bereich $E_{kin} = [mgh; mg(h + \Delta h)]$.

Diese einfache Betrachtung gilt zunächst nur für sich longitudinal zum Neutronenleiter ausbreitende Neutronen. UCNs verlassen jedoch die Turbine mit einer nahezu isotropen Winkelverteilung. Die Krümmung der Neutronenleiter zum Energieselektor ist hinreichend schwach, sodaß sich die Winkelverteilung der Neutronen hier nicht merklich ändert. Während des Anstiegs der Neutronen gegen das Gravitationsfeld der Erde verlieren sie an longitudinaler Geschwindigkeit, sodaß die Divergenz des Neutronenstrahls wie die eines Springbrunnens zunimmt. Daher können auch höherenergetische Neutronen einige Male von den Seitenwänden des Selektors reflektiert werden ohne auf den absorbierenden Deckel zu treffen und den Selektor mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit durch den Ausgang wieder verlassen. Durch Aufrauhen der Seitenwände des Gefäßes kann dieser Effekt verringert werden. Ultrakalte Neutronen werden daran nicht spekular sondern diffus reflektiert, sodaß die Wahrscheinlichkeit auf den absorbierenden Deckel zu treffen für hinreichend schnelle Neutronen zunimmt. Ferner kann der Selektor in einem Speichermodus betrieben werden. Neutronen, die das Vakuumgefäß erreichen, werden zunächst durch Verschließen der Löcher im Boden daran gehindert, dieses wieder zu verlassen, sodaß die Zahl der Reflexionen an den diffus streuenden Seitenwänden und damit die Wahrscheinlichkeit für hinreichend schnelle Neutronen auf den Deckel zu treffen weiter zunimmt. Nach Öffnen des Ausgangs fallen die verbleibenden UCNs im Gravitationsfeld auf die ursprüngliche Strahlhöhe zurück, wobei die Divergenz des Strahls wieder abnimmt.

Aus Intensitätsgründen haben wir uns im Rahmen dieses ersten Experiments für den Betrieb des Selektors im Durchflußmodus entschieden, obwohl aufgrund der größeren spektralen Breite eine geringere Polarisation des UCN-Strahls zu erwarten ist. Das Vakumgefäß wurde in einer Höhe von h = 1.32 m über dem übrigen Strahlniveau positioniert, die Höhe des absorbierenden Deckels über dem Boden des Gefäßes betrug $\Delta h = 33.4$ cm. Um die Rauhigkeit der reflektierenden Seitenwände des Selektors zu erhöhen, wurden diese mit diffus streuendem Fomblin-Fett bestrichen. Unter der Annahme, daß die Winkelverteilung der UCNs am Ausgang des Selektorgefäßes isotrop ist und sich durch die gekrümmten Leiterelemente nicht wesentlich ändert, läßt sich die Winkelverteilung nach dem Fallen der UCNs im Gravitationsfeld auf die ursprüngliche Strahlhöhe berechnen. Die genannte Fallhöhe der UCNs führt zu einem Cut-Off der Winkelverteilung bei einem Winkel von etwa 40° relativ zur Strahlachse.



Abbildung 4.5: Longitudinales Wellenlängenspektrum von UCNs nach Energieselektion a: theoretisch, b: gemessen

Abb.4.5a zeigt die unter oben genannten Annahmen berechneten longitudinalen Wellenlängenverteilungen der durch den Selektor ausselektierten UCNs. Die allein relevante longitudinale Komponente der Neutronengeschwindigkeit bestimmt deren Aufenthaltsdauer im Hochfrequenzfeld. Ferner entspricht sie der von uns in der Flugzeitmessung zugänglichen Komponente, sodaß das so berechnete Spektrum direkt mit den in Abb.4.5b gezeigten Messungen verglichen werden kann. Der Betrieb des Selektors im Speichermodus liefert unter Vernachlässigung des Einflusses der gekrümmten Leiterelemente auf die Winkelverteilung das gestrichelt gezeichnete Spektrum mit einer relativen Halbwertsbreite von ca. 5%. Wird der Selektor im Durchflußmodus betrieben und eine Zunahme der Divergenz aufgrund der gekrümmten Leiterelemente berücksichtigt, so ist ein deutlich breiteres Spektrum zu erwarten. Die Verbreiterung des Spektrums zu kurzen Wellenlängen hin beruht auf der unter diesen Bedingungen größeren Wahrscheinlichkeit, daß schnelle Neutronen nicht auf den absorbierenden Deckel treffen sondern den Selektor durch den Ausgang verlassen. Die Verbreiterung zu langen Wellenlängen entspricht natürlich nicht einer Zunahme der Transmission von langsameren Neutronen, sondern ist eine Folge der zunehmenden Divergenz und damit abnehmenden longitudinalen Geschwindigkeitskomponente der Neutronen aufgrund der gekrümmten Leiterelemente. Der Vergleich der beiden Flächen unter den Kurven läßt zunächst keinen großen Intensitätsunterschied in beiden Spektren vermuten. Die hier nicht berücksichtigte Schließzeit des Selektors im Speichermodus führt hier jedoch zu einer im zeitlichen Mittel geringeren Intensität. Die Halbwertsbreite des selektierten Wellenlängenspektrums liegt weit unterhalb des Auflösungsvermögens des verwendeten Choppers, sodaß das wahre Spektrum (Abb.4.5b. durchgezogene Linie) durch eine entsprechende Entfaltung mit der Chopperöffnungsfunktion berechnet werden muß. Die mittlere Wellenlänge des selektierten Spektrums beträgt somit $\overline{\lambda} = 69.6$ nm, was einer mittleren Geschwindigkeit von $\overline{v} = 5.7$ m/s und einer mittleren kinetischen Energie von $\overline{E_o} = 167$ neV enspricht.

Das Magnetfeld

Die mittlere kinetische Energie der durch den Energieselektor ausselektierten Neutronen entspricht der Zeemanaufspaltung ihrer Energie E_M in einem Magnetfeld von ca 1.4 T. D.h. im uns interes-

sierenden Energiebereich $E_M/E_o \leq 1$ sollte es nach den theoretischen Berechnungen des letzten Kapitels möglich sein, das selektierte Wellenlängenband mithilfe eines statischen Magnetfeldes von $B_o \leq 1.4$ T und eines Hochfrequenzfeldintegrals von wenigen μ Tm vollständig zu polarisieren.

Ein statisches B_o -Feld dieser Stärke erzeugen wir mit dem in Kap.3.5.5 bereits erwähnten PERKI-NO, einer supraleitenden Spule mit 30 cm Länge, 8 cm Innen- und 13 cm Außendurchmesser. Das Gehäuse dieser Spule hat eine zur Spulenachse longitudinale warme Bohrung mit einem Innendurchmesser von 5 cm. Die Maße der Spule sind uns mit Toleranzen von 1/100 sehr genau bekannt, so daß wir das von ihr erzeugte Magnetfeld mit entsprechend hoher Genauigkeit berechnen können (Abb 4.6). Im zentralen Bereich weist dieses Feld über den Querschnitt der warmen Bohrung eine Homogenität der Größenordnung 10⁻³ auf.



Abbildung 4.6: Statisches Magnetfeld

Um auf einer Wegstrecke von wenigen Millimetern ein HF-Feldintegral bis zu einigen μ Tm zu erzeugen bedarf es einer HF-Feldstärke B_1 von der Größenordnung $B_1 \sim \cdot 10^{-4} \cdot B_o$. Damit das HF-Feld $B_1(t)$ mit der Lamorfrequenz der Spins im statischen Feld B_o zumindest über einen Teilbereich der Strahlquerschnittsfläche in Resonanz sein kann, darf die Inhomogenität des B_o -Feldes über diesen Bereich maximal von der gleichen Größenordnung 10^{-4} , besser noch von der Größenordnung 10^{-5} sein. Die Homogenität des B_o -Feldes wurde deshalb mithilfe einer Korrekturspule, bestehend aus einem Helmholtz-Spulenpaar im zentralen Bereich der Perkinospule erhöht.

Abb. 4.7 zeigt das Ergebnis einer Berechnung des korrigierten Feldes. Da dieses auf einem schmalen Ring mit konstantem Radius um die Spulenachse homogener als über einen kreisförmigen Ausschnitt gleicher Fläche ist, wurden statt einer HF-Spule im Zentrum des B_o -Feldes acht kleine Spulen, jede mit 5 Windungen, wie die Speichen eines Rades um die Spulenachse angeordnet,



Abbildung 4.7: Statisches Magnetfeld mit Korrekturspule

sodaß sie ein ringförmiges in sich geschlossenes HF-Feld ohne Außenfeld senkrecht zum statischen B_o -Feld erzeugen. Damit nur im Bereichen dieses ringförmigen HF-Feldes UNCs durch die Magnetfeldanordnung gelangen, besteht der Spulenkörper aus für UCNs undurchlässigem Kunststoff mit kleinen Fenstern zwischen den Spulen. Innerhalb dieses Rings fällt die Feldstärke einer solchen Spulenanordnung radial nach außen hin ab. Um dennoch zu gewährleisten, daß UCNs unabhängig von ihrer Flugbahn durch die Fenster überall das gleiche Wegintegral des HF-Feldes sehen, nimmt die Dicke des Spulenkörpers und damit der Wirkungsbereich des HF-Feldes radial nach außen hin zu.



Abbildung 4.8: Hochfrequenzspule

Abb. 4.8 zeigt schematisch die HF-Spulenkonfiguration. Auf einem Ring von 20 mm Durchmesser befinden sich 8 Fenster mit jeweils einer Höhe von 5 mm. Sie bilden eine für UCNs durchlässige Fläche von 196 mm², was 13.8 % der gesamten Querschnittsfläches des PERKINO-Strahlrohrs entspricht. Dazwischen befindet sich jeweils eine Spule mit 5 Wicklungen, für die in den Spulenkörper Führungsbohrungen eingearbeitet wurden.

Die Leistung, die in eine Hochfrequenzspule eingespeist werden kann, ist durch deren Induktivität begrenzt. Um diese möglichst gering zu halten, wurden die acht kleinen Spulen nicht alle in Reihe geschaltet, sondern nur jeweils vier Spulen über Kreuz. Die zwei Serien von jeweils 4 Spulen wurden dann parallel zueinander an die HF-Versorgung angeschlossen. Da die Spulen alle induktiv untereinander koppeln, ist dennoch sichergestellt, daß in den beiden parallelen Zweigen immer die gleichen Ströme fließen.

Damit die relativen Positionen von B_o -Feld, Korrekturspule und HF-Spule definiert und stabil sind, wurde der HF-Spulenträger in den Träger der Korrekturspulen eingepaßt. Dieser besteht aus einem Hohlzylinder von 28 mm Länge und 4.1 mm Dicke, der Außendurchmesser ist genau auf den Innendurchmesser des Perkinostrahlrohrs angepaßt. An der Außenseite des Zylinders befindet sich für jede Korrekurspule eine Nut, in der sich 4 Lagen zu je 17 Wicklungen befinden.

Die verbleibende Varianz des HF-Feldintegrals über verschiedene Wege der UCNs, die auf der Divergenz des Neutronenstrahls von 40° beim Durchtritt durch die Fenster des Spulenkörpers beruht, wurde mithilfe einer Monte-Carlo-Simulation zu $\frac{\sigma(B_1L)}{B_1L} = 0.1$ bestimmt. Abb.4.9 zeigt die Häufigkeitsverteilung der in diesem Aufbau auftretenden Wegintegrale $\int B_1 l dl$.



Abbildung 4.9: Häufigkeitsverteilung des Wegintegrals von UCNs durch die Hochfrequenzspule

Der Spinflipper

Um die Polarisation $P_z = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}}$ des UCN-Strahls nach Verlassen der Magnetfeldkonfiguration zu bestimmen, müssen die Spins um π geflippt werden können, bevor sie auf den Analysator treffen.

Allgemein folgt ein Spin der Richtungsänderung eines beliebigen Magnetfeldes B adiabatisch, d.h. behält immer die gleiche Orientierung relativ zu diesem bei, wenn die Richtungsänderung im Vergleich zur Präzession des Spins im gegebenen Feld langsam erfolgt. Bewegt sich also ein Neutron mit der Geschwindigkeit v durch eine Region mit einem Feldgradienten ∇B , so lautet die Bedingung für Adiabazität:

$$\mu \cdot v \cdot \left| \vec{\nabla} B \right| \ll \omega^2$$

Das durch die Überlagerung des horizontalen statischen B_o -Feldes von PERKINO und eines vertikalen Führungsfeldes erzeugte effektive Feld wird von ultrakalten Neutronen in jedem Fall als langsam veränderlich angesehen, sodaß sie dieser Richtungsänderung adiabatisch folgen, wobei sich auch ihre relative Spinstellung zueinander nicht ändert. D.h. ein polarisierter Strahl bleibt bei diesem adiabatischen Übergang polarisiert. Der nun senkrecht zur Strahlachse polarisierte Strahl trifft auf die ebenfalls senkrecht magnetisierte Analysatorfolie. Aufgrund ihrer geringen Geschwindigkeit v folgen UCNs jedem im Laborsystem zeitlich konstanten Magnetfeld adiabatisch, sodaß es nicht möglich ist, ihren Spin beispielsweise mithilfe eines Stromblatts, einer Methode, die bei kalten Neutronen standardmäßig angewendet wird, umzuklappen. Es gibt jedoch im Prinzip zwei Möglichkeiten, den Spin eines ultrakalten Neutrons umzudrehen. Neben der im Experiment zur Erzeugung der Polarisation verwendeten Resonanzmethode, die jedoch, wie beschrieben, nur in einem jeweils sehr schmalen Energiebereich funktioniert, ist dies die Methode des schnellen adiabatischen Spinflips. Sie wurde Egorov et. al. [18] erstmals auf ultrakalte Neutronen angewandt. Die Magnetfeldkonfiguration ist der der Resonanzmethode ähnlich. Sie ist durch die Überlagerung eines homogenen statischen Feldes mit einem Gradienten in der Richtung des einlaufenden Spins und eines senkrecht dazu oszillierenden Feldes gegeben. Die Frequenz ω des oszillierenden Feldes B_1 wird so gewählt, daß sie in Resonanz mit der Larmorpräzession der Neutronenspins um das statische Gradientenfeld etwa in der Mitte des gemeinsamen Wirkungsbereichs ist. Im mit dem oszillierenden Feld rotierenden Koordinatensystem wirkt auf den Spin ein effektives Magnetfeld

$$B_{\text{eff}} = \sqrt{(B_o - B_\omega)^2 + B_1^2}$$

wobei $B_{\omega} = \hbar \omega / \mu$ dem Anteil des statischen B_o -Feldes entspricht, der durch die Rotation des Koordinatensystems wegtransformiert wird. In diesem effektiven Magnetfeld rotiert der Spin mit der Frequenz

$$\omega_2 = \sqrt{(\gamma B_o - \omega)^2 + (\gamma B_1)^2}$$

Am Resonanzpunkt entspricht die Larmorfrequenz des Neutronenspins der eingestrahlten Frequenz von B_1 und es gilt $B_{\omega} = B_o$. Das effektive Feld besteht nur noch aus einem konstanten B_1 -Feld um das der Spin rotiert.



Abbildung 4.10: Effektives Magnetfeld im

rotierenden Koordinatensystem

Gilt außerhalb dieser Resonanz immer $|B_o - B_\omega| \gg B_1$, so ändert das effektive Feld $B_{\rm eff}$ im rotierenden Koordinatensystem sein Vorzeichen (siehe Abb. 4.10). Der Spin folgt dem effektiven Feld adiabatisch, wenn seine Larmorfrequenz in B_1 größer ist als die Geschwindigkeit, mit der sich das effektive Feld am Resonanzpunkt umkehrt, d.h. wenn die entsprechende Adiabazitätbedingung

 $\mu v \left| \vec{\nabla} B_{\text{eff}} \right| \ll \omega_2^2$

erfüllt ist. Da diese Adiabazitätsbedingung eine relativ schwache Bedingung ist und in einem Gradientenfeld für

verschiedene Geschwindigkeiten ein Resonanzpunkt zur Verfügung steht, kann auf diese Weise mit technisch geringem Aufwand der Spin von UCNs eines relativ breiten Geschwindigkeitsbandes geflippt werden. Zwei Weicheisenplatten in einem mittleren Abstand von ca. 20 cm und unter einem Winkel von ca 30° zueinander, die mit Stabmagneten kontinuierlich sich ändernder Länge verbunden werden, erzeugen ein Gradientenfeld $B_o(x)$ von 50 - 150 μ T. Die entsprechende Lamorfrequenz der Neutronenspins und damit die erforderliche Frequenz des rotierenden Magnetfeldes liegt im Radiofrequenzbereich und ist damit wesentlich einfacher zu handhaben als die zur Erzeugung der induzierten Polarisation nötigen Hochfrequenzfelder. Aufgrund des Skineffekts, der verhindert, daß ein oszillierendes Magnetfeld durch ein Metall dringt, kann diese Radiofrequenzspule nicht direkt auf das Strahlrohr gewickelt werden. Darum wird der Neutronenleiter im Bereich der Spule durch ein Stück Glasrohr unterbrochen. Da an Glas aufgrund seines niedrigen Fermipotentials nur sehr langsame Neutronen reflektiert werden, wurde das Glasrohr von R. Simon [51] in der von ihm gebauten Beschichtungsanlage von innen mit einer dünnen Schicht Kupfer besputtert.

Der Chopper und der Detektor wurden bereits in den Experimenten zur Andersonlokalisierung verwendet. Eine Beschreibung dieser Elemente und auch der Methode der Wellenlängenbestimmung mithilfe der Flugzeitmessung findet sich in Kap.3.5.

4.2.2 Die erreichbare Polarisation

Im Energiebereich $E_M/E_o \leq 1$ ist die Polarisation eines ursprünglich unpolarisierten monochromatischen UCN-Strahls nach der Wechselwirkung mit der betrachteten ideal homogenen Magnetfeldkonfiguration nach Kap.4.1.2 durch

$$P_{z} = \frac{\frac{1}{2}\cos\left(\Phi_{R}(u)\sqrt{1+\beta^{2}}\right) - \frac{1}{2}\cos\left(\Phi_{R}(d)\sqrt{1+\beta^{2}}\right)}{1+\beta^{2}}$$

mit den Rabi-Phasen der Spin-Up bzw Spin-Down-Komponente

$$\Phi_R(u) = \frac{\Phi_R^0}{\sqrt{1 - E_M/2E_o}} \quad ; \quad \Phi_R(d) = \frac{\Phi_R^0}{\sqrt{1 + E_M/2E_o}} \quad \text{mit} \quad \Phi_R^0 = \frac{\gamma B_1 L}{\sqrt{m/2E_{kin}}}$$

gegeben. Die entsprechende Polarisation unter Berücksichtigung einer endlichen Energiebreite des UCN-Strahls folgt durch Integration der für einen monochromatischen Strahl berechneten Polarisation über das normierte Energiespektrum $f(E_o)$ der Neutronen zu

$$P_{z} = \frac{\beta^{2} + \int_{0}^{\infty} \left(\frac{1}{2}\cos\left(\Phi_{R}(u)\sqrt{1+\beta^{2}}\right) + \frac{1}{2}\cos\left(\Phi_{R}(d)\sqrt{1+\beta^{2}}\right)\right)f(E_{o})dE_{o}}{1+\beta^{2}}$$

Werden die Inhomogenitäten von B_o -Feld und B_1 -Feldintegral inform von Rechteckverteilungen des Detuning-Parameters β und der B_1 -Feldstärke mit

$$\frac{\Delta\beta}{\overline{\gamma B_1}} = 0.1 \quad ; \quad \frac{\Delta B_1}{\overline{B_1}} = 0.1$$

berücksichtigt, so ergibt die entsprechende Integration das in Abb. 4.11 gezeigte Verhalten der Polarisation im uns interessierenden Bereich $E_M/E_o \leq 1$. Wie erwartet wird der Effekt der hoch-frequenzinduzierten Polarisation durch die Breite der Energieverteilung der UCNs und durch Inhomogentiäten der Magnetfelder vor allem bei zunehmender Anzahl von Spinrotationen im HF-Feld, d.h. mit wachsenden (n,m), stark unterdrückt.



Abbildung 4.11: Polarisation nach Verlassen des Magnetfeldes

4.3 Experimentelle Ergebnisse

Am Teststrahl der UCN-Quelle steht eine Intensität von ca. $5 \cdot 10^3$ ultrakalten Neutronen pro Sekunde und cm² zur Verfügung. Aufgrund der zahlreichen Verluste durch den apparativen Aufbau blieb uns im Experiment bei geöffnetem Chopper, bei ausgeschalteten Magnetfeldern und Spinflipper eine Zählrate von lediglich 290 n / 300 s $\simeq 1$ n/s.

Bei fest eingestelltem B_o - und B_1 - Feld wurde zunächst eine Resonanzkurve, d.h. die Neutronenzählrate als Funktion der HF-Frequenz, gemessen. Da diese Resonanzen mit einer relativen Breite von 10^{-3} sehr schmal sind, mußte die Resonanzfrequenz der Magnetfeldkonfiguration, gegeben durch die B_o -Feldstärke im Wirkungsbereich der Hochfrequenzspule, vor der Messung bis auf wenige Prozent bekannt sein. Die supraleitende Spule wurde im persistent-mode betrieben um die nötige Stabilität des B_o -Feldes zu garantieren. So konnte das B_o -Feld zwar nicht mit dieser hohen Genauigkeit auf einen festen Endwert eingestellt werden, es konnte jedoch mithilfe einer NMR-Magnetsonde im Wirkungsbereich der Hochfrequenzspule auf einige Promille genau gemessen werden. Die genaue B_1 -Feldstärke ist für das Auffinden der Resonanzfrequenz zunächst unerheblich und wurde im Bereich $B_1/B_0 \simeq 10^{-4}$, d.h. $B_1 \simeq 100 \,\mu$ T gewählt. Wird bei konstantem B_o -Feld die Hochfrequenz auf die so ermittelte Resonanzfrequenz eingestellt und die B_1 -Feldstärke variiert, so kann die zu maximaler Polarisation des UCN-Strahls führende B_1 -Feldstärke ermittelt werden. Bei dieser wird wieder eine Resonanzkurve als Funktion der Frequenz aufgenommen. Auf diese Weise kann iterativ das in gegebenem B_0 -Feld zu maximaler Polarisation führende $B_1(t)$ -Feld gefunden werden.

Abb.4.12 zeigt eine auf diese Weise gemessene Resonanzkurve bei ausgeschaltetem Spinflipper, sodaß nur Spin-Down-polarisierte Neutronen durch den Analysator und zum Detektor gelangen. Die gewählte B_1 -Feldstärke führt hier zu einem Spin-Up-polarisierten Strahl, sodaß die Zählrate im Resonanzpunkt minimal wird.



Abbildung 4.12: Resonanzkurve

Ein Fit der theoretischen Kurve an die gemessene ergibt eine Resonanzfrequenz von $\nu_{res} = 23.4932$ MHz, welche der Larmorfrequenz eines Neutronenspins im B_o -Feld von 0.80553 T entspricht. Dieser Wert stimmt mit dem zuvor mit der NMR-Sonde bestimmten Wert von $B_o \simeq 0.806$ T im Rahmen der Genauigkeit sehr gut überein. Bei dieser Resonanzfrequenz zeigt die Neutronenzählrate als Funktion der B_1 -Feldstärke wiederum bei ausgeschaltetem Spinflipper den in Abb.4.13 gezeigten Verlauf.

Der mit A gekennzeichnete Meßpunkt entspricht einer B_1 -Feldstärke von 0.132 mT. Die Breite der



Abbildung 4.13: Rabi-Oszillation von UCNs: a. ohne Spinflipper, b. mit Spinflipper

Resonanzkurve ist durch $\Delta B_0/B_1$ gegeben, sodaß sich daraus bei bekanntem B_1 eine Homogenität des B_o -Feldes im Wirkungsbereich der Hochfrequenz von $\Delta B_0/B_0 = 1.2 \cdot 10^{-4}$ ergibt. Daß die Homogenität des B_o -Feldes nicht ganz die theoretische Erwartung erfüllt, könnte an einer minimalen Verkippung der Achse der supraleitenden PERKINO-Spule zur Achse ihrer warmen Bohrung liegen. Für eine erste experimentelle Untersuchung ist diese Homogenität jedoch völlig ausreichend. Mit einem B_o -Feld von 0.80553 T und einer mittleren Neutronenwellenlänge von $\overline{\lambda} = 69.6$ nm liegt das Verhältnis $E_M/Eo = 0.576$ im uns interessierenden Energiebereich.

Die Wellenlänge des Anteils der Spin-Up-Komponente des ursprünglich unpolarisierten UCN-Strahls mit $\overline{\lambda} = 69.6$ nm, der im Hochfrequenzfeld in einen Spin-Down-Zustand geflippt wird, wird aufgrund der induzierten Emission eines Photons zu $\overline{\lambda} = 107$ nm und gelangt damit nicht durch die Analysatorfolie. Folglich entspricht der gemessene Verlauf der Zählrate dem für einen ursprünglich Spin-Down polarisierten UCN-Strahl erwarteten Cosinus-Verlauf. Kurve a in Abb. 4.13 zeigt den über das Energiespektrum der UCNs, über das HF-Feldintegral und über das B_o -Feld verschiedener Flugbahnen der UCNs gemittelten berechneten Verlauf. Zusätzlich wurde ein Verlust an Polarisation von 10 % durch die Analysatorfolie berücksichtigt.

Wird bei sonst gleichen Bedingungen der Spinflipper eingeschaltet, so kann nur die Spin-Up-Komponente nachgewiesen werden. Da nur der durch das HF-Feld nicht geflippte Anteil der ursprünglichen Spin-Up-Komponente nachgewiesen werden kann, sollte der Verlauf der Zählrate dem für den Fall $E_M/2 < E_o \leq E_M$ erwarteten Verlauf entsprechen, welcher unter denselben Bedingungen wie Kurve a berechnet und als Kurve b in Abb. 4.13 eingezeichnet wurde. Diese Kurve wurde nicht vollständig vermessen, da die zu Verfügung stehende Meßzeit durch die begrenzte Standzeit der supraleitenden Spule stark eingeschränkt war. Darum wurde lediglich im Minimum der Zählrate bei dem durch Punkt A gekennzeichneten HF-Feld der Spinflipper eingeschaltet und die in Punkt B angegebene Intensität gemessen. Aus diesen beiden Intensitäten läßt sich die maximal erreichte Polarisation zu 39.4 ± 2.4 % bestimmen. Unter Berücksichtigung einer Nachweiseffizienz der Polarisation durch die Kombination eines Spinflippers mit einem konventionellen Analysator von 90 % entspricht dies einer maximalen Polarisation von ca. 44 %.

Die verbleibende Standzeit der supraleitenden Spule wurde genutzt um mithilfe von Flugzeitmessungen das Wellenlängenspektren ultrakalter Neutronen mit und ohne HF-Feld zu bestimmen Abb.4.14 a zeigt das Meßergebnis bei eingeschaltetem Spinflipper. Ohne HF-Feld werden nur ursprünglich Spin-Up-polarisierte Neutronen nachgewiesen (Kurve a), während bei eingeschaltetem HF-Feld zusätzlich der in den Spin-Up-Zustand geflippte Anteil der Spin-Down-Komponente (Kurve b) zur Gesamtintensität (Kurve c) beiträgt. Aufgrund der induzierten Absorption eines



Abbildung 4.14: Das aufgrund von hochfrequenzinduzierter Emission eines Photons verschobene Wellenlängenspektrum von UCNs

Photons wurde dessen Wellenlänge nach $\overline{\lambda} = 55.1$ nm verschoben. Abb. 4.14 b zeigt das mit der Chopperöffnungsfunktion entfaltete Ergebnis.

4.4 Zusammenfassung und Ausblick

Das Experiment zeigt deutlich den Effekt, daß ein ursprünglich unpolarisierter UCN-Strahl unter Einwirkung eines resonanten HF-Feldes polarisiert werden kann. Ferner beobachteten wir eine Energieänderung von UCNs aufgrund der Absorption eines Photons. Unter Berücksichtigung einer Nachweiseffizienz der Polarisation durch die Kombination eines Spinflippers mit einem konventionellen Analysator von 90 % erreichten wir eine maximale Polarisation von 44 % und einen Gewinn von 20 % an Intensität im Vergleich zu konventionellen Polarisationsmethoden. Die in diesem Experiment maximal erreichbare Polarisation war größtenteils durch die Inhomogenität des B_o -Feldes begrenzt. Bei einer mit etwas größerem weiteren Aufwand erreichbaren Homogenität von 10^{-5} im Wirkungsbereich des Hochfrequenzfeldes kann nach theoretischen Rechnungen für UCNs mit $E_M/E_o = 0.58$ eine maximale Polarisation von 88 %, mit $E_M/E_o = 1.2$ sogar von 92 % erzeugt werden, wobei der Intensitätsgewinn gegenüber konventionellen Polarisatoren hier sogar 70 % beträgt.

Kapitel 5

Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zwei Effekte der Quantenphysik mit ultrakalten Neutronen experimentell untersucht.

Der erste Teil beschäftigt sich mit dem Phänomen der Andersonlokalisierung, einem Interferenzeffekt, der nach einem Postulat von P.W.Anderson bei Vielfachstreuung einer beliebigen Welle, sei es einer klassischen Welle oder eines quantenmechanischen Teilchens, in einem ungeordneten, stark elastisch streuenden Medium auftritt und zu einer Behinderung der Diffusion durch das Medium führt. Da schon die Vielfachstreuung einer Welle ohne diesen Effekt der kohärenten Rückstreuung nicht analytisch beschrieben werden kann und die Andersonlokalisierung bisher auch experimentell nicht eindeutig nachgewiesen werden konnte, beruhen Aussagen über ihr Auftreten derzeit überwiegend auf umfangreichen numerischen Simulationen. Im Hinblick auf einen experimentellen Nachweis scheinen ultrakalte Neutronen ideale Kandidaten für mögliche Andersonlokalisierung in einem entsprechenden Medium zu sein.

• Die in dieser Arbeit durchgeführten teilweise analytischen Berechnungen der Transportweglänge in gegebenen Medien berücksichtigen lediglich kohärente Effekte aufgrund schwacher Vielfachstreuung ultrakalter Neutronen. Bereits im Rahmen dieser Näherung liegt die Transportweglänge ultrakalter Neutronen beispielsweise in Diamant- oder auch Aluminiumoxidpulver mit Korngrößen von ca. 50 - 100 nm in einem Bereich, in dem sie, wie in Experimenten der Optik experimentell gezeigt wurde, durch kohärente Rückstreueffekte stark reduziert wird. Das Joffe-Regel-Kriterium $l_{tr} \sim \lambda/2\pi$ für den Phasenübergang zur starken Lokalisierung, d.h. zum völligen Zusammenbruch der Diffusion aufgrund kohärenter Rückstreuung, könnte daher bei der Diffusion ultrakalter Neutronen in kommerziell erhältlichen Pulvern mit Korngrößen bis 100 nm eintreten.

Da die Transportweglänge von UCNs in einem streuenden Medium jedoch stark von der Struktur des Mediums, d.h. der Reichweite der auch in einem ungeordneten System immer auftretenden Nahordnung, abhängt, setzt der Nachweis von Lokalisierungseffekten als Ursache einer reduzierten Transportweglänge die genaue Kenntnis der Struktur der speziellen Probe voraus.

- Erste Experimente zur Bestimmung der Transportweglänge als Funktion der Neutronenwellenlänge wurden mithilfe von Flugzeitmessungen durchgeführt. Diese lassen jedoch aufgrund einiger experimenteller Schwierigkeiten keine eindeutige Aussage zu.
 - Trotz der Selektion der sich vor und nach der diffus streuenden Probe achsial ausbreitenden UCNs führt die starke Änderung der Winkelverteilung im Experiment zu einer Verfälschung der Wellenlängenbestimmung auf der Basis von Flugzeitmessungen, deren Korrektur die genaue Kenntnis der Winkel- und Wellenlängenverteilung über das gesamte Experiment hin erfordert. Diese ist jedoch weder am Ausgang der UCN-Quelle

noch nach der Transmission durch die verwendeten Neutronenleiter, noch nach der Diffusion durch die Probe gegeben. Einen Ausweg könnte hier der Einsatz eines bekannten isotropen Streuers oder aber einer Blende direkt am Turbinenausgang und die Verwendung von Titanrohren mit einem Fomblinölfilm als ideal spekular reflektierende Neutronenleiter bieten. Die unbekannte Winkelverteilung der die Probe verlassenden UCNs wird jedoch ein Problem für die Aussagekraft dieser Meßmethode bleiben.

 Im bisherigen Aufbau des Experiments wurde die Probe vertikal in einem horizontalen Neutronenleiter positioniert um in einem vertikalen Aufbau nötige Korrekturen der Flugzeitmessung ultrakalter Neutronen aufgrund der Gravitation zu vermeiden. Die verwendeten Pulver wurden dazu entweder in einer zähflüssigen Mischung mit Fomblinöl auf ein Substrat aufgetragen oder zwischen zwei Substraten gepreßt gehalten. Beide Methoden der Präparation können unter Umständen zu Löchern in der Probenschicht führen, die wir mit dem Lichtmikroskop nicht ausmachen können, die jedoch von ultrakalten Neutronen ungehindert passiert werden und damit zu einer Verfälschung der Transmissionsmessungen führen. Eventuell wäre hier ein nach wie vor horizontaler, jedoch auf einem kurzen Stück im Bereich einer vertikal gelagerten Probenschicht vertikaler Strahlaufbau geeigneter.

Mit einigen Änderungen sowohl des experimentellen Aufbaus, als auch der Probenpräparation und -charakerisierung könnte es jedoch möglich sein, eine Reduzierung oder sogar einen völligen Zusammenbruch der wellenlängenabhängigen Transmission ultrakalter Neutronen aufgrund von Anderson-Lokalisierung zu beobachten.

• Für geplante Reflexionsexperimente zur Untersuchung der kohärenten Rückstreuung wird derzeit im Rahmen einer weiteren Doktorarbeit ein geeigneter ortsauflösender Detektor für ultrakalte Neutronen entwickelt. Die Untersuchung einer eventuell auftretenden Verletzung der Zeitumkehrinvarianz würde aufgrund der erwarteten Größe des Effekts von weniger als einem Prozent darüberhinaus eine deutlich bessere Statistik und damit eine deutlich höhrere Intensität ultrakalter Neutronen erfordern. Auf jeden Fall geben ortsauflösende Experimente zur kohärenten Rückstreuung jedoch weitere Auskunft über die Transportweglänge ultrakalter Neutronen in ungeordneten stark streuenden Medien.

Im zweiten Teil der Arbeit wurde experimentell gezeigt, daß es prinzipiell möglich ist, einen zunächst unpolarisierten Neutronenstrahl eines schmalen Energiebandes mithilfe einer geeigneten Magnetfeldkonfiguration vollständig und verlustfrei zu polarisieren. Im durchgeführten Experiment wurde eine Polarisation von ca. 44 % erreicht. Die auftretenden Polarisationsverluste waren vor allem in Feldinhomogenitäten begründet. Mit wenig mehr apparativem Aufwand kann die Polarisation daher wesentlich erhöht werden. Neben der Polarisation konnte im Experiment ein deutlicher Shift der Neutronenenergien aufgrund der induzierten Absorption bzw. Emission von Photonen beobachtet werden. In mehreren hintereinander erfolgenden derartigen Emissionsprozessen können daher schnellere Neutronen effektiv abgebremst werden, womit eine weitere Möglichkeit zur Realisierung einer Quelle ultrakalter Neutronen gegeben ist.

Anhang A

Der Zeitentwicklungsoperator

Die Lösung $\psi(t)$ der zeitabhängigen Schrödingergleichung läßt sich in der Basis der Eigenzustände ψ_{\uparrow} und ψ_{\downarrow} des zeitunabhängigen Hamiltonoperators, der die Wechselwirkung mit dem konstanten B_o -Feld beschreibt, darstellen. ψ_{\uparrow} bezeichnet den Spin-Up-, ψ_{\downarrow} den Spin-Down-Zustand des Neutrons im B_o -Feld. Das Ergebnis ist ein System zweier gekoppelter linearer Differentialgleichungen

$$\begin{split} i\hbar\psi_{\uparrow}(t) &= +\gamma\frac{\hbar}{2}B_{o}\psi_{\uparrow}(t) + \gamma\frac{\hbar}{2}B_{1}\mathrm{e}^{-i\omega t}\psi_{\downarrow}(t) \\ i\hbar\psi_{\downarrow}(t) &= +\gamma\frac{\hbar}{2}B_{1}\mathrm{e}^{i\omega t}\psi_{\uparrow}(t) - \gamma\frac{\hbar}{2}B_{o}\psi_{\downarrow}(t), \end{split}$$

woraus sich eine Differentialgleichung zweiter Ordnung für den Zustand einer der beiden Spinkomponenten gewinnen läßt.

$$\ddot{\psi}_{\uparrow} + i\omega\,\dot{\psi}_{\uparrow} + \left(\left(\frac{\gamma}{2}\right)^2\left(B_1^2 + B_o^2\right) - \frac{\gamma}{2}B_o\omega\right)\psi_{\uparrow} = 0$$

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung besteht in einer Linearkombination von Exponentialfunktionen $e^{\pm \lambda t}$ mit

$$\lambda_{\pm} = -i\frac{\omega}{2} \pm \frac{i}{2}\sqrt{(\gamma B_o - \omega)^2 + (\gamma B_1)^2} \equiv -i\frac{\omega}{2} \pm \frac{i}{2}\omega_2$$
$$\psi_{\uparrow}(t) = e^{-i\frac{\omega}{2}} \left(ae^{i\frac{\omega_2}{2}} + be^{-i\frac{\omega_2}{2}}\right)$$

Die Lösung für die Spin-Down-Komponente $\psi_{\downarrow}(t)$ ergibt sich durch Einsetzen von $\psi_{\uparrow}(t)$ in das Gleichungssystem, die Konstanten a und b sind durch die Anfangsbedingungen des Systems zur Zeit t = 0 festgelegt.

Zu einer anschaulicheren Beschreibung der Zeitentwicklung des Spins im rotierenden HF-Feld, die formal durch den Zeitentwicklungsoperator U(t) gegeben ist, gelangt man mit Hilfe einer Transformation der Operator-Schrödingergleichung in ein mit $B_1(t)$ rotierendes Koordinatensystem. In diesem Koordinatensystem sieht der Spin ein zeitunabhängiges effektives Magnetfeld. Rotiert das B_1 -Feld und folglich auch das so gewählte Koordinatensystem mit der Lamorfrequenz des Spins im statischen B_o -Feld, so verschwindet in diesem Koordinatensystem das B_o -Feld und es bleibt ein zeitunabhängiges B_1 -Feld, um das der Spin mit der sogenannten Rabi-Frequenz

$$\omega_R = \gamma B_1$$

rotiert. Allgemein gilt: Ist der Hamiltonoperator in Diagonalform gegeben, so läßt sich die Operator-Schrödingergleichung formal integrieren.

$$i\hbar \dot{U}(t) = HU(t) \implies U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int Hdt}$$

Die Expontialfunktion ist nur mit einem Operator in Diagonalform als Argument wohl definiert und gilt dann komponentenweise. Ist der Hamiltonoperator nicht explizit von der Zeit abhängig, so vereinfacht sich diese Integration zu

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$$

Liegt der Hamiltonoperator nicht in Diagonalform vor, so läßt er sich durch eine Transformation T in die Basis der zugehörigen Eigenvektoren diagonalisieren. Die Transformation T hängt nicht explizit von der Zeit ab, sodaß sich die transformierte Operator-Schrödingergleichung formal integrieren läßt.

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int H dt} \Longrightarrow U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int T^* T H T^* T dt} \Longrightarrow U(t) = T^* e^{-\frac{i}{\hbar} \int T H T^* dt} T H T^* dt$$

mit $T^*T = 1$ und dem diagonalen Operator THT^* . In der Praxis läßt sich ein rotierendes Hochfrequenzfeld nur sehr schwer realisieren, sodaß wir ein linear oszillierendes Feld verwenden. Dieses läßt sich in zwei in entgegengesetzter Richtung rotierende Felder zerlegen. Im mit einer der Komponenten rotierenden Koordinatensystem rotiert die entgegengesetzte Komponente mit doppelter und damit weit von der Lamorfrequenz des Neutrons entfernter Frequenz. Sie führt somit zu einem zeitabhängigen effektiven Magnetfeld. In unserem Experiment wird die Feldstärke des HF-Feldes mit $\frac{B_1}{B_0} \sim 10^{-4}$ jedoch sehr klein im Vergleich zur B_o -Feldstärke sein, sodaß der Einfluß dieses zeitabhängigen Anteils des effektiven Magnetfelds als kleine Störung betrachtet und in erster Näherung vernachlässigt werden kann. Diese Näherung bezeichnet man als ' rotating wave approximation '. In einem Resonanzspinecho mit kalten Neutronen beispielsweise, in dem der Spin mehrfach eine solche Magnetfeldkonfiguration durchläuft, kann der Einfluß der 'falschen' HF-Feldkomponente nicht mehr vernachlässigt werden und führt zu einer Korrektur sowohl der Lamorfrequenz (Bloch-Siegert-Shift) als auch der Rabifrequenz des Spins. Jedoch auch in diesem Fall, wenn der Hamiltonoperator zunächst explizit zeitabhängig und nicht diagonal ist, läßt sich die Operator-Schrödingergleichung in oben gezeigter Weise formal lösen, wenn ein Koordinatensystem existiert, indem zumindest die Transformation T des Hamiltonoperators auf die entsprechende Diagonalform nicht explizit von der Zeit abhängt. Einer Rotation des Koordinatensystems mit der Frequenz ω entspricht ein Hamiltonoperator

$$H_{rot} = \frac{\hbar}{2} \left(\begin{array}{cc} \omega & 0\\ 0 & -\omega \end{array} \right),$$

der bei der Transformation von H in das rotierende Koordinatensystem aufgrund der Energieerhaltung berücksichtigt werden muß, und ein zugehöriger Zeitentwicklungsoperator

$$U_{rot}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_{rot}t} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega}{2}t} & 0\\ e^{-i\frac{\omega}{2}t} & 0\\ 0 & e^{i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix}$$

Für den Hamiltonoperator H^{rot} nach der Transformation ins rotierende Koordinatensystem gilt

$$H^{rot} = U^{rot^*}(t) (H - H_{rot}) U^{rot}(t) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \gamma B_o - \omega & \gamma B_1 e^{i\phi} \\ \gamma B_1 e^{-i\phi} & -(\gamma B_o - \omega) \end{pmatrix} \equiv \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} d & \gamma B_1 e^{i\phi} \\ \gamma B_1 e^{-i\phi} & -d \end{pmatrix},$$

wobei die komplette Zeitabhängigkeit des Systems auf den noch unbekannten Zeitentwicklungsoperator im rotierenden Koordinatensystem $U^{rot}(t)$ übertragen wurde, sodaß der Hamiltonoperator zeitunabhängig ist. Die Frequenz $d = \gamma B_o - \omega$ entspricht der Spinrotationsfrequenz im statischen Anteil des im rotierenden Koordinatensystem effektiv wirkenden Magnetfeldes. Die Diagonalform von H^{rot} erhalten wir aus ihren Eigenwerten

$$E_{\pm}(H^{rot}) = \pm \frac{\hbar}{2}\omega_2$$
 mit $\omega_2 = \sqrt{(\gamma B_o - \omega)^2 + (\gamma B_1)^2} = \sqrt{d^2 + (\gamma B_1)^2}$

$$H_{diag}^{rot} = \frac{\hbar}{2} \left(\begin{array}{cc} \omega_2 & 0\\ 0 & -\omega_2 \end{array} \right)$$

Die Frequenz ω_2 entspricht der Spinrotationsfrequenz im gesamten im rotierenden Koordinatensystem effektiv wirkenden Magnetfeld. Die Transformationsmatrix T^{rot} in das rotierende Koordinatensytem läßt sich mithilfe der normierten Eigenvektoren von H^{rot} zu

$$T^{rot} = \begin{pmatrix} \frac{d+\omega_2}{\sqrt{(d+\omega_2)^2 + (\gamma B_1)^2}} e^{-i\phi} & \frac{\gamma B_1}{\sqrt{(d+\omega_2)^2 + (\gamma B_1)^2}} \\ \frac{d-\omega_2}{\sqrt{(d-\omega_2)^2 + (\gamma B_1)^2}} e^{-i\phi} & \frac{\gamma B_1}{\sqrt{(d-\omega_2)^2 + (\gamma B_1)^2}} \end{pmatrix}$$

bestimmen. Der zugehörige Zeitentwicklungsoperator im rotierenden Koordinatensystem $U^{rot}(t)$ ergibt sich damit zu

$$U^{rot}(t) = T^{rot^*} e^{-\frac{i}{\hbar} H^{rot} t} T^{rot} = T^{rot^*} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega_2}{2}t} & 0 \\ & & \\ 0 & e^{i\frac{\omega_2}{2}t} \end{pmatrix} T^{rot}$$
$$= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\omega_2}{2}t\right) - ig\sin\left(\frac{\omega_2}{2}t\right) & -ic\sin\left(\frac{\omega_2}{2}t\right)e^{i\phi} \\ -ic\sin\left(\frac{\omega_2}{2}t\right)e^{-i\phi} & \cos\left(\frac{\omega_2}{2}t\right) + ig\sin\left(\frac{\omega_2}{2}t\right) \end{pmatrix}$$

Die Abkürzungen

$$g = \frac{d}{\omega_2}$$
 und $c = \frac{\gamma B_1}{\omega_2}$

entsprechen dem Anteil des statischen bzw dem Anteil des Hochfrequenzfeldes am gesamten im rotierenden Koordinatensystem effektiv wirkenden Magnetfeld. Rücktransformation ins Laborsystem ergibt für den Zeitentwicklungsoperator U(t) des Spins:

$$U(t) = U^{rot}(t)U_{rot}(t) = \begin{pmatrix} \left(\cos\left(\frac{\omega_2}{2}t\right) - ig\sin\left(\frac{\omega_2}{2}t\right)\right)e^{-i\frac{\omega}{2}t} & -ic\sin\left(\frac{\omega_2}{2}t\right)e^{-i\left(\frac{\omega}{2}t - \phi\right)} \\ -ic\sin\left(\frac{\omega_2}{2}t\right)e^{i\left(\frac{\omega}{2}t - \phi\right)} & \left(\cos\left(\frac{\omega_2}{2}t\right) + ig\sin\left(\frac{\omega_2}{2}t\right)\right)e^{i\frac{\omega}{2}t} \end{pmatrix}.$$

Literaturverzeichnis

- Akkermans, E., et. al: Coherent Backscattering of Light by Disordered Media: Analysis of the Peak Line Shape, Phys. Rev. Lett, 56, 1471 (1986)
- [2] Akkermans, E., et. al: Theoretical study of the coherent backscattering of light by disordered media, Phys. France, 49, 77 (1988)
- [3] Albada, M. P. v., et. al.: Speed of Propagation of Classical Waves in Strongly Scattering Media, Phys. Rev. Lett., 66, 3132 (1991)
- [4] Al'tshuler, B. L., Lee, P. A. : Disordered Electronic Systems, Physics Today, 36 (1988)
- [5] Anderson, P. W.: Absence of Diffusion in Certain Random Lattices, Phys. Rev., 109, 1492 (1958)
- [6] Anderson, P. W.: The question of classical localization A theorie of white paint ?, Phil. Mag. B52, 505 (1985)
- [7] Anderson, P. W.: Localization of Light: The Quest for the White Hole, Physica, 140A, 183 (1986)
- [8] Bendiksen, O.O., et. al.: AIIA Journal, 25, 1241 (1987)
- [9] Bergmann, G.: Physical interpretation of weak localization: A time-of-flight experiment with conduction electrons, Phys. Rev., **B28**, 2914 (1983)
- [10] Bergmann, G.: Localization in thin films A time-of-flight experiment with conduction electrons, Physica, **126B**, 229 (1984)
- [11] Cusack, N. E.: The Physics of Structurally Disordered Matter, Graduate Student Series in Physics, (1987)
- [12] Dalich R., et. al.: Microwave localization by tow-dimensional random scattering, Nature, 53 (1991)
- [13] Degussa: Standard Körnungsproduktreihe, Firmenbroschüre
- [14] Degussa: Was ist Ruß?, Firmenbroschüre
- [15] Drake, J. M., et. al.: Observation of Nonclassical Optical Diffusion, Phys. Rev. Lett., 63, 259 (1989)
- [16] Duderstadt, J.J.: Nuclear Reactor Analysis, Wiley-Verlag, (1976)
- [17] Economou, E. N.: Phys. Rev., **B30**, 1686 (1984)
- [18] Egorov, A.I., et. al.: Sov. J. Nucl. Phys., 19, 147 (1974)
- [19] Fermi, E.: Ricerca Scientifica, 7, 13 (1936)

- [20] Garcia, N., Genack, A. Z.: Anomalous Photon Diffusion at the Threshold of the Anderson Localization Transition, Phys. Rev. Lett., 66, 1850 (1991)
- [21] Gensterblum, G. et. al.: C₆₀ Growth on Si(100), GaSe(0001) and GeS(001), Appl. Phys. A, 56, 175 (1993)
- [22] Golub, R. et. al.: Ultra-Cold Neutrons, Adam-Hilger-Verlag, (1991)
- [23] Golub, R., et. al.: Ultracold Neutrons, Sci. Am., 240, 143 (1979)
- [24] Gordon: The Localization of Light and Other Classical Waves in Disordered Media, Com. Cond. Mat. Phys. 14/4, 193 (1988)
- [25] Ignatovich, V.K.: The Physics of Ultracold Neutrons, Oxford Series on Neutron Scattering in Condensed Matter, (1990)
- [26] Jones, C. F.: Size distribution of MgO smoke particles, Phil. Mag. A, 42, 267 (1980)
- [27] Joffe, A. F., Regel, A. R.: Non-crystalline, amorphous, and liquid electronic semiconductors, Prog. Sem., 4, 237 (1960)
- [28] Kaveh, M.: Localization of photons in disordered systems, Phil. Mag., B56, 693 (1987)
- [29] Khmel'nitskii, D. E. : Localization and coherent scattering of electrons, Physica, 126B, 235 (1984)
- [30] Krätschmer, W.: Solid C_{60} : a new form of carbon, Nature, **347**, 354 (1990)
- [31] Krätschmer, W.: Fullerene und Fullerite: neue Formen des Kohlenstoffs, Phys. Bl., 48, 553 (1992)
- [32] Krätschmer, W.: How we came to produce C₆₀-fullerite, Z. Phys. D, **19**, 405 (1991)
- [33] Kramer, B., MacKinnon, A.: Localization: theory and experiment, Rep. Prog. Phys., 56, 1469, (1993)
- [34] Kramer, B.: Der Quanten-Hall-Effekt, Physik in unserer Zeit, 3, 102, (1997)
- [35] Kuga, Y., Ishimaru, A.: J. Opt. Soc. Am., A1, 831 (1984)
- [36] Maret, G.: Lokalisierung von Licht durch Vielfachstreuung ?, Phys. Bl., 48, 161 (1992)
- [37] Maret, G., Fraden, S.: Multiple Scattering from Concentrated, Interacting Suspensions, Phys. Rev. Lett., 65, 512 (1990)
- [38] Mott, N. F.: Proc., Roy., Soc., A345, 169 (1975)
- [39] Nolting, W.: Quantenmechanik, vieweg, (1997)
- [40] Oed, A.: Position-Sensitive Detector with Microstrip Anode for Electron Multiplication with Gases, Nucl. Instr. Meth., A263, 351 (1988)
- [41] Omar, M. A.: X-ray, neutron, and electron diffraction in crystalls, Elementary Solid State Physics (1991)
- [42] Pendlebury, J. M., et. al.: Nucl. Inst. Meth, 148, 353 (1978)
- [43] Pierre, C., et. al.: Journal of Sound and Vibration, **139**, 111 (1990)
- [44] Richardson, D. J.: The Production Of, And Experiments With, Monochromatic Ultra Cold Neutrons, University of Sussex, (Feb.1989)
- [45] Rosenbaum, T. F.: Phys. Rev. Lett, **45**, 1723 (1980)

- [46] Sears, V.F.: Neutron Opics, Oxford University Press, Oxford, (1989)
- [47] Sears, V.F.: Neutron News **3**, 26 (1992)
- [48] Sheng, P., Zhang, Z. Q.: Scalar-Wave-Localization in a Two-Component Composite, Phys. Rev. Lett., 57, 1879 (1986)
- [49] Sheng, P.: Introduction to Wave Scattering, Localization, and Mesoscopic Phenomena, Academic Press, California (1995)
- [50] Sheng, P.: Scattering and Localization of Classical Waves in Random Media, World Scientific Series in Directions in Condensed Matter Physics, (1990)
- [51] Simon, R.: Neutronenmetalloptik und anomale Lamorpräzession, Dissertation, Universität Heidelberg, (1998)
- [52] Soukoulis, C.M. et. al.: Existence of Anderson Localization of Classical Waves in a Random Two-Composite Medium, Phys. Rev. Lett., 62, 575 (1989)
- [53] Steyerl, A.: A new source of cold and ultracold neutrons, Phys. Lett., A116, 347
- [54] Vollhardt, D.: Localization Effects in Disordered Systems, Festkörperprobleme, 27, 63, (1987)
- [55] Watson, G. H. et. al.: Search for Photon Localization in the Time Domain, Phys. Rev. Lett., 58, 945 (1987)
- [56] Wiersma, D. S. et. al: Localization of light in a disordered medium, Nature, 390, 671 (1997)
- [57] Wiersma, D. S. et. al: Experimental Evidence of the Recurrent Multiple Scattering Events of Light in Disordered Media, Phys. Rev. Lett., 74, 4193 (1995)
- [58] Yarnell, J.L., et. al.: Phys. Rev., A7, 2130 (1973)
- [59] Ye, Z., Alvarez, A.: Acoustic Localization in Bubbly Liquid Media, Phys. Rev. Lett., 80, 3503 (1998)
- [60] Yoshino, S., Makoto, O.: Numerical Study of Electron Localization in Anderson Model for Disordered Systems: Spatial Extension of Wavefunction, J. Phys. Soc. Japan, 43, 415 (1977)

Danksagung

Ich möchte alldenjenigen danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Herrn Prof. D. Dubbers danke ich für die Überlassung dieser interessanten Themen, die guten Bedingungen zur Durchführung der Arbeit und seine motivierende Unterstützung.

Dr. U. Schmidt möchte ich ganz besonders für die sehr gute Unterstützung, seine unendliche Geduld und stete Diskussions- und Hilfsbereitschaft danken.

Dr. H. Abele, Martin Klein und Robert Simon danke ich für die gute Zusammenarbeit und die angenehme Atmosphäre, vor allem bei den Strahlzeiten in Grenoble.

Mein besonderer Dank gilt der ehemaligen Diplomandin Agnes Boucher für die gute Zusammenarbeit und die daraus erwachsene Freundschaft.

Der ganzen Arbeitsgruppe von Prof. D. Dubbers danke ich für die lustige und aufgeschlossene Atmosphäre, viele interessante Gespräche und deren Hilfbereitschaft und Unterstützung.

Den PF2- Mitgliedern Peter Geltenbort, Herbert Just, Stefan Neumaier und den Reaktormitarbeitern am ILL danke ich für ihre Hilfe und Aufmunterung während der Strahlzeiten in Grenoble.

Den Mitarbeitern aller Werkstätten am Physikalischen Institut und am ILL danke ich für die freundliche Unterstützung und ihren Einsatz bei der Verwirklichung der Experimente.

Allen Freunden und Bekannten, besonders meinen WG-Mitbewohnern Sonja Böttcher und Christian Stark, danke ich für ihre große Rücksichtnahme während der Zeit des Zusammenschreibens.

Herrn K. Jungmann danke ich für die Begutachtung dieser Arbeit.