

**TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN**

**VIENNA
UNIVERSITY OF
TECHNOLOGY**

DIPLOMARBEIT

Diffraktion thermischer Neutronen an periodischen Phasengittern aus Silizium-Einkristall

ausgeführt am Atominstitut der Österreichischen Universitäten
der Technischen Universität Wien
unter der Leitung von

O. Univ. Prof. DI Dr. H. Rauch

Eingereicht an der Technischen Universität Wien
Fakultät für Physik

von

Kirsten Lux

Matr. Nr. 0226541
Fockygasse 47/7/4
1120 Wien

Wien, im Oktober 2008

Kurzfassung

In der Kleinwinkelstreuung thermischer Neutronen an mikroskopischen Objekten ist die erste Bornsche Näherung eine etablierte Methode zur Datenanalyse. Im Falle periodischer Phasengitter werden Daten gemessen, die mit dieser Methode nicht modelliert werden können wie die Absenkung der nullten Ordnung und asymmetrische Beugungsbilder.

Ultrakleinwinkelmessungen solcher periodischer Phasengitter bei variabler Orientierung zum Neutronenstrahl, die Entwicklung eines geeigneten Modells zur Interpretation der Messergebnisse sowie die Probleme und deren vorrangigen Ursachen bei der Interpretation der Messergebnisse mit der Bornschen Näherung sind neben den notwendigen theoretischen Grundlagen der Streu- und Beugungstheorie Thema dieser Arbeit.

Die Messungen der Phasengitter aus Silizium-Einkristallen erfolgten an der Ultrakleinwinkelstreuanlage am Atominstitut der österreichischen Universitäten in Wien. Mittels Doppelkristall - Diffraktometer wurden Beugungsbilder verschiedener Gitter ähnlicher Struktur in einem Winkelbereich nahe der Vorwärtsstreurichtung aufgenommen. Die Messungen erfolgten bei verschiedenen Einfallswinkeln der Neutronen zu den Gittern, wobei diese hierfür normal zur Einfallsrichtung rotiert wurden.

In der Bornschen Näherung wird die einfallende, beziehungsweise ungestreute Welle nicht berücksichtigt, was für die meisten Streuexperimente auch nicht nötig ist. Im Falle korrelierter Systeme, wie zum Beispiel Strukturen in einer streng periodischen Anordnung, wie sie bei den gemessenen Phasengittern vorliegen, sind jedoch Interferenzen verursacht durch die ungestreute Welle nicht vernachlässigbar. Diese Interferenzen zeigen sich in einem kleinen Bereich um die Vorwärtsstreurichtung besonders deutlich.

Weiters erleiden Neutronen, die einen Festkörper durchqueren, Phasenschübe in einer Größenordnung, die mit der Methode der ersten Bornschen Näherung nicht beschrieben werden können. Für Proben mit geringer Absorption wirken sich diese Phasenschübe dominant auf das Beugungsbild in dem betrachteten Winkelbereich aus.

Gerade diese Dominanz legt einen anderen einfachen Ansatz nahe: Die Berücksichtigung der geometrischen Ausdehnung in Einfallsrichtung allein durch Phasenmodulation und somit die Reduktion des zweidimensionalen Problems auf ein Modell eindimensional angeordneter, phasenmodulierter Punktquellen unter Berücksichtigung der einfallenden Welle.

Mit Hilfe dieses Modells lassen sich die Streudaten in diesem Winkelbereich gut auswerten. Auch die Änderung des Beugungsbildes bei Rotation der Gitter im Raum kann sehr gut veranschaulicht werden.

Abstract

In the small-angle scattering of thermal neutrons at microscopic objects the first Born approximation is an acknowledged method to data analysis. In case of periodic phase gratings data measured cannot be modeled with this method such as the sinking of the zeroth diffraction order and asymmetric diffraction patterns.

Ultra small angle scattering (USANS) measurements of such periodic phase gratings in variable orientation to the neutron beam are, apart from the necessary theoretical bases of the scattering and diffraction theory, topic of this work. A suitable model for the interpretation of the results of measurement is presented. Additionally the problems and their priority causes with the interpretation using the Born approximation are discussed.

The measurements of the silicon phase gratings took place at the USANS Instrument at the Atominstitut der österreichischen Universitäten in Vienna. Using a double crystal diffractometer diffraction patterns of different lattices of similar structure were taken up in an angle range close to the forward scattering direction. The measurements were carried out with different angles of incidence as the lattices were rotated normal to the direction of arrival.

Referring to the Born approximation the incident, undisturbed wave is not considered since it is not necessary for most scattering experiments. In case of correlated systems, such as structures in a strictly periodic arrangement, as present with the measured phase gratings, interference of and with the undisturbed waves are not negligible. These interferences emerge in a small range around the forward scattering direction in a particular clear manner.

Further neutrons, which cross a solid body, suffer phase shifts in an order of magnitude, that cannot be described with the method of the first Born approximation. For samples with small absorption these phase shifts affect the diffraction pattern in the regarded angle range in a dominant manner.

Just this dominance suggests another, simple approach. The concept is to consider the geometrical expansion in direction of arrival only by the generated phase modulation. Thus the two-dimensional problem can be reduced to a model of linear arranged, phase-modulated point sources in which the undisturbed waves are taken into account.

With the help of this model the scattering data in this angle range can be evaluated well. Especially the change of the diffraction pattern caused by the rotation of the lattices can be very well illustrated.

Danksagung

Allen voran danke ich o. Univ. Prof. DI Dr. Helmut Rauch für die Betreuung meiner Diplomarbeit, den wissenschaftlichen Freiraum sowie die Ermöglichung von Auslandsaufenthalten mit dem dadurch verbundenen besonderen Einblick in die Wissenschaft.

Besonderer Dank geht an DI Dr. Mario Villa und DI Dr. Erwin Jericha für die interessante Themenstellung, die tatkräftige wissenschaftliche und menschliche Unterstützung und etliche interessante Gespräche und Diskussionen.

DI Dr. Martin Trinker sei gedankt für die zur Verfügung gestellten Proben und Daten.

Dank gebührt auch allen anderen Angestellten und Mitarbeitern des Atominstituts, die in irgendeiner Weise zum Gelingen beitrugen. Das besonders angenehme Arbeitsklima sei nicht unerwähnt.

Meinem Chef Prok. Dir. Ing. Peter Badura möchte ich für die jahrelange berufliche Unterstützung danken.

Ich danke meiner Familie, die immer an mich glaubt und mir in jeder Weise beisteht.

Meinen Freunden sei an dieser Stelle besonders gedankt. Ohne sie wäre ich sowieso verloren.

Meiner
Großmutter
gewidmet

Inhaltsverzeichnis

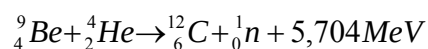
1	Allgemeines über Neutronen	7
1.1	Grundlegende Eigenschaften der Neutronen	7
1.2	Neutronenquellen	10
1.2.1	Fission in Forschungsreaktoren	
1.2.2	Spallation	
1.3	Moderation	11
1.4	Neutronendetektoren	11
2	Grundlagen der Streutheorie	12
2.1	Allgemeine Streutheorie	12
2.1.1	Stationäre Streulösungen	
2.1.2	Lippmann-Schwinger-Gleichung	
2.1.3	Bestimmung der Streuamplitude aus der Lippmann-Schwinger-Gleichung	
2.2	Der differentielle Wirkungsquerschnitt	15
2.2.1	Zusammenhang Messung und Streutheorie	
2.2.2	Neutronenstromdichte	
2.2.3	Wirkungsquerschnitt	
2.3	Bornsche Näherung	16
2.4	Streuung an sphärisch symmetrischen Potentialen.....	17
2.4.1	Partialwellenentwicklung	
2.4.2	Partialwellendarstellung	
2.4.3	Streuphasendarstellung	
2.4.4	Streulänge	
3	Streuung thermischer Neutronen	21
3.1	Streupotential thermischer Neutronen	21
3.1.1	Fermi - Pseudopotential	
3.1.2	Streuung thermischer Neutronen am gebundenen Atomkern	
3.1.3	Streuung an einem System gebundener Atome	
3.2	Makroskopische Streuphase.....	24
3.2.1	Der Brechungsindex	
3.2.2	Phasenschub	
3.3	Streuung an zwei-Phasen-Systemen.....	27
3.3.1	Unkorrelierte zwei-Phasen-Systeme	
3.3.2	Korrelierte zwei-Phasen-Systeme	
3.4	Erste Bornsche Näherung mit optischen Potential	31
3.4.1	Geometrische Interpretation	
3.4.2	Probleme bei Phasengittern	
4	Beugungstheorie.....	35
4.1	Huygens Prinzip	35
4.2	Skalare Beugungstheorie nach Kirchhoff	37
4.2.1	Kirchhoff-Identität	
4.2.2	Kirchhoff- Randbedingungen	
4.2.3	Kirchhoffsche Beugungsformel	
4.2.4	Fraunhoferbeugung	
4.2.5	Beugung am Spalt	
4.3	Beugung an N-Spalten	41
5	Modell phasenmodulierter Punktquellen.....	42
6	Ultraschallwinkelstreuung an periodischen Phasengittern aus Silizium-Einkristall ..	47
6.1	TRIGA Mark-II Reaktor	47
6.2	Kleinwinkelstreuanlage.....	51
6.3	Instrumentenkurve	54
6.3.1	Rockingkurve	
6.3.2	Schlitzverschmierung	
6.3.3	Wellenlängenunschärfe	
6.4	Proben	57
6.5	Messungen	61
7	Interpretation der Messergebnisse mittels Modell phasenmodulierter Punktquellen	68
8	Literatur	86
9	Anhang.....	87

1 Allgemeines über Neutronen

1.1 Grundlegende Eigenschaften der Neutronen

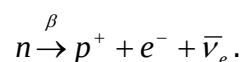
Die Entdeckung des Neutrons resultierte aus dem Studium der Kernreaktionen zwischen Beryllium-Atomen und Alpha-Teilchen. Bei der Reaktion wurde die Emission einer außerordentlich durchdringenden Strahlung beobachtet, die zunächst als Gammastrahlung interpretiert wurde.

Sir James Chadwick erhielt 1935 den Nobelpreis für die richtige Interpretation dieser Strahlung und somit für die Entdeckung der Neutronen.



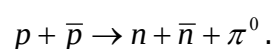
Neutronen sind Elementarteilchen aus der Familie der Baryonen bestehend aus drei Quarks, zwei down- und einem up-Quark, welche durch Gluonen zusammen gehalten werden. Sie haben daher eine innere Struktur mit einem Confinement-Radius von 0,7 fm, welche jedoch für die Physik der kondensierten Materie vernachlässigt werden kann.

Neben den Protonen sind Neutronen die wichtigsten Bestandteile der Atomkerne und können durch verschiedene Kernreaktionen freigesetzt werden, wobei sie als freie Neutronen eine endliche Lebensdauer von $889,6 \pm 2,3\text{s}$ besitzen und durch β -Zerfall in ein Proton, ein Elektron und ein Elektron - Antineutrino zerfallen:



Neutronen haben eine wohldefinierte (Ruhe-)Masse von $m_n = 1,6749286(10) \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ und gehören mit einem Spin $\frac{1}{2}\hbar$ zu der Gruppe der Fermionen. Mit diesem Spin ist ein magnetisches Dipol-Moment $\mu_n = -1,91304275(45)\mu_N$ mit dem Kernmagneton $\mu_N = 5,0507866(17) \cdot 10^{-27} \text{ JT}^{-1}$ verbunden.

Das Antiteilchen des Neutrons (Antineutron) wurde 1956 beim Beschuss von Materie mit Antiprotonen entdeckt. Beim Zusammenstoß von Protonen mit Antiprotonen entstehen ein Neutron, ein Antineutron und ein elektrisch neutrales Pion nach der Reaktionsgleichung



Nach außen erscheinen Neutronen elektrisch neutral. Da sie daher als quasi-ungeladene Teilchen in Wechselwirkung mit Materie treten, können sie auch bei geringen Energien sehr große Strecken in Materie ungestört zurücklegen.

Neutronen unterliegen der starken Wechselwirkung mit den Atomkernen, der elektromagnetischen Wechselwirkung hauptsächlich als Folge des magnetischen Dipolmoments, der Gravitation aufgrund ihrer endlichen Ruhemasse und der schwachen Wechselwirkung, welche für die endliche Lebensdauer des Neutrons verantwortlich ist.

Insbesondere die Neutron-Kernwechselwirkung zeigt eine starke Energieabhängigkeit. Als Beispiel ist der totale Wirkungsquerschnitt für Neutroneneinfang an ^{232}Th in Abbildung 1.1. gezeigt. Man erkennt drei Energiebereiche: Ein $1/v$ -Verhalten bei sehr niedrigen Energien, einen Resonanzbereich, der sich je nach Kern bis in den keV-Bereich ausdehnt, und einen Potentialstreibereich für Energien größer als einige keV.

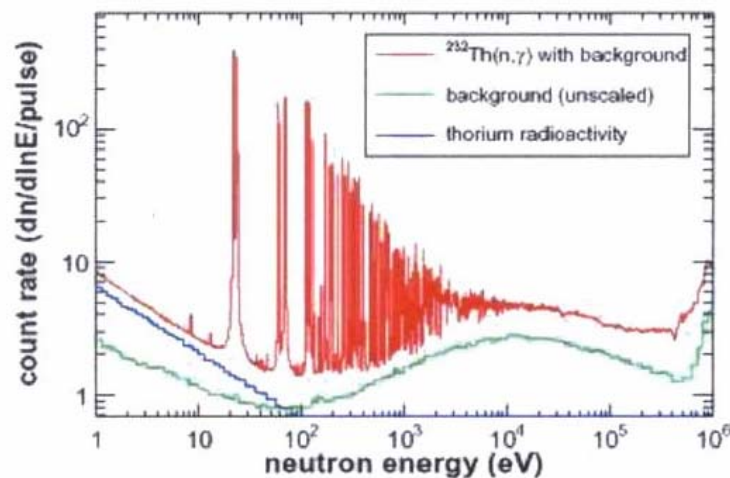


Abbildung 1.1. Totaler Wirkungsquerschnitt für Neutroneneinfang an ^{232}Th als Funktion der Energie [Leeb 2006]

Um der starken Energieabhängigkeit Rechnung zu tragen, hat sich eine Einteilung der Neutronen nach Energien als günstig erwiesen.

Bezeichnung der Neutronen	Neutronenenergie E_n [eV]
Ultrakalt	$E_n < 10^{-5}$
Kalt	$10^{-5} < E_n < 5 \cdot 10^{-3}$
Thermische	$5 \cdot 10^{-5} < E_n < 0,5$
Epithermische	$0,5 < E_n < 10^3$
Mittelschnelle	$10^3 < E_n < 10^5$
Schnelle	$10^5 < E_n < 5 \cdot 10^7$
Sehr schnelle	$5 \cdot 10^7 < E_n$

Tabelle 1.1. Klassifizierung der Neutronen nach Energien [Römpf95]

Ruhemasse	$m_n = 1,6749286(10) \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Magnetisches Dipolmoment	$\mu_n = -1,91304275(45) \mu_N$
Mittlere Lebensdauer	$\tau = 889,6 \pm 2,3 \text{ s}$
Quarkstruktur	udd
Spin	$\frac{1}{2} \hbar$
Confinement-Radius	$R = 0,7 \text{ fm}$
Ruheenergie	$E = mc^2 = 939,6 \text{ MeV}$
Zeemannenergie	$E = -\mu B = 60,311 \text{ neV} / T$

Tabelle 1.2. Einige grundlegende Eigenschaften der Neutronen

Entsprechend der 1923 erstmals von Louis de Broglie [de Broglie 1923] aufgestellten Relation, die jedem Teilchen mit Geschwindigkeit v und Impuls $p=mv$ eine Wellenlänge λ zuordnet,

$$\lambda = \frac{h}{p},$$

wobei h das Plancksche Wirkungsquantum darstellt, kann man bewegte Teilchen als so genannte Materiewellen betrachten (Welle-Teilchen-Dualismus). Relativistische Effekte sind hierbei nicht berücksichtigt, was für Neutronenoptische Experimente im Allgemeinen gut erfüllt ist.

Die Betrachtung von Neutronen als Materiewellen führte auf eine Vielzahl neutronenoptischer Experimente, in denen gezeigt werden konnte, dass aus der Optik bekannte Phänomene wie Reflexion, Refraktion und Diffraktion Charakteristika von Wellen im Allgemeinen sind und nicht eine spezielle Eigenschaft der Photonen.

Die ersten Beugungsexperimente mit Neutronen an Gittern wurden am Atominstitut anhand von Reflexionsgittern durchgeführt [Kurz, Rauch 1969]. Mit Beugungen an Transmissionsgittern, wie sie in der vorliegenden Arbeit benutzt werden, beschäftigten sich Arbeiten wie unter anderem [Jericha 2003] oder [Trinker 2007].

Für den Zusammenhang zwischen kinetischer Energie und Temperatur gilt

$$E = \frac{\hbar^2}{2m\lambda^2} = kT.$$

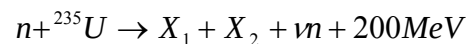
Es ergibt sich daher zum Beispiel für eine Temperatur $T = 295 \text{ K}$ eine Wellenlänge von etwa $\lambda = 1,8 \text{ \AA}$ beziehungsweise eine Energie von $E = 25 \text{ meV}$.

1.2 Neutronenquellen

Für viele Experimente in der Neutronen- und Festkörperphysik benötigt man freie Neutronen. Als Kernbestandteile sind diese nur über Kernreaktionen freizusetzen. Die häufigsten Neutronenquellen sind Forschungsreaktoren und Spallationsquellen. Kernkraftwerke sind aus technischen Gründen nicht als Neutronenquellen geeignet.

1.2.1 Fission in Forschungsreaktoren

Diese Reaktoren nutzen die Kernspaltung des Uranisotopes ^{235}U durch Einfang thermischer Neutronen:



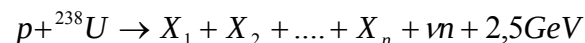
Bei dieser Reaktion werden im Mittel $\langle \nu \rangle = 2,5$ Neutronen freigesetzt, die weitere Kerne spalten können und somit eine Kettenreaktion aufrechterhalten. (X_1 , X_2 symbolisieren die Spaltprodukte)

Forschungsreaktor	Neutronenflußdichte [$\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$]	thermische Leistung
TRIGA-MARK II Wien	1×10^{13}	250 kW
TRIGA-Mainz (D)	$0,7 \times 10^{13}$	100 kW
HFR-Grenoble (F)	$1,5 \times 10^{15}$	58 MW
BR2 Mol (B)	$1,2 \times 10^{15}$	60-100 MW
FR M-II München (D)	8×10^{14}	20 MW

Tabelle 1.3. Flußdichte und thermische Leistung einiger Forschungsreaktoren [Villa 2001]

1.2.2 Spallation

Hierbei wird neutronenreiches Targetmaterial (schwere Atomkerne) mit extrem hochenergetischen Teilchen (zum Beispiel Protonen mit circa 1 GeV) beschossen. Als Ergebnis einer intranuklearen Kaskade wird die Energie des Projektils mehr oder weniger gleich über den Nukleus verteilt. Dieser somit hoch angeregte Kern „evaporiert“ bis zu 50 Neutronen pro Proton.



1.3 Moderation

Da meist Neutronen mit Wellenlängen von einigen Ångström benötigt werden, müssen diese durch elastische Stöße mit leichten Atomen (Moderator) abgebremst werden. Nach einer vom Moderator material abhängigen Anzahl an Stößen n stellt sich ein thermisches Gleichgewicht nach der Boltzmannverteilung ein.

Bei der Moderation an Wasserstoff sind zur Abbremsung etwa 18 Stöße und eine Zeit von circa 10µs erforderlich; für die Moderation an Graphit hingegen etwa 114 Stöße und 150µs. In Tabelle 1.4. sind die nötigen Stoßanzahlen einiger Moderatoren angeführt.

Moderator	Stoßanzahl
1H (leichtes Wasser)	18
2H (schweres Wasser)	25
4He (Helium)	43
7Li (Lithium)	67
9Be (Beryllium)	86
12C (Graphit)	114
16O (Sauerstoff)	150

Tabelle 1.4. Anzahl nötiger Stöße für verschiedene Moderatoren

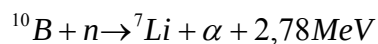
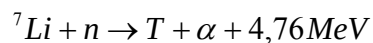
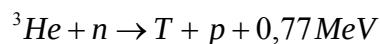
Für die Energieverteilung des Flusses ergibt sich mit T als Moderatortemperatur

$$\Phi(E) = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{\pi k_B^3 T^3}} e^{-\frac{E}{k_B T}}.$$

1.4 Neutronendetektoren

Der Nachweis von Neutronen erfolgt im Allgemeinen durch Kernreaktionen, deren prompten, energiereichen, geladenen Reaktionsprodukte wie Protonen oder Alpha-Teilchen detektiert werden. Neutronendetektoren bestehen daher aus einer Kombination eines Konvertermaterials, in dem die Kernreaktion stattfindet, mit einem Detektor für geladene Teilchen.

Als Konvertermaterialien für thermische Neutronen werden meist Helium, Lithium oder Bor gemäß den folgenden Reaktionen verwendet:



Im thermischen Bereich betragen die Wirkungsquerschnitte dieser drei Reaktionen 5327, 953 und 3837 barn. Der Nachweis dieser Reaktionen erfolgt durch Auslösen eines elektronisch messbaren Impulses in einem Gasionisationsdetektor (meist ${}^3\text{He}$ - oder BF_3 -Gas) oder in einem Szintillator (Li- oder B-Glas). [Rauch 1993]

2 Grundlagen der Streutheorie

2.1 Allgemeine Streutheorie

2.1.1 Stationäre Streulösungen

Ausgangspunkt für die Berechnung stationärer Streuzustände ist die stationäre Schrödingergleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right\} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (2.1)$$

zu einer festen, positiven Energie

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0 \quad (2.2)$$

Die Lösungen ergeben ein kontinuierliches Spektrum. Um aus den vielen möglichen Lösungen jene auszuwählen, die dem Streuproblem entsprechen, werden Lösungen gesucht, die asymptotisch gegen folgenden Ausdruck konvergieren.

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3} \left\{ e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{\pm ikr}}{r} \right\} \quad (2.3)$$

Diese gesuchte Lösung entspricht, wie auch in Abbildung 2.1. gezeigt, einer ebenen Welle und einer durch die winkelabhängige Streuamplitude gewichteten Kugelwelle.

$e^{i\vec{k}\vec{r}} \dots$	ebene Welle
$\frac{e^{\pm ikr}}{r} \dots$	gestreute Kugelwelle
$f(\vartheta, \varphi) \dots$	Streuamplitude

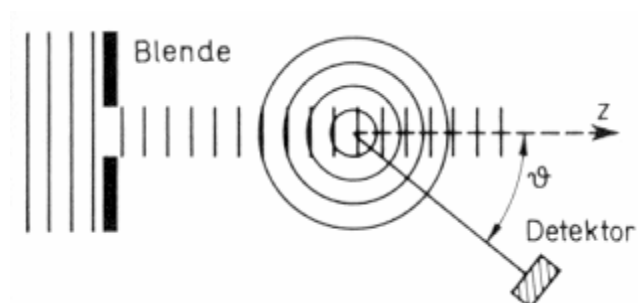


Abbildung 2.1. einlaufende ebene Welle und gestreute Kugelwelle [Mayer-Kuckuk 2002]

Diese Vorgangsweise, die Anwendung der so genannten Streurandbedingungen, ist nur für Potentiale gültig, die schneller als $1/r$ gegen Null gehen.

$$|V(\vec{r})| \leq r^{-\alpha} : \alpha > 1 \quad (2.4)$$

2.1.2 Lippmann-Schwinger-Gleichung

Die Lippmann-Schwinger-Gleichung ist eine Formulierung der Schrödingergleichung, die bereits die Streurandbedingung enthält. Sie liefert exakte Lösungen des Streuproblems für den gesamten Ortsraum.

Umformen der Schrödingergleichung führt auf

$$\{\nabla^2 + k^2\}\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r}) \quad \text{mit} \quad U(\vec{r}) = \frac{2mV(\vec{r})}{\hbar^2} \quad (2.5)$$

$\{\nabla^2 + k^2\}$ stellt den Helmholtzoperator dar, der angewendet auf die Green-Funktion

$$G_0^\pm(\vec{k}, \vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (2.6)$$

eine Delta-Funktion ergibt

$$\{\nabla^2 + k^2\}G_0^\pm(\vec{k}, \vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.7)$$

Die Methode der Greenschen Funktion führt somit auf die Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$\psi^\pm(\vec{k}, \vec{r}) = \phi(\vec{k}, \vec{r}) + \int d^3r' G_0^\pm(\vec{k}, \vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi^\pm(\vec{k}, \vec{r}') \quad (2.8)$$

mit der normierten ebenen Welle

$$\phi(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (2.9)$$

als homogene Lösung der Helmholtzgleichung.

Bei den Lösungen $\psi^\pm(\vec{k}, \vec{r})$ handelt es sich nicht um quadratintegrale Funktionen sondern um Distributionen. Ein- (ψ^-) beziehungsweise auslaufende (ψ^+) Welle sind dabei voneinander linear unabhängige Lösungen.

2.1.3 Bestimmung der Streuamplitude aus der Lippmann-Schwingergleichung

Für die Bestimmung der Streuamplitude durch die Lippmann-Schwingergleichung sind eine asymptotische Entwicklung derselben und ein Vergleich mit der asymptotischen Lösung der Schrödingergleichung zweckmäßig.

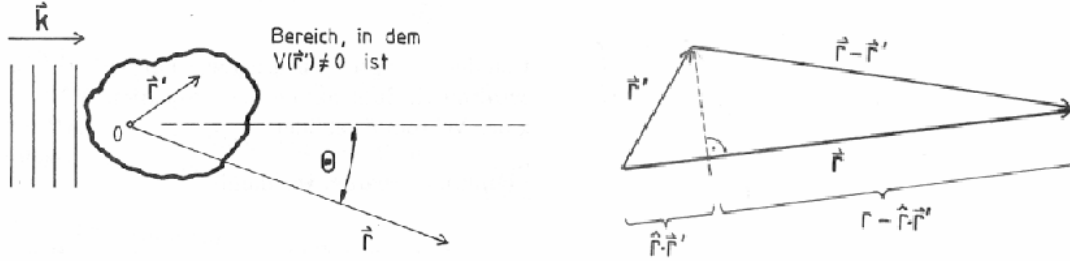


Abbildung 2.2. Zur Herleitung der Streuamplitude [Burgdörfer 2004]

Eine Entwicklung der Terme

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{(\vec{r} - \vec{r}')^2} = r \sqrt{1 - 2\vec{r}' \cdot \frac{\hat{r}}{r} + \left(\frac{r'}{r}\right)^2} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\approx} r \left(1 - \frac{\vec{r} \cdot \hat{r}}{r}\right) \Rightarrow e^{\pm i k |\vec{r} - \vec{r}'|} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\rightarrow} e^{\pm i k r} e^{\mp i \vec{k}' \cdot \vec{r}'} \text{ mit } \vec{k}' := k \hat{r}$$

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\rightarrow} \frac{1}{r}$$

führt auf die asymptotische Green-Funktion

$$G_0^\pm(\vec{k}, \vec{r}, \vec{r}') \stackrel{r \rightarrow \infty}{\rightarrow} -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm i k r} e^{\mp i \vec{k}' \cdot \vec{r}'}}{r}. \quad (2.10)$$

Einsetzen in die Lippmann-Schwingergleichung

$$\begin{aligned} \psi^\pm(\vec{k}, \vec{r}) &\stackrel{r \rightarrow \infty}{\rightarrow} \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3} e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} - \int d^3 r' \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm i k r} e^{\mp i \vec{k}' \cdot \vec{r}'}}{r} U(\vec{r}') \psi^\pm(\vec{k}, \vec{r}') \\ &= \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3} \left\{ e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} + \left(-\sqrt{\frac{\pi}{2}} \int d^3 r' e^{\mp i \vec{k}' \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') \psi^\pm(\vec{k}, \vec{r}') \right) \frac{e^{\pm i k r}}{r} \right\} \end{aligned} \quad (2.11)$$

und Vergleich mit asymptotischer Lösung der Schrödingergleichung (2.3) führt auf das gewünschte Resultat

$$f(\vartheta, \varphi) = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \int d^3 r' e^{\mp i \vec{k}' \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') \psi^\pm(\vec{k}, \vec{r}') \quad (2.12)$$

2.2 Der differentielle Wirkungsquerschnitt

2.2.1 Zusammenhang Messung und Streutheorie

Mit dem Detektor misst man die Zahl N , der pro Zeiteinheit in den Raumwinkel $d\Omega$ in die Richtung (θ, φ) gestreuten Teilchen.

$$N = \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot J_0 \cdot d\Omega \quad (2.13)$$

Die Anzahl der bei der Streuung an einem Potential abgelenkten Teilchen ist also proportional zum einlaufenden Teilchenstrom. Die Proportionalitätskonstante ist der differentielle Wirkungsquerschnitt und lässt sich aus dem Verhältnis von einlaufender zu gestreuter Neutronenstromdichte berechnen.

2.2.2 Neutronenstromdichte

Die Stromdichte J gibt die Anzahl von Teilchen pro Zeit- und Flächeneinheit an.

Für eine Wellenfunktion ist die Wahrscheinlichkeitsstromdichte wie folgt berechenbar

$$\bar{J} = \text{Re} \left\{ \psi^* \frac{\hbar}{mi} \nabla \psi \right\} \quad (2.14)$$

Setzt man für die einlaufenden Neutronen eine ebene Welle $\psi_0 = e^{ikz}$ an, so ergibt sich für den einfallenden Neutronenstrom

$$J_0 = \text{Re} \left\{ e^{-ikz} \frac{\hbar}{mi} \frac{d}{dz} e^{ikz} \right\} = \frac{\hbar k}{m} \quad (2.15)$$

Für die Stromdichte der Streuwelle $\psi_{sc} = f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$ ist der Radialteil der dominante Anteil.

Im Grenzfall $r \rightarrow \infty$ gilt für einen Fluss gestreuter Teilchen durch eine Kugeloberfläche mit Radius r , die das Streuzentrum umschließt

$$J_{sc} = \int J_{sc}^r r^2 d\Omega \quad (2.16)$$

Der Radialteil des gestreuten Neutronenstroms berechnet sich wie vorher zu

$$J_{sc}^r = \text{Re} \left\{ \frac{e^{-ikr}}{r} f^*(\Omega) \frac{\hbar}{im} \frac{d}{dr} \left(f(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \right\} = |f(\Omega)|^2 \frac{\hbar k}{mr^2} \quad (2.17)$$

2.2.3 Wirkungsquerschnitt

Für den Wirkungsquerschnitt ergibt sich somit

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int \frac{J_{sc}^r r^2}{J_0} d\Omega = \int |f(\Omega)|^2 d\Omega \quad (2.13)$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist daher das Quadrat der Streuamplitude

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\Omega)|^2 \quad (2.13)$$

Er hat die Dimension einer Fläche und kann daher als effektive Fläche, die das Target dem einlaufenden Strahl für die Streuung in den Raumwinkel $d\Omega$ bietet, interpretiert werden.

2.3 Bornsche Näherung

Die Dirac-Notation¹ der Lippmann-Schwinger-Gleichung lautet

$$|\psi_{\vec{k}}^{\pm}\rangle = |\vec{k}\rangle + G_0^{\pm}(\vec{k})U|\psi_{\vec{k}}^{\pm}\rangle \quad (2.13)$$

Eine einfache Umformung und Entwicklung in eine geometrische Reihe führt auf

$$|\psi_{\vec{k}}^{\pm}\rangle = (1 - G_0^{\pm}(\vec{k})U)^{-1}|\vec{k}\rangle = \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} (G_0^{\pm}(\vec{k})U)^n \right\} |\vec{k}\rangle \quad (2.14)$$

Dirac-Notation der Streuamplitude:

$$f(\vartheta, \varphi) = -2\pi^2 \langle \vec{k}' | U | \psi_{\vec{k}}^+ \rangle \quad (2.15)$$

Einsetzen der vorher umgeformten Streuwellenfunktion führt auf

$$f(\vartheta, \varphi) = -2\pi^2 \langle \vec{k}' | U \sum_{n=0}^{\infty} (G_0^{\pm}(\vec{k})U)^n | \vec{k} \rangle \quad (2.16)$$

Der Index n-1 bezeichnet die Ordnung der Bornschen Näherung. Somit gilt für die 1. Ordnung (n=0):

$$f^{1.B}(\vartheta, \varphi) = -2\pi^2 \langle \vec{k}' | U | \vec{k} \rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r V(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \quad (2.17)$$

wobei für den letzten Term für das Potential die ursprüngliche Notation $U(\vec{r}) = \frac{2mV(\vec{r})}{\hbar^2}$ benutzt und die Wellenvektoren durch den Impulsübertrag $\vec{q} := \vec{k}' - \vec{k}$ ausgedrückt wurden.

In erster Bornscher Näherung entspricht also die Streuamplitude der Fouriertransformierten des Potentials.

¹ Zur Erläuterung der Diracnotation:

$$\phi(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3} e^{i\vec{k}\vec{r}} = \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle$$

$$\psi^{\pm}(\vec{k}, \vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi_{\vec{k}}^{\pm} \rangle$$

$$G_0^{\pm}(\vec{k}, \vec{r}, \vec{r}') = \langle \vec{r} | G_0^{\pm}(\vec{k}) | \vec{r}' \rangle$$

2.4 Streuung an sphärisch symmetrischen Potentialen

2.4.1 Partialwellenentwicklung

Im Spezialfall eines Zentralpotentials ist der Drehimpuls eine Konstante der Bewegung. Daher gilt:

$$[H, \vec{L}] = [V(r), \vec{L}] = 0 \quad (2.18)$$

Daraus folgt, dass stationäre Zustände mit wohldefiniertem Drehimpuls existieren und damit ein VONS $\{H, L^2, L_z\}$, das H und L simultan diagonalisiert. Die Eigendistributionen zu dieser Basis nennt man Partialwellen.

Anders gesagt: die Partialwellendarstellung ist die Parametrisierung nach Bahndrehimpulsen der einfallenden Teilchen.

Die Darstellung einer ebenen Welle in Eigenfunktionen des Drehimpulses l ist

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \vartheta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \vartheta) \quad (2.19)$$

Die $j_l(kr)$ stellen die sphärischen Besselfunktionen dar.

$$j_l(x) = -(-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \left(\frac{\sin x}{x} \right) \quad (2.20)$$

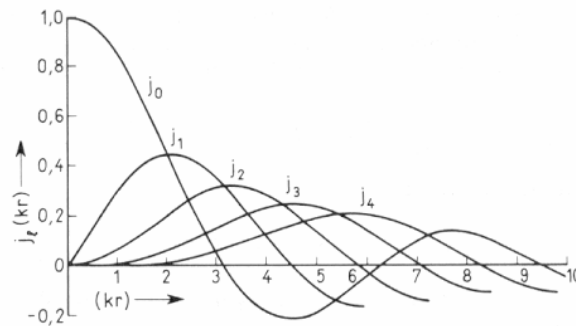


Abbildung 2.3. Sphärische Besselfunktionen [Mayer-Kuckuk 2002]

2.4.2 Partialwellendarstellung

Für die Anwendung auf asymptotische Streuzustände

$$\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \psi_0 + \psi_{sc} \propto e^{ikz} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{\pm ikr}}{r} \quad (2.21)$$

ist der Grenzfall der sphärischen Besselfunktionen für große Entfernungen von Bedeutung

$$j_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr} = \frac{i}{2kr} \left[e^{-i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)} - e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)} \right] \quad (2.22)$$

Für die ebene einlaufende Welle ergibt sich mit oben angeführten Entwicklungen in großer Entfernung vom Streuzentrum

$$\psi_0 = e^{ikz} = \frac{1}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^{l+1} \left[e^{-i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)} - e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)} \right] P_l(\cos \vartheta) \quad (2.23)$$

Wobei die Exponentialfunktionen eine einlaufende und eine auslaufende Kugelwelle darstellen, das heißt, dass die ebene Welle formal in eine Summe aus ein- und auslaufenden Kugelwellen zerlegt wurde.

Die gleiche Entwicklung ergibt sich für die totale Wellenfunktion ψ , wenn das Potential ausgeschaltet ist. Da man Lösungen in großer Entfernung vom Streuzentrum betrachtet, muss sich auch bei einem Potential $V \neq 0$ die totale Wellenfunktion als Lösung einer kräftefreien Bewegung, also in analoger Weise darstellen lassen. Die Modifikation durch das Streupotential kann hierbei nur die auslaufende Kugelwelle betreffen.

$$\psi = \frac{1}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^{l+1} \left[e^{-i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)} - \eta_l e^{i\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)} \right] P_l(\cos \vartheta) \quad (2.24)$$

Die Streuwelle ψ_{sc} lässt sich als Differenz von einfallender und totaler Wellenfunktion schreiben

$$\psi_{sc} = \psi - \psi_0 = f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - \eta_l) P_l(\cos \vartheta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.25)$$

Die Streuamplitude in Partialwellendarstellung ist hierdurch unmittelbar ablesbar

$$f(\vartheta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - \eta_l) P_l(\cos \vartheta) \quad (2.26)$$

${}^{\perp} i^l = e^{\frac{i l \pi}{2}}$

2.4.3 Streuphasendarstellung

Im Falle rein elastischer Streuung manifestiert sich der Einfluß des Potentials asymptotisch im Wesentlichen nur in einer Phasenverschiebung zwischen der ungestörten ψ_0 und der gestreuten Welle ψ_{sc} , der so genannten Streuphase δ_l .

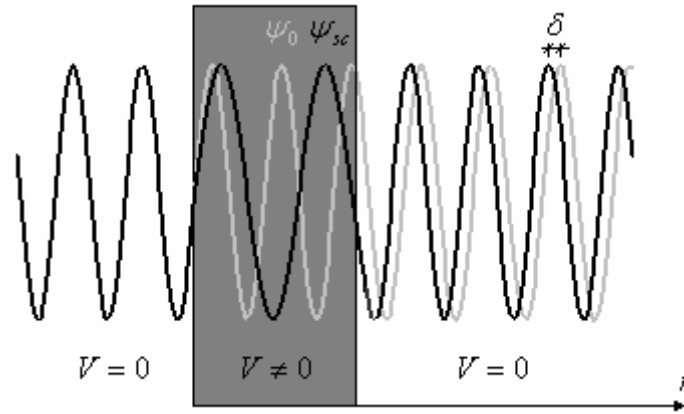


Abbildung 2.4. Zur Erläuterung der Streuphase

Mit

$$\eta_l = e^{2i\delta_l} \quad (2.27)$$

ergibt sich für die Streuamplitude

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \vartheta) \quad (2.28)$$

Bei festgelegter Energie der einfallenden Teilchen ist die Reichweite des Potentials ausschlaggebend für die Anzahl der Partialwellen, die zur Summe beitragen.

Im Falle niederenergetischer Neutronen, also mit Wellenlängen (einige Å) viel größer als der Durchmesser der Atome (einige fm) und aufgrund der Kurzreichweitigkeit der Kernkräfte kann man das Kernpotential als sphärisch symmetrisch annehmen und sich im Wesentlichen auf s-Wellenstreuung ($l=0$) beschränken.

Die Streuamplitude für s-Wellenstreuung reduziert sich somit zu

$$f_0(\vartheta) = e^{i\delta_0} \frac{\sin \delta_0}{k} \quad (2.29)$$

Der Wirkungsquerschnitt ist in diesem Fall isotrop

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 = |f_0|^2 = \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2} \quad (2.30)$$

Der Wirkungsquerschnitt für s-Wellen-Streuung von Neutronen hängt also nur von einem einzigen Phasenverschiebungswinkel δ_0 ab.

² Unter Verwendung von $\frac{i}{2} (1 - e^{2i\delta_l}) = e^{i\delta_l} \sin \delta_l$

2.4.4 Streulänge

Den Grenzwert für sehr kleine Wellenvektoren der einfallenden Teilchen bezeichnet man als Streulänge a :

$$\lim_{k \rightarrow 0} \left(\frac{\sin \delta_0}{k} \right) = -a \cong \frac{\delta_0}{k} \quad (2.31)$$

Betrachtet man den totalen Wirkungsquerschnitt so sieht man, dass das Streuzentrum wie eine Kugel mit dem Radius $2a$ wirkt.

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma = 4\pi a^2 \quad (2.32)$$

Im Allgemeinen ist die Streulänge eine komplexe Größe und kann im Gegensatz zur Röntgenstreuung sowohl positiv als auch negativ sein.

Größe und Vorzeichen der Streulänge enthalten Informationen über die Eigenschaft des Streupotentials. Betrachtet man beliebige zentrale Potentiale, so ergibt sich die Streulänge als Schnittpunkt der Tangente an die reale Radialwellenfunktion bei $r=R_0$ mit der radialen Achse.

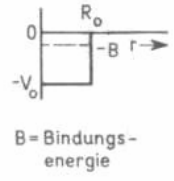
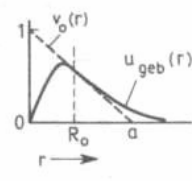
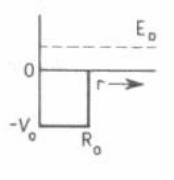
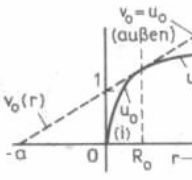
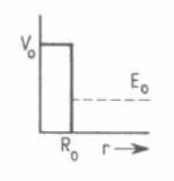
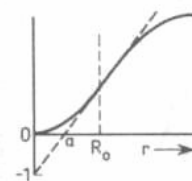
	1 Potentialform $V(r)$	2 k^2 i =Innenraum a =Außenraum	3 Form der Lösung $u(r)$	4 Bei der Streulösung für $E \rightarrow 0$ ist k^2 Krümmung $u'' = -k^2 u$	5 Skizze der Wellenfunktionen	6 Streulänge a
a)	 $B = \text{Bindungsenergie}$	$k_i^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - B) > 0$ $k_a^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (-B) < 0$ Für gebundenen Zustand (innen $E = -B, V(r) = -V_0$)	$\sin k_i r$ $e^{- k_a r}$	> 0 0	Negativ (innen) 0	 $a > R_0$
b)	 E_0	$k_i^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E_0) > 0$ $k_a^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_0 > 0$	$\sin k_i r$ $\sin(k_a r + \delta)$	> 0 0	Negativ (innen) 0	 $a < 0$
c)	 E_0	$k_i^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - V_0) < 0$ $k_a^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E_0 > 0$	$e^{ k_i r}$ $\sin(k_a r - \delta)$	< 0 0	Positiv (innen) 0	 $0 < a < R_0$

Abbildung 2.5. Streulängen für verschiedene Potentiale [Mayer-Kuckuk 2002]

Die Streulängen der Elemente und deren Isotope werden mittels neutronenoptischer Experimente bestimmt. Sie sind die relevanten Größen zur Beschreibung der Neutron-Kernwechselwirkung im Niederenergiebereich.

3 Streuung thermischer Neutronen

3.1 Streupotential thermischer Neutronen

3.1.1 Fermi - Pseudopotential

Die Reichweite der Neutron-Kern-Wechselwirkung (starke Wechselwirkung $\sim 10^{-15}\text{m}$) ist wesentlich kleiner als die Wellenlänge thermischer Neutronen ($\sim 10^{-10}\text{m}$). Dies rechtfertigt den Ansatz eines punktförmigen Potentials.

$$V(\vec{r}') \propto \delta(\vec{r}') \quad (3.1)$$

Die Streuamplitude $f(\theta)$ für thermische Neutronen kann (siehe Kapitel 2.4.) durch die *Streulänge* a angegeben werden.

$$f(\theta) = -a \quad (3.2)$$

Unter Verwendung der Streuamplitude in erster Bornscher Näherung (2.17)

$$f^{1.Born}(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' V(\vec{r}') e^{-i\vec{q}\vec{r}'}$$

wird ersichtlich, dass das zugehörige Potential von der Form

$$V(\vec{r}') = \frac{2\pi\hbar^2}{m} a \delta(\vec{r}') \quad (3.3)$$

sein muss. Dies ist das so genannte *Fermi-Pseudopotential* [Fermi (1936)]

3.1.2 Streuung thermischer Neutronen am gebundenen Atomkern

Während der Kollision ist die (Kern)Kraft, die das Neutron auf den gestreuten Kern ausübt, um viele Ordnungen größer als die interatomaren Kräfte. Als Näherung nimmt man das Atom für die Zeit der Kollision als quasifrei an (Impuls Approximation) [Fermi (1936) beziehungsweise Chew (1950)]

Für die Streuung thermischer Neutronen an einem quasifreien (elastisch eingebetteten) Atom gilt

$$V(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu} a \delta(\vec{r}) \quad \text{beziehungsweise} \quad V(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b \delta^3(\vec{r}) \quad (3.4)$$

mit b als so genannte *gebundene Streulänge*, $\vec{r}$ als Position des Neutrons relativ zum Kern

$$b = \left(\frac{m+M}{M} \right) a = \frac{m}{\mu} a \quad (3.5)$$

und μ

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \quad (3.6)$$

als reduzierte Masse von Neutron (m) und Kern (M).

3.1.3 Streuung an einem System gebundener Atome

Für die Kleinwinkelstreuung kohärenter Neutronen an ausgedehnten Strukturen in einem Festkörper kann man das System wie ein kontinuierliches, makroskopisches Medium mit einem resultierenden mittleren makroskopischen Potential

$$V = \left\langle \sum_i^N V_i \right\rangle = \left\langle \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_i^N b_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \right\rangle \quad (3.7)$$

ansetzen.

Unter Benützung der *mittleren kohärenten gebundenen Streulängendichte*

$$b_c = \langle b_i \rangle \quad (3.8)$$

und der *mittleren Teilchendichte*

$$N = \langle N(\vec{r}) \rangle = \left\langle \sum_i^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \right\rangle \quad (3.9)$$

ergibt sich das so genannte *optische Potential* zu

$$V = \frac{2\pi\hbar^2}{m} N b_c \quad (3.10)$$

Für ein homogenes System identischer Atome ist dieses mittlere Potential eine Konstante. Im Falle eines Siliziumeinkristalls ergibt sich diese mit $b_c = 4,419 \cdot 10^{-15} \text{ m}$ und $N = 4,99479 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$ zu $5,3975 \cdot 10^{-8} \text{ eV}$.

	N · 10²⁸ [m⁻³]	b_c [fm]
Be	12,362	7,791
Al	6,030	3,4495
Si	4,994	4,1491
Ti	5,657	-3,4382
V	7,034	-0,382412
Fe ³	8,475	9,546 ± 5,98
Co*	8,901	2,535 ± 4,64
Ni*	9,129	10,31 ± 1,62
⁵⁸ Ni*	9,251	15,05 ± 1,62
Cu	8,453	7,7184
Ge	4,438	8,18520
Hg	4,081	12,662
Pb	3,297	9,401720
H ₂ O	3,343	-1,6774
D ₂ O	3,322	19,1537
SiO ₂	2,641	15,7595

Tabelle 3.1. mittlere Teilchendichte und kohärente gebundene Streulänge einiger in der Neutronenoptik häufig verwendeter Substanzen. [Rauch 1993]

Betrachtet man ein System mit makroskopisch veränderlicher Zusammensetzung, so muss die Ortsabhängigkeit des Potentials weiterhin berücksichtigt werden.

$$V(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} (Nb_c)(\vec{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \rho(\vec{r}) \quad (3.11)$$

Wobei $\rho(\vec{r})$ als *kohärente gebundene Streulängendichte* bezeichnet wird.

Die Streuamplitude in erster Bornscher Näherung ergibt sich mit (2.17) zu

$$f^{1.B}(\vartheta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' V(\vec{r}') e^{-i\vec{q}\vec{r}'} = -\int d^3r' \rho(\vec{r}') e^{-i\vec{q}\vec{r}'} \quad (3.12)$$

und somit der Wirkungsquerschnitt (2.13) zu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{q}) = \left| \int d^3r' \rho(\vec{r}') e^{-i\vec{q}\vec{r}'} \right|^2 \quad (3.13)$$

* ± Angaben beziehen sich auf spinabhängige magnetische Streulängen

3.2 Makroskopische Streuphase

3.2.1 Der Brechungsindex

Neutronenoptische Experimente können mit guter Genauigkeit mit der Schrödingergleichung behandelt werden.

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right\} \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \quad (3.14)$$

Für ein stationäres quantenmechanisches System ($V = \text{konstant}$) wird der Zustand des Systems mit der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right\} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (3.15)$$

beschrieben, wobei ψ die Neutronen-Materiewelle, $\hbar$ das Planksche Wirkungsquantum, m die Neutronenmasse und E die Energie des Neutrons ist.

Unter Verwendung von

$$k(\vec{r})^2 = \frac{2m(E - V(\vec{r}))}{\hbar^2} \quad (3.16)$$

führt dies auf die Gleichung

$$\{\nabla^2 + k(\vec{r})^2\} \psi(\vec{r}) = 0 \quad (3.17)$$

Diese, auch als Helmholtz-Gleichung bekannte Differentialgleichung, zeigt deutlich die Analogie zur klassischen Optik.

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung für ein auf einen Raumbereich beschränktes, konstantes Potential V kann beschrieben werden durch ebene Wellen:

Innerhalb des Mediums $V(\vec{r}) = V$:

$$\psi(\vec{r}) = A e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad \text{mit} \quad k^2 = \frac{2m(E - V)}{\hbar^2} \quad (3.18)$$

Außerhalb des Mediums $V(\vec{r}) = 0$:

$$\psi(\vec{r}) = a e^{i\vec{k}_0\vec{r}} \quad \text{mit} \quad k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (3.19)$$

Der Brechungsindex in der Neutronenoptik ist analog zur klassischen Optik definiert als Verhältnis der Geschwindigkeiten in Vakuum (v_0) und in Materie (v)

$$n = \frac{v}{v_0}. \quad (3.20)$$

Die de Broglie-Relation $\lambda = \frac{h}{p}$ ($\Rightarrow p = \hbar k = mv$) führt somit auf $n = \frac{k}{k_0}$, wodurch der Brechungsindex dargestellt werden kann als

$$n = \sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}} = \sqrt{1 - \frac{V}{E}}. \quad (3.21)$$

Für $\frac{V}{E} \ll 1$ gilt dann

$$n \cong 1 - \frac{V}{2E} \quad (3.22)$$

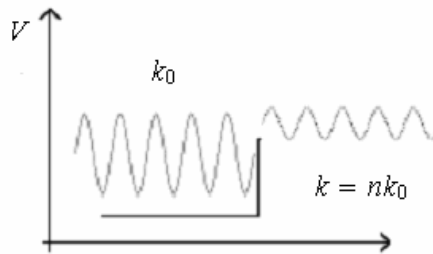


Abbildung 3.1. Impulsänderung bei Eintritt in ein Medium

Im Falle nicht polarisierter Neutronen trägt in erster Linie nur das Kernpotential zur Wechselwirkungs-Energie bei.

Ein mittleres Potential, geeignet für die Beschreibung der Wechselwirkung eines Neutrons mit einem ausgedehnten Medium der Teilchendichte N und der mittleren kohärenten Streulänge b_c , ist das Optische Potential (3.10)

$$V = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b_c N.$$

Unter Verwendung dieses Potentials ergibt sich mit

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m\lambda^2} \quad (3.23)$$

der Brechungsindex zu

$$n = 1 - \frac{b_c N \lambda^2}{2\pi}. \quad (3.24)$$

Im Allgemeinen Fall ist n eine komplexe Größe, wobei der Imaginärteil die Absorption beschreibt und nur der Realteil zum Phasenschub beiträgt.

3.2.2 Phasenschub

Makroskopisch können die Ergebnisse so interpretiert werden, dass die Neutronenwelle innerhalb des Mediums eine veränderte Wellenlänge $\lambda' = 2\pi/k'$ besitzt, wobei sich dies nach Austritt aus dem Medium nur noch in einem Phasenschub manifestiert.

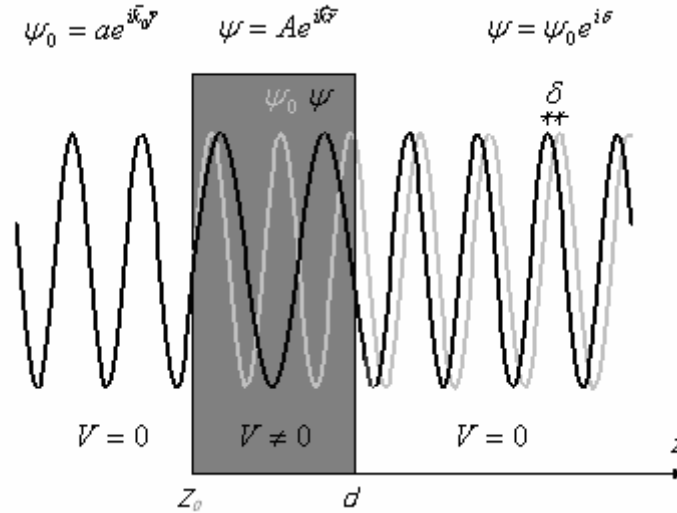


Abbildung 3.2. Zur Veranschaulichung des Phasenschubs

Die Größe des Phasenschubs beim Durchgang durch das Medium der Ausdehnung d in z-Richtung ergibt sich durch

$$\delta = (kz - k_0 z) \Big|_{z_0}^{z_0+d} = kd - k_0 d = k_0 d (n - 1) \quad (3.25)$$

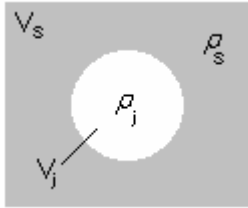
Unter weiterer Verwendung des vorher ermittelten Brechungsindex n ergibt sich daher

$$\chi = -db_c N \lambda \quad (3.26)$$

3.3 Streuung an zwei-Phasen-Systemen

3.3.1 Unkorrelierte zwei-Phasen-Systeme

Betrachtet man ein System mit konstanter Streulängendichte ρ_s , dem eine zufällig angeordnete Struktur V_j mit unterschiedlicher, aber ebenfalls konstanter Streulängendichte ρ_j eingelagert ist (z.B. Ausscheidungen in einer Matrix), so lässt sich der Wirkungsquerschnitt schreiben als



$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{q}) &= \left| \int_{V_s} d^3r' \rho(\vec{r}') e^{-i\vec{q}\vec{r}'} \right|^2 = \left| \int_{V_j} d^3r' \rho_j e^{-i\vec{q}\vec{r}'} + \int_{V_s-V_j} d^3r' \rho_s e^{-i\vec{q}\vec{r}'} \right|^2 \\ &= \left| \int_{V_j} d^3r' \Delta\rho \cdot e^{-i\vec{q}\vec{r}'} + \int_{V_s} d^3r' \rho_s \cdot e^{-i\vec{q}\vec{r}'} \right|^2 \end{aligned} \quad (3.27)$$

mit der Streulängendifferenz

$$\Delta\rho = \rho_j - \rho_s. \quad (3.28)$$

Im zweiten Term erstreckt sich die Integration über das Gesamtvolumen und liefert für große Volumina bei zufälliger Anordnung der eingelagerten Strukturen keinen relevanten Beitrag für den betrachteten Bereich.

Mit einer Funktion $s(\vec{r})$, welche die Form des Streuers durch

$$\begin{aligned} s(\vec{r}) &= 1 \quad \text{für } \vec{r} \text{ innerhalb } V_j \\ s(\vec{r}) &= 0 \quad \text{sonst} \end{aligned}$$

beschreibt, lässt sich der Wirkungsquerschnitt weiter umformen zu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{q}) = |F(\vec{q})|^2, \quad (3.29)$$

wobei

$$F(\vec{q}) = \Delta\rho \int d^3r' s(\vec{r}') e^{-i\vec{q}\vec{r}'} \quad (3.30)$$

den so genannten *Formfaktor* des Streuers darstellt.

3. Streuung thermischer Neutronen

Für die Streuung an einfachen geometrischen Objekten kann der Formfaktor leicht durch Fouriertransformation angegeben werden.

Für den Fall unkorrelierter homogener Sphären mit $\Delta\rho = 1$ und dem Radius R ergibt sich etwa

$$s(\vec{r}) = s(r) = \begin{cases} 0 & : r > R \\ 1 & : r \leq R \end{cases}$$

$$F(\vec{q}) = \int d^3r' s(r') e^{-i\vec{q}\vec{r}'} = \int dr' s(r') r'^2 \underbrace{\int d\Omega e^{-i\vec{q}\vec{r}'}}_{\frac{4\pi}{qr'} \sin qr'} = \frac{4\pi}{q} \int_0^R dr' r' \sin qr' = V \cdot 3 \frac{\sin qR - qR \cos qR}{q^3}$$

mit dem Volumen der Sphäre $V = \frac{4\pi R^3}{3}$

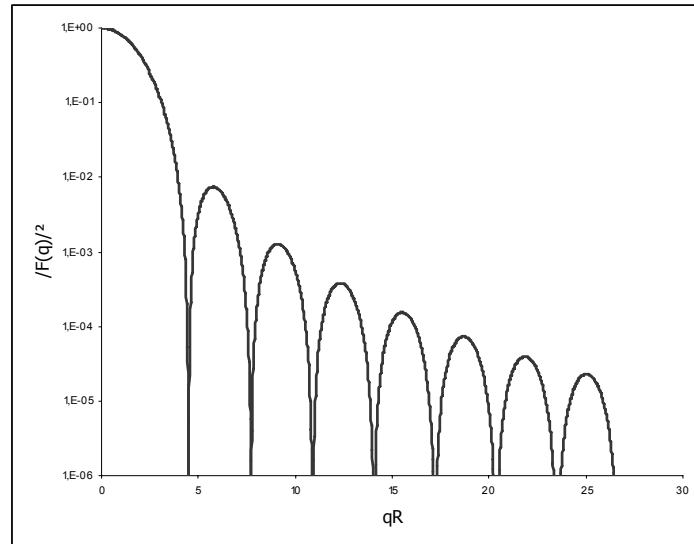


Abbildung 3.3. Betragquadrat des Formfaktors $|F(\vec{q})|^2$ für homogene Sphären

Für den Bereich kleiner Streuvektoren $qr \ll 1$ hat [Guinier (1939)] im Rahmen einer Reihenentwicklung des Formfaktors gezeigt, dass der Verlauf des Streuquerschnitts in diesem Bereich allgemein durch ein Exponentialgesetz beschreibbar ist

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{q}) \propto e^{-\frac{q^2 R_g^2}{3}}, \quad (3.31)$$

wobei R_g den Trägheitsradius der Ausscheidung, auch *Guinierradius* genannt, angibt. Für den oben behandelten Fall einer Kugel wäre dieser

$$R_g = \sqrt{\frac{3}{5}} R. \quad (3.32)$$

3.3.2 Korrelierte zwei-Phasen-Systeme

Die bisherigen Ausführungen beziehen sich auf statistisch verteilte, von einander unabhängige Streugeometrien. Die Intensitäten der Einzelstreuer konnten einfach zum totalen Beugungsbild aufaddiert werden.

Sind die Streuer jedoch in einer periodischen Anordnung, so sind weitere Interferenzeffekte zu erwarten.

Betrachtet man N identische Strukturen an den Positionen $\vec{r}_j$ mit $\vec{r} = \vec{r}_j + \vec{r}_j'$ (3.33)

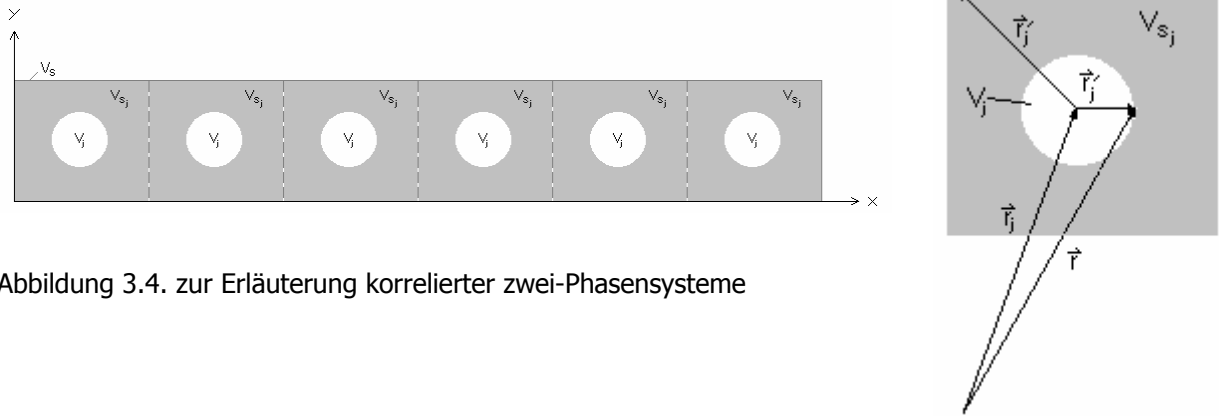


Abbildung 3.4. zur Erläuterung korrelierter zwei-Phasensysteme

so lässt sich der Wirkungsquerschnitt [Kratky (1982)] angeben als

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{q}) &= \left| \int_{V_s} d^3r \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} \right|^2 = \left| \sum_j^N e^{i\vec{q}\vec{r}_j} \overbrace{\int_{V_{s_j}} d^3r_j' \rho(\vec{r}_j') e^{-i\vec{q}\vec{r}_j'}}^{F_j(\vec{q})} \right|^2 = \left| \sum_j^N e^{-i\vec{q}\vec{r}_j} F_j(\vec{q}) \right|^2 \\ &= \sum_{k=0}^N \sum_{l=0}^N e^{-i\vec{q}(\vec{r}_k - \vec{r}_l)} F_k(\vec{q}) F_l^*(\vec{q}) \end{aligned} \quad (3.34)$$

Für den einfachen Fall

$$F_k(\vec{q}) = F_l(\vec{q}) = F(\vec{q}) \quad \text{und} \quad \vec{r}_{j+1} = \vec{r}_j + \Delta x \cdot \hat{e}_x \quad (3.35)$$

lässt sich die Summe entwickeln

$$\begin{aligned} \sum_j^N e^{-i\vec{q}\vec{r}_j} &= e^{-iq_y y} e^{-iq_z z} e^{-iq_x x_1} \overbrace{\left(1 + e^{-iq_x(x_2 - x_1)} + \dots + e^{-iq_x(x_N - x_1)} \right)}^{\sum_{n=0}^{N-1} e^{iq_x n \Delta x}} \\ &= e^{-iq_y y} e^{-iq_z z} e^{-iq_x x_1} e^{\frac{iq_x \Delta x}{2}(N-1)} \frac{\sin\left(N \frac{q_x \Delta x}{2}\right)}{\sin\left(\frac{q_x \Delta x}{2}\right)} \end{aligned} \quad (3.36)$$

und der Wirkungsquerschnitt reduziert sich zu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\bar{q}) = \left| \frac{\sin\left(N \frac{q_x \Delta x}{2}\right)}{\sin\left(\frac{q_x \Delta x}{2}\right)} \right|^2 \cdot |F(\bar{q})|^2 \quad (3.37)$$

Der erste Term, im weiteren *Strukturfaktor* genannt, gibt die Periode der Anordnung wieder. Die Funktion $\sin^2(Nx)/\sin^2(x)$ ist in Abbildung 3.5 für verschiedene N dargestellt.

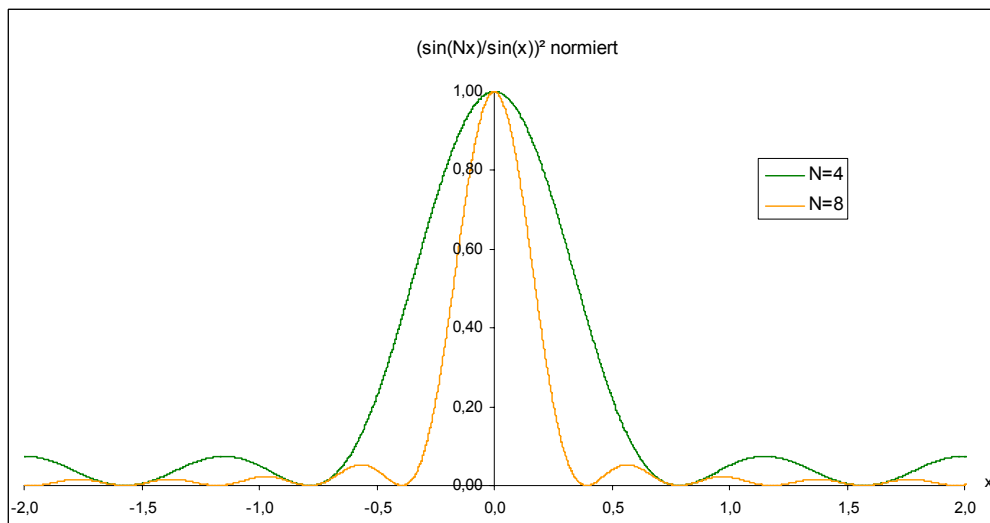


Abbildung 3.5. Funktion $\sin^2(Nx)/\sin^2(x)$ für N=4 und N=8

3.4 Erste Bornsche Näherung mit optischen Potential

3.4.1 Geometrische Interpretation

Betrachtet man die Streuamplitude in erster Bornscher Näherung (2.17)

$$f^{1.B}(\vartheta, \varphi) = -2\pi^2 \langle \vec{k}' | U | \vec{k} \rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r V(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}$$

mit dem optischen Potential (3.10)

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

und der Formfunktion des Streuers

$$s(\vec{r}) = 1 \quad \text{für } \vec{r} \text{ innerhalb Streuvolumen } V_s$$

$$s(\vec{r}) = 0 \quad \text{sonst}$$

reduziert sich die Streuamplitude auf

$$f^{1.B}(\vartheta, \varphi) = -N b_c \int_{V_s} d^3r' e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'} \quad (3.38)$$

Dies kann man anschaulich geometrisch interpretieren als einfach gestreute ebene Wellen mit geometrischem Phasenunterschied $\Delta\chi$

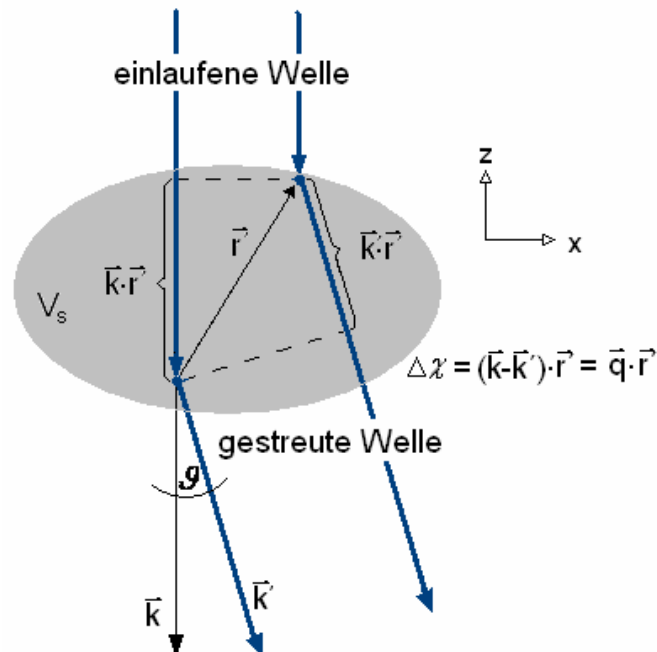


Abbildung 3.6. zur Veranschaulichung der geometrischen Interpretation der ersten Bornschen Näherung mit optischem Potential

Die Streuintensität ergibt sich also aus der Summation der an den Atomkernen einfach gestreuten Wellen und somit der Interferenz aufgrund der Phasenunterschiede, die sich aus den geometrischen Bedingungen des Objekts ergeben. Die Methode liefert also eine Abbildung des dreidimensionalen Streuobjektes.

3. Streuung thermischer Neutronen

Der geometrische Phasenunterschied der Anordnung in Abbildung 3.6 ist

$$\Delta\chi = (\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}' = \vec{q} \cdot \vec{r}' = kr'2 \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right) \approx kr'\vartheta. \quad (3.39)$$

Für eine Streugeometrie mit $\vec{r}' = (r', 0, 0)$ ergibt sich der Wegunterschied zu

$$\Delta\chi = \vec{k}' \cdot \vec{r}' = kr' \sin(\vartheta) \approx kr'\vartheta \quad (3.40)$$

Für sehr kleine Streuwinkel ϑ wird also die z-Abhängigkeit minimal.

Um dies zur Veranschaulichung in Zahlenwerten auszudrücken, kann man die richtungsabhängigen Wegunterschiede wie in Abbildung 3.7 definieren:

$$\begin{aligned} \Delta s_d &= d(1 - \cos \vartheta) \\ \Delta s_b &= b \sin \vartheta \\ \Delta\chi &= 2\pi\Delta s / \lambda \end{aligned} \quad (3.41)$$

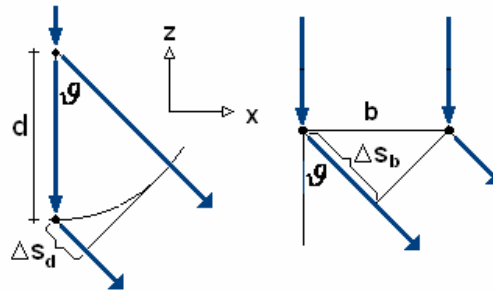


Abbildung 3.7. Richtungsabhängige Wegunterschiede

Mit einer Wellenlänge von $\lambda = 1,76\text{\AA}$ und somit einem Phasenunterschied von etwa $3,57 \cdot 10^4$ pro μm ergeben sich die relativen geometrischen Phasenunterschiede in Abhängigkeit zur Ausdehnung des Streuvolumens in x- beziehungsweise z-Richtung wie in Tabelle 3.1. angeführt

Winkel [μrad]	Geometrischer Phasenunterschied pro μm		Geometrischer Phasenunterschied	
	z-Abhängigkeit (d)	x-Abhängigkeit (b)	d=80 μm	b=20 μm
0,1	1,78E-10	3,57E-03	1,43E-08	7,14E-02
15	4,02E-06	5,35E-01	3,21E-04	1,07E+01
30	1,61E-05	1,07E+00	1,29E-03	2,14E+01
45	3,61E-05	1,61E+00	2,89E-03	3,21E+01
60	6,43E-05	2,14E+00	5,14E-03	4,28E+01
150	4,02E-04	5,35E+00	3,21E-02	1,07E+02

Tabelle 3.2. geometrische Phasenunterschiede

Der Phasenschub nach Durchgang durch ein homogenes makroskopisches Medium (3.26) war

$$\chi = -Nb_c \lambda d$$

Für Silizium bei einer Wellenlänge von $1,76\text{\AA}$ beträgt dies etwa 0,037 pro μm . Für einen Phasenschub von π müsste eine Neutronenwelle einen Weg von etwa $86\mu\text{m}$ im Medium zurücklegen. In Tabelle 3.3 sind die Phasenschübe für verschiedene d angegeben.

d [μm]	$\chi = -Nb_c \lambda d$
40	-1,4593
60	-2,1889
80	-2,9186

Tabelle 3.3. Phasenschübe nach (3.26) für verschiedene Durchgangslängen

Bei kleinen Streuwinkeln und großen d ist der Phasenunterschied nach (3.26) also wesentlich größer als jener hervorgerufen durch die Streugeometrie in Einfallsrichtung (z-Richtung).

3.4.2 Probleme bei Phasengittern

Phasengitter, wie sie bei den Messungen benutzt wurden, haben streng periodische Strukturen und sind somit korrelierte Systeme. Es sind daher die Interferenzen der Einzelstreuer zu berücksichtigen, aber auch Interferenzen, hervorgerufen durch die ungestreute Welle, wobei sowohl Interferenzen der ungestreuten mit den gestreuten Wellen als auch jene der ungestreuten Wellen mit sich selbst zu betrachten sind.

Diese wirken sich besonders in einem kleinen Winkelbereich nahe der Vorwärtsstreurichtung aus und zeigen sich zum Beispiel in einer Absenkung der nullten Ordnung.

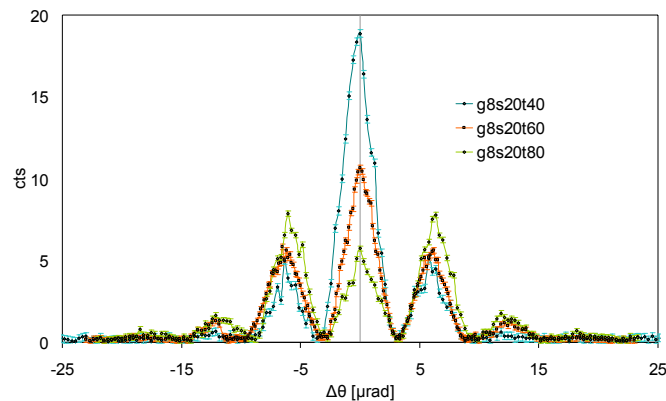


Abbildung 3.8. Messung Phasengitter mit Steghöhen 40,60 und 80µm bei geradem Einfallswinkel; geringe Variationen der Steghöhe führen zu starken Änderungen im Beugungsbild.

Streutheorien wie die erste Bornsche Näherung berücksichtigen die einfallende Welle nicht und sind somit nicht besonders gut für die Berechnung von Phasengittern in diesem Winkelbereich geeignet.

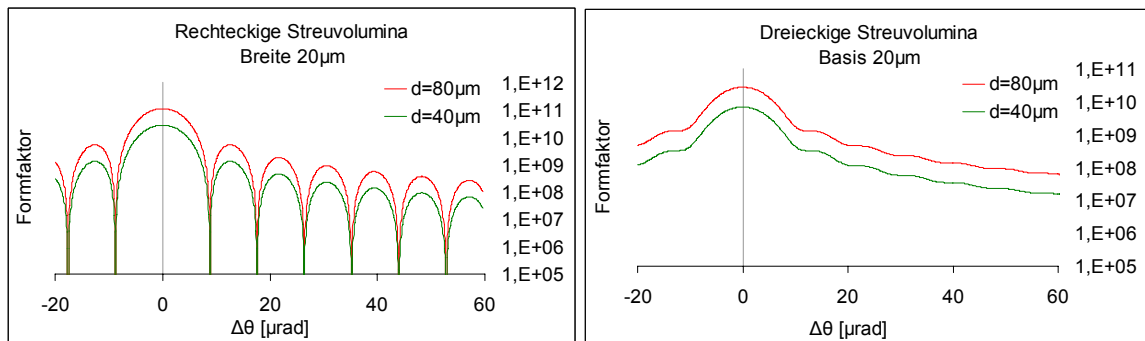


Abbildung 3.9. Formfaktoren berechnet mit erster Bornscher Näherung und optischem Potential für verschiedene Streugeometrien. Additive Änderung der Intensität.

Die „Form“ des Beugungsbildes, berechnet in erster Bornscher Näherung mit optischem Potential, ändert sich durch (realistische) Variation der Geometrie in Einfallsrichtung nicht. Die Intensität ändert sich lediglich additiv. Dies gilt für jede Streugeometrie. So haben rechteckige oder dreieckige Streuvolumen gleicher Breite, aber mit doppelter Höhe einfach die vierfache Intensität. Erst bei großen Streuwinkeln oder unrealistischen Dimensionen von d ist eine Abhängigkeit des Beugungsbildes von d zu sehen.

Ein weiterer Grund für die schlechte Eignung der Methode ist die Tatsache, dass eine Phasendifferenz, hervorgerufen rein durch die geometrischen Bedingungen (Kapitel 3.4.1) in Einfallsrichtung zu gering ist, um asymmetrische Beugungsbilder, wie sie in den Messungen vorkommen, zu beschreiben.

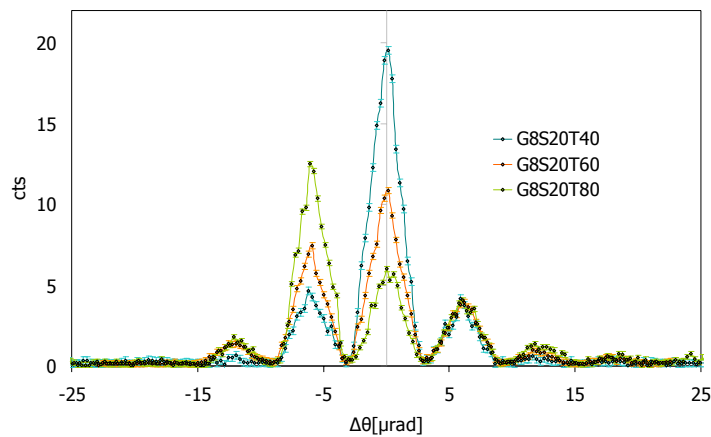


Abbildung 3.10. Messung Phasengitter mit Steghöhen 40, 60 und 80 µm bei einer Gitterverdrehung um circa 4°; Asymmetrische Beugungsbilder

Selbst bei asymmetrischen Streuvolumina (in realistischer Größenordnung) werden mit der Methode im Bereich kleiner Streuwinkel immer symmetrische Beugungsbilder berechnet, wie auch in Abbildung 3.11.a für eine dreieckige Streuanordnung zu sehen ist.

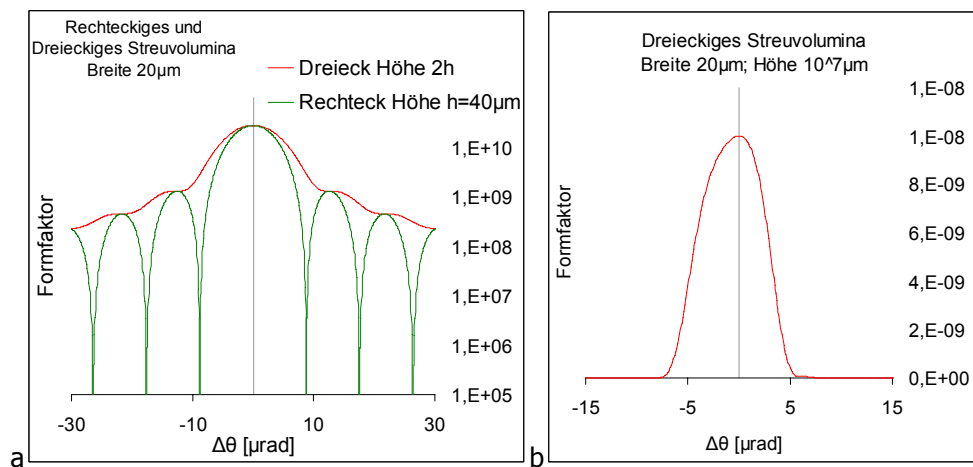


Abbildung 3.11. Formfaktoren berechnet mit erster Bornscher Näherung und optischen Potential für verschiedene Streugeometrien; symmetrische Beugungsbilder bei realistischen Größenordnungen (a); asymmetrisches Streubild für dreieckiges Streuvolumen mit unrealistischer Höhe $10^7 \mu\text{m}$ (b)

Der durch die Dreiecksanordnung kontinuierlichere Phasenunterschied führt zwar zum Auswaschen der Minima, aber zu keiner Asymmetrie (Abbildung 3.11. a.). Erst bei Extremwerten von d kommt es zu asymmetrischen Beugungsbildern (Abbildung 3.11. b.).

Die Messung asymmetrischer Beugungsbilder bei Phasengitter und die gemessene starke Abhängigkeit der Beugungsbilder von der Ausdehnung der Streuanordnung in Einfallsrichtung zeigen, dass eine Behandlung von Phasengittern mit der ersten Bornschen Näherung mit optischem Potential keine ausreichende Methode darstellt.

Gerade die verschwindende z -Abhängigkeit der Streuanordnung (Kapitel 3.4.1) legt einen anderen Ansatz nahe wie Kapitel 5 behandelt. Da diese Abhängigkeit mit steigendem Streuwinkel (Tabelle 3.2.) zunimmt, ist dieses Modell jedoch nur für kleine Winkel gültig.

4 Beugungstheorie

4.1 Huygens Prinzip

Das Huygens Prinzip (C. Huygens 1680) besagt, dass jeder Punkt auf einer Phasenfläche einer Welle als Ausgangspunkt einer neuen Welle (Sekundarwelle) angesehen werden kann. Diese Sekundarwellen breiten sich als Kugelwellen in alle Richtungen aus und überlagern sich. Die Tangentenflächen an den Kugelwellenfronten der Sekundarwellen bilden wiederum eine Phasenfläche der Primärwelle, die gegenüber der ersten Fläche im Raum um $r = v_{\text{ph}} \cdot \Delta t$ vorgerückt ist.

Trifft eine solche Phasenfront auf ein Hindernis, so werden Wellenanteile unterdrückt und es sind Beugungsphänomene zu beobachten.

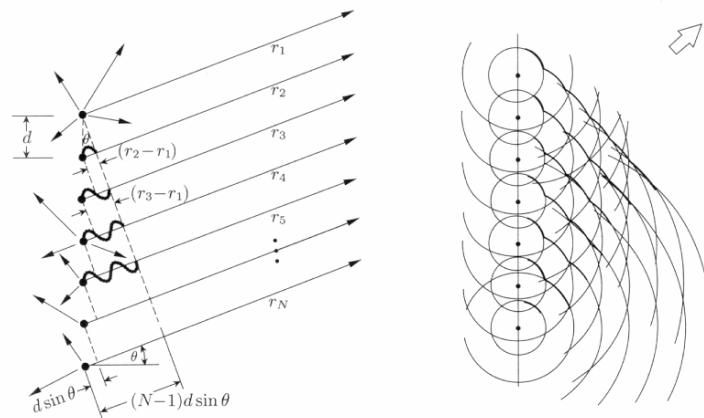


Abbildung 4.1. Wellenausbreitung [Hecht 2005]

Mittels dieses Prinzips kann man den Durchgang von Wellen durch eine Blendenöffnung so beschreiben, dass jeder Punkt innerhalb der Blendenöffnung Quellpunkt für eine Welle ist. Für einen Spalt der Breite b kann die Intensität als Überlagerung dieser Wellen somit beschrieben werden durch

$$\begin{aligned}
 I = |A|^2 &= \left| A_0 e^{-i\omega t} \sum_{i=1}^N e^{ikr_i} \right|^2 = \left| A_0 e^{i(kr_1 - \omega t)} \sum_{i=1}^N e^{ik(r_i - r_1)} \right|^2 = \left| A_0 e^{i(kr_1 - \omega t)} \sum_{n=0}^{N-1} e^{ik \sin \vartheta dn} \right|^2 \\
 &= \left| A_0 e^{i(kR - \omega t)} \frac{\sin\left(\frac{N\pi d}{\lambda} \sin \vartheta\right)}{\sin\left(\frac{\pi d}{\lambda} \sin \vartheta\right)} \right|^2 \quad \text{mit } R = r_1 + \frac{(N-1)d \sin \vartheta}{2}
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

In Fernfeldnäherung mit $Nd = b$, $N \rightarrow \infty$ und $d \rightarrow 0$ ergibt sich dies zu

$$I = I_0 \left(\frac{\sin \beta}{\beta} \right)^2 \quad \beta = \frac{\pi b}{\lambda} \sin \vartheta \tag{4.2}$$

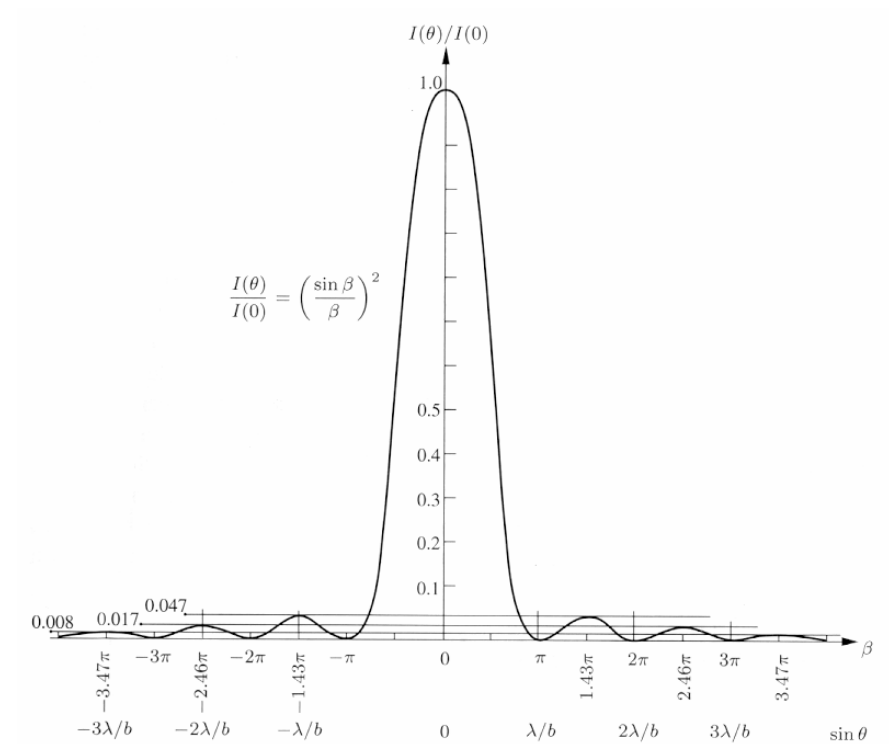


Abbildung 4.2. Beugung am Einzelspalt in Fernfeldnäherung [Hecht 2005]

4.2 Skalare Beugungstheorie nach Kirchhoff

4.2.1 Kirchhoff-Identität

Im freien Raum reduziert sich die Schrödingergleichung auf die Helmholtzgleichung

$$(\Delta + k^2)\psi(\vec{r}) = 0. \quad (4.4)$$

Mit der Greenfunktion des Helmholtzoperators

$$(\Delta + k^2)G(\vec{r}, \vec{r}') = -4\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (4.5)$$

lässt sich mit dem zweiten Greenschen Satz

$$\int_V d^3r [\psi(\vec{r})\Delta G(\vec{r}, \vec{r}') - G(\vec{r}, \vec{r}')\Delta\psi(\vec{r})] = \oint_{\partial V} d^2\vec{f} \cdot [\psi(\vec{r})\nabla G(\vec{r}, \vec{r}') - G(\vec{r}, \vec{r}')\nabla\psi(\vec{r})] \quad (4.6)$$

das *Helmholtz-Kirchhoff-Theorem* formulieren

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{\partial V} d^2\vec{f}' \cdot [G(\vec{r}, \vec{r}')\nabla'\psi(\vec{r}') - \psi(\vec{r}')\nabla'G(\vec{r}, \vec{r}')]. \quad (4.7)$$

Die Wahl der Greenfunktion für den unendlichen Raum

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (4.8)$$

führt mit

$$d^2\vec{f} = -\vec{n}d^2f \quad (4.9)$$

auf die *Kirchhoff-Identität*

$$\boxed{\psi(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \oint_{\partial V} d^2f' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \left[\frac{\partial\psi(\vec{r}')}{\partial n'} + ik \left(1 + \frac{i}{k|\vec{r}-\vec{r}'|} \right) \frac{\vec{n}' \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \psi(\vec{r}') \right]} \quad (4.10)$$

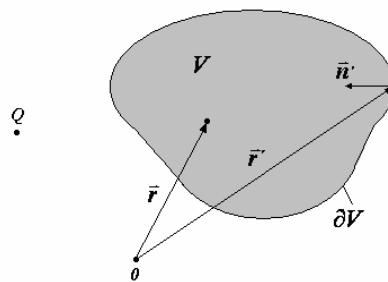


Abbildung 4.3. zur Erläuterung der Kirchhoff-Identität

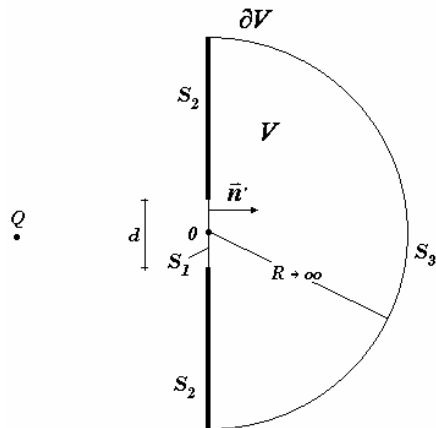
Man beachte, dass jede Lösung der inhomogenen Helmholtzgleichung für eine beliebige Quellfunktion und beliebige Randbedingungen bei asymptotischen Bedingungen für Punkte $\mathbf{r}$ in einem quellenfreien Volumen die Gleichungen identisch erfüllt.

Weiters ist zu beachten, dass G als Kugelwelle interpretiert werden kann, die vom Punkt $\mathbf{r}'$ zum Aufpunkt $\mathbf{r}$ läuft (Huygens)

4.2.2 Kirchhoff- Randbedingungen

Sind die exakten Randwerte $\psi(\vec{r}')$ und $\frac{\partial \psi(\vec{r}')}{\partial n'}$ für eine Beugungsanordnung auf einer geschlossenen Fläche ∂V , deren Inneres quellfrei ist, bekannt, so kann man aus der Kirchhoff-Identität die exakte Identität $\psi(\vec{r})$ für Aufpunkte in V berechnen. (Ein Mangel dieses Verfahrens liegt in der Überbestimmtheit der Randbedingungen (Annahme für $\psi(\vec{r}')$ und $\frac{\partial \psi(\vec{r}')}{\partial n'}$))

Da dies nicht möglich ist, müssen Näherungen für die Werte angenommen werden. Die Näherungen für die Randwerte beruhen auf der Kirchhoffsche Standardanordnung, auf die daher das Kirchhoffsche Verfahren anwendbar sein wird:



Ebener, undurchdringlicher Schirm S2 mit einer oder mehreren Öffnungen S1, wobei sowohl für die Öffnung als auch für die Abstände zwischen mehreren Öffnungen $d \ll \lambda$ gelten muss.

Abbildung 4.4. Kirchhoffsche Standardanordnung

S₁: Im Bereich der Öffnung werden die Werte der ungestörten, von Q einfallenden Welle angenommen:

$$\psi(\vec{r}') = \psi_0(\vec{r}') \quad \text{und} \quad \frac{\partial \psi(\vec{r}')}{\partial n'} = \frac{\partial \psi_0(\vec{r}')}{\partial n'} \quad (4.11)$$

S₂: Unmittelbar hinter dem undurchlässigen Schirm wird

$$\psi(\vec{r}') = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial \psi(\vec{r}')}{\partial n'} = 0 \quad (4.12)$$

Man beachte, dass diese Annahme mathematisch eigentlich nicht mit der Helmholtzgleichung verträglich ist. Trotzdem liefert das Kirchhoffverfahren gute, mit dem Experiment übereinstimmende Ergebnisse.

S₃: Für die Halbkugelfläche mit $R \rightarrow \infty$ gilt

$$\psi(\vec{r}') \underset{r' \rightarrow \infty}{\approx} = f(\mathcal{G}', \varphi') \frac{e^{ikr'}}{r'} \quad (4.13)$$

4.2.3 Kirchhoffsche Beugungsformel

Einsetzen der Kirchhoffschen Annahmen in die Kirchhoff-Identität liefert somit nur für die Integration über S_1 eine Lösung ungleich Null

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int_{S_1} d^2 f' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \left[\frac{\partial \psi_0(\vec{r}')}{\partial n'} + ik \left(1 + \frac{i}{k|\vec{r}-\vec{r}'|} \right) \frac{\vec{n}' \cdot (\vec{r}-\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \psi_0(\vec{r}') \right] \quad (4.14)$$

Mit der ungestörten Welle

$$\psi_0(\vec{r}') = A_0 \frac{e^{ik|\vec{R}-\vec{r}'|}}{|\vec{R}-\vec{r}'|} \quad (4.15)$$

und den weiteren Annahmen, dass $R \gg d$ und $r \gg d$ sowie weiterhin $d \gg \lambda$ und der Beschränkung auf Aufpunkte, welche nicht zu weit im geometrischen Schattenraum liegen,

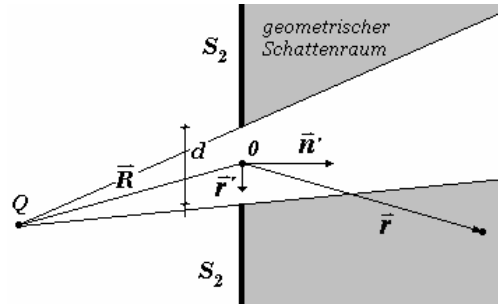


Abbildung 4.5. zur Erläuterung der Kirchhoffschen Beugungsformel

vereinfacht sich die Kirchhoff-Identität zu

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{ik}{4\pi} A_0 \int_{S_1} d^2 f' \underbrace{\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}}_{\approx r} \underbrace{\frac{e^{ik|\vec{R}-\vec{r}'|}}{|\vec{R}-\vec{r}'|}}_{\approx R} \left[\underbrace{\left(1 + \frac{i}{k|\vec{r}-\vec{r}'|} \right)}_{\approx 1} \underbrace{\frac{\vec{n}' \cdot (\vec{r}-\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|}}_{\approx \frac{\vec{n}' \cdot \vec{r}}{r}} - \underbrace{\left(1 + \frac{i}{k|\vec{R}-\vec{r}'|} \right)}_{\approx 1} \underbrace{\frac{\vec{n}' \cdot (\vec{R}-\vec{r}')}{|\vec{R}-\vec{r}'|}}_{\approx \frac{\vec{n}' \cdot \vec{R}}{R} \approx -\frac{\vec{n}' \cdot \vec{r}}{r}} \right] \quad (4.16)$$

und somit zur Kirchhoffschen Beugungsformel

$$\boxed{\psi(\vec{r}) = -\frac{ik}{2\pi} \frac{\vec{n}' \cdot \vec{r}}{r} \frac{A_0}{rR} \int_{S_1} d^2 f' e^{ik(|\vec{r}-\vec{r}'| + |\vec{R}-\vec{r}'|)}} \quad (4.17)$$

Im Unterschied zur Kirchhoff-Identität ist die Kirchhoffsche Beugungsformel kein exaktes Ergebnis, sondern abhängig von den Kirchhoff-Randbedingungen.

4.2.4 Fraunhoferbeugung

Die Kirchhoffsche Beugungsformel wurde unter den Annahmen $R, r \gg d \gg \lambda$ hergeleitet. Unter diesen Annahmen ist ebenfalls eine Entwicklung

$$\begin{aligned} |\vec{r} - \vec{r}'| &= r - \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r} + \frac{r^2 r'^2 - (\vec{r} \cdot \vec{r}')^2}{2r^3} + \dots \\ |\vec{R} - \vec{r}'| &= R - \frac{\vec{R} \cdot \vec{r}'}{R} + \frac{R^2 r'^2 - (\vec{R} \cdot \vec{r}')^2}{2R^3} + \dots \end{aligned} \quad (4.18)$$

möglich.

Genügt es in der Entwicklung nur die ersten beiden Terme zu berücksichtigen, so spricht man von Fraunhofer-Beugung, sonst von Fresnel-Beugung. Die Vernachlässigung der restlichen Terme ist nur möglich, wenn die Bedingungen

$$\frac{r}{d}, \frac{R}{d} \gg \frac{d}{\lambda} \gg 1 \quad (4.19)$$

erfüllt sind.

Einsetzen der Entwicklung führt auf

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{ik}{2\pi} A_0 \underbrace{\frac{e^{ikR}}{R}}_{\psi_0(0)} \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\vec{n}' \cdot \vec{r}}{r} \int_{S_1} d^2 f' e^{-ik \left(\frac{\vec{r}}{r} + \frac{\vec{R}}{R} \right) \vec{r}'} \quad (4.20)$$

4.2.5 Beugung am Spalt

Schneller erreicht man das Ergebnis (4.2) mit der Kirchhoffschen Beugungsformel in Fraunhofernäherung:

Für die Beugung an einem Spalt der Breite a ergibt sich mit $\vec{r}' = (x', 0, 0)$; $\vec{n}' = (0, 0, 1)$; $\vec{R} = (0, 0, -R)$, wobei gilt $x' \in [-a/2, a/2]$, für die Wellenfunktion

$$\psi(\vec{r}) = -\frac{ik}{2\pi} A_0 \frac{e^{ikR}}{R} \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\vec{n}' \cdot \vec{r}}{r} \int_{S_1} d^2 f' e^{-ik \frac{\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r}} e^{-ik \frac{\vec{R} \cdot \vec{r}'}{R}} = -\frac{ik}{2\pi} A_0 \frac{e^{ikR}}{R} \frac{e^{ikr}}{r} \frac{z}{r} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx' e^{-ik \frac{x}{r} x'} = C \frac{\sin\left(\frac{kx}{2r} a\right)}{\frac{kx}{2r}}$$

Für eine Abbildung auf einer weit entfernten Ebene ist r nur schwach richtungsabhängig, daher kann der Vorfaktor als konstant angenommen werden.

Die Intensität ergibt sich somit zu

$$I(x) = I(0) \left| \frac{\sin\left(\frac{kx}{2r} a\right)}{\frac{kx}{2r}} \right|^2 \quad (4.21)$$

4.3 Beugung an N-Spalten

Für die Beugung an mehreren (N) Spalten lassen sich die Ergebnisse einfach erweitern und man erhält

$$I \propto \left(\frac{\sin \beta}{\beta} \right)^2 \left(\frac{\sin(N\alpha)}{\sin \alpha} \right)^2. \quad (4.22)$$

$$\alpha = \frac{\pi a}{\lambda} \sin \vartheta, \quad \beta = \frac{\pi b}{\lambda} \sin \vartheta$$

N... Anzahl Öffnungen

b... Spaltbreite

a... Abstände zwischen den Öffnungen

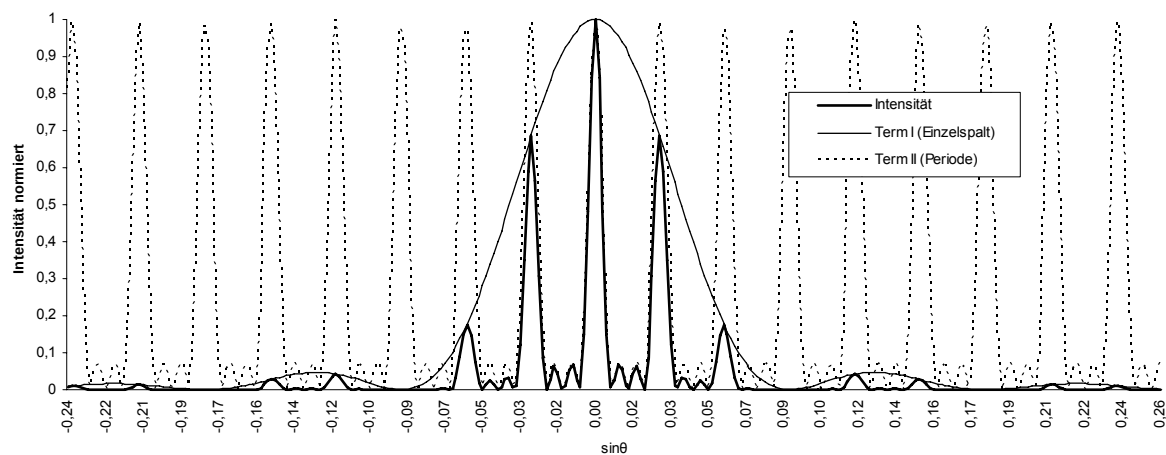


Abbildung 4.6. normierte Intensitätsverteilung für $a=3b$; $N=4$

5 Modell phasenmodulierter Punktquellen

Basis für den Ansatz dieses Modells ist die in Kapitel 3.4. behandelte geringe Abhängigkeit der Phasenunterschiede, hervorgerufen durch die Streugeometrie in Einfallsrichtung.

Die einfallende Welle sei eine ebene Welle. Nach Durchqueren eines makroskopischen Mediums mit Brechungsindex n sei die einzige Änderung ein Phasenschub φ , dessen Größe allein von der Länge des Weges d im Medium abhängt. Das Medium werde geradlinig durchquert und die Kohärenz sei erhalten.

$$\psi_i = \psi_0 e^{i\varphi_i} \quad \text{mit} \quad \varphi = (kz - k_0 z) \Big|_{z_0}^{z_0+d} = kd - k_0 d = k_0 d(n-1) = -db_c N \lambda \quad (5.1)$$

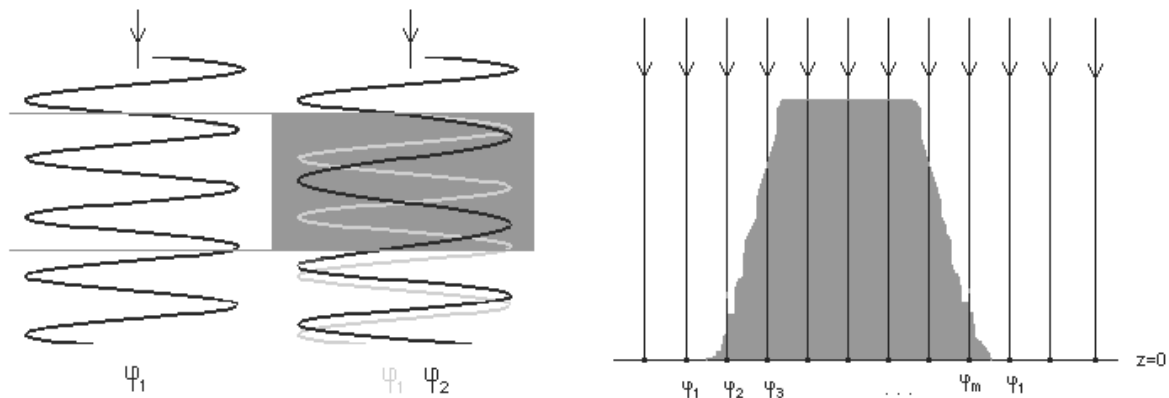


Abbildung 5.1. Reduktion auf Punktquellen mit zugehörigem Phasenfaktor

Das Problem lässt sich in diesem Modell reduzieren auf kohärente Punktquellen am Ort $z=0$, die sich nur durch einen Phasenfaktor unterscheiden.

Im Weiteren werden also kohärente ebene Wellen, ausgehend von Punktquellen in äquidistanten Abständen mit unterschiedlichen Ausgangsphasen und deren Phasenbeziehung bei Ausbreitung unter einem Winkel ϑ betrachtet.

Für ein Medium mit N periodischen Strukturen der Periode p betrachtet man $N \cdot m$ Punktquellen mit m verschiedenen Phasen φ_1 bis φ_m in einem Abstand p/m .

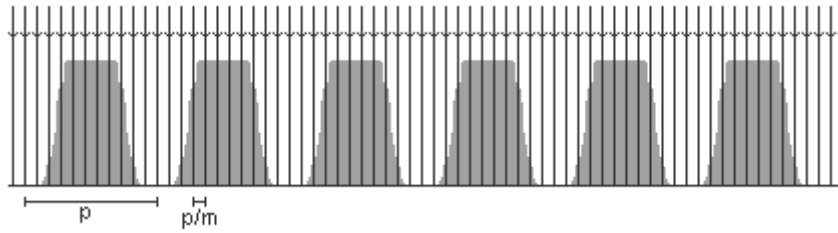
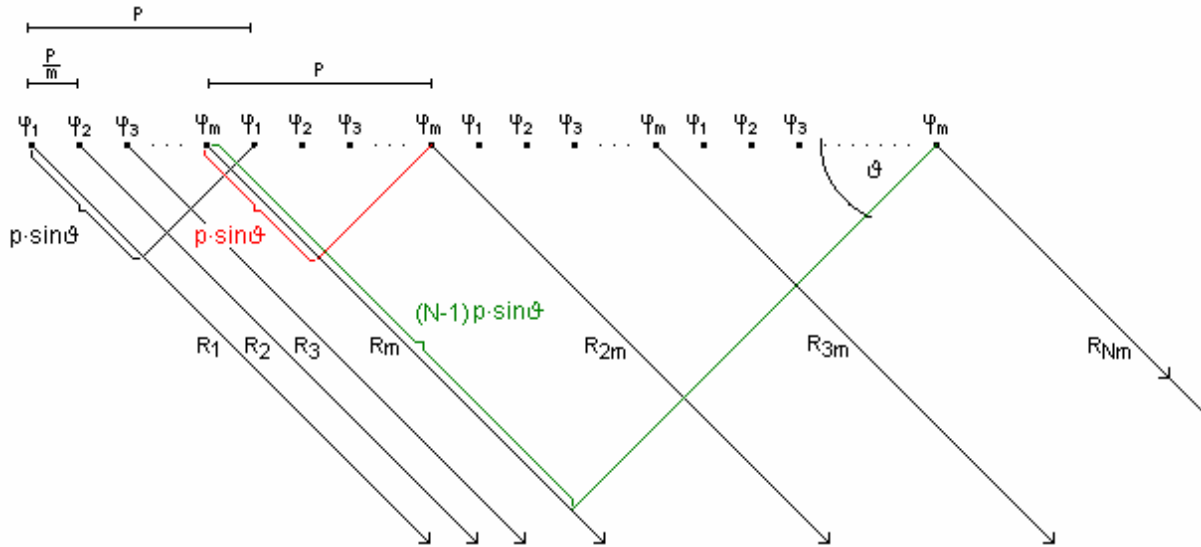


Abbildung 5.2. Medium mit Periode p und Abständen p/m der Punktquellen


 Abbildung 5.3. $N \cdot m$ Punktquellen mit m unterschiedlichen Ausgangsphasen φ_1 bis φ_m

Für die Intensität ergibt sich in Abhängigkeit des betrachteten Winkels

$$\begin{aligned}
 I &\propto \left| \begin{aligned} &\left(e^{ikR_1} + e^{ikR_{m+1}} + e^{ikR_{2m+1}} + \dots + e^{ikR_{(N-1)m+1}} \right) \cdot e^{i\varphi_1} + \\ &\left(e^{ikR_2} + e^{ikR_{m+2}} + e^{ikR_{2m+2}} + \dots + e^{ikR_{(N-1)m+2}} \right) \cdot e^{i\varphi_2} + \dots + \\ &\left(e^{ikR_m} + e^{ikR_{2m}} + e^{ikR_{3m}} + \dots + e^{ikR_{Nm}} \right) \cdot e^{i\varphi_m} \end{aligned} \right|^2 = \\
 &= \left| \begin{aligned} &\left(1 + e^{ik(R_{m+1}-R_1)} + e^{ik(R_{2m+1}-R_1)} + \dots + e^{ik(R_{(N-1)m+1}-R_1)} \right) \cdot e^{i\varphi_1} e^{ikR_1} + \\ &\left(1 + e^{ik(R_{m+2}-R_2)} + e^{ik(R_{2m+2}-R_2)} + \dots + e^{ik(R_{(N-1)m+2}-R_2)} \right) \cdot e^{i\varphi_2} e^{ikR_2} + \dots + \\ &\left(1 + e^{ik(R_{2m}-R_m)} + e^{ik(R_{3m}-R_m)} + \dots + e^{ik(R_{Nm}-R_m)} \right) \cdot e^{i\varphi_m} e^{ikR_m} \end{aligned} \right|^2 \\
 &= \underbrace{\left(1 + e^{ikp \sin \vartheta} + e^{ik2p \sin \vartheta} + \dots + e^{ik(N-1)p \sin \vartheta} \right)}_I \cdot \underbrace{\left(e^{i\varphi_1} e^{ikR_1} + e^{i\varphi_2} e^{ikR_2} + \dots + e^{i\varphi_m} e^{ikR_m} \right)}_{II}^2 \quad (5.2)
 \end{aligned}$$

Wobei folgende Relationen verwendet wurden

$$\begin{aligned}
 R_{m+1} - R_1 &= R_{m+2} - R_2 = \dots = R_{2m} - R_m = p \sin \vartheta \\
 R_{2m+1} - R_1 &= R_{2m+2} - R_2 = \dots = R_{3m} - R_m = 2p \sin \vartheta \\
 &\vdots \\
 R_{(N-1)m+1} - R_1 &= R_{(N-1)m+2} - R_2 = \dots = R_{Nm} - R_m = (N-1)p \sin \vartheta
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

Der Term in der ersten Klammer (I) von (5.2) gibt die Periodizität wieder und bestimmt die Position der Beugungsmaximas.

$$\begin{aligned}
 (1 + e^{ikp \sin \vartheta} + e^{ik2p \sin \vartheta} + \dots + e^{ik(N-1)p \sin \vartheta}) &= \sum_{n=0}^{N-1} (e^{ikp \sin \vartheta})^n = \frac{1 - e^{ikNp \sin \vartheta}}{1 - e^{ikp \sin \vartheta}} \\
 &= e^{\frac{ikp \sin \vartheta}{2}(N-1)} \frac{\sin\left(N \frac{kp \sin \vartheta}{2}\right)}{\sin\left(\frac{kp \sin \vartheta}{2}\right)}
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

Den Beitrag zur Intensität liefert das Betragsquadrat dieses Terms, der schon in Kapitel 3.3.2 eingeführte Strukturfaktor $S(\vartheta)$

$$S(\vartheta) = \left| \frac{\sin\left(N \frac{kp \sin \vartheta}{2}\right)}{\sin\left(\frac{kp \sin \vartheta}{2}\right)} \right|^2 \tag{5.5}$$

Die Halbwertsbreite des Strukturfaktors sinkt mit steigender Anzahl an Quellen und liefert für $N \rightarrow \infty$ Deltafunktionen an den Winkeln der Beugungsmaximas.

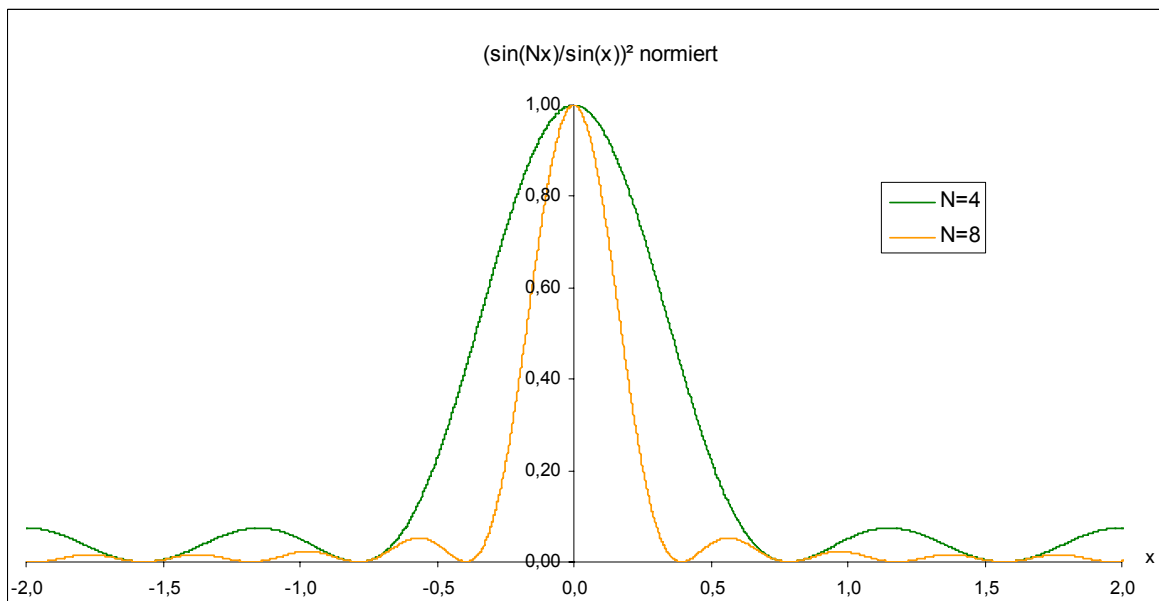


Abbildung 5.4. Strukturfaktor für N=4 und N=8

Der Term in der zweiten Klammer (II) der Formel (5.2) bildet unter Verwendung der Relationen

$$R_2 - R_1 = \frac{p}{m} \sin \vartheta \quad R_3 - R_1 = \frac{2p}{m} \sin \vartheta \quad \dots \quad R_m - R_1 = \frac{(m-1)p}{m} \sin \vartheta \quad (5.6)$$

$$\Delta \varphi_i = \varphi_{(i+1)} - \varphi_1 \quad (5.7)$$

den Formfaktor der Funktion, welcher die Intensität an den Beugungsmaximas bestimmt.

$$\begin{aligned} & (e^{i\varphi_1} e^{ikR_1} + e^{i\varphi_2} e^{ikR_2} + e^{i\varphi_3} e^{ikR_3} + \dots + e^{i\varphi_m} e^{ikR_m}) = \\ & e^{i\varphi_1} e^{ikR_1} \left(1 + e^{i(\varphi_2 - \varphi_1)} e^{ik(R_2 - R_1)} + e^{i(\varphi_3 - \varphi_1)} e^{ik(R_3 - R_1)} + \dots + e^{i(\varphi_m - \varphi_1)} e^{ik(R_m - R_1)} \right) = \\ & e^{i\varphi_1} e^{ikR_1} \left(1 + e^{i\Delta\varphi_1} e^{ik \frac{p}{m} \sin \vartheta} + e^{i\Delta\varphi_2} e^{ik 2 \frac{p}{m} \sin \vartheta} + \dots + e^{i\Delta\varphi_m} e^{ik (m-1) \frac{p}{m} \sin \vartheta} \right) = e^{i\varphi_1} e^{ikR_1} \sum_{n=0}^{m-1} e^{i\Delta\varphi_n} e^{ik \frac{p}{m} \sin \vartheta \cdot n} \end{aligned} \quad (5.8)$$

$$F(\vartheta) = \left| \sum_{n=0}^{m-1} e^{i\Delta\varphi_n} e^{ik \frac{p}{m} \sin \vartheta \cdot n} \right|^2 \quad (5.9)$$

In Abbildung 5.5. sind Formfaktoren für zwei Beispielp Profile abgebildet.

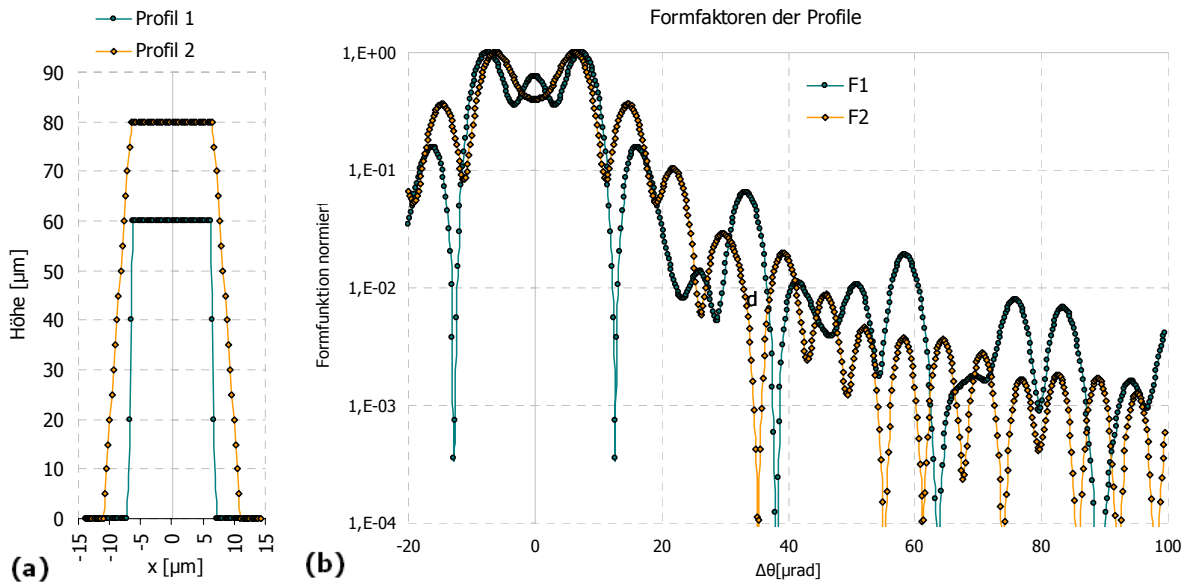


Abbildung 5.5. Beispiele für mögliche Profile (a) und zugehörige Formfaktoren (b)

Strukturfaktor und Formfaktor bestimmen die Intensität des Beugungsbildes durch

$$I \propto \underbrace{\left| \frac{\sin\left(N \frac{kp \sin \vartheta}{2}\right)}{\sin\left(\frac{kp \sin \vartheta}{2}\right)} \right|^2}_{\text{Strukturfaktor}} \cdot \underbrace{\left| \sum_{n=0}^{m-1} e^{i\Delta\varphi_n} e^{ik \frac{p}{m} \sin \vartheta \cdot n} \right|^2}_{\text{Formfaktor}} \quad (5.10)$$

Für einfache Profilformen lässt sich theoretisch die Geometrie aus der Differenz der Formfaktoren einfach ablesen.

Betrachtet man zum Beispiel rechteckige Modellprofile mit verschiedenen Höhen (beziehungsweise Phasen) (Abbildung 5.6 a.) und die zugehörigen Formfaktoren (Abbildung 5.6 b.),

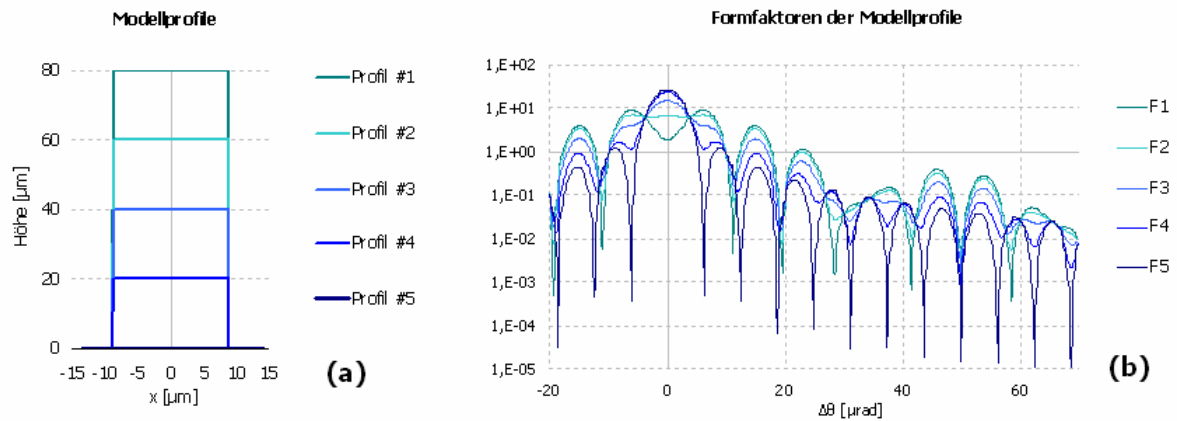


Abbildung 5.6. Modellprofile (a) und Formfunktionen für die Modellprofile (b)

so sieht man, dass sich die Formfunktionen bei den gleichen Winkeln schneiden, also bei diesen Winkeln die Funktion phasenunabhängig wird. Besonders gut ist dies aus den Differenzen der Formfunktionen Abbildung 5.7 ersichtlich. Die phasenunabhängigen Winkel erscheinen als Minima.

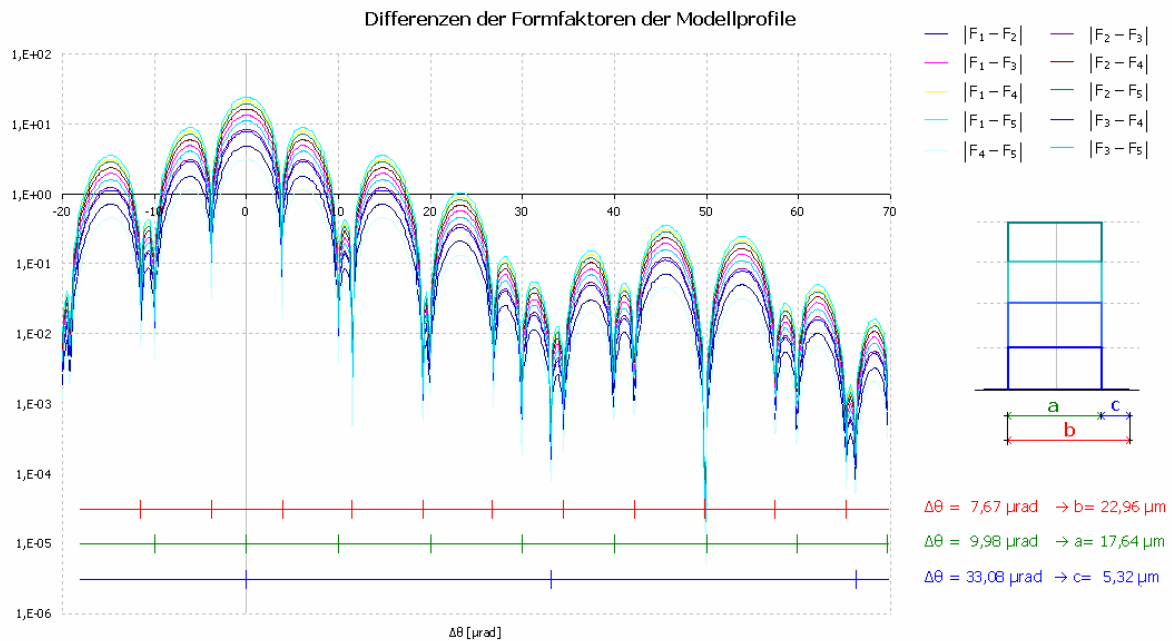


Abbildung 5.7. Differenzen der Formfunktionen der Modellprofile

Diese Minima geben die Form der Geometrie wieder. Für den Fall rechteckiger Profile existieren 3 äquidistante Minima bei den Winkeln

$$\sin \theta = \frac{n\lambda}{x} \quad \text{mit } x = a, b, c$$

6 Ultrakleinwinkelstreuung an periodischen Phasengittern aus Silizium-Einkristall

6.1 TRIGA Mark-II Reaktor

Bei TRIGA-Reaktoren (TRIGA = Training, Research, Isotope Production, General Atomic) handelt es sich um reine Forschungsreaktoren des Swimmingpool-Typs.

Der TRIGA-Reaktor in Wien erzeugt eine maximale thermische Dauerleistung von 250kW mit einer maximalen Neutronenflußdichte von $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$.

Der Reaktorkern besteht aus 83 Brennelementen (Durchmesser 3,75 cm, Länge 72,24 cm), wobei für je zwei Brennelemente drei Thermoelemente für die Temperaturüberwachung des Brennstoffes eingebracht sind.

Als Startquelle dient eine Sb-Be-Photoneutronenquelle. Die Reaktorregelung erfolgt über drei Borkarbid – Absorberstäbe, deren Eintauchhöhen in den Reaktorkern mittels Elektromotor beziehungsweise pneumatisch gesteuert werden und damit durch Absorption der Neutronen aus der Startquelle die Reaktorleistung steuern.

Der in der Brennelementhülle (Aluminium oder Stahl) befindliche Brennstoff ist eine homogene Mischung aus 8 gew% Uran mit 20% Uran-235, 1 gew% Wasserstoff und 91 gew% Zirkon. Das Zirkon-Hydrid dient als Moderator und hat die besondere Eigenschaft mit steigender Temperatur schlechter zu moderieren. Dies ermöglicht einen Impulsbetrieb des Reaktors, das heißt eine rasche Leistungserhöhung auf 250 MW für etwa 40 Millisekunden mit einer maximalen Neutronenflußdichte von $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$.

Der Wärmeabtransport erfolgt über einen Primärkühlkreislauf (deionisiertes, destilliertes Wasser, Temperatur: 20° - 40° C) gekoppelt durch einen Wärmetauscher mit dem Sekundärkühlkreislauf (Brunnenwasser, Temperatur: 12° - 18° C).

Als Bestrahlungseinrichtungen stehen zur Verfügung:

- 5 Reflektor-Bestrahlungsrohre
- 1 zentrales Bestrahlungsrohr
- 1 langsames Rohrpostsystem (Transportzeit 3 Sekunden)
- 1 schnelles Rohrpostsystem (Transportzeit 20 Millisekunden)
- 4 Neutronenstrahlrohre
- 1 thermische Säule
- 1 Neutronen-Radiographieanlage

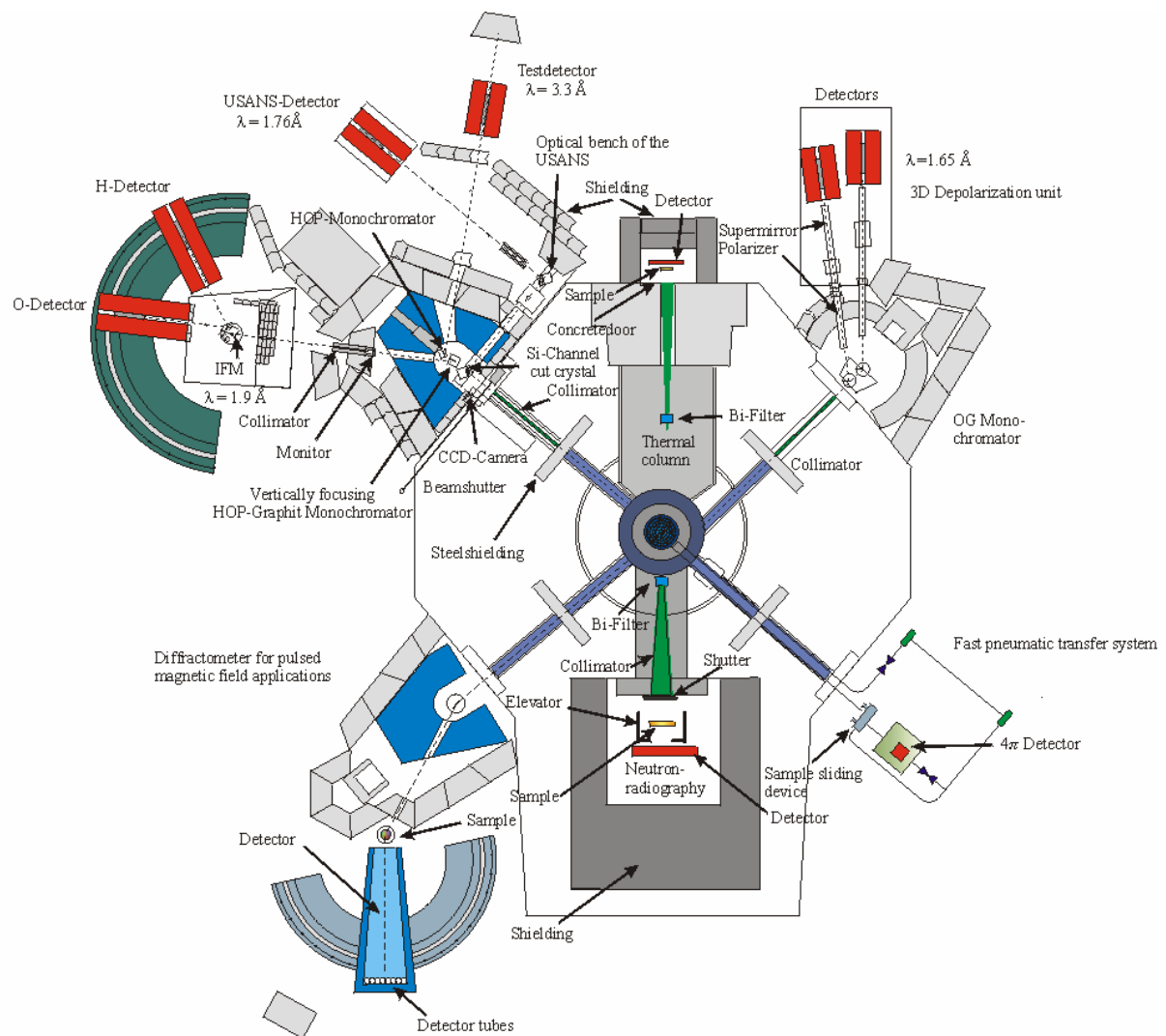


Abbildung 6.1. Querschnitt TRIGA-Reaktor Wien [ATI 2008]

6 Ultrakleinwinkelstreuung an periodischen Phasengittern aus Silizium-Einkristall

Technisches Datenblatt [ATI 2008]

1. REAKTORKERN	
Brennstoff-Moderator-Material	8 wt% Uran 91 wt% Zirkon 1 wt% Wasserstoff
Uran-Anreicherung	20% Uran-235
Brennstoffelement-Abmessungen	3.75 cm Durchmesser 72.24 cm Länge
Umhüllung	0,76 mm Aluminium oder 0,51 mm Stahl
aktives Kernvolumen	max. 44,4 cm Durchmesser 38,10 cm Höhe
Kernladung	etwa 3,6 kg Uran-235

2. REFLEKTOR	
Material	Graphit mit Aluminium-Umhüllung
Dicke radial	30.5 cm
Dicke oben (im Brennelement)	6,6 cm
Dicke unten (im Brennelement)	9,4 cm

3. BAUMASSE	
Reaktoraufbau	Schwer- und Normalbeton 6,55 m hoch, 6,19 m breit, 8,76 m lang
Reaktortank	1,98 m Durchmesser 6,40 m Tiefe

4. ABSCHIRMUNG	
radial:	30,5 cm Graphit, 45,7 cm Wasser und mindestens 206 cm Schwerbeton
vertikal:	über dem Kern 4,90 m Wasser und 6,6 cm Graphit, unter dem Kern 61,0 cm Wasser, 9,4 cm Graphit und mindestens 91 cm Normalbeton

5. BESTRAHLUNGSEINRICHTUNGEN	
(1) vier Strahlrohre: 15,2 cm Durchmesser	
(2) ein zentrales Bestrahlungsrohr (Kernmitte)	
(3) fünf Reflektor-Bestrahlungsrohre	
(4) eine Rohrpostanlage (in Nähe des Kernrandes)	
(5) thermische Säule: 1,22 x 1,22 m Querschnitt und 1,68 m lang	
(6) Experimentiertank: 2,44 x 2,74 m Fläche, 3,66 m tief Verbindung zum Reaktor: Neutronenradiographiekollimator 0,61 x 0,61 m Querschnitt und 1,22 m lang	

6. REGELEINRICHTUNG	
• 2 Borkarbid-Regelstäbe, Antrieb: Elektromotor und Zahnstange. • 1 Borkarbid-Impulsstab, Antrieb: Druckluft, 5 atü maximaler Reaktivitätseinsatz, zeitliche Änderung (Impulsvorgang ausgenommen) 0,04% $\delta k/k/s$ • gesamter Stabwert etwa 4,8% $\delta k/k$	

6 Ultrakleinwinkelstreuung an periodischen Phasengittern aus Silizium-Einkristall

7. EIGENSCHAFTEN BEIM DAUERBETRIEB

thermische Leistung:	250 kW
Kühlung der Brennelemente:	natürliche Konvektion des Tankwassers, oberhalb von 100 kW Umwälzpumpe
Kühlung Tankwasser:	Wärmeaustauscher
thermische Flußdichte	zentrales Bestrahlungsgrohr: $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ in den Bestrahlungsrohren: $1.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$
prompter Temperaturkoeffizient:	$-1.2 \times 10^{-4} \text{ } \delta k / k^{\circ} \text{C}$
mittlere Lebensdauer der prompten Neutronen:	$6.0 \times 10^{-5} \text{ s.}$

8. EIGENSCHAFTEN BEIM IMPULSBETRIEB

Spitzenleistung	250 MW
Energieabgabe prompter Impuls	10 MW s
Dauer des prompten Impulses	40 ms
Energieabgabe gesamt	16 MW s
minimale Periode	10 ms
maximaler Reaktivitätseinsatz	$1.4\% \text{ } \delta k / k = 2\%$
maximale Wiederholungsrate	12/h
Spaltungen während des Impulses	3×10^{17}
maximale Brennstofftemperatur	während des Impulses 240 °C 9 Sekunden nach Impuls 360 °C

6.2 Kleinwinkelstreuanlage

Die Kleinwinkelstreuanlage (KWS) in Wien befindet sich am Strahlrohr C des TRIGA-Reaktors.

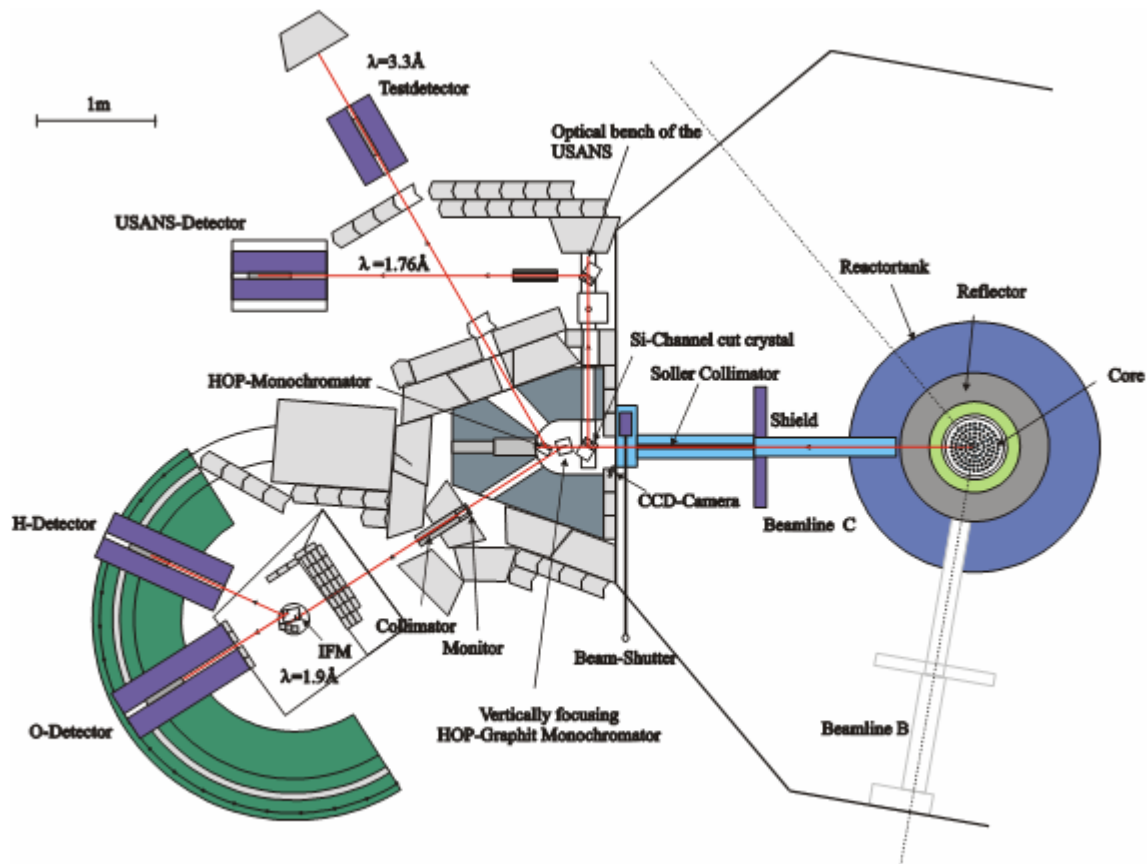


Abbildung 6.2. Kleinwinkelstreuanlage am Triga-Reaktor Wien [ATI 2008]

Als Monochromator für die KWS dient ein Silizium-Nutenkristall. Er befindet sich direkt hinter dem Kollimator in der Betonabschirmung. Die vom Reaktor zur Verfügung gestellten Neutronen haben ein Energiespektrum, das in etwa einer Maxwell-Boltzmann-Verteilung entspricht. Für die Präparation des Neutronenstrahls wird die Reflexionsebene [331] des Einkristalls unter einem Winkel von 45° genutzt. Gemäß der Bragg-Bedingung

$$n\lambda = 2d_{[hkl]} \sin \Theta_B \quad (6.1)$$

ergibt dies mit $d_{[331]} = 1,246 \text{ \AA}$ eine Wellenlänge von etwa $1,76 \text{ \AA}$:

Der Analysator – ebenfalls Si-Nutenkristall – befindet sich außerhalb der Betonabschirmung hinter der Probe. Die von der Probe gestreuten monochromatischen Neutronen werden unter der gleichen Bragg-Bedingung durch Drehung des Analysatorkristalls nach dem Streuwinkel aufgelöst. Je nach Winkel-Stellung des Analysators werden nur Neutronen, die von der Probe in einen bestimmten Winkel gestreut wurden, nach der Bragg-Bedingung auch in den Detektor gebeugt.

6 Ultrakleinwinkelstreuung an periodischen Phasengittern aus Silizium-Einkristall

Sowohl Monochromator als auch Analysator sind auf je zwei Goniometern montiert, die durch Schritt-beziehungsweise Gleichstrommotoren betrieben werden, womit sowohl horizontale als auch vertikale Drehungen ermöglicht werden. Die maximale Winkelauflösung bei horizontaler Drehung beträgt $0,1513\mu\text{rad}$ (Fehler: $0,007\mu\text{rad}$), bei vertikaler Drehung $0,3471\mu\text{rad}$.

Beide Goniometer des Monochromatorkristalls sowie jener für vertikale Drehung des Analysators dienen der Grundjustierung der KWS. Einzig die horizontale Drehung des Analysatorkristalls ist Bestandteil der Messung.

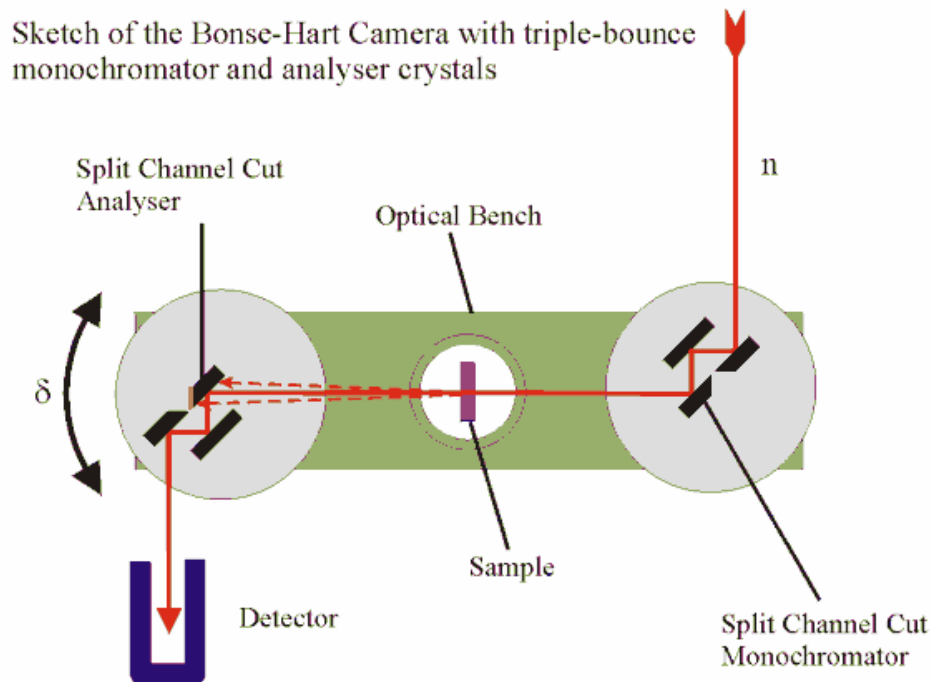


Abbildung 6.3. Schema einer KWS (Bonse-Hart-Kamera) [ATI 2008]

Monochromator und Analysator befinden sich auf einer circa 1,5 m langen optischen Bank. Dies ist nötig um einerseits eine stabile Positionierung der Anordnung zu gewährleisten und weiters um störende Vibrationen möglichst gering zu halten.

Als Neutronendetektor dient ein BF₃-Zählrohr der Marke Reuter Stokes RSN 108S-MG mit einem Durchmesser von 50mm und einer Länge von 360mm. Die Abschirmung erfolgt durch eine Paraffinummantelung mit einem Durchmesser von 410mm und einer Länge von 800mm.

6 Ultrakleinwinkelstreuung an periodischen Phasengittern aus Silizium-Einkristall

Technisches Datenblatt [ATI 2008]:

Si - channel cut crystals

Reflexion plane	[3 3 1] $F = 4 + 4i$
Structur factor	$ F = 32^{1/2}$
Asymmetry factor	$b = -1$
theoretischer Totalreflexionsbereich	$\Delta\Theta = 2.899 \cdot 10^{-6} \text{ rad} = 0,596''$
Bragg angle	$2\Theta_b = 90^\circ$
Wellenlängeunschärfe	$\Delta\lambda/\lambda = 2,5 \cdot 10^{-3}$
Energiebereich	$\Delta E/E = 5 \cdot 10^{-3}$

Monochromator - Goniometer

Winkelauflösung Drehung	18,05''
Winkelauflösung Kippung	18,05''

Analysator - Goniometer

Winkelauflösung Drehung	0,1513 μrad
Winkelauflösung Kippung	0,3471 mrad
Halbwertsbreite	3,3 μrad

Other instrument parameters

Cross section of the neutron beam	26 mm x 26 mm
Background	0,05 Neutrons / s
Peakintensity	9,5 cps / cm^2
Integral Intensity	285 cps / cm^2

6.3 Instrumentenkurve

6.3.1 Rockingkurve

Für die Reflexionsfunktion eines dicken Perfektkristalls (Analysator, Monochromator) in Braggreflexion gilt nach der Dynamischen Beugungstheorie [Rauch 1976]

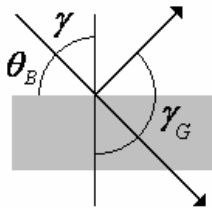
$$R(y) = \frac{P_G}{P_e} = \begin{cases} 1 & |y| \leq 1 \\ \left(1 - \sqrt{1 - 1/y^2}\right) & |y| > 1 \end{cases} ; \quad (6.2)$$

y stellt dabei einen verallgemeinerten Winkel

$$y = \frac{(b-1) \frac{V(\vec{0})}{E} + \alpha b}{2\sqrt{|b|} \left| \frac{V(\vec{G})}{E} \right|} \quad (6.3)$$

dar.

Weiters wurden die Relationen



$$\alpha = 2(\theta_B - \theta) \sin 2\theta_B, \quad b = \frac{\cos \gamma}{\cos \gamma_G}, \quad (6.4)$$

$$\frac{V(\vec{0})}{E} = \frac{4\pi N b_c}{k^2}, \quad \frac{V(\vec{G})}{E} = \frac{4\pi b_c |F|}{k^2 a^2} \quad (6.5)$$

Abbildung 6.4. Geometrische Beziehungen in Braggreflexion

verwendet, wobei F den geometrischer Strukturfaktor und a die Gitterkonstante des Kristallgitters beschreibt.

Für m-fache Reflexionen gilt für die gemittelte Intensitätsverteilung für einen dicken Kristall

$$R(y) = \begin{cases} 1 & |y| \leq 1 \\ \left(1 - \sqrt{1 - 1/y^2}\right)^m & |y| > 1 \end{cases} \quad (6.6)$$

Die Flanken der Ewaldkurve erschweren die Auswertung der Streudaten. Es wird daher angestrebt, möglichst viele Reflexionen zu erreichen. Aus Intensitätsgründen beschränkt man sich jedoch in der Kleinwinkelstreuung auf drei Reflexe.

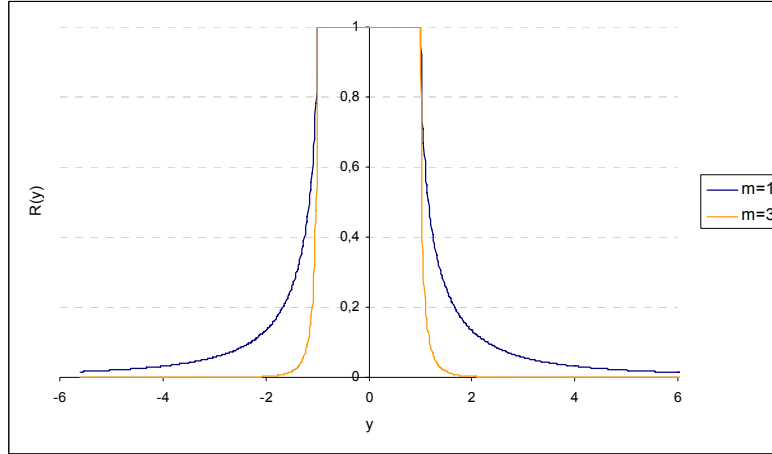


Abbildung 6.5. Reflektivität für eine und drei Reflexionen

Die Breite des Plateaus der Totalreflexion ($-1 \leq y \leq 1$) entspricht einem Winkelbereich

$$\Delta\theta = \frac{b_c N \lambda^2 |F|}{4\pi \sin(2\theta_B)} \sqrt{\frac{\cos \gamma_G}{\cos \gamma}} e^{-M}, \quad (6.7)$$

wobei e^{-M} den Debey-Waller Faktor darstellt.

Die Instrumentenkurve, auch Rockingkurve genannt, ergibt sich aus der Faltung der Reflektivitäten von Monochromator- und Analysatorkristall

$$I_0(\Delta) = \int (R(y))^n (R(y + \Delta))^m dy \quad (6.8)$$

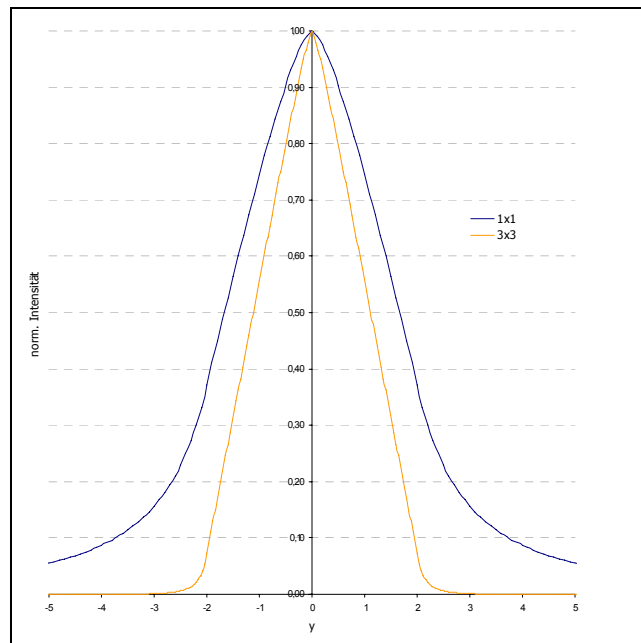


Abbildung 6.6. normierte theoretische Rockingkurve mit 1x1 und 3x3 Reflexen

In einfachen Worten gesagt liefert die Rockingkurve ihren Maximalwert bei Parallelstellung der Netzebenen der beiden Kristalle. Die Messung erfolgt durch Drehung der Netzebenen um die horizontale Achse. Für die Messung ist daher eine genaue Grundjustierung der vertikalen Achse (rho-Achse) erforderlich.

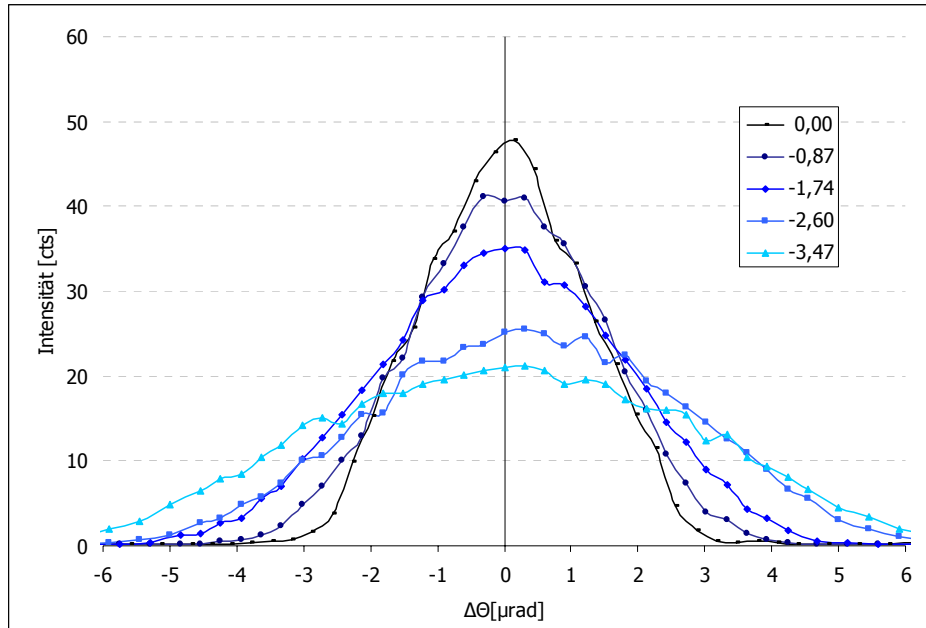


Abbildung 6.7. Gemessene Rockingkurve bei verschiedenen rho-Winkeln [rad]

6.3.2 Schlitzverschmierung

Die Messung erfolgt, wie schon erwähnt, durch horizontale Drehung des Analysatorkristalls. Ablenkungen in vertikaler Richtung werden nicht aufgelöst, sondern einfach zur Gesamtintensität addiert. Diese *Schlitzhöhenverschmierung* muss durch

$$I_h(q_x) = \int_{-\infty}^{\infty} I(q_x, q_z) dq_z \quad (6.9)$$

berücksichtigt werden.

Für die Interpretation der Messergebnisse muss weiters die endliche Breite der Rockingkurve berücksichtigt werden. Die Auswirkung auf das gemessene Signal besteht in der Faltung der schlitzhöhenverschmierten Intensität I_h mit der Instrumentenkurve I_0 , der *Schlitzbreitenverschmierung*

$$I(\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} I_0(\theta') I_h(\theta + \theta') d\theta' \quad (6.10)$$

6.3.3 Wellenlängenunschärfe

Es sei noch anzumerken, dass bei der Interpretation der Messergebnisse darauf Rücksicht genommen werden muss, dass der Neutronenstrahl nicht rein monochromatisch ist, da aufgrund von Winkelunschärfen der auf den Monochromator treffenden Neutronen auch Neutronen mit anderen Wellenlängen die Bragg-Bedingung erfüllen können.

6.4 Proben

Wie auch Analysator und Monochromator sind auch die Proben aus Silizium-Einkristall. In Tabelle 6.1. sind einige Eigenschaften von Silizium angeführt.

Atomgewicht	28,0855 g/mol
Dichte	2330 kg/m ³
Atome pro m ³	4,99479.10 ²⁸
Kohärente gebunden Streulänge	4,149 fm
b _c N	2,0785.10 ¹⁴ m
Optisches Potential	5,39752.10 ⁻⁸ eV
Ordnungszahl	14
Gitterkonstante	1,246 Å

Tabelle 6.1. Einige Eigenschaften von Silizium

Die Kristallstruktur von Silizium ist eine Diamantstruktur - ein kubisch flächenzentriertes Basisgitter mit zwei Basisatomen auf (0,0,0) und ($\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$) – mit der Gitterkonstante $a = 1,246 \text{ Å}$

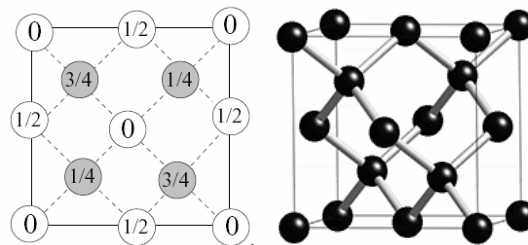


Abbildung 6.8. Diamantstruktur [Wikipedia 2008]

Die Prozessentwicklung und Herstellung der Proben erfolgte durch M. Trinker [Trinker 2006] am Zentrum für Mikro- und Nanostrukturen (ZMNS) der technischen Universität Wien. Die Silizium Einkristalle wurden mittels Reaktives Ionenätzen (Reactive Ion Etching, RIE) zu periodischen Gittern mit den Dimensionen

Bezeichnung	Stegbreite	Periode	Steghöhe
G8S20T40	$\approx 20 \mu\text{m}$	$\approx 28 \mu\text{m}$	$\approx 40 \mu\text{m}$
G8S20T60			$\approx 60 \mu\text{m}$
G8S20T80			$\approx 80 \mu\text{m}$

Tabelle 6.2. Gitterdimensionen

geformt.

Die SEM - Aufnahmen der Gitter [Trinker 2006] sind in den folgenden Abbildungen (6.9.-6.11.) zu sehen.

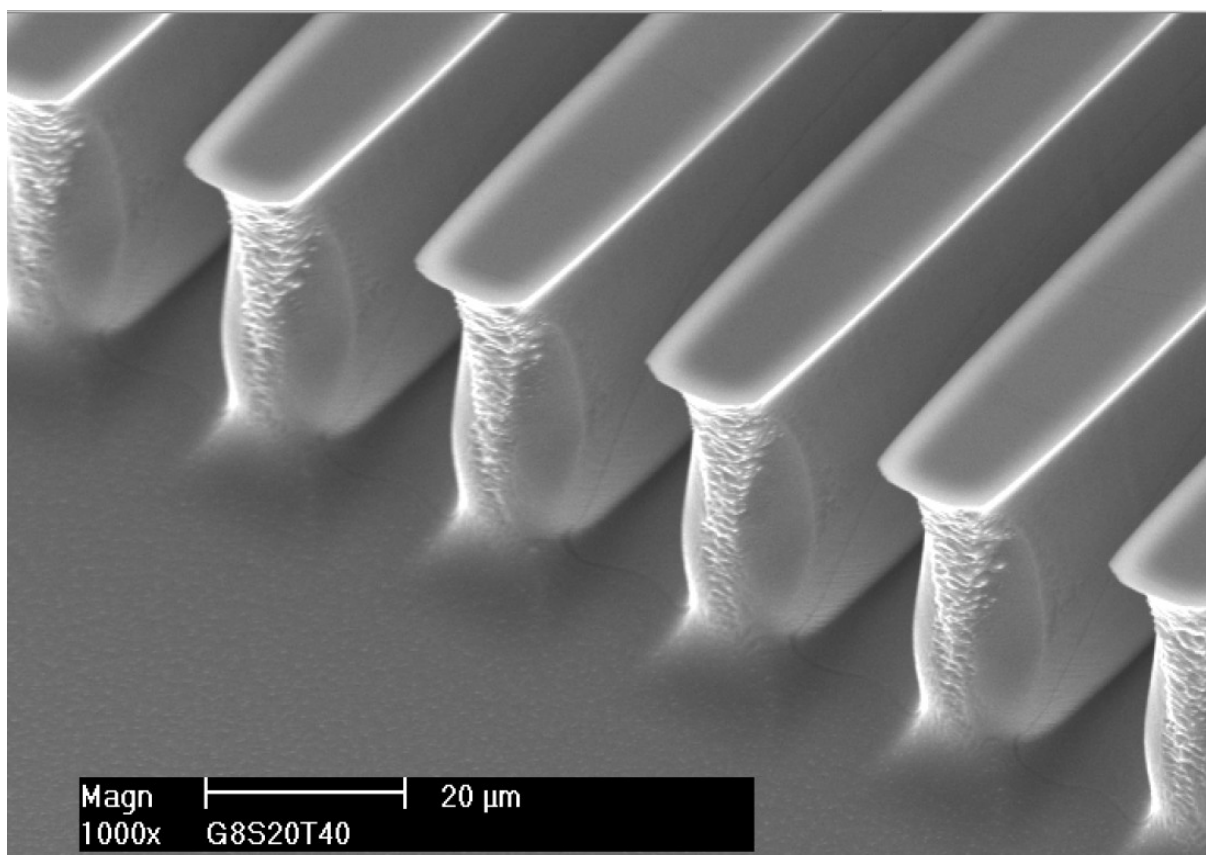
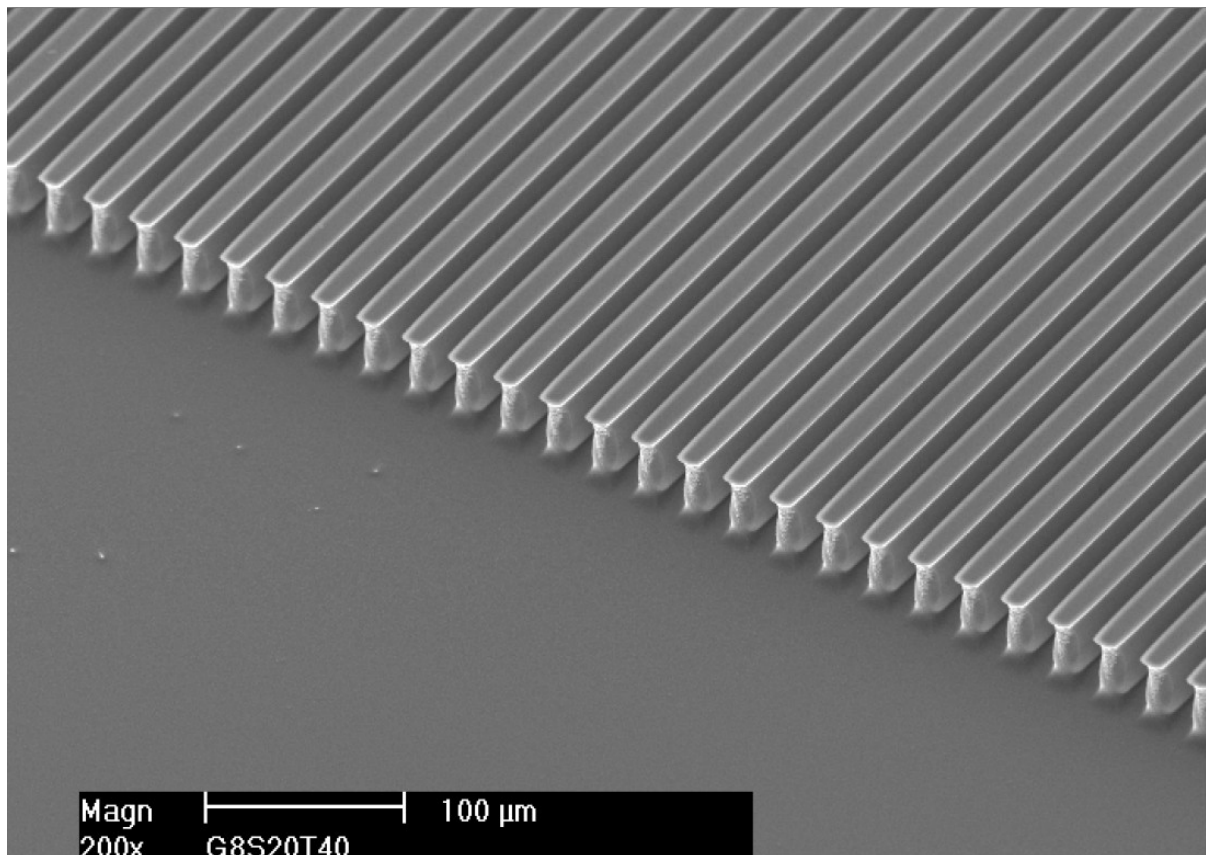


Abbildung 6.9. SEM-Aufnahmen G8S20T40

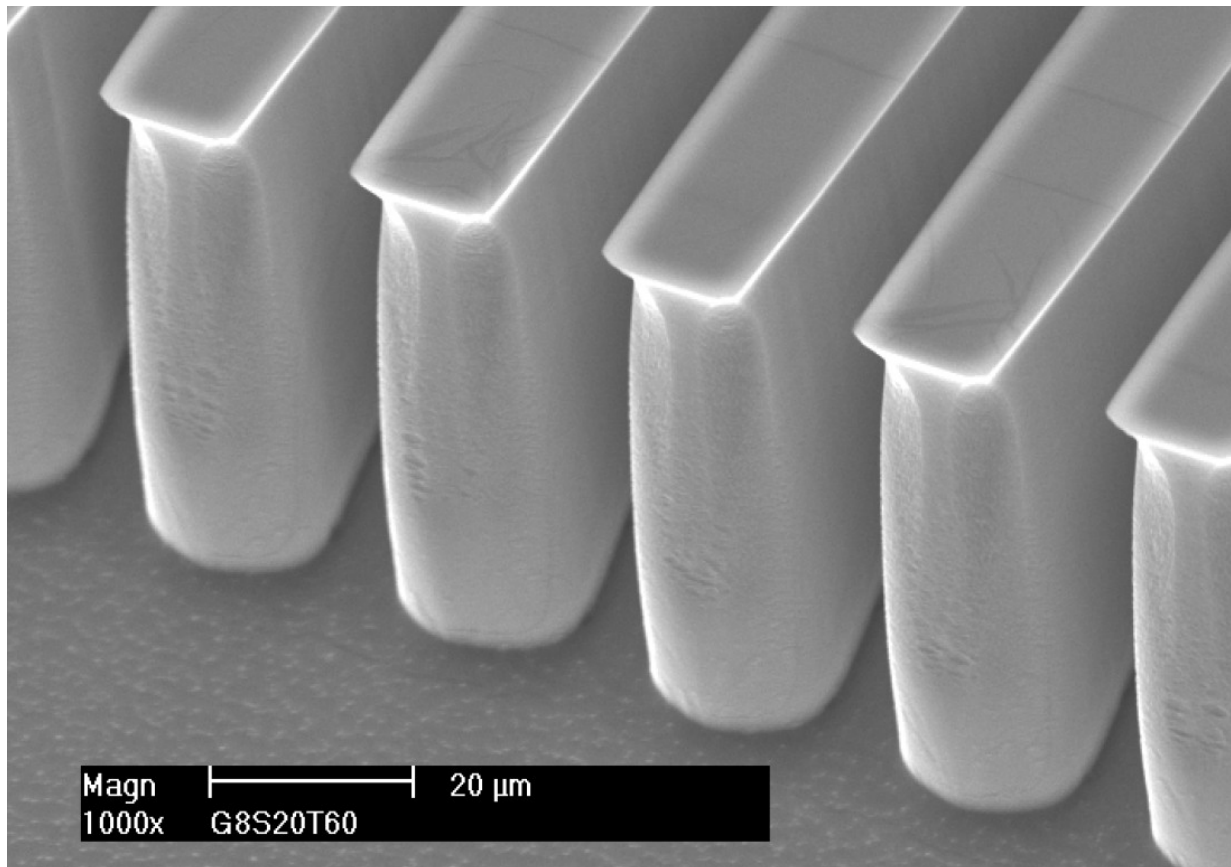
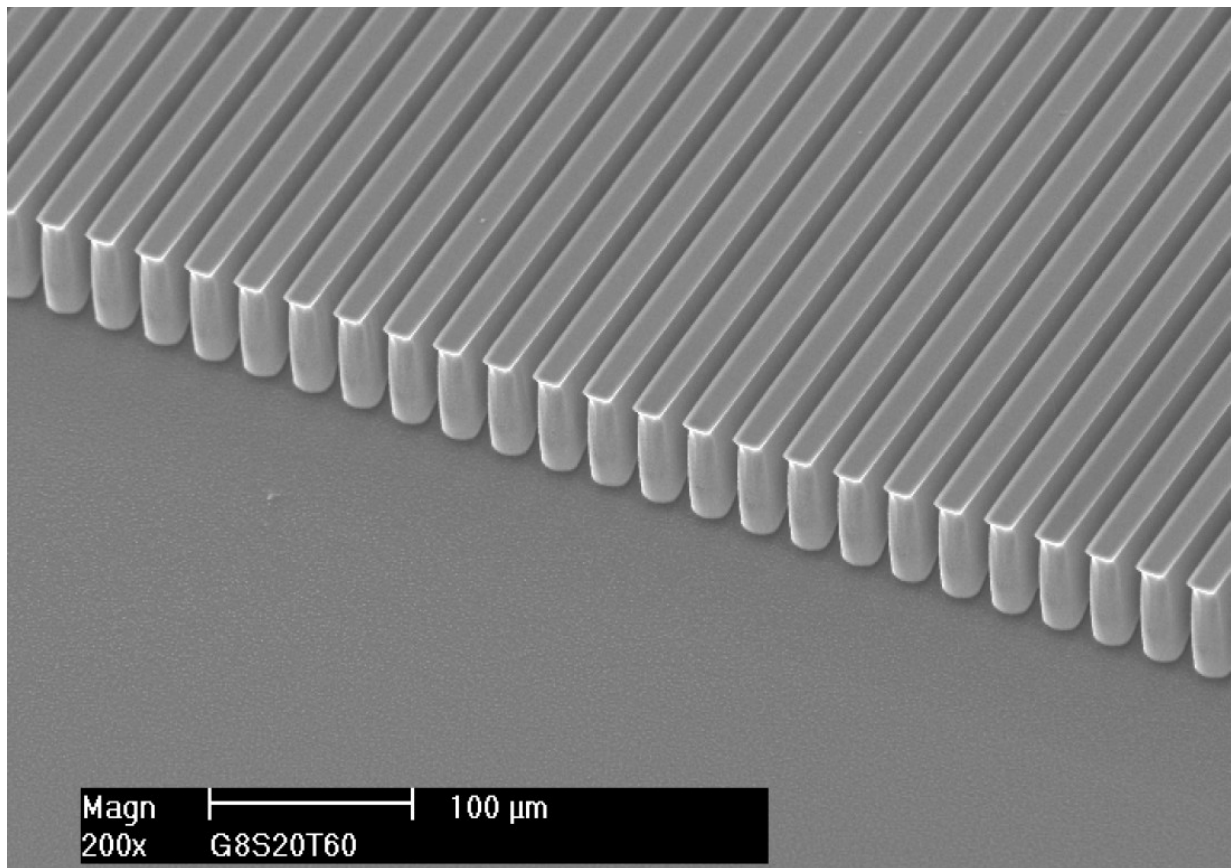


Abbildung 6.10. SEM-Aufnahmen G8S20T60

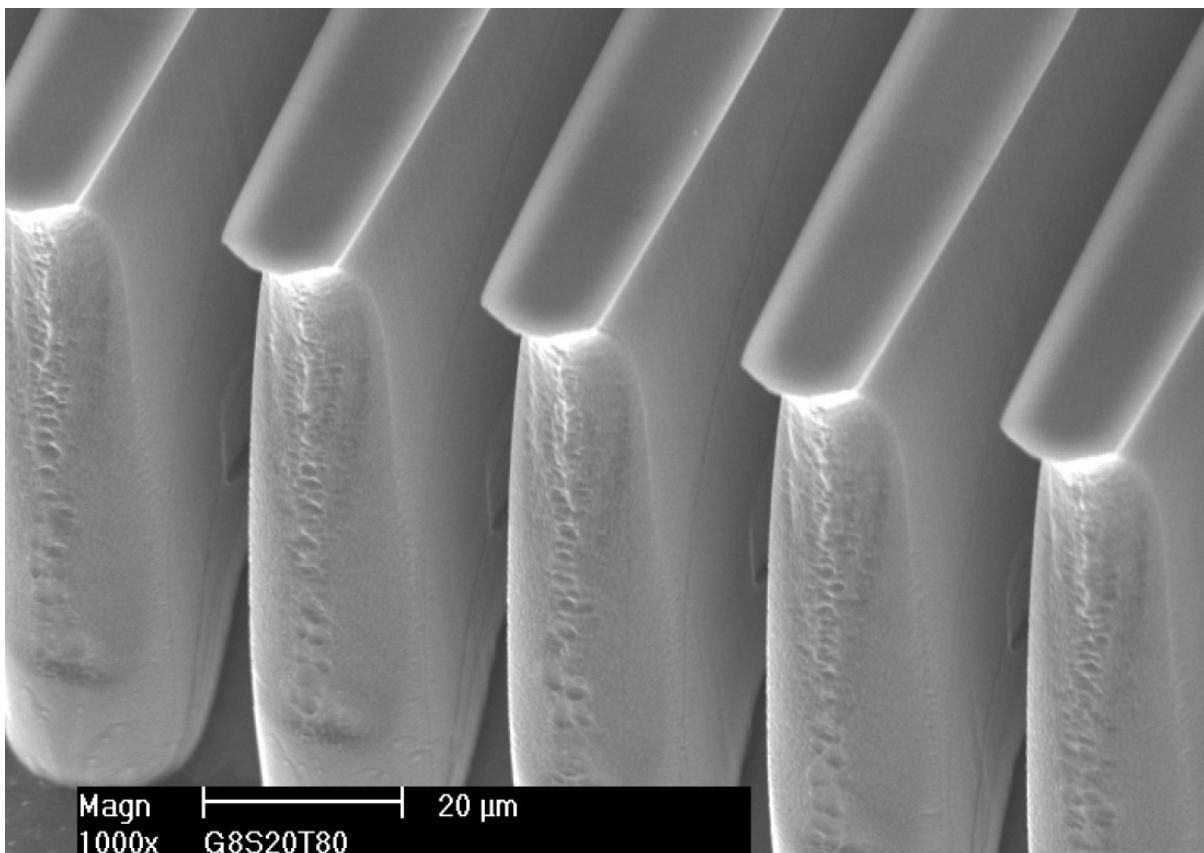
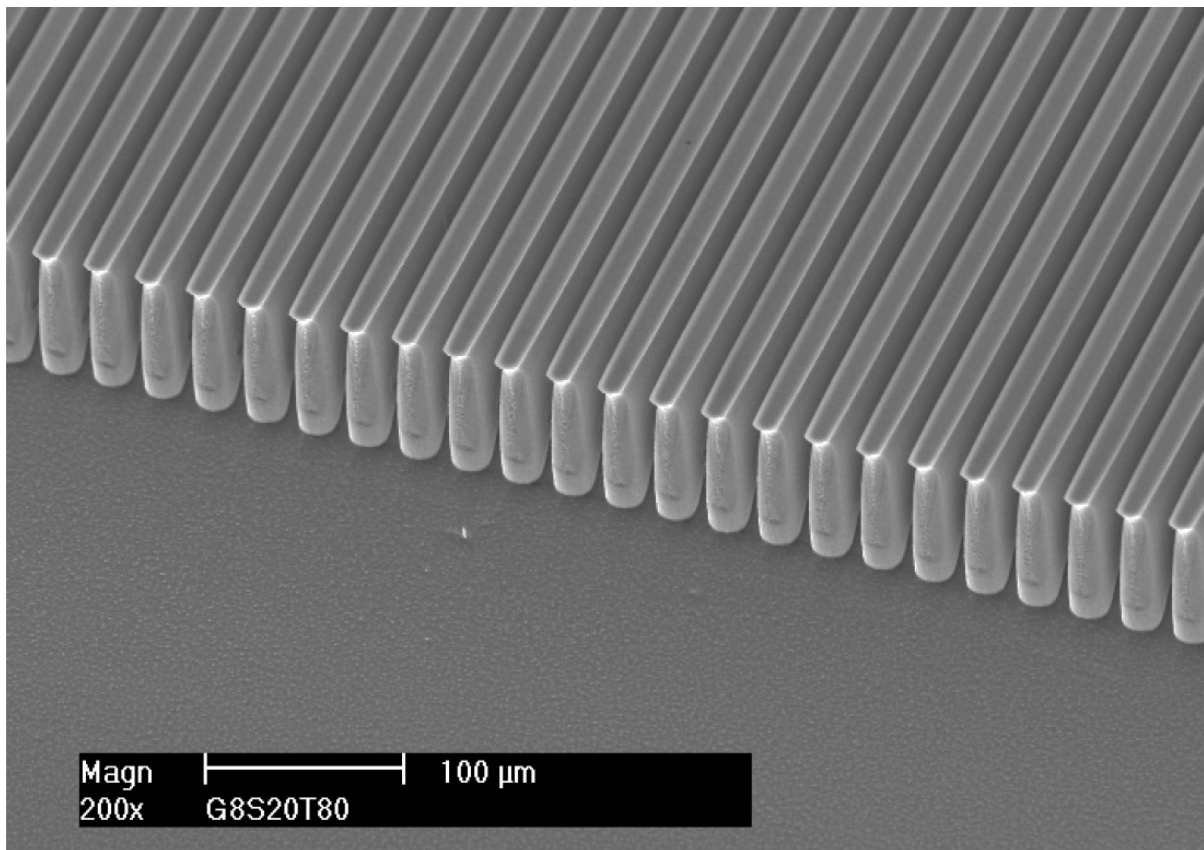


Abbildung 6.11. SEM-Aufnahmen G8S20T80

6.5 Messungen

Die im vorigen Kapitel beschriebenen Proben wurden auf einen Goniometer mittig zwischen Monochromator und Analysator in den Neutronenstrahl derart eingebracht, dass das Gitterprofil in einer Ebene senkrecht zum Neutronenstrahl verdreht werden konnte. Positive Winkel wurden per Definition durch Drehung gegen den Uhrzeigersinn festgelegt.

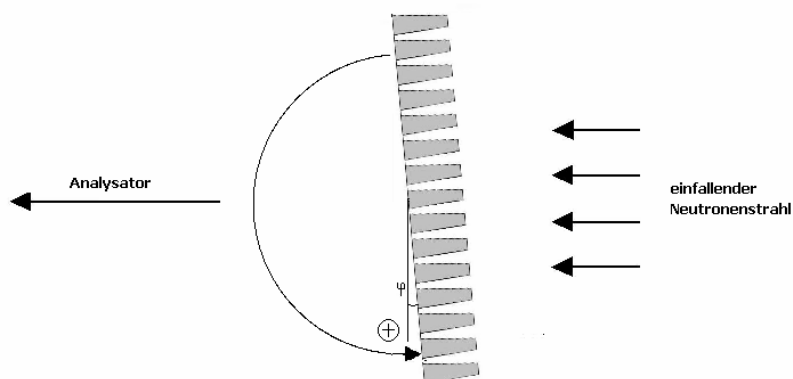


Abbildung 6.12. Probenpositionierung im Neutronenstrahl

Die ungeätzten Bereiche der Proben wurden mit Cadmium-Blenden abgedeckt. Um den Einfluss der Strahlreduzierung durch diese Blenden zu berücksichtigen, wurden Rockingkurven der Blenden aufgenommen. Die Verdrehung der Blenden ergab keine nennenswerte Strahlreduktion.

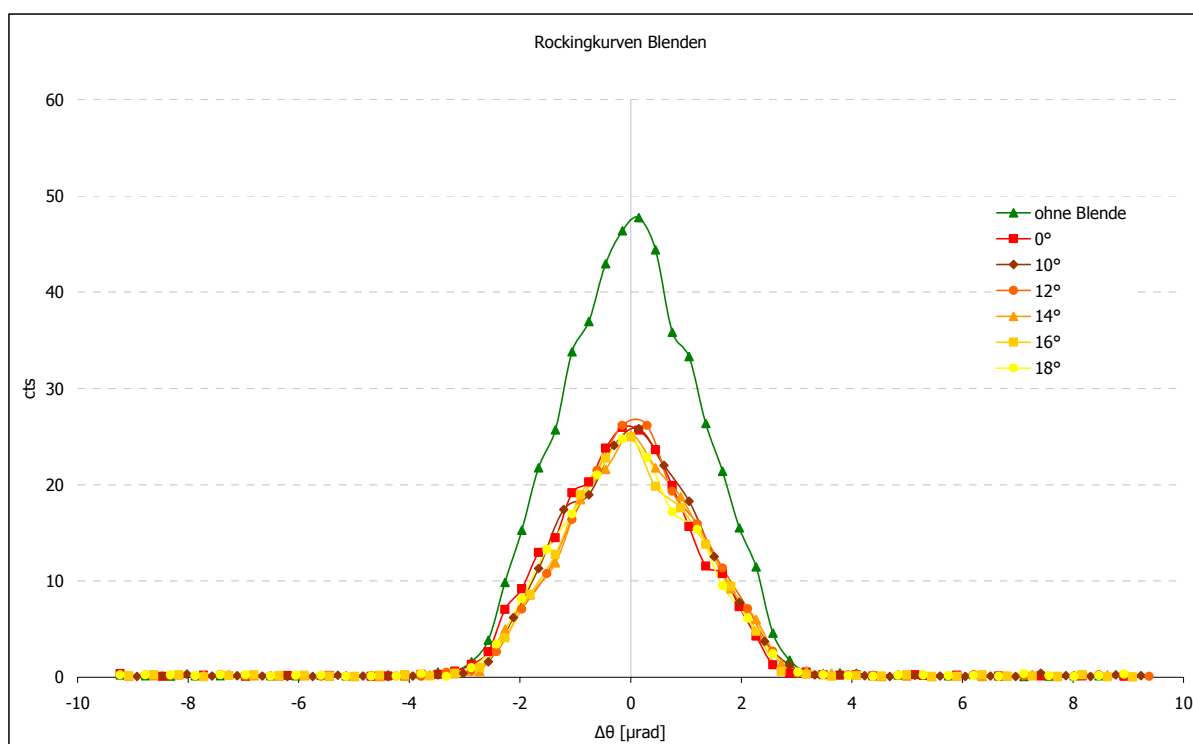


Abbildung 6.13. Rockingkurven ohne Blende und mit Blende unter verschiedenen Winkeln

Die folgenden Abbildungen (6.14.- 6.22.) zeigen die Veränderung des Beugungsbildes der Gitter bei Verdrehung senkrecht zur Einfallsrichtung

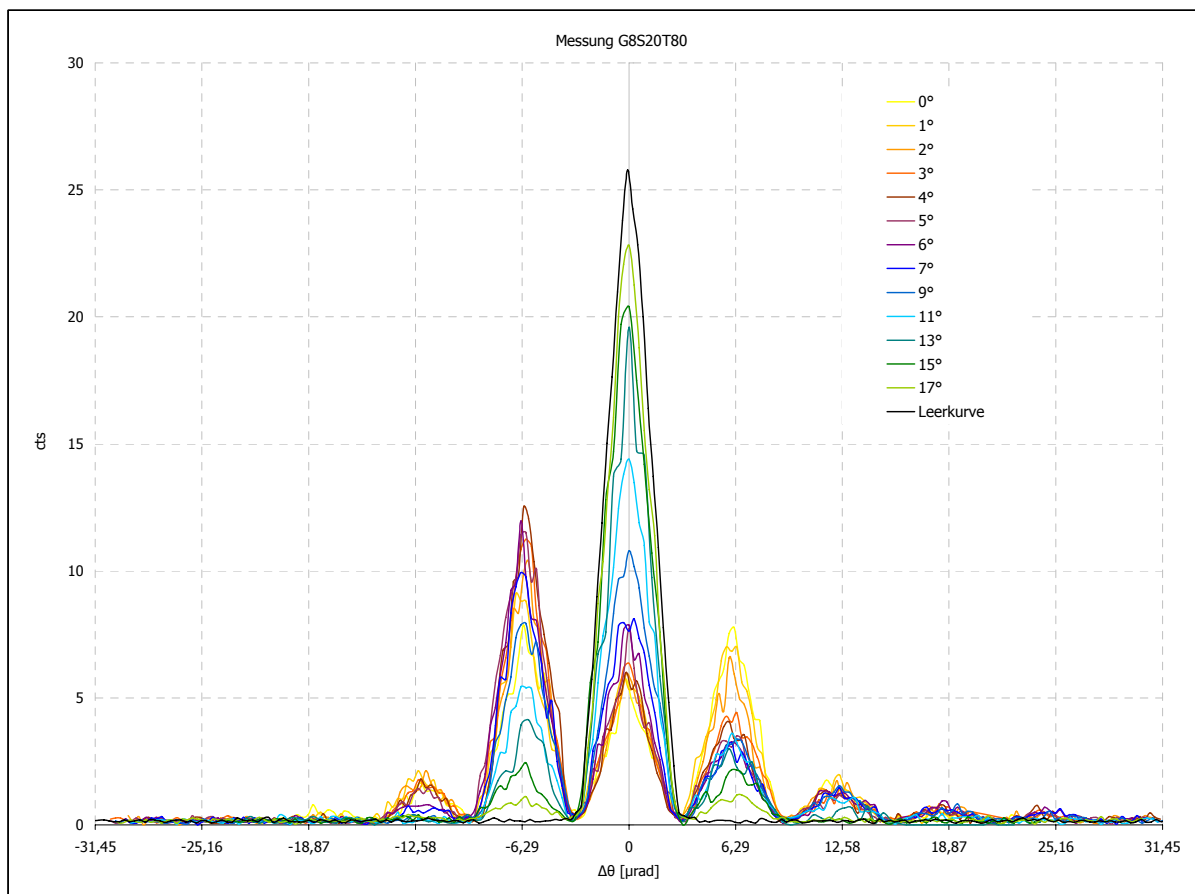


Abbildung 6.14. Messungen des Gitters G8S20T80 bei Verdrehung des Gitters zwischen 0° und 17° sowie Leerkurve mit Blende.

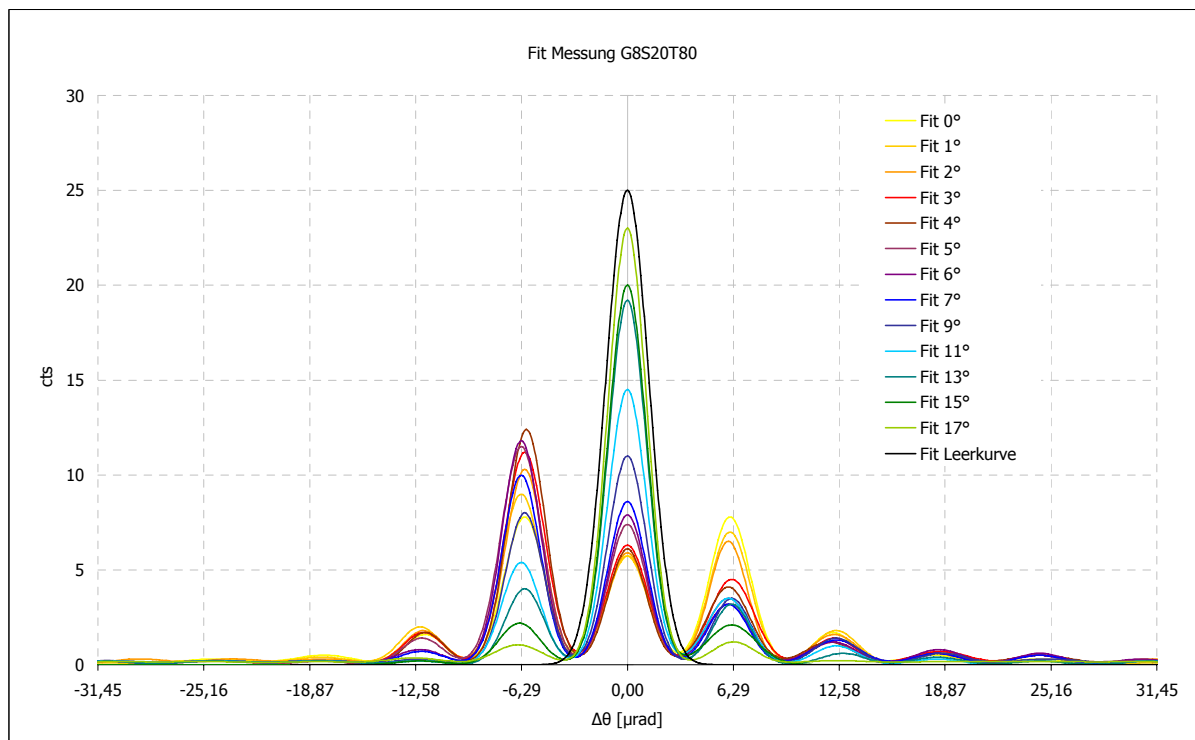


Abbildung 6.15. Fit der Messungen des Gitters G8S20T80 bei Verdrehung des Gitters zwischen 0° und 17° sowie der Leerkurve mit Blende.

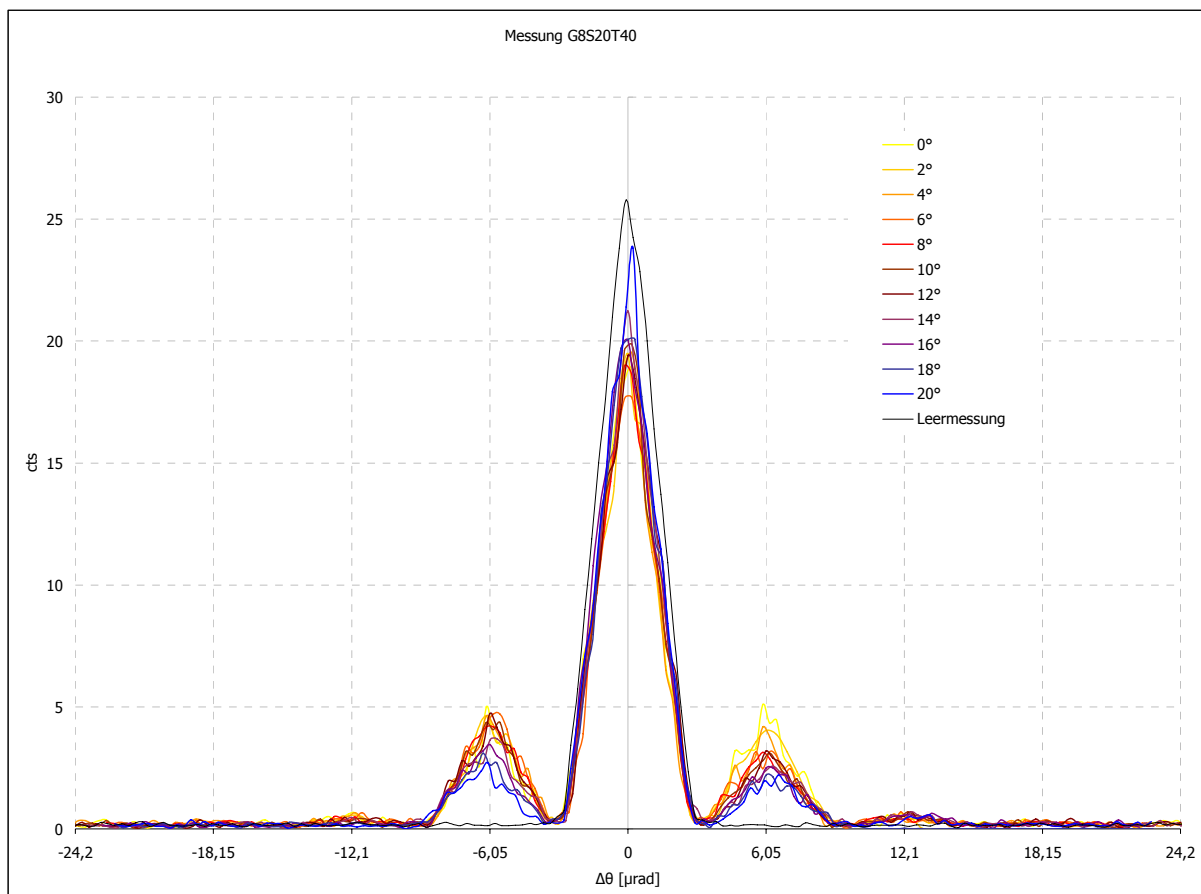


Abbildung 6.16. Messungen des Gitters G8S20T40 bei Verdrehung des Gitters zwischen 0° und 20° sowie Leerkurve mit Blende.

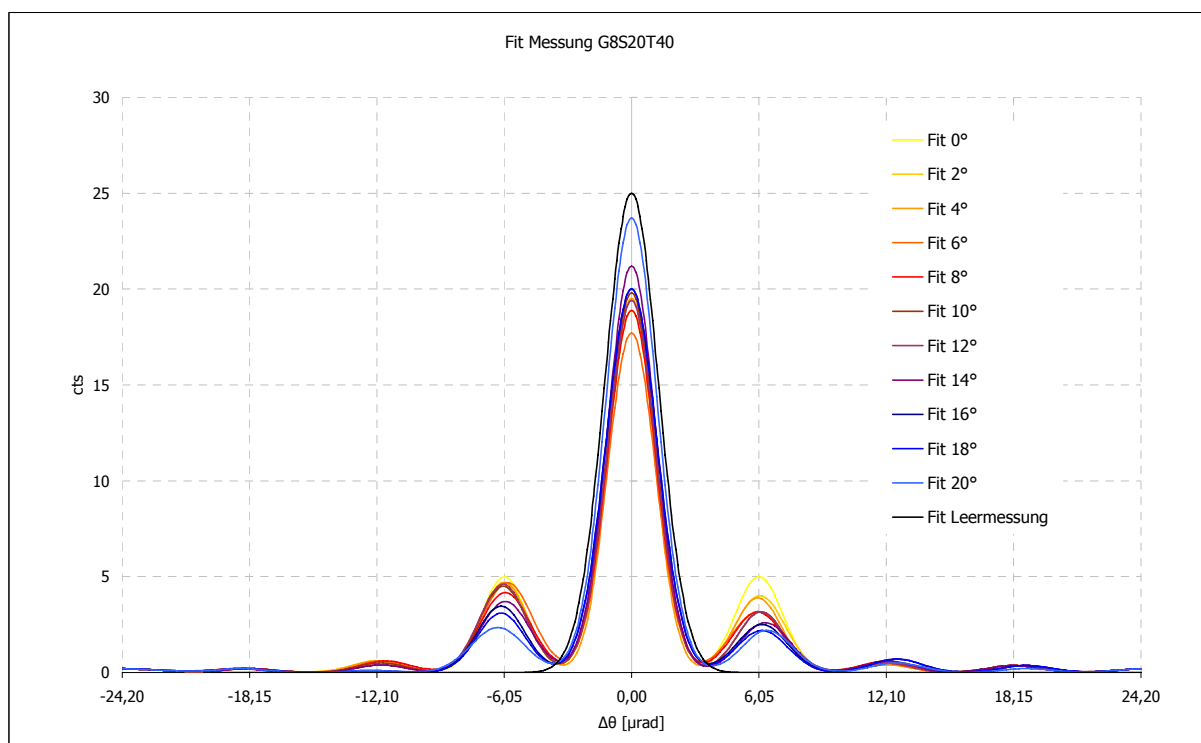


Abbildung 6.17. Fit der Messungen des Gitters G8S20T40 bei Verdrehung des Gitters zwischen 0° und 20° sowie der Leerkurve mit Blende.

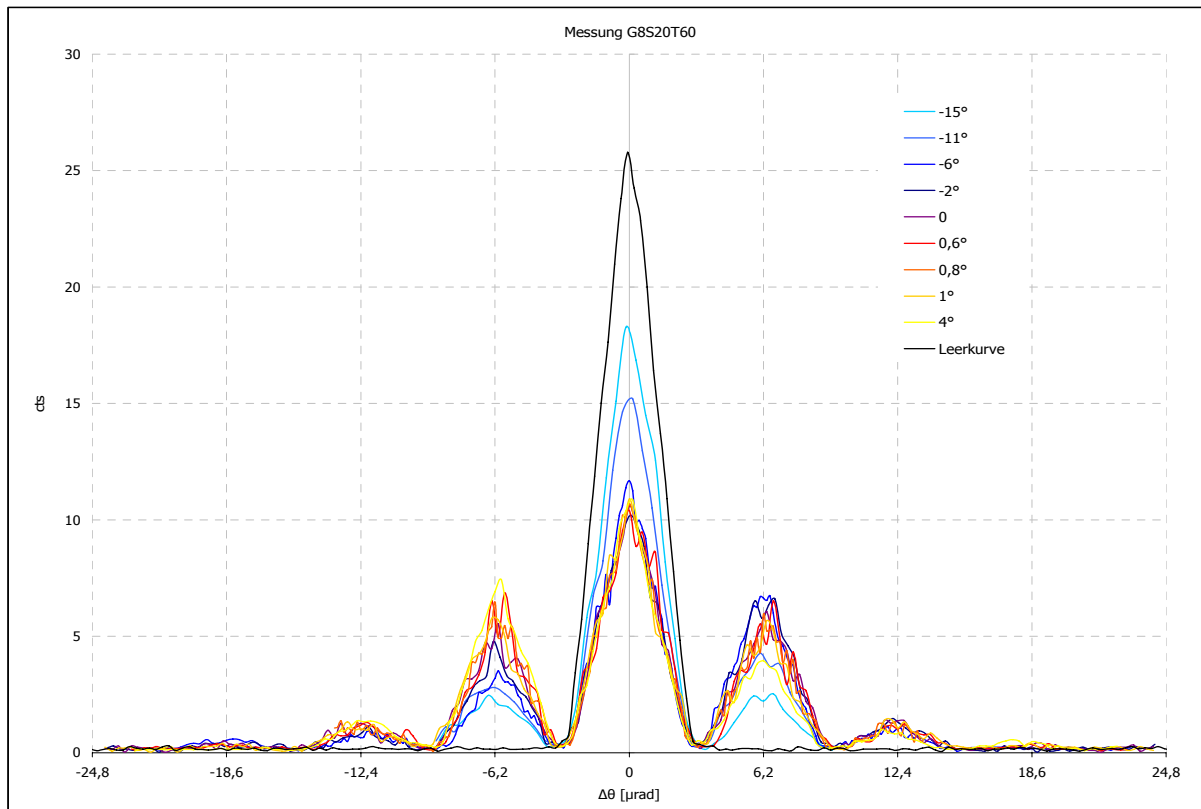


Abbildung 6.18. Messungen des Gitters G8S20T60 bei Verdrehung des Gitters zwischen -15° und 4° sowie Leerkurve mit Blende.

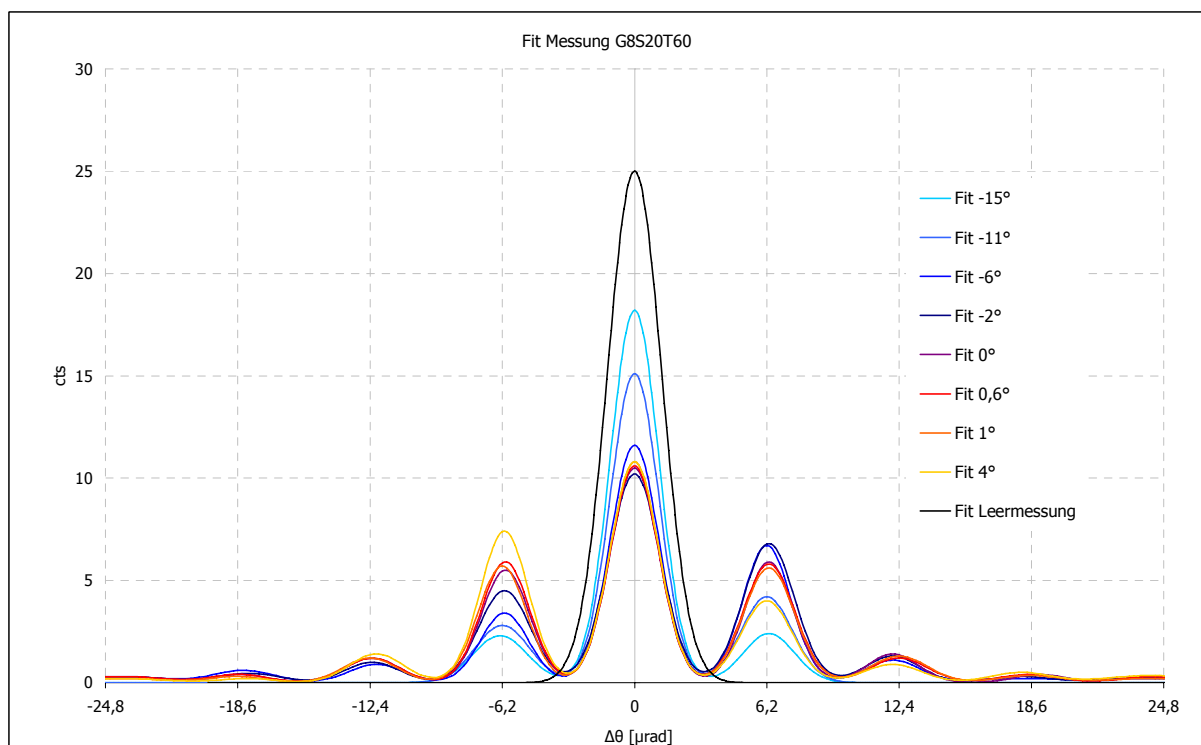


Abbildung 6.19. Fit der Messungen des Gitters G8S20T40 bei Verdrehung des Gitters zwischen -15° und 4° sowie der Leerkurve mit Blende.

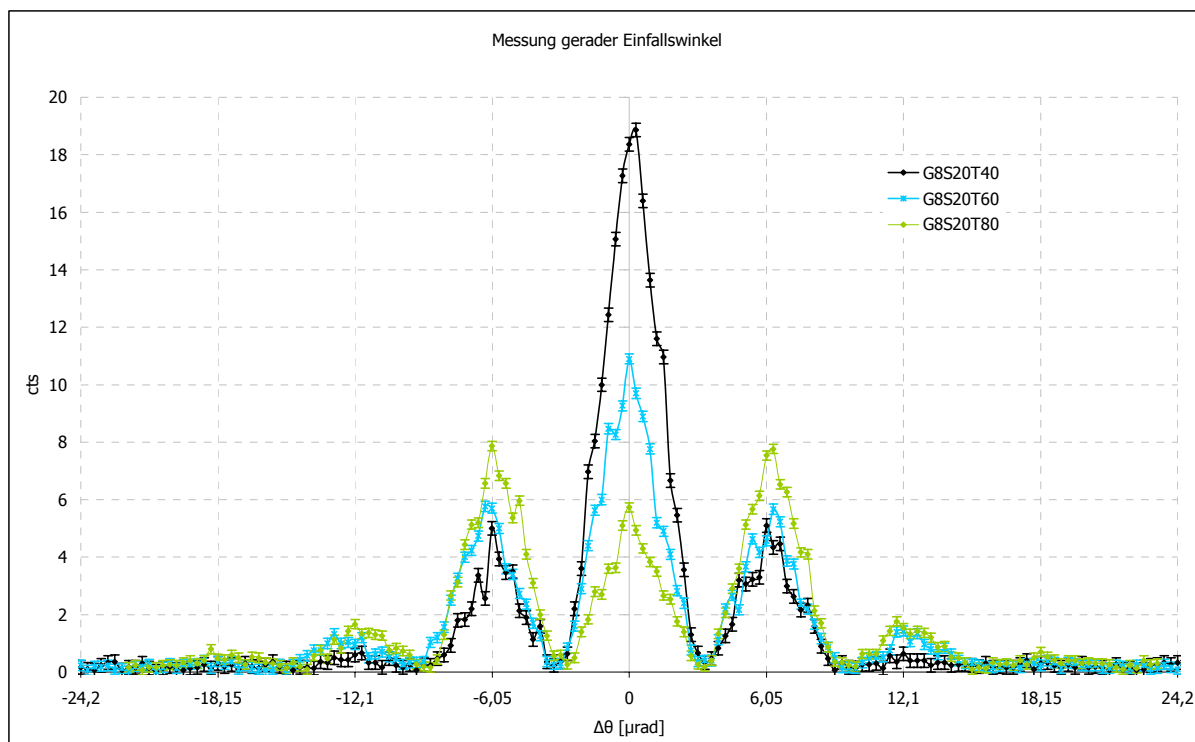


Abbildung 6.19. Messungen der Gitter G8S20T40, G8S20T60 und G8S20T80 bei geradem Einfallswinkel.

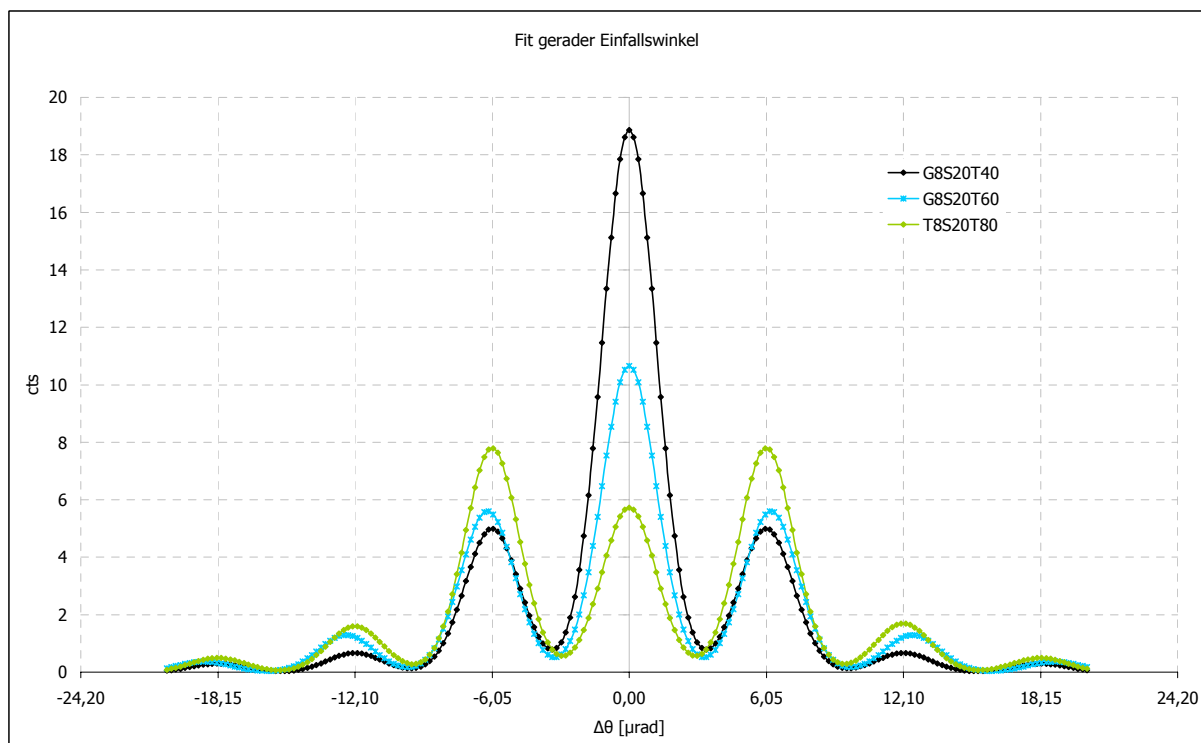


Abbildung 6.20. Fit der Messungen der Gitter G8S20T40, G8S20T60 und G8S20T80 bei geradem Einfallswinkel.

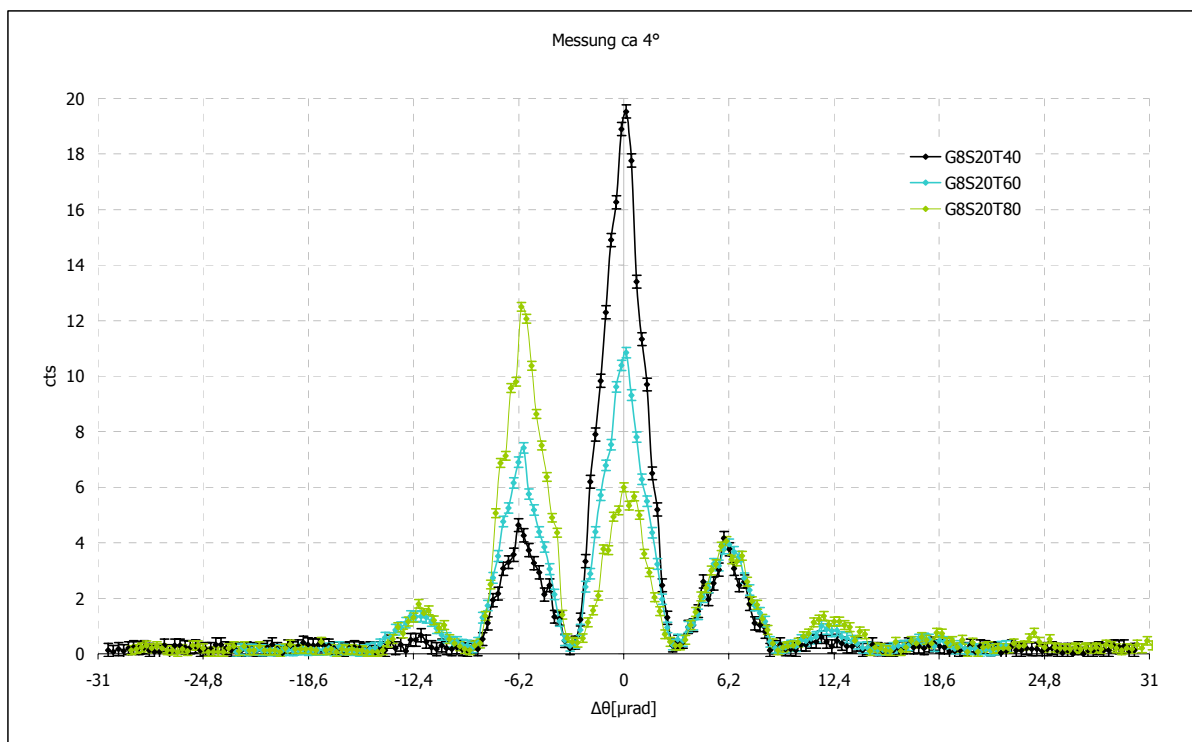


Abbildung 6.21. Messungen der Gitter G8S20T40, G8S20T60 und G8S20T80 bei Gitterverdrehung um circa 4°.

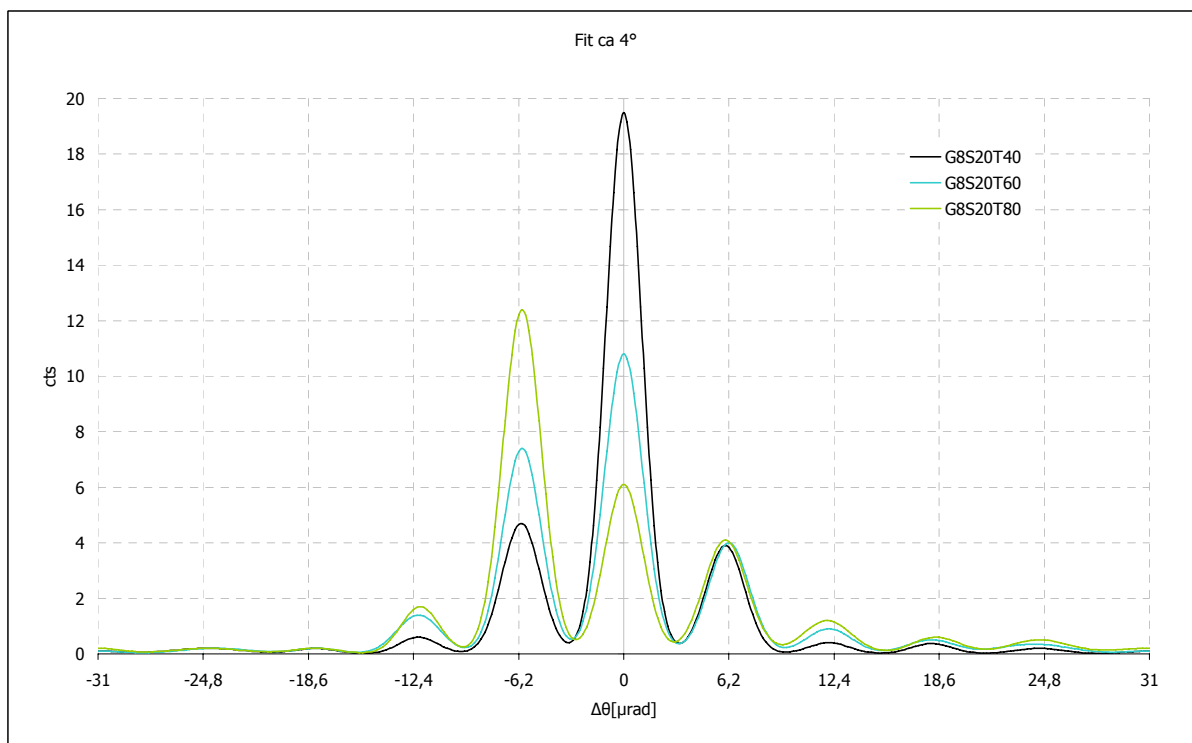


Abbildung 6.22. Fit der Messungen der Gitter G8S20T40, G8S20T60 und G8S20T80 bei Gitterverdrehung um circa 4°.

6 Ultrakleinwinkelstreuung an periodischen Phasengittern aus Silizium-Einkristall

Für die Fitfunktionen wurden Gaußkurven der Form

$$I(q) = C \cdot e^{\left(\frac{\theta - \theta_0}{HBW}\right)^2} \quad (6.11)$$

verwendet.

θ_0 bezeichnet dabei die Peakposition, C die Peakintensität und HBW die Halbwertsbreite der Gaußfunktion. Die Intensitäten und Halbwertsbreiten der einzelnen Fitkurven sind im Anhang aufgelistet.

In Tabelle 6.3. sind einige Peakpositionen der Fitfunktionen für das Gitter G8S20T80 angegeben. Obwohl die Peakpositionen theoretisch äquidistant sein müssen, sind Abweichungen zu beobachten.

G8S20T80	Gitterwinkel [°]									
	0	1	2	3	4	5	6	7	9	11
Ordnungen	Peakposition θ [μ rad]									
-3	-18,00	-18,16	-18,00	-18,16	-18,16	-18,16	-18,16	-18,16	-18,16	-18,16
-2	-12,00	-12,30	-12,10	-12,10	-12,10	-12,20	-12,30	-12,20	-12,30	-12,30
-1	-6,10	-6,30	-6,10	-6,10	-6,10	-6,30	-6,30	-6,30	-6,10	-6,30
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
1	6,10	6,10	6,00	6,20	6,00	6,00	6,00	6,00	6,20	6,00
2	12,20	12,40	12,30	12,30	12,00	12,20	12,20	12,40	12,40	12,40
3	18,16	18,20	18,50	18,60	18,40	18,40	18,50	18,40	18,70	18,40
	Abstände zwischen Peakpositionen $\Delta\theta$ [μ rad]									
zw. -3.0 und -2.0	-6,00	-5,86	-5,90	-6,06	-6,06	-5,96	-5,86	-5,96	-5,86	-5,86
zw. -2.0 und -1.0	-5,90	-6,00	-6,00	-6,00	-6,00	-5,90	-6,00	-5,90	-6,20	-6,00
zw. -1.0 und 0.0	-6,10	-6,30	-6,10	-6,10	-6,10	-6,30	-6,30	-6,30	-6,10	-6,30
zw. 0.0 und 1.0	-6,10	-6,10	-6,00	-6,20	-6,00	-6,00	-6,00	-6,00	-6,20	-6,00
zw. 1.0 und 2.0	-6,10	-6,30	-6,30	-6,10	-6,00	-6,20	-6,20	-6,40	-6,20	-6,40
zw. 2.0 und 3.0	-5,96	-5,80	-6,20	-6,30	-6,40	-6,20	-6,30	-6,00	-6,30	-6,00
Mittelwert	-6,03	-6,06	-6,08	-6,13	-6,09	-6,09	-6,11	-6,09	-6,14	-6,09
max. Differenz	0,20	0,50	0,40	0,30	0,40	0,40	0,44	0,50	0,44	0,54

Tabelle 6.3. einige Peakpositionen der Fitfunktionen (G8S20T80) sowie deren Mittelwerte und maximalen Differenzen

Diese Messungenauigkeiten sind unter anderem auf Ungenauigkeiten bei der Drehung der Analysatorachse zurückzuführen. Die KWS Wien besitzt keinen Absolutencoder, mit dessen Hilfe die Lage der Drehachse immer genau bekannt wäre.

Bei der Auswertung der Messungen ist weiters darauf Rücksicht zu nehmen, dass die Winkel der Gitterverdrehungen per Hand eingestellt werden mussten und auch hierfür kein Encoder existierte.

7 Interpretation der Messergebnisse mittels Modell phasenmodulierter Punktquellen

Die Länge des Weges innerhalb des Mediums ist proportional zum Phasenschub (3.26)

$$\chi = -Nb_c \lambda d$$

Bei geradem Durchgang der Neutronen durch das Gitter ist daher die „Form“ des verursachten Phasenschubes gleich der geometrischen Form des Gitters.

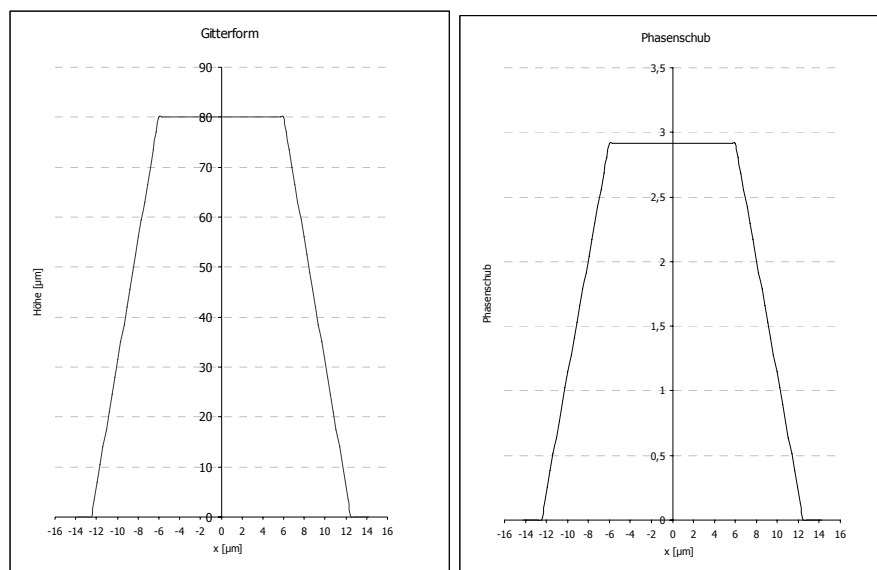


Abbildung 7.1. Gitterform (links) und Phasenschub (rechts) bei geradem Durchgang durch das Gitter. Dies gilt natürlich nicht mehr, wenn das Gitter gedreht wird. So sieht zum Beispiel der Phasenschub eines mit dem Winkel φ durchquerten Gitterprofils (Abbildung 7.2.a) wie in Abbildung 7.2.b dargestellt aus.

7 Interpretation der Messergebnisse mittels Modell phasenmodulierter Punktquellen

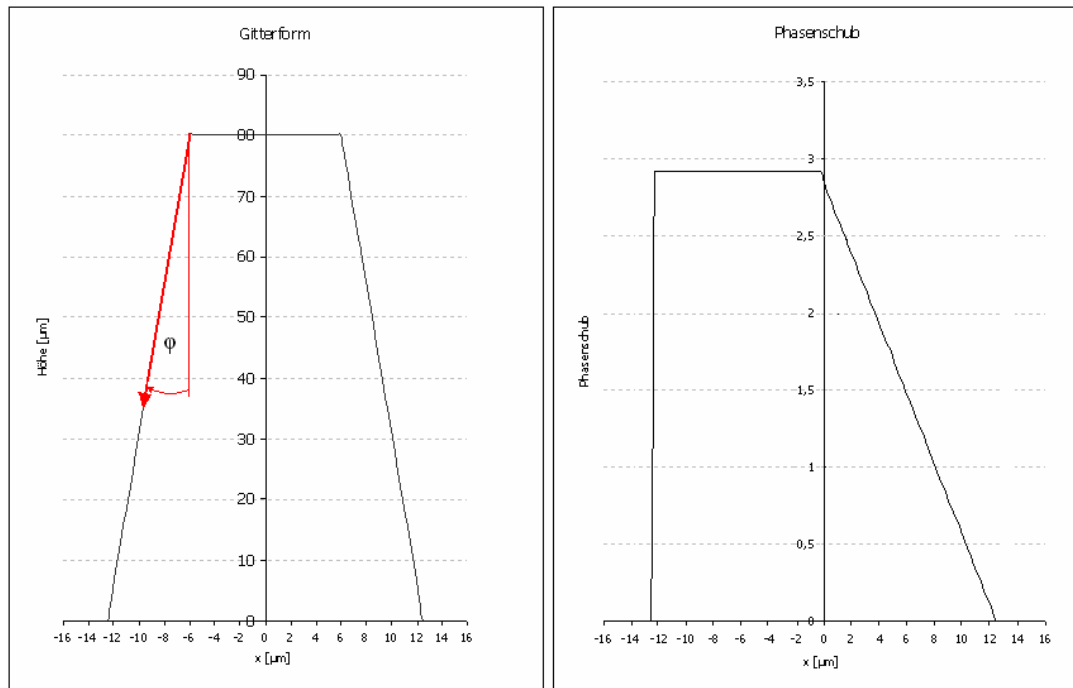
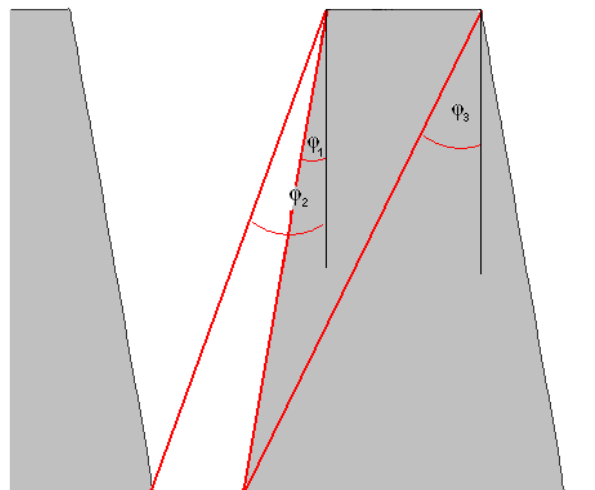


Abbildung 7.2. Gitterform (a) und Phasenschub bei schrägem Durchgang durch das Gitter (b)

Aufgrund der Geometrie des Gitters können gitterabhängige Grenzwinkel existieren, bei denen sich die Phasenschübe abrupt ändern. Zwischen den Grenzwinkeln ändert sich die Form des Phasenschubes kontinuierlich. Für ein trapezförmiges Gitterprofil sind einige Grenzwinkel in Abbildung 7.3 dargestellt.

Abbildung 7.3. drei Grenzwinkel für ein trapezförmiges Gitterprofil



Kontinuierliche Änderungen des Phasenschubes ergeben kontinuierliche Änderungen des Beugungsbildes.

Es ist daher sinnvoll, die Messergebnisse in Bereiche zwischen möglichen Grenzwinkeln einzuteilen, in denen die Änderungen des Beugungsbildes kontinuierlich und ähnlich sind.

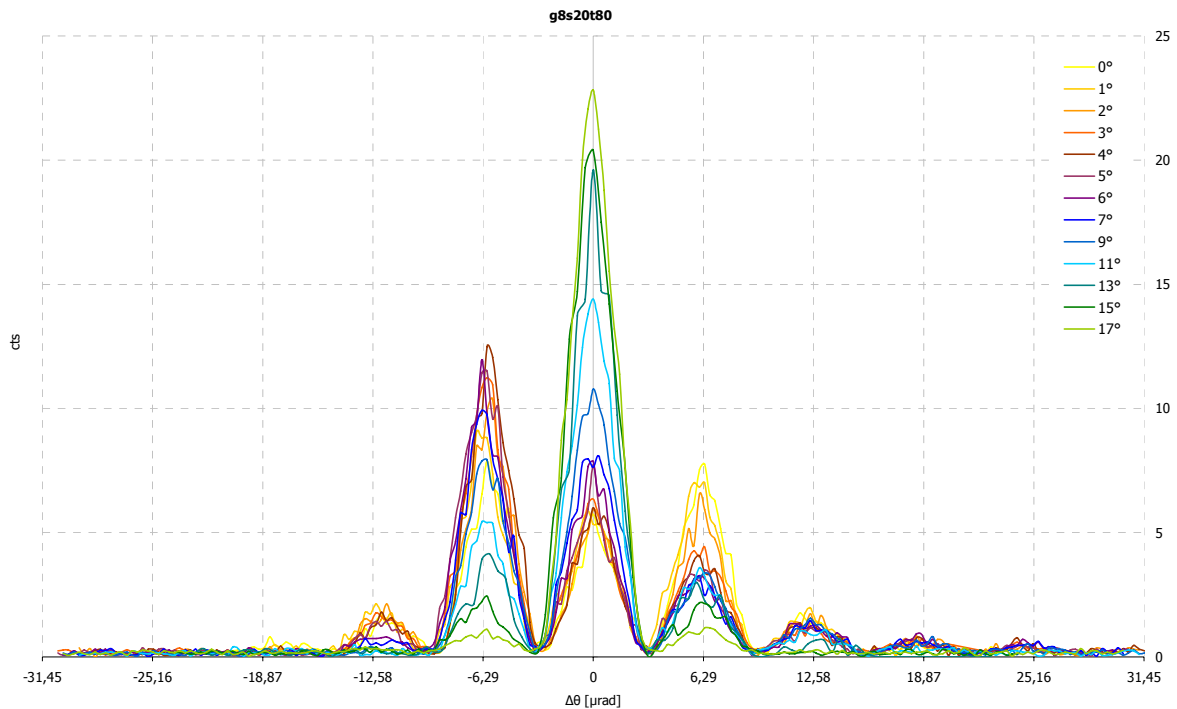


Abbildung 7.4. Messung des Gitters G8S20T80 für verschiedene Gitterwinkel

Betrachtet man die Messungen des Gitters G8S20T80 für die verschiedenen Winkel, so wäre eine Einteilung in folgende Bereiche sinnvoll:

Bereich I: $0^\circ \leq \varphi \leq 4^\circ$

Die Intensität in der nullten Ordnung bleibt nahezu unverändert, während die beiden ersten Ordnungen starken Änderungen unterliegen. Mit steigendem Winkel beobachtet man links einen Zuwachs und rechts eine Verminderung der Intensität.

Die höheren Ordnungen auf der linken Seite werden nahezu gänzlich unterdrückt.

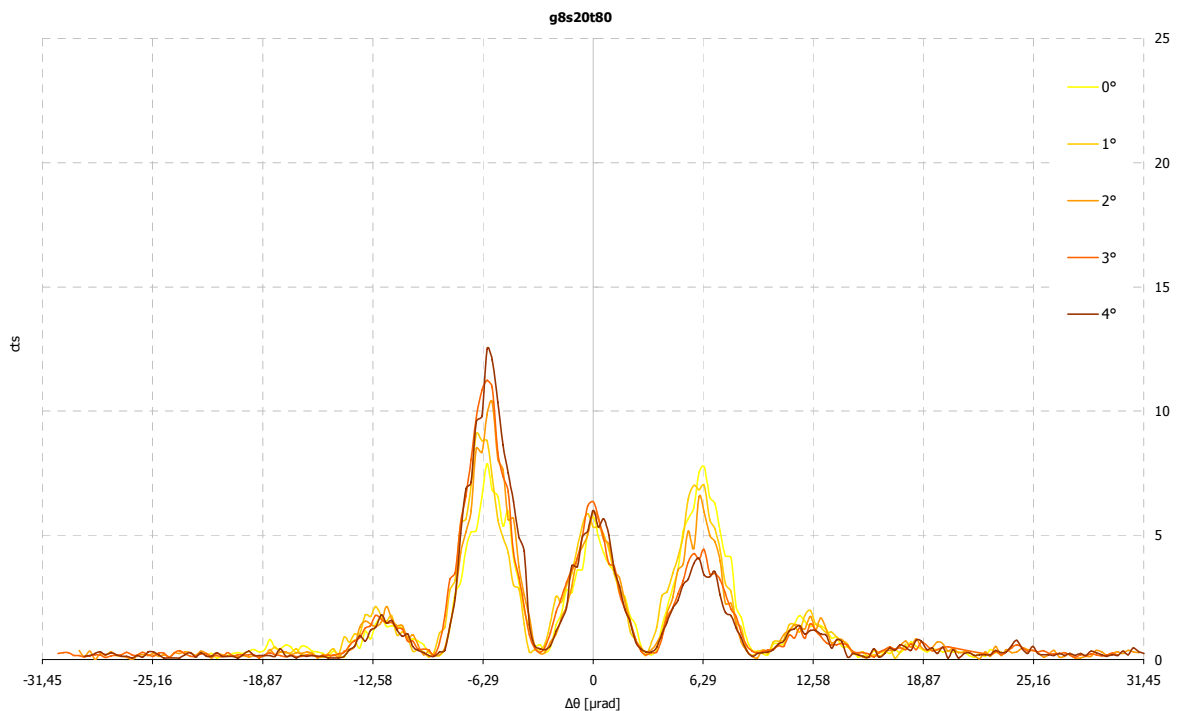


Abbildung 7.6. Messung des Gitters G8S20T80 für die Gitterwinkel $0^\circ \leq \varphi \leq 4^\circ$

Bereich II: $4^\circ \leq \varphi \leq 7^\circ$

In diesem Bereich ändert sich auch die nullte Ordnung; Mit steigendem Winkel steigt die Intensität leicht. Die erste Ordnung links ändert sich weiterhin, jedoch beobachtet man jetzt bei steigendem Winkel eine Absenkung. Weiters sinkt die Intensität in der zweiten Ordnung links.

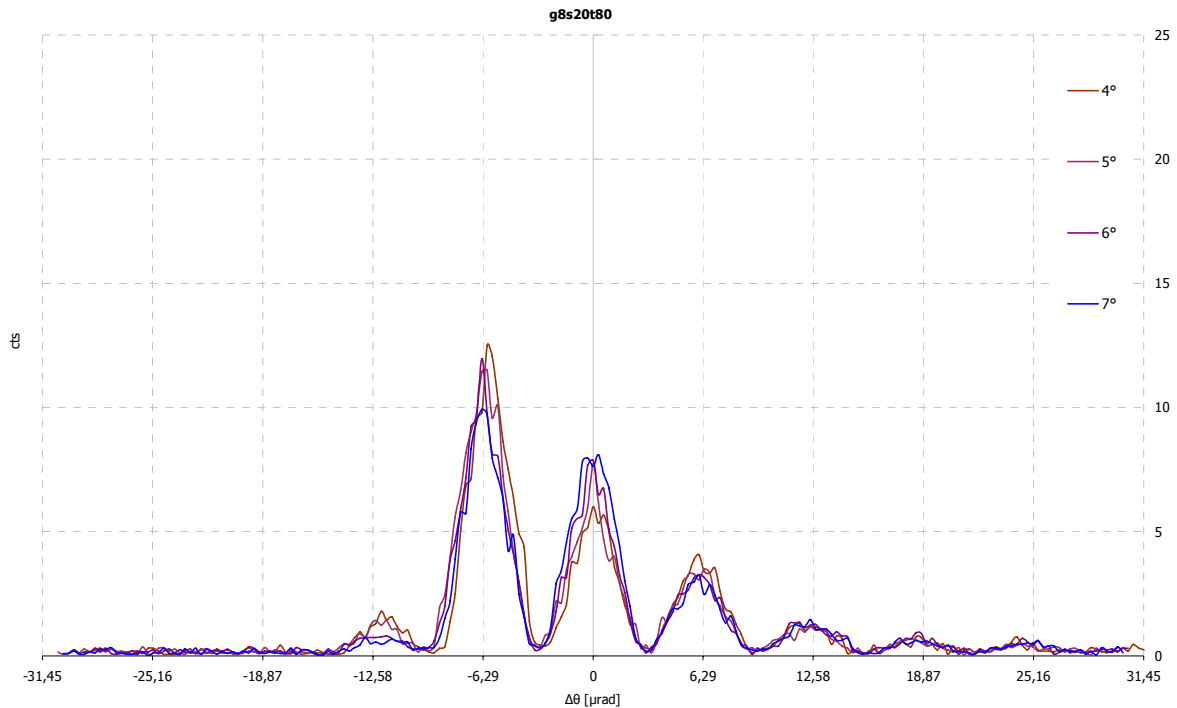


Abbildung 7.7. Messung des Gitters G8S20T80 für die Gitterwinkel $4^\circ \leq \varphi \leq 7^\circ$

Bereich III: $7^\circ \leq \varphi \leq 13^\circ$

Hier beobachtet man starke Änderungen in der nullten (Anstieg) und linken ersten Ordnung (Verminderung) sowie eine leichte Absenkung der zweiten Ordnung rechts.

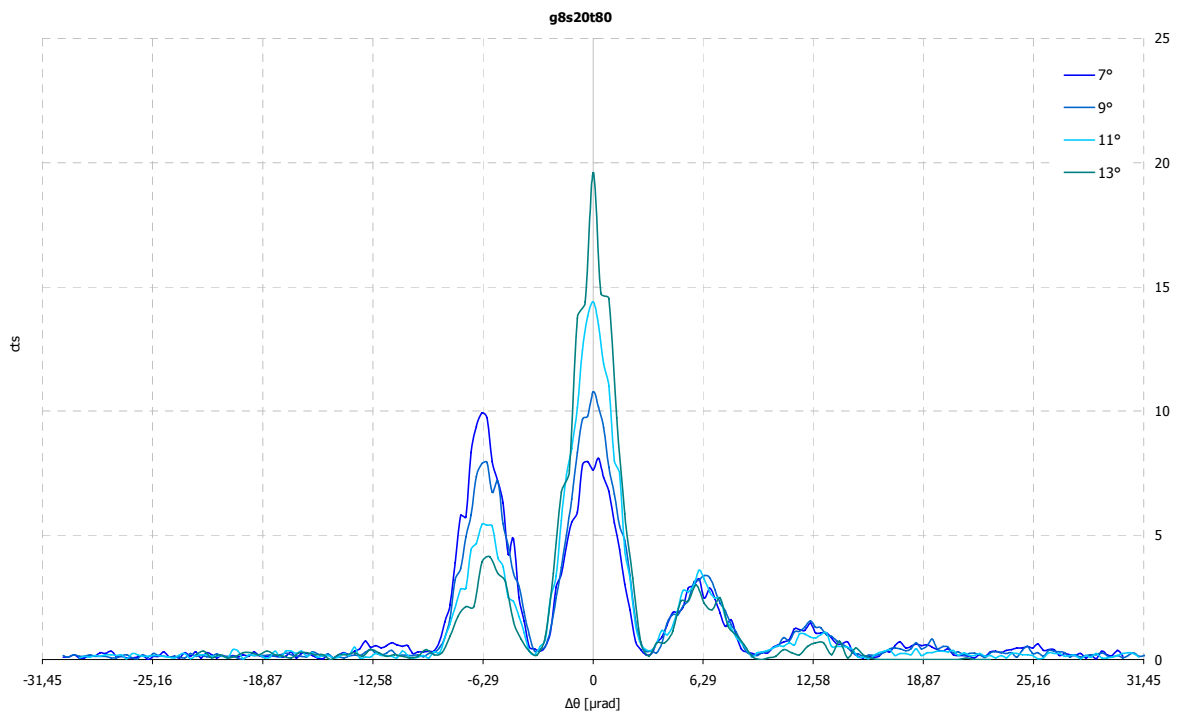


Abbildung 7.8. Messung des Gitters G8S20T80 für die Gitterwinkel $7^\circ \leq \varphi \leq 13^\circ$

7 Interpretation der Messergebnisse mittels Modell phasenmodulierter Punktquellen

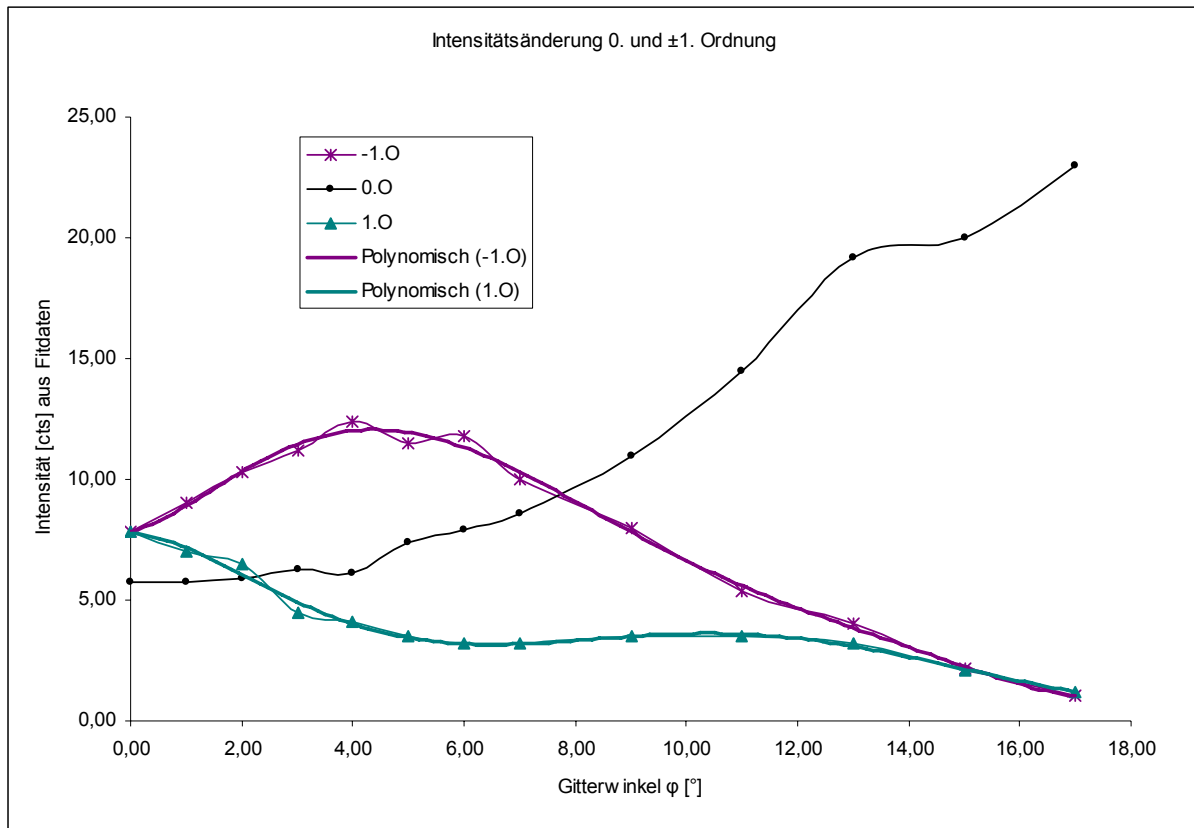


Abbildung 7.5. gefittete Messwerte der nullten und ersten Ordnungen für verschiedene Gitterwinkel; Wendepunkte bei circa 4,6° und 7°

Ausgehend von dieser Unterteilung kann man ein Modellprofil mit den folgenden Eigenschaften annehmen:

Profil: Gleichschenkeliges Trapez mit den Grenzwinkeln

$$\varphi_1 \approx 4,65^\circ$$

$$\varphi_2 \approx 7,1^\circ$$

$$\varphi_3 \approx 13^\circ$$

daraus ergibt sich geometrisch

Höhe: 80µm

Basis: 25µm

Stegbreite 12µm

Abstand zum nächsten Profil: 3,4 µm
(entspricht Periode 28,4µm)

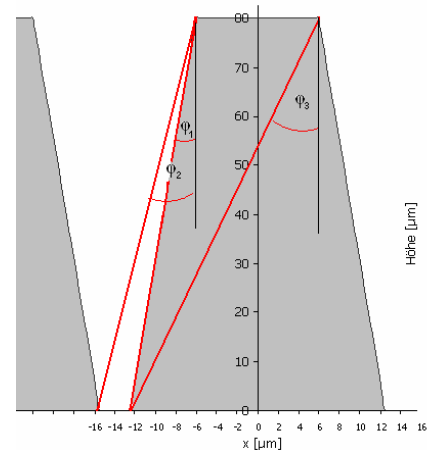


Abbildung 7.9. Modellgitter mit drei Grenzwinkeln

7 Interpretation der Messergebnisse mittels Modell phasenmodulierter Punktquellen

Basierend auf diesem Modellprofil lassen sich die verursachten Phasenschübe für die 3 Bereiche

- Bereich I: $0^\circ \leq \varphi \leq 4,65^\circ$
 Bereich II: $4,65^\circ \leq \varphi \leq 7,1^\circ$
 Bereich III: $7,1^\circ \leq \varphi \leq 13^\circ$

aus geometrischen Überlegungen angeben:

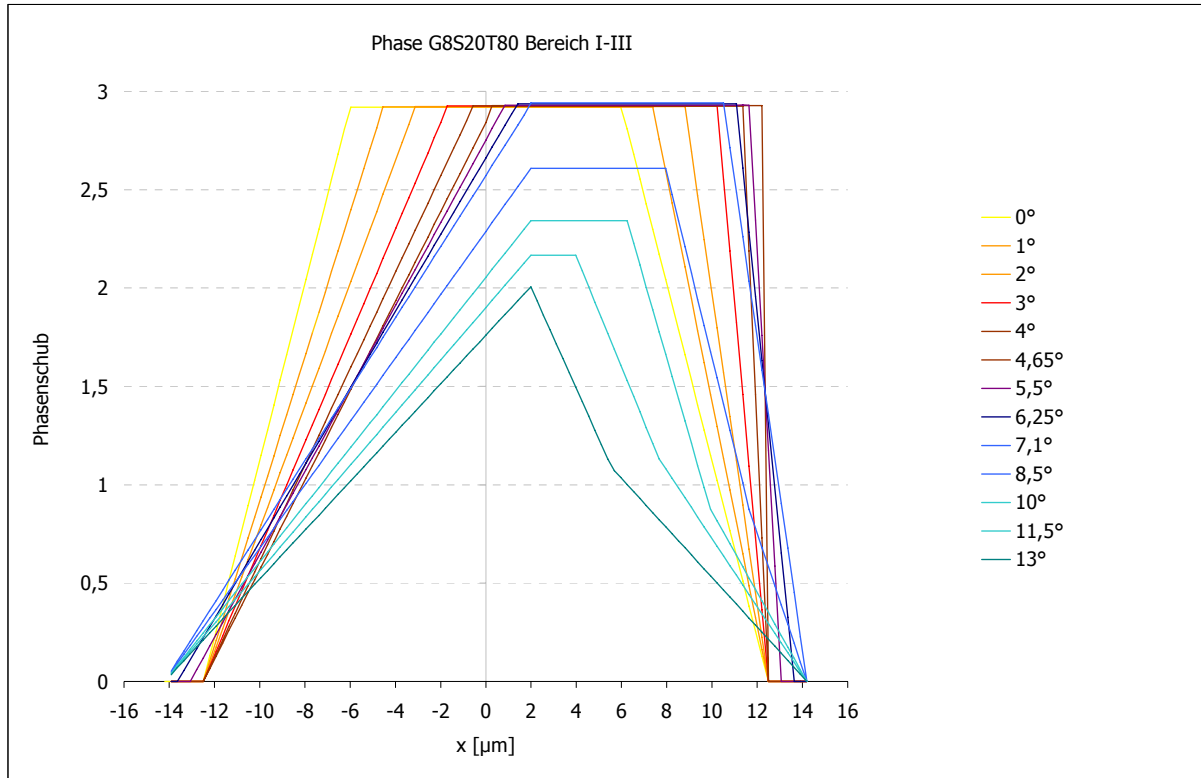


Abbildung 7.10. Phasenfaktoren für Modellgitter bei verschiedenen Gitterwinkeln

Die Intensität nach dem Modell der phasenmodulierten Punktquellen war durch Gleichung (5.10) angegeben:

$$I \propto \underbrace{\left| \frac{\sin\left(N \frac{kp \sin \vartheta}{2}\right)}{\sin\left(\frac{kp \sin \vartheta}{2}\right)} \right|^2}_{\text{Strukturfaktor}} \cdot \underbrace{\left| \sum_{n=0}^{m-1} e^{i\Delta\varphi_n} e^{ik \frac{p}{m} \sin \vartheta \cdot n} \right|^2}_{\text{Formfaktor}}$$

Um die gesamte theoretische Beugungsfunktion zu erhalten, müssen, wie bereits erwähnt, die gerechneten theoretischen Intensitäten noch mit der Instrumentenkurve gefaltet werden, wobei diese als Gaußkurve mit einer Halbwertsbreite von $1,7 \mu\text{rad}$ angenähert wurde.

Bereich I: $0^\circ \leq \varphi \leq 4,65^\circ$

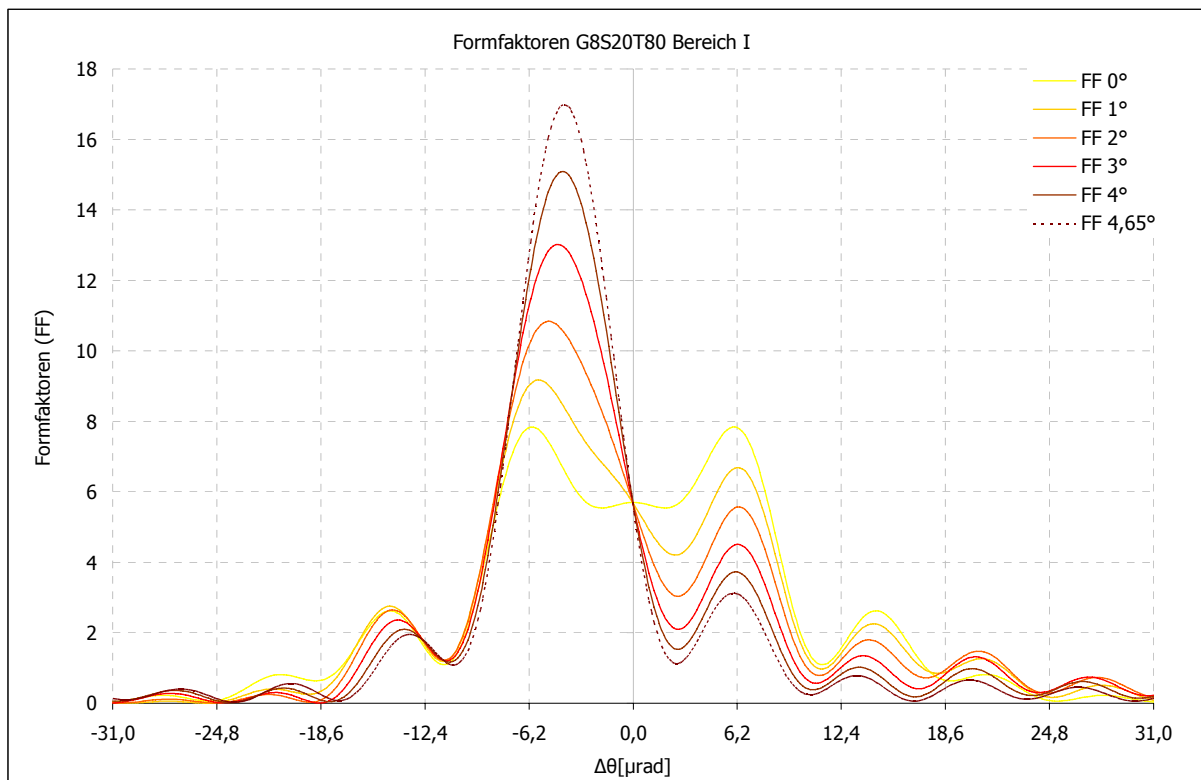


Abbildung 7.11. berechnete Formfaktoren für Bereich I

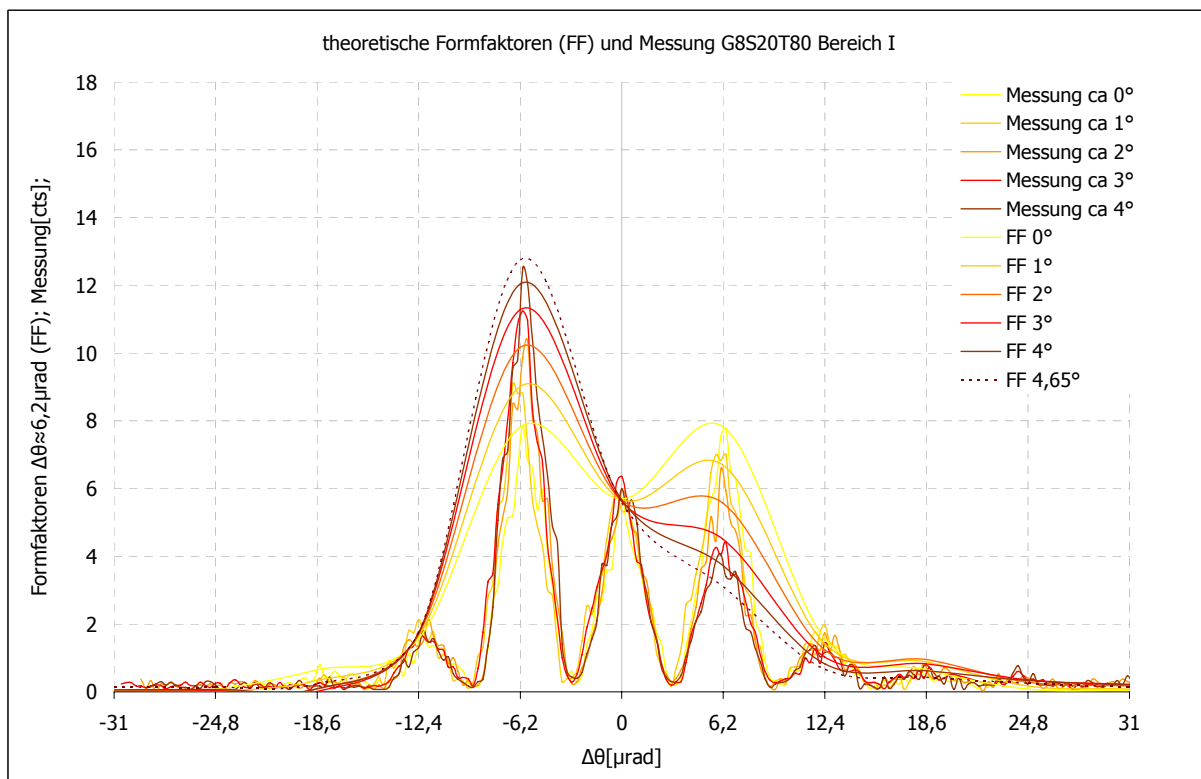


Abbildung 7.12. Messung und berechnete Werte der Formfaktoren an den Stellen der Maximas des Strukturfaktors ($\Delta\theta \approx 6,2 \mu\text{rad}$) für Bereich I

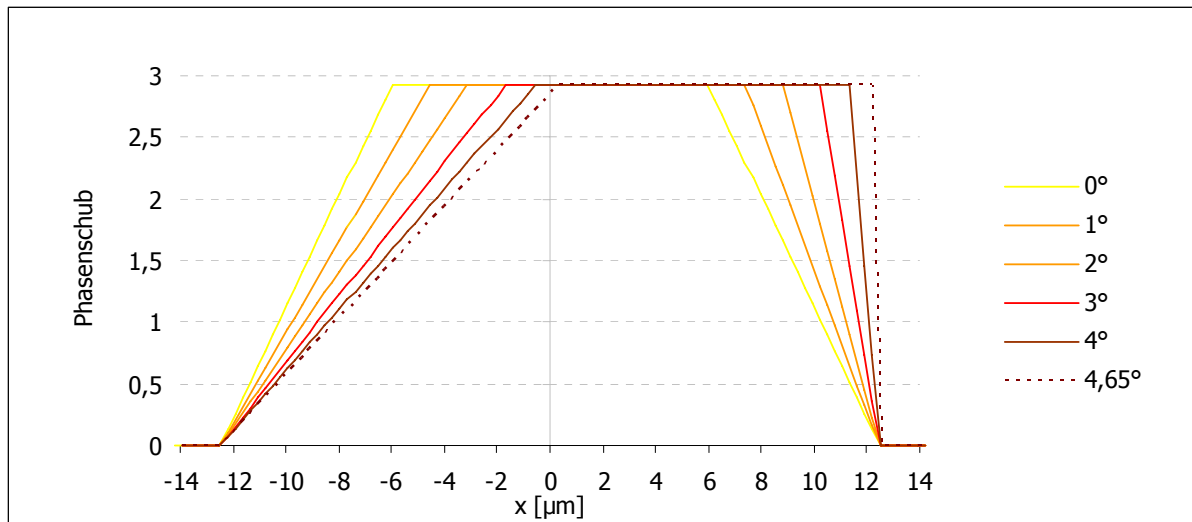


Abbildung 7.13. Phasendiagramme Bereich I

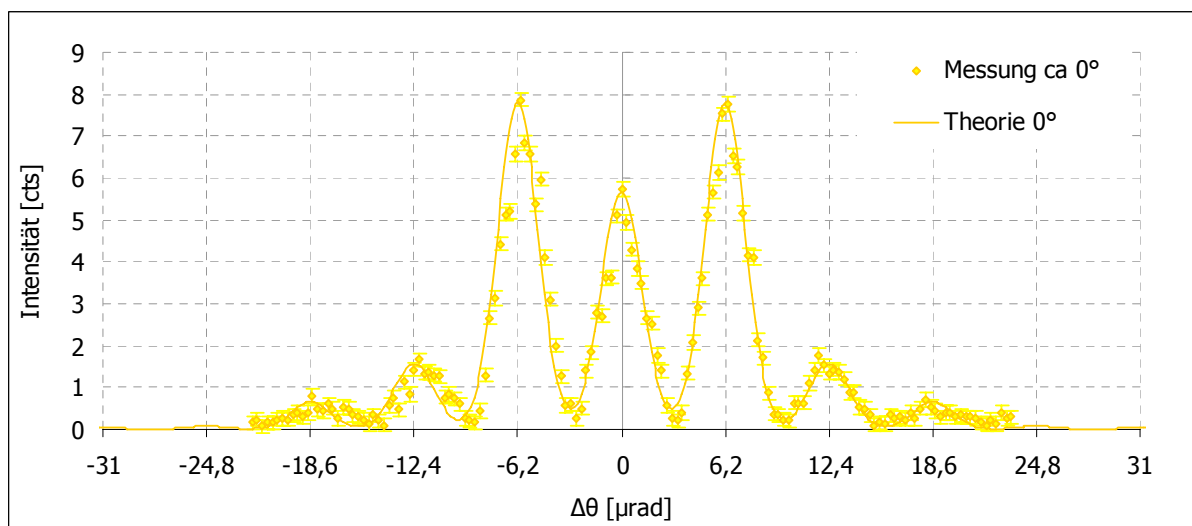


Abbildung 7.14. Messung und theoretische Messkurven circa 0°

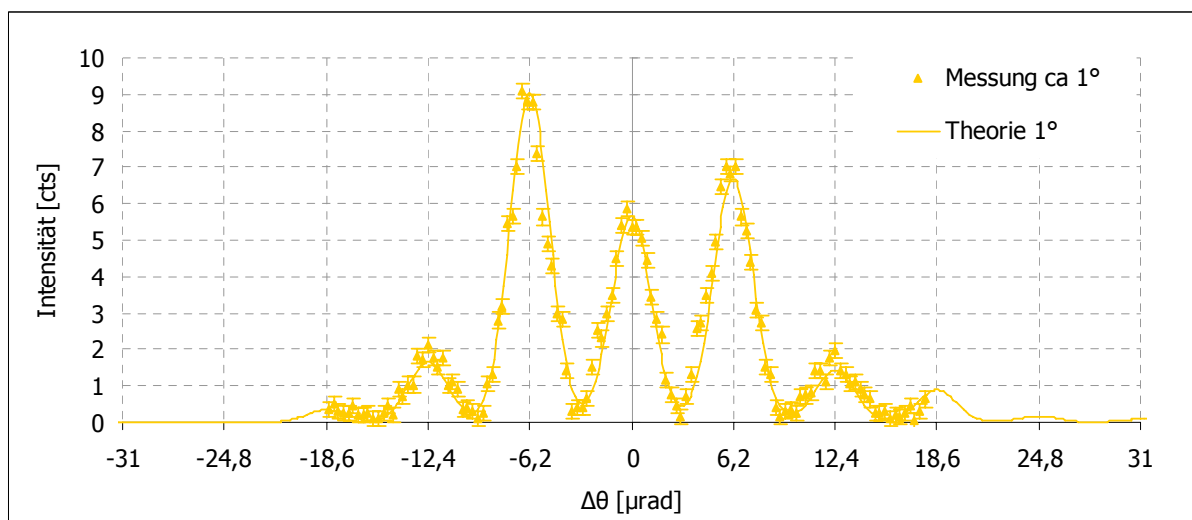


Abbildung 7.15. Messung und theoretische Messkurven circa 1°

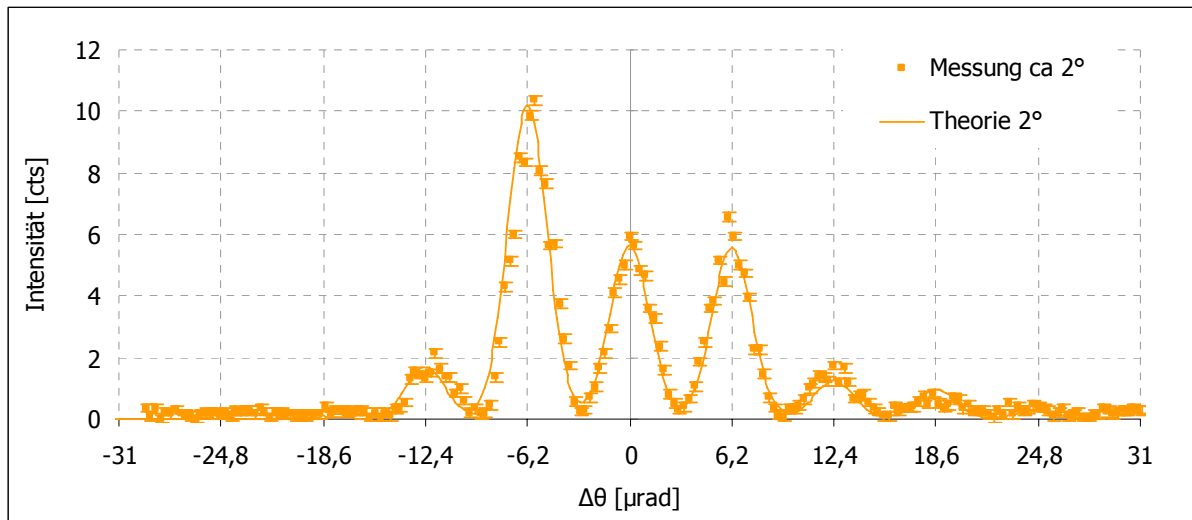


Abbildung 7.16. Messung und theoretische Messkurven circa 2°

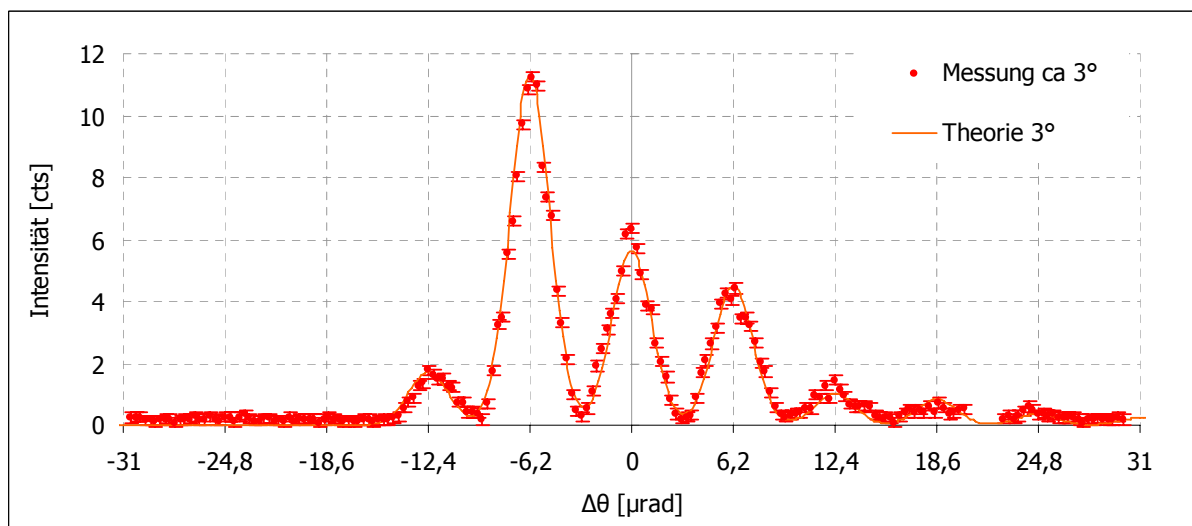


Abbildung 7.17. Messung und theoretische Messkurven circa 3°

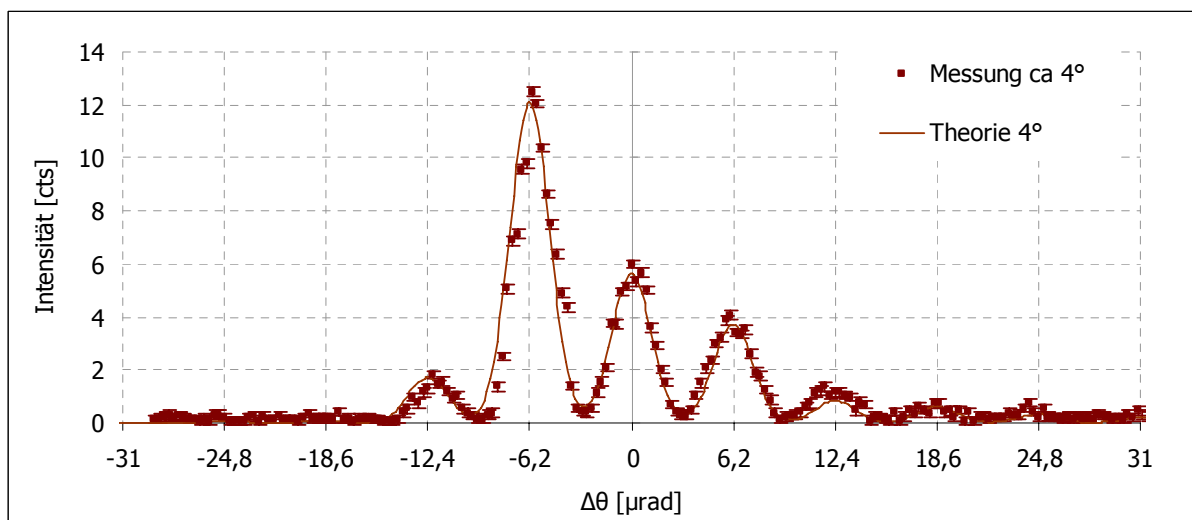


Abbildung 7.18. Messung und theoretische Messkurven circa 4°

Bereich II: $4,65^\circ \leq \varphi \leq 7,1^\circ$

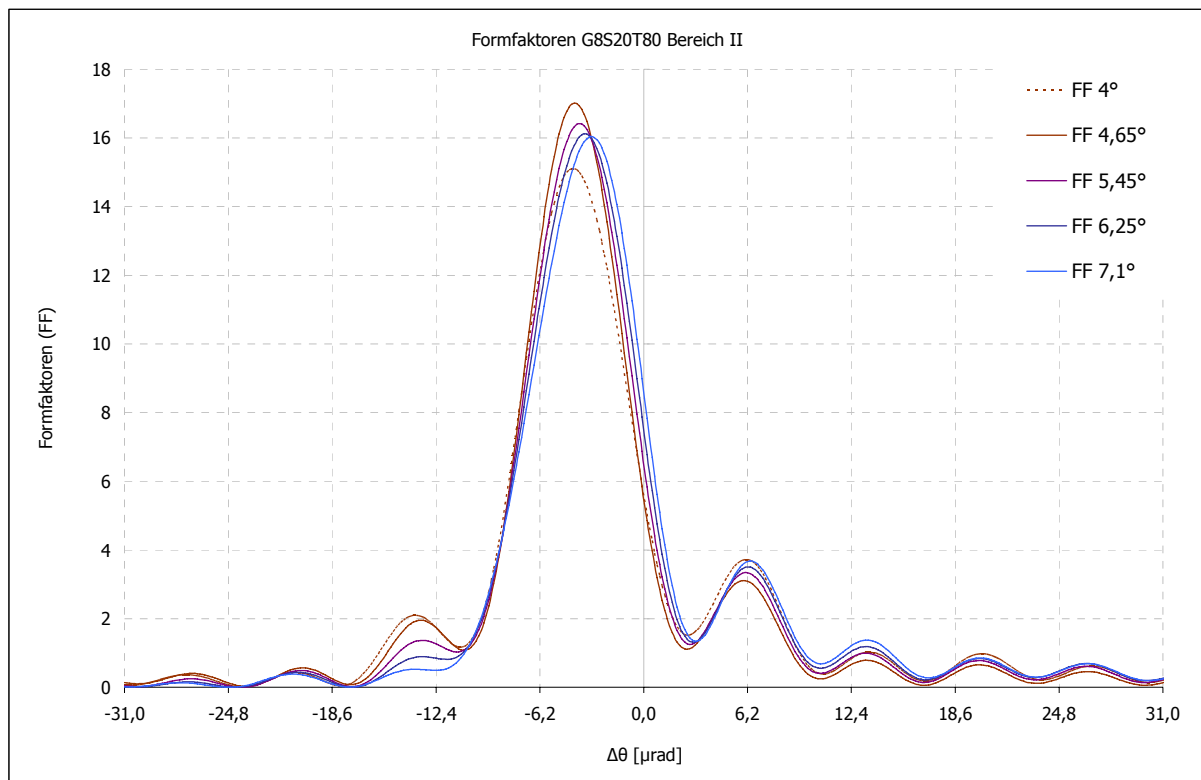


Abbildung 7.19. berechnete Formfaktoren Bereich II

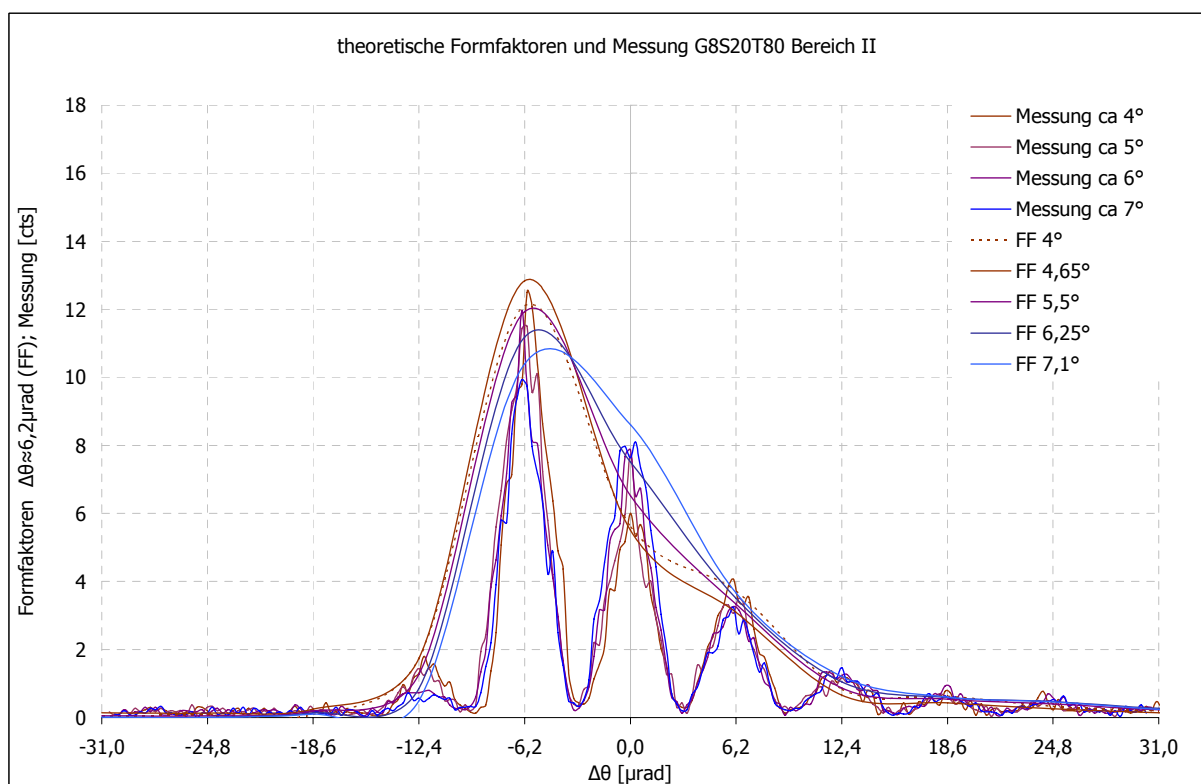


Abbildung 7.20. Messungen und berechnete Werte der Formfaktoren an den Stellen der Maximas des Strukturfaktors ($\Delta\theta \approx 6,2 \mu\text{rad}$) für Bereich II

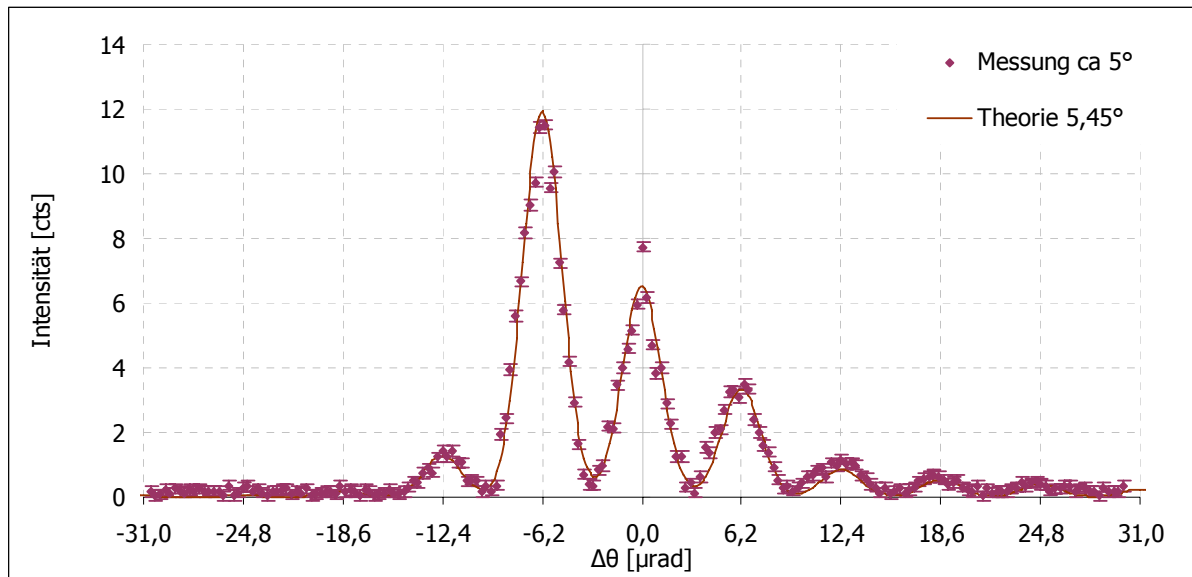


Abbildung 7.21. Messung und theoretische Messkurven circa 5°

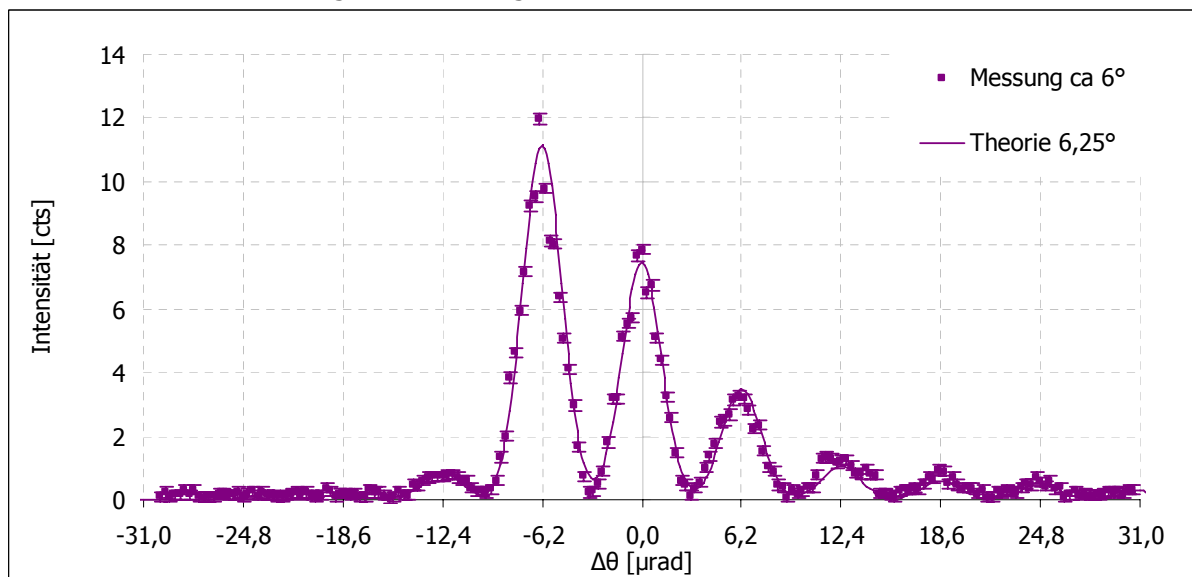


Abbildung 7.22. Messung und theoretische Messkurven circa 6°

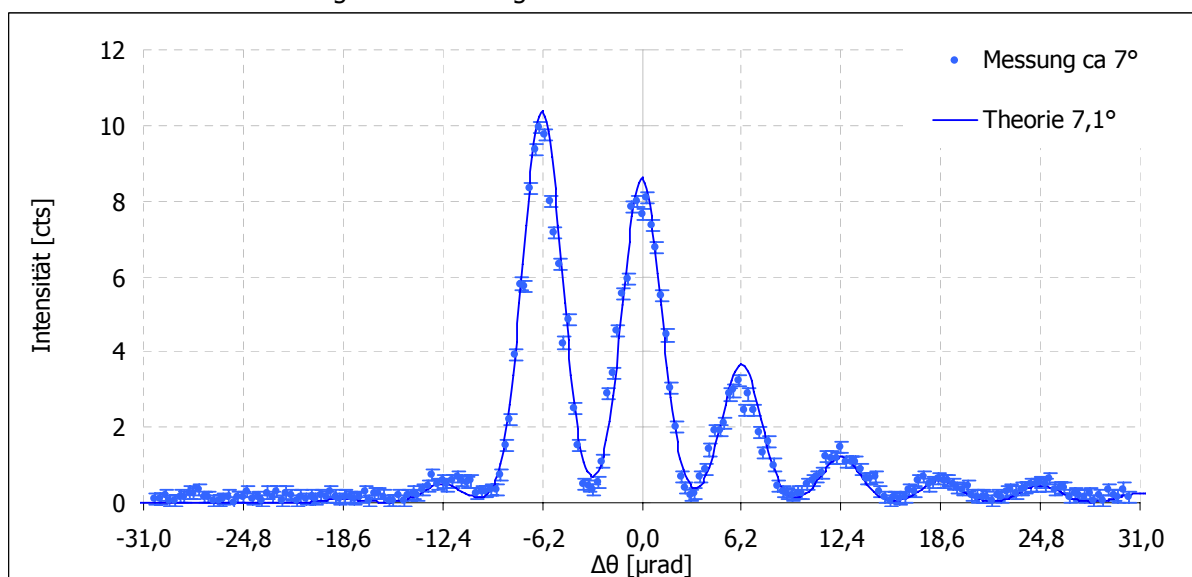


Abbildung 7.23. Messung und theoretische Messkurven circa 7°

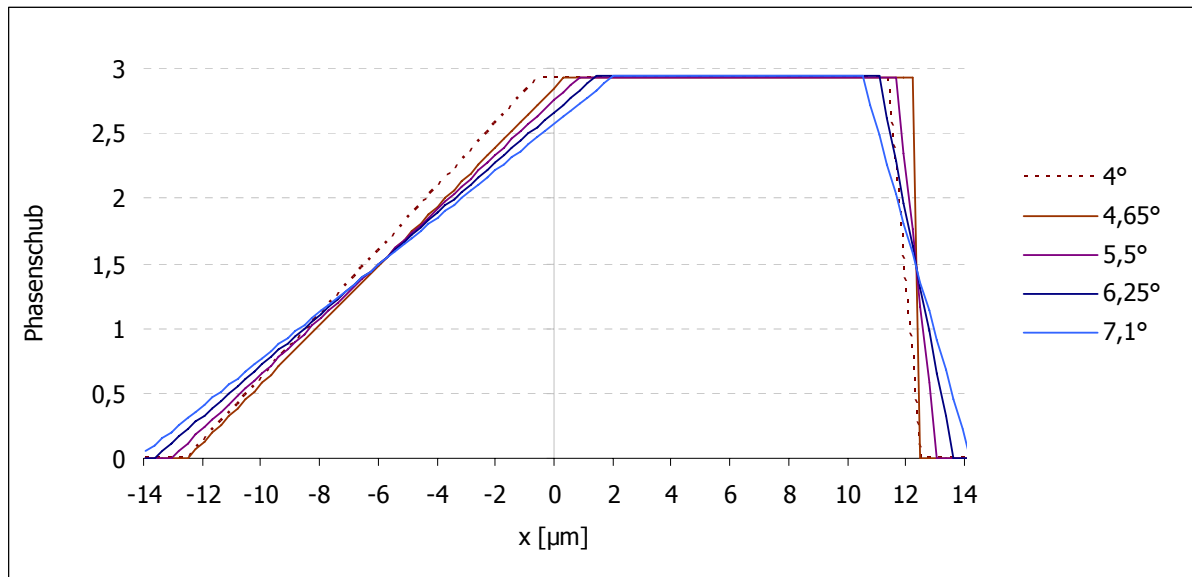


Abbildung 7.24. Phasendiagramme Bereich II

Bereich III: $7,1^\circ \leq \varphi \leq 13^\circ$

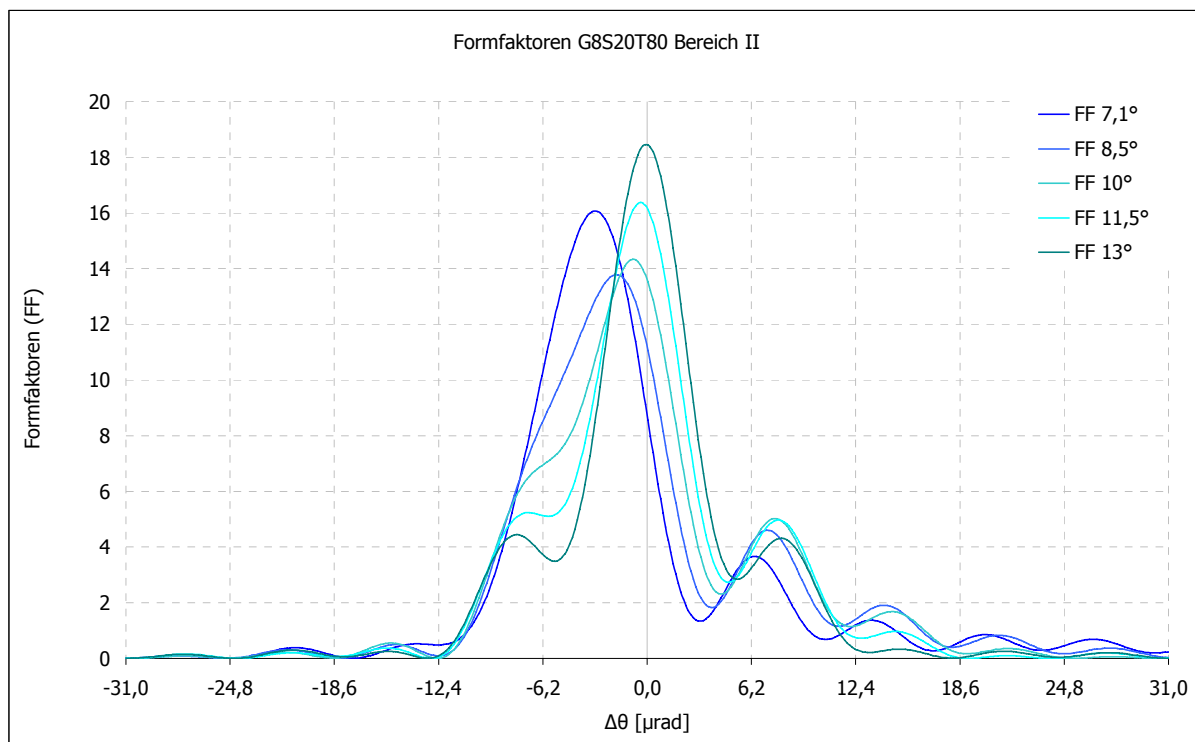


Abbildung 7.25. berechnete Formfaktoren Bereich III

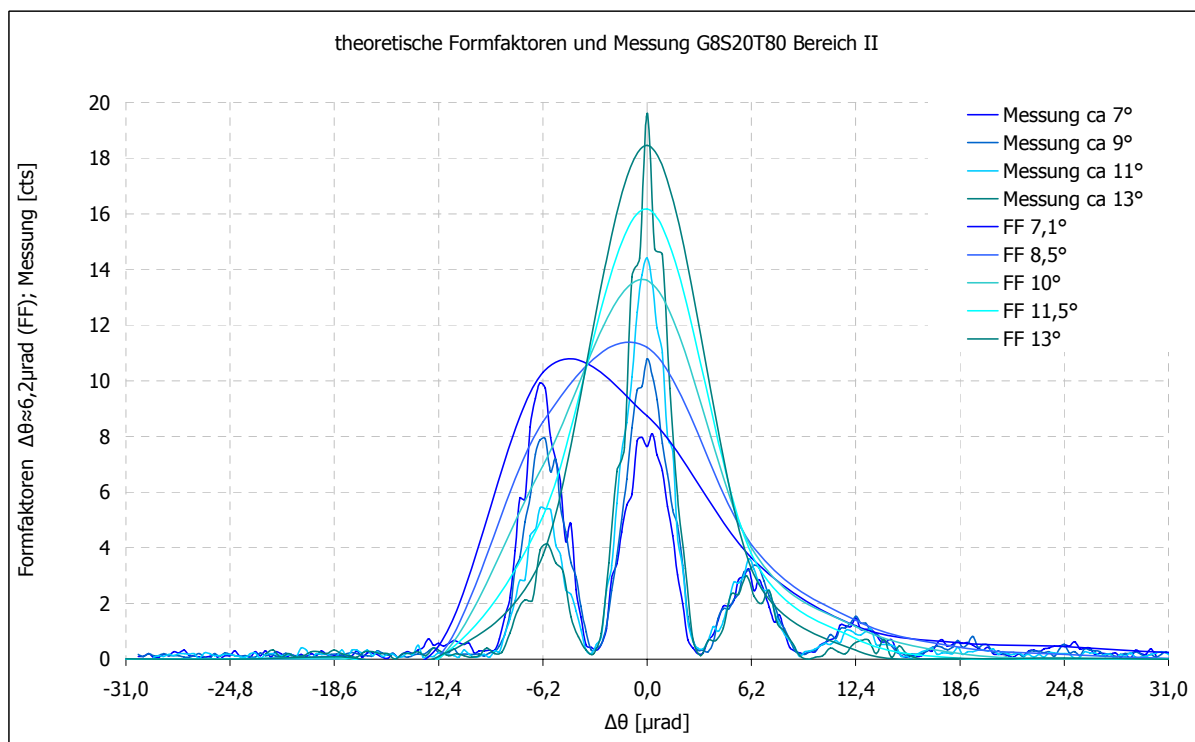


Abbildung 7.26. Messung und berechnete Werte der Formfaktoren an den Stellen der Maximas des Strukturfaktors ($\Delta\theta \approx 6,2 \mu\text{rad}$) für Bereich III

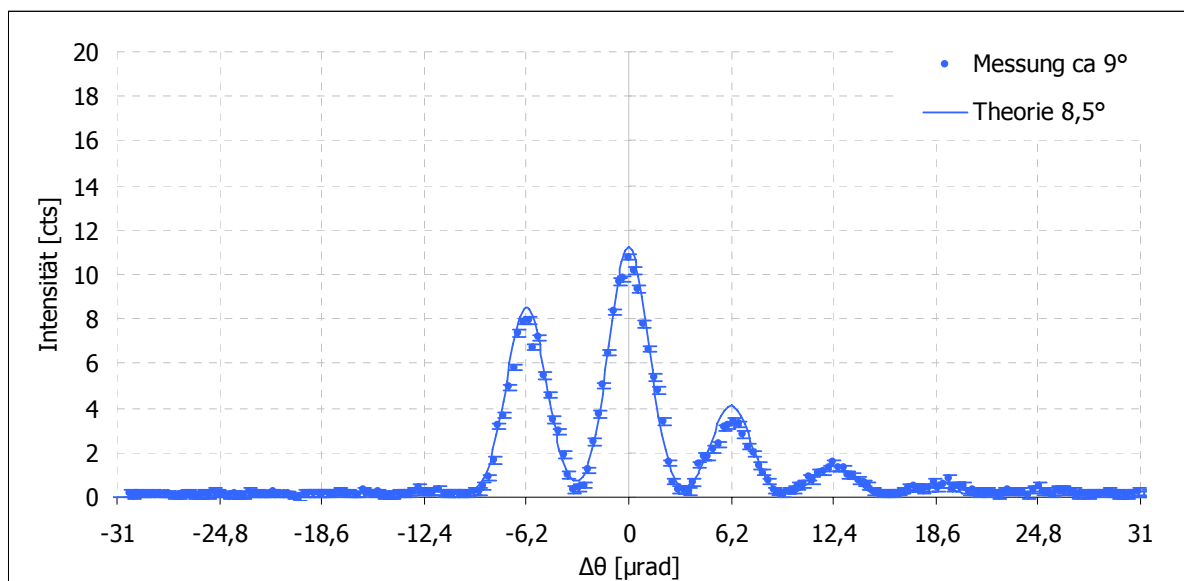


Abbildung 7.27. Messung und theoretische Messkurven circa 9°

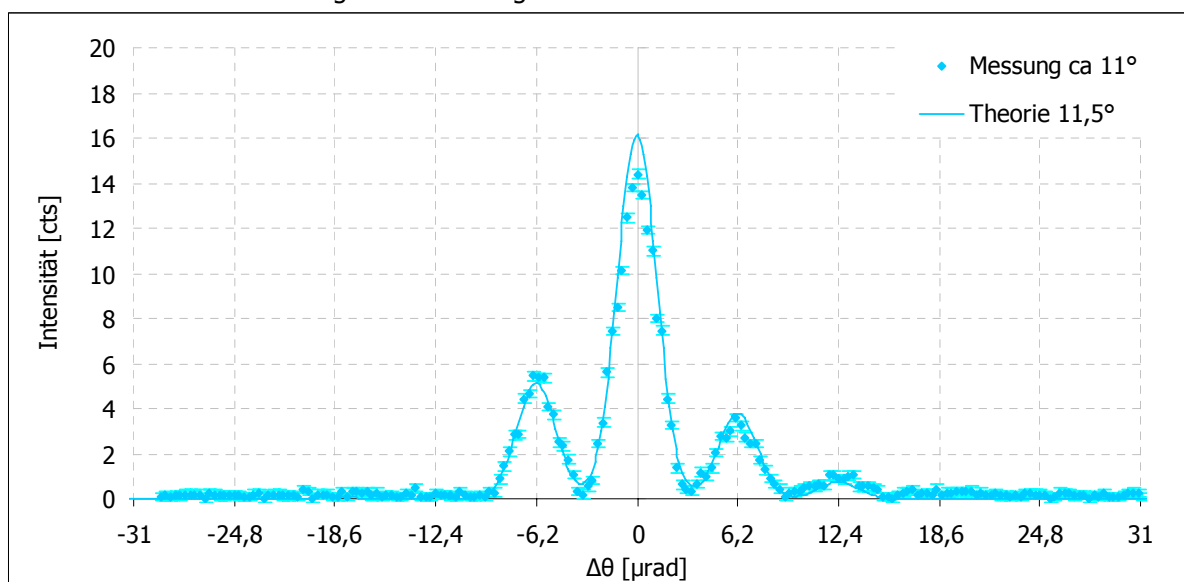


Abbildung 7.28. Messung und theoretische Messkurven circa 11°

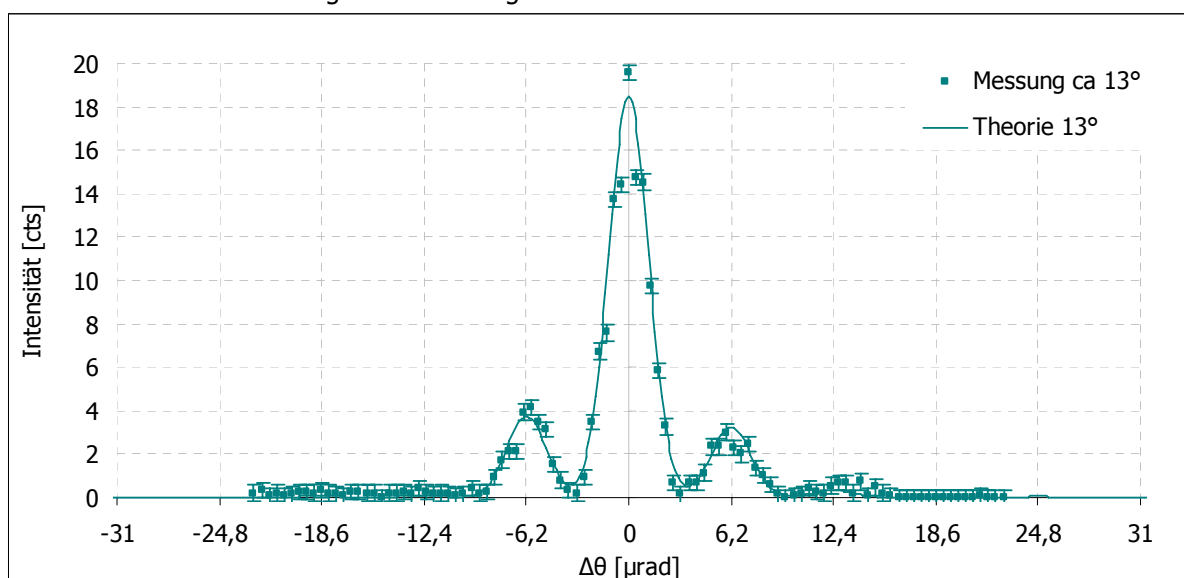


Abbildung 7.29. Messung und theoretische Messkurven circa 13°

7 Interpretation der Messergebnisse mittels Modell phasenmodulierter Punktquellen

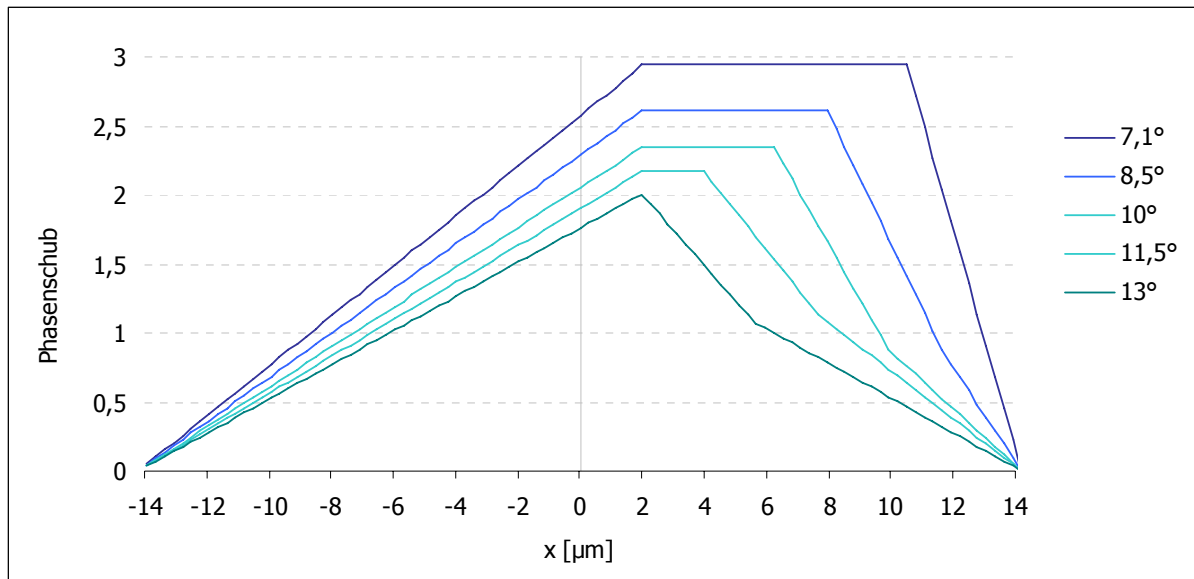


Abbildung 7.30. Phasendiagramm Bereich III

Wie man sieht, stimmen die theoretischen Messkurven und vor allem die Art der Veränderung derselben durch Drehung des Gitters sehr gut mit den Messungen überein.

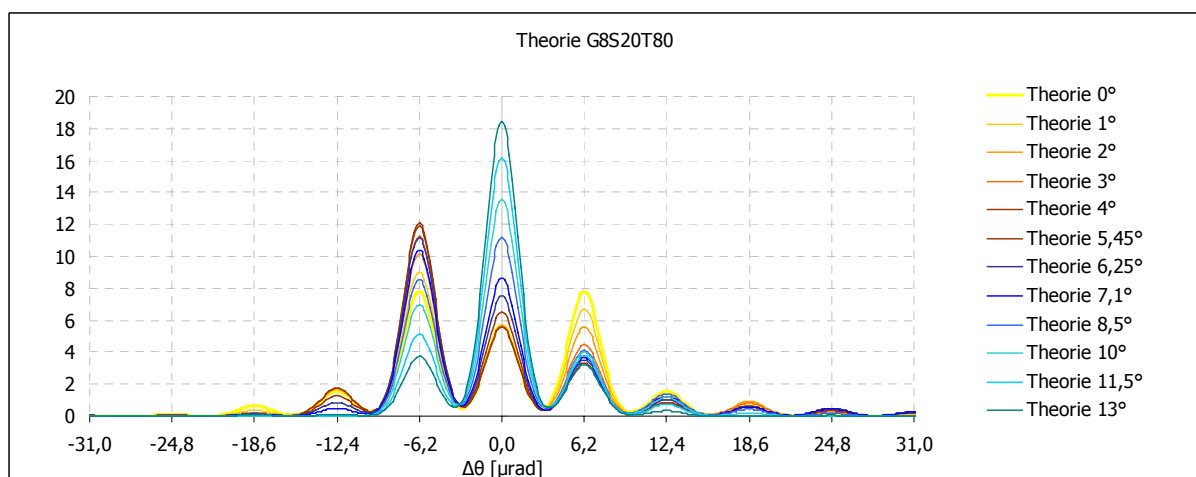


Abbildung 7.31. theoretische Messkurven G8S20T80 Bereich I-III

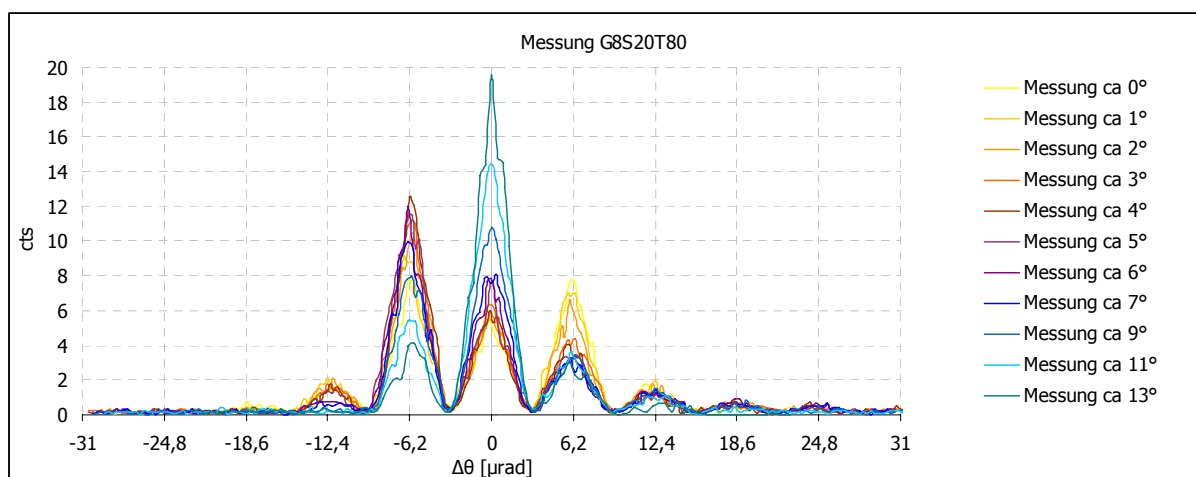


Abbildung 7.32. Messkurven G8S20T80 Bereich I-III

7 Interpretation der Messergebnisse mittels Modell phasenmodulierter Punktquellen

Die Auswertung wurde auf das Gitter mit der größten Steghöhe und somit den größten Phasenunterschieden reduziert, da dort die Änderungen im Beugungsbild bei Variation der Winkel am deutlichsten sind. Für geraden Durchgangswinkel und für eine Gitterverdrehung um circa 4° wurde das Modellgitter in der Höhe auf $40\mu\text{m}$ und $60\mu\text{m}$ reduziert, ohne die ursprünglich Form zu verändern.

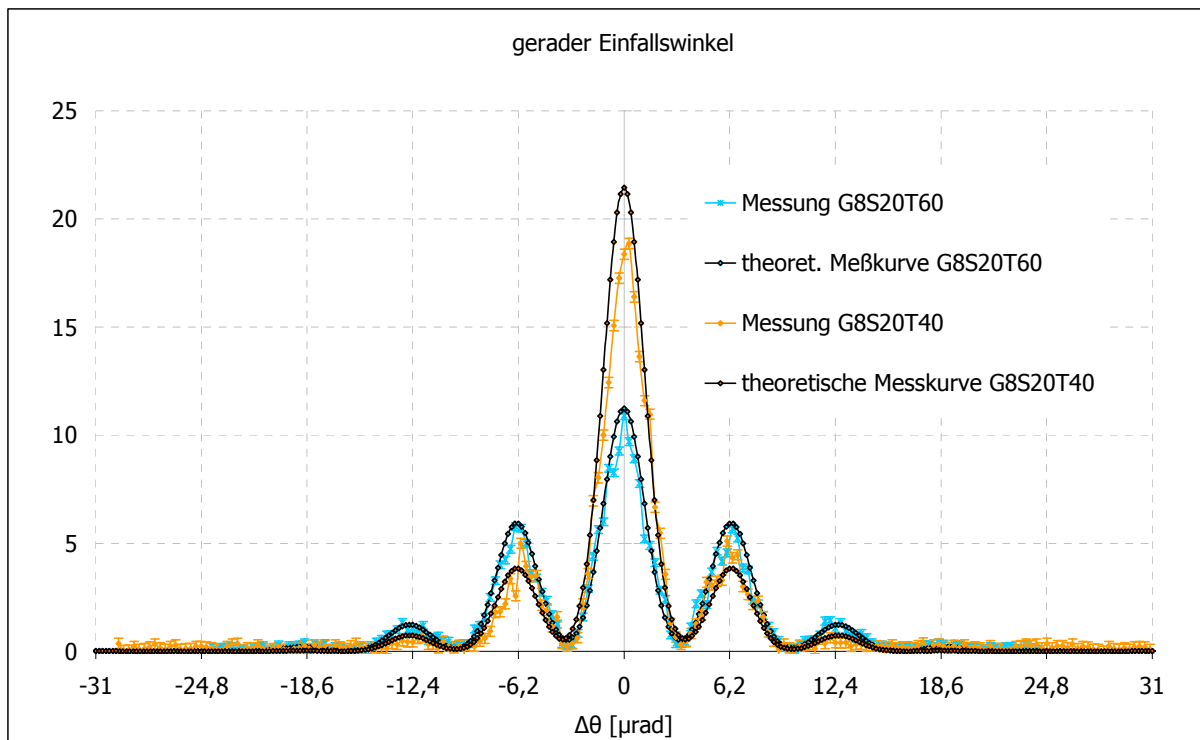


Abbildung 7.32. Messungen und theoretische Messkurven für die Gitter G8S20T40 und T60 bei geradem Gitterwinkel

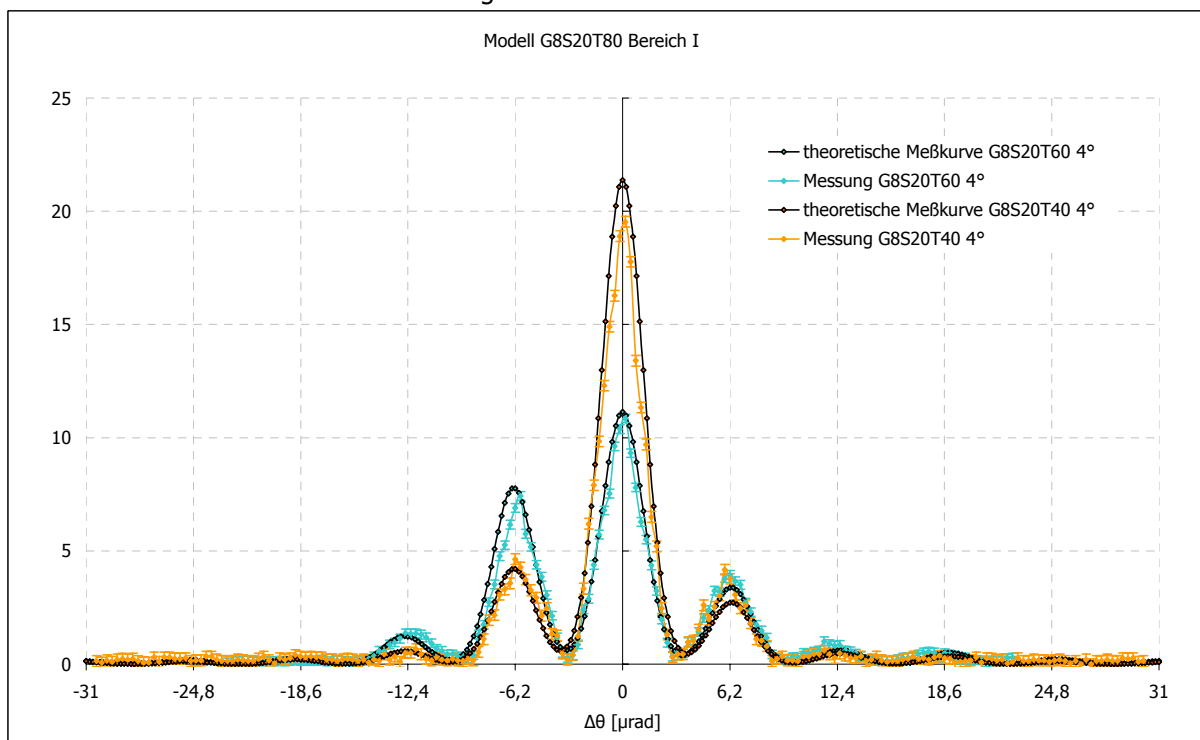


Abbildung 7.33. Messungen und theoretische Messkurven für die Gitter G8S20T40 und T60 bei einem Gitterwinkel von ca. 4°

Wie aus den Abbildungen ersichtlich wird, muss vor allem für T40 eine etwas andere Profilform angenommen werden.

7 Interpretation der Messergebnisse mittels Modell phasenmodulierter Punktquellen

Das Modell der phasenmodulierten Punktquellen liefert für niedrige Ordnungen gute Ergebnisse. Wie in Kapitel 3.4. erwähnt, steigt jedoch der Phasenunterschied, hervorgerufen durch die Streugeometrie in Einfallsrichtung, mit steigendem Winkel und muss bei größeren Winkeln berücksichtigt werden.

Wie in Abbildung 7.34. zu sehen ist, lassen sich mit dem Modell trotzdem auch für große Winkel scheinbar recht gute Ergebnisse erzielen. Der Berechnung liegt die Modell-Profilform in Abbildung 7.35. zugrunde. Die Messung des Gitters G8S12T40 erfolgte durch M. Trinker am ILL Grenoble.

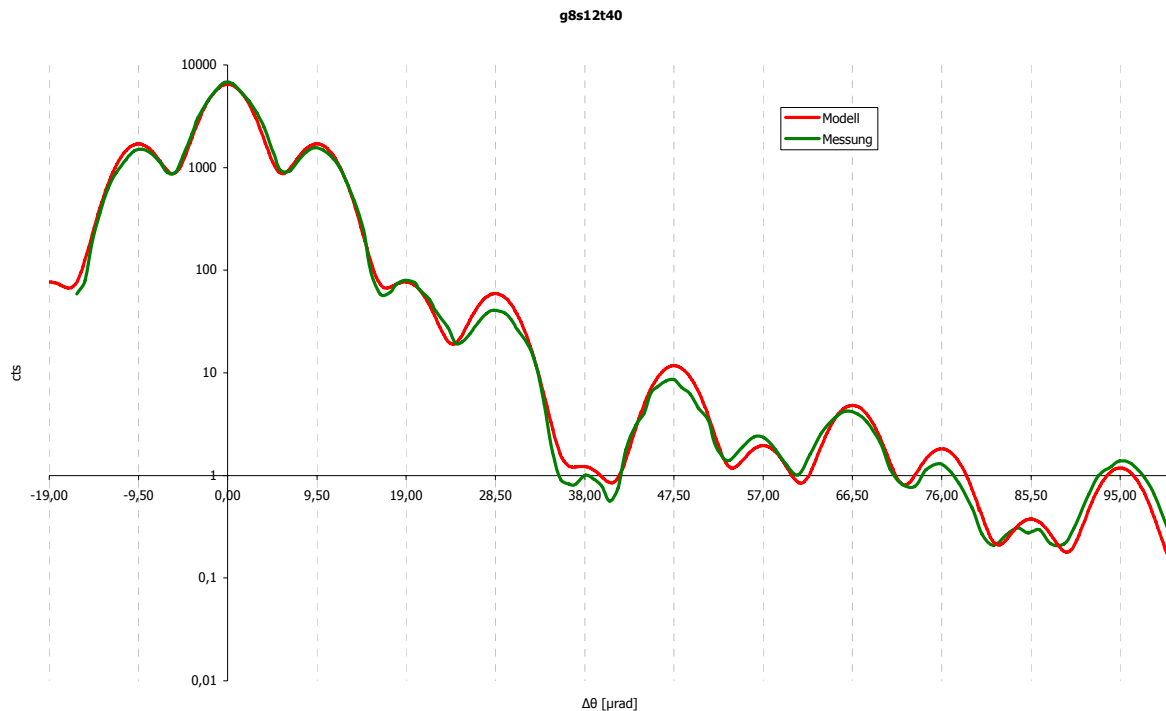


Abbildung 7.34. theoretische Ergebnisse für Modell-Profilform (7.35) und Messung G8S12T40 [Trinker 2006]

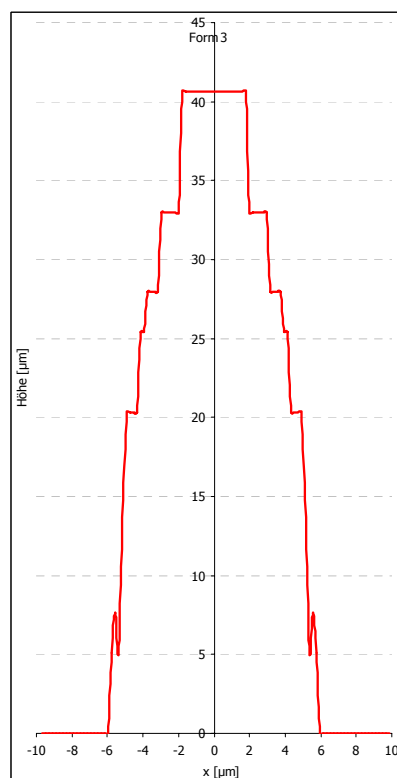


Abbildung 7.35. Modellprofilform

7 Interpretation der Messergebnisse mittels Modell phasenmodulierter Punktquellen

Diese Ergebnisse sind jedoch mit Vorsicht zu genießen, da geringe Abweichungen der Profilform in höheren Ordnungen zu eklatanten Unterschieden führen. Die Abbildung 7.36 zeigt dies anhand der Formfunktionen für verschiedene Profilformen (Abbildung 7.37). Das vorher behandelte Modell ist wieder in Rot eingezeichnet.

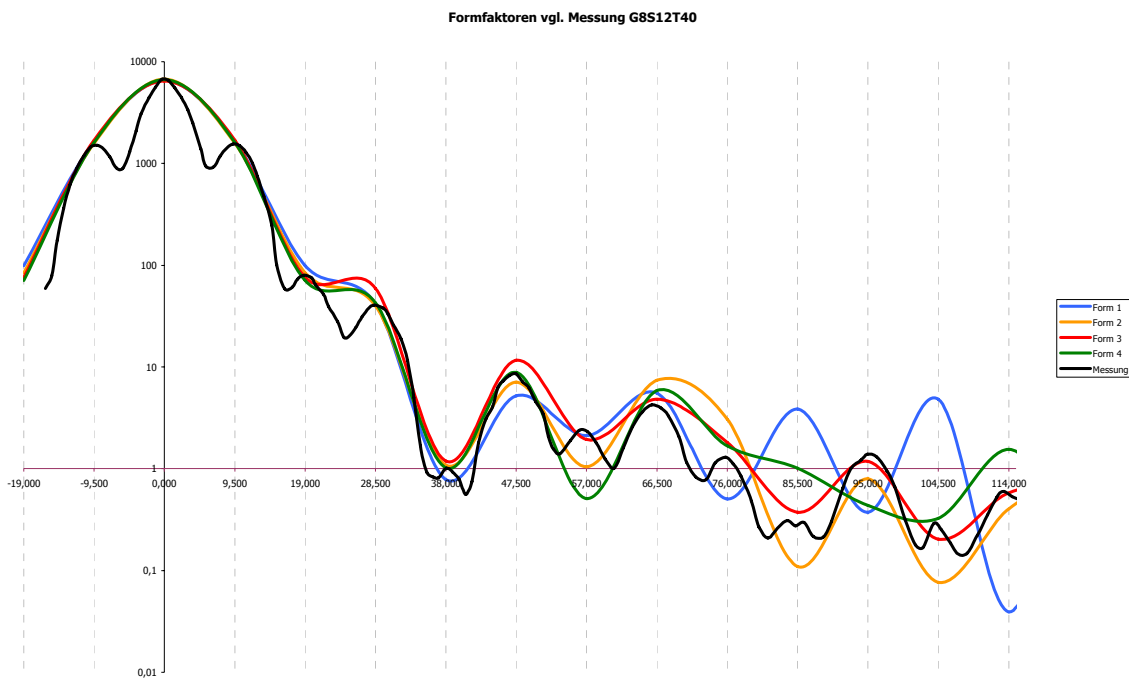


Abbildung 7.36. theoretische Formfunktionen verschiedener Modell-Profilformen (7.37) und Messung G8S12T40 [Trinker 2006]

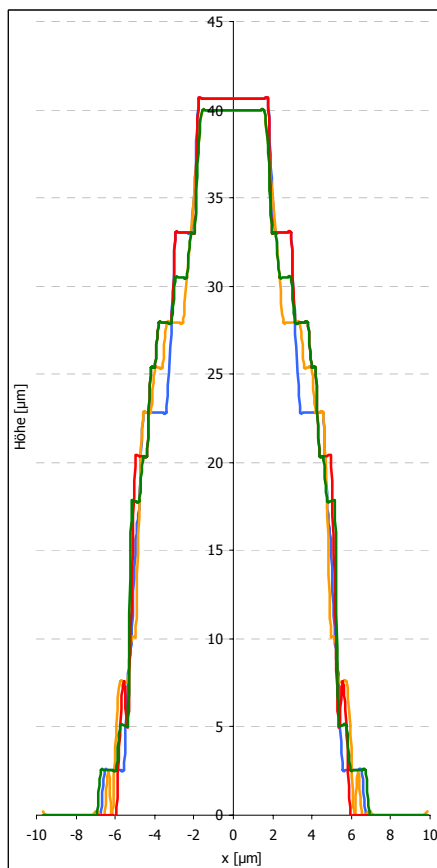


Abbildung 7.37. Modellprofilformen

Eine Auswertung der Profilform aufgrund höherer Ordnungen erscheint daher etwas willkürlich. Die niederen Ordnungen liefern jedoch eine gute Abschätzung für die Dimensionen.

8 Literatur

- [ATI 2008] Atominstitut (2008) <http://www.ati.ac.at>
- [Burgdörfer 2004] J. Burgdörfer, Skriptum „Quantentheorie“, 2. Auflage, TU-Wien (2004)
- [Chew 1950] G. F. Chew, Phys. Rev. 80 (1950) 196
- [de Broglie 1923] L. de Broglie, Nature 113 (1923) 540
- [Fermi 1936] E. Fermi, Ric. Sci. 1, (1936) 13
- [Guinier 1939] A. Guinier, Ann. Phys. (Paris) 12, 161 (1939)
- [Hecht 2005] E. Hecht, „Optik“, 4. Auflage, Oldenburg Verlag München Wien (2005)
- [Jericha 2003] E. Jericha, et al., J. Appl. Cryst. 36 (2003) 36 778-782
- [Kratky 1982] O. Kratky, O. Glatter, „Small Angle X-ray Scattering“, Academic Press (1982)
- [Kurz, Rauch 1969] H. Kurz, H. Rauch, Z. Physik 220 (1969) 419
- [Leeb 2006] H. Leeb, Skriptum „Kern- und Teilchenphysik“, TU-Wien (2006)
- [Mayer-Kuckuk 2002] T. Mayer-Kuckuk, „Kernphysik“, 7. Auflage, Teubner-Verlag (2002)
- [Rauch 1976] H. Rauch, D. Petraschek, Grundlagen für ein Neutroneninterferometer, Teil I, Dynamische Beugung, 3. Auflage, AIAU 74405b, (1976)
- [Rauch 1993] H. Rauch, Sonderdruck Bergmann Schaefer, „Lehrbuch der Experimentalphysik“, Band 3, Optik, 9. Auflage, Walter de (1993) 1099
- [Römpp 1995] Römpp Chemielexikon, Cd, Version 1, Stuttgart/New York, Georg Thieme Verlag (1995)
- [Trinker 2006] M. Trinker, Dissertation „Neutronen-Kleinwinkelstreuung an mikro- und nanostrukturierten Materialien“, TU-Wien (2006)
- [Trinker 2007] M. Trinker, et al., Nucl. Instr. And Meth. A579 (2007) 1081
- [Villa 2001] M. Villa, Dissertation „Optimiertes Kristalldesign für ein Doppelkristall-Diffraktometer“, TU-Wien (2001)
- [Wikipedia 2008] Wikipedia (2008) <http://de.wikipedia.org/wiki/Diamant-Struktur>

9 Anhang

Fitdaten der Messungen G8S20T80

G8S20 T80	Gitterwinkel [°]														Mittel- wert
	0	1	2	3	4	5	6	7	9	11	13	15	17		
Ordnung	Peakposition θ [μrad]														
-5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-30,85	
-4	31,00	31,00	29,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	-24,42	
-3	24,50	24,50	23,40	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	-18,14	
-2	18,00	18,16	18,00	18,16	18,16	18,16	18,16	18,16	18,16	18,16	18,16	18,16	18,16	-12,24	
-1	12,00	12,30	12,10	12,10	12,10	12,20	12,30	12,20	12,30	12,30	12,30	12,30	12,60	-6,23	
0	-6,10	-6,30	-6,10	-6,10	-6,10	-6,30	-6,30	-6,30	-6,10	-6,30	-6,10	-6,40	-6,50	0,00	
1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	6,10	
2	6,10	6,10	6,00	6,20	6,00	6,00	6,00	6,00	6,20	6,00	6,20	6,20	6,30	12,31	
3	12,20	12,40	12,30	12,30	12,00	12,20	12,20	12,40	12,40	12,40	12,80	12,20	12,20	18,42	
4	18,16	18,20	18,50	18,60	18,40	18,40	18,50	18,40	18,70	18,40	18,40	18,40	18,40	24,52	
5	24,50	24,50	24,50	24,40	24,50	24,30	24,50	24,50	25,00	24,50	24,50	24,50	24,50	30,88	
Ordnung	Peak-Höhe														
-5	0,00	0,10	0,30	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,00	0,15	0,17	
-4	0,30	0,20	0,30	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,00	0,15	0,20	
-3	0,50	0,40	0,30	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,00	0,15	0,23	
-2	1,60	2,00	1,80	1,70	1,70	1,40	0,80	0,70	0,30	0,20	0,20	0,20	0,35	1,00	
-1	7,80	9,00	10,30	11,20	12,40	11,50	11,80	10,00	8,00	5,40	4,00	2,20	1,05	8,05	
0	5,73	5,73	5,90	6,30	6,10	7,40	7,90	8,60	11,00	14,50	19,20	20,00	23,00	10,87	
1	7,80	7,00	6,50	4,50	4,10	3,50	3,20	3,20	3,50	3,50	3,20	2,10	1,20	4,10	
2	1,70	1,80	1,60	1,40	1,20	1,20	1,20	1,30	1,40	1,00	0,60	0,00	0,20	1,12	
3	0,50	0,60	0,70	0,70	0,60	0,60	0,80	0,60	0,60	0,30	0,40	0,00	0,15	0,50	
4	0,30	0,20	0,50	0,50	0,50	0,50	0,60	0,50	0,30	0,20	0,20	0,00	0,15	0,34	
5	0,00	0,10	0,30	0,20	0,20	0,20	0,30	0,20	0,20	0,20	0,20	0,00	0,15	0,17	
Ordnung	HWB [μrad]														
-5	2,00	2,00	2,50	3,00	2,00	2,00	3,00	2,00	3,00	3,00	2,00	2,00	4,00	2,50	
-4	3,00	3,00	2,50	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	4,00	3,04	
-3	2,50	2,50	2,50	3,00	2,00	2,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	2,73	
-2	1,70	1,70	1,70	1,70	1,60	1,70	1,90	1,90	1,90	1,90	1,90	1,90	2,50	1,85	
-1	1,70	1,70	1,60	1,70	1,60	1,70	1,60	1,60	1,60	1,60	1,60	1,70	2,00	1,67	
0	1,80	1,70	1,70	1,70	1,60	1,60	1,60	1,60	1,60	1,60	1,60	1,60	1,60	1,64	
1	1,70	1,70	1,60	1,85	1,80	1,80	1,80	1,70	1,60	1,80	1,60	2,00	1,80	1,75	
2	1,70	1,80	1,90	1,80	2,00	1,80	2,00	2,00	1,80	1,80	1,80	1,80	3,00	1,94	
3	2,50	2,00	2,00	2,40	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	4,00	2,22	
4	2,50	2,00	2,00	2,00	2,50	2,00	2,00	2,00	3,00	2,00	2,00	2,00	4,00	2,31	
5	2,00	2,00	2,50	3,00	3,00	3,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	4,00	2,42	

Fitdaten der Messungen G8S20T40

G8S20 T40	Gitterwinkel [°]											Mittel- wert
	0	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20	
Ordnung	Peakposition θ [μ rad]											
-5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-31,00
-4	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	-24,50
-3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-18,30
-2	18,16	18,16	18,16	18,16	18,75	18,16	18,16	18,16	18,50	18,50	18,50	-12,07
-1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-6,09
0	12,10	12,10	12,10	11,90	11,70	11,90	11,90	11,90	12,40	12,40	12,40	0,00
1	-6,05	-6,05	-6,05	-5,90	-6,00	-6,10	-6,10	-6,00	-6,20	-6,20	-6,35	6,15
2	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	12,23
3	6,05	6,10	6,00	6,00	6,00	6,15	6,15	6,35	6,20	6,20	6,45	18,37
4	12,10	12,10	12,10	11,90	12,10	12,10	12,10	12,20	12,60	12,60	12,60	24,50
5	18,16	18,16	18,16	18,16	18,75	18,16	18,16	18,16	18,75	18,75	18,75	31,00
Ordnung	Peak-Höhe											
-5	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	0,10
-4	18,16	18,16	18,16	18,16	18,75	18,16	18,16	18,16	18,50	18,50	18,50	0,20
-3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0,20
-2	12,10	12,10	12,10	11,90	11,70	11,90	11,90	11,90	12,40	12,40	12,40	0,20
-1	-6,05	-6,05	-6,05	-5,90	-6,00	-6,10	-6,10	-6,00	-6,20	-6,20	-6,35	0,42
0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	4,09
1	6,05	6,10	6,00	6,00	6,00	6,15	6,15	6,35	6,20	6,20	6,45	19,87
2	12,10	12,10	12,10	11,90	12,10	12,10	12,10	12,20	12,60	12,60	12,60	3,19
3	18,16	18,16	18,16	18,16	18,75	18,16	18,16	18,16	18,75	18,75	18,75	0,55
4	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	24,50	0,35
5	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	0,20
Ordnung	HWB [μ rad]											
-5	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	2,00
-4	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	3,00
-3	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	1,70
-2	0,60	0,60	0,60	0,60	0,60	0,50	0,40	0,40	0,10	0,10	0,10	1,65
-1	5,00	4,70	4,70	4,70	4,18	4,50	4,60	3,70	3,47	3,10	2,35	1,64
0	18,87	19,50	19,50	17,70	18,89	19,80	19,40	21,20	20,00	20,00	23,70	1,62
1	5,00	4,00	3,90	3,17	3,17	3,17	3,17	2,60	2,50	2,20	2,20	1,67
2	0,60	0,40	0,40	0,50	0,60	0,50	0,50	0,60	0,70	0,70	0,50	1,70
3	0,37	0,37	0,37	0,37	0,37	0,37	0,37	0,37	0,37	0,37	0,20	1,70
4	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20	2,00
5	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	2,00

Fitdaten der Messungen G8S20T60

G8S20 T60	Gitterwinkel [°]									Mittel- wert
	-15	-11	-6	-2	0	0,6	0,8	1	4	
Ordnungen	Peakposition θ [μ rad]									
-5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-31,00
-4	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	31,00	-24,10
-3	24,10	24,10	24,10	24,10	24,10	24,10	24,10	24,10	24,10	-18,28
-2	18,00	18,00	18,30	18,00	18,50	18,50	18,50	18,60	18,10	-12,28
-1	12,40	12,30	12,10	12,30	12,30	12,30	12,30	12,40	12,10	-6,13
0	-6,30	-6,20	-6,10	-6,10	-6,05	-6,05	-6,05	-6,20	-6,10	0,00
1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	6,27
2	6,30	6,20	6,20	6,30	6,30	6,30	6,30	6,30	6,20	12,20
3	12,10	12,10	12,10	12,10	12,10	12,40	12,40	12,40	12,10	18,33
4	18,10	18,10	18,10	18,10	19,00	18,50	18,50	18,50	18,10	24,20
5	24,20	24,20	24,20	24,20	24,20	24,20	24,20	24,20	24,20	31,00
Ordnungen	Peak-Höhe									
-5	0,00	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,00	0,10	0,10	0,08
-4	0,00	0,00	0,30	0,30	0,30	0,30	0,00	0,20	0,20	0,18
-3	0,00	0,00	0,60	0,45	0,40	0,40	0,00	0,30	0,20	0,26
-2	0,00	0,00	0,90	1,00	1,20	1,20	1,20	1,20	1,40	0,90
-1	2,30	2,80	3,40	4,50	5,50	5,90	6,00	5,70	7,40	4,83
0	18,20	15,10	11,60	10,20	10,50	10,60	10,70	10,80	10,80	12,06
1	2,40	4,20	6,70	6,80	5,90	5,80	5,80	5,60	4,00	5,24
2	0,00	0,00	1,10	1,30	1,40	1,20	1,20	1,30	0,90	0,93
3	0,00	0,00	0,20	0,30	0,40	0,40	0,00	0,35	0,50	0,24
4	0,00	0,00	0,20	0,25	0,30	0,30	0,00	0,20	0,35	0,18
5	0,00	0,00	0,10	0,10	0,10	0,10	0,00	0,10	0,10	0,07
Ordnungen	HWB [μ rad]									
-5	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00
-4	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00	3,00
-3	2,00	2,00	2,00	2,00	1,80	1,80	1,80	1,80	1,80	1,89
-2	1,80	1,80	1,80	1,80	1,80	1,80	1,80	1,80	1,80	1,80
-1	1,80	1,80	1,60	1,70	1,60	1,60	1,60	1,60	1,60	1,66
0	1,60	1,60	1,60	1,70	1,60	1,60	1,60	1,60	1,60	1,61
1	1,70	1,70	1,60	1,70	1,60	1,70	1,70	1,70	1,70	1,68
2	1,80	1,80	1,80	1,80	1,70	1,90	1,90	1,90	1,90	1,83
3	2,00	2,00	3,00	2,00	1,70	2,00	2,00	2,00	2,00	2,08
4	3,00	3,00	3,00	3,00	2,00	2,00	2,00	3,00	3,00	2,67
5	2,00	2,00	3,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,00	2,11