

Dissertation

Entwicklung eines Elektronenpolarimeters und Messungen der  
Spin-Asymmetrie bei Stößen von Elektronen mit Bleiatomen

Volker Hamelbeck

2010



EXPERIMENTELLE PHYSIK

ENTWICKLUNG EINES ELEKTRONENPOLARIMETERS UND MESSUNGEN DER  
SPIN-ASYMMETRIE BEI STÖSSEN VON ELEKTRONEN MIT BLEIATOMEN

Inaugural-Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften im Fachbereich Physik  
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

vorgelegt von  
Volker Hamelbeck  
aus Lippstadt

— 2010 —

Dekan:	Prof. Dr. J. P. Wessels
Erster Gutachter:	Prof. Dr. G. F. Hanne
Zweiter Gutachter:	Prof. Dr. H. Zacharias
Tag der mündlichen Prüfung(en):	27.10.2010
Tag der Promotion:	27.10.2010

*The electron does anything it likes. It just goes in any direction at any speed, forward or backward in time, however it likes, and then you add up the amplitudes and it gives you the wave-function.*

Richard P. Feynman

# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1. Theorie zur Elektron-Atom-Streuung</b>	<b>3</b>
1.1. Dichtematrixformalismus . . . . .	3
1.1.1. Polarisierte Elektronen . . . . .	4
1.1.2. Dichtematrix von Atomen . . . . .	4
1.1.3. Streuamplituden und Streuzustand . . . . .	5
1.1.4. Reduzierte Dichtematrix . . . . .	6
1.2. Generalisierte <i>STU</i> -Parameter . . . . .	8
1.3. Die Spin-Asymmetriefunktion . . . . .	11
1.3.1. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung . . . . .	11
1.3.2. Der Feinstruktur-Effekt . . . . .	13
1.3.3. Einfluss von Resonanzen . . . . .	13
1.4. Atomares Blei als Streu-Target . . . . .	15
1.5. Modelle zur theoretischen Behandlung elastischer Streuprozesse . . . . .	17
1.5.1. Methode mit relativistischem Modell-Potenzial . . . . .	17
1.5.2. Die <i>R</i> -Matrix-Methode . . . . .	18
<b>2. Kompaktes Elektronenpolarimeter</b>	<b>21</b>
2.1. Elektronenpolarimetrie . . . . .	21
2.1.1. Reale Anordnung . . . . .	22
2.1.2. Polarimeterkenngröße Effizienz . . . . .	24
2.2. Designstudie . . . . .	25
2.2.1. Simulation der Bauform . . . . .	25
2.2.2. Konstruktion des Prototypen . . . . .	30
2.3. Elektrische Versorgung . . . . .	33
2.4. Charakterisierung des Polarimeters . . . . .	34
2.5. Spinpolarisation von Photoelektronen aus Gold . . . . .	38
2.6. Fazit . . . . .	41
<b>3. Das Streuexperiment</b>	<b>43</b>
3.1. Die Quelle spinpolarisierter Elektronen . . . . .	44
3.2. Der Streuzipient mit Elektronenpolarimeter . . . . .	45
3.3. Der Metallverdampfungssofen . . . . .	46

3.4. Das Datenerfassungssystem . . . . .	47
<b>4. Durchführung der Messungen</b>	<b>50</b>
4.1. Einrichtung des Experiments . . . . .	50
4.1.1. Winkelnullpunkt . . . . .	50
4.1.2. Primärpolarisation . . . . .	51
4.1.3. Kalibrierung der Primärenergie . . . . .	53
4.1.4. Elektronen-Energieverlustspektrum . . . . .	55
4.2. Messgrößen . . . . .	57
4.2.1. Relativer differentieller Wirkungsquerschnitt . . . . .	57
4.2.2. Spin-Asymmetriefunktion . . . . .	57
<b>5. Messergebnisse</b>	<b>60</b>
5.1. Relativer differentieller Wirkungsquerschnitt . . . . .	60
5.2. Winkelverteilung der Spin-Asymmetriefunktion von Blei im Bereich 11 – 14 eV	61
5.3. Resonanzstrukturen der Spin-Asymmetriefunktion von Blei für Primärenergien bis 15 eV . . . . .	66
<b>6. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>70</b>
<b>Summary</b>	<b>73</b>
<b>Anhang</b>	<b>76</b>
A. Das Streuexperiment . . . . .	76
A.1. Koordinatensystem–Drehung . . . . .	76
A.2. Notation des Grundzustands bei schweren Atomen . . . . .	77
A.3. Tabellen zu Blei . . . . .	77
A.4. Eigenschaften des Tiegelofens . . . . .	79
A.5. Europium als Streutarget . . . . .	79
B. Kompakte Mottkammer . . . . .	83
B.1. Schaltpläne . . . . .	84
B.2. Zur Kalibrierung des Elektronenpolarimeters . . . . .	86
C. Tabellierte Messergebnisse . . . . .	87
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>93</b>

## Abbildungsverzeichnis

1.1.	Schema des Streuprozesses im Stoßsystem. . . . .	3
1.2.	Bedeutung der $STU$ -Parameter. . . . .	10
1.3.	Skizze zur Spin-Bahn-Wechselwirkung. . . . .	12
1.4.	Stoßinduzierte Orientierung im semiklassischen Bild. . . . .	13
1.5.	Schemata der direkten und resonanten Streuung . . . . .	14
1.6.	Vereinfachtes Termschema für Blei . . . . .	16
2.1.	Die effektive SHERMAN-Funktion $S_{\text{eff}}$ von Gold. . . . .	22
2.2.	Prinzipieller Aufbau eines Mott-Detektors. . . . .	23
2.3.	Grundlegende Geometrie des Polarimeters: Außen- und Innenelektrode als Segmente aus Kugelschalen mit Hilfeelektroden. . . . .	26
2.4.	Simulation einer zylindersymmetrischen Konfiguration mit zwei ringförmigen Hilfeelektroden. . . . .	27
2.5.	Entwicklungsschritte zur Festlegung einer Hilfeelektrode auf Massepotenzial. . . . .	28
2.6.	Simulation der finalen Bauform. . . . .	29
2.7.	Zeichnung eines geschlitzten $90^\circ$ -Umlenkers ohne Ein- und Austrittsblenden nach JOST (1979). . . . .	29
2.8.	Simulation von Elektronenbahnen durch die Anordnung aus $90^\circ$ -Umlenker, Transportoptik und Polarimeter: Primärenergie 20 eV. . . . .	30
2.9.	3-dimensionale Ausschnittsansicht des Elektronenpolarimeters. . . . .	31
2.10.	Zeichnungsansicht der elektrostatischen Transportoptik und des $90^\circ$ -Umlenkers mit Teilausschnitt. . . . .	32
2.11.	Blockdiagramm der elektrischen Versorgung des Elektronenpolarimeters. . . . .	33
2.12.	Fotografie des Trenntransformators ohne Vergussmasse. . . . .	33
2.14.	Bild des Fokus auf dem Leuchtschirm. . . . .	35
2.13.	Fotografie des montierten Elektronenpolarimeters . . . . .	35
2.15.	Häufigkeitsverteilung der Asymmetrie $A_0$ für 50 keV Streuenergie. . . . .	36
2.16.	Abhängigkeit der Asymmetrie $\bar{A}_0$ von der Beschleunigungsspannung $U$ . . . . .	37
2.17.	Schema des Oberflächenexperiments. . . . .	39
2.18.	Häufigkeitsverteilungen der Asymmetriewerte für Au(111) bei Beschuss mit zirkular und linear polarisiertem Licht. . . . .	40
3.1.	Skizze des experimentellen Aufbaus. . . . .	43
3.2.	Aktivierung des GaAs-Kristalls mit Weißlicht. . . . .	44



---

3.3. Schnittansicht des Tiegelofens . . . . .	46
3.4. Blockdiagramm des Datenerfassungssystems. . . . .	48
4.1. Bestimmung des Winkelnullpunkts. . . . .	51
4.2. Histogramm der Primärpolarisation $P_y$ bei kaltem Ofen und bei Betrieb. . . . .	52
4.3. Messprinzip der Energiekalibrierung. . . . .	53
4.4. Kalibrierung der Primärenergie $E_0$ an Blei. . . . .	54
4.5. Histogramm des Kristallpotenzials $U_0$ bei Rechnersteuerung: $E_0 = 7$ eV. . . . .	55
4.6. Elektronen-Energieverlustspektrum von Blei bei $E_0 = 15$ eV Primärenergie bis $\Delta E = 6,5$ eV . . . . .	56
4.7. Schema eines Messzyklus zur Spin-Asymmetriefunktion $S_A$ . . . . .	58
5.1. Relativer DCS von atomarem Blei bei 15 eV Streuenergie in logarithmischer Darstellung. Die Fehlerbalken sind in der Darstellung nicht aufgelöst. . . . .	60
5.2. Spin-Asymmetriefunktion $S_A$ für elastische Streuung an Blei im Vergleich zu RMP- und GKS-Rechnungen. . . . .	62
5.3. Spin-Asymmetriefunktion $S_A$ für elastische Streuung an Blei im Vergleich zu R-Matrix-Rechnungen. . . . .	64
5.4. Energieabhängigkeit der Spin-Asymmetriefunktion $S_A$ bei elastischer Streuung an Blei unter dem Streuwinkel $\vartheta = 65^\circ$ und $\vartheta = 130^\circ$ . . . . .	67
A.1. Elektrische Heiz-Charakteristik des Tiegelofens. . . . .	80
A.2. Vereinfachtes Grotrian-Diagramm von Europium . . . . .	81
A.3. Energiekalibrierung an Europium. . . . .	82
A.4. Spin-Asymmetriefunktion $S_A$ von Eu bei $E_0 = 55$ eV. . . . .	83
B.5. Schaltplan der VV/SCA-Platine. . . . .	84
B.6. Schaltplan der Zählerkarte. . . . .	85
B.7. Fotografie des 19"-Einschubs. . . . .	86
B.8. Häufigkeitsverteilungen der Asymmetriewerte bei verschiedenen Streuenergien. . . . .	87

## Tabellenverzeichnis

2.1. Berechnete effektive SHERMAN-Funktion für die verwendete Folie in der Detektoranordnung. . . . .	37
2.2. Parameter der Anpassungen an eine GAUSS-Normalverteilung in Abb. 2.18. . .	40
4.1. Auswertung der Primärpolarisationsbestimmung in Abb. 4.2. . . . .	53
5.1. Positionen der Resonanzstrukturen für $\vartheta = 65^\circ$ und $\vartheta = 130^\circ$ . . . . .	68
A.1. Isotopie von natürlichem Blei (RALCHENKO <i>et al.</i> , 2008). . . . .	77
A.2. Energieniveaus und Terme des neutralen Pb-Atoms (RALCHENKO <i>et al.</i> , 2008; WOOD und ANDREW, 1968; MOORE, 1958). . . . .	78
A.3. Ausgewählte Autoionisationszustände von neutralem Blei nach PEJCEV <i>et al.</i> (1981); ASSOUS (1972), sortiert nach Konfiguration. . . . .	79
C.4. $S_A$ -Parameter von 11 bis 14 eV . . . . .	88
C.5. Messung der Energieabhängigkeit der Spin-Asymmetriefunktion von 6,7 eV bis 15,5 eV. . . . .	92

## Einleitung

Streuexperimente sind eine etablierte Technik, physikalische Mechanismen und die Struktur von Atomen zu verstehen. Die Untersuchung von Spin-Effekten bei der Streuung von Elektronen an Atomen eröffnet die Möglichkeit, die Zusammenhänge detailliert zu studieren und theoretische Berechnungen eingehend zu überprüfen (KESSLER, 1985; ANDERSEN und BARTSCHAT, 2001). Insbesondere an schweren Atome mit nicht abgeschlossenen Valenzschalen wie Blei können simultan auftretende Spin-Effekte wie Spin-Bahn-Wechselwirkung und Elektronenaustausch genauer untersucht werden. Die Streuung spin-polarisierter Elektronen an solchen komplexen Atomen ist insoweit noch nicht vollständig verstanden, als es zum Zeitpunkt der Entstehung dieser Arbeit zwischen Messungen und Modellrechnungen Diskrepanzen gibt. Die Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  ist einer von acht Parametern, die in einer theoretischen Behandlung des Stoßes von spinpolarisierten Elektronen mit unpolarisierten und unausgerichteten Atomen eingeführt werden, um Spin-Effekte zu quantifizieren. Sie ist ein Maß für die Spinabhängigkeit des Wirkungsquerschnitts. Darauf basierend ist eine Technik zur Bestimmung der Spinpolarisation von Elektronenstrahlen etabliert worden, die MOTT-Elektronenpolarimetrie. In vielen Bereichen der experimentellen Physik wenden sich die Fragestellungen der Elektronen-Spinabhängigkeit zu. Aufgrund der räumlichen Begrenzung vieler Laboratorien ist es notwendig, effiziente Detektoraufbauten mit kleinen Abmessungen zu verwenden. In dieser Arbeit wird auch die Entwicklung eines kompakten Elektronenpolarimeters vorgestellt. Beispielhaft wird in einem Oberflächenexperiment die Spinpolarisation von Photoelektronen aus einem Gold-Einkristrall bestimmt.

Ferner wird die Spin-Asymmetriefunktion bei der elastischen Streuung an atomarem Blei untersucht. Der vorhandene Datensatz an experimentellen Ergebnissen ist umfangreich. Spineffekte bei der Elektron-Atom-Streuung an natürlichem Blei und anderen Metallatomen wurden von KAUSSEN *et al.* (1987) für ausgewählte Energien von 6 bis 180 eV behandelt. Bei GEESMANN *et al.* (1991) und DÜMMLER *et al.* (1992) sind unter anderem winkeldifferenzielle Untersuchungen der Spin-Asymmetriefunktion für die elastische und inelastische Streuung an Blei für ausgewählte Energien im Bereich von 2,5 bis 14 eV bzw. von 0,3 bis 2,0 eV präsentiert worden. Darin zeigte sich eine starke Abhängigkeit von der Primärenergie der einfallenden Elektronen. Deutlich wird sie an den unterschiedlichen Verläufen der Spin-Asymmetriefunktion für 11 und 14 eV im Winkelbereich von 30° bis 125°. Die entsprechenden theoretischen Modellrechnungen zeigten im Falle eines so genannten  $R$ -Matrix-Ansatzes keine zufrieden stellende Übereinstimmung. Im Falle eines generalisierten KOHN-SHAM-Modells von HABERLAND und FRITSCHKE (1987) sind bei 14 eV zwar kaum Abweichungen vom Experiment festzustel-

len, jedoch bei 11 eV. Ziel dieser Arbeit ist es, durch experimentelle Untersuchung der Spin-Asymmetriefunktion für die elastische Elektron-Atom-Streuung zwischen 11 und 14 eV einen Satz von Daten zu gewinnen, der dazu genutzt werden kann, theoretische Modellrechnungen zu überprüfen. Eine aktuell diskutierte Methode ist eine relativistische Erweiterung der *R*-Matrix-Rechnungen mit einer Basis aus sogenannten *B-Splines*, aus der physikalische Information über das Target-Atom erhalten werden können. Im Zuge dieser Behandlung wird die These aufgestellt, dass Elektronenkonfigurationen von Autoionisationszuständen die spinabhängige Streuung beeinflussen. Dies wird in einer Messung von Resonanzstrukturen im Energiebereich von 6,5 eV bis 15,5 eV bei elastischer Streuung überprüft. Eine ähnliche Messung ist von BARTSCHAT *et al.* (1981) an Quecksilber für elastische und inelastische Streuung durchgeführt worden, jedoch wurde bisher keine Modellrechnung hierfür präsentiert, so dass eine weitere Auswertung ausgeblieben ist. In dieser Arbeit wird diese Analyseverfahren anhand der elastischen Elektronenstreuung an Blei erprobt.

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt gegliedert: Im ersten Kapitel werden die theoretischen Grundlagen der spinabhängigen Elektronenstreuung an Atomen behandelt, insbesondere die Spin-Asymmetriefunktion und der Einfluss von Resonanzen. Anschließend wird in Kapitel 2 die Entwicklung eines kompakten Elektronenpolarimeters vorgestellt. Die Apparatur des Streuexperiments und die Durchführung der Messungen werden in den Kapiteln 3 und 4 beschrieben. Die Ergebnisse der Untersuchungen zur Spin-Asymmetriefunktion werden in Kapitel 5 dargestellt und mit Modellrechnungen verglichen. Abschließend wird die Arbeit zusammengefasst und ein Ausblick auf weitere Untersuchungen gegeben.

## 1. Theorie zur Elektron-Atom-Streuung

Gegenstand dieser Arbeit sind Spin-Effekte, die bei der Streuung von Elektronen an unpolarisierten und unausgerichteten Atomen auftreten. Um die Effekte bei der Streuung beschreiben zu können, werden die Spinpolarisationen von ein- ( $\vec{P}$ ) und auslaufenden ( $\vec{P}'$ ) Elektronenstrahlen betrachtet. Abbildung 1.1 veranschaulicht den Stoßprozess. Im dargestellten Experiment

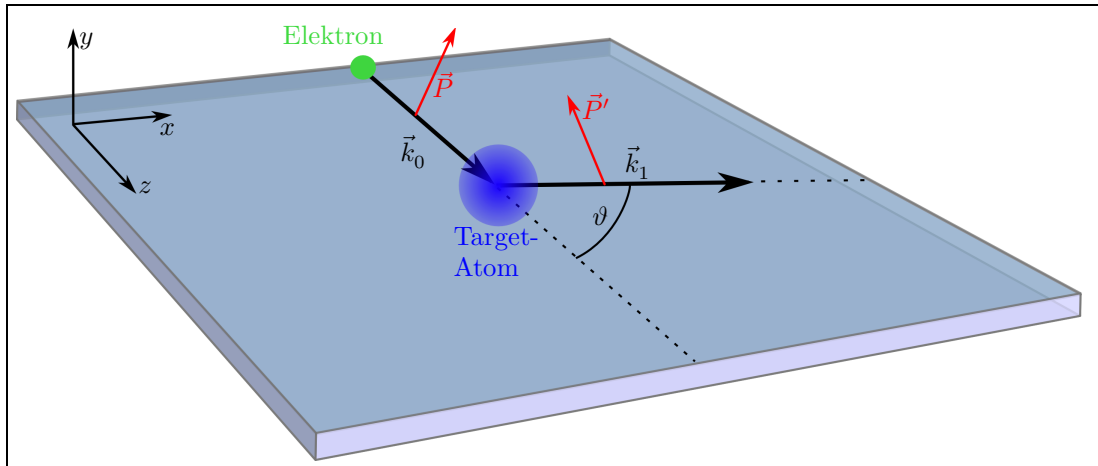


Abb. 1.1.: Schema des Streuprozesses im Stoßsystem (*collision frame*).

trifft ein Elektronenstrahl mit der Spinpolarisation  $\vec{P}$  und dem Wellenvektor  $\vec{k}_0$  auf den Stoßpartner im Streuzentrum, der im Folgenden als Target-Atom bezeichnet wird. Die gestreuten Elektronen werden unter dem Streuwinkel  $\vartheta$  in Richtung von  $\vec{k}_1$  emittiert und weisen im Allgemeinen eine von  $\vec{P}$  verschiedene Spinpolarisation  $\vec{P}'$  auf. Die Streuebene wird von den Wellenvektoren  $\vec{k}_0$  und  $\vec{k}_1$  aufgespannt. Zur theoretischen Beschreibung und experimentellen Analyse wird die  $z$ -Achse des karthesischen Koordinatensystems in Richtung von  $\vec{k}_0$  gewählt. Diese Konvention wird Stoßsystem (*collision frame*) genannt, in dem ein in  $y$ -Richtung polarisierter Elektronenstrahl einen zur Streuebene senkrecht stehenden Polarisationsvektor hat. Im Folgenden wird dieser Streuprozess im Dichtematrixformalismus beschrieben und parametrisiert. Anschließend wird seine Bedeutung für das Experiment mit dem Target-Atom Blei erläutert. Dabei wird insbesondere auf den Parameter Spin-Asymmetriefunktion eingegangen. Abschließend werden zwei Ansätze zur numerischen Behandlung der spinabhängigen Streuung werden vorgestellt, die später zur Diskussion der Messergebnisse herangezogen werden.

### 1.1. Dichtematrixformalismus

Zur Beschreibung der Streuung von Elektronen an Atomen ist der Dichtematrix-Formalismus ein bewährtes Werkzeug. In dem verwendeten Aufbau erfolgt keine vollständige Polarisation

oder Ausrichtung der Stoßpartner. Sie liegen somit nicht in einem reinen, sondern in einem gemischten Zustand vor. Die Information über den Anfangszustand ist daher unvollständig. Dies erfordert die Verwendung des statistischen Operators  $\rho$ , der durch eine Dichtematrix repräsentiert wird.

### 1.1.1. Polarisierte Elektronen

Zunächst wird ein Strahl von Elektronen betrachtet, deren Spins beliebig orientiert sind. Diese lassen sich als inkohärente Mischung von zwei reinen Spinzuständen  $|\chi_k\rangle$  ( $k = a, b$ ) ausdrücken, die mit einer entsprechenden Wahrscheinlichkeit  $w_k = N_k/N$  besetzt werden. Die Dichtematrix  $\rho^e = w_a|\chi_a\rangle\langle\chi_a| + w_b|\chi_b\rangle\langle\chi_b|$  ist eine spezielle Darstellung des statistischen Operators dieses zusammengesetzten Strahls (BLUM, 1996). Die Berechnung des Erwartungswerts

$$\langle\sigma_i\rangle = \frac{\text{Spur}(\rho^e\sigma_i)}{\text{Spur}(\rho^e)} = w_a\langle\chi_a|\sigma_i|\chi_a\rangle + w_b\langle\chi_b|\sigma_i|\chi_b\rangle = P_i \quad (i = x, y, z) \quad (1.1)$$

der PAULI-Matrizen  $\sigma_i$  liefert Komponenten eines Vektors  $\vec{P} = (P_x, P_y, P_z)$ , der Spinpolarisation genannt wird. Die Dichtematrix eines polarisierten Elektronenstrahls lässt sich damit notieren als:

$$\rho^e = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & 1 - P_z \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

Bezogen auf eine ausgewählte Raumachse weisen die Spins der Elektronen die Projektionen  $+\hbar/2$  oder  $-\hbar/2$  auf, die in diesem Zusammenhang üblicherweise als „Spin-up“ bzw. „Spin-down“ bezeichnet werden. Ein Elektronenstrahl gilt als spinpolarisiert entlang dieser Achse, wenn sich die Anzahlen der Spin-up- ( $N^\uparrow$ ) und Spin-down-Elektronen ( $N^\downarrow$ ) unterscheiden. Die Überschussgleichung

$$P_i = \frac{N^\uparrow - N^\downarrow}{N^\uparrow + N^\downarrow} \quad (1.3)$$

definiert diese Spinpolarisation bezüglich der Raumachse  $i$  (KESSLER, 1985).

### 1.1.2. Dichtematrix von Atomen

Da bei dem hier vorgestellten Experiment die Target-Atome unpolarisiert und unausgerichtet und daher als Mischung aus unabhängigen reinen Anfangszuständen vorliegen, werden diese durch den statistischen Operator  $\rho_0^A$  beschrieben. Dieser setzt sich allgemein zusammen aus den möglichen Zuständen der Atome  $|\psi_i\rangle$  ( $i = 1, 2, \dots$ ), die mit der Wahrscheinlichkeit  $w_i$  eingenommen werden:

$$\rho_0^A = \sum_i w_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \quad (1.4)$$

Jeder der Zustände  $|\psi_i\rangle$  wird in einer gewählten vollständigen Orthonormalbasis  $\{|\phi_{j'}\rangle\}$ , ( $j' = 1, 2, \dots$ ) als Superposition ausgedrückt:

$$|\psi_i\rangle = \sum_{j'} a_{ij'} |\phi_{j'}\rangle \quad \text{und} \quad \langle\psi_i| = \sum_j a_{ij}^* \langle\phi_j|.$$

Der statistische Operator aus (1.4) hat damit die Form:

$$\rho_0^A = \sum_i \sum_{j'} \sum_j a_{ij'} a_{ij}^* w_i |\phi_{j'}\rangle \langle\phi_j|.$$

Die Übergangsmatrixelemente zwischen zwei Basiszuständen

$$\langle\phi_l|\rho_0^A|\phi_k\rangle = \sum_i w_i a_{il} a_{ik}^*$$

sind eine Darstellung der Dichtematrix in der gewählten Basis. Im Fall von nicht orientierten und nicht ausgerichteten Target-Atomen, die sich allein in der Gesamtdrehimpuls-Magnetquantenzahl  $M_0$  bei fester Gesamtdrehimpuls-Quantenzahl  $J_0$  unterscheiden, sind die Besetzungswahrscheinlichkeiten der magnetischen Unterniveaus gleichverteilt und damit  $w_i = (2J_0 + 1)^{-1}$ . Die Dichtematrix des Target-Atoms vereinfacht sich damit zu:

$$\rho_0^A = \frac{1}{2J_0 + 1} \cdot \mathbf{1}_{J_0}, \quad (1.5)$$

wobei  $\mathbf{1}_{J_0}$  die Einheitsmatrix vom Rang  $(2J_0 + 1)$  ist (BLUM, 1996).

### 1.1.3. Streuamplituden und Streuzustand

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit lässt sich ein reiner Anfangszustand des Stoßsystems durch  $|J_0, M_0; \vec{k}_0 m_0\rangle$  angeben, wobei  $M_0$  die Magnetquantenzahl der Target-Drehimpulsquantenzahl  $J_0$  und  $m_0 = \pm 1/2$  die magnetische Spinquantenzahl des einfallenden Elektrons bezeichnen. Analog wird ein reiner Endzustand mit  $|J_1, M_1; \vec{k}_1 m_1\rangle$  ausgedrückt. Der Übergang zwischen beiden wird mittels des Übergangsoperators  $\mathbf{T}$  in Form einer Streuamplitude  $f$  berechnet, wobei die Abhängigkeiten von  $J_0$ ,  $J_1$ ,  $\vec{k}_0$  und  $\vec{k}_1$  hier unterdrückt werden:

$$f(M_1 m_1; M_0 m_0) = \langle J_1 M_1; \vec{k}_1 m_1 | \mathbf{T} | J_0 M_0; \vec{k}_0 m_0 \rangle. \quad (1.6)$$

Es werden solche *direkte* Streuamplituden genannt, für die  $m_0 = m_1$  gilt, d. h., dass die Spinprojektion sich durch die Streuung nicht ändert. Die anderen, bei denen der Spin des Elektrons umgekehrt wird ( $m_0 = -m_1$ ), werden als *Spin-Flip*-Amplituden bezeichnet.

Gewöhnlich erfolgt die Präparation der Stoßpartner, wie auch in diesem Experiment, unabhängig voneinander. Die Anfangszustände sind somit nicht miteinander verschränkt. Für ein System aus stoßenden Elektronen und Target-Atomen wird die Dichtematrix  $\rho_0$  seines Anfangszustands daher als direktes Produkt aus (1.5) und (1.2) berechnet:

$$\rho_0 = \rho_0^A \times \rho_0^e = \frac{1}{2J_0 + 1} \mathbf{1}_{J_0} \times \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & 1 - P_z \end{pmatrix}. \quad (1.7)$$

Bei gemischten Zuständen wird die Dichtematrix nach dem Stoß  $\rho_1$  aus der Anfangsdichtematrix  $\rho_0$  mit dem Übergangoperator  $\mathbf{T}$  gebildet:

$$\rho_1 = \mathbf{T}\rho_0\mathbf{T}^\dagger. \quad (1.8)$$

$\mathbf{T}^\dagger$  bezeichnet den zu  $\mathbf{T}$  adjungierten Operator. Formal wird die Information über den Streuprozess aus den Matrixelementen  $\langle J'_1 M'_1; \vec{k}_1 m'_1 | \rho_1 | J_1 M_1; \vec{k}_1 m_1 \rangle$  gewonnen, deren weitere Berechnung mit Gleichung (1.8) einen Zusammenhang zur Anfangsdichtematrix  $\rho_0$  herstellt (BARTSCHAT, 1984). Für die Elemente der Dichtematrix gilt damit folgende Beziehung:

$$\begin{aligned} & \langle J'_1 M'_1; \vec{k}_1 m'_1 | \rho_1 | J_1 M_1; \vec{k}_1 m_1 \rangle \stackrel{(1.8)}{=} \langle J'_1 M'_1; \vec{k}_1 m'_1 | \mathbf{T}\rho_0\mathbf{T}^\dagger | J_1 M_1; \vec{k}_1 m_1 \rangle \\ &= \sum_{\substack{J'_0 M'_0 J_0 M_0 \\ m'_0 m_0}} \underbrace{\langle J'_1 M'_1; \vec{k}_1 m'_1 | \mathbf{T} | J'_0 M'_0; \vec{k}_0 m'_0 \rangle}_{(1.6)} \langle J'_0 M'_0; \vec{k}_0 m'_0 | \rho_0 | J_0 M_0; \vec{k}_0 m_0 \rangle \\ & \quad \times \underbrace{\langle J_0 M_0; \vec{k}_0 m_0 | \mathbf{T}^\dagger | J_1 M_1; \vec{k}_1 m_1 \rangle}_{(1.6)} \quad (1.9) \\ &= \sum_{\substack{J'_0 M'_0 J_0 M_0 \\ m'_0 m_0}} f(M'_1 m'_1; M'_0 m'_0) f^*(M_1 m_1; M_0 m_0) \langle J'_0 M'_0; \vec{k}_0 m'_0 | \rho_0 | J_0 M_0; \vec{k}_0 m_0 \rangle. \end{aligned}$$

Dies ist die Dichtematrix des Streuzustands, der sich aus den Endzuständen des Target-Atoms und der gestreuten Elektronen zusammensetzt. Bei der letzten Umformung werden hierbei die in Gleichung (1.6) definierten Streuamplituden mit den auftretenden Matrixelementen identifiziert.  $f^*(M_1 m_1; M_0 m_0)$  bezeichnet die komplex konjugierte Streuamplitude.

Für gewöhnlich wird ein Experiment so eingerichtet, dass die Target-Drehimpulse vor und nach dem Stoß ( $J_0 = J'_0$ ,  $J_1 = J'_0$ ) sowie der Wellenvektor  $\vec{k}_0$  feststehen, d.h., dass unter diesen Voraussetzungen eine Summation über diese Größen entfällt. Die Matrixelemente  $\langle J'_0 M'_0; \vec{k}_0 m'_0 | \rho_0 | J_0 M_0; \vec{k}_0 m_0 \rangle$  mit  $J_0 = J'_0$  repräsentieren die Präparation des Stoßsystems.

#### 1.1.4. Reduzierte Dichtematrix

Bei den Messungen im Rahmen dieser Arbeit werden nur die gestreuten Elektronen detektiert. Die daraus maximal zugängliche Information ist in der sogenannten *reduzierten* Dichtematrix  $\langle \vec{k}_1 m'_1 | \rho_1 | \vec{k}_1 m_1 \rangle$  enthalten (BLUM, 1996). Sind die Target-Atome anfangs unpolarisiert, gelten für die Magnetquantenzahlen in Gleichung (1.9):  $M'_0 = M_0$ . Werden sie nach dem Stoß nicht untersucht, wird über die nicht beobachteten Magnetquantenzahlen  $M_1 = M'_1$  ebenfalls inkohärent summiert, wobei auf Grund eines energieselektiven Elektronennachweises wie oben erwähnt  $J_1 = J'_1$  als fest angesehen wird:

$$\begin{aligned} & \underbrace{\langle J'_1 M'_1; \vec{k}_1 m'_1 | \rho_1 | J_1 M_1; \vec{k}_1 m_1 \rangle}_{\text{allg. Dichtematrix}} \longrightarrow \sum_{\substack{M_1 M_0 \\ m'_0 m_0}} \langle J_1 M_1; \vec{k}_1 m'_1 | \rho_1 | J_1 M_1; \vec{k}_1 m_1 \rangle \\ & \quad = \underbrace{\langle \vec{k}_1 m'_1 | \rho_1 | \vec{k}_1 m_1 \rangle}_{\text{red. Dichtematrix}}. \quad (1.10) \end{aligned}$$



Dieser Ausdruck wird als reduzierte Dichtematrix  $\langle \vec{k}_1 m'_1 | \rho_1 | \vec{k}_1 m_1 \rangle$  bezeichnet. Diese beinhaltet die Information des Stoßprozesses, ohne Betrachtung des anfangs unpolarisierten Target-Atoms, sondern nur unter Berücksichtigung der Elektronen. Unter den vorangehenden Annahmen ( $J'_0 = J_0$ ,  $M'_0 = M_0$ ,  $M_1 = M'_1$ ,  $J_1 = J'_1$  fest) und Beziehungen wird sie wie folgt berechnet:

$$\begin{aligned}
& \langle \vec{k}_1 m'_1 | \rho_1 | \vec{k}_1 m_1 \rangle \\
& \stackrel{(1.9)}{=} \sum_{\substack{M_1 M_0 \\ m'_0 m_0}} f(M_1 m'_1; M_0 m'_0) f^*(M_1 m_1; M_0 m_0) \langle M_0; \vec{k}_0 m'_0 | \rho_0 | M_0; \vec{k}_0 m_0 \rangle \\
& \stackrel{(1.7)}{=} \sum_{\substack{M_1 M_0 \\ m'_0 m_0}} f(M_1 m'_1; M_0 m'_0) f^*(M_1 m_1; M_0 m_0) \langle M_0; \vec{k}_0 m'_0 | \rho_0^A \times \rho_0^e | M_0; \vec{k}_0 m_0 \rangle \quad (1.11) \\
& \stackrel{(1.5)}{=} \frac{1}{2J_0 + 1} \sum_{\substack{M_1 M_0 \\ m'_0 m_0}} f(M_1 m'_1; M_0 m'_0) f^*(M_1 m_1; M_0 m_0) \langle \vec{k}_0 m'_0 | \rho_0^e | \vec{k}_0 m_0 \rangle .
\end{aligned}$$

Für die letzte Umformung wurde die Inkohärenz zwischen  $\rho_0^A$  und  $\rho_0^e$  ausgenutzt, die allgemein bei getrennter Präparation gilt:

$$\langle M_0; \vec{k}_0 m'_0 | \rho_0^A \times \rho_0^e | M_0; \vec{k}_0 m_0 \rangle = \langle M_0 | \rho_0^A | M_0 \rangle \langle \vec{k}_0 m'_0 | \rho_0^e | \vec{k}_0 m_0 \rangle .$$

Für eine übersichtliche Darstellung der anschliessenden Betrachtungen wird folgende Schreibweise eingeführt (BLUM und KLEINPOPPEN, 1983):

$$\langle m'_1 m'_0; m_1 m_0 \rangle = \frac{1}{2J_0 + 1} \sum_{M_1 M_0} f(M_1 m'_1; M_0 m'_0) f^*(M_1 m_1; M_0 m_0) . \quad (1.12)$$

Die Argumente des Ausdrucks  $\langle m'_1 m'_0; m_1 m_0 \rangle$  können zu  $2^4 = 16$  komplexen Parametern kombiniert werden, die aus solchen Experimenten bestimmt werden können und die darin zugängliche Information enthalten. Eine detaillierte Besprechung wird bei BARTSCHAT (1989) gegeben.

Mathematische und physikalische Eigenschaften des Stoßsystems schränken jedoch deren Anzahl ein. Aus Gleichung (1.12) wird ersichtlich, dass gilt:

$$\langle m'_1 m'_0; m_1 m_0 \rangle = \langle m_1 m_0; m'_1 m'_0 \rangle^* , \quad (1.13)$$

wenn die Hermitizität der reduzierten Dichtematrix berücksichtigt wird. Die Anzahl der unabhängigen Parameter wird hierdurch auf 16 reale verringert. Weiterhin unterliegt ein solches Stoßsystem der Spiegelinvarianz bezüglich der Streuebene. Bezeichnet  $\mathbf{R}$  den Spiegeloperator, gilt für die Streuamplituden aus Gleichung (1.6):

$$\langle J_1 M_1; \vec{k}_1 m_1 | \mathbf{T} | J_0 M_0; \vec{k}_0 m_0 \rangle = \langle J_1 M_1; \vec{k}_1 m_1 | \mathbf{R}^\dagger \mathbf{T} \mathbf{R} | J_0 M_0; \vec{k}_0 m_0 \rangle . \quad (1.14)$$

Diese Spiegelung setzt sich zusammen aus einer Paritätsoperation  $\mathbf{P}$  und einer Drehung  $\mathbf{D}(\alpha, \beta, \gamma)$  um den Winkel  $\beta = -\pi$  um die  $y$ -Achse des Koordinatensystems, die gemäß den EULER'schen Winkeln vollzogen wird (s. Anh. A.1). Der Paritätsoperator ist hermitesch und präpariert den Eigenwert  $\Pi_0$  des Zustands heraus:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}|J_0 M_0; \vec{k}_0 m_0\rangle &= \mathbf{D}(0, -\pi, 0) \circ \mathbf{P}|J_0 M_0; \vec{k}_0 m_0\rangle \\ &= \Pi_0 (-1)^{J_0 - M_0 + 1/2 - m_0} |J_0 - M_0; \vec{k}_0 - m_0\rangle . \end{aligned}$$

Diese Beziehung gilt analog für den Endzustand des Stoßsystems. Angewendet auf Gleichung (1.14), wird für die Streuamplituden damit folgende Beziehung berechnet:

$$f(M_1 m_1; M_0 m_0) = \Pi_0 \Pi_1 (-1)^{J_1 - M_1 + \frac{1}{2} - m_1 + J_0 - M_0 + \frac{1}{2} - m_0} f(-M_1 - m_1; -M_0 - m_0) . \quad (1.15)$$

Diese Symmetriebeziehung wird auf die Schreibweise in Gleichung (1.12) übertragen:

$$\langle m'_1 m'_0; m_1 m_0 \rangle = (-1)^{m'_1 - m_1 + m'_0 - m_0} \langle -m'_1 - m'_0; -m_1 - m_0 \rangle . \quad (1.16)$$

In einem Experiment, in dem nur die Elektronen präpariert und beobachtet werden, wird dadurch die Anzahl der zugänglichen Parameter auf acht halbiert. Sie werden im folgenden Abschnitt behandelt.

## 1.2. Generalisierte *STU*-Parameter

Im Zuge der theoretischen Behandlung des Streuprozesses werden generalisierte Parameter eingeführt, mit denen Spin-Effekte dargestellt werden. Sie beschreiben die Streuung spinpolarisierter Elektronen an unausgerichteten Target-Atomen. Im Folgenden wird ihre Ableitung skizziert und ihre Bedeutung für das Experiment betrachtet. Eine detaillierte Besprechung, insbesondere eine Berechnung der Streuparameter, findet sich bei BARTSCHAT (1989).

Zunächst wird aus der Spur der reduzierten Dichtematrix der differenzielle Wirkungsquerschnitt unter Verwendung der Dichtematrix eines polarisierten Elektronenstrahls aus Gleichung (1.2) berechnet:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \text{Spur}(\rho_1) = \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_0} \underbrace{\langle m_1 m_0; m_1 m_0 \rangle}_{\text{spinunabhängig}} - 2 P_y \underbrace{\text{Im}\{\langle \frac{1}{2} - \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle\}}_{\text{spinabhängig}} , \quad (1.17)$$

der in einen spinunabhängigen und einen spinabhängigen Teil zerlegt wird. Aus dem ersten Summanden wird der differenzielle Wirkungsquerschnitt für die Streuung unpolarisierter Elektronen an nicht ausgerichteten Target-Atomen definiert:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_u = \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_0} \langle m_1 m_0; m_1 m_0 \rangle = \frac{1}{2(2J_0 + 1)} \sum_{\substack{M_1 M_0 \\ m_1 m_0}} |f(M_1 m_1; M_0 m_0)|^2 . \quad (1.18)$$

Der Wirkungsquerschnitt aus Gleichung (1.17) wird damit als

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_u (1 + P_y S_A) \quad (1.19)$$

notiert.  $S_A$  bezeichnet die Spin-Asymmetriefunktion, die in der gewählten Beschreibung durch:

$$S_A = -2 \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_u^{-1} \text{Im} \{ \langle \frac{1}{2} - \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle \} \quad , \quad -1 \leq S_A \leq +1 \quad (1.20)$$

dargestellt wird. Durch diese Größe wird die Spinabhängigkeit des differentiellen Wirkungsquerschnitts quantifiziert. Die Streuintensität der Elektronen unterscheidet sich für die Projektionen *Spin-up* und *Spin-down*. Im anschließenden Abschnitt 1.3 wird dies eingehender behandelt. Anhand von Gleichung (1.17) bzw. (1.19) wird ersichtlich, dass in der gewählten Streugeometrie wie in Abb. 1.1 nur senkrecht zur Streuebene stehende Polarisationskomponenten ( $P_y$ ) einen Beitrag liefern.

Ein Zusammenhang zwischen der Polarisation vor und nach dem Stoß wird analog zu Gleichung (1.1) durch die Bildung des Erwartungswerts der PAULI-Matrizen hergestellt. Für die Komponenten der beiden Vektoren  $\vec{P}$  und  $\vec{P}'$  ergeben sich folgende Gleichungen:

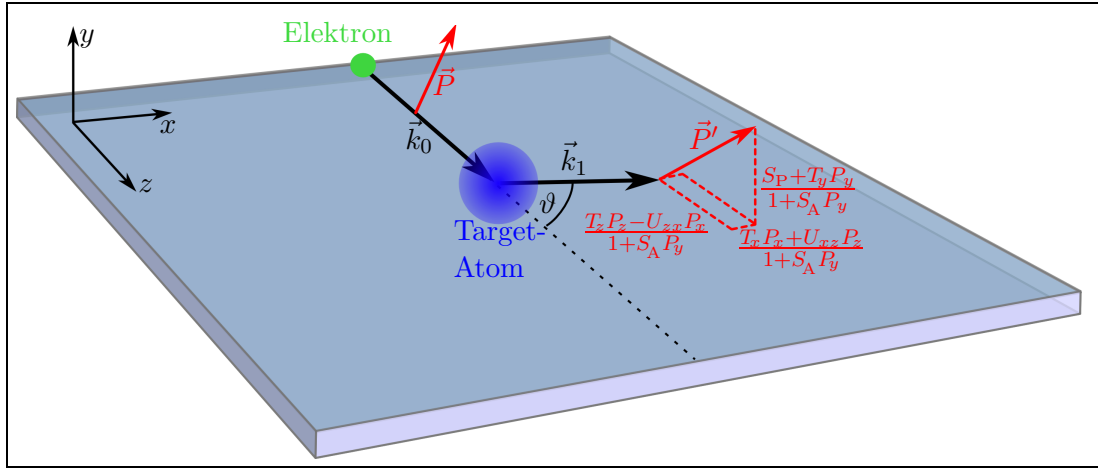
$$P'_x \frac{d\sigma}{d\Omega} = P_x \underbrace{\left( \langle -\frac{1}{2} - \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle + \langle -\frac{1}{2} \frac{1}{2}; \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle \right)}_{T_x \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_u} + P_z \underbrace{\left( \langle -\frac{1}{2} \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle - \langle -\frac{1}{2} - \frac{1}{2}; \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle \right)}_{U_{xz} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_u} \quad , \quad (1.21 \text{ a})$$

$$iP'_y \frac{d\sigma}{d\Omega} = \underbrace{\left( \langle -\frac{1}{2} \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle + \langle -\frac{1}{2} - \frac{1}{2}; \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle \right)}_{iS_p \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_u} + iP_y \underbrace{\left( \langle -\frac{1}{2} - \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle - \langle -\frac{1}{2} \frac{1}{2}; \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle \right)}_{T_y \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_u} \quad , \quad (1.21 \text{ b})$$

$$P'_z \frac{d\sigma}{d\Omega} = P_z \underbrace{\left( \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle - \langle \frac{1}{2} - \frac{1}{2}; \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle \right)}_{T_z \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_u} + P_x \underbrace{\left( \langle \frac{1}{2} \frac{1}{2}; \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle + \langle \frac{1}{2} - \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle \right)}_{-U_{zx} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_u} \quad . \quad (1.21 \text{ c})$$

Bei den jeweiligen Umformungen wird eine Darstellung gewählt, bei der die einzelnen Terme den differentiellen Wirkungsquerschnitt  $(d\sigma/d\Omega)_u$  beinhalten. Die verbleibenden Faktoren sind neben  $S_A$  weitere Parameter für Spin-Effekte, die bei der Streuung auftreten. Für den Fall, dass  $P_y = 0$  ist, verschwindet die Komponente  $P'_y$  nicht. Dies bedeutet, dass ein zuvor unpolarisierter Strahl durch den Stoß senkrecht zur Streuebene polarisiert werden kann. Daher bezeichnet  $S_p$  die sogenannte *Polarisierfunktion*, die Werte von  $-1 \leq S_p \leq +1$  annimmt.

$U_{zx}$  und  $U_{xz}$  werden *Rotationsparameter* genannt. Für sie beträgt der Wertebereich:  $-1 \leq U_{xz,zx} \leq +1$ . Sie quantifizieren jeweils einen Anteil von  $P_x$  bzw.  $P_z$ , der in der Streuebene gedreht wird. Die  $T_{x,y,z}$ -Parameter sind ein Maß für die *Kontraktion* des Polarisationsvektors. Sie nehmen Werte zwischen  $-1 \leq T_{x,y,z} \leq +1$  an. Sie beschreiben eine Stauchung oder sogar Umkehrung der jeweiligen Komponente von  $\vec{P} = (P_x, P_y, P_z)$ . Ursache hierfür ist die Änderung einer einzelnen Elektronenspinprojektion (sog. *Spin-Flip*) durch Elektronenaustausch oder durch



**Abb. 1.2.:** Bedeutung der *STU*-Parameter im Stoßsystem. Gezeigt werden die Wirkung der Asymmetriefunktion  $S_A$ , die der Polarisierfunktion  $S_P$ , die Kontraktionsparameter  $T_{x,y,z}$  sowie  $U_{xz}$  und  $U_{zx}$ , die eine Drehung in der Streuebene beschreiben.

„Umklappen“, was die Änderung der Spinorientierung bezeichnet. Die geometrische Interpretation dieser *generalisierten STU*-Parameter ist in Abbildung 1.2 dargestellt. Durch Zusammenfassen der Gleichungen (1.20) lässt sich der Polarisationsvektor nach dem Stoß mit einer Vektorgleichung angeben:

$$\vec{P}' = \frac{1}{1 + S_A P_y} \cdot \begin{pmatrix} T_x P_x + U_{xz} P_z \\ S_P + T_y P_y \\ T_z P_z - U_{zx} P_x \end{pmatrix}. \quad (1.22)$$

Die hier eingeführten sieben Parameter sind zusammen mit dem differentiellen Wirkungsquerschnitt die zuvor erwähnten acht Größen, die die maximale Information des Streuprozesses bei der hier behandelten Experimentführung wiedergeben. Im Sinne ihrer Definition beschreiben sie die Spin-Effekte, die bei der Streuung an unpolarisierten Atomen auftreten. In einem Experiment mit der Elektronenpolarisation senkrecht zur Streuebene ( $\vec{P} = (0, P_y, 0)$ ) sind die Parameter  $S_P$ ,  $S_A$  und  $T_y$  zugänglich.

Abschließend wird ein verschwindender Target-Gesamtdrehimpuls vor und nach der Streuung ( $J_0 = J_1 = 0$ ) betrachtet, was z.B. bei der elastischen Streuung an Blei der Fall ist. In dem Ausdruck  $\langle m'_1 m'_0; m_1 m_0 \rangle$  in Gleichung (1.12) entfällt die Summierung über die Magnetquantenzahlen  $M_0$  und  $M_1$ . Die Beziehung für die Streuamplituden in Gleichung (1.15), die aus der Reflexionsinvarianz folgt, führt damit zu einer weiteren Eigenschaft:

$$\langle m'_1 m'_0; m_1 m_0 \rangle = \Pi_0 \Pi_1 (-1)^{m'_1 - m'_0} \langle -m'_1 - m'_0; m_1 m_0 \rangle. \quad (1.23)$$

Insbesondere folgt unter diesen Voraussetzungen aus der Definition in Gleichung (1.12):

$$\langle m'_1 m'_0; m_1 m_0 \rangle = f(0 m'_1; 0 m'_0) f^*(0 m_1; 0 m_0); \quad (1.24)$$

somit tritt hier eine Faktorisierung in die Streuamplituden auf. Mit den vorangegangenen Überlegungen wird die Anzahl der *STU*-Parameter schließlich auf vier reduziert:

$$S_P = \Pi_1 \Pi_0 S_A, \quad T_y = \Pi_1 \Pi_0, \quad T_x = \Pi_1 \Pi_0 T_z, \quad U_{xz} = \Pi_1 \Pi_0 U_{zx}. \quad (1.25)$$

Bei elastischer Streuung ergibt das Produkt  $\Pi_0 \Pi_1 = +1$ , sodass insbesondere gilt:

$$S_A = S_P, \quad T_y = 1, \quad T_x = T_z, \quad U_{zx} = U_{xz}. \quad (1.26)$$

Diese drei verbleibenden Parameter und der differentielle Wirkungsquerschnitt  $(d\sigma/d\Omega)_u$  aus Gleichung (1.18) sind die sogenannten *relativen STU*-Parameter nach KESSLER (1985). Da  $T_y = 1$  feststeht, kann Elektronen-Austausch bei elastischer Streuung an Target-Atomen mit  $J_0 = J_1 = 0$  in  $y$ -Richtung nicht direkt beobachtet werden.

### 1.3. Die Spin-Asymmetriefunktion

In dieser Arbeit wird insbesondere die Energieabhängigkeit der Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  bei der Elektronenstreuung an Blei behandelt. Zwei Effekte liefern hier einen Beitrag: die Spin-Bahn-Wechselwirkung und der Feinstruktur-Effekt. Diese beiden Mechanismen werden im Folgenden kurz erläutert.

#### 1.3.1. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung

Die Spin-Bahn-Wechselwirkung resultiert aus der Relativbewegung von Elektronen im Feld eines Atomkerns. Im Ruhesystem eines Elektrons mit dem Impuls  $\hbar \vec{k}_0$ , das sich auf einen Atomkern zubewegt, sieht dieses ein Magnetfeld  $\vec{B} = -(\vec{v} \times \vec{E})/c^2$ , das aus seiner Relativbewegung im elektrischen Zentralfeld  $\vec{E}(r) = -\nabla V(r)$  der abgeschirmten positiven Kernladung resultiert (MAYER-KUCKUK, 1985):

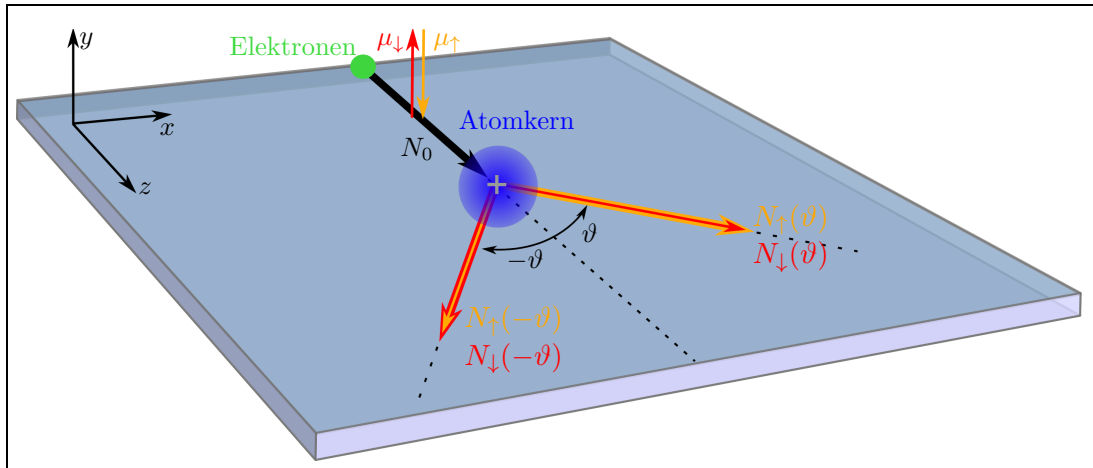
$$\vec{E}(r) = -\frac{dV(r)}{dr} \frac{\vec{r}}{r} \quad \text{und} \quad \vec{B} = -\frac{1}{m_e c^2} \cdot \hbar \vec{k}_0 \times \vec{E}(r) = -\frac{1}{m_e c^2 r} \frac{dV(r)}{dr} \cdot \vec{l}, \quad (1.27)$$

wobei die Definition des Bahndrehimpulses  $\vec{l} = \vec{r} \times \hbar \vec{k}_0$  verwendet wird. Dieses Feld steht in Wechselwirkung mit dem Spin  $\vec{s}$  des Elektrons, mit dem ein magnetisches Moment verbunden ist:

$$\vec{\mu}_{\vec{s}} = -\frac{g_s e_0}{2 m_e} \vec{s}. \quad (1.28)$$

Dieser Ausdruck enthält mit  $g_s \approx -2.00232$  den LANDÉ-Faktor des Elektrons mit der Ruhemasse  $m_e$ , und  $e_0$  ist die Elementarladung. Das Wechselwirkungspotenzial  $V_s$  im Ruhesystem des Elektrons berechnet sich dann nach:

$$V_s = -\vec{\mu}_{\vec{s}} \cdot \vec{B} = -\frac{g_s e_0}{2 m_e^2 c^2 r} \frac{dV(r)}{dr} \vec{s} \cdot \vec{l}. \quad (1.29)$$



**Abb. 1.3.:** Skizze zur Spin-Bahn-Wechselwirkung. Die magnetischen Momente ( $\mu_\uparrow$ ,  $\mu_\downarrow$ ) und die entsprechenden Streuintensitäten sind farblich kodiert:  $\uparrow$  *Spin-up*-Elektronen,  $\downarrow$  *Spin-down*-Elektronen.

Beim Wechsel in das Laborsystem muss zusätzlich in Folge der LORENTZ-Transformation der THOMAS-Faktor  $1/2$  berücksichtigt werden (JACKSON, 2002).  $V_{ls}$  hängt also von dem Produkt aus Spin und Bahndrehimpuls ab. Abbildung 1.3 veranschaulicht diese Spin-Bahn-Wechselwirkung zwischen dem Kontinuums-Elektron und dem Target-Atom. Daraus folgen die unterschiedlichen Wirkungsquerschnitte  $(d\sigma/d\Omega)^\uparrow$  und  $(d\sigma/d\Omega)^\downarrow$  für die beiden möglichen Spinprojektionen entlang der  $y$ -Achse. Ein unpolarisierter Elektronenstrahl wird durch die Streuung polarisiert. Dies ist die Ursache für die Polarisierfunktion  $S_P$  aus Gleichung (1.22). Spinpolarisierte Elektronen werden demnach unterschiedlich stark gestreut. Diese Wirkungsquerschnittasymmetrie wird als Überschussgleichung zusammengefasst:

$$A(\vartheta) = \frac{(d\sigma/d\Omega)^\uparrow - (d\sigma/d\Omega)^\downarrow}{(d\sigma/d\Omega)^\uparrow + (d\sigma/d\Omega)^\downarrow} \stackrel{(1.19)}{=} P_y S_A(\vartheta) . \quad (1.30)$$

Für einen beliebigen, aber festen Streuwinkel  $\vartheta$  resultiert daraus ein Unterschied an Streuintensitäten für *Spin-up*- und *Spin-down*-Elektronen ( $N^{\uparrow,\downarrow}(\vartheta)$ ). Diese Streuintensitäten sind proportional zum differentiellen Wirkungsquerschnitt. Damit lässt sich Gleichung (1.30) schreiben als:

$$A(\vartheta) = P_y S_A(\vartheta) = \frac{N^\uparrow(\vartheta) - N^\downarrow(\vartheta)}{N^\uparrow(\vartheta) + N^\downarrow(\vartheta)} . \quad (1.31)$$

Die Wechselwirkung ist spiegelsymmetrisch, sodass für die Streuintensitäten  $N^{\uparrow,\downarrow}(\pm\vartheta)$  gilt:  $N^\downarrow(\vartheta) = N^\uparrow(-\vartheta)$ . Gleichung (1.31) beschreibt somit auch eine Links-Rechts-Asymmetrie, die für polarisierte Elektronen bei festen Streuwinkeln  $\pm\vartheta$  zu beobachten ist. In diesem Zusammenhang wird  $S_A$  auch als SHERMAN-Funktion bezeichnet (SHERMAN, 1956). Sie ist im elastischen Fall identisch mit der Spin-Asymmetriefunktion für die Streuung an unpolarisierten Target-Atomen (KESSLER, 1985). Die Streuung unter Einbeziehung der Spin-Bahn-Wechselwirkung ist in der Literatur auch als MOTT-Streuung bekannt (MOTT, 1929).

### 1.3.2. Der Feinstruktur-Effekt

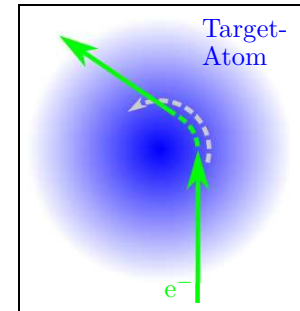
Der Feinstruktur-Effekt tritt in reiner Form merklich auf, wenn spinabhängige Kräfte wie die zuvor diskutierte Spin-Bahn-Wechselwirkung vernachlässigt werden können. Unter dieser Annahme ist eine Änderung der Spinorientierung (*Spin-Flip*) des Projektilelektrons nur über Austausch möglich.

Maßgeblich für den Feinstruktur-Effekt ist die stoßinduzierte Orientierung der anfangs unpolarisierten Target-Atome. Eine semiklassische Betrachtung ist in Abbildung 1.4 gezeigt (HANNE, 1984). Die Vorstellung ist analog zu einem streifenden Stoß, der Drehimpuls in das System einbringt. Zwischen der Hülle und dem Projektilelektron wirkt die COULOMB-Abstoßung auf Grund der negativen Ladung. Durch die wirkenden Kräfte kommt es zur Orientierung der „Ladungswolke“ senkrecht zur Streuebene. Im quantenmechanischen Bild bedeutet Orientierung eines Ensembles von Atomen, dass der Erwartungswert des Bahndrehimpuls-Operators  $\mathbf{L}$  nicht verschwindet:  $\langle \mathbf{L} \rangle \neq 0$ .

Wird nun das Target-Atom im Zuge des Stoßprozesses orientiert, hängt die Streuwahrscheinlichkeit, und damit der Wirkungsquerschnitt, von dem beteiligten Feinstruktur-Multiplett und von der Spinorientierung der Elektronen ab. Kann die Aufspaltung der Niveaus experimentell aufgelöst werden, hat die Konfiguration des beobachteten Feinstruktur-niveaus Auswirkung auf die Austauschwahrscheinlichkeit der Elektronen, denn mit  $\langle \mathbf{L} \rangle \neq 0$  ist durch die Feinstrukturkopplung auch eine Spinorientierung  $\langle \mathbf{S} \rangle \neq 0$  verbunden, wobei  $\mathbf{S}$  die Spinoperator bezeichnet. Es lässt sich auch hier eine Asymmetrie zwischen  $N^\uparrow(\vartheta)$  und  $N^\downarrow(\vartheta)$  feststellen. Ein unpolarisierter Strahl wird durch diesen Effekt polarisiert. Der Mechanismus ist unabhängig der Ordnungszahl  $Z$ . Lediglich die Aufspaltung der Feinstruktur nimmt mit der Größe des Kerns zu, weshalb sie bei schweren Atomen besser aufgelöst werden kann. Eine ausführliche Besprechung wird bei HANNE (1983) vorgenommen. In reiner Form tritt der Feinstruktur-Effekt bei leichten Target-Atomen ( $Z \leq 10$ ) und eher kleinen Streuwinkeln auf. Mit der Größe des Atomkerns nimmt auch die Spin-Bahn-Wechselwirkung mit dem Projektilektron zu. Die beiden Effekte sind dann nicht zu unterscheiden, insbesondere bei Energien, bei denen Elektronen-Austausch eine hohe Wahrscheinlichkeit besitzt.

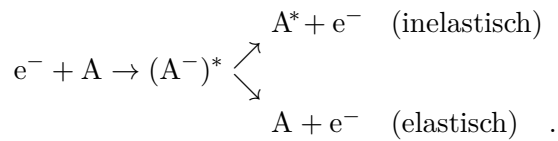
### 1.3.3. Einfluss von Resonanzen

Eine Fragestellung dieser Arbeit behandelt den Einfluss von Resonanzen auf die Spin-Asymmetriefunktion. Sie treten bei der Elektronenstreuung auf, wenn das Target-Atom mit dem einfallenden Projektilektron ein kurzlebiges angeregtes Anion bildet. Dabei werden ein



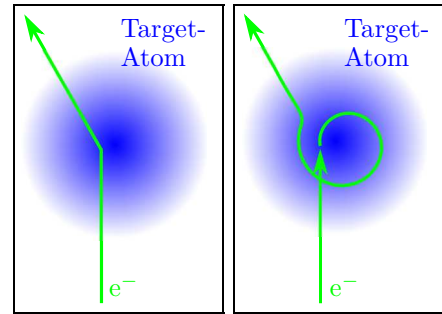
**Abb. 1.4.:** Stoßinduzierte Orientierung nach HANNE (1984).

nicht-bindender Zustand mit einer kurzen Lebensdauer besetzt und das gestreute Elektron wieder abgegeben:



Diese Reaktionsgleichung berücksichtigt bei den Ejektilen eine mögliche Anregung des Target-Atoms bei inelastischer Streuung.

Der Mechanismus unterscheidet sich grundsätzlich von der direkten Streuung, bei der das Streuelektron instantan den Bereich des Target-Atoms verlässt. In Abbildung 1.5 sind diese beiden Prozesse skizziert. Der gebundene Übergangszustand ist darin als Bahn um den Atomkern symbolisiert.



**Abb. 1.5.:** Schemata der direkten (links) und der resonanten Streuung (rechts).

Nach TAYLOR *et al.* (1966) besteht im Allgemeinen ein Zusammenhang zwischen Resonanzen und angeregten Zuständen des Target-Atoms, das in einer Modellvorstellung den Rumpf des Anions bildet. An dieses wird das einfallende Elektron dadurch gebunden, dass es angeregt wird und daher der Kern weniger stark abgeschirmt ist. Die Streupartner werden dadurch aneinander gebunden. Das zusätzliche Elektron besetzt einen angeregten Zustand (sog. *core-excited resonant state*). Das Anion zerfällt schließlich durch Autoionisation zum neutralen Atom. Ein Elektron wird dabei abgestoßen, indem es die durch den Elektroneneinfang in das System eingeführte Energie vollständig bzw. teilweise aufnimmt, je nachdem, ob es sich um elastische oder inelastische Streuung handelt.

Es werden zwei Arten von Resonanzen unterschieden, die über die relative energetische Lage bezüglich der zugeordneten angeregten Zustände des Target-Atoms festgelegt werden (SCHULZ, 1973). Die FESHBACH-Resonanzen liegen bis zu 0,5 eV unterhalb der entsprechenden Target-Zustände. Sie haben eine längere Lebensdauer, da die Bindung stärker ist. Im Wirkungsquerschnitt sind sie als scharfe Struktur zu erkennen. Die kurzlebigeren *Shape*-Resonanzen bilden, energetisch betrachtet, oberhalb der angeregten Zustände „virtuelle“ Zustände. Das Wechselwirkungspotenzial zwischen einfallendem Elektron und Target-Atom setzt sich zusammen aus einem attraktiven Dipolterm und einem repulsiven Zentrifugalterm  $V_l$ , der sich aus einer semiklassischen Betrachtung der Bahnbewegung ergibt:

$$V_l \sim \frac{l(l+1)}{r^2} ,$$

wobei  $r$  den Abstand vom Kern und  $l$  die Drehimpulsquantenzahl bezeichnet. Daraus resultiert eine Potenzialmulde, in der das Kontinuumselektron gebunden wird. Diese Resonanzen



treten vorwiegend bei inelastischer Streuung sowie im elastischen Fall bei kleinen Energien auf. Die Lebensdauer ist im Allgemeinen kürzer, und damit ist die Form im Wirkungsquerschnitt breiter.

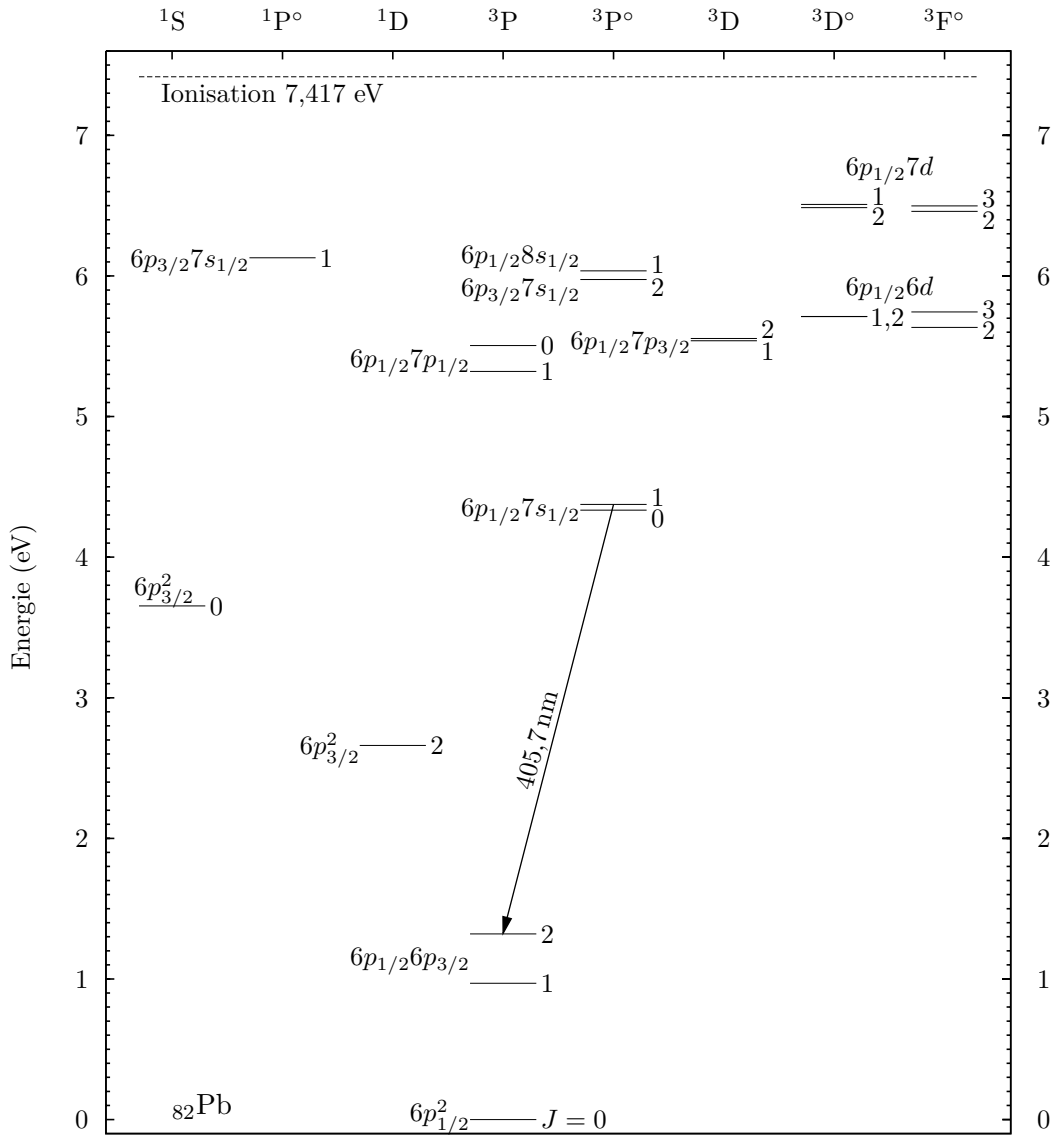
Von besonderem Interesse sind die sogenannten Autoionisations-Resonanzen. Sie bezeichnen metastabile Anregungen, die oberhalb der Ionisationsschwelle eines Mehr-Elektronen-Atoms liegen. Die Zustände zerfallen dann in ein einfach geladenes Ion und ein emittiertes Elektron. Eine ausführliche Besprechung wird bei CONNERADE (1998) vorgenommen. Experimentell nachgewiesen wurden sie bereits von BEUTLER (1933). Eine analytische Behandlung und Ableitung der Form der Resonanz wird bei FANO (1961) vorgestellt. Diese Autoionisationszustände sind Bestandteil der theoretischen Berechnungen in Abschnitt 1.5.2. Der im Vergleich zur direkten Streuung längere Aufenthalt im Bereich des Target-Atoms wirkt sich auf die Wechselwirkungszeit im Streuprozess aus. Als Folge treten angeregte Zustände, die die Spin-Asymmetriefunktion beeinflussen, als Resonanzen auf. Bei einer Untersuchung der Abhängigkeit von der Primärenergie der Elektronen kann dieser Einfluss bestimmt werden.

#### 1.4. Atomares Blei als Streu-Target

Als Streu-Target wird natürliches Blei verwendet. Im Periodensystem ist es das fünfte Element der IV. Hauptgruppe (Graphit-Gruppe) mit der Ordnungszahl  $Z = 82$ . Der Schmelzpunkt beträgt  $327^\circ\text{C}$ , der Siedepunkt  $1750^\circ\text{C}$ . Abbildung 1.6 zeigt ein vereinfachtes Termschema von atomarem Blei. Dargestellt sind ausgewählte Zustände bis zur ersten Ionisationsschwelle von  $E_{\text{ion}} = 7,417\text{ eV}$ . Die Werte und elektronischen Konfigurationen sind der Internet-Datenbank des *National Institute of Standards and Technology, USA* entnommen (RALCHENKO *et al.*, 2008; WOOD und ANDREW, 1968) und im Anhang A.3 tabelliert. Die entsprechenden *LS*-Terme sind bei MOORE (1958) aufgeführt. Im elektronischen Grundzustand betragen die Quantenzahlen  $S = 1$  und  $L = 1$ . In *LS*-Notation wird er als  $[\text{Xe}]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^2 \ ^3\text{P}_0$  angegeben. Wegen der hohen Ordnungszahl ( $Z = 82$ ) tritt innerhalb des Atoms eine starke Spin-Bahn-Wechselwirkung auf, weshalb das intermediäre Kopplungsschema oder die *jj*-Schreibweise  $[\text{Xe}]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^2 (1/2,1/2)_0$  verwendet werden kann (Anh. A.2). Ausschlaggebend für theoretische Überlegungen ist jedoch die Angabe der Gesamtdrehimpuls-Quantenzahl  $J_0 = 0$ , die in den Notationen enthalten ist.

Für eine Energiekalibrierung wird die Stoßanregung des Übergangs  $6p\ 7s \ ^3\text{P}_1^\circ \rightarrow 6s^2\ 6p^2 \ ^3\text{P}_2$  ausgewählt, dessen Wellenlänge  $\lambda = 405,7\text{ nm}$  beträgt. Dieser ist in Abb. 1.6 mit einem Pfeil gekennzeichnet. Die benötigte kinetische Energie beträgt  $E = 4,38\text{ eV}$ .

Bei der spinabhängigen Streuung ist zum einen auf Grund der hohen Ordnungszahl ein starker Spin-Bahn-Effekt zu erwarten. Bei Energien um  $10\text{ eV}$  muss andererseits der Feinstruktur-Effekt mitberücksichtigt werden, da bei diesen Energien der Austausch wahrscheinlich wird,



**Abb. 1.6.:** Vereinfachtes Termschema für atomares Blei nach RALCHENKO *et al.* (2008) und MOORE (1958). Den Niveaus sind die Elektronenkonfigurationen zugeordnet. Die nebenstehenden Zahlen bezeichnen den Gesamtdrehimpuls  $J$ . Zur Benennung der Terme wird die  $LS$ -Notation verwendet. Zusätzlich ist der zur Energiekalibrierung verwendete Übergang eingezeichnet.

weil die Geschwindigkeiten der Projektil-Elektronen denen der gebundenen Target-Elektronen entsprechen. Weiterhin zeigt die Elektronenkonfiguration  $6s^2 6p^2$  mit den  $LS$ -Termen  $^3P_{0,1,2}$  auf, dass beim Blei im Grundzustand eine starke Feinstrukturaufspaltung vorliegt. Sie beträgt zwischen  $J = 0$  und  $J = 1$  circa  $0,9\text{ eV}$ . Der ( $J = 2$ )-Zustand liegt bei  $1,4\text{ eV}$ . In einem realen Experiment mit einem typischen Verdampfungsofen ist das Feinstruktur-Niveau  $^3P_0$  bei elastischer Streuung zugänglich, auch wenn zum Elektronennachweis Spektrometer mit geringer Energieauflösung  $\Delta E \geq 200\text{ meV}$  verwendet werden. Ein Austausch in  $y$ -Richtung ist an die-

sem Zustand nicht beobachtbar, da die Spins der Target-Elektronen parallel stehen und nach Gleichung (1.26)  $T_y = 1$  gilt. Ein Elektronenaustausch wird nur über eine Anregung möglich, d.h. bei inelastischer Streuung.

## 1.5. Modelle zur theoretischen Behandlung elastischer Streuprozesse

Bei der theoretischen Behandlung von atomaren Streuprozessen werden im Wesentlichen zwei unterschiedliche Ansätze für die Berechnung verwendet, deren Grundzüge im Folgenden erläutert werden. Der eine bedient sich der Störungsrechnung, der andere benutzt das nicht-perturbative  $R$ -Matrix-Konzept. Zur Lösung der SCHRÖDINGER- respektive der DIRAC-Gleichung werden bei beiden ein Separationsansatz gewählt und das Problem auf die Berechnung der Radialwellenfunktion reduziert. Aus der asymptotischen Form der Lösungen werden dann üblicherweise die Streuamplituden abgeleitet.

### 1.5.1. Methode mit relativistischem Modell-Potenzial

Dieses Verfahren basiert auf der sogenannten *Relativistic Distorted Wave Approximation* (RDWA). Dabei wird die Bewegung des Projektil-Elektrons im Feld des Target-Atoms durch einen Potenzialansatz beschrieben und mit Mitteln der Störungsrechnung gelöst.

Die Wellenfunktionen der Target-Atome werden je nach deren Kernladungszahl  $Z$  ausgewählt. Bei leichten Atomen wird die Wellenfunktion des Grundzustands z. B. nach der HARTREE-FOCK-Methode berechnet (MCLEAN und MCLEAN, 1981). In dieser nicht-relativistischen Näherung wird ein  $N$ -Elektronen-System durch  $N$  Einelektron-Wellenfunktionen repräsentiert. Sogenannte DIRAC-FOCK-Wellenfunktionen stellen eine relativistische Erweiterung der Methode dar (PARPIA *et al.*, 1996) und werden üblicherweise für schwere Atome eingesetzt.

Die Bewegung eines Projektilelektrons im (effektiven) Zentralfeld des Target-Atoms wird durch die (vereinfachte) DIRAC-Gleichung beschrieben (TOŠIĆ *et al.*, 2008):

$$\left[ c\boldsymbol{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 - V(r) \right] \boldsymbol{\Psi} = E\boldsymbol{\Psi} \quad .$$

Hierbei sind  $\boldsymbol{\alpha}$  und  $\beta$  die DIRAC'schen  $4 \times 4$ -Matrizen. Die Lösungen  $\boldsymbol{\Psi}$  sind 4-dimensional und werden Spinoren genannt. Zur Lösung des Streuproblems wird das Variationsprinzip der quantenmechanischen Störungsrechnung herangezogen.

Die Störung tritt als Potenzialterm auf. Dieser wird in diesem Zusammenhang *optisches Potenzial*  $V_{\text{opt}}(r)$  genannt und als Summe von drei Anteilen dargestellt:

$$V_{\text{opt}}(r) = V_{\text{stat}}(r) + V_{\text{ex}}(r) + V_{\text{pol}}(r) \quad .$$

$V_{\text{stat}}(r)$  heißt das *statische Potenzial*, das aus der HARTREE-FOCK-Gleichung berechnet wird. Dieser Term beinhaltet die COULOMB-Wechselwirkung des Projektilelektrons mit dem Atom

und dessen Hülle.

Der zweite Summand  $V_{\text{ex}}(r)$  (*exchange*) bezeichnet einen lokalen Potenzialterm, der Elektronenaustausch berücksichtigt. Bei SLATER (1951) wird ein Ausdruck  $V_{\text{ex}} \sim \rho(r)^{1/3}$  angegeben, bei dem die Ladungsdichte  $\rho(r)$  der Hüllenelektronen berücksichtigt wird. FURNESS und MCCARTHY (1973) diskutieren einen Term, der von der Elektronenenergie abhängt und die Nichtlokalität der Austauschwechselwirkung durch ein äquivalentes Zentralpotential ausdrückt.

Das Polarisationspotential  $V_{\text{pol}}(r)$  wird aus einem kurz- und einem langreichweitigen Potenzialterm ( $V_{\text{SR}}$  und  $V_{\text{LR}}$ ) ausgedrückt (TOŠIĆ *et al.*, 2008):

$$V_{\text{pol}}(r) = \begin{cases} V_{\text{SR}}, & \text{falls } r < r_c \\ V_{\text{LR}}, & \text{falls } r \geq r_c. \end{cases}$$

Dabei bezeichnet  $r_c$  den Abstand, bei dem die Potentiale ineinander übergehen. Grundsätzlich propagiert bei dieser Methode das Kontinuumslektron im Potenzial  $V_{\text{LR}}$ . Spinabhängige Wechselwirkungen mit dem Target-Atom werden durch  $V_{\text{SR}}$  berücksichtigt. Ein gebräuchlicher Ausdruck für das kurzreichweitige Potenzial ist vom sogenannten BUCKINGHAM-Typ, wie er bei MILISAVLJEVIĆ *et al.* (2005) benutzt worden ist. Dieser hat einen von der Energie abhängigen Parameter. Für den Radius werden  $r_c = 5,0$  atomare Einheiten angenommen. Der langreichweitige Term hängt von der Dipol-Polarisierbarkeit  $\alpha_d$  des Blei-Atoms ab:  $V_{\text{LR}} = -\alpha_d/(2r^4)$ . Die komplexen Streuamplituden der gestreuten Elektronen werden in spinunabhängige ( $f$ ) und -abhängige ( $g$ ) Anteile geteilt. Der differenzielle Wirkungsquerschnitt und die Spin-Asymmetriefunktion berechnen sich daraus nach:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 + |g|^2 \quad \text{und} \quad S_A = i \frac{fg^* + gf^*}{|f|^2 + |g|^2} \quad (\text{KUMAR } et al., 1994).$$

Die im Rahmen dieser Arbeit diskutierten Rechnungen nach dieser Methode werden mit RMP (*relativistic model potential*) bezeichnet. Die Zusätze -HF und -DF verweisen dabei auf die Verwendung von HARTREE-FOCK- bzw. DIRAC-FOCK-Wellenfunktionen. Die Rechnungen sind von R. SRIVASTAVA und R. K. GANGWAR (*Roorkee University, Roorkee, Indien*) durchgeführt worden. Sie basieren auf Untersuchungen des differenziellen Wirkungsquerschnitts von Blei (TOŠIĆ *et al.*, 2008). Es hat sich jedoch gezeigt, dass Potenzialterme und die Größe  $r_c$  für die Berechnung von Spin-Effekten angepasst werden mussten (HAMELBECK *et al.*, 2009).

### 1.5.2. Die *R*-Matrix-Methode

In einer *close-coupling*-Näherung wird die Wellenfunktion für ein Stoßsystem derart aus orthogonalen Target-Zuständen  $|\Phi_i\rangle$  zusammengesetzt, dass der HAMILTON-Operator des Target-Atoms mit  $N$  Elektronen  $\mathbf{H}^N$  die Diagonalisierung

$$\langle \Phi_{i'} | \mathbf{H}^N | \Phi_i \rangle = E_i \delta_{i'i}$$

erfüllt. Die  $E_i$  sind die Eigenwerte zu den Zuständen  $|\Phi_i\rangle$ ,  $\delta_{i'i}$  ist das KRONECKER-Symbol. Die in der Rechnung berücksichtigten Zustände erhalten die gleiche Gewichtung. Der Lösungsansatz der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung führt zu einem Satz von gekoppelten Gleichungen (sog. *close coupling*).

Beim  $R$ -Matrix-Verfahren wird die vollständige Wechselwirkung zwischen den Stoßpartnern auf einen Radius  $R$  beschränkt. Dieser „Raumbereich“ wird *innere Region* genannt. Die verbleibende *äußere Region* beinhaltet langreichweitige Felder wie die COULOMB-Wechselwirkung. Im Rahmen dieser Arbeit wiedergegebene Rechnungen bedienen sich eines Radius von  $R = 50 a_0$ , wobei  $a_0 = 52.9177 \cdot 10^{-12}$  m der BOHR-Radius ist.

In einer gängigen Methode wird der BREIT-PAULI-HAMILTON-Operator  $\mathbf{H}^{(N+1)}$  verwendet (SCOTT und BURKE, 1980). Für die Beschreibung eines Stoßes zwischen einem Elektron und einem Atom mit  $N$  Elektronen ( $N+1$ -Elektronenproblem) wird er als Summe aus einem nicht-relativistischen und einem relativistischen Anteil dargestellt. Das Target-Atom wird durch einen Rumpf mit  $(N-1)$  oder  $(N-2)$  Elektronen repräsentiert, um den Rechenaufwand zu reduzieren (*frozen core*). Die verbleibenden Valenzelektronen ( $e_1, e_2$ ) treten in Wechselwirkung mit dem Stoßelektron ( $e_3$ ). Die Basis  $\{\Psi_k(e_{1,2}, e_3)\}$  der Gesamtwellenfunktion hat mit diesen Näherungen die Form:

$$\Psi_k(e_{1,2}, e_3) = \mathbf{A} \sum_{i,j} \Phi_i(e_{1,2}) u_{i,j}(e_3) a_{ijk} + \sum_j \theta_j(e_{1,2}, e_3) b_{jk}.$$

Die  $\Phi_i(e_{1,2})$  sind die Basis-Eigenzustände. Mit  $u_{i,j}(e_3)$  werden die Kontinuumszustände des Streuelektrons bezeichnet. Die  $\theta_j(e_{1,2}, e_3)$  repräsentieren die Wechselwirkung zwischen den Elektronen.  $a_{ijk}$  und  $b_{jk}$  sind Entwicklungskoeffizienten, die aus der Diagonalisierungsbedingung

$$\langle \Psi_k | \mathbf{H}^{(N+1)} | \Psi_{k'} \rangle = \delta_{kk'} E_k^{(N+1)}$$

berechnet werden.  $\mathbf{A}$  ist der Antisymmetrisierungsoperator. Die in dieser Arbeit verwendeten Rechnungen nach der BREIT-PAULI- $R$ -Matrix-Methode werden bei BARTSCHAT (1985) beschrieben. Als Bezug hierauf wird im Folgenden die Kurzform BPRM- $n$  verwendet, wobei  $n$  die Anzahl der in die Beschreibung des Targets eingehenden elektronischen Zustände des Target-Atoms bezeichnet.

In letzter Zeit ist diese Methode auf eine vollrelativistische Beschreibung gemäß der DIRAC-Gleichung erweitert worden (ZATSARINNY und FISCHER, 2000). Ein erfolgreiches Konzept ist dabei, die Struktur der Elektronenorbitale des Target-Atoms aus sogenannten nicht-orthogonalen *B-Splines* anzunähern. Diese stellen einen überbestimmten Basissatz dar (sog. *overcomplete basis sets*) und sind stückweise Polynomialfunktionen, die zur Beschreibung der inneren Region der  $R$ -Matrix-Methode herangezogen werden (ZATSARINNY, 2006). Im Folgenden wird auf diese Methode mit der Abkürzung DBSR- $n$  (DIRAC-based B-Spline  $R$ -Matrix)

verwiesen, wobei  $n$  wiederum die Anzahl der einbezogenen Target-Zustände bezeichnet. Parallel zu den in dieser Arbeit dargestellten experimentellen Ergebnissen haben K. BARTSCHAT und O. ZATSARINNY nach beiden Varianten Modellrechnungen durchgeführt. Der BREIT-PAULI-Ansatz entspricht dem, der bei GEESMANN *et al.* (1991) diskutiert wurde. Dabei sind die fünf Zustände der Konfiguration  $6s^2 6p^2$  einbezogen worden ( $\rightarrow$  BPRM-5). Das DBSR-Modell umfasst  $n = 20$  Zustände. Zu den genannten werden die Konfigurationen  $6p^4$  und  $6s 6p^3$  hinzugefügt, also Anregungen der  $s$ -Elektronen. Deren Terme liegen in der Region der Autoionisationszustände (PEJCEV *et al.*, 1981). Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass auf die Einbeziehung von Anregungen der  $p$ -Elektronen der Art  $6s^2 6pnl$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) verzichtet wird, die im Rahmen der Dipolauswahlregeln zu den erlaubten Übergängen gezählt werden. Ein signifikanter Einfluss dieser Konfigurationen auf die elastische Streuung wird somit nicht angenommen.

## 2. Kompaktes Elektronenpolarimeter

Im Rahmen dieser Arbeit ist ein MOTT-Elektronenpolarimeter entwickelt worden, das mit wenig Aufwand von einem Experiment zu einem anderen bewegt werden kann. Wichtig bei der mechanischen Ausführung ist dabei, den Umfang der zu ergreifenden Hochspannungsschutzmaßnahmen so gering wie möglich zu halten. Maßgeblich für die Entwicklung des hier vorgestellten Polarimeters ist daher vor allem ein kompakter Gesamtaufbau.

Im Folgenden wird die Funktionsweise, Entwicklung und Charakterisierung eines konventionellen, kompakten MOTT-Elektronenpolarimeters beschrieben. Abschließend wird damit beispielhaft die Spinpolarisation von Photoelektronen aus einem Gold-Einkristall bestimmt.

### 2.1. Elektronenpolarimetrie

Zur Messung der Polarisation eines Elektronenstrahls bieten sich im Allgemeinen physikalische Prozesse an, die in Abhängigkeit von den Elektronenspin-Projektionen einen messbaren Unterschied bei einer Beobachtungsgröße erzeugen. Detektoraufbauten zur Messung dieser Größen werden Elektronenpolarimeter genannt. Effekte wie der Elektronen-Austausch oder die Spin-Bahn-Wechselwirkung werden hierfür ausgenutzt.

Eine Methode, die von weniger praktischer Bedeutung ist, wird von GAY (1983) diskutiert. Sie basiert auf der inelastischen Elektron-Atom-Streuung. Durch Elektronenaustausch können Atome polarisiert werden. Anregung und Zerfall ausgewählter Zustände sind dabei abhängig von der Spinpolarisation. Eine Analyse des emittierten zirkular polarisierten Lichts lässt auf die Elektronenpolarisation schließen. Dieses Verfahren wird vorwiegend zu Kalibrierungszwecken angewendet (GAY *et al.*, 1996).

Ein starker Austauscheffekt tritt bei der Rückstreuung von niederenergetischen Elektronen ( $\approx 10 - 50$  eV) an Oberflächen magnetisierter Proben, wie z.B. Fe(001) auf (BERTACCO *et al.*, 1999). Die Streuintensität hängt hier von der longitudinalen Spinpolarisation der Elektronen und der oberflächennahen Bandstruktur des Festkörpers ab. In aktuellen Entwicklungen werden auch dünne magnetische Filme wie Fe(100) auf Ag(100) (HILLEBRECHT *et al.*, 2002) oder Fe(001) auf W(001) verwendet (WINKELMANN *et al.*, 2008). Die darauf basierenden Polarimeter werden im Ultrahochvakuum betrieben. Die Proben müssen regelmäßig wieder magnetisiert und in Zeitintervallen von 20 min bis zwei Wochen gereinigt werden. Vorteil ist hier die hohe Streuintensität.

Eine andere etablierte Technik stellen die sogenannten MOTT-Elektronenpolarimeter dar. Zu Grunde liegt hier die Spin-Bahn-Wechselwirkung, deren Beschreibung ursprünglich auf MOTT

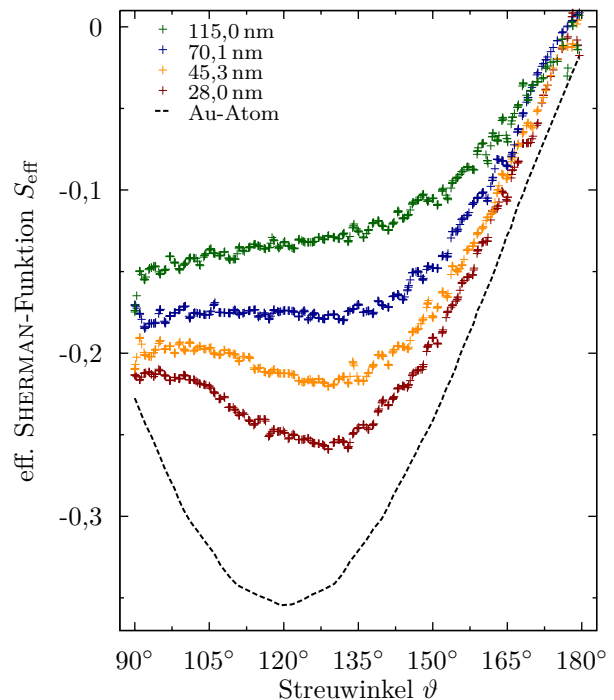
(1929) zurückgeht. Der Mechanismus ist bereits in Abschn. 1.3 besprochen worden. Vorteilhaft ist bei diesen Polarimetern die Funktionalität im Hochvakuum über lange Messzeiten hinweg.

### 2.1.1. Reale Anordnung

In einer realen Anordnung eines Elektronenpolarimeters, das auf der MOTT-Streuung basiert, werden die Elektronen an einer dünnen Folie aus einem Material mit großer Ordnungszahl  $Z$  bei kinetischen Energien von mehreren 10 keV gestreut, da dann die Spin-Bahn-Wechselwirkung einen hohen Betrag aufweist und aufgrund der hohen Packungsdichte der Atome in solchen Folien hohe Streuintensitäten auftreten. Die Polarisation wird aus der gemessenen Links-Rechts-Asymmetrie ermittelt.

Ein übliches Analysiertarget ist Gold ( $Z = 79$ ). Der Verlauf der SHERMAN-Funktion hat ein ausgeprägtes Minimum mit einem Betrag  $|S| \geq 0,3$  bei Streuwinkeln um  $\vartheta \approx 120^\circ$  im genannten Bereich der Streuenergie (KESSLER, 1985). Wird als Analysier-Target eine dünne Folie von einigen 10 nm Dicke verwendet, wird aufgrund von nicht zu vermeidender Mehrfachstreuung die gemessene Asymmetrie vermindert.

Die SHERMAN-Funktion wird durch die sogenannte *effektive*  $S_{\text{eff}}$  ersetzt, die in einer Kalibrierung bestimmt wird. In einer theoretischen Behandlung mit Monte-Carlo-Methoden berechnen QIAO und KAKIZAKI (1997) dieses  $S_{\text{eff}}$  bei 50 keV Streuenergie für verschiedene Foliendicken. Es zeigt sich in der Arbeit eine gute Übereinstimmung mit verschiedenen Experimenten, unter anderem zu den Ergebnissen einer Absolutbestimmung in einem Doppelstreuexperiment bei GELLRICH und KESSLER (1991). Die Modell-Ergebnisse sind in Abbildung 2.1 dargestellt. Im Vergleich zum monoatomaren Target ist das Minimum der SHERMAN-Funktion bei  $\vartheta = 120^\circ$  weniger stark ausgeprägt und zu größeren Winkeln verschoben. Für die mittleren Foliendicken (45,3 nm und 70,1 nm) ist ein Winkelbereich zu erkennen, bei dem der Wert von  $S_{\text{eff}}$  wenig schwankt. Er überstreicht die Streuwinkel  $90^\circ \leq \vartheta \leq 150^\circ$ . Diese Ergebnisse zeigen, dass bei der Realisierung eines MOTT-



**Abb. 2.1.:** Die effektive SHERMAN-Funktion  $S_{\text{eff}}$  von Gold bei 50 keV für verschiedene Foliendicken nach QIAO und KAKIZAKI (1997). Zum Vergleich ist der Verlauf für atomares Gold gezeigt.



Elektronenpolarimeters ein großer Streuwinkelbereich  $\Delta\vartheta$  mit annähernd konstantem  $S_{\text{eff}}$  zur Spinanalyse genutzt werden kann. Es wird dadurch über die Werte in diesem Winkelbereich gemittelt. Werden Foliendicken zwischen etwa 28 nm und 70 nm verwendet, wird der Wertebereich von  $S_{\text{eff}}$  dadurch eingegrenzt auf:  $-0,23 \leq S_{\text{eff}} \leq -0,18$ .

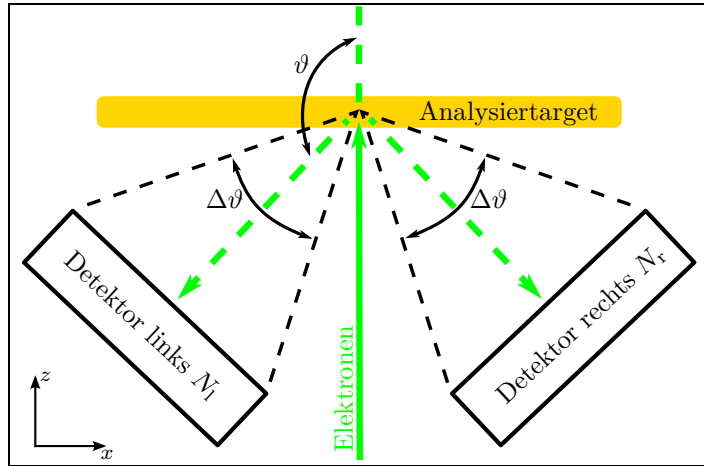
Ein prinzipieller Aufbau eines solchen Elektronenpolarimeters ist in Abbildung 2.2 gezeigt. Die in  $z$ -Richtung einfallenden Elektronen werden am Analysiertarget gestreut und in zwei symmetrisch angeordneten Detektoren unter den mittleren Winkeln  $\pm\vartheta$  nachgewiesen, deren Größe und Abstand den Öffnungskonus  $\Delta\vartheta$  festlegen. Der Winkel  $\vartheta$  wird am Minimum der SHERMAN-Funktion gewählt. Es wird aus den registrierten Ereignissen die Links-Rechts-Asymmetrie der Spin-Asymmetriefunktion gemäß der Abbildung 1.3 bestimmt. In einem realen Detektor wird dieser Asymmetriewert  $A$  für eine feste Spinorientierung ( $\uparrow\downarrow$ ) als Überschussgleichung aus den Zählraten der Detektoren  $N_l$  und  $N_r$  berechnet:

$$A = \frac{N_l - N_r}{N_l + N_r} . \quad (2.1)$$

Hierbei muss bedacht werden, dass zum einen instrumentelle Gegebenheiten und zum anderen Variationen im einfallenden Elektronenstrahl diese Messung beeinträchtigen. Es ergeben sich damit zwei Beiträge zur gemessenen Links-Rechts-Asymmetrie in Gleichung (2.1). Verschieden starke Nachweiseffizienzen der verwendeten Elektronenzähler und nicht exakt gleiche Raumwinkel der Zählkanäle, die unter Umständen aus Fertigungstoleranzen entstehen, werden unter dem Begriff *instrumentelle Asymmetrie*  $A_{\text{inst}}$  zusammengefasst. Sie ist für beide Spinorientierungen gleich. Verändert sich die Strahlage oder Position des Fokus auf dem Analysiertarget beim Umkehren der Spinpolarisation, spricht man von *falscher Asymmetrie*  $A_f$ , die sich für die beiden Orientierungen unterscheidet. Generell ist diese etwa drei Größenordnungen geringer als die instrumentelle (KESSLER, 1985). Die gemessene Asymmetrie  $A$  aus (2.1) setzt sich folglich aus drei Summanden zusammen:

$$A = A_0 + A_{\text{inst}} + A_f \quad \text{mit } A_0 = P_y S_{\text{eff}} . \quad (2.2)$$

Die zu bestimmende, echte Asymmetrie wird hier mit  $A_0$  bezeichnet, wobei in Gleichung (1.31) die Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  durch  $S_{\text{eff}}$  ersetzt wird. Da die SHERMAN-Funktion



**Abb. 2.2.:** Prinzipieller Aufbau eines Mott-Detektors in der  $xz$ -Ebene. Die in dieser Konfiguration messbare Polarisationskomponente  $P_y$  steht senkrecht auf der Zeichnungsfläche.

zur Streuebene symmetrisch ist, bietet es sich an, über die beiden spiegelbildlichen Prozesse ( $A^\uparrow$  und  $A^\downarrow$ ) zu mitteln:

$$A^{\uparrow\downarrow} = \frac{A^\uparrow - A^\downarrow}{2} = A_0 + \frac{1}{2} (A_f^\uparrow - A_f^\downarrow). \quad (2.3)$$

Auf diese Weise wird die Messung der Asymmetrie um instrumentelle Effekte bereinigt. Der Einfluss des zweiten Summanden auf die Asymmetrie ist gering. Wenn eine entsprechend präzise Auflösung der Spinpolarisation erzielt werden soll, werden unter  $\vartheta = \pm 45^\circ$  sogenannte Monitorzähler eingesetzt. Die SHERMAN-Funktion hat an dieser Stelle einen Nulldurchgang, wodurch von Null abweichende Asymmetriewerte zur Korrektur genutzt werden. Bei ESTER (1989) wird die Einrichtung einer solchen Anordnung ausführlich beschrieben. Wenn die Mittelung über beide Spinstellungen nicht realisiert werden kann, kann ein unpolarisierter Elektronenstrahl dazu genutzt werden, den Term  $(A_{\text{instr}} + A_f)$  in Gleichung (2.2) abzuschätzen.

### 2.1.2. Polarimeterkenngröße Effizienz

Zur Charakterisierung der Analysierfähigkeit eines Elektronenpolarimeters wird die Effizienz  $\varepsilon$  definiert. Sie wird formell aus der Fehlerbetrachtung der gemessenen Asymmetrie abgeleitet. Es wird hier angenommen, dass die instrumentelle und die falsche Asymmetrie verschwinden:  $A_{\text{instr}} = A_f = 0$ , d.h., dass  $A = A_0 = P_y S_{\text{eff}}$  gilt. Die Unsicherheit von  $S_{\text{eff}}$  sei vernachlässigbar gering. Dann wird gemäß dem Fehlerfortpflanzungsgesetz die Unsicherheit von Gleichung (2.1) berechnet:

$$(\Delta A)^2 = \left( \frac{\partial A}{\partial N_1} \right)^2 (\Delta N_1)^2 + \left( \frac{\partial A}{\partial N_r} \right)^2 (\Delta N_r)^2 = \frac{4 N_1 N_r}{(N_1 + N_r)^3}. \quad (2.4)$$

Für die Zählraten wird die Unsicherheit nach der POISSON-Statistik angegeben:  $\Delta N_{r,1} = \sqrt{N_{r,1}}$ . Um eine Beziehung in Gleichung (2.4) zu den Größen  $S_{\text{eff}}$  und  $P_y$  herzustellen, wird folgender Ausdruck gebildet:

$$1 - A^2 = \frac{4 N_1 N_r}{(N_1 + N_r)^2} = 1 - (S_{\text{eff}} P_y)^2 \Rightarrow (\Delta A)^2 = \frac{1}{N_1 + N_r} \left[ 1 - (S_{\text{eff}} P_y)^2 \right]. \quad (2.5)$$

Bei einer Messung der Spinpolarisation  $P_y = A/S_{\text{eff}}$  ergibt sich somit eine Unsicherheit von:

$$(\Delta P_y)^2 = \left( \frac{\Delta A}{S_{\text{eff}}} \right)^2 \stackrel{(2.5)}{=} \frac{1}{S_{\text{eff}}^2} \frac{1}{N_1 + N_r} \left[ 1 - (S_{\text{eff}} P_y)^2 \right]. \quad (2.6)$$

Die Messung wird also umso genauer, je größer das Produkt  $S_{\text{eff}}^2 (N_1 + N_r)$  wird. Hieraus wird die Polarimeter-Effizienz  $\varepsilon$  definiert, wobei die Streuzählrate  $(N_1 + N_r)$  auf die in die Detektoranordnung einfallende Gesamtteilchenzahl  $N_0$  normiert wird:

$$\varepsilon = S_{\text{eff}}^2 \frac{N_1 + N_r}{N_0}. \quad (2.7)$$

Diese Größe ist ein Vergleichswert, um unterschiedliche Verfahren und Bautypen miteinander vergleichen zu können. Die Werte von  $\varepsilon$  liegen im Bereich von  $10^{-8} \leq \varepsilon \leq 10^{-2}$ .

## 2.2. Designstudie

Bei GAY und DUNNING (1992) wird ein Überblick über die Bautypen verschiedener MOTT-Elektronenpolarimeter gegeben. Es werden grundsätzlich zwei Ausführungen unterschieden, die konventionelle und die Verzögerungsfeld-Bauform. Bei letzterer werden die Elektronen in einem sphärischen oder zylindrischen elektrostatischen Feld auf die Goldfolie zubeschleunigt und nach der Streuung gegenläufig in demselben Feld auf Laborpotenzial abgebremst, wo sie dann in Teilchenzählern nachgewiesen werden. Diese Vorgehensweise verkleinert den effektiven Öffnungswinkel  $\Delta\vartheta$  (s. Abb. 2.2), da der Elektronenstrahl beim Abbremsen stark defokussiert wird und somit die Effizienz stark erniedrigt ist.

Bei der konventionellen Bauform sind die Detektoren in unmittelbarer Nähe des Analysier-Targets untergebracht. Auf diese Weise werden ein breiter Öffnungswinkel  $\Delta\vartheta$  ausgenutzt und somit eine hohe Streuintensität erzielt. Deshalb ist eine konventionelle Detektoranordnung vorzuziehen.

Um eine präzise Spinanalyse gewährleisten zu können, wird ein wohldefinierter Fokus auf dem Analysier-Target benötigt. Weiterhin ist eine Konstruktion vorteilhaft, deren Komponenten einfach montiert werden können und die einer geringen Anzahl an Hochspannungsdurchführungen bedarf. Aus apparativen Gegebenheiten wird die Grundfläche der gesamten Baugruppe auf  $400 \times 300 \text{ mm}^2$  eingegrenzt. Für den Anschluss an einen Vakuumrezipienten ist ein Flansch der Norm DN 150 KF vorgesehen. Als kompakte Versorgung für die Beschleunigungsspannung kommen Hochspannungsmodule in Frage, wie z. B. von APPLIED KILOVOLTS, deren Gehäuse die Abmessungen  $230 \times 135 \times 60 \text{ mm}^3$  haben. Diese werden für Spannungen bis 50 kV konfektioniert. Für höhere Werte müssten „herkömmliche“ Netzteile verwendet werden, die einen viel höheren Platzbedarf haben. Somit wird die Streuenergie zu 50 keV festgelegt.

Im Zuge der Designstudie wird zuerst ein Entwurf der Bauform in einer Simulationssoftware auf die entstehende Feldkonfiguration hin optimiert. Danach wird eine Einschussoptik hinzugefügt und die Abbildung eines Modell-Elektronenstrahls simuliert. Die Konstruktion eines Prototyps wird im Anschluss vorgestellt.

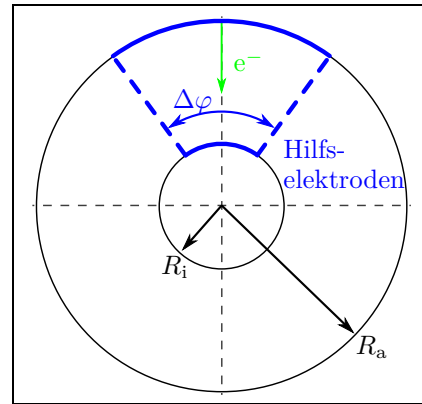
### 2.2.1. Simulation der Bauform

Um die Bauform des Elektronenpolarimeters effektiv zu gestalten, wird zunächst der Feldverlauf simuliert. Zur Darstellung und Evaluation der Elektrodenkonfigurationen wird das Programm SIMION (Version 7.0) verwendet, das mit einem numerischen iterativen Verfahren die LAPLACE-Gleichung im Raumbereich der simulierten Detektoranordnung löst. Die in der folgenden Besprechung verwendeten Grafiken sind dem Programm entnommen.

Bei der Wahl der Polarimeter-Geometrie wird das sphärische Potenzial eines Kugelkondensators ausgenutzt, um den Elektronenstrahl auf das Target zu fokussie-

ren. In einer solchen Elektrodenanordnung ist die Feldstärke  $E(r) \sim r^{-2}$ . Die elektrische Kraft auf eine Ladung zeigt räumlich isotrop auf das Zentrum, auf das ein räumlich divergenter Strahl fokussiert wird, der entlang des elektrischen Feldes eintritt. Daher wird hier das Analyziertarget untergebracht. Beim Entwurf der Elektrodenkonfiguration des Detektoraufbaus wird entlang der Elektronenbahnen ein sphärischer Feldverlauf nachgebildet. Als geometrische Grundform wird ein konischer Ausschnitt aus zwei konzentrischen Kugelschalen gewählt, die seitlich durch feldformende Elektroden (Hilfselektroden) abgeschlossen werden. Diese Vorgehensweise ist angelehnt an die Entwicklung eines neuartigen Zylinderspiegel-Spektrometers von HERTING *et al.* (2008).

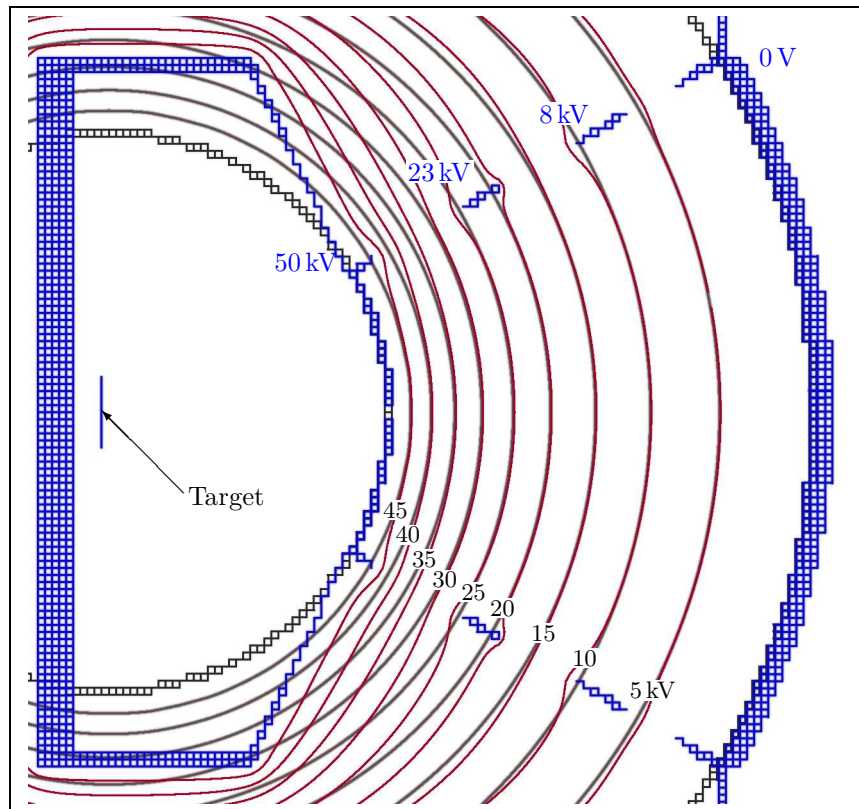
Das Prinzip ist in Abb. 2.3 gezeigt. Das innere Segment hat den Radius  $R_i$ , das äußere  $R_a$ . Diese beiden Bauteile werden Innen- bzw. Außenelektrode genannt. Der ausgewählte Bogenwinkel wird mit  $\Delta\varphi$  bezeichnet, die Einfallsrichtung



**Abb. 2.3.:** Grundlegende Geometrie des Polarimeters: Außen- und Innenelektrode als Segmente aus Kugelschalen mit Hilfselektroden.

der Elektronen durch einen grünen Pfeil repräsentiert. Der Radius der inneren Elektrode wird zum einen an Hand bestehender Konstruktionen der Arbeitsgruppe abgeschätzt, zum anderen ergibt er sich aus dem Mindestplatzbedarf der verwendeten Detektoren, der Goldfolie und einem Strahlsumpf. Aus der Abschätzung eines Gehäuses, das diese Komponenten aufnimmt, ergibt sich ein Innenradius von mindestens  $R_i \geq 40$  mm. Der Radius der Außenelektrode lässt sich aus geeigneten Hochspannungsschutzmaßnahmen und den damit verbundenen Mindestabständen abschätzen. Begonnen wird mit  $R_a = 100$  mm.

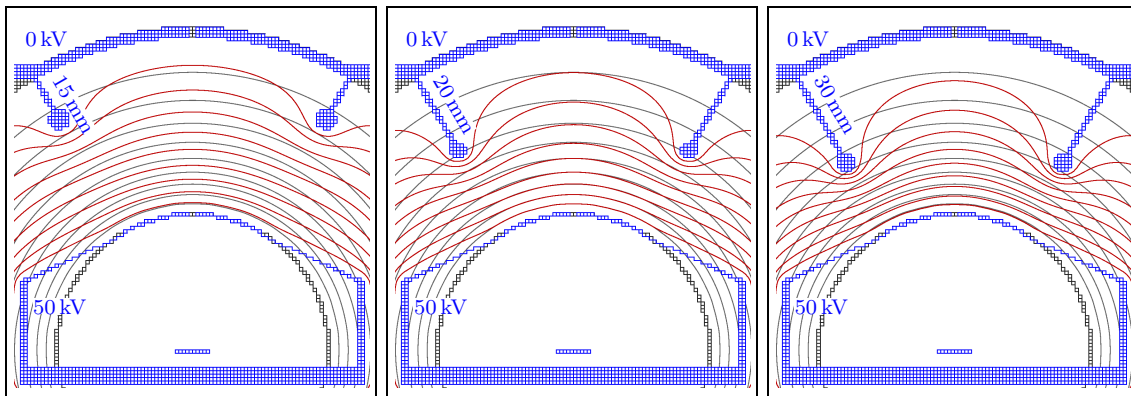
In einem ersten Entwurf wird überprüft, ob diese Bauform zur Simulation sphärischer Felder geeignet ist. Als Ausschnitt wird ein Öffnungswinkel von  $\Delta\varphi = 60^\circ$  gewählt. Für den seitlichen Feldabschluss werden zwei zusätzliche Ringelektroden in gleichmäßigem Abstand zwischen Innen- und Außenelektrode untergebracht, an denen feldformende Kragen angebracht werden. Der Querschnitt der Hilfselektroden wird rechteckig mit den Maßen  $1 \times 10$  mm gewählt. Die Abstände der Elektrodenmittelpunkte vom Zentrum betragen 60 und 80 mm. In Abb. 2.4 ist eine Simulation dieser Konfiguration dargestellt. Durch die Wahl der Streuenergie 50 keV ist die Innenelektrode auf das entsprechende Potenzial festgelegt. Die Außenschale definiert das 0 V-Potenzial, also die elektrische Bezugsmasse. Die Spannungen der Hilfselektroden werden so lange variiert, bis die Abweichung von einem sphärischen Feldverlauf von der Simulations-Software nicht mehr aufgelöst werden kann. Die so erhaltenen Werte (8 kV und 23 kV) sind in blauer Färbung neben den Hilfselektroden eingetragen. An den darin gezeigten Äquipotenziallinien wird die Übereinstimmung mit dem Feld eines Kugelkondensators derselben Dimension in-



**Abb. 2.4.:** Simulation einer zylindersymmetrischen Konfiguration (Querschnittsansicht). Blau: Entwurf mit zwei ringförmigen Hilfselektroden; rot: Äquipotenziallinien von 5 bis 45 kV mit 5 kV Abstand. Zum Vergleich ist ein Kugelkondensatorfeld (schwarz) hinterlegt.

nerhalb eines großen Raumbereiches deutlich. Diese erste Simulation zeigt, dass die Methode prinzipiell auf die gegebene Aufgabenstellung anwendbar ist. Die äußere Dimensionierung und die Wahl der Hilfselektroden hat hier zu einem „simulierten“ sphärischen Feld innerhalb des Elektrodenzwischenraums geführt.

In einem zweiten Entwurf wird eine Elektrodenkonfiguration untersucht, die ohne zusätzliche Hilfselektroden auskommt, die andere Potentiale tragen als 0 und 50 kV. Dadurch entfällt zum einen in einer realen Konstruktion eine mechanische, isolierte Befestigung innerhalb des Vakuumrezipienten. Zum anderen werden für eine solche Konfiguration laborseitig keine Hochspannungsteiler mit elektrischen Durchführungen benötigt. Die Abmessungen  $R_i = 40$  mm,  $R_a = 100$  mm und  $\Delta\varphi = 60^\circ$  aus der ersten Simulation werden zunächst übernommen und auf eine mechanische Umsetzung hin von den Abmessungen her noch ein wenig modifiziert. Verschiedene Entwurfsskizzen werden schrittweise auf die Realisierbarkeit mit dem Konstrukteur der feinmechanischen Werkstatt des Instituts diskutiert und angepasst. Maßgeblich sind dabei Materialeigenschaften und -stärken sowie Befestigung und Isolation der entsprechenden Komponenten. Innen- und Außenradius werden anhand dieser Vorgehensweise auf  $R_i = 45$  mm und  $R_a = 90$  mm abgeändert. Als feldformende Hilfselektrode wird ein konischer Ring-Ausschnitt

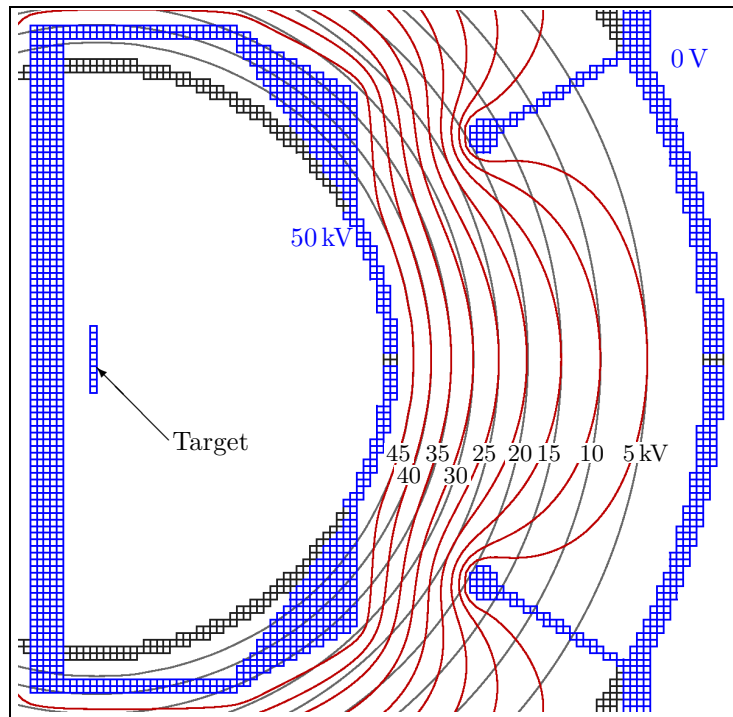


**Abb. 2.5.:** Entwicklungsschritte zur Festlegung einer Hilfselektrode auf Massepotenzial: Links beträgt die Ausdehnung 15 mm, in der Mitte 20 mm und rechts 30 mm. Die Äquipotenzialflächen für 5 bis 45 kV sind in Abständen von 5 kV eingezeichnet (rot). Zum Vergleich ist jeweils ein sphärisches Feld hinterlegt (schwarz).

auf Massepotenzial gewählt, dessen Ausdehnung in Simulationen so angepasst wird, dass wiederum ein sphärisches Feld entlang der Zentralachse erzielt wird. In Abb. 2.5 sind drei Entwürfe mit den Ausdehnungen 15 mm, 20 mm und 30 mm im Vergleich zu einem Kugelkondensator dargestellt. Die Kanten, die in Richtung des Hochspannungspotenzials weisen, werden hier durch einen Kragen mit 5 mm durchmessendem rundem Querschnitt abgeschlossen, um hohe Gradienten an dieser Stelle zu verhindern. Diese Maßnahme beugt der Feldemission vor. An den Simulationen wird der feldformende Einfluss deutlich. Die Wahl einer Ausdehnung von 20 mm zeigt bereits eine gute Übereinstimmung der Äquipotenzialflächen mit einem sphärischen Feld. Damit ist die grundlegende Elektrodenkonfiguration festgelegt. Eine abschließende Anpassung des Innengehäuses erfordert, schräge Flächen an der Innenelektrode zu begradigen. Die verbleibenden Abmessungen bleiben jedoch erhalten. Die Simulation des fertigen Entwurfs (Abb.2.6) zeigt, dass diese Anpassung des Querschnitts den Feldverlauf zwischen Außen- und Innenelektrode nicht beeinflusst. Die Abmessungen und Äquipotenzialflächen werden wie bei den vorangehenden Darstellungen gewählt.

Um eine möglichst hohe Variabilität bei der Verwendung des Detektors zu gewährleisten, wird diesem Entwurf eine elektrostatische 1Elektronenoptik hinzugefügt. So kann das Polarimeter an verschiedenen Aufbauten eingesetzt werden, ohne dass eine zusätzliche Erweiterung bestehender Komponenten benötigt wird. Es sind lediglich kleinere Anpassungen der jeweiligen Apparatur erforderlich.

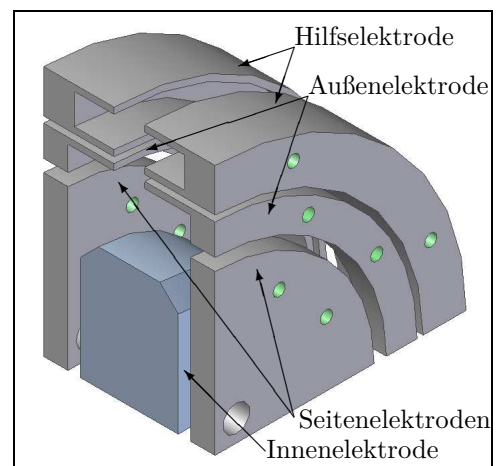
Als elektrostatische Transportoptik wird das vierelementige Design von KUREPA *et al.* (1974) mit einem Innendurchmesser von 16 mm übernommen. Es hat den Vorteil, für Transportenergien von 10 bis 100 eV gleichmäßige Abbildungseigenschaften zu besitzen. Die Gesamtlänge ergibt sich nach der Skalierung zu 327 mm. Am Eintritt des ersten und am Aus-



**Abb. 2.6.:** Simulation der finalen Bauform. Gezeigt sind die Feldlinien (rot) des erzeugten elektrischen Feldes im Vergleich zum sphärischen Verlauf (schwarz). Die Elektroden sind blau eingefärbt. Die Äquipotenziallinien sind im Abstand von 5 kV dargestellt.

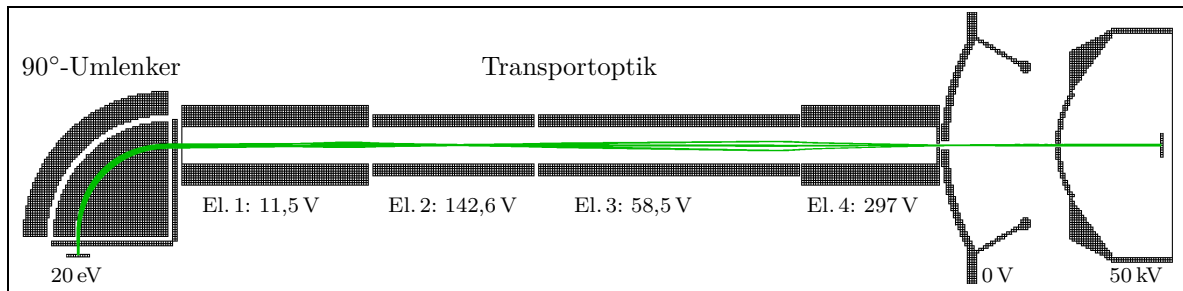
tritt des letzten Linsenelements sind Kreisblenden mit 2 mm Durchmesser vorgesehen. Der Anbau des Elektronenpolarimeters an ein Oberflächenexperiment (Abschn. 2.5) erfordert zusätzlich einen elektrostatischen, geschlitzten 90°-Umlenker vor dem ersten Linsenelement.

Er basiert auf einem Spektrometer-Entwurf nach JOST (1979). Eine Darstellung des 90°-Umlenkers zeigt Abbildung 2.7. Die dort vorgestellte Elektrodenkonfiguration erzeugt ein sogenanntes *simuliertes* sphärisches Feld entlang der Sollbahn der transmittierten Elektronen, deren Radius hier 26 mm beträgt. Der Radius der Innenelektrode beträgt 20 mm. Die Außenelektrode mit einem Innenradius von 32 mm wird geschlitzt ausgeführt, so dass beispielsweise ein Lichtstrahl durch die Elektrodenanordnung geführt werden kann. Eine solche Anwendung wird später in Abschnitt 2.5 vorgestellt. Um einen Felddurchgriff durch den Schlitz



**Abb. 2.7.:** Zeichnung eines geschlitzten 90°-Umlenkers ohne Ein- und Austrittsblenden nach JOST (1979).

zu kompensieren, wird oberhalb der Außenelektrode eine zusätzliche, separat kontaktierbare, zweiteilige Hilfsselektrode angebracht, deren Außenradius von 41 mm die Gesamtabmessung



**Abb. 2.8.:** Simulation von Elektronenbahnen durch die Anordnung aus 90°-Umlenker, Transportoptik und Polarimeter: Primärenergie 20 eV. Die Sollbahnenergie des Umlenkens wird hier zu 50 eV gewählt. Die Linsenelemente (EL. 1-4) sind mit ihren eingestellten Potenzialen beschriftet.

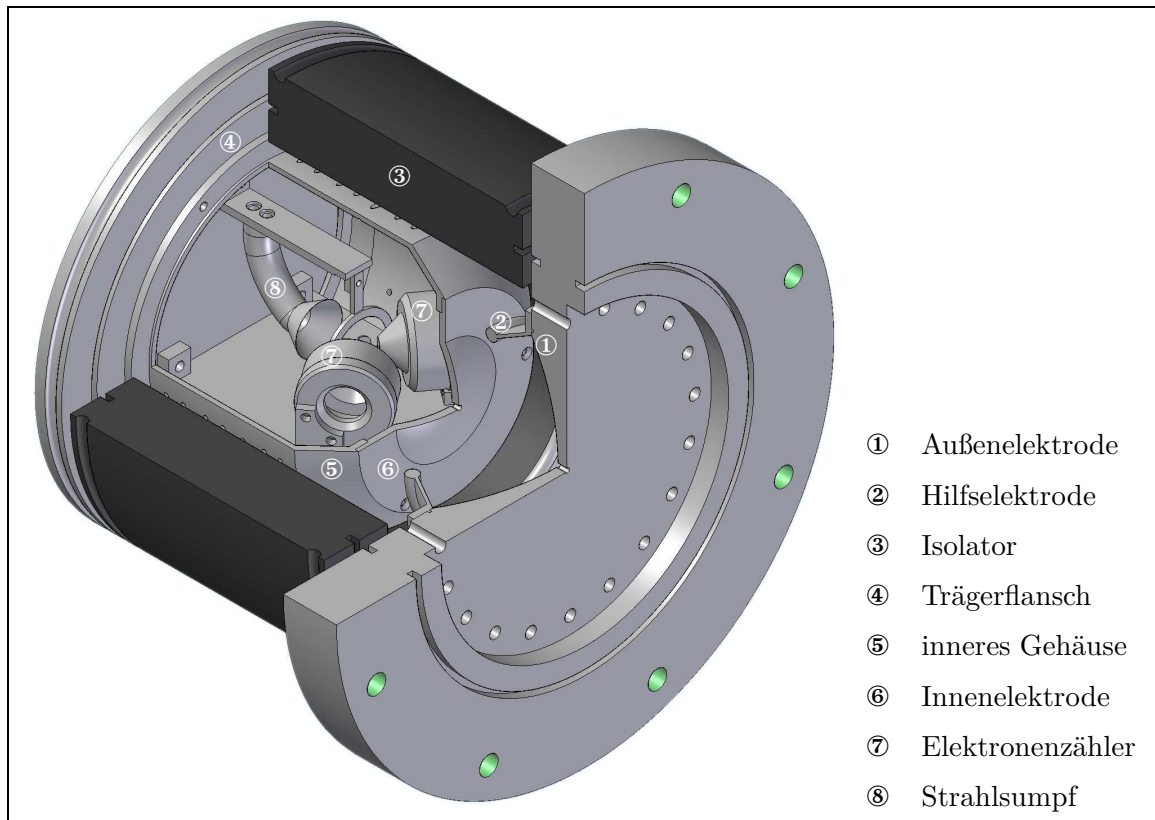
des Bauteils festlegt. In Abb. 2.8 wird eine Simulation der Elektronenbahnen durch die drei Baugruppen dargestellt. Die Elektronen starten unterhalb des 90°-Umlenkens von einer Potenzialfläche aus, werden durch die Transportoptik geführt und schließlich in dem Elektronenpolarimeter auf das Target fokussiert. Bei der Durchführung der Simulationen werden die Startbedingungen der Elektronen so festgelegt, dass anfangs die Ausdehnung des Strahlbündels 1 mm im Durchmesser beträgt. Es wird eine Winkeldivergenz von  $\pm 3^\circ$  angenommen. Auf diese Weise wird ein nicht-punktförmiger Quellbereich mit leicht divergenten Elektronen nachgebildet. Die Simulationen werden exemplarisch für die Primärenergien 10 eV, 20 eV und 50 eV durchgeführt. Dies ist der Bereich, in dem im Allgemeinen Niederenergiestreuexperimente betrieben werden. Nach dem Durchlaufen des 90°-Umlenkens ergibt sich ein leicht asymmetrischer Strahlquerschnitt. Für die genannten Parameter wird eine Fokussierung auf der Folie erreicht, deren Durchmesser  $d \leq 1$  mm beträgt.

### 2.2.2. Konstruktion des Prototypen

Ein nach der Designstudie aus dem vorherigen Abschnitt angefertigter Prototyp wird für den Betrieb im Hochvakuum ausgelegt. Die Konstruktion der mechanischen Komponenten wird hier vorgestellt. Die Abmessungen werden aus den Simulationen übernommen. Der Prototyp des Elektronenpolarimeters ist in Abb. 2.9 als dreidimensionale Ausschnittsansicht dargestellt. Der Außendurchmesser beträgt 175 mm, die Gesamtlänge 225 mm. Die Außenelektrode ① mit einem Radius von 90 mm ist in einen Flansch aus Edelstahl der Norm DN 150 KF eingelassen. Daran befestigt ist die Hilfselektrode ②. Die Flächen sind poliert. Zur Entlüftung des dahinterliegenden Volumens ist ein Kranz von Bohrungen vorgesehen. Diese Bauteile werden auf einer Seite eines zylindrischen, hohlen Kunststoffisolators ③ montiert.

Die Komponenten auf Hochspannungspotenzial werden von der anderen Seite eingeschoben. Auf einem Trägerflansch der Norm DN 150 KF ④ befindet sich ein Gehäuse aus Aluminium ⑤





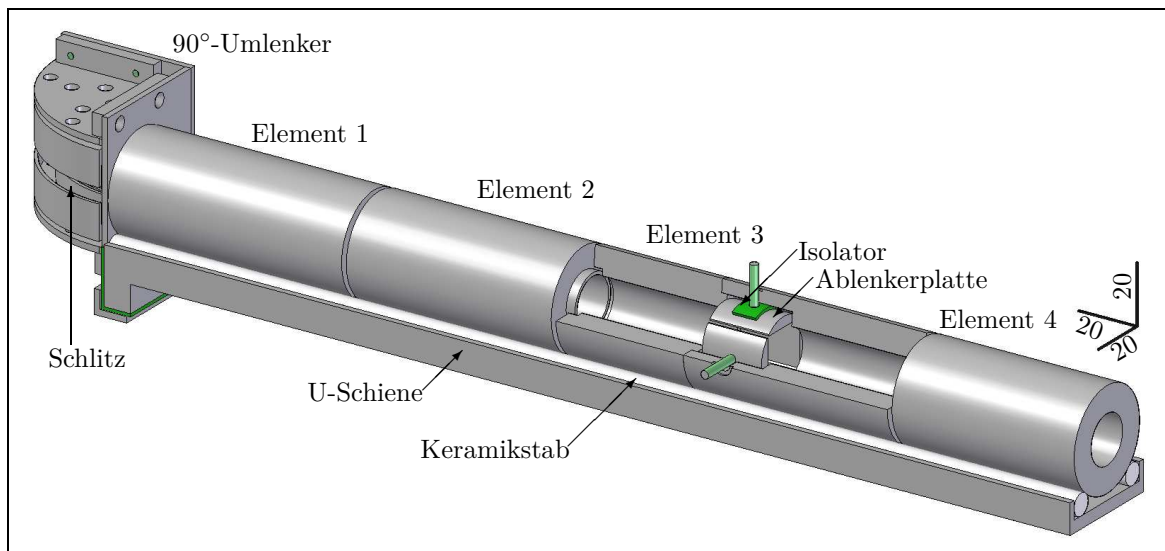
**Abb. 2.9.:** 3-dimensionale Ausschnittsansicht des Elektronenpolarimeters. Dichtungen, elektrische Durchführungen und Flanschüberwürfe sind hier nicht dargestellt.

mit seitlichen Entlüftungsöffnungen, an dem die aus Edelstahl gefertigte, polierte Innenelektrode ⑥ angeschraubt ist. An einer 100 mm durchmessenden Öffnung wird ein weiterer Flansch der Norm DN 100 KF befestigt, an dem Halterungen für die Elektronenzähler ⑦, die Goldfolie und einen Strahlsumpf ⑧ angebracht sind. Diese innerhalb des Gehäuses liegenden Bauteile sowie dessen Innenwand sind graphitisiert, um die Emission von Sekundärelektronen aus den Oberflächen zu minimieren. Als Dichtungen werden VITON-Ringe verwendet. Die Goldfolie besteht aus einem dünnen organischen Trägermaterial, auf das in einer Vakuumapparatur Gold aufgedampft wird. Das Herstellungsverfahren wird bei AFTING (1995) beschrieben.

Zum Elektronennachweis bei 50 keV werden runde ionenimplantierte Oberflächensperrschichtzähler (CANBERRA PIPS PD 300-15-300 AM) mit 300 mm<sup>2</sup> aktiver Fläche verwendet. Sie werden eingefasst in Gehäuse mit einer konischen Öffnung, die den sichtbaren Winkelbereich der Folie begrenzt und nicht von der Goldfolie herrührende Elektronen blocken soll. Zur elektrischen Kontaktierung sind zwei koaxiale Vakuumdurchführungen vorgesehen. Die vakuumseitige Verkabelung besteht aus RG174-Kabel mit PTFE-Isolator. Gewinkelte SMA-Steckverbinder stellen den Kontakt zum Elektronenzähler her. Die Konstruktion ist so ausgelegt, dass das Hochspannungspotenzial laborseitig an den rückwärtigen Trägerflansch angelegt wird. Zum Schutz des Laborpersonals wird eine Abdeckung aus 6 mm starkem Plexiglas über die Kom-

ponenten gestülpt. Zusätzlich zu den vorgestellten Komponenten existiert ein Sichtflansch der Norm DN 100 KF, der im Austausch für den rückseitigen Trägerflansch montiert werden kann. Daran ist ein Leuchtschirm derart befestigt, dass er die Position der Goldfolie einnimmt. Er ermöglicht eine Kontrolle des Fokus.

Eine Zeichnungsansicht der elektrostatischen Elektronenoptik wird in Abb. 2.10 gezeigt. Die Materialien werden so ausgewählt, dass sie auch im Ultrahochvakuum verwendet werden können. Die Transportoptik wird auf einer U-Schiene aus Edelstahl befestigt. Die Linsenelemente aus einer bleifreien Aluminiumlegierung ruhen auf Keramikstäben. Damit die Abbildung der Elektronenstrahlen nicht durch statische Aufladungen an der passivierten Oberfläche beeinflusst wird, werden die inneren Flächen graphitiert. Die Befestigung erfolgt durch Schrauben, die in Isolatoren aus VESPEL geführt werden. Im dritten Linsenelement werden zusätzlich sogenannte Ablenker mittig eingebaut. Es handelt sich dabei um zwei gekreuzte Plattenkondensatoranordnungen. Zwischen diesen wird zusätzlich eine symmetrische Potenzialdifferenz angelegt, um die relative Lage der Elektronenstrahlen beim Durchgang zu korrigieren. Ein Ende der Schiene ist abgewinkelt, wo die Baugruppe des 90°-Umlenkers aufgenommen wird. Die Befestigung der Komponenten ist generell angelehnt an andere Lösungen der Arbeitsgruppe und wird hier nicht weiter behandelt. Die Elektroden des Umlenkers sind aus unmagnetischem Edelstahl gefertigt und werden durch rechtwinklig angeordnete Potenzialbleche getragen. Seitliche Wände nehmen über Keramikisolatoren die Bauteile auf. Die elektrostatischen Komponenten werden über die Befestigungsschrauben kontaktiert.



**Abb. 2.10.:** Zeichnungsansicht der elektrostatischen Transportoptik und des 90°-Umlenkers mit Teilausschnitt: Gesamtlänge 371 mm, Maßangaben in mm. Im Teilausschnitt sind die Platten des Ablenkers sichtbar.

### 2.3. Elektrische Versorgung

Wie bei der mechanischen Konstruktion wird die elektrische Versorgung maßgeblich kompakt ausgeführt. Für die Oberflächensperrschichtzähler wird eine Versorgungsspannung benötigt, die auf dem Potenzial der Beschleunigungsspannung erzeugt wird. Die Übertragung des ausgekoppelten Zählsignals zur weiteren Datenverarbeitung im Labor erfordert weiterhin eine galvanische Trennung. Ein Blockdiagramm der elektrischen Versorgung ist in Abb. 2.11 dargestellt.

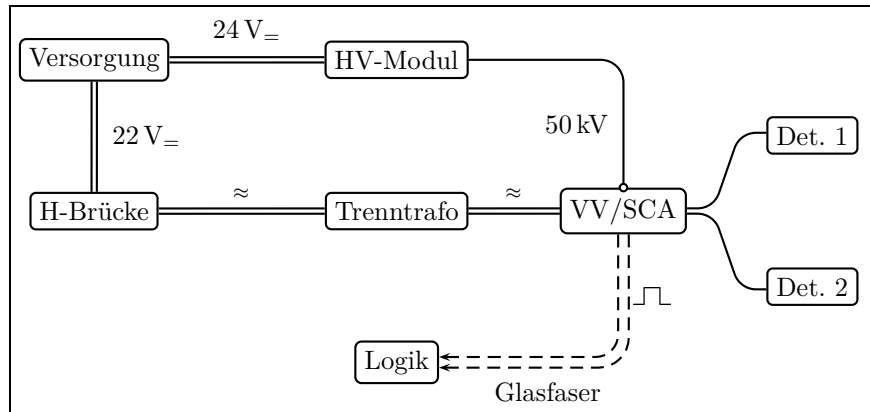


Abb. 2.11.: Blockdiagramm der elektrischen Versorgung des Elektronenpolarimeters.

Die positive Beschleunigungsspannung von  $U = 50 \text{ kV}$  wird durch ein Hochspannungsmodul (HV-Modul) vom Typ APPLIED KILOVOLTS HW050P erzeugt. Elektrische Energie für die hochspannungsseitigen Komponenten wird durch einen Trenntransformator übertragen. Generell steigt seine Energiedichte mit der verwendeten Frequenz. Dieser Effekt wird unter anderem in modernen Schaltnetzteilen ausgenutzt und ermöglicht eine platzsparende Ausführung. Hier wird eine von der Institutswerkstatt angefertigte sogenannte *H-Brücken*-Schaltung verwendet, die eine angelegte Gleichspannung ( $15 \text{ V} - 24 \text{ V}$ ) in eine symmetrische Rechteck-Wechselspannung der Frequenz  $20 \text{ kHz}$  überführt. Sie wird an die Primärseite des Trenntransformators angelegt. Die Platine hat die Abmessungen  $100 \times 70 \text{ mm}^2$ . Eine Fotografie ist in Abb. 2.12 gezeigt. Darin sind rechts und links die BNC-Anschlüsse der Primär- bzw. Sekundärwicklung zu sehen. Die galvanische Trennung von labor- und hochspannungsseitigen Komponenten wird dadurch gewährleistet, dass für die Sekundärwicklung Hochspannungskabel mit einer Prüfspannung von  $50 \text{ kV}$  verwendet wird. Der Schirm wurde entfernt, sodass lediglich die innere Litze und der

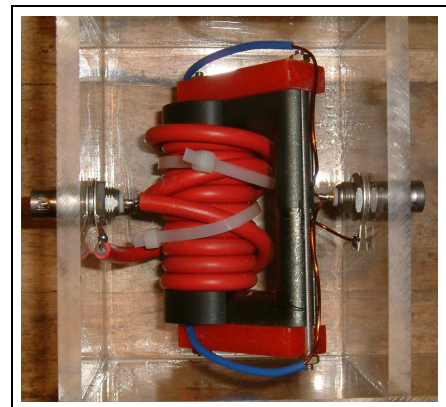


Abb. 2.12.: Fotografie des Trenntransformators ohne Vergussmasse.

Isolator verbleiben. Diese Anordnung wird in einem Gehäuse aus 6 mm starkem Plexiglas untergebracht. Die Grundfläche beträgt  $95 \times 80 \text{ mm}^2$ , die Höhe 70 mm. Das Hochspannungskabel (rot) ist auf einer Kunststoffrolle befestigt, die die darunterliegenden 20 Windungen der primären Wicklung überdeckt. Die Windungszahl der Sekundärseite beträgt 12. Der Doppel-U-Kern wird zur mechanischen Stabilisierung zwischen zwei Kunststoffplatten mit Gewindebolzen verspannt. Abschließend wird das Gehäuse zwecks Isolation mit Vergussmasse ausgefüllt. Bei  $U_{\text{dc}} = 22 \text{ V}$  Gleichspannung am Eingang der H-Brücke wird an der Sekundärseite des Trenntransformators eine Effektivspannung von  $U_{\text{eff}} = 8 \text{ V}$  erreicht. In einem Test auf Durch- bzw. Überschlagsfestigkeit ist eine Hochspannung bis 60 kV angelegt worden, ohne dass spontane Entladungen auftreten.

Auf der Seite der Beschleunigungsspannung werden von einer kombinierten Schaltung auf einer Platine die beiden Oberflächensperrschichtzähler mit 60 V versorgt. Deren Zählsignal wird darin ausgekoppelt, vorverstärkt, diskriminiert und über eine Glasfaserstrecke an Komponenten auf Laborpotenzial übertragen. In Abb. 2.11 trägt sie die Bezeichnung VV/SCA. Ein Schaltplan befindet sich im Anhang B in Abb. B.5. Als Vorverstärker-Diskriminator-Kombination wird darin eine integrierte Schaltung (IC) vom Typ AMPTEK A-111 verwendet, die in einem TO-8-Gehäuse untergebracht ist. Sowohl das analoge Verstärker-, als auch das TTL-kompatible Zählsignal sind an dem IC kontaktierbar. Die Grundfläche der Platine beträgt  $80 \times 100 \text{ mm}^2$ . Sie ist in einem passenden Metallgehäuse untergebracht. Eine Fotografie des montierten Elektronenpolarimeters wird in Abb. 2.13 zusammen mit dem Trenntransformator und der VV/SCA-Schaltung gezeigt. Der Gesamtaufbau ist 323 mm breit, 280 mm hoch und 335 mm lang.

Die Versorgung der Komponenten ist in einem 19"-Einschub zusammengestellt. Er enthält die optischen Empfänger, die ein TTL-kompatibles Ausgangssignal haben, und eine mikrocontrollerbasierte Zählerkarte, die auf einer LCD-Anzeige die aktuelle Zählrate am Detektor ausgibt. Der Schaltplan wird im Anhang B in Abb. B.6 gezeigt.

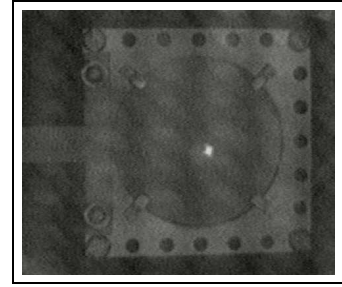
## 2.4. Charakterisierung des Polarimeters

Die Eigenschaften eines Elektronenpolarimeters sind bereits in Abschnitt 2.1 behandelt worden. Im Folgenden wird die Charakterisierung des Polarimeters dargestellt. Die Bestimmung der Detektor-Güte  $\varepsilon$  aus Gleichung (2.7) erfordert die Kenntnis der *effektiven* SHERMAN-Funktion  $S_{\text{eff}}$  und der Nachweiseffizienz  $I/I_0$ . Zudem ist die Reproduzierbarkeit der Detektorasymmetrie für die Spinauflösung maßgebend. In einem ersten Schritt wird die Anordnung auf die Fokussierung hin untersucht. Dazu werden der Sichtflansch mit dem Leuchtschirm montiert und mit einer kommerziellen CCD-Kamera ein Bild (Abb. 2.14) aufgenommen.

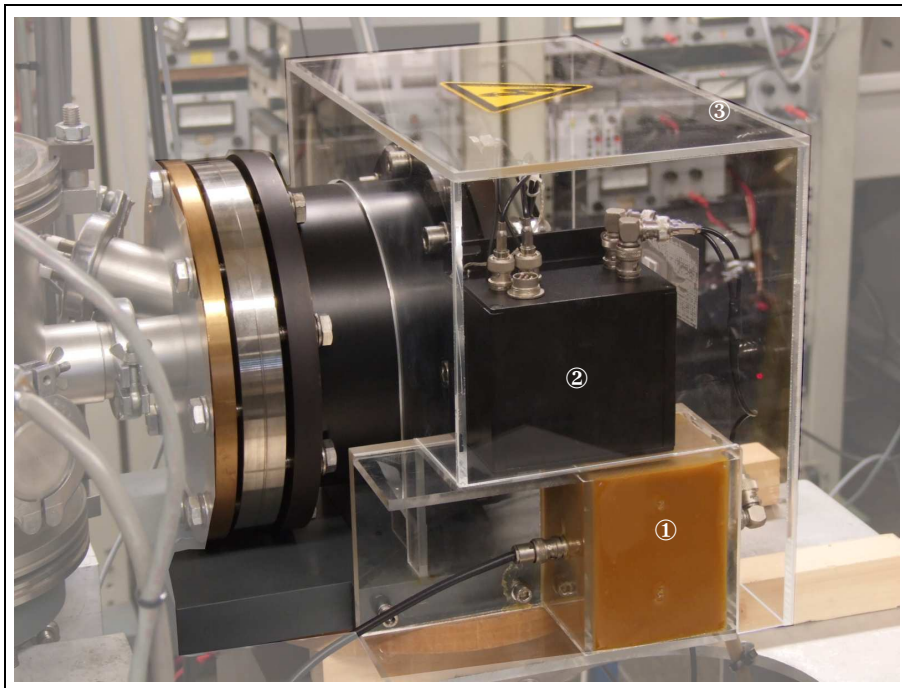
Der Rahmen des Leuchtschirms hat eine Kantenlänge von 25 mm. Damit wird der Durchmesser des Fokus auf 2 mm abgeschätzt. Die Bestimmung der effektiven SHERMAN-Funktion  $S_{\text{eff}}$  erfolgt in diesem Fall gemäß Gleichung (2.2) durch die Messung der Asymmetrie  $A_0$  bei bekannter Spinpolarisation  $P_y$ . Hierzu wird das Elektronenpolarimeter an die Streuapparatur in Geradeausrichtung aus Sicht des Elektronenstrahls angeflanscht, wie sie bei TAKE (2008) verwendet wird. Der Elektronenstrahl wird mit 15 eV Primärenergie in Richtung des Detektors gelenkt und gegebenenfalls durch geschickte Defokussierung in der Intensität abgeschwächt, um die Detektorkomponenten vor Sättigung oder gar Beschädigung zu bewahren. Die Polarisation der Quelle wird aus Erfahrung mit anderen Aufbauten und aufgrund desselben GaAs-Kristalltyps auf  $P_y = 27 \pm 1\%$  geschätzt. Gemessen wird die Links-Rechts-Asymmetrie aus Gleichung (2.1) jeweils für die beiden Orientierungen *Spin-up* ( $A^\uparrow$ ) und *Spin-down* ( $A^\downarrow$ ). Die Mittelung über beide Werte ergibt die Asymmetrie

$$A^{\uparrow\downarrow} = \frac{A^\uparrow - A^\downarrow}{2} \quad . \quad (2.8)$$

Eine Korrektur der falschen Asymmetrien  $A_f^{\uparrow\downarrow}$  nach Gleichung (2.3) ist hier nicht möglich, da keine Monitordetektoren vorgesehen sind. Ihr Einfluss ist nach KESSLER (1985) jedoch als gering zu betrachten, sodass hier  $A_0 \approx A^{\uparrow\downarrow}$  gilt.

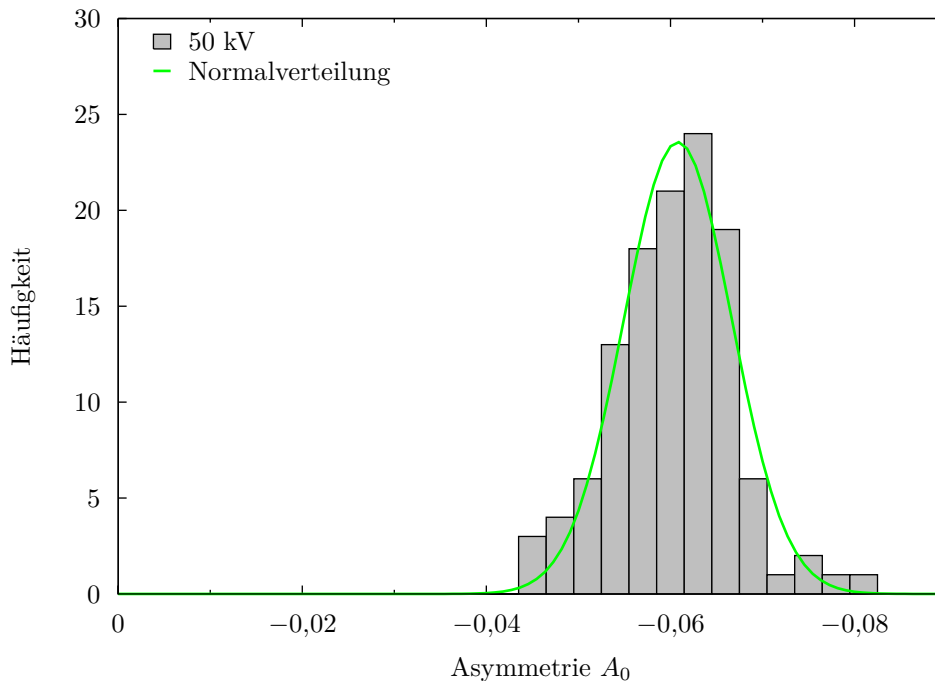


**Abb. 2.14.:** Fokus auf dem Leuchtschirm:  $\sim \varnothing 2$  mm.



**Abb. 2.13.:** Fotografie des montierten Elektronenpolarimeters mit Trenntransformator ①, VV/SCA-Schaltung ② und Schutzabdeckung ③.

Es wird als Analyziertarget eine Goldfolie der Dicke  $d \approx 77$  nm verwendet, die nach der bei AFTING (1995) beschriebenen Vorgehensweise bestimmt worden ist. Die Asymmetrien  $A_0$  werden für ausgewählte Streuenergien von  $20 \text{ keV} \leq U \leq 50 \text{ keV}$  bestimmt. Zur Abschätzung der Genauigkeit dieses Verfahrens wird eine Statistik der Asymmetriewerte aufgenommen. Hierzu werden bei gleicher Erfassungszeit wiederholt die Zählraten  $N_{R,L}$  aufgezeichnet. Abbildung 2.15 zeigt eine Häufigkeitsverteilung der Asymmetriewerte  $A_0$  für einen Stichprobenumfang von  $n = 119$  Werten bei 50 keV Streuenergie. Zum Vergleich ist eine Anpassung („Fit“) an eine GAUSS-Normalverteilung mit dem Mittelwert  $\bar{A}_0^{(1)} = -6,1 \cdot 10^{-2}$  und der Standardabweichung  $\sigma^{(1)} = 0,59 \cdot 10^{-2}$  eingezeichnet. Für weitere Häufigkeitsverteilungen sei an dieser Stelle auf den Anhang B verwiesen. Zu erkennen ist eine Häufung der Asymmetriewerte um  $A_0 = -6,1 \cdot 10^{-2}$ .



**Abb. 2.15.:** Häufigkeitsverteilung der Asymmetrie  $A_0$  für 50 keV Streuenergie bei einem Stichprobenumfang von 119 Einzelwerten.

Der aus den Einzelwerten berechnete Mittelwert beträgt  $\bar{A}_0^{(2)} = -6,19 \cdot 10^{-2}$  mit einer Standardabweichung von  $\sigma^{(2)} = 0,64 \cdot 10^{-2}$ . Bei einem Stichprobenumfang von  $n = 119$  beträgt der Standardfehler des Mittelwerts  $\Delta = 0,06 \cdot 10^{-2}$ . Die Asymmetriewerte werden durch eine Normalverteilung wiedergegeben und somit als reproduzierbar angesehen. Ein einzelner Asymmetriewert kann bei der verwendeten Konfiguration folglich mit  $\Delta A = \pm 0,6 \cdot 10^{-2}$  aufgelöst werden.

Die Abhängigkeit der Mittelwerte der Asymmetrie  $\bar{A}_0$  vom Streupotenzial  $U$  ist in Abbildung 2.16 aufgetragen. Der Betrag der Asymmetrie nimmt mit der Beschleunigungsspannung zu, und somit auch das Vermögen, die Spinpolarisation zu bestimmen. Innerhalb der statistischen Abweichungen kann für Zählraten bis  $2500 \text{ s}^{-1}$  keine Intensitätsabhängigkeit nachgewiesen

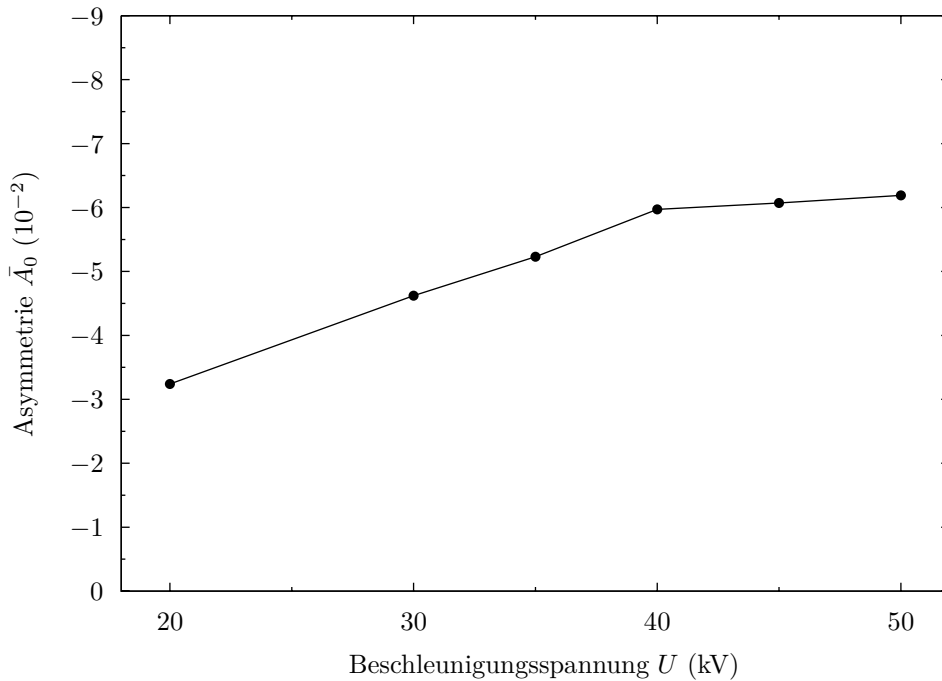
werden. Ein möglicher Einfluss der sogenannten Totzeit der Detektorelektronik wird somit nicht aufgelöst. Deshalb wird keine Totzeitkorrektur vorgenommen, wie sie bei HOLTKÖTTER (2008) beschrieben ist.

Unter der Annahme von  $P_y = 27 \pm 1\%$  wird die effektive SHERMAN-Funktion  $S_{\text{eff}}$  nach  $A_0 = P_y S_{\text{eff}}$  berechnet. Die Werte sind in folgender Tabelle 2.1 zusammengefasst. Zur Berech-

$E$ (keV)	$\bar{A}_0$ ( $10^{-2}$ )	$\Delta$ ( $10^{-2}$ )	$S_{\text{eff}}$
20	-3,24	–	-0,120
30	-4,62	–	-0,171
35	-5,23	–	-0,194
40	-5,97	–	-0,221
45	-6,07	–	-0,225
50	-6,19	0,06	$-0,229 \pm 0,011$

**Tab. 2.1.:** Berechnete effektive SHERMAN-Funktion  $S_{\text{eff}}$  für die verwendete Folien in der Detektoranordnung bei einer Primärpolarisation von  $P_y = (27 \pm 1)\%$ .

nung herangezogen werden die aus den Einzelwerten berechneten Mittelwerte. Für das Streuenenergie 50 keV wird die errechnete Abweichung  $\Delta = 0,06$  übernommen. Bei den übrigen Streuenenergien ist der Stichprobenumfang mit Anzahlen von 20 bis 40 deutlich geringer, weshalb eine weitere statistische Behandlung hier unterlassen wird. Der Wert  $S_{\text{eff}}(50 \text{ keV}) = 0,229 \pm 0,011$



**Abb. 2.16.:** Abhängigkeit der Asymmetrie  $\bar{A}_0$  von der Beschleunigungsspannung  $U$ . Die Linie dient der Führung des Auges.

deutet darauf hin, dass die verwendete Folie dünner als die im Herstellungsverfahren bestimmte Dicke  $d \approx 77$  nm ist, wenn die Berechnungen aus Abbildung 2.1 betrachtet werden.

Um schließlich die Effizienz  $\varepsilon$  abzuschätzen, wird der in den Detektor eintretende Strahlstrom bei einer bestimmten Zählrate abgeschätzt. Das Polarimeter wird wie gewohnt in Betrieb genommen, und es wird eine Gesamtzählrate von  $N \approx 5500 \text{ s}^{-1}$  gemessen. Ohne Änderung der Elektronenstrahljustierung wird die Beschleunigungsspannung abgeschaltet, und die Verbindung zum Innengehäuse wird getrennt. Über ein gewöhnliches Netzteil wird ein Potenzial von 100 V an die Innenelektrode gelegt. Mit einem zwischengeschalteten Elektrometer wird der Strom  $I_{\text{max}} = 1,7 \text{ nA}$  zum Innengehäuse bestimmt. Um einen Leckstrom zu korrigieren, wird der Elektronenstrahl blockiert und der Strom  $I_{\text{min}} = 1,6 \text{ nA}$  abgelesen. Die Differenz ergibt eine Abschätzung der einfallenden Intensität  $I_0 = I_{\text{max}} - I_{\text{min}} = 0,1 \text{ nA}$ . Die Effizienz aus Gleichung (2.7) beträgt somit mindestens:

$$\varepsilon \geq (0,229)^2 \cdot \frac{5500 e_0 \text{ s}^{-1}}{0,1 \text{ nA}} = 4,6 \cdot 10^{-7}.$$

Diese Abschätzung setzt voraus, dass alle durch die Außenelektrode eintretenden Elektronen auf die Detektoranordnung bzw. Goldfolie zu beschleunigt werden. Nicht berücksichtigt werden jene, deren Bahn innerhalb der Elektrodenanordnung nicht in das innere Gehäuse führt. Der hohe Leckstrom auf das Innengehäuse ist etwa eine Größenordnung stärker als der Elektronenstrahlstrom. Dadurch wird eine präzise Bestimmung der in den Detektor eintretenden Intensität  $I_0$  erschwert. Festzuhalten bleibt, dass für die Effizienz daher ein Mindestwert angegeben werden kann.

## 2.5. Spinpolarisation von Photoelektronen aus Gold

Das kompakte Elektronenpolarimeter ist exemplarisch an einem im Institut befindlichen Oberflächenexperiment angebaut und die Spinpolarisation von Photoelektronen aus einem Au(111)-Einkristall ist bestimmt worden. Der experimentelle Aufbau wird kurz beschrieben und eine Messung wird vorgestellt. Ein Schema des Experiments wird in Abb. 2.17 gezeigt.

Die Probe wird von einem gepulsten Laserstrahl der Wellenlänge 210 nm mit der Repititionsrate 1 kHz bestrahlt. Eine ausführliche Beschreibung dieses Aufbaus wird bei ROSENFELDT (2009) gegeben. Als Erweiterung wird in den Laserstrahlengang eine Polarisationsoptik integriert. Ein mechanisch drehbarer  $\lambda/4$ -Verzögerer ermöglicht eine zirkuläre Polarisation des linear polarisierten Laserlichts. Die Helizität wird durch Rotation des  $\lambda/4$ -Verzögerers umgekehrt. Ist dessen ordentliche oder außerordentliche Achse entlang der linearen Polarisation orientiert, tritt keine Verzögerung auf; das Licht wird, unverändert in der Polarisation, transmittiert. Die in Abschnitt 2.2.2 vorgestellte Konstruktion wird der bestehenden Apparatur hinzugefügt. Der  $90^\circ$ -Umlenker wird so ausgerichtet, dass das Laserlicht durch den Schlitz



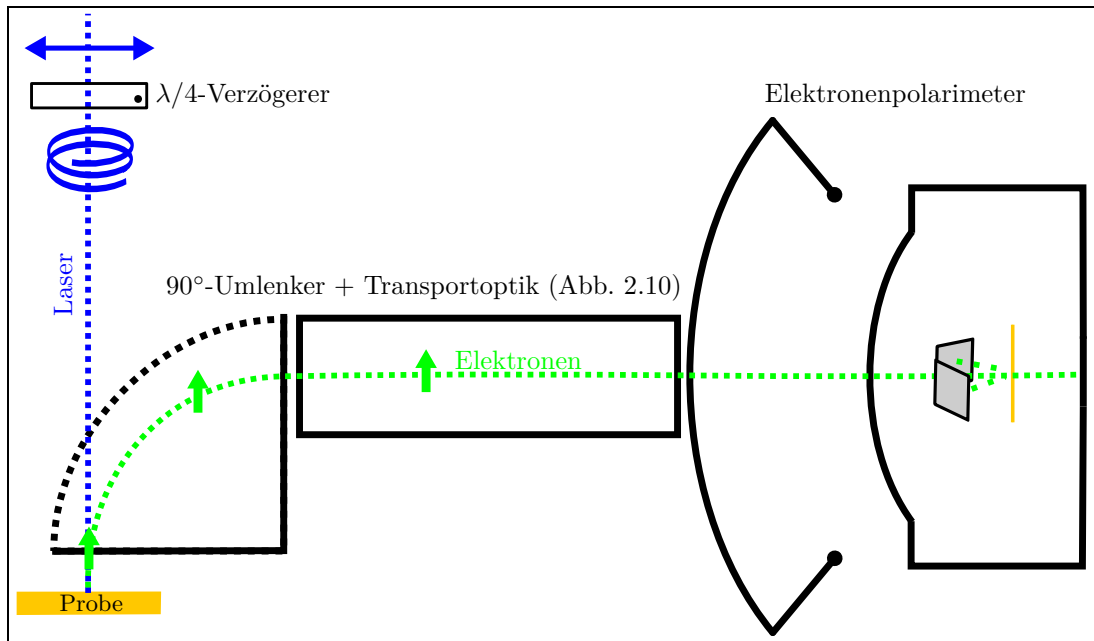


Abb. 2.17.: Schema des Oberflächenexperiments.

und die Eintrittsblende auf die dahinterliegende Probe fällt. Die aus der Probe austretenden Photoelektronen treten in den Umlenker ein und werden dann durch die Transportoptik zum Elektronenpolarimeter geführt. Die Quantisierungsachse für den Elektronenspin ist die Einfallrichtung des Laserlichts, die den Bezug für dessen Helizität darstellt. Die Elektronen treten daher longitudinal polarisiert aus der Oberfläche aus. Da die Spinorientierung durch die elektrostatische Ablenkung in erster Näherung nicht beeinflusst wird, folgt aus der Strahlführung eine transversale Polarisation nach dem 90°-Umlenker. In dieser Konfiguration wird die senkrecht auf der Oberfläche stehende Komponente der Spinpolarisation analysiert. Die Kammer des Experiments wird im Ultrahochvakuum betrieben, was ein differenzielles Pumpen des Elektronenpolarimeters erfordert.

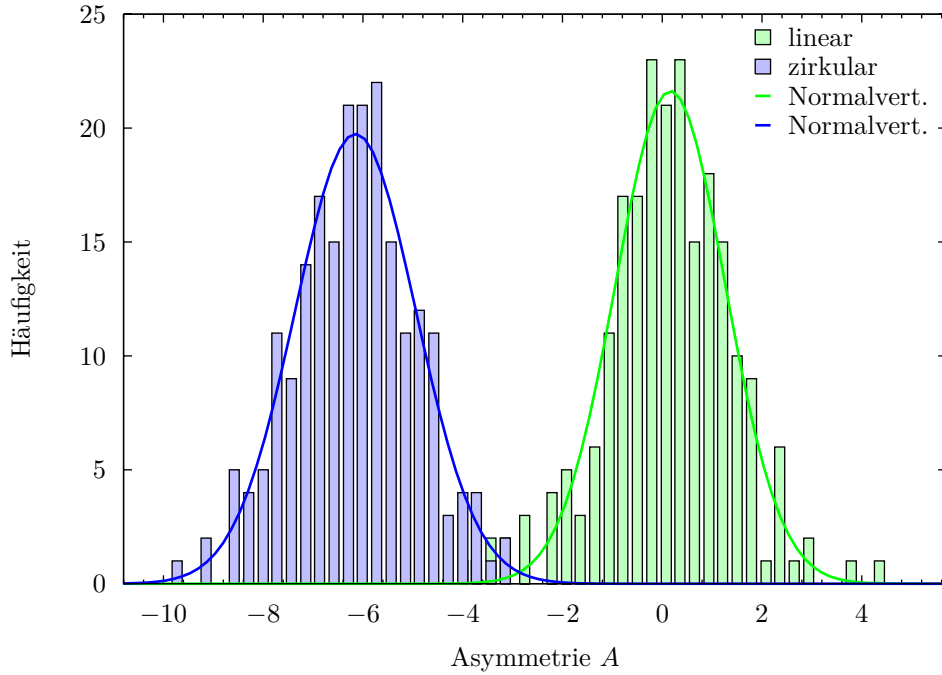
Zur Untersuchung der Spinpolarisation werden die Asymmetrien am Elektronenpolarimeter bei Beschuss der Probe mit polarisiertem Licht erfasst. Dazu wird der  $\lambda/4$ -Verzögerer in 45°-Schritten senkrecht zum Laserstrahl gedreht, sodass abwechselnd linear und zirkulär polarisiertes Licht auf die Probe fällt. Die Drehung wird mehrfach wiederholt und die Einzelasymmetrien werden statistisch ausgewertet.

Zwei Asymmetriewerte  $A^+$  und  $A^-$ , die bei gegensätzlicher Helizität aufgenommen werden, werden entsprechend der Vorgehensweise nach Gleichung (2.3) zur Asymmetrie  $A_z$  verrechnet, um instrumentelle Asymmetrie zu eliminieren. Entsprechend wird mit den Werten für linear polarisierten Beschuss verfahren. Es wird über die beiden Asymmetriewerte für die Stellungen „ordentliche Achse“  $A_{oA}$  und „außerordentliche Achse“  $A_{aoA}$  gemittelt; der Wert wird  $A_I$  genannt. Eine Abweichung von  $A_I = 0\%$  deutet auf instrumentelle Asymmetrie durch optische

Komponenten hin.

In Abb. 2.18 sind die Häufigkeitsverteilungen der Asymmetriewerte für lineare und zirkuläre Polarisation gezeigt mit jeweils einem Stichprobenumfang von  $n = 220$  Werten. Zudem eingezeichnet sind Anpassungen an eine GAUSS-Normalverteilung:

$$N(A) = \frac{C}{\sqrt{2\pi}\sigma^2} \exp\left(-\frac{(A - \bar{A})^2}{2\sigma^2}\right).$$



**Abb. 2.18.:** Häufigkeitsverteilungen der Asymmetriewerte für Au(111) bei Beschuss mit zirkular und linear polarisiertem Licht.

Die Parameter sind in Tabelle 2.2 zusammengestellt. Anhand der Ergebnisse wird deutlich,

	$\bar{A}$ (%)	$\sigma$ (%)	$C$
zirkular	-6,14993	1,2108	59,9292
linear	0,162309	1,10304	59,8063

**Tab. 2.2.:** Parameter der Anpassungen an eine GAUSS-Normalverteilung in Abb. 2.18. Die Parameter sind dem Programm GNUPLLOT entnommen.

dass in diesem Experiment die Asymmetrieauflösung  $\Delta A = 1,22\%$  beträgt. Für die weitere Auswertung werden der Mittelwert der Verteilung und dessen Standardfehler verwendet. Bei linear polarisiertem Beschuss beträgt der Mittelwert  $\bar{A}_1 = (0,16 \pm 0,08)\%$ , was eine geringe Abweichung vom Nullpunkt darstellt. Die Drehung des  $\lambda/4$ -Verzögerers beeinflusst daher nicht

die gemessene Asymmetrie. Aus  $\bar{A}_z = -(6,15 \pm 0,09) \%$  wird zusammen mit  $S_{\text{eff}} = -(0,229 \pm 0,011)$  eine Polarisation von  $P_y = (26,9 \pm 1,7) \%$  berechnet.

## 2.6. Fazit

In diesem Kapitel ist die Entwicklung eines kompakten Elektronenpolarimeters in Kombination mit einer elektrostatischen Transportoptik beschrieben worden. In der Elektrodenkonfiguration wurde ein sphärischer Feldverlauf entlang der Elektronenbahn durch eine geeignete Elektrodenkonfiguration nachgebildet. Durch eine schrittweise Optimierung der Bauform ist ein Design entworfen worden, das ohne zusätzliche Hilfselektroden auf Hochspannungspotenzial auskommt, wodurch der laborseitige elektrische Aufwand gering gehalten wird, da keine Hochspannungsteiler benötigt werden. Zur Versorgung auf hochspannungsseitig betriebener Komponenten sind ein kompakter Hochspannungs-Trenntransformator und eine elektronische Schaltung entwickelt worden. Auf Grund der kompakten Abmessungen des Gesamtaufbaus ist dieser einfach zu montieren und variabel einzusetzen. Die Kalibrierung ist an einer Streuapparatur durchgeführt worden.

Bei bekannter Primärpolarisation ist die effektive SHERMAN-Funktion bestimmt worden. Der Wert von  $S_{\text{eff}}(50 \text{ kV}) = (-0,229 \pm 0,011)$  liegt innerhalb des Bereichs  $-0,23 \leq S_{\text{eff}} \leq -0,18$ , der in Abschnitt 2.1.1 abgeschätzt wurde. In anderen konventionellen MOTT-Elektronenpolarimetern (MEINTRUP, 1999) der Arbeitsgruppe werden, bei ähnlicher Dicke der Goldfolie und Streuenergien von 120 keV, Werte um  $S_{\text{eff}} = -0,24$  erreicht. Ein niedrigere Streuenergie kann also zu einer ähnlichen Auflösung der Spinpolarisation führen. Jedoch deutet der hohe Betrag darauf hin, dass die verwendete Goldfolie dünner ist als 77 nm. Für eine Kalibrierung durch eine Foliendickenextrapolation wird im Herstellungsverfahren eine präzisere Dickenbestimmung benötigt. Bei der Methode nach AFTING (1995) wird die aufgedampfte Menge durch Wägung bestimmt. Die Schichtdicke wird bei gegebener Bedampfungsfläche aus der Massenzunahme bestimmt. Die Genauigkeit der verwendeten Feinwaage legt die Präzision der Goldfolienherstellung fest. Eine Alternative ist, bei der Herstellung neben dem eigentlichen Folienträger weitere Diagonalgläser mitzubedampfen. Die Schichtdicke der darauf aufgedampften Goldschicht kann danach mit einem Atom-Kraft-Mikroskop (AFM) bestimmt werden. Dieses Verfahren wird momentan erprobt.

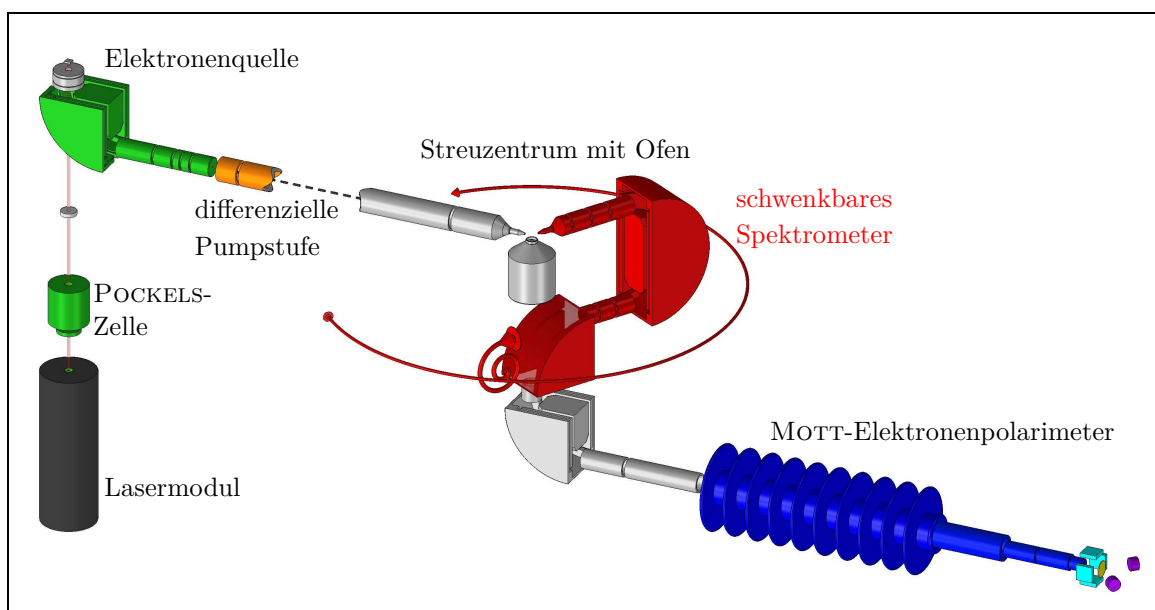
Aufbauend auf dem hier präsentierten Prototyp ist ein Elektronenpolarimeter entwickelt worden, das an einem UHV-Rezipienten ohne differenzielles Pumpen betrieben werden kann. In der Konstruktion wird das hier vorgestellte Design im Prinzip beibehalten. Es wird ein weiteres Detektorpaar eingebaut, das um  $90^\circ$  versetzt zu dem ersten befestigt wird. Dadurch steht eine zweite Streuebene zur Verfügung, sodass gleichzeitig zwei Komponenten der Spinpolarisation analysiert werden können.

An einem Oberflächenexperiment in einer anderen Arbeitsgruppe ist das Elektronenpolarimeter zusammen mit der elektrostatischen Transportoptik angebaut worden. In dem Experiment wird die Spinpolarisation von Photoelektronen untersucht. Exemplarisch ist zunächst die Spinpolarisation von einem Au(111)-Einkristall bei Bestrahlung mit gepulster zirkular polarisierter Laserstrahlung der Wellenlänge  $\lambda = 210$  nm bestimmt worden. Zum Zeitpunkt der Entstehung dieser Arbeit kann die Spinkomponente senkrecht zur Oberfläche der Probe gemessen werden. Sie beträgt  $|P_y| = (26,9 \pm 1,7) \%$ , also mindestens 25,2%. Aus einer früheren Arbeit von MEIER und PESCIA (1981) wird für Au(111) eine Polarisation von etwa 10% abgelesen. Dieser Wert wird hier deutlich überschritten.

Weitere Untersuchungen werden an Proben durchgeführt, bei denen polykristallines Gold und der hier behandelte Einkristall mit einer Schicht aus selbst organisierten chiralen Molekülen versehen wird. Es wird vermutet, dass diese Schichten eine Photoelektronen-Transmission aufweisen, die von deren Longitudinalpolarisation abhängt (RAY *et al.*, 1999). Es deutet darauf hin, dass der Effekt ähnlich dem Elektronendichrosimus ist, der eine Spinabhängigkeit des Wirkungsquerschnitts longitudinal polarisierter Elektronen bei der Transmission durch einen Dampf chiraler Moleküle beschreibt (MAYER *et al.*, 1996). Da die Enantiomere der Moleküle auf der Oberfläche zur Ausbreitungsrichtung der Elektronen ausgerichtet sind, wird auf diese Weise ein starker sogenannter *Spin-Filter* möglich. Zur Zeit der Entstehung dieser Arbeit werden Untersuchungen solcher Proben mithilfe des hier beschriebenen Elektronenpolarimeters in einer Arbeitsgruppe des Instituts durchgeführt (KETTNER, 2011; GÖHLER, 2011).

### 3. Das Streuexperiment

Der experimentelle Aufbau ist eine winkel-, energie- und spinauflösende Elektronenstreuapparat mit Metallverdampfungs-ofen, die im Folgenden vorgestellt wird. Die verwendete Apparat dient der Messung der *STU*-Parameter. Sie ist von MEINTRUP (1999) entwickelt und schrittweise ausgebaut worden. Zuletzt verwendet wurde sie bei HOLTKÖTTER (2008), von dem die Messsoftware übernommen und erweitert wird. Abbildung 3.1 zeigt eine Skizze des Aufbaus. Die Anlage lässt sich in drei Teile gliedern: die Elektronenquelle, den Streuzipanten und das Elektronenpolarimeter. Neben der Beschreibung dieser wesentlichen Baugruppen wird ein Metallverdampfungs-ofen vorgestellt, der in die Apparat integriert worden ist. Zusätzlich



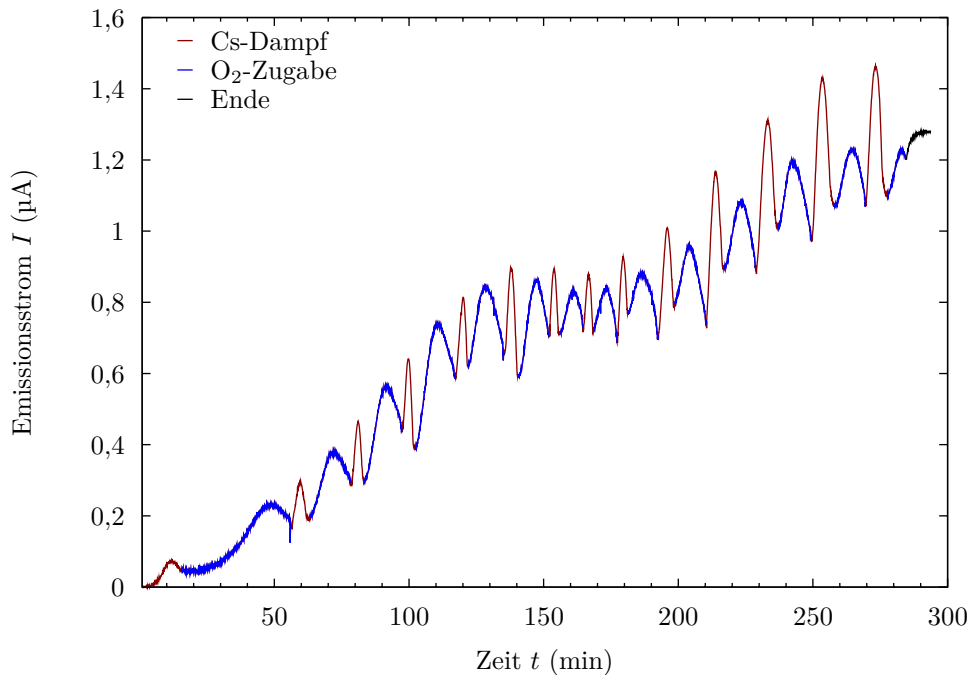
**Abb. 3.1.:** Skizze des experimentellen Aufbaus nach HOLTKÖTTER (2008). Gezeigt sind wesentliche Komponenten der Apparat ohne Halterungen und Vakuumrezipienten.

zu den abgebildeten Komponenten ist seitlich innerhalb des Streuzipanten eine verschiebbare optische Linse angebracht, an die sich außen, durch einen Sichtflansch von der Luft getrennt, eine Kombination aus einem Interferenzfilter und einem Photomultiplier anschließt. Diese Anordnung dient zur Kalibrierung der Primärenergie und wird in Abschnitt 4.1.3 vorgestellt.

Im Labor sind in jeder Raumrichtung Spulenpaare an den Wänden montiert, die dazu dienen, das Erdmagnetfeld und andere magnetische Störungen im Bereich des Streuexperimentes zu kompensieren. Die Anordnung ist an HELMHOLTZ-Spulen angelehnt: ein jeweiliges Spulenpaar wird von demselben Strom durchflossen, die Geometrie weicht jedoch von der idealen ab. Das Signal einer FÖRSTER-Sonde in unmittelbarer Nähe der Apparat wird genutzt, um den Windungsstrom zu regeln.

### 3.1. Die Quelle spinpolarisierter Elektronen

In einem Ultrahochvakuum-Rezipienten ist die Quelle spinpolarisierter Elektronen untergebracht. Details zur Konstruktion können der Arbeit von RUPPEL (1994) entnommen werden. Generell basiert sie auf der Photoanregung von Elektronen in einem Gallium-Arsenid-Halbleiterkristall (GaAs), wie sie bei PIERCE *et al.* (1980) vorgestellt wird. Je nach Helizität des eingestrahlten Lichts werden dabei am  $\Gamma$ -Punkt des Kristallgitters auf Grund von unterschiedlichen Übergangswahrscheinlichkeiten *Spin-up*- oder *Spin-down*-Elektronen bevorzugt angeregt. Durch Erzeugung einer negativen Elektronenaffinität (PIERCE *et al.*, 1975) in Folge einer geeigneten Präparation der Halbleiteroberfläche mit Cäsium (Cs) und Sauerstoff (O<sub>2</sub>) werden die Elektronen ins Vakuum emittiert. Die Vorgehensweise bei der Kristallaktivierung wird bei HOLTKÖTTER (2008) ausführlich besprochen. Die Abbildung 3.2 zeigt den Zeitverlauf des Emissionsstroms während einer solchen Aktivierung, die mit einem handelsüblichen Halogenleuchtmittel als Lichtquelle durchgeführt wird. Zunächst wird der Kristall mit Cs be-



**Abb. 3.2.:** Aktivierung des GaAs-Kristalls mit Weißlicht: Zeitverlauf des Emissionsstroms bei der wechselweisen Behandlung der Kristalloberfläche mit Cs-Dampf und O<sub>2</sub>.

dampft, bis der Emissionsstrom ein erstes Maximum durchläuft. Darauf folgt die Zugabe von O<sub>2</sub>, bis auch hier ein Maximum erreicht wird. Diese Abfolge wird üblicherweise bis zu 15 Mal wiederholt. Generell sind bei diesem Aufbau die Zeitintervalle für die Cs-Bedampfung kürzer als für die O<sub>2</sub>-Zugabe. Bei dem hier gezeigten Zeitverlauf einer Aktivierung mit Weißlicht wird schließlich ein stabiler Emissionsstrom von  $I \approx 1,3 \mu\text{A}$  erzielt.

Als zirkular polarisierte Lichtquelle dient eine Kombination aus einem Diodenlasermodul

(808 nm, 30 mW), einem Linearpolfilter und einer PÖCKELS-Zelle (LINOS LM08 IM 99), in der in einem anisotropen, transparenten Kristall durch ein elektrisches Feld Doppelbrechung induziert wird. Die Phasenmodulation des einfallenden linear polarisierten Lichts ist proportional zur angelegten Potenzialdifferenz (HECHT, 1989).

Der mit dieser Lichtquelle erzielte maximale Emissionsstrom aus dem GaAs-Kristall kann bis zu 10  $\mu\text{A}$  betragen. Nach circa 2 Wochen Betrieb sinkt er unter 1  $\mu\text{A}$  ab. Durch eine 5-minütige Behandlung mit Cs-Dampf steigt er wieder bis fast zum ursprünglichen Wert an. Mit der Zeit werden die Intervalle zwischen diesen Nachaktivierungen kürzer und der erreichte Maximalstrom nimmt ab. Dann ist eine erneute Aktivierung nötig. Üblicherweise geschieht dies nach einem Zeitraum von 12 bis 15 Monaten.

Die Quantisierungsachse der Spinpolarisation ist die Richtung des Laser-Lichtstrahls, die den Bezug für dessen Helizität darstellt. Eine elektrostatische Abzugsoptik führt die zunächst longitudinal polarisierten Elektronen durch einen  $90^\circ$ -Umlenker nach JOST (1979), wodurch eine transversale Elektronenpolarisation hervorgerufen wird.

### 3.2. Der Streuzepient mit Elektronenpolarimeter

Über eine differenzielle Pumpstufe ( $p \approx 2 \cdot 10^{-9}$  mbar) wird der Elektronenstrahl in einer elektrostatischen Zylinderoptik zum Streuzentrum transportiert, das sich im Hochvakuumteil der Anlage befindet. Zur Kontrolle der primären Elektronenstrahlintensität kann ein FARADAY-Becher hinter das Streuzentrum in die Strahllinie geschwenkt werden. Während des Messbetriebs werden Strahlströme zwischen 50 und 300 nA erreicht.

Unterhalb der Einschussoptik ist ein Verdampfungssofen angebracht, aus dessen Düse das Targetmaterial annähernd kollimiert austritt und im Streuzentrum vom Elektronenstrahl getroffen wird. Der Abstand zwischen der Austrittsöffnung und dem Streuzentrum beträgt etwa 6,5 mm. Eine Beschreibung der Ofenkonstruktion folgt in Abschnitt 3.3. In 20 mm Abstand über dem Streuzentrum befindet sich eine Blechscheibe aus Edelstahl von 30 mm Durchmesser, an der sich das Targetmaterial niederschlägt. Diese Maßnahme verringert die Verschmutzung der übrigen Apparaturteile.

Auf einem Drehteller sind ein  $180^\circ$ -Spektrometer und ein geschlitzter  $90^\circ$ -Umlenker montiert. An dessen Rückseite ist in Richtung des Spektrometerraustritts ein Ein-Kanal-Elektronenvervielfacher („Channeltron“) befestigt. Dieser kann genutzt werden, um die Streuintensität zu bestimmen. Diese Bauteile sind in Abbildung 3.1 rot eingefärbt. Sie sind über Elektronenstreuwinkel von  $-135^\circ \leq \vartheta \leq +135^\circ$  schwenkbar. Ein weiterer Umlenker ist raumfest unterhalb des Drehtellers befestigt. Die erwähnten Spektrometer und Umlenker sind nach der Arbeit von JOST (1979) entworfen. Der Verlauf der Elektronenbahn im Nachweis Kanal hat in  $0^\circ$ -Richtung die Form eines „S“. In dieser Baugruppe werden die Elektronen bei

einer Sollbahnenergie von 20 eV energetisch analysiert und zu einer elektrostatischen Beschleunigungsstufe geführt, die in einem Hochenergie-MOTT-Elektronenpolarimeter endet.

Die Elektronen werden zur Bestimmung der Spinpolarisation auf eine Streuenergie von 120 keV beschleunigt und an einer Goldfolie gestreut. Die Polarisation kann in zwei Ebenen gemessen werden. Dadurch lassen sich die Komponenten  $P_x$  und  $P_y$  bestimmen. Die Messgeometrie ist in der  $xz$ -Ebene zusätzlich mit Monitorzählern unter  $\pm 45^\circ$  ausgestattet. An dieser Stelle gilt für die effektive SHERMAN-Funktion  $S_{\text{eff}} \approx 0$ . Dadurch wird eine um falsche Asymmetrien bereinigte und somit präzisere Polarisationsmessung ermöglicht. Der Aufbau und die Funktionsweise wird bei ESTER (1989) beschrieben.

### 3.3. Der Metallverdampfungs-ofen

Der bei MEINTRUP (1999) verwendete Hochtemperaturofen ist ersetzt worden, da er bei längerem Betrieb zu Tropfenbildung neigte und weil auf die dafür vorgesehene Turbomolekularpumpe und die Wasserkühlung verzichtet werden kann. Für die Untersuchungen an Blei ist zunächst der Verdampfungs-ofen aus der Arbeit von BRÜNER (2008) eingesetzt worden. Die Konstruktion orientiert sich an dem Mantelheizelement-Ofen nach GEERS (2001). Er besteht aus einem liegenden zylindrischen Molybdänbehälter, der mit einem Heizleiter bifilar umwickelt ist. Aus diesem tritt das Targetmaterial durch eine Düse annähernd kollimiert aus. Drei Hitzeschilde schirmen diesen nach außen thermisch ab. Diese Konstruktion zeigte im Laufe der Zeit Tropfenbildung an der Düsenöffnung im Inneren des Molybdän-Behälters, was zu einem schwankenden Dampfdruck und schließlich zu einem unregelmäßigen Streusignal führte.

Aufgrund dieser Erfahrungen ist ein Ofen mit Keramiktiegel eingebaut worden, der auf dem Design basiert, wie es bei GEESMANN (1990) und HERTING (2002) verwendet wurde. Eine Schnittzeichnung der Konstruktion wird in Abbildung 3.3 gezeigt. Das zu verdampfende Material befindet sich in einem Keramiktiegel, der von außen mit Graphitlack beschichtet ist. Eine kegelförmige Graphitkappe mit integrierter Austrittsdüse schließt diesen Teil nach oben hin ab. Der Tiegel ruht auf einem zweiteiligen Stempel, der aus einem Titanträger

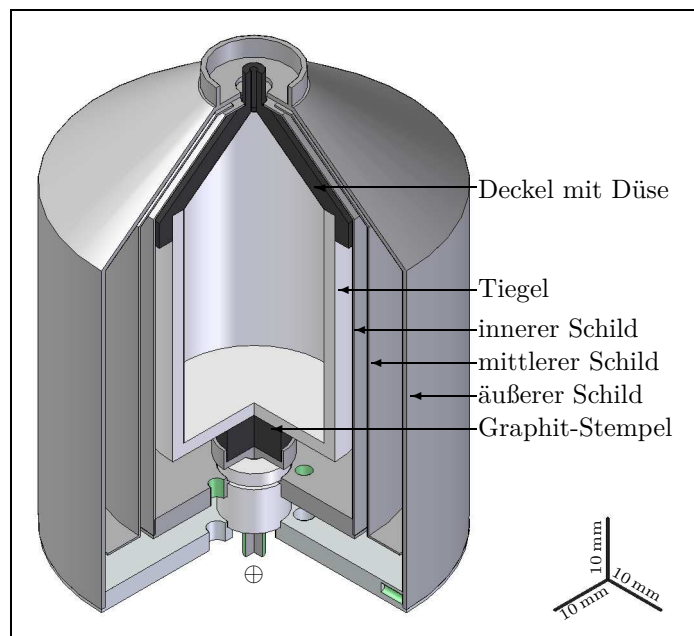


Abb. 3.3.: Schnittansicht des Tiegelfofens.



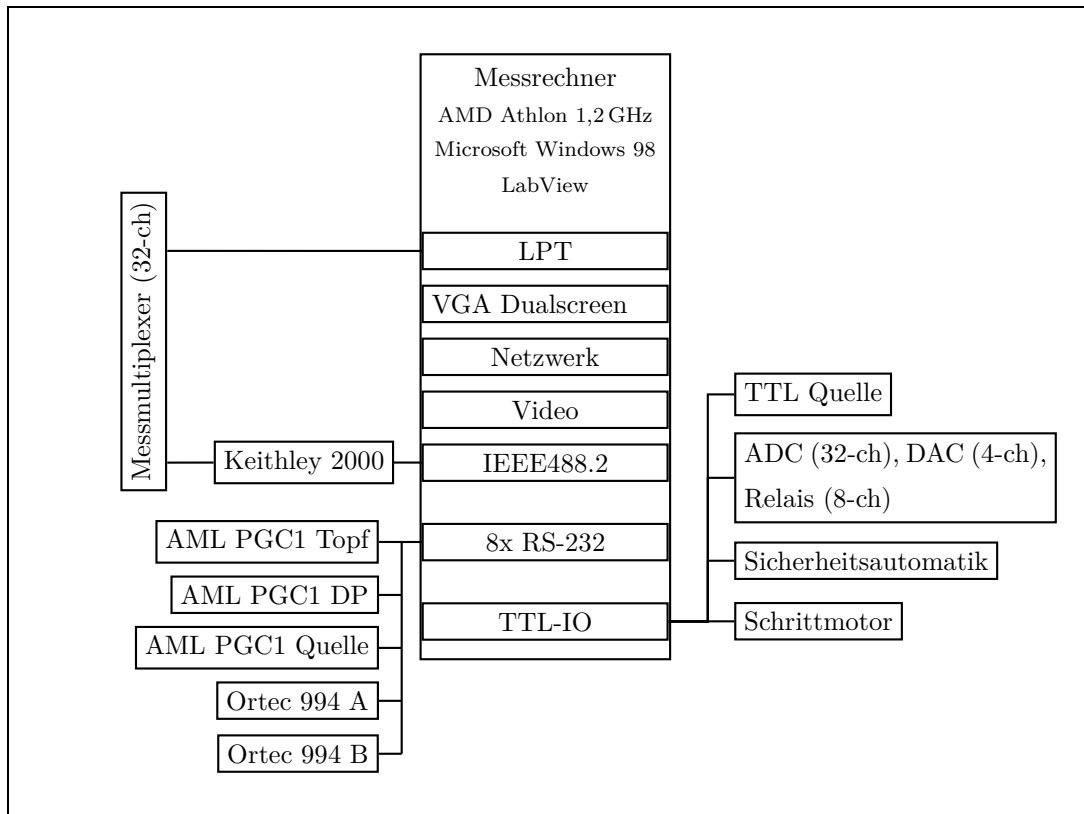
und einem 6 mm breiten zylindrischen Graphitkontakt besteht. Er ist, durch Keramikhülsen thermisch und elektrisch isoliert, auf einer Titan-Trägerplatte befestigt. Die Düsengeometrie ist nach den Überlegungen bei BRÜNER (2008) entworfen, wobei davon ausgegangen wird, dass die Düse der wärmste Punkt im Betrieb ist. Aus der Betrachtung des Dampfdrucks und der mittleren freien Weglänge des Target-Materials wird der Innendurchmesser auf 1,1 mm und die Länge auf 7 mm festgelegt.

Diese Bauteile sind von drei Hitzeschilden umgeben. Die Formgebung folgt dem Umriss des mit dem Graphitdeckel verschlossenen Tiegels. Das innerste Schild besteht aus Molybdän und dient zusammen mit der Trägerplatte zur Befestigung der inneren Komponenten, indem die Bauteile mechanisch verspannt werden. Das mittlere Schild ist aus Titan und das äußere ist aus Edelstahl gefertigt. An letzterem ist oben ein Kragen konzentrisch angeschweißt. Geheizt wird der Tiegel, indem ein Gleichstrom durch das innere Hitzeschild über die Kontaktstelle am Deckel in der Nähe der Düse, durch die Graphitschicht und schließlich durch den Stempel fließt. Diese gegenläufige Stromführung vermindert störende Magnetfelder auf vernachlässigbare Werte von  $B < 0,15 \mu\text{T}$  (HERTING, 2002), was vor allem in der Nähe des Streuzentrums ein wichtiger Gesichtspunkt ist. Der Widerstand der Schicht beträgt direkt nach dem Auftragen der Graphitfarbe etwa  $300 \text{ k}\Omega$  und nach dem ersten Erhitzen um  $100 \Omega$  bis  $300 \Omega$ . Er nimmt mit steigender Temperatur leicht ab. Im Experiment werden Heizleistungen bis  $60 \text{ W}$  erreicht, um die nötigen Targetdampfdrücke zu erzeugen.

Integriert in die Streuapparatur befindet sich direkt über der Austrittsdüse ein schwenkbares Blech mit einer 7 mm großen Blendenöffnung. Dieses Bauteil ist an einer Drehdurchführung befestigt, so dass es laborseitig betätigt werden kann. Während des Messbetriebs wird dieser Schieber benutzt, um das Targetmaterial in das Streuzentrum zu lassen oder es für eine Streuuntergrundbestimmung zurückzuhalten, die bei dieser Apparatur somit im Gegensatz zu KAUSSEN (1985) und GEESMANN (1990) bei eingeschalteter Heizleistung vorgenommen wird.

### 3.4. Das Datenerfassungssystem

Das Datenerfassungssystem besteht aus einem Rechner im Labor (Messrechner) und damit verbundenen externen Messgeräten. Ein Blockdiagramm des Aufbaus ist in Abbildung 3.4 dargestellt. Die Ansteuerung und das Auslesen erfolgen mit Hilfe eines Satzes von Programmen, der in der grafischen Programmiersprache LABVIEW erstellt wurde (HOLTKÖTTER, 2003) und insbesondere für die Aufgabenstellung dieser Arbeit angepasst und ergänzt worden ist. Neben einer Netzwerkanbindung steht auf einer Erweiterungssteckkarte ein Videoeingang zur Verfügung, an den bei Bedarf zur visuellen Überwachung einzelner Komponenten eine Kamera angeschlossen werden kann. Über den Parallelanschluss (LPT) wird ein sogenannter Messmultiplexer mit 32 Kanälen angesteuert. Die geschaltete Spannung wird durch ein KEIT-



**Abb. 3.4.:** Blockdiagramm des Datenerfassungssystems.

Das Keithley 2000-Tischmultimeter gemessen, das über einen GPIB-Anschluss (IEEE 488.2) ausgelesen wird. Auf diese Weise können im Betrieb bis zu 32 Spannungen erfasst werden.

In den Messrechner ist zudem eine Erweiterungskarte mit acht seriellen Anschlüssen eingebaut. Daran sind zum einen die Druckmessgeräte (AML PGC 1/2) angeschlossen, die die Vakuumdrücke im Quellrezipienten, in der differentiellen Druckstufe und im Streutopf ausgeben. Zum anderen sind zwei Zählbausteine vom Typ ORTEC 994 daran angeschlossen. Diese sind mit vier Zählkanälen von 100 MHz Bandbreite ausgestattet, wovon einer jeweils als Zeitbasis verwendet wird. An den verbleibenden sechs Kanälen liegen die Zählsignale des MOTT-Elektronenpolarimeters und des Einkanal-Elektronen-Vervielfachers im Streutopf an.

Eine weitere Erweiterungssteckkarte stellt TTL-kompatible Ein- und Ausgänge (TTL-IO) zur Verfügung. An diese sind Baugruppen zur Steuerung und Überwachung des Messbetriebs angeschlossen, sowie sicherheitsrelevante Relais und Sperrschieber. Der Spektrometerteller wird mittels eines Schrittmotors verdreht, der über die Steckkarte gesteuert wird. Weitere Kanäle werden zur technischen Überwachung der Anlage verwendet, um im Fall einer Störung weitere Beschädigungen, insbesondere eine Belüftung des Quellrezipienten, zu vermeiden. Eine detaillierte Behandlung dieser Sicherheitsautomatik wird bei MEINTRUP (1999) geleistet. Eine externe Baugruppe besteht aus 32 Analog-Digital- (ADC) und vier Digital-Analog-Wandlern (DAC). An einem davon (DAC 1) wird das Potenzial für die Sollbahn des Spektrometers aus-

---

gegeben, an einem anderen (DAC 2) eine Regelspannung für die Versorgung der Quellenkomponenten, sodass die Streuenergie per Rechnersteuerung variiert werden kann.

## 4. Durchführung der Messungen

Bevor mit dem eigentlichen Messablauf zur Bestimmung der Streuparameter begonnen werden kann, sind vorbereitende Messungen nötig, die Auskunft geben über die aktuelle Konfiguration des primären Elektronenstrahls. Nach der Einrichtung des Experiments wird der Ablauf der Datenerfassung zur Bestimmung des differentiellen Wirkungsquerschnitts ( $d\sigma/d\Omega$ ) und der Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  beschrieben.

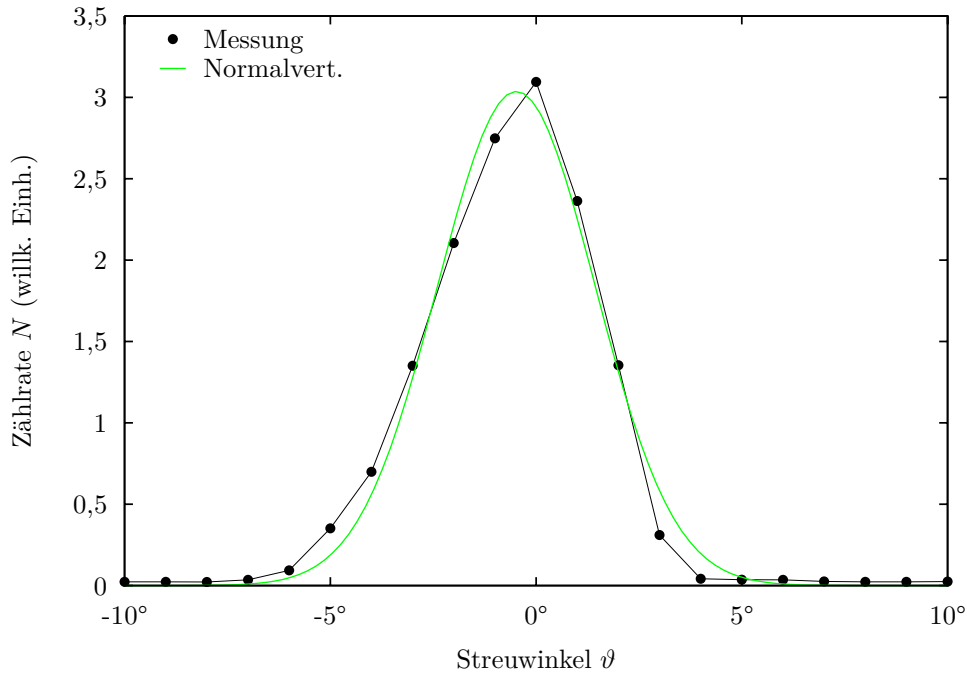
### 4.1. Einrichtung des Experiments

Vor und nach jeder Einzelmessung werden der Winkelnullpunkt und die primäre Spinpolarisation des Elektronenstrahls bestimmt. In unregelmäßigen Zeitabständen wird die Einschussenergie kalibriert. Anhand eines Elektronen-Energieverlustspektrums wird die Funktion des Metallverdampfungsovens überprüft.

#### 4.1.1. Winkelnullpunkt

Der Drehteller in der Streuapparatur verfügt über eine Winkelskala, anhand der im belüfteten Zustand die Komponenten zueinander ausgerichtet werden können. Als Bezug ist eine Lichtschranke unter dem Drehwinkel  $143^\circ$  angebracht. Im Messbetrieb kann die Lage des Elektronenstrahls von dem Nullpunkt der Skala abweichen, weshalb dieser kalibriert wird. Dadurch wird die Referenz für die Streuwinkel festgelegt.

Durch entsprechende Dejustierung der elektrostatischen Transportoptik wird die Intensität in Geradeausrichtung stark abgeschwächt, ohne deren Abbildungseigenschaften zu ändern. Das Nachweis-Spektrometer wird über den Winkelbereich  $-10^\circ \leq \vartheta \leq +10^\circ$  in Schritten von  $\Delta\vartheta = 1^\circ$  bewegt, und die Zählrate wird an der jeweiligen Position aufgezeichnet. Abbildung 4.1 zeigt einen typischen Strahlquerschnitt, wie er mit dieser Methode aufgenommen wurde. Der Verlauf ist annähernd GAUSS-förmig. Der Erwartungswert einer GAUSS-Normalverteilung wird als Winkel-Nullpunkt  $\vartheta_0$  übernommen. In dem hier gezeigten Beispiel ist  $\vartheta_0 = -0,47^\circ$ . Üblicherweise ist die Standardabweichung  $\sigma \approx 2,5^\circ$ , wodurch die Winkelauflösung abgeschätzt wird. Eine Einzelmessung wird dadurch abgeschlossen, dass der zuvor gewählte Nullpunkt durch eine nachfolgende Überprüfung bestätigt wird. Bei übereinstimmenden Werten vor und nach einer Messung gelten die im Messablauf eingestellten Streuwinkel. Bei Abweichungen wird die Messung als ungültig angesehen. Dieser Fall ist selten aufgetreten. Es hat sich im Zuge der Datennahme gezeigt, dass der justierte Elektronenstrahl mehrere Tage innerhalb der erstellten Abschätzung nicht von dem eingestellten Winkelnullpunkt abweicht.



**Abb. 4.1.:** Bestimmung des Winkelnullpunkts: Gemessener Verlauf im Vergleich zu einer Normalverteilung.

#### 4.1.2. Primärpolarisation

Die primäre Spinpolarisation  $P_y$  der Elektronen wird im MOTT-Elektronenpolarimeter bei einem Streupotenzial von  $U = 120$  kV gemessen. Dazu wird der Strahl durch Dejustierung der elektrostatischen Transportoptik insofern abgeschwächt, dass in  $0^\circ$ -Richtung die Zählrate an den Oberflächensperrschichtzählern etwa 1 kHz beträgt. Um den Einfluss experimenteller Schwankungen zu minimieren, wird während der Messung die Spin-Orientierung vier Mal umgeschaltet und für eine feste Erfassungszeit wird die Zählrate aufgezeichnet. Begonnen wird mit der Orientierung *Spin-up*. Danach wird sie umgekehrt und es werden zwei Mal die Daten für *Spin-down* aufgezeichnet. Zuletzt wird wiederum auf *Spin-up* zurückgestellt. Diese Sequenz wird einmal wiederholt, sodass schließlich acht einzelne Zählraten registriert werden, die dann zu den jeweiligen Gesamtzählraten  $N_{l,r}^{\uparrow,\downarrow}$  aufsummiert werden. Die Vorgehensweise mit der Umkehrung des Spins ist bereits in Abschnitt 2.1 behandelt worden. Sie dient zur Elimination instrumenteller Asymmetrie. Das hier verwendete Polarimeter verfügt in der  $xz$ -Ebene über Monitorzähler, die zur Elimination von falscher Asymmetrie dienen. Analog zur Datenerfassung der Polarisationszähler werden deren Zählraten mit  $M_{l,r}^{\uparrow,\downarrow}$  bezeichnet. Die Links-Rechts-Asymmetrie der Polarisationszähler  $A_{\text{pol}}$  wird mit der von den Monitorzählern  $A_{\text{mon}}$  korrigiert (GELLRICH *et al.*, 1990). Die korrigierte, echte Asymmetrie  $A_0$  berechnet sich nach:

$$A_0 = A_{\text{pol}} + c A_{\text{mon}} = P_y S_{\text{eff}} , \quad (4.1)$$

wobei  $c = 0,23$  die sogenannte Monitorkonstante dieser Apparatur bezeichnet, die aus einer Kalibrierung bestimmt wird (ESTER, 1989). Die effektive SHERMAN-Funktion der verwendeten Analysierfolie beträgt  $S_{\text{eff}} = -0,24$  (MEINTRUP, 1999). Die Asymmetriewerte werden durch geometrische Mittelung aus den Zählraten bestimmt:

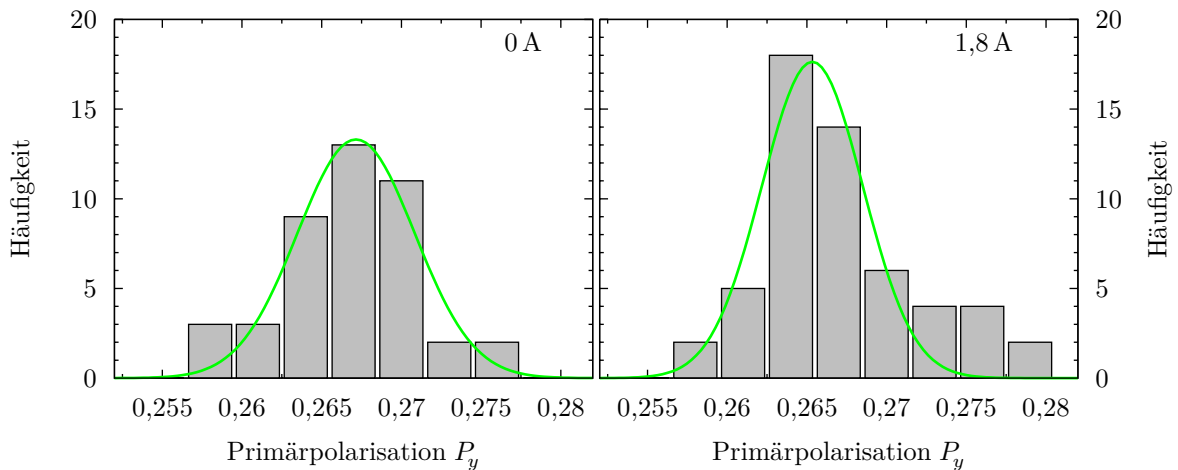
$$A_{\text{pol}} = \frac{\sqrt{\frac{N_l^\uparrow N_r^\downarrow}{N_l^\downarrow N_r^\uparrow}} - 1}{\sqrt{\frac{N_l^\uparrow N_r^\downarrow}{N_l^\downarrow N_r^\uparrow}} + 1} = P_{\text{pol}} S_{\text{eff}} \quad \text{und} \quad A_{\text{mon}} = \frac{\sqrt{\frac{M_l^\uparrow M_r^\downarrow}{M_l^\downarrow M_r^\uparrow}} - 1}{\sqrt{\frac{M_l^\uparrow M_r^\downarrow}{M_l^\downarrow M_r^\uparrow}} + 1} = P_{\text{mon}} S_{\text{eff}}. \quad (4.2)$$

Die einzelnen Polarisationswerte  $P_{\text{pol}}$  und  $P_{\text{mon}}$  werden dann zur echten Polarisation analog zu Gl. (4.1) verrechnet. Die Messunsicherheit  $\Delta P_y$  ergibt sich durch Fehlerfortpflanzung:

$$\begin{aligned} P_y &= P_{\text{pol}} + c P_{\text{mon}} \\ (\Delta P_y)^2 &= (\Delta P_{\text{pol}})^2 + c^2 (\Delta P_{\text{mon}})^2 \\ &= \left( \frac{1 - A_{\text{pol}}^2}{4 S_{\text{eff}}} \right)^2 \sum_{i \in \{l,r\}} \sum_{\chi \in \{\uparrow, \downarrow\}} \frac{1}{N_i^\chi} + c^2 \left( \frac{1 - A_{\text{mon}}^2}{4 S_{\text{eff}}} \right)^2 \sum_{i \in \{l,r\}} \sum_{\chi \in \{\uparrow, \downarrow\}} \frac{1}{M_i^\chi}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Ein Messzyklus wird als gültig angesehen, wenn die Werte der Primärpolarisation vorher und nachher innerhalb der statistischen Abweichung liegen.

In Abbildung 4.2 werden die statistischen Verteilungen der Primärpolarisationswerte bei einem Ofen-Heizstrom von  $I_{\text{Heiz}} = 0 \text{ A}$  (links) und unter Betriebsbedingung bei  $I_{\text{Heiz}} = 1,8 \text{ A}$  (rechts) gezeigt. Zur Auswertung ist in beide Auftragungen jeweils eine Anpassung an eine



**Abb. 4.2.:** Histogramm der Primärpolarisation  $P_y$  bei kaltem Ofen (links:  $I_{\text{heiz}} = 0 \text{ A}$ ) und bei Betrieb (rechts:  $I_{\text{heiz}} = 1,8 \text{ A}$ ), jeweils mit Anpassung an eine GAUSS-Normalverteilung.

GAUSS-Normalverteilung eingezeichnet, die die Messwerte gut repräsentiert. Die Parameter sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst. Darin sind die Werte aus der Anpassung ( $\bar{P}_y^{(1)}, \sigma^{(1)}$ ) und aus der direkten Berechnung aus den Messwerten ( $\bar{P}_y^{(2)}, \sigma^{(2)}$ ) aufgeführt. Der Stichprobenumfang wird mit  $n$  bezeichnet. Innerhalb der Standardabweichungen weichen die Werte nicht

$I_{\text{Heiz}}$ (A)	$n$	Normalverteilung		berechnet	
		$\bar{P}_y^{(1)}$	$\sigma^{(1)}$	$\bar{P}_y^{(2)}$	$\sigma^{(2)}$
0	43	0,2672	0,0037	0,2651	0,0042
1,8	55	0,2654	0,0032	0,2657	0,0045

**Tab. 4.1.:** Auswertung der Primärpolarisationsbestimmung in Abb. 4.2.

voneinander ab. Der Ofenbetrieb wirkt sich daher nicht auf die Spinpolarisation aus, d. h., dass der Einfluss des Heizstroms, sowie etwaiger resultierender Magnetfelder, vernachlässigt werden kann. Die Primärpolarisation ist daher  $P_y = 26,6\%$  mit einer absoluten Unsicherheit eines Einzelmesswerts von  $\Delta P_y = \pm 0,5\%$ . Dieser Wert der Abweichung wird üblicherweise bei einer Datenerfassungszeit von 300 s pro Einzelschritt erreicht, wenn Gl. (4.3) zu Grunde gelegt wird. Werden mechanische und elektrische Umschaltzeiten bei der Erfassung der einzelnen Zählraten berücksichtigt, so dauert eine Polarisationsbestimmung etwa 45 min.

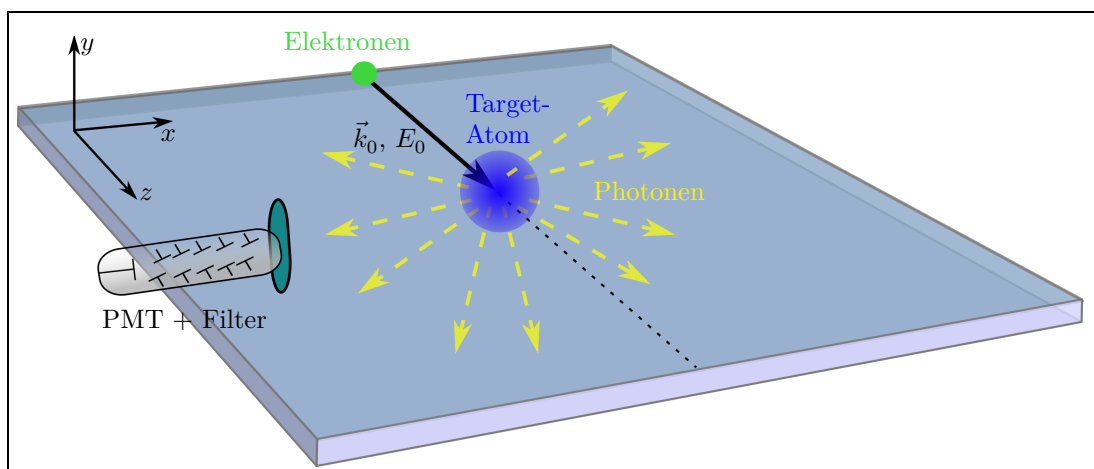
#### 4.1.3. Kalibrierung der Primärenergie

Im Folgenden werden die Kalibrierung der Primärenergie und die Abschätzung ihres Vertrauensbereichs behandelt. Im Allgemeinen ist sie abhängig von der gewählten Targetsubstanz. Das an der Elektronenkathode angelegte negative Potenzial  $U_0$  legt die Primärenergie  $E_0$  der Elektronen fest, die jedoch um einen Betrag ( $e_0 \cdot \Delta U_{\text{target}}$ ) geringer ist:

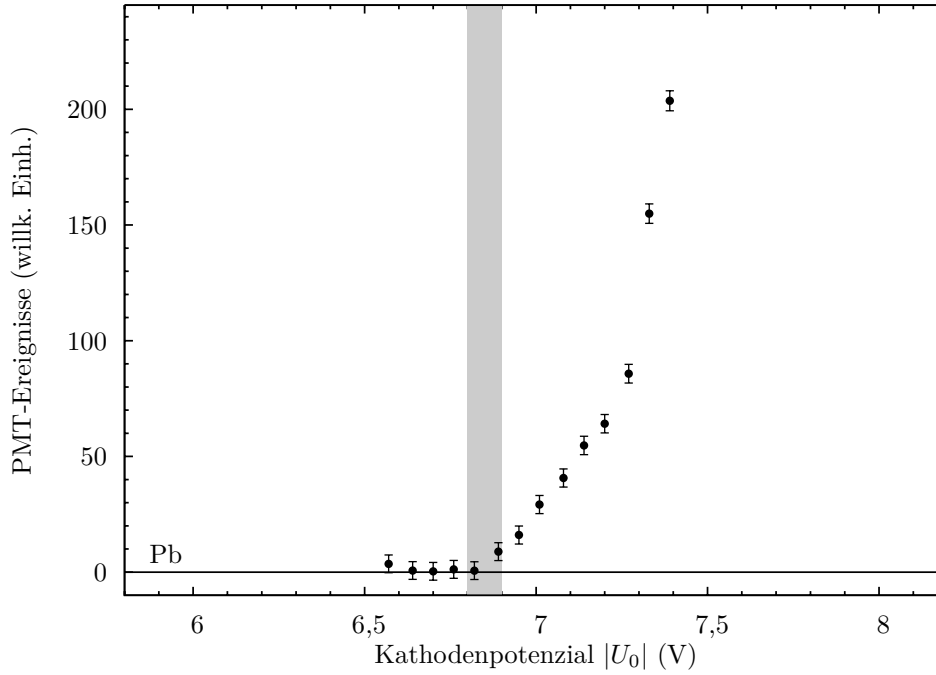
$$E_0 = e_0 \cdot (|U_0| - \Delta U_{\text{target}}).$$

$\Delta U_{\text{target}}$  wird Kontaktpotenzial genannt, das aus dem elektrischen Kontakt zwischen den vom Elektronenstrahl getroffenen Komponenten und dem Targetmaterial herrührt.

Das Messprinzip wird in Abbildung 4.3 schematisch dargestellt. Zur Kalibrierung der



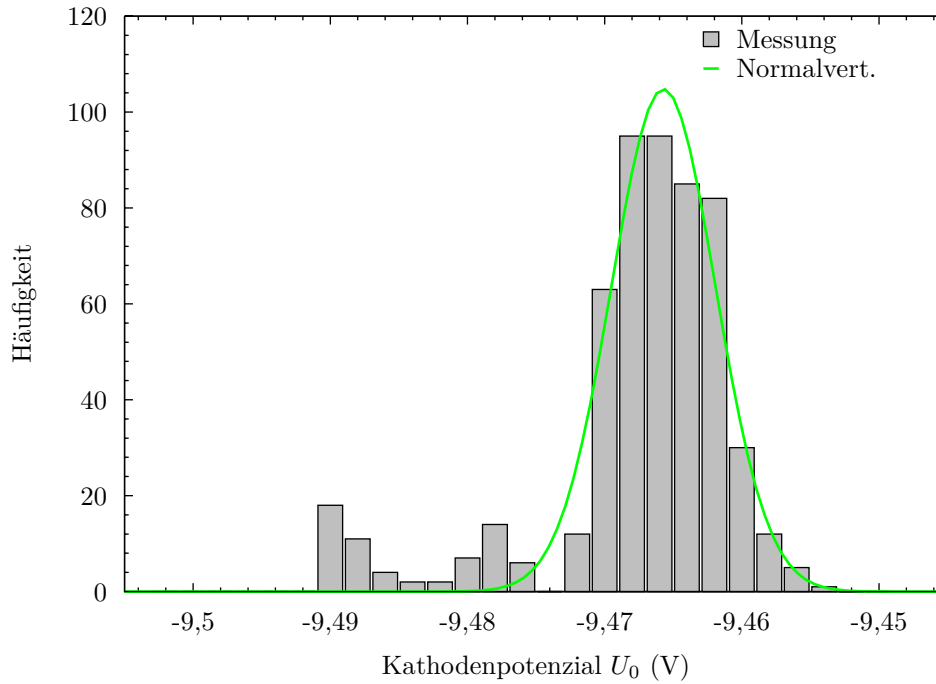
**Abb. 4.3.:** Messprinzip der Energiekalibrierung. Die verschiebbare Linse ist hier nicht gezeigt.



**Abb. 4.4.:** Kalibrierung der Primärenergie  $E_0$  an Blei: Die Anregungsschwelle des Übergangs  $6p7s\ ^3P_1 \rightarrow 6p^2\ ^3P_2 + \hbar\lambda$  bei  $6,8\text{ V} \leq |U_0| \leq 6,9\text{ V}$  ist markiert. Das Kontaktpotenzial ist  $\Delta U_{\text{Pb}} = (2,47 \pm 0,10)\text{ eV}$ .

Primärenergie wird die Stoßanregung eines atomaren Übergangs genutzt. Der einfallende Elektronenstrahl trifft den Atomdampf und regt ihn zum Leuchten an. Emittierte Photonen werden seitlich in einer Kombination aus einer verschiebbaren Linse (nicht gezeigt), einem Interferenzfilter und einem Photomultiplier (PMT: EMI 9789) detektiert. Das Kathodenpotenzial  $U_0$  wird variiert. Überschreitet die Primärenergie die Anregungsenergie des Übergangs, so nimmt die Ereignis-Zählrate am Detektor stark zu. Dieser Punkt wird zur Kalibrierung herangezogen. Der Messablauf wird per Rechner gesteuert. Das Kathodenpotenzial wird über den benötigten Energiebereich variiert und die jeweilige Ereignis-Zählrate wird am Photomultiplier aufgezeichnet. Dieser automatisierte Ablauf ermöglicht die mehrfache Wiederholung. Abbildung 4.4 zeigt eine solche Messung für das Target Blei. Ausgewählt wird der intensivste Übergang  $6p7s\ ^3P_1 \rightarrow 6p^2\ ^3P_2 + \hbar\lambda$  mit einer Wellenlänge von  $\lambda = 405,7\text{ nm}$ , der im Termschema von Blei (Abb. 1.6) eingezeichnet ist. Die Stoßanregung aus dem Grundzustand erfolgt bei  $E_0 \geq 4,38\text{ eV}$ . Üblicherweise werden bei solchen niedrigen Energien maximale Strahlströme von etwa 50 bis 70 nA im Streuzentrum erzielt, auch wenn mehrere  $\mu\text{A}$  Emissionsstrom aus der Elektronenquelle austreten. Die Zentral-Wellenlänge des verwendeten Filters wird mit  $\lambda = 405,5\text{ nm}$  bei einer Halbwertsbreite von 3,8 nm angegeben (Typ Schott MA 3-0.3). Eine Untergrundkorrektur wird aus den Photomultiplier-Ereignisraten für  $|U_0| < 6,8\text{ V}$  durch Mittelung bestimmt, da sich in diesem Bereich ohne Anregung ein Plateau ausbildet. Für ein Kathodenpotenzial im Bereich  $6,8\text{ V} \leq |U_0| \leq 6,9\text{ V}$  steigt die Zählrate am Photomultiplier an. Den Mittelwert





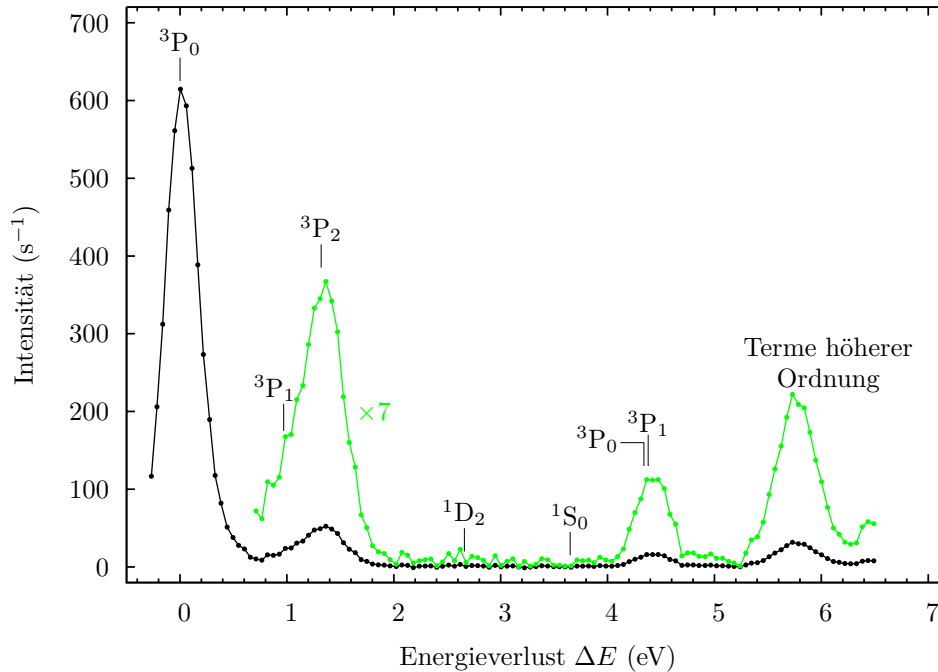
**Abb. 4.5.:** Histogramm des Kristallpotenzials  $U_0$  bei Rechnersteuerung:  $E_0 = 7 \text{ eV}$ .

$|U_0| = 6,85 \text{ V}$  zu Grunde gelegt, wird das Kontaktpotenzial für Blei auf  $\Delta U_{\text{Pb}} = (2,47 \pm 0,10) \text{ V}$  bestimmt. Bei dieser Fehlerabschätzung werden apparative Schwankungen berücksichtigt, die aus der Rechnersteuerung des Kathodenpotenzials resultieren. Als Beispiel ist ein Histogramm des Kathodenpotenzials bei der Streuenergie  $7 \text{ eV}$  in Abbildung 4.5 gezeigt. Darin ist eine leichte Schwankung zu erkennen, obwohl eine signifikante Häufung oberhalb von  $U_0 \approx -9,47 \text{ V}$  auftritt. Zum Vergleich ist eine Anpassung dieser Werte an eine Normalverteilung mit dem Mittelwert  $\bar{U}_0 = -9,466 \text{ V}$  und der Standardabweichung  $\sigma = 0,004 \text{ V}$  eingezeichnet. Zusammen mit der obigen Ungenauigkeit bei der Bestimmung des Kontaktpotenzials wird der Vertrauensbereich insgesamt auf  $\Delta U_0 = \pm 0,10 \text{ V}$  abgeschätzt.

Für gasförmige Targetmoleküle wurde bei HOLTKÖTTER (2008) nach derselben Vorgehensweise eine Kalibrierung an Xenon bei Primärenergien um  $E_0 = 11 \text{ eV}$  durchgeführt, bei denen die Transmission des Elektronenstrahls besser ist als bei  $E_0 = 4,4 \text{ eV}$ . Jedoch beträgt dabei das Kontaktpotenzial  $\Delta U_{\text{Xe}} \approx 3,7 \text{ V}$ , es ist somit größer als beim Blei. Des Weiteren ist das Nebengruppenelement Europium ( ${}_{63}\text{Eu}$ ) als Targetmaterial erprobt worden (Abschn. A.5). Eine Energiekalibrierung ergibt hier  $\Delta U_{\text{Eu}} \approx 2,6 \text{ V}$ , was wiederum von  $\Delta U_{\text{Pb}}$  abweicht. Auf Grund dieser Unterschiede ist eine Kalibrierung an der jeweiligen Targetsubstanz vorzuziehen.

#### 4.1.4. Elektronen-Energieverlustspektrum

Zur Überprüfung der Ofenfunktion und der Target-Reinheit wird ein sogenanntes Elektronen-Energieverlustspektrum aufgenommen. Dazu werden die am Target gestreuten Elektronen



**Abb. 4.6.:** Elektronen-Energieverlustspektrum von Blei für  $\vartheta = 40^\circ$  bei  $E_0 = 15$  eV Primärenergie bis  $\Delta E = 6,5$  eV. Ein Teil der Messung ist 7-fach überzeichnet dargestellt (grün). Die eingezeichneten Linien dienen der Führung des Auges.

energieselektiv im  $180^\circ$ -Spektrometer bei einer festen Primärenergie  $E_0$  nachgewiesen. Die Sollbahnenergie wird so gewählt, dass nachgewiesene Elektronen bei 20 eV das Spektrometer passieren. Inelastisch gestreute Elektronen mit dem Energieverlust  $\Delta E$  werden dadurch registriert, dass die Potenziale am Nachweiskanal um eine Spannung  $\Delta U = \Delta E/e_0$  nachgeführt werden. Für jeden eingestellten Energieverlust wird die Zählrate des Einkanal-Elektronen-Vervielfachers bei geöffnetem sowie zur Untergrundkorrektur bei geschlossenem Ofenschieber aufgezeichnet.

In Abbildung 4.6 ist eine solche Messung für den Streuwinkel  $\vartheta = 40^\circ$  dargestellt. Die Primärenergie beträgt hier 15 eV und der maximale Energieverlust  $\Delta E = 6,5$  eV. Die Elektronen werden bei 20 eV Sollbahnenergie im Spektrometer nachgewiesen. Die auftretenden Peaks rühren von den Energieniveaus des Target-Atoms her, an denen die Elektronen gestreut werden. Die  $LS$ -Terme aus Abbildung 1.6 sind bei den entsprechenden Energien eingezeichnet, wodurch eine Zuordnung vorgenommen wird. Der elastische Peak des Grundzustandes ( ${}^3P_0$ ) hat die höchste Streuintensität. Anhand dessen energetischer Breite wird die Energieauflösung der Streuapparatur bei 20 eV Sollbahnenergie auf  $\Delta E_0 = 250$  meV abgeschätzt. Es schließt sich eine breitere Struktur an, in der zwei Niveaus nicht getrennt voneinander aufgelöst werden. Die Konfigurationen sind  $6p^2 {}^3P_1$  (0,93 eV) und  $6p^2 {}^3P_2$  (1,32 eV). Bei der ersteren ist die Streuintensität offenbar geringer, weil sie nicht als Peak gegenüber der zweiten auftritt. Die Zustände  $6p^2 {}^1D_2$  und  $6p^2 {}^1S_0$  treten nicht deutlich hervor. Dem nächsten Peak werden die

Konfigurationen  $6p7s\ ^3P_{0,1}$  (4,33 eV, 4,38 eV) zugeordnet. Terme höherer Energie treten bei Energieverlusten  $\Delta E > 5,3\text{ eV}$  auf und werden vom Nachweissystem nicht mehr getrennt. In dem beobachteten Energiebereich treten keine weiteren Strukturen auf, die auf eine Verunreinigung des Targetmaterials hindeuten. Die Strukturen im Energieverlustspektrum können eindeutig Zuständen des Bleiatoms zugeordnet werden.

## 4.2. Messgrößen

Als Messgrößen werden die Parameter Wirkungsquerschnitt und Spin-Asymmetriefunktion betrachtet. Beide werden winkeldifferenziell bei Primärenergien bis zu 15 eV erfasst. Während einer Streumessung können der Strahlstrom und die Targetedichte im Streuzentrum nicht erfasst werden, weshalb insbesondere bei ersterem dessen Größenordnung nur relativ erfasst werden kann und somit die Ergebnisse nur qualitativen Charakter haben. Die Spin-Asymmetriefunktion hingegen ist eine relative Größe, sodass sie quantitativ bestimmt werden kann.

Die Vorgehensweise der Datenerfassung sowie die Auswertung der experimentellen Unsicherheiten wird im Folgenden dargestellt. Sofern keine weiteren Angaben erfolgen, werden für die Zählraten das POISSON-Gesetz und für die weitere Auswertung die GAUSS'sche Fehlerfortpflanzung angewendet.

### 4.2.1. Relativer differenzieller Wirkungsquerschnitt

Für ausgewählte Energien wird der relative differenzielle Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{\text{rel}}(\vartheta)$  gemessen. Die apparativen Gegebenheiten reichen nicht aus, diese Größe absolut zu bestimmen. Es wird bei einer festen Primärenergie die Zählrate der gestreuten Elektronen  $N(\vartheta)$  im Winkelbereich  $35^\circ \leq \vartheta \leq 135^\circ$  im *Channeltron* hinter dem Spektrometer detektiert. Bei geschlossenem Schieber wird der Streuuntergrund  $U(\vartheta)$  ermittelt und zur Korrektur herangezogen:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \sigma_{\text{rel}}(\vartheta) = N(\vartheta) - U(\vartheta). \quad (4.4)$$

Die Unsicherheit wird angegeben durch eine Größtfehlerabschätzung:

$$\Delta\sigma_{\text{rel}}(\vartheta) = \sqrt{N(\vartheta)} + \sqrt{U(\vartheta)}. \quad (4.5)$$

### 4.2.2. Spin-Asymmetriefunktion

Zur Bestimmung der Asymmetriefunktion  $S_A$  werden die transmittierten gestreuten Elektronen in dem am Spektrometerraustritt angebrachten *Channeltron* nachgewiesen.

In der Auswertung werden die einzelnen Streusignal-Zählraten ( $N^\uparrow$ ,  $N^\downarrow$ ) für die jeweilige Spin-Ausrichtung sowie der jeweilige Streuuntergrund ( $U^\uparrow$ ,  $U^\downarrow$ ) subtrahiert. Der Asymmetriepara-

meter wird aus der Streuasymmetrie  $A(\vartheta)$  und der Polarisation  $P_y$  nach folgender Gleichung berechnet:

$$S_A(\vartheta) = \frac{1}{P_y} \cdot A(\vartheta) = \frac{1}{P_y} \cdot \frac{(N^\uparrow - U^\uparrow) - (N^\downarrow - U^\downarrow)}{(N^\uparrow - U^\uparrow) + (N^\downarrow - U^\downarrow)} \quad (4.6)$$

Der Vertrauensbereich der Einzelzählraten berechnet sich nach dem POISSON-Gesetz. Aus der Fehlerfortpflanzung wird formell die Unsicherheit der Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  berechnet:

$$(\Delta S_A)^2 = \left( \frac{1}{P_y} \Delta A \right)^2 + \left( \frac{A}{P_y^2} \Delta P_y \right)^2 \quad \text{mit} \quad (4.7)$$

$$\Delta A = \frac{2 \sqrt{(N^\downarrow - U^\downarrow)^2 (N^\uparrow + U^\uparrow) + (N^\uparrow + U^\uparrow)^2 (N^\downarrow - U^\downarrow)}}{(N^\uparrow - U^\uparrow + N^\downarrow - U^\downarrow)^2} \quad (4.8)$$

Der Ablauf eines Messzyklus ist in Abbildung 4.7 schematisch dargestellt. Bei der Datenerfassung werden die Zählraten für beide Spinausrichtungen abwechselnd aufgezeichnet und es wird jeweils der Streuuntergrund bestimmt. Die Erfassung eines Messpunktes besteht aus der Aufzeichnung der Detektorereignisse von 16 Schritten. Diese gruppieren sich in vier Sequenzen aus einem Spin-Schaltzyklus. Die Spinpolarisation wird zuerst auf *Spin-up*, dann

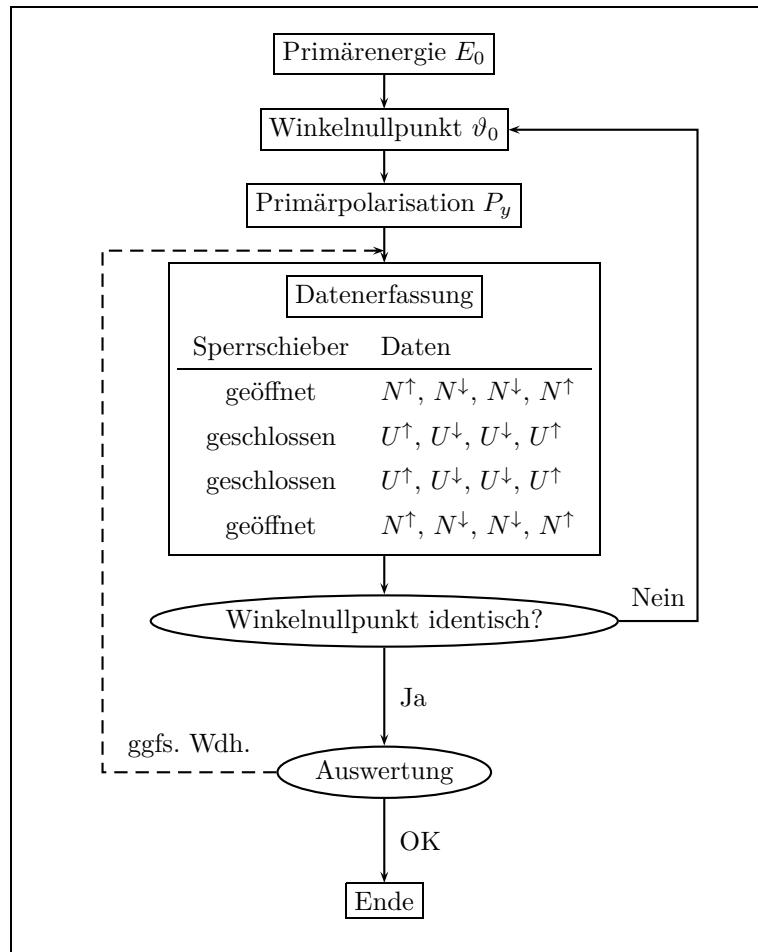


Abb. 4.7.: Schema eines Messzyklus zur Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$ .

zweimal auf *Spin-down* und zuletzt wiederum auf *Spin-up* eingestellt. Dieser Zyklus wird viermal ausgeführt, zuerst und zuletzt mit Target im Streuzentrum, dazwischen zweimal bei geschlossenem Schieber. Auf diese Weise werden die Anzahl an Umschaltvorgängen sowie der Einfluss von Störungen und Schwankungen der Strahlintensität minimiert.

In dem Schema in Abb. 4.7 ist nicht explizit berücksichtigt, dass aufgrund des unterschiedlichen Wirkungsquerschnitts die Messung an bestimmten Winkeln öfter wiederholt werden muss als z. B. bei kleinen Winkeln. Anhand der Auswertung der Zwischenergebnisse wird letztlich entschieden, inwiefern eine Messung als abgeschlossen angesehen werden kann. Die Ergebnisse der Einzelmessungen werden dann gemittelt, indem alle entsprechenden Einzelzählraten aufsummiert und ausgewertet werden.

Bei der Streuung an Blei werden nur die positiven Streuwinkel angefahren, da aus vorherigen Arbeiten (HOLTKÖTTER, 2003; JÜTTEMANN, 2003; HOLTKÖTTER, 2008) die Primärpolarisation der Elektronenquelle genau bekannt ist und die früheren Messungen der Arbeitsgruppe zum Vergleich herangezogen werden können (KAUSSEN, 1985; GEESMANN, 1990). Zudem wird der Winkelnullpunkt regelmäßig kontrolliert.

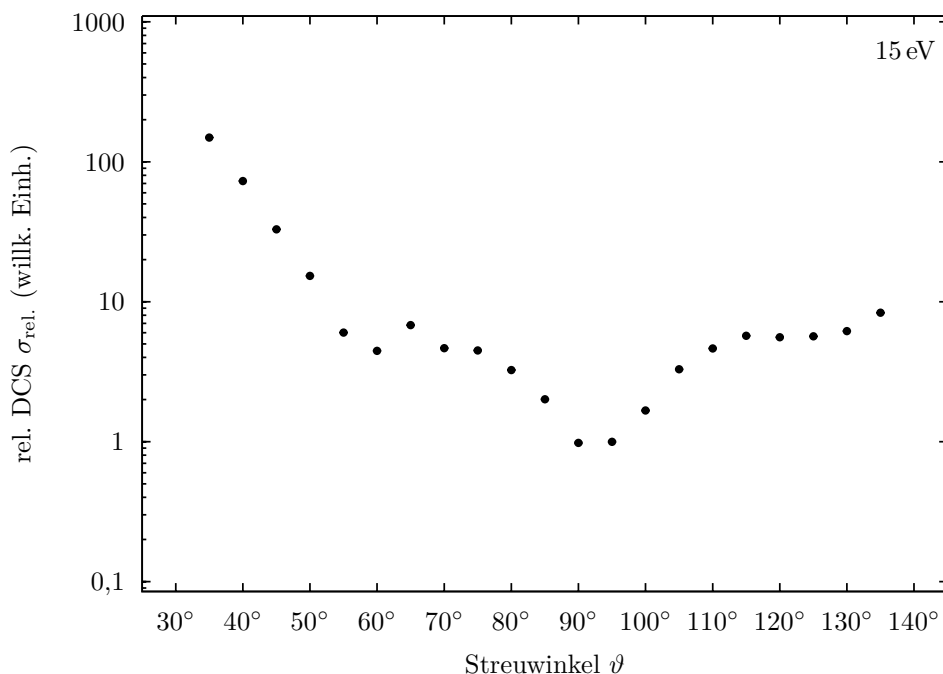
## 5. Messergebnisse

Die im Rahmen dieser Arbeit vorgenommenen Messungen werden im Folgenden vorgestellt. Der relative differenzielle Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{\text{rel}}(\vartheta)$  dient im Allgemeinen der Analyse markanter Stellen. Anschließend werden die Untersuchungen der Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  vorgestellt, die zum einen für ausgewählte Primärenergien zwischen 11 und 14 eV winkeldifferenziell, und zum anderen für zwei feste Winkel ( $\vartheta \in \{65^\circ, 130^\circ\}$ ) für den Bereich von 6 bis 15,5 eV bestimmt worden ist.

Generell zeigte sich bei der Durchführung der Messung, dass der aufgeheizte Ofen in der Nähe des Streuzentrums zu einem hohen Streuuntergrund führt, der auf ausströmende Restgase zurückzuführen ist. Das Signal-zu-Rauschen-Verhältnis ist deshalb bestenfalls 1:1, liegt jedoch häufig zwischen 1:5 bis 1:10.

### 5.1. Relativer differenzieller Wirkungsquerschnitt

In diesem Abschnitt werden die Messungen zum relativen differenziellen Wirkungsquerschnitts (rel. DCS) für die Primärenergie 15 eV vorgestellt. In Abbildung 5.1 wird der relative DCS für elastische Streuung bei  $E_0 = 15 \text{ eV}$  dargestellt. Generell fällt er von den kleinen zu den seitlichen Streuwinkeln hin ab und steigt von dort zu den rückwärtigen wieder an. Bei  $90^\circ \leq$



**Abb. 5.1.:** Relativer DCS von atomarem Blei bei 15 eV Streuenergie in logarithmischer Darstellung. Die Fehlerbalken sind in der Darstellung nicht aufgelöst.

$\vartheta \leq 95^\circ$  wird ein Minimum durchlaufen. Andere Strukturen werden nicht explizit aufgelöst, jedoch deuten sich Sattelpunkte bei  $\vartheta = 65^\circ$  und bei  $\vartheta = 110^\circ$  an.

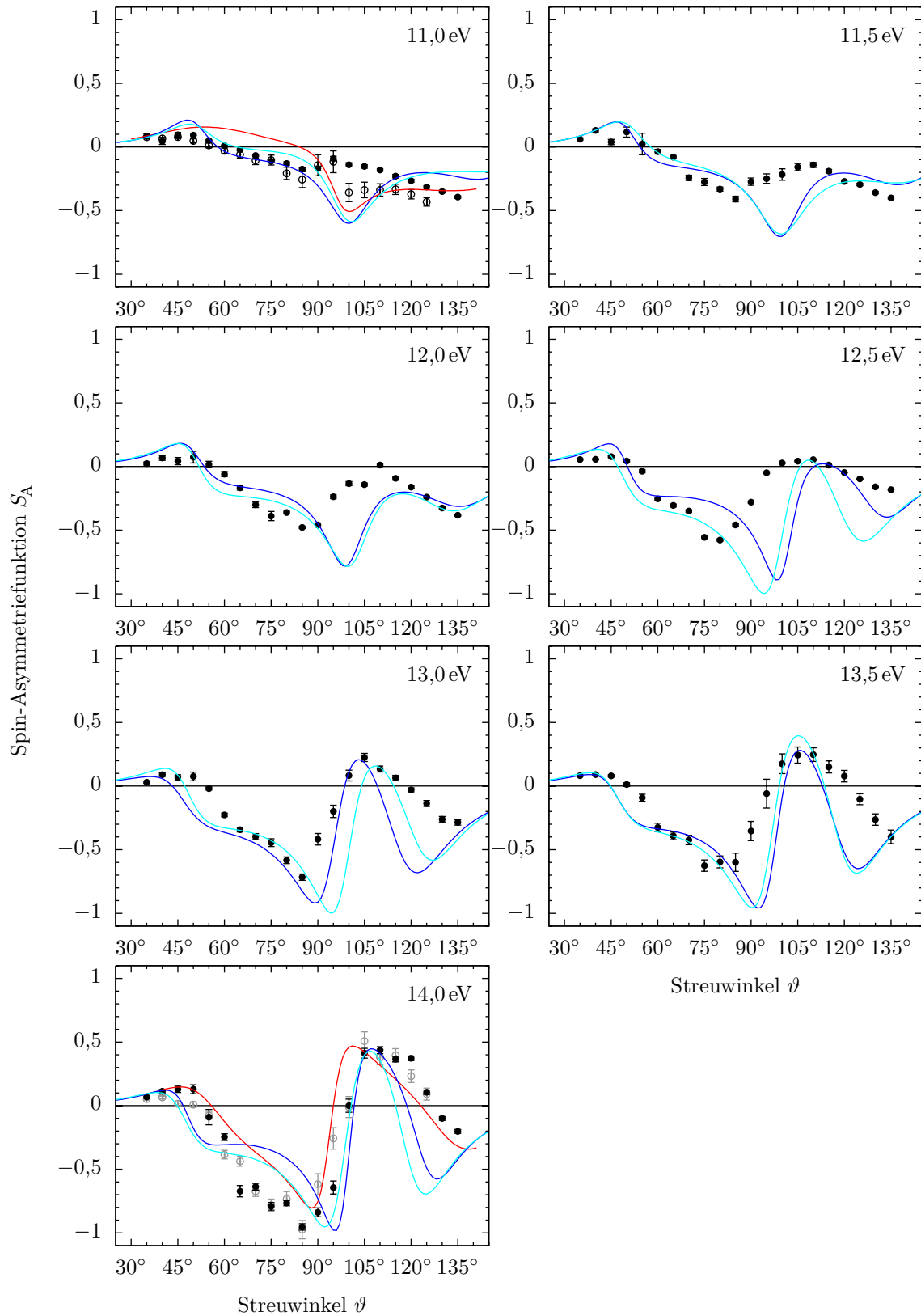
## 5.2. Winkelverteilung der Spin-Asymmetriefunktion von Blei im Bereich 11 – 14 eV

Im Folgenden werden die Ergebnisse der winkeldifferenziellen Untersuchungen der Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  von Blei für den Streuwinkel-Bereich  $35^\circ \leq \vartheta \leq 135^\circ$  vorgestellt. Die Einschussenergie der Elektronen wird zwischen 11 eV und 14 eV in 0,5 eV-Schritten variiert. Die Werte werden anschließend mit Ergebnissen aus Modellrechnungen verglichen. Für alle Primärenergien stehen RMP-HF-, RMP-DF- und  $R$ -Matrix-Rechnungen (BPRM-5, DBSR-20) zur Verfügung (Abschn. 1.5). Für  $E_0 = 11,0$  eV und  $E_0 = 14,0$  eV sind ältere Modellrechnungen von HABERLAND und FRITSCH (1987) vorhanden, denen ein Verfahren mit Störungsrechnung und einem Potenzialansatz zugrunde liegt. Darin werden Potenzialterme für die Polarisierbarkeit des Target-Atoms und für Elektronenaustausch berücksichtigt, die ohne Kenntnis der experimentellen Ergebnisse aus physikalischen Überlegungen heraus berechnet werden. Als Bezeichnung wird die Abkürzung GKS (*Generalized KOHN-SHAM*) verwendet.

Die Darstellung ist getrennt nach den theoretischen Methoden aufgeführt. Es werden zuerst die Rechnungen mit einem Potenzialansatz (RMP, GKS) diskutiert, danach die, die nach der  $R$ -Matrix-Methode behandelt werden. Die eingezeichneten Messunsicherheiten zeigen den statistischen Fehler nach Gl. (4.7).

In Abbildung 5.2 sind die Messergebnisse der Spin-Asymmetriefunktion für den Energiebereich  $11,0 \text{ eV} \leq E_0 \leq 14,0 \text{ eV}$  zusammen mit den Modellrechnungen nach der RMP-Methode und den GKS-Rechnungen von HABERLAND und FRITSCH (1987) dargestellt. Zum Vergleich sind die Ergebnisse von GEESMANN *et al.* (1991) eingefügt. Die sieben Felder sind mit der Primärenergie beschriftet.

Generell wird eine ausgeprägte Energieabhängigkeit festgestellt. Bei  $E_0 = 11,0$  eV beginnend, ist für die Streuwinkel  $\vartheta < 60^\circ$  die Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  positiv, oberhalb davon negativ. Extrema treten hier nicht ausgeprägt auf, jedoch deutet sich um  $\vartheta = 95^\circ$  ein Maximum an. Zu größeren Winkeln hin fällt  $S_A$  weiter ab. Mit steigender Primärenergie treten zwei Extrema merklich hervor: ein Minimum bei  $\vartheta = 85^\circ$  und ein Maximum bei  $\vartheta = 110^\circ$ . Im Rahmen der experimentellen Unsicherheiten nimmt das Maximum bei 12 eV Primärenergie den Wert Null an und ist für größere Energien positiv, bei 14 eV Primärenergie liegt der Wert bei  $S_A = 0,5$ . Zu großen Winkeln hin fällt die Spin-Asymmetriefunktion in den negativen Wertebereich ab. Der Nulldurchgang liegt bei Streuwinkeln  $120^\circ \leq \vartheta \leq 125^\circ$ . Für Primärenergien  $E_0 \geq 13$  eV wird um  $\vartheta = 65^\circ$  eine Struktur nicht besser aufgelöst, die den



**Abb. 5.2.:** Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  für elastische Streuung an Blei im Vergleich zu RMP- und GKS-Rechnungen: • diese Arbeit, ○ Geesmann, — GKS, — RMP-HF, — RMP-DF.



Verlauf eines Sattelpunkts hat.

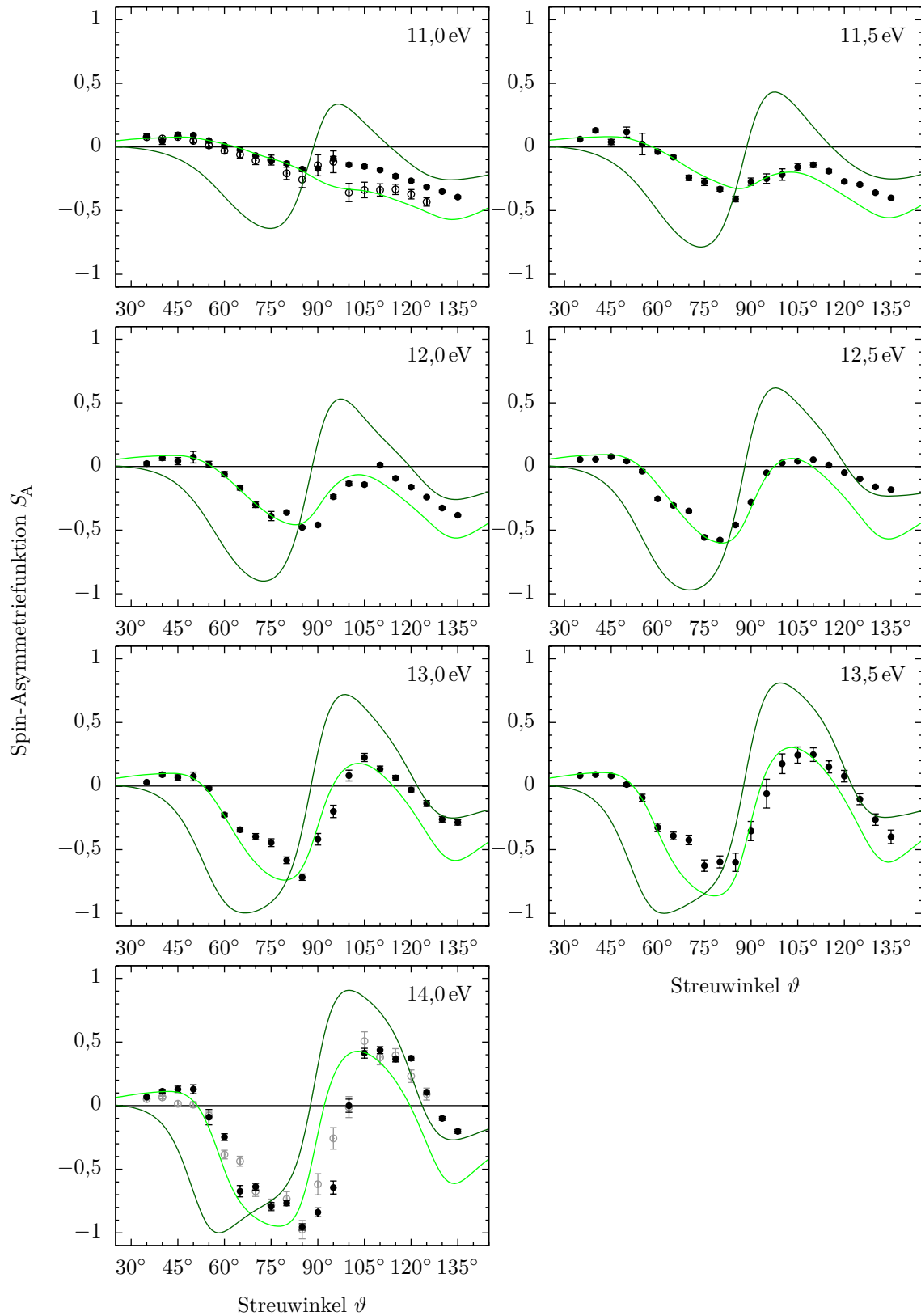
Die vorhandenen Messergebnisse von GEESMANN *et al.* (1991) für 11 eV und 14 eV werden im Rahmen der statistischen Unsicherheiten reproduziert. Lediglich bei einer Primärenergie von  $E_0 = 11$  eV treten für Streuwinkel  $100^\circ \leq \vartheta \leq 110^\circ$  Abweichungen auf. Der beobachtete Winkelbereich ist durch die Messungen auf Streuwinkel bis  $\vartheta = 135^\circ$  erweitert worden. Im Allgemeinen wird der zuvor bekannte Verlauf experimentell wiedergegeben. Somit ist die gewählte Methode zur Messung der Asymmetriefunktion geeignet.

Die GKS-Rechnungen von HABERLAND und FRITSCHKE (1987) zeigen bei einer Primärenergie von  $E_0 = 11$  eV eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten für Streuwinkel  $\vartheta \leq 90^\circ$ . Das berechnete Minimum bei  $100^\circ$  kann nicht bestätigt werden. Um diesen Winkel herum treten die größten Abweichungen auf. Die zweite verfügbare Rechnung nach dieser Methode zeigt für  $E_0 = 14,0$  eV eine gute Übereinstimmung mit dem gemessenen Verlauf über den beobachteten Streuwinkel-Bereich, wie es auch schon bei GEESMANN *et al.* (1991) diskutiert wurde.

In Abbildung 5.2 wird gezeigt, dass die RMP-HF- und RMP-DF-Rechnungen mit den Messergebnissen für  $\vartheta \leq 90^\circ$  übereinstimmen, zu größeren Winkeln weichen sie jedoch ab. Auch hier wird bei  $E_0 = 11,0$  eV ein Minimum bei  $\vartheta = 100^\circ$  angezeigt, das nicht bestätigt wird. Zu höheren Primärenergien hin wird dieses Minimum bei einem Streuwinkel von  $\vartheta = 95^\circ$  angegeben. Das in den Messungen auftretende Maximum wird generell von beiden Varianten für  $E_0 \geq 12,5$  eV erfasst. Es wird ein weiteres Minimum bei großen Streuwinkeln angezeigt, das von den Messergebnissen nicht bestätigt wird. Im Allgemeinen werden die Messergebnisse bei den Primärenergien  $E_0 = 13,5$  eV und  $E_0 = 14,0$  eV gut wiedergegeben. Der Verlauf der beiden Varianten ist sehr ähnlich. Bei  $E_0 = 12,5$  eV und  $E_0 = 13,0$  eV wird die Sattelpunkts-Struktur um  $\vartheta = 65^\circ$  erfasst. Bei diesen Energien treten Unterschiede zwischen beiden Methoden hervor. Insbesondere weist das RMP-HF-Modell hier eine tendenziell bessere Übereinstimmung auf. Im Allgemeinen kann hieraus keine Aussage über den physikalischen Mechanismus der Streuung getroffen werden.

In Abbildung 5.3 sind die Messergebnisse im Vergleich zu den *R*-Matrix-Rechnungen dargestellt. Zum einen wird die BPRM-5-Variante gezeigt. Die Berechnungen stimmen weder quantitativ noch qualitativ mit den Ergebnissen im gesamten beobachteten Bereich überein. Lediglich für die höheren Primärenergien kann hieraus eine Aussage über die Lage der Extrema getroffen werden. Die Methode ist hier ungeeignet zur Beschreibung der auftretenden Spin-Asymmetrien.

Das DBSR-20-Modell stimmt bei  $E_0 = 11,0$  eV für  $\vartheta \leq 90^\circ$  mit den Messungen überein. Bei größeren Winkeln wird tendenziell der Verlauf wiedergegeben, jedoch bei größeren Beträgen.



**Abb. 5.3.:** Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  für elastische Streuung an Blei im Vergleich zu  $R$ -Matrix-Rechnungen: • diese Arbeit, ○ Geesmann, — DBSR-20, — BPRM-5.

Im Bereich  $11,5 \text{ eV} \leq E_0 \leq 13,5 \text{ eV}$  werden die Messungen bis zum Maximum bei  $\vartheta = 110^\circ$  gut wiedergegeben. Bei größeren Winkeln weicht die Rechnung von den experimentellen Ergebnissen zu größeren Beträgen hin ab, folgt aber tendenziell dem Verlauf. Bei einem Streuwinkel von  $\vartheta = 135^\circ$  wird ein weiteres Minimum angezeigt, das aufgrund des begrenzten Umfangs der Messungen nicht nachvollzogen werden kann. Diskrepanzen zeigen sich bei einer Streuenergie von  $E_0 = 14 \text{ eV}$ . Der experimentell bestimmte Verlauf wird tendenziell wiedergegeben, jedoch um bis zu  $10^\circ$  zu kleineren Winkeln verschoben. Die Sattelpunkts-Struktur bei  $\vartheta = 65^\circ$  wird nicht erfasst. Dennoch zeigt diese Methode generell eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Das DBSR-20-Modell stellt gegenüber der BPRM-5-Variante eine deutliche Verbesserung der Rechenmethode dar.

Die vorangegangene Besprechung zusammenfassend, wird für Primärenergien zwischen  $11 \text{ eV}$  und  $14 \text{ eV}$  eine starke Energieabhängigkeit der Spin-Asymmetriefunktion festgestellt, sowie in der Winkelverteilung ein ausgeprägtes Minimum bei  $85^\circ$  und ein Maximum bei  $110^\circ$  registriert. Die im Zusammenhang mit den Messergebnissen diskutierten Modellrechnungen fallen unterschiedlich aus. Zum einen hat sich eine gute Übereinstimmung der GKS-Rechnungen mit dem Experiment gezeigt, wobei bei  $E_0 = 11,0 \text{ eV}$  Abweichungen auftreten. Da bei dieser Methode ein Modellpotenzial für Elektronenaustausch einbezogen wird, sollte dieser bei weiteren Modellrechnungen berücksichtigt werden.

Bei der anderen Modellpotenzialmethode (RMP) wird die Winkelabhängigkeit der Spin-Asymmetriefunktion generell bei den Vorwärtswinkeln gut wiedergegeben. Ab  $E_0 = 13,0 \text{ eV}$  wird eine Sattelpunkts-Struktur erfasst und die Lage der Extrema annähernd wiedergegeben. Jedoch treten für große Winkel Abweichungen von den Messungen hervor. Tendenziell ist die Übereinstimmung der Rechnung mit relativistischem DIRAC-FOCK-Ansatz (RMP-DF) besser als die auf Basis der HARTREE-FOCK-Wellenfunktionen (RMP-HF). Ein Problem der hier diskutierten RMP-Rechnungen ist, dass sie an das Messergebnis angepasst wurden, so dass keine wirkliche Vergleichsmöglichkeit mit früheren Varianten wie z. B. der Modellrechnung bei TOŠIĆ *et al.* (2008) besteht, die für elastische Streuung an Blei entwickelt wurde.

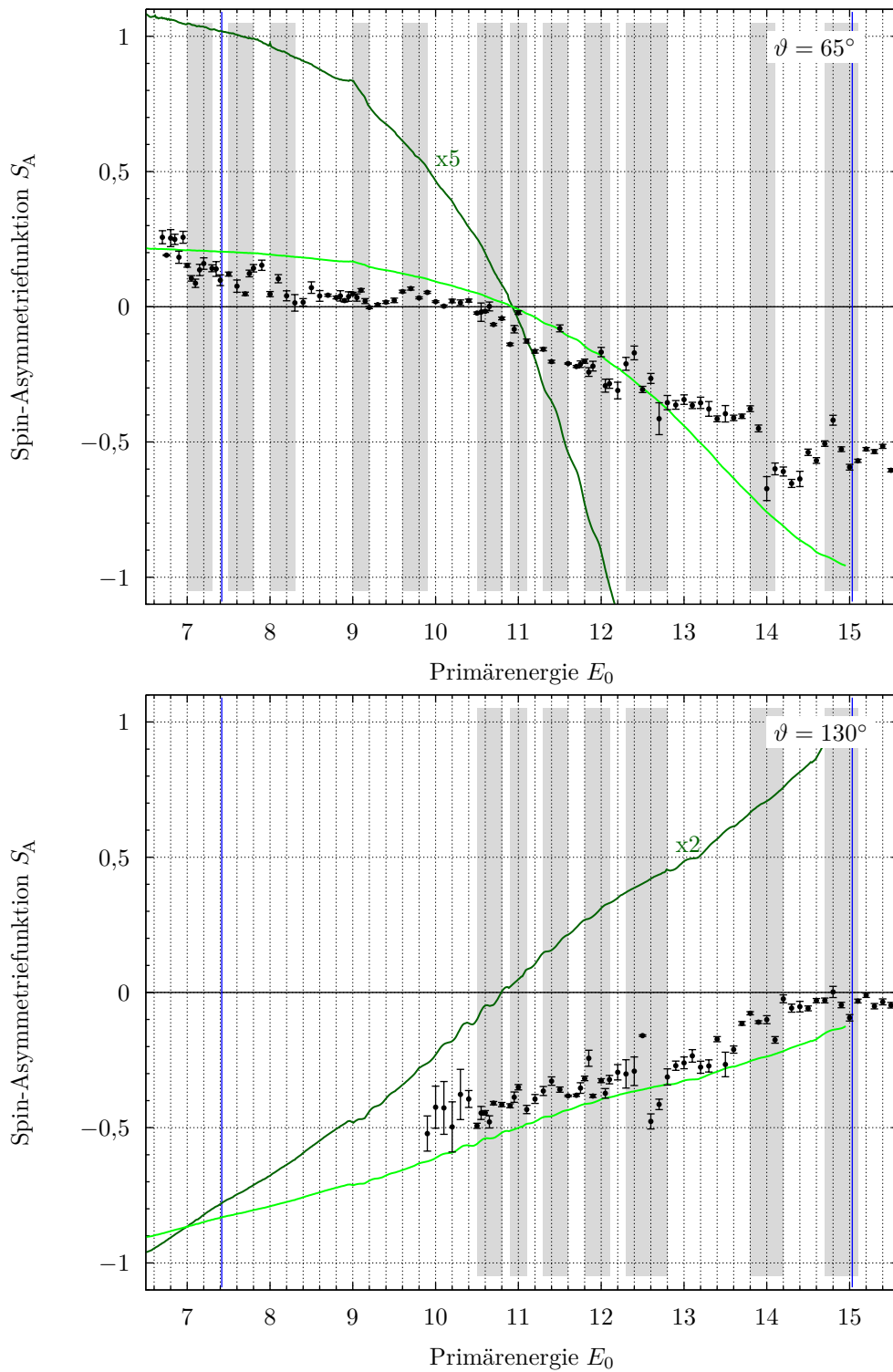
Das *R*-Matrix-Modell BPRM-5 erscheint in diesem Energiebereich ungeeignet, da weder deren Verlauf noch die Größenordnung mit den Messdaten vergleichbar sind. Die DBSR-20-Variante hingegen führt zu einer guten Übereinstimmung mit den Ergebnissen und hat den Vorteil, vom Ansatz her eine Basis zur Beschreibung der Orbitale des Target-Atoms zu beinhalten. Insbesondere werden bei dieser Methode Autoionisationszustände mit Termen im beobachteten Energiebereich berücksichtigt, die aufgrund der Übereinstimmung mit dem Experiment einbezogen werden müssen. Die Ergebnisse der hier präsentierten Untersuchungen sind kürzlich veröffentlicht unter HAMELBECK *et al.* (2009).

### 5.3. Resonanzstrukturen der Spin-Asymmetriefunktion von Blei für Primärenergien bis 15 eV

Im vorherigen Abschnitt ist gezeigt worden, dass die DBSR-20-Modellrechnungen die Ergebnisse der winkeldiffenziellen Untersuchungen der Spin-Asymmetriefunktion in dem betrachteten Energiebereich gut beschreiben. Insbesondere wird vermutet, dass die zehn Zustände der Konfiguration  $6s6p^3$  einen wesentlichen Beitrag am spin-abhängigen Streuprozess haben (BARTSCHAT, 2009). Wenn diese Zustände einen Einfluss auf die Spin-Asymmetriefunktion ausüben, sollten sie sich als Resonanzstruktur im energetischen Verlauf auffinden lassen. Für die Winkel  $\vartheta = 65^\circ$  und  $\vartheta = 130^\circ$  wurden entsprechende Messungen zur Spin-Asymmetriefunktion durchgeführt. Diese Winkel sind ausgewählt worden, weil dort zum einen der Wirkungsquerschnitt, und damit die Streuintensität, deutlich höher ist als am Wirkungsquerschnittsminimum, und zum anderen, weil an diesen Stellen zwischen 11 eV und 14 eV  $S_A \neq 0$  ist. Zudem ist bei dem Streuwinkel  $\vartheta = 65^\circ$  sowohl im differenziellen Wirkungsquerschnitt bei einer Primärenergie von  $E_0 = 15$  eV, als auch in der Winkelverteilung der Spin-Asymmetriefunktion für Primärenergien  $E_0 \geq 13$  eV eine Sattelpunkts-Struktur festgestellt worden.

Die Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  wird auf eine Abhängigkeit von der Primärenergie  $E_0$  hin untersucht, indem diese unter festem Streuwinkel in Schritten von 50 bis 100 meV variiert wird. Unter  $\vartheta = 65^\circ$  wird der Bereich  $6,7 \text{ eV} \leq E_0 \leq 15,5 \text{ eV}$  erfasst. Bei der Messung für  $\vartheta = 130^\circ$  hat sich gezeigt, dass die Ergebnisse für  $E_0 < 10$  eV durch den geringen Wirkungsquerschnitt eine deutlich schlechtere Reproduzierbarkeit aufweisen. Deshalb ist der untersuchte Bereich hier kleiner. Die Abbildung 5.4 zeigt solche Messungen für die Streuwinkel  $\vartheta = 65^\circ$  und  $\vartheta = 130^\circ$  im Vergleich zu DBSR-20-Rechnungen, die zur Lesbarkeit von Strukturen zusätzlich noch einmal überzeichnet und verschoben dargestellt sind. Die Skalierungsfaktoren sind neben den Graphen dargestellt. Die Spin-Asymmetriefunktion für den Streuwinkel  $\vartheta = 65^\circ$  ist bei  $E_0 = 6,7$  eV positiv ( $S_A \approx 0,25$ ) und fällt zu höheren Energien ab. Bei  $E_0 = 10,8$  eV erreicht sie einen Nulldurchgang. Zu  $E_0 = 15$  eV hin erreicht sie Werte um  $S_A \approx -0,5$ . Unter dem Streuwinkel  $\vartheta = 130^\circ$  beträgt die Spin-Asymmetriefunktion bei 10,0 eV Streuenergie etwa  $S_A \approx -0,5$ . Von da steigt sie mit der Primärenergie bis zu dem Wert Null an.

In den Darstellung sind die erste und zweite Ionisationsschwelle des neutralen Blei-Atoms bei 7,4 bzw. 15 eV blau markiert. In Grau sind Markierungen für mögliche Resonanzen eingetragen. Diese werden als Struktur erkannt, wenn sie vom optisch gemittelten Verlauf der Funktion abweichen und sich bei der gewählten Schrittweite nachvollziehen lassen. Die Form entspricht zweier aufeinander folgender lokaler Extrema unterschiedlichen Typs, wie z. B. eine Struktur, die aus einem lokalen Minimum und Maximum zusammengesetzt ist. Manche dieser Resonanzen treten deutlich hervor, andere wiederum sind nicht vollständig aufgelöst. Zudem variiert



**Abb. 5.4.:** Energieabhängigkeit der Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  bei elastischer Streuung an Blei unter dem Streuwinkel  $\vartheta = 65^\circ$  (oben) und  $\vartheta = 130^\circ$  (unten). Resonanzstrukturen sind grau hinterlegt: — DBSR-20, — DBSR-20 überzeichnet und verschoben.

deren Breite im Rahmen des experimentellen Auflösungsvermögens, weshalb im Diagramm energetische Bereiche hervorgehoben werden.

Nachweis $E_0$ (eV)	Zuordnung		Energie (eV)		
	$\vartheta = 65^\circ$	$\vartheta = 130^\circ$	Term	PEJCEV	DBSR-20
7,0 – 7,3	+	—	$6s6p^3 \ ^5S_2$	7,253	6,408
7,5 – 7,8	+	—	$6s^26p8s \ ^3P_2^o$	7,747 ± 0,02	
			$6s^26p8s \ ^3P_1^o$	7,877 ± 0,05	
8,0 – 8,3	+	—	$6s^26p8p \ ^3D_3$	8,132	
			$6s^26p7d \ ^3D_3$	8,187	
			$6s^26p7d \ ^3P_1^o$	8,222	
			$6s^26p7d \ ^1P_1^o$	8,272	
9,1 – 9,2	+	—	$6s6p^3 \ ^3D_{1,2}$	9,397 ± 0,05	8,980 9,168
9,6 – 9,9	+	+	$6s6p^3 \ ^3D_3$	9,737	9,779
10,5 – 10,8	(+)	—	$6s6p^3 \ ^3P_0$	10,747	10,365
10,9 – 11,1	+	+	$6s6p^3 \ ^3P_1$	11,087	10,679
			$6s6p^3 \ ^3P_2$	11,167	11,073
11,3 – 11,6	+	+	keine Zuordnung		
12,3 – 12,8	+	+	$6s6p^3 \ ^3S_1$	12,762	12,807
			$6s6p^3 \ ^1D_2$	12,887	13,192
13,8 – 14,1	+	(+)	$6s6p^3 \ ^1P_1$	13,847	14,566
14,7 – 15,1	+	+	keine Zuordnung		
+ nachgewiesen		(+) nicht aufgelöst	— nicht beobachtet		

**Tab. 5.1.:** Positionen der Resonanzstrukturen für  $\vartheta = 65^\circ$  und  $\vartheta = 130^\circ$  bei elastischer Streuung an Blei und ihre Zuordnung nach PEJCEV *et al.* (1981) und dem DBSR-20-Modell.

Im energetischen Verlauf der Spin-Asymmetriefunktion  $S_\Lambda$  unter dem Streuwinkel  $\vartheta = 65^\circ$  sind zwölf Resonanzstrukturen markiert, bei  $\vartheta = 130^\circ$  sieben, deren Energien bei beiden Streuwinkeln auftreten. Sie sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst. Als nachgewiesen angesehene Strukturen werden mit einem „+“, nicht aufgelöste mit einem „(+“ und nicht beobachtete mit einem „—“ versehen. Die DBSR-20-Rechnung kann bei beiden Messungen die Größenordnung und tendenziell den Verlauf gut erfassen. Eine gute Übereinstimmung wird für den Streuwinkel  $\vartheta = 65^\circ$  im Bereich  $11 \text{ eV} \leq E_0 \leq 13 \text{ eV}$  erzielt. Bei höheren Energien wird hierfür ein zu großer Betrag angezeigt. Generell werden die Ergebnisse der Messung unter dem Streuwinkel  $\vartheta = 130^\circ$  gut erfasst. Durch die Überzeichnung der Graphen in Abbildung 5.4 werden Strukturen darin hervorgehoben. Sie sind im Allgemeinen weniger stark ausgeprägt als bei

den experimentellen Ergebnissen, und bei  $\vartheta = 130^\circ$  geringfügig betonter als bei  $\vartheta = 65^\circ$ . Dennoch fallen diese Strukturen mit den markierten Bereichen grötenteils zusammen. Diese DBSR-20-Rechnungen zeigen vom Ansatz her den Einfluß der Elektronenkonfigurationen auf die Spin-Asymmetriefunktion.

Durch Vergleich der Primärenergien, bei denen Resonanzstrukturen auftreten, können ihnen in der Literatur verzeichnete Zustände zugeordnet werden. Bei den Resonanzstrukturen oberhalb der ersten Ionisationsschwelle handelt es sich bei elastischer Streuung um Autoionisationszustände. Bei PEJCEV *et al.* (1981) wird eine Liste mit 207 solcher Zustände präsentiert, denen teilweise atomare Konfigurationen zugeordnet sind. In der Tabelle 5.1 sind jene angegeben, die im jeweiligen Energiebereich liegen und einer Elektronenkonfiguration zugeordnet sind. Zu zwei Resonanzstrukturen kann dennoch kein Term angegeben, da zwar Linien verzeichnet sind, aber keine Zuordnung vorgenommen worden ist. Zudem sind für die zehn Zustände der Elektronenkonfiguration  $6s6p^3$  die theoretisch berechneten Energien aus dem DBSR-20-Modell angegeben. Sie weichen von den experimentellen Ergebnissen ab, sind aber von derselben Größenordnung.

Den beobachteten Resonanzstrukturen werden Zustände der Konfigurationen  $6s6p^3$ ,  $6s^26p8s$ ,  $6s^26p8p$  und  $6s^26p7d$  zugeordnet. Insbesondere werden unter  $\vartheta = 65^\circ$  an sechs Positionen Resonanzstrukturen verzeichnet, die im Bereich der Energien von neun Termen der Konfiguration  $6s6p^3$  liegen. Lediglich die Resonanz an der Stelle  $10,5\text{eV} \leq E_0 \leq 10,8\text{eV}$  kann nicht eindeutig identifiziert werden. Bei  $\vartheta = 130^\circ$  wird diese nicht beobachtet. Jedoch treten bei drei Positionen Resonanzen auf, die mit den Termen der Konfiguration  $6s6p^3$  zusammenfallen. Für Primärenergien  $13,8\text{eV} \leq E_0 \leq 14,1\text{eV}$  kann die Struktur nicht aufgelöst werden.

Gerade der Einfluß der Elektronenkonfiguration  $6s6p^3$  ist hier hervorzuheben, da sie in den DBSR-20-Rechnungen berücksichtigt werden. Obwohl dipol-erlaubte Terme ( $6s^26pnl$ ) ausgelassen werden, wird die Energieabhängigkeit der Spin-Asymmetriefunktion durch dieses Modell von der Größenordnung und Tendenz her wiedergegeben. Weiterhin gehen Terme der Konfiguration  $6s^26p^2$  und  $6p^4$  in dieses Modell ein. Erstere sind atomare Zustände, die in diesem Experiment aufgrund der geringen Energie nicht zugänglich sind. Letztere werden für die DBSR-20-Rechnungen im Bereich 20 – 25 eV angegeben. Bei PEJCEV *et al.* (1981) sind bei diesen Energien Autoionisationszustände verzeichnet, jedoch nicht einer Konfiguration zugeordnet. Im Experiment sind sie aufgrund des Zeitaufwands nicht erfasst worden, da mit steigender Energie der Wirkungsquerschnitt abnimmt.

## 6. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden Spin-Effekte bei der elastischen Elektron-Atom-Streuung behandelt, wobei abhängig von der Spin-Orientierung der Projektilelektronen verschieden starke differenzielle Wirkungsquerschnitte auftreten. Die Messgröße für diesen Effekt ist die Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$ . Sie wird einerseits dazu verwendet, die Spinpolarisation von Elektronen zu bestimmen. Andererseits kann in einem Streuexperiment zusammen mit theoretischen Modellrechnungen der Mechanismus des Streuprozesses verstanden werden. Zum einen wurde die Entwicklung und Erprobung eines Elektronenpolarimeters vorgestellt, und zum anderen ein Streuexperiment an Blei durchgeführt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Hochvakuum-tauglicher Prototyp eines sogenannten MOTT-Elektronenpolarimeters mit kompakten Gesamtabmessungen entwickelt. Hierzu wurde in einer Studie zur Elektrodenkonfiguration mit Hilfe einer Simulationssoftware ein sphärischer Feldverlauf bei einem Streupotenzial von 50 kV nachgebildet. Bei der Umsetzung der Konstruktion wurde für die Anpassung an experimentelle Aufbauten eine elektrostatische Transportoptik hinzugefügt. Weitere Entwicklungsschritte dienen der elektrischen Versorgung des Detektors. Dabei wurde der Maßgabe eines kompakten Gesamtaufbaus dadurch Rechnung getragen, dass die Versorgung von elektrischen Komponenten auf Hochspannungs-Streupotenzial durch einen Trenntransformator realisiert wird, der in Eigenentwicklung aus Hochspannungskabel gefertigt worden ist. Die Wechselspannung am Transformator wird mit einer Frequenz von 20 kHz übertragen, wodurch die Leistungsdichte erhöht und damit der Platzbedarf reduziert wird. Die daraus versorgte Platine mit der Signal- und Versorgungselektronik der Detektoranordnung hat die Abmessungen  $100 \times 80 \text{ mm}^2$ , was einer halben Europakarte entspricht. Die Zählsignale werden durch Glasfaser übertragen.

Die effektive SHERMAN-Funktion der Detektoranordnung mit Goldfolie beträgt  $S_{\text{eff}} = -(0,229 \pm 0,011)$ . Sie ist dadurch bestimmt worden, dass das Elektronenpolarimeter an eine Elektronenquelle bekannter Polarisation angebaut wurde und die Links-Rechts-Asymmetrie bestimmt worden ist. Eine Abschätzung der Detektor-Effizienz ergibt einen Mindestwert von  $\varepsilon \geq 4,6 \cdot 10^{-7}$ . Aktuell wird eine Variante dieses Detektors erprobt, die zum Betrieb im Ultrahochvakuum ausgelegt ist.

Der kalibrierte Prototyp wird benutzt, um die Polarisation von Photoelektronen in einem Oberflächenexperiment zu bestimmen. Beispielhaft ist ein Au(111)-Einkristall untersucht worden. Unter Verwendung von gepulster Laserstrahlung der Wellenlänge  $\lambda = 210 \text{ nm}$ , die senkrecht auf die Oberfläche trifft, wird eine Spinpolarisation von  $P_y = (26,8 \pm 1,7)\%$



gemessen. Es steht somit eine Apparatur zur Verfügung, an der die Spinpolarisation in Richtung der Flächennormalen einer Probe bestimmt werden kann. Weitere Untersuchungen an diesem Experiment werden an poly- und einkristallinen Goldsubstraten durchgeführt, auf die dünne selbstorganisierte organische Schichten chiraler Substanzen aufgetragen werden. Bei solchen Proben wird ein effizienter *Spin-Filter*-Effekt vermutet, d.h., dass beim Durchgang der Photoelektronen durch eine solche Schicht eine Spin-Orientierung besser transmittiert wird als die andere. Diese Experimente werden derzeit fortgesetzt (GÖHLER, 2011; KETTNER, 2011).

In einem Streuexperiment ist die Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  bei elastischer Streuung spinpolarisierter Elektronen an atomarem Blei im Niederenergiebereich untersucht worden. Hierzu wurde ein Experiment durchgeführt, in dem ein spinpolarisierter Elektronenstrahl auf den Dampf unausgerichteter Atome trifft. Als Elektronenquelle diente eine UHV-Apparatur mit einem GaAs-Kristall. Der polarisierte Elektronenstrahl traf im Streuzentrum auf einen Dampf des Target-Materials. In einem Spektrometer wurden die gestreuten Elektronen nachgewiesen. Zur Spinanalyse stand ein konventionelles Elektronenpolarimeter mit Monitorzählern zur Verfügung, das bei 120 keV Streuenergie betrieben wurde.

Es liegen experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Elektronenstreuung an Blei vor. Von KAUSSEN *et al.* (1987) ist die Spin-Polarisationsfunktion  $S_P$  für ausgewählte Energien zwischen 6 und 180 eV bestimmt worden. DÜMLER *et al.* (1992) untersuchten die Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  im Niederenergiebereich zwischen 0,3 und 2,0 eV. Bei GEESMANN *et al.* (1991) ist die Spin-Asymmetriefunktion für ausgewählte Primärenergien im Bereich von 2,5 bis 14 eV bestimmt worden. Es zeigte sich bei den Primärenergien 11 eV und 14 eV ein großer Unterschied der Winkelverteilungen. Diese Energieabhängigkeit ist in dieser Arbeit genauer untersucht worden. Es liegt nun ein Datensatz für die Spin-Asymmetriefunktion der elastischen Streuung an Blei für den Bereich  $11 \text{ eV} \leq E_0 \leq 14 \text{ eV}$  in Schritten von 0,5 eV vor. Im untersuchten Bereich ist eine starke Abhängigkeit der Spin-Asymmetriefunktion von der Primärenergie festgestellt worden. Die Messergebnisse bei 11 eV und 14 eV stimmen mit denen von GEESMANN *et al.* (1991) überein. Mit steigender Primärenergie werden Extrema ausgeprägt: bei  $85^\circ$  ein Minimum und bei  $110^\circ$  ein Maximum.

Der Vergleich mit Modellrechnungen fällt unterschiedlich aus. Modelle, die auf der Modell-Potenzial-Methode basieren, liefern teilweise eine gute Übereinstimmung, insbesondere bei 13 eV Primärenergie bis zu einem Streuwinkel von etwa  $110^\circ$ . Eine Auswertung der Rechnungen nach dem generalisierten KOHN-SHAM-Verfahren zeigt, dass der darin verwendete Potenzialterm für Elektronenaustausch zu einer Übereinstimmung mit dem Experiment führt. Von den beiden *R*-Matrix-Varianten BPRM-5 und DBSR-20 ist erstere nicht geeignet, im beobachteten Energiebereich die Spin-Asymmetriefunktion zu berechnen, da weder der Verlauf

noch die Magnitude der Messwerte wiedergegeben werden. Das DBSR-20-Modell führt zu einer guten Übereinstimmung über einen weiten Bereich der beobachteten Streuwinkel und Primärenergien. In den Rechnungen werden Näherungslösungen für die Elektronenkonfigurationen  $6s^2 6p^2$ ,  $6s 6p^3$  und  $6p^4$  verwendet. Deren Energieterme treten teilweise als angeregte Zustände des Atoms auf, zu einem anderen Teil als Autoionisationszustände. In einer Messung der Energieabhängigkeit der Spin-Asymmetriefunktion bei elastischer Streuung unter den Streuwinkeln  $65^\circ$  und  $130^\circ$  konnten Resonanzstrukturen im Bereich  $6,7 \text{ eV} \leq E_0 \leq 15,5 \text{ eV}$  identifiziert werden, die insbesondere mit der Konfiguration  $6s 6p^3$  verknüpft sind. Neun von zehn Terme dieser in der Literatur verzeichneten Autoionisationszustände konnten mit dieser Vorgehensweise beobachteten Resonanzstrukturen zugeordnet werden. Der Einfluß der Autoionisationszustände auf die Spin-Asymmetriefunktion ist durch diese Arbeit gezeigt worden. Die DBSR-Methode verwendet eine Basis für die Elektronenkonfigurationen, die einer physikalischen Realität entsprechen, auch wenn die angegebenen theoretischen Term-Energien von der Literatur unterscheiden. Die hier diskutierte Vorgehensweise ist daher geeignet derartige Einflüsse aufzuklären. Durch den Vergleich mit theoretischen Modellrechnungen werden auf diese Weise detaillierte Erkenntnisse zur spinabhängigen Elektron-Atom-Streuung gewonnen.

In zukünftigen Untersuchungen sollte der Einfluss der Resonanzen im Bereich der Autoionisationszustände weiter erarbeitet werden. Eine Möglichkeit bietet sich bei der inelastischen Streuung an Blei im selben Bereich der Primärenergie, also zwischen 7 eV und 15 eV. Insbesondere die DBSR-20-Modellrechnungen sollten dahingehend fortgeführt werden, um unter anderem die Rolle der Elektronenkonfiguration  $6s 6p^3$  aufzuklären. Offensichtlich kann anhand der verwendeten Basisfunktionen eine Voraussage der physikalischen Realität gemacht werden. Zudem ist eine Erweiterung auf Innerschalen-Anregungen ( $d$ -Orbitale) wünschenswert. Weiterhin bietet es sich an, die Untersuchungen auf andere Target-Atome auszuweiten, um einen umfassenden Datensatz zur Verfügung zu haben und die Generalität der Modell-Rechnungen zu überprüfen. Da bereits Untersuchungen in diese Richtung gemacht wurden, ist die Streuung an Quecksilber aussichtsreich, da hier ein umfangreicher Datensatz an theoretischen und experimentellen Ergebnissen zur Verfügung steht.

## Summary

In this thesis, spin effects in elastic electron scattering are studied. In particular, one of these effects results in a difference of differential cross sections corresponding to the spin orientation of the electrons. The measurand is called the spin asymmetry function  $S_A$ . One application of this effect is used for electron spin-analysis, namely the MOTT electron polarimetry. Otherwise, the investigation of spin-effects in electron-atom scattering leads to a better understanding of the physical mechanism. In particular, the collisions of electrons with heavy atoms are not fully understood. In this case, spin-orbit and electron-exchange effects occur simultaneously, which is still a task for theory. In this thesis, the development of a compact conventional MOTT-type electron polarimeter is demonstrated, on the one hand. On the other, an experimental study of the spin-asymmetry function for elastic electron scattering from lead atoms in the low energy range is presented.

A prototype of an electron polarimeter of a compact size was designed which is suitable for high-vacuum application. The scattering energy was chosen to be 50 keV. The shape of the particular electrodes was studied using a simulation software. The accelerating field was meant to be spherical along the trajectories of the incoming electrons. For the adaption to different experimental set-ups, an electrostatic beam optics has been added to the design. Additional development was spent on the electrical supply of peripheral floating electronics on scattering potential. In particular, a handy-sized isolating transformer was built from high-voltage cable in a do-it-yourself construction. To meet the prerequisite of a small size, this transformer is driven by an alternating voltage of 20 kHz frequency to increase the density of power transfer. This signal is a supply for floating signal electronics which carries the supply voltage for two electron counters and pulse processing. The electric pulses on the output stage are compatible to TTL-electronics. The circuit board has the overall measures  $100 \times 80 \text{ mm}^2$ . The counting signals are transmitted optically by fibre optics.

For calibration purpose, the prototype was mounted to a source of polarised electrons, which polarisation is well-known to be  $P_y = (27 \pm 1)\%$ . From the determination of the left-right scattering asymmetry of the polarimeter set-up, the effective SHERMAN-function is calculated to be  $S_{\text{eff}} = -(0.229 \pm 0.011)$ . Additionally, the so-called *figure of merit* was estimated to be  $\varepsilon \geq 4.6 \times 10^{-7}$ . Currently, design work is in progress to develop an assembly which could be used in ultra-high vacuum experiments.

The calibrated prototype is presently used for spin analysis of photoelectrons from coated surfaces. Exemplarily, a gold single crystal (Au(111)) has been investigated. In this experiment, photoelectrons were excited by circularly polarised pulsed laser light of 210 nm wavelength

which was incident perpendicular to the sample's plane. The spin polarisation is determined to be  $P_y = (26.8 \pm 1.7)\%$ . Hence, an apparatus is set-up in which the photoelectron spin polarisation perpendicular to the sample's plane can be measured. Further investigation are targeted on samples which are coated with self-assembled monolayers of chiral organic molecules. Poly- and single crystalline gold is used as substrate in the preparation. These kind of samples supposedly show an efficient spin-filter effect, meaning that the transmission of electrons through the thin film depends on their spin orientation. Currently, work in this direction of spin-selectivity in thin films is in progress (KETTNER, 2011; GÖHLER, 2011).

In another experiment, the spin-asymmetry function  $S_A$  has been studied for elastic scattering of spin-polarised electrons from atomic lead. In the experiment, a spin-polarised electron beam was extracted from a GaAs-source assembly which is kept under ultra-high vacuum. The electron beam was guided to the scattering center where it hit an atomic vapour of lead emanating from an oven. The scattered electrons were detected in a rotatable spectrometer with a channeltron for counting. A conventional high-energy MOTT-type electron polarimeter with monitor counters was used for precision spin analysis. The scattering energy was 120 keV. The primary spin polarisation is  $P_y = (26.5 \pm 0.5)\%$

Many studies, experimental and theoretical, on electron scattering from lead atoms have been carried out before. For low energies down to 0.3 eV, the results of DÜMLER *et al.* (1992) show good agreement with predictions from  $R$ -matrix close-coupling calculations that include both Mott scattering and the fine-structure effect. GEESMANN *et al.* (1991) investigated on the spin asymmetry function in the region from 2.5 eV to 14 eV. For 11 eV and 14 eV, a strong dependency on the primary energy was shown. A study of this energy dependence is one task of this work. In steps of 0.5 eV, the angular distribution of the spin asymmetry function has been studied in the region  $11 \text{ eV} \leq E_0 \leq 14 \text{ eV}$  for scattering angles  $35^\circ \leq \vartheta \leq 135^\circ$ . The strong dependence on the primary energy is evident. The results presented here agree well with the data by GEESMANN *et al.* (1991). With increasing incident energy, two extrema become incrementally distinct: a minimum at  $\vartheta = 85^\circ$  and a maximum at  $\vartheta = 110^\circ$ .

The results are compared to several theoretical calculations. One uses the relativistic model potential approach (RMP). These show good agreement with the experimental results to some extent, in particular up to  $\vartheta = 110^\circ$  at 13 eV incident energy. From a generalised KOHN-SHAM approach by HABERLAND und FRITSCH (1987), one can conclude that electron exchange plays a role in this particular experiment because this leads to good agreement. Furthermore, the results are compared to  $R$ -matrix calculations, being a 5-state BREIT-PAULI model (BPRM-5) and a fully relativistic  $B$ -spline  $R$ -matrix approach (DBSR-20). The BPRM-5 model is insufficient for this task since agreement with the experiment is not observed. The DBSR-20 calculations show a good prediction of the data. This model accounts for relativistic effects,

angular momentum orientation and the influence of autoionising states. For this task, 20 states of the configurations  $6s^2 6p^2$ ,  $6s 6p^3$  and  $6p^4$  were generated during the calculations. They are partly atomic states. Most of them lie in the autoionising region between 11 eV and 15 eV. To investigate on these states, a determination of the energy dependence of the spin asymmetry function for elastic scattering has been carried out under two fixed scattering angles:  $\vartheta = 65^\circ$  and  $\vartheta = 130^\circ$ . For incident energies ranging from 6,7 eV to 15,5 eV, resonance structures are observed which are in particular connected to autoionising levels of the  $6s 6p^3$  configuration. By comparison with literature, nine of ten terms of this configuration are assigned to experimentally observed resonance structures. Hence, the influence of autoionising levels on the spin asymmetry function has been shown in this work. The DBSR-calculations provide a prediction of the collision process involving spin phenomena. The experimental method which is used here is sufficient to study on these influences. By comparison to theoretical calculations, detailed information of the spin-dependent electron-atom scattering can be achieved.

In future investigations, studies of the influence of the autoionising levels on the scattering process should be continued. One possibility is the inelastic scattering on lead in the same energy region as studied in this work. In particular, the DBSR-calculations should be pursued to clarify the role of the  $6s 6p^3$  configurations. Evidently, the basis set of the DBSR-model is suitable to describe the scattering process. An expansion to  $d$ - shells is desirable. Furthermore, these kind of investigations could be carried out with different target atoms to check the validity on a wide basis. As there have been attempts in this direction before, mercury is a promising target because it has been studied comprehensively, both experimentally and theretically. Currently, this work is in progress.

## Anhang

### A. Das Streuexperiment

Dieser Abschnitt beinhaltet zusätzliche Angaben zur Theorie der Elektron-Atom-Streuung (Kap. 1) und Inhalte zum Streuexperiment (Kap. 3), die tabellierten Messergebnisse sowie technische Angaben zum kompakten Elektronenpolarimeter aus Kap. 2.

#### A.1. Koordinatensystem–Drehung

Zur Drehung eines Koordinatensystems werden die EULER'schen Winkel verwendet. Es werden kurz die Relationen für die Drehung im Stoßsystem behandelt. Eine ausführliche Besprechung wird bei EDMONDS (1996) gegeben.

Betrachtet wird die Koordinatensystem–Drehung im Bezug auf einen allgemeinen quantenmechanischen Drehimpuls  $\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$ , der zusammen mit seiner  $z$ -Komponente die Vertauschungsrelationen erfüllt. Die Quantenzahl sei  $j$ , der die Magnetquantenzahl  $m_j$  zugeordnet ist. Ein Eigenzustand wird daher mit  $|jm_j\rangle$  bezeichnet.

Eine finite Drehung um den Winkelsatz  $(\alpha, \beta, \gamma)$  wird beschrieben durch:

$$\mathbf{D}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp\left(\frac{i\gamma}{\hbar} J_z\right) \exp\left(\frac{i\beta}{\hbar} J_y\right) \exp\left(\frac{i\alpha}{\hbar} J_x\right).$$

Wenn Matrizen zu  $J_z$  diagonal sind, werden die Matrixelemente des Drehoperators wie folgt berechnet:

$$D_{m'm}^j = \langle jm' | \exp(im'\gamma) d_{m'm}^j(\beta) \exp(im\alpha) | jm \rangle,$$

wobei  $d_{m'm}^j(\beta) = \langle jm' | \mathbf{D}(0, \beta, 0) | jm \rangle$  ist. Dieser Ausdruck muss weiter ausgewertet werden. Die Exponentialausdrücke gehen als Faktoren ein. Für den Winkel  $\beta = \pm\pi$  gilt schliesslich folgende Symmetriebeziehung:

$$d_{m'm}^j(\pm\pi) = (-1)^{j\pm m} \delta_{m'-m}.$$

Damit berechnet sich die Drehung eines Zustands um den Winkelsatz  $(0, -\pi, 0)$ :

$$\mathbf{D}(0, -\pi, 0) | jm_j \rangle = (-1)^{j-m_j} | j - m_j \rangle.$$

Dies gilt sowohl für Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen ( $j = 1/2$ ,  $m = \pm 1/2$ ), als auch für Atome ( $j = J_{0,1}$ ,  $m = M_{0,1}$ ).

## A.2. Notation des Grundzustands bei schweren Atomen

Die Beschreibung der atomaren Zustände nach RUSSELL und SAUNDERS (1925) ist streng genommen bei so schweren Kernen wie dem von Blei nicht mehr gültig, da die inneratomare Spin-Bahn-Wechselwirkung an Bedeutung zunimmt MAYER-KUCKUK (1985). Für mittelschwere bis schwere Atome wird die intermediäre Kopplung verwendet, für schwere die reine  $jj$ -Kopplung.

### jj-Kopplung

Für schwere Atome wird die Notation der  $jj$ -Kopplung verwendet, bei der zuerst die einzelnen Spins  $\vec{s}_i$  der Elektronen mit ihren jeweiligen Bahndrehimpulsen  $\vec{l}_i$  zum Gesamt-Teilchen-Drehimpuls  $\vec{j}_i = \vec{s}_i + \vec{l}_i$  gekoppelt werden, bevor aus den  $\vec{j}_i$  der Gesamtdrehimpuls der Hülle  $\vec{J} = \sum_i \vec{j}_i$  gebildet wird. Zur Notation des Zustands werden die  $j_i$  in Klammern angegeben. Der Grundzustand von Blei ist nach RALCHENKO *et al.* (2008):

$$[\text{Xe}]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^2 (1/2, 1/2) .$$

Dieses Kopplungsschema tritt selten rein auf, weshalb oft das intermediäre vorgezogen wird.

### Intermediäres Kopplungsschema

Bei mittelschweren bis schweren Atomen kommt das *intermediäre Kopplungsschema* zur Anwendung, um Zustände zu beschreiben. Rein  $LS$ -gekoppelte Konfigurationen werden hierbei mit Mischungskoeffizienten  $\alpha$  und  $\beta$  zu einem Zustand zusammengesetzt, für die  $\alpha^2 + \beta^2 = 1$  gilt. Für den Bleigrundzustand gibt BARTSCHAT (1985) folgende Darstellung an, bei der \* zur Unterscheidung des intermediär gekoppelten Zustands angefügt wurde:

$$|^3\text{P}_0\rangle^* = 0,9611 |^3\text{P}_0\rangle + 0,2764 |^1\text{S}_0\rangle .$$

## A.3. Tabellen zu Blei

In dem Streuexperiment wird natürliches Blei verwendet. In A.1 ist die Isotopie zusammengefasst. Bis auf das Isotop  $^{207}\text{Pb}$  haben die anderen drei Isotope mit einem relativen Vorkommen von etwa 78 % einen verschwindenden Kerndrehimpuls  $I$ .

Isotop	Masse (u)	Vorkommen	Kerndrehimpuls $I$
$^{204}\text{Pb}$	203,973020	1,4%	0
$^{206}\text{Pb}$	205,974440	24,1%	0
$^{207}\text{Pb}$	206,975872	22,1%	1/2
$^{208}\text{Pb}$	207,976627	52,4%	0

**Tab. A.1.:** Isotopie von natürlichem Blei (RALCHENKO *et al.*, 2008).

Für das vereinfachte Termschema in Abb. 1.6 werden die in Tab A.2 gelisteten Zustände aus der Literatur verwendet. Terme höherer Ordnung werden wegen der Übersicht nicht berücksichtigt.

$E$ (eV)	Konfiguration	$LS$ -Term	$jj$ -Term	$J$
0	$6p_{1/2}^2$	$^3P$	$(1/2, 1/2)$	0
0,96947	$6p_{1/2}6p_{3/2}$	$^3P$	$(1/2, 3/2)$	1
1,32048	$6p_{1/2}6p_{3/2}$	$^3P$	$(1/2, 3/2)$	2
2,66044	$6p_{3/2}^2$	$^1D$	$(3/2, 3/2)$	2
3,65344	$6p_{3/2}^2$	$^1S$	$(3/2, 3/2)$	0
4,33450	$6p_{1/2}7s_{1/2}$	$^3P^\circ$	$(1/2, 1/2)^\circ$	0
4,37508	$6p_{1/2}7s_{1/2}$	$^3P^\circ$	$(1/2, 1/2)^\circ$	1
5,32126	$6p_{1/2}7p_{1/2}$	$^3P$	$(1/2, 1/2)$	1
5,50504	$6p_{1/2}7p_{1/2}$	$^3P$	$(1/2, 1/2)$	0
5,53902	$6p_{1/2}7p_{3/2}$	$^3D$	$(1/2, 3/2)$	1
5,55568	$6p_{1/2}7p_{3/2}$	$^3D$	$(1/2, 3/2)$	2
5,63427	$6p_{1/2}6d$	$^3F^\circ$	$^2[5/2]^\circ$	2
5,74405	$6p_{1/2}6d$	$^3F^\circ$	$^2[5/2]^\circ$	3
5,71085	$6p_{1/2}6d$	$^3D^\circ$	$^2[3/2]^\circ$	2
5,71179	$6p_{1/2}6d$	$^3D^\circ$	$^2[3/2]^\circ$	1
5,97466	$6p_{3/2}7s_{1/2}$	$^3P^\circ$	$(3/2, 1/2)^\circ$	2
6,12976	$6p_{3/2}7s_{1/2}$	$^1P^\circ$	$(3/2, 1/2)^\circ$	1
6,03644	$6p_{1/2}8s_{1/2}$	$^3P^\circ$	$(1/2, 1/2)^\circ$	1
6,45982	$6p_{1/2}7d$	$^3F^\circ$	$^2[5/2]^\circ$	2
6,49834	$6p_{1/2}7d$	$^3F^\circ$	$^2[5/2]^\circ$	3
6,48581	$6p_{1/2}7d$	$^3D^\circ$	$^2[3/2]^\circ$	2
6,50916	$6p_{1/2}7d$	$^3D^\circ$	$^2[3/2]^\circ$	1
7,41668	1. Ionisation			

**Tab. A.2.:** Energieniveaus und Terme des neutralen Pb-Atoms (RALCHENKO *et al.*, 2008; WOOD und ANDREW, 1968; MOORE, 1958).

Zur Berechnung in dem DBSR-20-Modell werden u. a. die Autoionisationsniveaus der Konfigurationen  $6s^2 6p^2$ ,  $6s 6p^3$  und  $6p^4$  verwendet, also die nächstmöglichen Anregungen des neutralen Atoms, ohne ein anderes Orbital zu besetzen. Bei PEJCEV *et al.* (1981) sind 207 solcher Niveaus aufgeführt. Daraus ausgewählte Autoionisationszustände sind in der Tab. A.3 dargestellt. Für die Konfiguration  $6p^4$  sind bei PEJCEV *et al.* (1981) keine verzeichnet, jedoch sind viele der gemessenen Terme nicht benannt worden.



$E$ (eV)	Konfiguration	$LS$ -Term
7,253	$6s\ 6p^3$	$^5S_2$
9,3		$^3D_{1,2}$
9,7		$^3D_3$
10,747		$^3P_0$
11,087		$^3P_1$
11,167		$^3P_2$
12,76		$^3S_1$
12,88		$^1D_2$
13,8		$^1P_1$

**Tab. A.3.:** Ausgewählte Autoionisationszustände von neutralem Blei nach PEJCEV *et al.* (1981); ASSOUS (1972), sortiert nach Konfiguration.

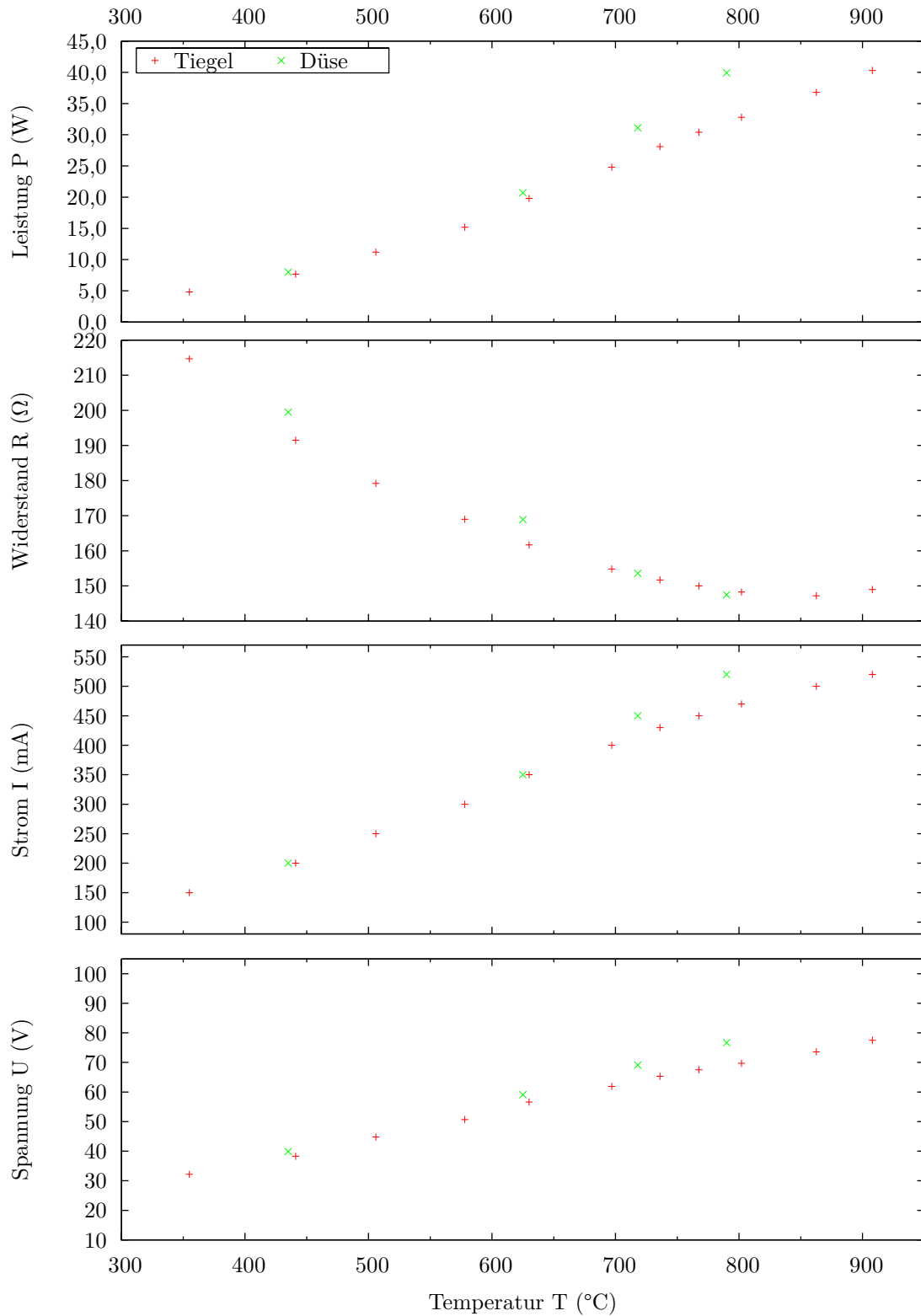
#### A.4. Eigenschaften des Tiegelofens

Die elektrischen Eigenschaften des Tiegelofens lassen sich an den Darstellungen in Abb. A.1 ablesen. Für die Erfassung der Heiz-Charakteristik wird der Ofen ohne Targetmaterial betrieben. Ein Mantelthermoelement wird durch die Düsenöffnung in das Innere des Tiegels geschoben, um dessen Temperatur aufzuzeichnen. Zur Bestimmung der Düsenteperatur wird das Thermoelement in die Düsenöffnung gesteckt. Registriert werden die angelegte Heizspannung und der fließende Heizstrom. Daraus werden die elektrischen Größen Momentan-Widerstand  $R$  und Heizleistung  $P$  berechnet.

Es zeigt sich, dass die Düsenteperatur allgemein niedriger ist als die Tiegeltemperatur. Eine Ursache ist, dass ein Großteil der Heizleistung an der Graphitschicht auf dem Keramiktiegel abfällt, da ihr Widerstand größer ist. Infolge dessen wird die Düse weniger stark erwärmt. Dem kann durch eine höhere Temperatur oder durch Änderung der Düsengeometrie begegnet werden. Eine Möglichkeit stellt eine kürzere und weitere Düsenöffnung dar. Bei 60 W Heizleistung wird in der Streuapparatur ein genügend hoher Dampfdruck erzeugt, um das Experiment durchzuführen.

#### A.5. Europium als Streutarget

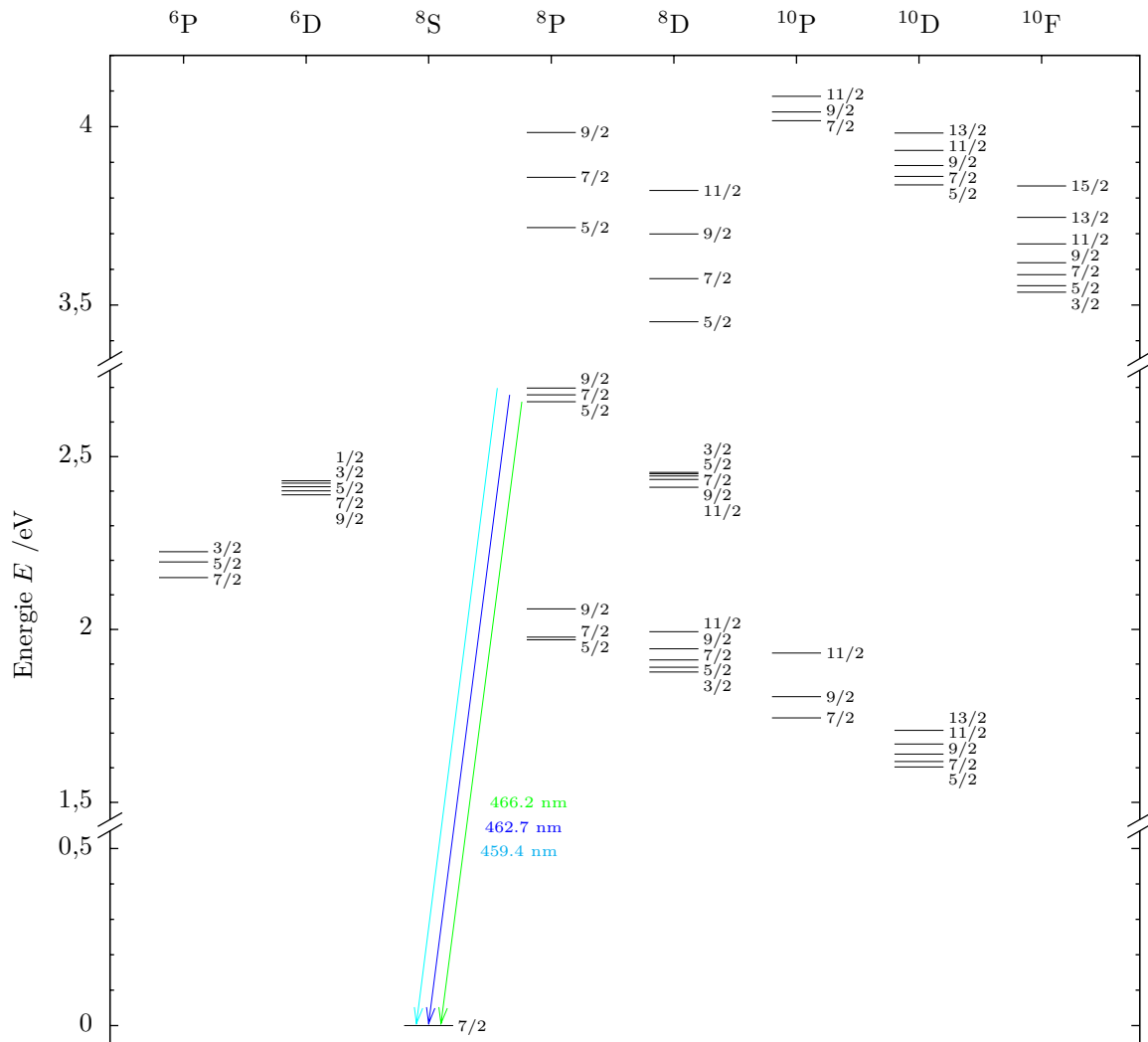
In der Streuapparatur ist Europium als Target-Atom erprobt worden. Im Zuge der Untersuchungen stellte sich heraus, dass die Strahljustierung insgesamt instabil wird innerhalb von weniger als zwei Wochen Betrieb. Dies erforderte eine zu häufige Belüftung der Streukammer und Reinigung der elektronenoptischen Komponente in unmittelbarer Nähe des Streuzentrums. Ferner konnten Unverträglichkeiten zwischen den Materialien der Apparaturteile und Europi-



**Abb. A.1.:** Elektrische Heiz-Charakteristik des Tiegelofens.

um festgestellt werden.

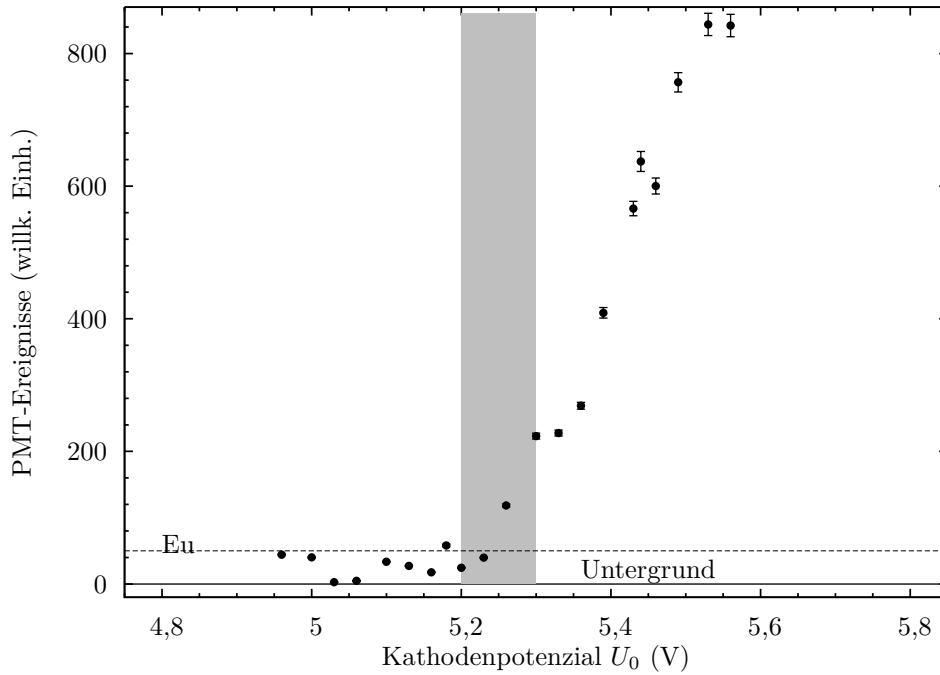
In diesem Abschnitt wird das Element Europium als Streutarget vorgestellt. Es wurde ei-



**Abb. A.2.:** Vereinfachtes Termschema von Europium bis 4,2 eV. Die Niveaus sind mit den Gesamtdrehimpulsquantenzahlen  $J$  beschriftet. Zusätzlich eingezeichnet sind die intensivsten Übergänge, die zwecks einer Energiekalibrierung angeregt werden.

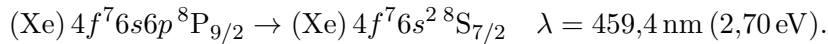
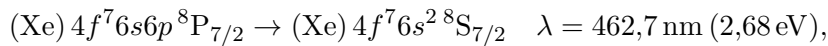
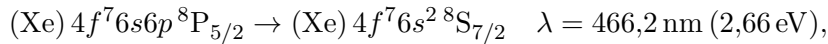
ne Energiekalibrierung und versuchsweise eine Streumessung zur Bestimmung der Spin-Asymmetriefunktion bei  $E_0 = 55$  eV durchgeführt.

Europium mit der Ordnungszahl  $Z = 63$  zählt zu den Seltenen Erden der Lanthanoid-Reihe im Periodensystem. Der Schmelzpunkt bei Normalbedingungen beträgt  $T_{\text{Schm.}} = 1095$  K ( $\vartheta_{\text{Schm.}} = 822^\circ\text{C}$ ). Der Dampfdruck bei dieser Temperatur beträgt 144 Pa. Abb. A.2 zeigt ein vereinfachtes Termschema von atomarem Europium bis zu einer Energie von 4,2 eV. Der Grundzustand in  $LS$ -Notation ist  $5d^{10}4f^76s^28S_{7/2}$ . Darin eingezeichnet sind die intensivsten Übergänge des Emissionsspektrums, die zu einer Energiekalibrierung genutzt werden. Die erste Ionisierungsschwelle wird mit 5,67 eV angegeben (RALCHENKO *et al.*, 2008).



**Abb. A.3.:** Energiekalibrierung an Europium. Das Kontaktpotenzial beträgt  $\Delta U_{\text{Eu}} = 2,57 \text{ V}$ .

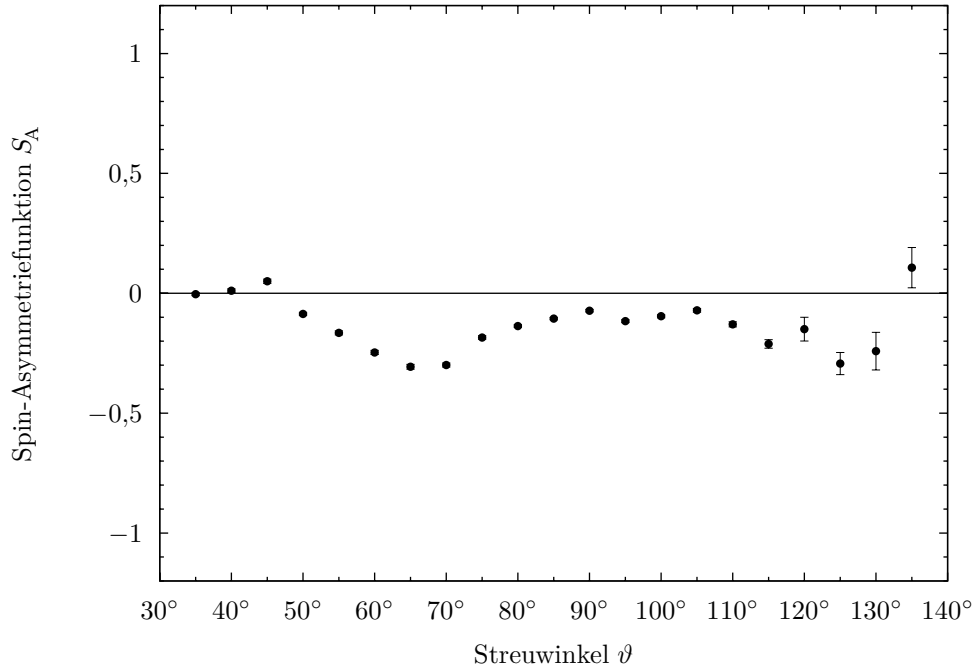
Für die Energiekalibrierung an Europium zeigt das Spektrum keine intensive einzelne Linie. Die intensivsten drei Übergänge liegen energetisch nah beieinander. Sie sind in das Termschema (Abb. A.2) eingetragen:



Da dies Übergänge in den Grundzustand sind, muss der Elektronenstrahl bei Primärenergien um  $2,5 \text{ eV}$  in das Streuzentrum geführt werden. Bei diesen Bedingungen sind selbst bei hoher Emission aus dem GaAs-Kristall der Elektronenquelle nur sehr niedrige Ströme im Streuzentrum von einigen nA zu erreichen. Daraus resultiert ein schwaches Signal-zu-Rauschen-Verhältnis bei der Detektion der emittierten Photonen. In diesem Fall kann die Rechnersteuerung zur Aufnahme einer mehrfach wiederholten Messreihe wie beim Blei nicht benutzt werden, da die Einstellung der Elektronenoptik bei so niedrigen Primärenergien zu empfindlich auf Änderungen der Potenziale ist. Diese Kalibrierung wird daher manuell durchgeführt, d.h., dass für jedes einzelne Kathodenpotenzial die Linsenpotenziale nachjustiert werden, um auf diese Weise ähnliche experimentelle Bedingungen zu erreichen. In Abb. A.3 ist die Anregungsfunktion dargestellt. Bei Kathodenpotenzialen  $U_0 \leq 5,2 \text{ V}$  werden die Übergänge nicht angeregt. Dieser Bereich wird zur Untergrundkorrektur genutzt. Ein Plateau ist nicht so stark ausgeprägt wie beim Blei. Deshalb muss hier über diesen Bereich gemittelt werden. Die Anregung tritt deutlich hervor bei Kathodenpotenzialen  $5,2 \text{ V} \leq U_0 \leq 5,3 \text{ V}$ .

Dieser Bereich ist in Abbildung A.3 grau hinterlegt. Mit dem Mittelwert  $U_0 = 5,25 \text{ V}$  ergibt sich daraus ein Kontaktpotenzial von  $\Delta U_{\text{Eu}} = 2,57 \pm 0,10 \text{ V}$ . Der Fehler wird aus denselben Überlegungen wie in Abschnitt 4.1.3 abgeschätzt. Im weiteren Verlauf der Anregungsfunktion treten um  $U_0 \approx 5,3 \text{ V}$  und  $U_0 = 5,5 \text{ V}$  nicht weiter aufgelöste Strukturen auf.

Versuchsweise ist eine Messung der Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  bei  $55 \text{ eV}$  Streuenergie durchgeführt worden. In Abbildung A.4 sind die Messergebnisse für den Streuwinkelbereich  $35^\circ \leq \vartheta \leq 135^\circ$  dargestellt. Von  $\vartheta = 35^\circ$  nach  $\vartheta = 45^\circ$  steigt die Spin-Asymmetriefunktion



**Abb. A.4.:** Spin-Asymmetriefunktion  $S_A$  von Eu bei  $E_0 = 55 \text{ eV}$ . Die angegebenen Vertrauensbereiche zeigen den statistischen Fehler an.

leicht an und durchläuft ein lokales Maximum. Von da an fällt sie ab, bis sie bei  $\vartheta = 65^\circ$  ein breites Minimum erreicht ( $S_A \approx -0,3$ ) und bis  $\vartheta = 90^\circ$  wieder bis nahezu  $S_A \approx 0$  ansteigt. Im Bereich  $90^\circ \leq \vartheta \leq 105^\circ$  deutet sich ein lokales Minimum und ein lokales Maximum an. Zu größeren Streuwinkeln hin fällt die Spin-Asymmetriefunktion ab. Es deutet sich bei  $\vartheta = 120^\circ$  eine Struktur an, die jedoch nicht aufgelöst wird. Bei  $\vartheta = 125^\circ$  wird ein lokales Minimum durchlaufen. Danach ist ein starker Anstieg ins Positive zu verzeichnen.

## B. Kompakte Mottkammer

In diesem Abschnitt wird zum einen die Zähllektronik beschrieben, die für das kompakte Elektronenpolarimeter entwickelt worden ist. Zum anderen werden weitere Informationen zur Kalibrierung gegeben.

## B.1. Schaltpläne

In Abb. B.5 ist ein Schaltplan der Voverstärker-Diskriminator-Platine (VV/SCA-Platine) gezeigt. Er ist mit dem Programm EAGLE (Version 4.16r2) erstellt worden. Darin sind Bauteile in Rot dargestellt, elektrische Verbindungen in Grün. Die anliegende Wechselfrequenz wird durch

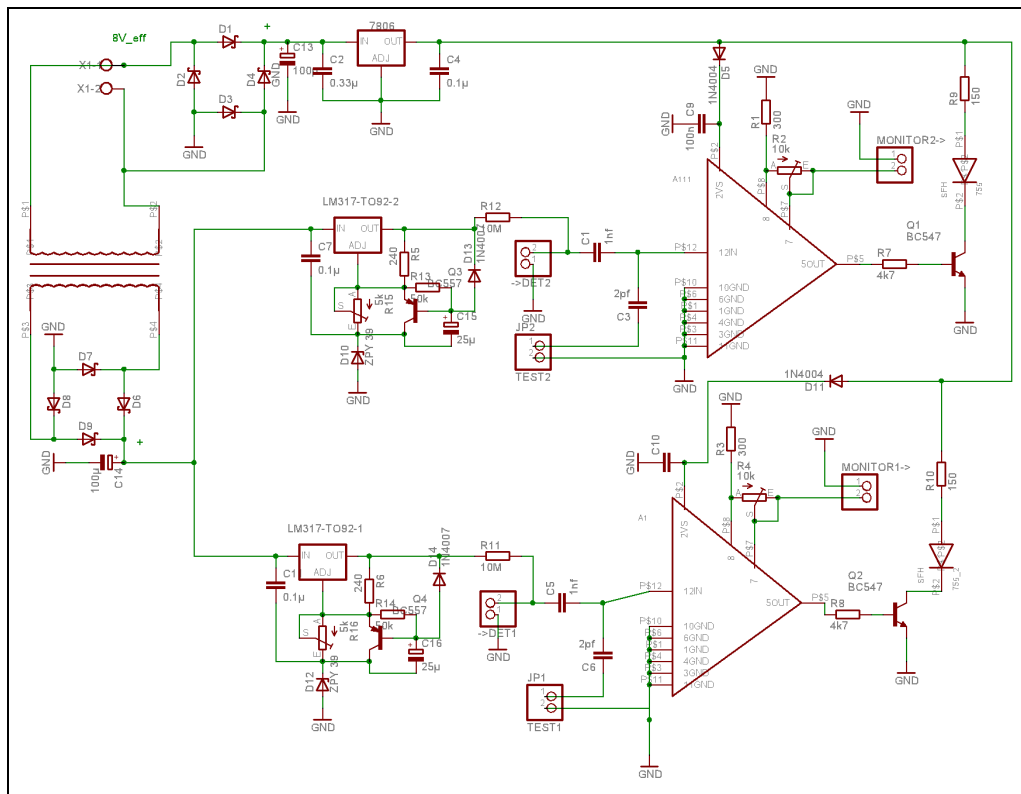


Abb. B.5.: Schaltplan der VV/SCA-Platine.

einen 1:7-Übertrager gewandelt und gleichgerichtet. Die zwei Betriebsspannungen der Oberflächensperrschichtzähler (60 V) werden mit einem einstellbaren Spannungsregler (LM 317) erzeugt. Das Zählsignal wird über Keramikkondensatoren eingekoppelt und in einer integrierten Schaltung (IC) vom Typ AMPTEK A111 vorverstärkt und diskriminiert. Die analogen Pulse aus dem Vorverstärker des A111 sind an Kontaktstifte auf der Platine zugänglich, so dass z. B. ein Pulshöhenspektrum bei Bedarf aufgenommen werden kann. Die Diskriminatorschwellen sind bei diesem IC einstellbar. Das TTL-kompatible Zählsignal wird an eine Sendediode vom Typ INFINEON SFH-756 V angelegt und über eine kommerzielle Kunststoffglasfaser (2 mm) übertragen.

Die Zählsignale werden auf einer Empfängerplatine weiterverarbeitet, von der der Schaltplan in Abb. B.6 gezeigt wird. Zur besseren Übersicht sind hier einige elektrische Verbindungen (grün) zu einem Datenbus (blau) zusammengefasst worden. Als optische Empfänger werden IC's vom Typ INFINEON SFH-551 verwendet. Diese sind jeweils an einen 8-bit breiten Zählerbaustein (74HC590) angeschlossen. Gesteuert und ausgelesen werden diese von einem

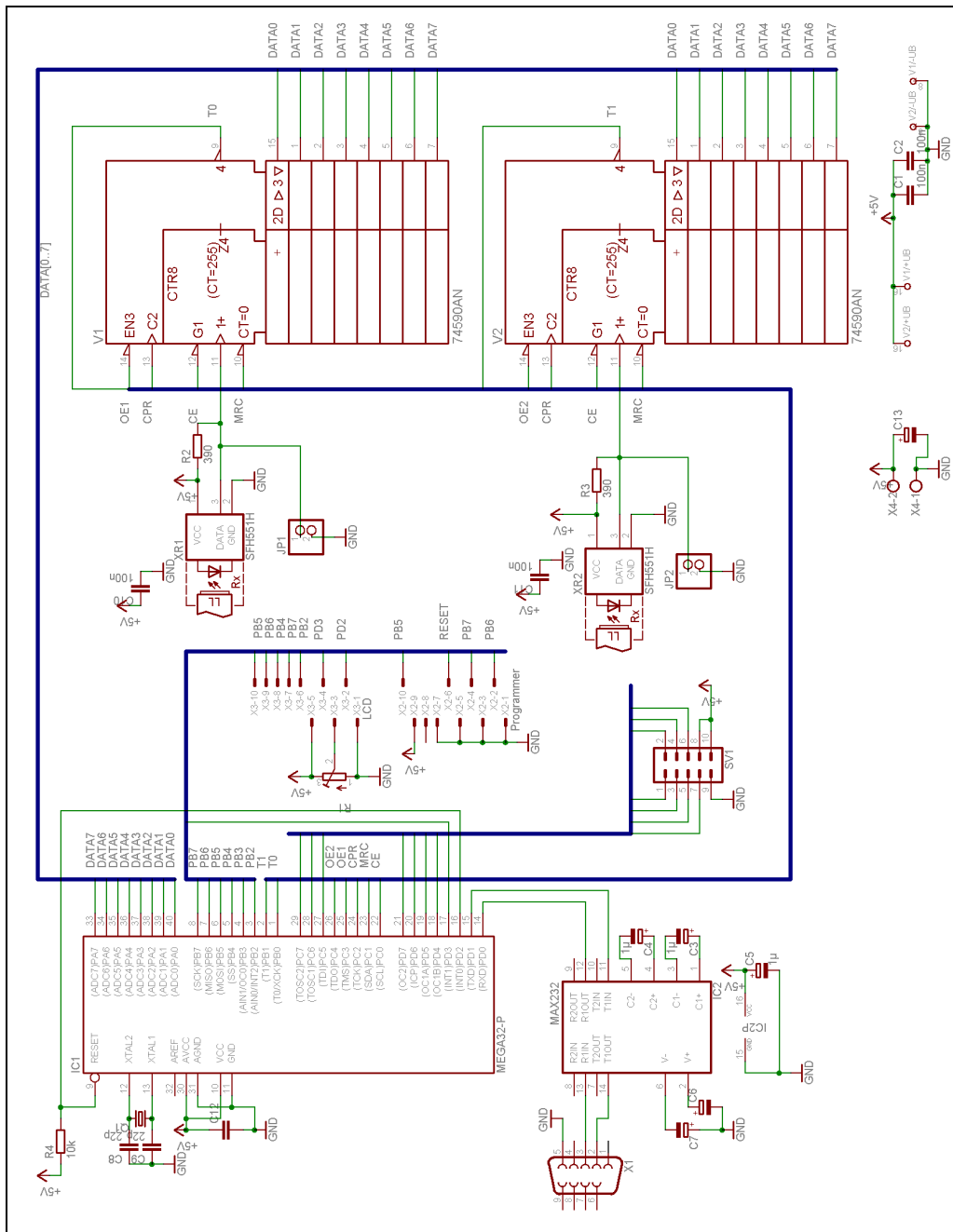


Abb. B.6.: Schaltplan der Zählerkarte.

Mikro-Controller (ATMEL AVR ATmega32), der zudem Zählerüberläufe registriert. Ein vierzeiliges Display dient zur Ausgabe der Zählrate. Über BNC-Buchsen am Gehäuse kann das TTL-kompatible Zählsignal zur Weiterverarbeitung in anderen logischen Geräten abgegriffen werden. Diese Zählerkarte ist zusammen mit der Ansteuerung des Hochspannungsmoduls in einem 19"-Einschub untergebracht. Eine Fotografie wird in Abb. B.7 gezeigt. Darin ist links das erwähnte LC-Display zu sehen. Mittig ist ein Drehspulinstrument eingebaut, das zur Anzeige einer Monitorspannung des Hochspannungsmoduls verwendet wird. Rechts davon sind die Bedienelemente der Hochspannungsversorgung untergebracht.

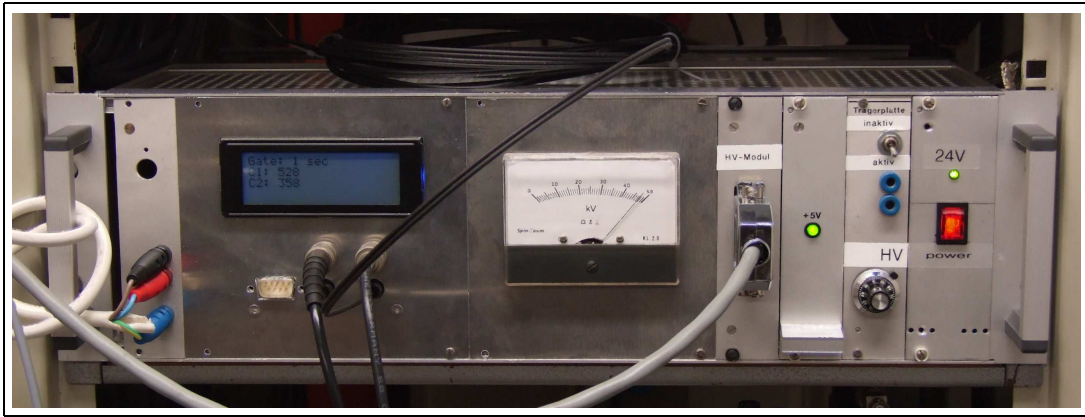
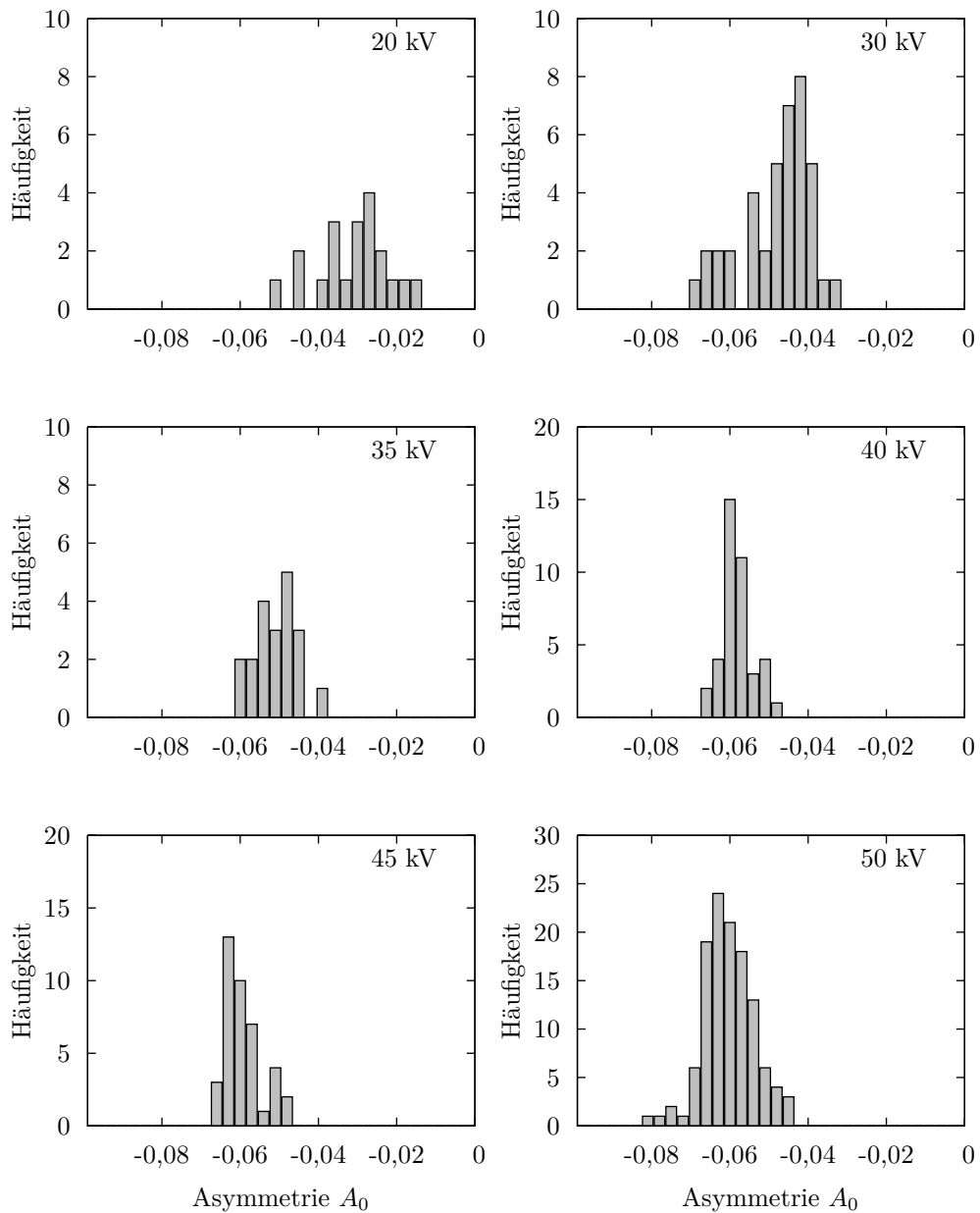


Abb. B.7.: Fotografie des 19"-Einschubs.

## B.2. Zur Kalibrierung des Elektronenpolarimeters

Zur Kalibrierung des kompakten Elektronenpolarimeters ist dieses an einen Aufbau mit einer Quelle spinpolarisierter Elektronen angebaut worden. Der Elektronenstrahl wird zum Polarimeter geführt und die Links-Rechts-Asymmetrie bestimmt. Eine Mittelung über beide Spin-Orientierungen vermindert den Einfluß instrumenteller Asymmetrie. Zur Überprüfung der Funktionalität der Detektoranordnung wird die Streuenergie von 20 keV bis 50 keV variiert und jeweils eine Statistik aufgenommen. Die erhaltenen Häufigkeitsverteilungen sind in Abb. B.8. Bei allen Streuenergien tritt eine Häufung auf, jedoch ist der Stichprobenumfang bis auf die Messung bei 50 keV zu gering um eine weitere statistische Auswertung vorzunehmen. Zur Orientierung sind die berechneten Mittelwerte bereits in Tab. 4.1 zusammengefasst.





**Abb. B.8.:** Häufigkeitsverteilungen der Asymmetriewerte bei verschiedenen Streuenergien.

### C. Tabellierte Messergebnisse

Im folgenden sind die Messergebnisse der Untersuchungen der Spin-Asymmetriefunktion von Blei bei elastischer Elektronenstreuung zusammengefasst. Angegeben werden die bestimmten Werte und die nach der Fehlerfortpflanzung berechneten Abweichungen.

Tab. C.4.: Ergebnisse der winkelaufgelösten Messung des  $S_A$ -Parameters von 11 bis 14 eV.

$\vartheta$	11,0 eV	11,5 eV	12,0 eV	12,5 eV	13,0 eV	13,5 eV	14,0 eV
135°	-0,3942±0,0097	-0,4007±0,0081	-0,3832±0,0067	-0,1815±0,0030	-0,2857±0,0208	-0,3989±0,0535	-0,2024±0,0151
130°	-0,3504±0,0100	-0,3591±0,0095	-0,3262±0,0072	-0,1597±0,0031	-0,2603±0,0218	-0,2634±0,0448	-0,1008±0,0147
125°	-0,3151±0,0104	-0,2949±0,0095	-0,2404±0,0082	-0,0967±0,0032	-0,1366±0,0235	-0,1032±0,0429	0,1055±0,0165
120°	-0,2658±0,0119	-0,2707±0,0111	-0,1614±0,0097	-0,0471±0,0035	-0,0298±0,0156	0,0783±0,0453	0,3724±0,0183
115°	-0,2296±0,0136	-0,1899±0,0137	-0,0928±0,0143	0,0112±0,0042	0,0641±0,0201	0,1507±0,0475	0,3661±0,0211
110°	-0,1808±0,0103	-0,1411±0,0192	0,0116±0,0097	0,0540±0,0044	0,1338±0,0233	0,2472±0,0535	0,4360±0,0271
105°	-0,1533±0,0141	-0,1581±0,0277	-0,1417±0,0122	0,0423±0,0046	0,2248±0,0320	0,2438±0,0634	0,4120±0,0385
100°	-0,1403±0,0161	-0,2167±0,0449	-0,1343±0,0161	0,0277±0,0055	0,0825±0,0425	0,1752±0,0775	-0,0005±0,0515
95°	-0,0912±0,0166	-0,2490±0,0374	-0,2374±0,0150	-0,0488±0,0073	-0,1988±0,0481	-0,0591±0,1132	-0,6435±0,0509
90°	-0,1691±0,0153	-0,2726±0,0290	-0,4592±0,0151	-0,2805±0,0087	-0,4176±0,0453	-0,3532±0,0753	-0,8380±0,0344
85°	-0,1739±0,0109	-0,4091±0,0224	-0,4783±0,0086	-0,4592±0,0090	-0,7158±0,0251	-0,5988±0,0717	-0,9535±0,0254
80°	-0,1302±0,0137	-0,3312±0,0159	-0,3613±0,0097	-0,5778±0,0092	-0,5826±0,0263	-0,5960±0,0469	-0,7651±0,0188
75°	-0,1126±0,0108	-0,2751±0,0281	-0,3892±0,0357	-0,5564±0,0072	-0,4446±0,0302	-0,6249±0,0445	-0,7911±0,0299
70°	-0,0676±0,0087	-0,2422±0,0207	-0,3009±0,0214	-0,3500±0,0106	-0,3968±0,0235	-0,4235±0,0371	-0,6370±0,0263
65°	-0,0215±0,0065	-0,0800±0,0129	-0,1677±0,0173	-0,3059±0,0114	-0,3432±0,0175	-0,3912±0,0300	-0,6725±0,0444
60°	0,0104±0,0060	-0,0371±0,0183	-0,0595±0,0197	-0,2537±0,0101	-0,2266±0,0140	-0,3251±0,0328	-0,2470±0,0261
55°	0,0505±0,0049	0,0232±0,0847	0,0158±0,0250	-0,0372±0,0128	-0,0196±0,0107	-0,0912±0,0275	-0,0903±0,0598
50°	0,0932±0,0050	0,1171±0,0391	0,0732±0,0459	0,0431±0,0088	0,0755±0,0345	0,0124±0,0136	0,1296±0,0347
45°	0,0953±0,0190	0,0391±0,0206	0,0425±0,0281	0,0779±0,0070	0,0668±0,0220	0,0800±0,0094	0,1287±0,0247
40°	0,0449±0,0250	0,1301±0,0129	0,0675±0,0188	0,0567±0,0045	0,0895±0,0136	0,0907±0,0083	0,1134±0,0143
35°	0,0836±0,0181	0,0613±0,0087	0,0232±0,0130	0,0551±0,0062	0,0301±0,0087	0,0816±0,0051	0,0678±0,0085

$E_0$ (eV)	$S_A(65^\circ)$	$S_A(130^\circ)$
6,7	0,2571±0,0241	—±—
6,75	0,1907±0,0021	—±—
6,8	0,2536±0,0315	—±—
6,85	0,2491±0,0189	—±—
6,9	0,1830±0,0225	—±—
6,95	0,2569±0,0219	—±—
7	0,1529±0,0069	—±—
7,05	0,1051±0,0102	—±—
7,1	0,0869±0,0152	—±—
7,15	0,1361±0,0208	—±—
7,2	0,1597±0,0210	—±—
7,3	0,1424±0,0129	—±—
7,35	0,1398±0,0273	—±—
7,4	0,0981±0,0199	—±—
7,5	0,1209±0,0074	—±—
7,6	0,0761±0,0228	—±—
7,7	0,0477±0,0062	—±—
7,75	0,1229±0,0123	—±—
7,8	0,1426±0,0137	—±—
7,9	0,1534±0,0189	—±—
8	0,0468±0,0095	—±—
8,1	0,1036±0,0152	—±—
8,2	0,0405±0,0184	—±—
8,3	0,0144±0,0304	—±—
8,4	0,0164±0,0136	—±—
8,5	0,0708±0,0214	—±—
8,6	0,0400±0,0198	—±—
8,7	0,0426±0,0040	—±—
8,8	0,0344±0,0049	—±—
8,85	0,0402±0,0192	—±—
8,9	0,0231±0,0055	—±—
8,95	0,0377±0,0176	—±—
9	0,0483±0,0054	—±—
9,05	0,0342±0,0133	—±—

bitte wenden
--------------

$E_0$ (eV)	$S_A(65^\circ)$	$S_A(130^\circ)$
9,1	$0,0611 \pm 0,0060$	— $\pm$ —
9,15	$0,0210 \pm 0,0091$	— $\pm$ —
9,2	$-0,0027 \pm 0,0041$	— $\pm$ —
9,3	$0,0077 \pm 0,0045$	— $\pm$ —
9,4	$0,0169 \pm 0,0048$	— $\pm$ —
9,5	$0,0236 \pm 0,0083$	— $\pm$ —
9,6	$0,0564 \pm 0,0047$	— $\pm$ —
9,7	$0,0673 \pm 0,0055$	— $\pm$ —
9,8	$0,0328 \pm 0,0038$	— $\pm$ —
9,9	$0,0533 \pm 0,0039$	$-0,5217 \pm 0,0651$
10	$0,0189 \pm 0,0030$	$-0,4243 \pm 0,0778$
10,1	$0,0023 \pm 0,0038$	$-0,4271 \pm 0,0976$
10,2	$0,0214 \pm 0,0066$	$-0,4971 \pm 0,0926$
10,3	$0,0150 \pm 0,0101$	$-0,3771 \pm 0,0929$
10,4	$0,0227 \pm 0,0057$	$-0,3940 \pm 0,0313$
10,5	$-0,0233 \pm 0,0041$	$-0,4930 \pm 0,0095$
10,55	$-0,0200 \pm 0,0339$	$-0,4457 \pm 0,0240$
10,6	$-0,0167 \pm 0,0042$	$-0,4451 \pm 0,0083$
10,65	$0,0013 \pm 0,0165$	$-0,4788 \pm 0,0226$
10,7	$-0,0655 \pm 0,0041$	$-0,4095 \pm 0,0062$
10,8	$-0,0433 \pm 0,0048$	$-0,4146 \pm 0,0078$
10,9	$-0,1391 \pm 0,0047$	$-0,4192 \pm 0,0074$
10,95	$-0,0830 \pm 0,0137$	$-0,3872 \pm 0,0192$
11	$-0,0215 \pm 0,0065$	$-0,3504 \pm 0,0100$
11,1	$-0,1268 \pm 0,0074$	$-0,4328 \pm 0,0152$
11,2	$-0,1651 \pm 0,0063$	$-0,3939 \pm 0,0165$
11,3	$-0,1569 \pm 0,0059$	$-0,3643 \pm 0,0166$
11,4	$-0,2029 \pm 0,0051$	$-0,3278 \pm 0,0154$
11,5	$-0,0800 \pm 0,0129$	$-0,3591 \pm 0,0095$
11,6	$-0,2097 \pm 0,0024$	$-0,3825 \pm 0,0028$
11,7	$-0,2209 \pm 0,0034$	$-0,3802 \pm 0,0039$
11,75	$-0,2123 \pm 0,0121$	$-0,3536 \pm 0,0196$
11,8	$-0,2009 \pm 0,0077$	$-0,3179 \pm 0,0085$
11,85	$-0,2414 \pm 0,0161$	$-0,2432 \pm 0,0297$

bitte wenden
--------------

$E_0$ (eV)	$S_A(65^\circ)$	$S_A(130^\circ)$
11,9	-0,2196±0,0179	-0,3827±0,0054
12	-0,1677±0,0173	-0,3262±0,0072
12,05	-0,2919±0,0241	-0,3731±0,0178
12,1	-0,2844±0,0172	-0,3222±0,0156
12,2	-0,3096±0,0309	-0,2951±0,0285
12,3	-0,2112±0,0239	-0,3014±0,0524
12,4	-0,1706±0,0255	-0,2913±0,0529
12,5	-0,3059±0,0114	-0,1597±0,0031
12,6	-0,2649±0,0183	-0,4769±0,0279
12,7	-0,4137±0,0589	-0,4140±0,0193
12,8	-0,3543±0,0263	-0,3125±0,0299
12,9	-0,3628±0,0161	-0,2708±0,0171
13	-0,3432±0,0175	-0,2603±0,0218
13,1	-0,3648±0,0116	-0,2346±0,0230
13,2	-0,3554±0,0209	-0,2764±0,0224
13,3	-0,3777±0,0273	-0,2717±0,0225
13,4	-0,4142±0,0107	-0,1727±0,0093
13,5	-0,3957±0,0303	-0,2665±0,0453
13,6	-0,4109±0,0100	-0,2111±0,0133
13,7	-0,4050±0,0082	-0,1146±0,0070
13,8	-0,3770±0,0108	-0,0770±0,0059
13,9	-0,4499±0,0126	-0,1098±0,0049
14	-0,6725±0,0444	-0,1008±0,0147
14,1	-0,5994±0,0218	-0,1756±0,0121
14,2	-0,6092±0,0167	-0,0237±0,0146
14,3	-0,6531±0,0148	-0,0579±0,0149
14,4	-0,6366±0,0284	-0,0524±0,0197
14,5	-0,5379±0,0117	-0,0590±0,0090
14,6	-0,5686±0,0106	-0,0302±0,0079
14,7	-0,5060±0,0100	-0,0297±0,0088
14,8	-0,4195±0,0184	0,0020±0,0207
14,9	-0,5266±0,0086	-0,0465±0,0100
15	-0,5931±0,0106	-0,0937±0,0118
15,1	-0,5696±0,0060	-0,0319±0,0070

bitte wenden
--------------

---

$E_0$ (eV)	$S_A(65^\circ)$	$S_A(130^\circ)$
15,2	$-0,5265 \pm 0,0060$	$-0,0107 \pm 0,0075$
15,3	$-0,5354 \pm 0,0071$	$-0,0507 \pm 0,0099$
15,4	$-0,5162 \pm 0,0073$	$-0,0349 \pm 0,0109$
15,5	$-0,6045 \pm 0,0062$	$-0,0473 \pm 0,0105$

---

**Tab. C.5.:** Messung der Energieabhängigkeit der Spin-Asymmetriefunktion von 6,7 eV bis 15,5 eV.

## Literaturverzeichnis

- AFTING, I. (1995): *Herstellung von dünnen Goldfolien ( $\sim 100$  nm) und Bestimmung ihrer Schichtdicken*. Examensarbeit Sek. II, Universität Münster.
- ANDERSEN, N. und BARTSCHAT, K. (2001): *Polarization, Alignment, and Orientation in Atomic Collisions*. Springer-Verlag, New York (USA) [u. a.], 1. Aufl., ISBN 0-387-98989-7.
- ASSOUS, R. (1972): J. Opt. Soc. Am., **62**, S. 544–547.
- BARTSCHAT, K. (1984): *Spinabhängige Effekte bei der Streuung niederenergetischer Elektronen an schweren Atomen*. Dissertation, Universität Münster.
- BARTSCHAT, K. (1985): J. Phys. B, **18**, S. 2519–2524.
- BARTSCHAT, K. (1989): Phys. Rep., **180**, S. 1–81.
- BARTSCHAT, K. (2009): *persönliche Kommunikation*. Email.
- BARTSCHAT, K. *et al.* (1981): Phys. Rev. Lett., **47**, S. 997–999.
- BERTACCO, R. *et al.* (1999): Rev. Sci. Instr., **70**, S. 3572–3576.
- BEUTLER, H. (1933): Z. Phys. A, **86**, S. 495–515.
- BLUM, K. (1996): *Density Matrix Theory and Applications*. Plenum Press,, New York (USA), 2. Aufl., ISBN 0-306-45341-X.
- BLUM, K. und KLEINPOPPEN, H. (1983): *Spin-Dependent Phenomena in Inelastic Electron-Atom Collisions*, In: BATES, D. und BEDERSON, B. (Hg.), *Adv. At. Mol. Phys.*, Bd. 19, Academic Press, London (UK) [u. a.], S. 187–264.
- BRÜNER, P. (2008): *Konstruktion eines Metallverdampfungssofens zur Untersuchung spinabhängiger Streuprozesse zwischen Elektronen und atomaren Targets*. Diplomarbeit, Universität Münster.
- CONNERADE, J. P. (1998): *Highly excited atoms*. Cambridge monographs on atomic, molecular and chemical physics ; 9, Cambridge University Press, Cambridge (UK) [u. a.], ISBN 0-521-43232-4.
- DÜMMLER, M. *et al.* (1992): J. Phys. B, **25**, S. 4281–4285.
- EDMONDS, A. R. (1996): *Angular Momentum in Quantum Physics*. Princeton University Press,, Princeton (USA), 2. Aufl., ISBN 0-691-07912-9.

- ESTER, T. (1989): *Elimination instrumenteller Asymmetrien bei der Elektronenpolarisationsmessung durch Mottstreuung*. Diplomarbeit, Universität Münster.
- FANO, U. (1961): Phys. Rev., **124**, S. 1866–1878.
- FURNESS, J. B. und MCCARTHY, I. E. (1973): J. Phys. B, **6**, S. 2280–2291.
- GAY, T. J. (1983): J. Phys. B, **16**, S. L553–L556.
- GAY, T. J. und DUNNING, F. B. (1992): Rev. Sci. Instr., **63**, S. 1635–1651.
- GAY, T. J. *et al.* (1996): Phys. Rev. A, **53**, S. 1623–1629.
- GEERS, S. (2001): *Konstruktion eines Bleiverdampfungssofens zur Untersuchung spinabhängiger Wechselwirkungen zwischen polarisierten Elektronen und Bleiatomen*. Diplomarbeit, Universität Münster.
- GEESMANN, H. (1990): *Links-Rechts-Asymmetrien bei elastischer und inelastischer Streuung spinpolarisierter Elektronen an Thallium- und Bleiatomen*. Dissertation, Universität Münster.
- GEESMANN, H. *et al.* (1991): J. Phys. B, **24**, S. 2817–2831.
- GELLRICH, A. und KESSLER, J. (1991): Phys. Rev. A, **43**, S. 204–216.
- GELLRICH, A. *et al.* (1990): Rev. Sci. Instr., **61**, S. 3399 – 3404.
- GÖHLER, B. (2011): (*in Vorb.*), Dissertation, Universität Münster.
- HABERLAND, R. und FRITSCHKE, L. (1987): J. Phys. B, **20**, S. 121–126.
- HAMELBECK, V. *et al.* (2009): Phys. Rev. A, **80**, 062711.
- HANNE, G. F. (1983): Phys. Rep., **95**, S. 95–165.
- HANNE, G. F. (1984): Comments At. Mol. Phys., **14**, S. 163–171.
- HECHT, E. (1989): *Optik*. Addison-Wesley Verlag, ISBN 3-925118-86-1.
- HERTING, C. (2002): *( $e, e\gamma$ )-Koinzidenzexperiment zur Bestimmung der Orientierung von Quecksilber- und Bleiatomen nach Stoßanregung mit polarisierten Elektronen*. Dissertation, Universität Münster.
- HERTING, C. *et al.* (2008): Rev. Sci. Instr., **79**, 023304.
- HILLEBRECHT, F. U. *et al.* (2002): Rev. Sci. Instr., **73**, S. 1229–1234.



- HOLTKÖTTER, I. (2003): *Optimierung des Betriebs einer Elektronenstreuapparatur mit Spinanalyse*. Diplomarbeit, Universität Münster.
- HOLTKÖTTER, I. (2008): *Untersuchung von Austauscheffekten bei der Streuung spinpolarisierter Elektronen an paramagnetischen Molekülen*. Dissertation, Universität Münster.
- JACKSON, J. D. (2002): *Klassische Elektrodynamik*. de Gruyter Verlag, Berlin [u. a.], 3., überarb. und erw. Aufl., ISBN 3-11-016502-3.
- JOST, K. (1979): J. Phys. E., **12**, S. 1006–1012.
- JÜTTEMANN, F. (2003): *Erprobung einer Apparatur zur Untersuchung der Streuung von polarisierten Elektronen an Atomen und Molekülen*. Diplomarbeit, Universität Münster.
- KAUSSEN, F. (1985): *Doppelstreuexperiment zur Untersuchung von Spineffekten bei elastischen Stößen von Elektronen mit Hg-, Tl-, Pb- und Bi-Atomen*. Dissertation, Universität Münster.
- KAUSSEN, F. *et al.* (1987): J. Phys. B, **20**, S. 151–165.
- KESSLER, J. (1985): *Polarized Electrons*. Springer-Verlag, Berlin [u. a.], 2. Aufl.
- KETTNER, M. (2011): (*in Vorb.*), Diplomarbeit, Universität Münster.
- KUMAR, P. *et al.* (1994): Phys. Rev. A, **49**, S. 899–907.
- KUREPA, M. V. *et al.* (1974): J. Phys. E, **7**, S. 940–944.
- MAYER, S. *et al.* (1996): J. Phys. B, **29**, S. 3497–3511.
- MAYER-KUCKUK, T. (1985): *Atomphysik*. Teubner Verlag, Stuttgart, 3., überarb. u. erw. Aufl., ISBN 3-519-13042-4.
- MCLEAN, A. D. und MCLEAN, R. S. (1981): At. Data Nucl. Data Tables, **26**, S. 197–381.
- MEIER, F. und PESCIA, D. (1981): Phys. Rev. Lett., **47**, S. 374–377.
- MEINTRUP, R. (1999): *Messung der Polarisationsparameter  $S$  und  $T_y$  bei der Streuung von 20-eV-Elektronen an Mangan*. Dissertation, Universität Münster.
- MILISAVLJEVIĆ, S. *et al.* (2005): J. Phys. B, **38**, S. 2371–2384.
- MOORE, C. E. (1958): *Atomic Energy Levels, Natl. Stand. Ref. Data Ser.*, Bd. III. Natl. Bur. Stand., Gaithersburg (USA).
- MOTT, N. F. (1929): Proc. Roy. Soc. A, **124**, S. 425–442.
- PARPIA, F. A. *et al.* (1996): Comp. Phys. Comm., **94**, S. 249–271.

- PEJCEV, V. *et al.* (1981): J. Phys. B, **14**, S. 4649–4664.
- PIERCE, D. T. *et al.* (1975): Appl. Phys. Lett., **26**, S. 670–672.
- PIERCE, D. T. *et al.* (1980): Rev. Sci. Instr., **51**, S. 478–499.
- QIAO, S. und KAKIZAKI, A. (1997): Rev. Sci. Instr., **68**, S. 4017–4021.
- RALCHENKO, Y. *et al.* (2008): *NIST Atomic Spectra Database (version 3.1.5)*, [Internet]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (USA), URL: <http://physics.nist.gov/asd3>, Stand: 31. August 2009.
- RAY, K. *et al.* (1999): Science, **283**, S. 814–816.
- ROSENFELDT, A. C. (2009): *Time-resolved photoelectron spectroscopy of low energy excitations of 4x4 C<sub>60</sub> / Cu(111)*. Dissertation, Universität Münster.
- RUPPEL, H. (1994): *Konstruktion und Bau einer Quelle spinpolarisierter Elektronen*. Diplomarbeit, Universität Münster.
- RUSSELL, H. N. und SAUNDERS, F. A. (1925): Ap. J., **61**, S. 38–69.
- SCHULZ, G. J. (1973): Rev. Mod. Phys., **45**, S. 378–422.
- SCOTT, N. S. und BURKE, P. G. (1980): J. Phys. B, **13**, S. 4299–4314.
- SHERMAN, N. (1956): Phys. Rev., **103**, S. 1601–1607.
- SLATER, J. C. (1951): Phys. Rev., **81**, S. 385–390.
- TACKE, S. (2008): *Bestimmung von Resonanzen im totalen Wirkungsquerschnitt für das chirale Molekül Octanol*. Diplomarbeit, Universität Münster.
- TAYLOR, H. S. *et al.* (1966): J. Chem. Phys., **45**, S. 2872–2888.
- TOŠIĆ, S. D. *et al.* (2008): Phys. Rev. A, **77**, 012725.
- WINKELMANN, A. *et al.* (2008): Rev. Sci. Instr., **79**, 083303.
- WOOD, D. R. und ANDREW, K. L. (1968): J. Opt. Soc. Am., **58**, S. 818–828.
- ZATSARINNY, O. (2006): Comp. Phys. Comm., **174**, S. 273 – 356.
- ZATSARINNY, O. und FISCHER, C. F. (2000): J. Phys. B, **33**, S. 313–341.

## Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen beteiligten Personen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Herrn Prof. Dr. G. F. Hanne danke ich herzlich für die Aufgabenstellung, für die ständige Diskussionsbereitschaft, die hilfreichen Anregungen und das stete Interesse am Fortgang der Arbeit.

Mein Dank gilt außerdem Herrn Prof. Dr. H. Zacharias für die vielen interessanten Diskussionen im Rahmen des Oberflächenexperiments und für das Interesse am Fortgang der Arbeit.

Herrn Prof. Dr. K. Bartschat und Herrn Dr. O. Zatsarinny (Drake University, Des Moines, USA), sowie Herrn Prof. Dr. R. Srivastava und Herrn R. K. Gangwar (Roorkee University, Roorkee, Indien) bin ich für die Bereitstellung der  $R$ -Matrix- bzw. RMP-Rechnungen zu Dank verpflichtet.

Ferner bedanke ich mich bei Herrn Priv.-Doz. Dr. B. Lohmann für die konstruktive Diskussionen zur Atomphysik.

Den Mitarbeitern der feinmechanischen Werkstatt des Physikalischen Institutes, besonders Herrn W. David, danke ich außerdem für ihre sorgfältige Arbeit und kompetente Hilfe in allen technischen Fragen.

Allen Mitarbeitern der Arbeitsgruppen von Prof. Dr. G. F. Hanne und Prof. Dr. H. Zacharias sei für fruchtbare Diskussionen und die kollegiale Arbeitsatmosphäre gedankt.



