

Die Anwendbarkeit polarisierter Positronen zur Untersuchung paramagnetischer Zentren

Inaugural-Dissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades
der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

vorgelegt von

Christoph Deckers
aus Mönchengladbach

Bonn 1996

Angefertigt mit Genehmigung der
Mathematisch–Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Rheinischen Friedrich–Wilhelms–Universität Bonn

Referent: Prof. Dr. K. Maier
Korreferent: Prof. Dr. P. Herzog

Tag der Promotion:

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Untersuchung der Anwendbarkeit von polarisierten Positronen zur Verbesserung der Leerstellenspektroskopie im Falle von paramagnetischen Zentren. Hierzu wird eine besondere Eigenschaft des β^+ -Zerfalls, nämlich die Emission spinpolarisierter Positronen, mit der Polarisierbarkeit paramagnetischer Elektronen in einem starken Magnetfeld bei tiefer Temperatur verknüpft.

Da die Zerstrahlung von Positron und Elektron von der relativen Spinorientierung beider Teilchen abhängig ist, ergibt sich bei der Annihilation polarisierter Positronen mit paramagnetischen Elektronen beim Umpolen des Magnetfeldes und der damit verbundenen Änderung der bevorzugten Richtung des Elektronenspins ein meßbarer Unterschied der Zerstrahlungsparameter.

Eine derartige Veränderung des Meßsignals zwischen den beiden Magnetfeldrichtungen kann an F-Zentren in additiv gefärbten Alkalihalogeniden beobachtet werden. An den untersuchten Proben zeigt sich erwartungsgemäß eine deutliche Abhängigkeit des Zerstrahlungsparameters vom Polarisationsgrad der paramagnetischen Elektronen. Gleichzeitig tritt dabei auch ein Signal des positronium-ähnlichen Zustandes im F-Zentrum auf.

Weitere Untersuchungen an einer Vielzahl von verschiedenartigen Materialien zeigen hingegen keine klaren Anzeichen paramagnetischer Zentren anhand der Annihilation. Diese Systeme, deren Verhalten unterschiedliche Ursachen haben, erlauben eine Abgrenzung der Anwendbarkeit der vorgestellten Methode.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Physikalische Grundlagen	9
2.1	Methode der Positronenzerstrahlung	9
2.1.1	Das Leben des Positrons bis zur Zerstrahlung	9
2.1.2	Annihilation von Positron und Elektron	11
2.1.3	Das Positron als Fehlstellensonde	13
2.2	Polarisierte Positronen	13
2.3	Positronium	14
2.3.1	Allgemeine Eigenschaften von Positronium	14
2.3.2	Positronium im externen Magnetfeld	15
2.3.3	Quasipositronium in Materie	17
2.4	Paramagnetische Zentren	19
2.4.1	Polarisierbarkeit paramagnetischer Zentren	19
2.4.2	Farbzentren in Alkalihalogeniden	19
3	Experimentelle Vorgehensweise	22
3.1	Erzeugung spinpolarisierter Positronen	22
3.2	Polarisation der Elektronen	25
3.3	γ -Meßtechnik	26
3.4	Datenauswertung und Darstellung	27

<i>INHALTSVERZEICHNIS</i>	5
4 Messungen an F-Zentren	29
4.1 F-Zentren in Kaliumchlorid	29
4.2 F-Zentren in Kaliumbromid	32
5 Messungen an verschiedenen Materialien	33
5.1 Einfachleerstellen in Platin	33
5.2 Silizium	37
5.2.1 Protonenbestrahltes Silizium	37
5.2.2 Elektronenbestrahltes Silizium	40
5.3 Isolatoren	42
5.3.1 Quarzglas	42
5.3.2 Saphir	44
5.4 Weitere Systeme	46
5.4.1 Elektronenbestrahltes Germanium	46
5.4.2 Deformiertes Aluminium	47
5.4.3 Kupfer-Beryllium	47
6 Diskussion der Ergebnisse	49
6.1 F-Zentren in Alkalihalogeniden	49
6.1.1 Meßergebnisse an F-Zentren in Alkalihalogeniden	49
6.1.2 Bildung von Quasipositronium in den F-Zentren	50
6.1.3 Detektierung paramagnetischer Zentren	52
6.2 Sonstige untersuchte Systeme	53
6.2.1 Platin	54
6.2.2 Silizium	55
6.2.3 Isolatoren	57
6.3 Sind polarisierte Positronen geeignete Sonden?	59
6.3.1 Erklärung für das unterschiedliche Verhalten	60
6.3.2 Bewertung der Anwendbarkeit der Methode	62

A Bildung von Quasipositronium im Magnetfeld	64
Literaturverzeichnis	66
Danksagung	73
Lebenslauf	75

Kapitel 1

Einleitung

In den letzten Jahren hat die Materialforschung, die ein Spezialgebiet der Festkörperphysik darstellt, eine immer größere Bedeutung als Grundlage neuer Technologien erlangt. Hierfür gibt es eine Reihe von Ursachen. Die wichtigsten sind einerseits der weiterhin rasant wachsende Bereich der Halbleiterphysik, andererseits die immer spezieller werdenden Anforderungen an heutige Werkstoffe für die unterschiedlichsten Anwendungen. Da eine Vielzahl von makroskopischen Eigenschaften eines Materials, hierzu zählen unter anderem mechanische Härte, Plastizität und elektrische Leitfähigkeit, auf Defekte im mikroskopischen Bereich zurückzuführen sind, benötigt man geeignete Meßverfahren, um derartige Fehlerrordnungen auf atomarer Skala untersuchen zu können.

Neben einer Reihe von klassischen Meßmethoden, wie z.B. Elektronenspin-Resonanz oder magnetische Kernresonanz, haben sich seit einigen Jahrzehnten auch nukleare Sonden in diesem Bereich etabliert. Hierzu zählen u.a. der Mößbauer-Effekt, die Gestörte γ - γ -Winkelkorrelation (PAC), die Kernorientierung (NO), die Rutherford-Rückstreuung (RBS) und die Positronenzerstrahlung. Eine Übersicht über dieses Gebiet findet sich unter anderem in [Sch92].

Die Methode der Positronenzerstrahlung wird insbesondere zur Untersuchung atomarer Leerstellen seit vielen Jahren mit großem Erfolg angewendet. Neben der Tatsache, daß es sich hierbei um eine zerstörungsfreie Methode handelt, beruht dies auf der hohen Sensitivität für Fehlstellen (10^{-6} - 10^{-7} /Atom). Ein Nachteil besteht jedoch in der Schwierigkeit der klaren Erkennung einzelner Leerstellentypen, also einer Leerstellenspektroskopie.

Die Motivation für diese Arbeit ist die Suche nach Verbesserungsmöglichkeiten der spektroskopischen Eigenschaften des Verfahrens. Dies soll durch die Identifikation eines häufig vorkommenden Fehlstellentyps, der *paramagnetischen Zentren*, erreicht werden. Hierbei handelt es sich um Fehlstellen mit einem ungepaarten Elektron.

Hierfür wird eine in diesem Zusammenhang bislang nicht genutzte Eigenschaft der Positronen aus dem β^+ -Zerfall, nämlich die Polarisation ihres Spins, angewendet. Gleichzeitig werden die Elektronen paramagnetischer Zentren in einem starken externen Magnetfeld bei tiefer Temperatur polarisiert. Da die Annihilation von Positron und Elektron spinabhängig erfolgt, sollten die Zerstrahlungen an den paramagnetischen Zentren von den übrigen Fehlstellen, bei denen das Magnetfeld keinen Einfluß auf die Elektronenspins hat, zu unterscheiden sein.

Dieser Effekt konnte im Rahmen von zwei Vorversuchen bereits im Jahre 1993 an F-Zentren in additiv gefärbten KCl-Kristallen verifiziert werden [Lau93, Dec95]. Hier zeigte sich eine Aufspaltung der Meßsignale, die eindeutig auf die paramagnetischen Elektronen in den F-Zentren zurückzuführen ist.

Konkrete Aufgabenstellung dieser Arbeit war es nun, die allgemeine Verwendbarkeit dieser neuartigen Methode an physikalisch relevanten Systemen auszutesten, um so den Anwendbarkeitsbereich zu erkunden.

Kapitel 2

Physikalische Grundlagen

2.1 Methode der Positronenzerstrahlung

Das Positron (e^+), das Antiteilchen des Elektrons, wurde 1929 von P.A.M. Dirac [Dir30a] postuliert und anschließend 1932 von C.D. Anderson [And33] in der Höhenstrahlung entdeckt.

Im Anschluß daran waren Positronen zunächst ausschließlich im Bereich der kernphysikalischen Grundlagenforschung von Bedeutung. Erst seit ungefähr 1950, nachdem sich herausgestellt hatte, daß die Annihilationsparameter im wesentlichen von den Eigenschaften der Elektronen im Festkörper bestimmt werden [DeB50, DeB52], ist die Positronenannihilation für die Festkörperphysik von Bedeutung [Bel53].

Bis zum heutigen Zeitpunkt hat sich dieses Verfahren zu einer unverzichtbaren Methode bei der Erforschung verschiedenartiger Materialien entwickelt. Dies gilt aufgrund der großen Sensitivität im besonderen bei der Untersuchung atomarer Fehlstellen [Wes73, Hau79, Sch81, Pus94]. Die wesentlichen Grundlagen werden nachfolgend skizziert.

2.1.1 Das Leben des Positrons bis zur Zerstrahlung

Positronen entstehen bei der Paarbildung hochenergetischer γ -Quanten, beim Zerfall einer Reihe von Elementarteilchen (z.B. μ^+) sowie beim β^+ -Zerfall protonenreicher Atomkerne. Für die Meßmethode der Positronenzerstrahlung kommt dabei hauptsächlich die letzte Variante in Betracht. Ein typischer Kern, der Positronen emittiert, ist z.B. ^{22}Na . Die Energieverteilung der Positronen kann näherungsweise mithilfe der Störungsrechnung berechnet werden [Fer50] und ist für ^{22}Na in Abb. 2.1 dargestellt.

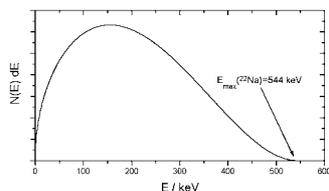


Abbildung 2.1: β^+ -Spektrum von ^{22}Na in willkürlichen Einheiten. Berechnet mithilfe der Formel $N(e) de \sim e\sqrt{e^2 - 1}(e_0 - e)^2 de$ mit $e = W/(m_0c^2)$ und $W = E + m_0c^2$ [Fer50].

Nach dem Eindringen der Positronen in den zu untersuchenden Festkörper verlieren sie innerhalb kürzester Zeit durch Ionisation, Plasmonenanregung und Bildung von Elektron-Loch-Paaren einen Großteil ihrer Energie. Dabei erreichen die Positronen typische, materialabhängige Eindringtiefen¹ von einigen 100 μm .

Ab etwa einem Elektronenvolt erfolgt die weitere Energieabgabe hauptsächlich durch Phononanregung [Per70], bis die Positronen schließlich thermische Energie ($E_{th} = \frac{3}{2}k_B T$) erreicht haben. Dieser Abbremsprozeß geschieht innerhalb weniger Pikosekunden [Lee55, Kub75]. Obwohl Rechnungen für Temperaturen unterhalb von zehn Kelvin eine Thermalisierungsdauer von einigen zehn Pikosekunden voraussagen [Nie80], hat man aber bislang experimentell selbst bei tiefsten Temperaturen keine Veränderung der Zerstrahlungsereignisse durch nicht thermalisierte Positronen gefunden². Dies bedeutet, daß der Thermalisierungsprozeß schnell im Vergleich zu selbst kurzen Positronenlebensdauern (100–200 ps) erfolgt.

Im Anschluß an die Thermalisation diffundieren die Positronen mit thermischer Energie durch den Festkörper. Ihre hohe Beweglichkeit ($D_{e^+} \approx 1 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$ [Nie79]) ermöglicht ihnen einen großen Diffusionsbereich von ungefähr 1000 \AA Durchmesser. Treffen die Positronen auf ihrem Weg durch das Material auf eine Leerstelle, so werden sie von dieser eingefangen. Ein Verlassen ist bei der typischen Potentialtiefe einer Leerstelle von ca. 1 eV mit ihrer thermischen Energie (bei Raumtemperatur ca. 0,04 eV) fast vollständig ausgeschlossen.

Dieser Einfang, auch *trapping* genannt, wird häufig durch die Formel $\kappa = \nu c_t$ beschrieben, in der κ ($[\kappa] = [\text{s}^{-1}]$) die Einfangrate, ν ($[\nu] = [\text{s}^{-1}]$) den Trapping-Koeffizienten und c_t die spezifische Defektkonzentration angeben [Pus94]. Es zeigt

¹ Die Reichweite der Positronen kann mit folgender Formel abgeschätzt werden [Bra77]:

$I(z) = I_0 \exp(-\alpha_+ z)$ mit $\alpha_+ [\text{cm}^{-1}] \approx 16 \cdot \frac{\rho [\text{g}/\text{cm}^3]}{E_{max}^{1.43} [\text{MeV}]}$ (ρ : Dichte, E_{max} : Maximale β^+ -Energie).

² Bis in den Subkelvin-Bereich bei Aluminium [Tro93].

sich, daß der Trapping-Koeffizient, der ein Maß für die Affinität eines Positrons an bestimmte Leerstellen darstellt, temperaturabhängig ist. Das Ergebnis einer Rechnung für ν für Einfachleerstellen in Silizium ist in Abb. 2.2 dargestellt.

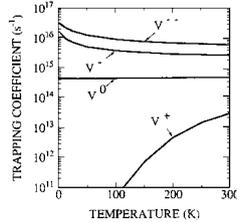


Abbildung 2.2: Temperaturabhängigkeit des Trapping-Koeffizienten ν^ϵ für die verschiedenen Ladungszustände V^ϵ von Einfachleerstellen in Silizium [Pus94]. Während die Affinität der Positronen für negativ geladene Defekte mit abnehmender Temperatur von einem ohnehin schon hohen Wert noch weiter anwächst, spielt der Einfang in positiv geladene Defekte praktisch keine Rolle.

2.1.2 Annihilation von Positron und Elektron

Nach einer materialabhängigen, mittleren Lebensdauer ($\tau \approx 100\text{--}500$ ps) zerstrahlt das Positron mit einem Elektron des Festkörpers entweder frei oder in einer Fehlstelle. Stehen die Spins der Zerstrahlungspartner dabei antiparallel zueinander, so erfolgt die Annihilation in zwei γ -Quanten der Energie 511 keV, die im Ruhesystem beider Teilchen unter 180° emittiert werden. Die Zerstrahlung bei paralleler Spinstellung, die aufgrund von Auswahlregeln in eine ungerade Anzahl von γ -Quanten erfolgen muß, ist stark unterdrückt.

Der Wirkungsquerschnitt σ für die Zwei- γ -Zerstrahlung beträgt im gut erfüllten Grenzfall kleiner Positronenenergien³ $\sigma = \pi r_0^2 c / v_{e+}$. Damit ergibt sich die Zerstrahlungsrate zu $\Gamma = \sigma v_{e+} n_{e-} = \pi r_0^2 c n_{e-}$. Folglich ist die Positronenlebensdauer $\tau = \Gamma^{-1}$ umgekehrt proportional zur Elektronendichte n_{e-} am Ort des Positrons. Die Messung der Positronenlebensdauer liefert demzufolge Aussagen über die elektronische Struktur des Festkörpers.

³ Die exakte Formel findet sich in [Dir30b, Hei54]. r_0 : klassischer Elektronenradius, c : Lichtgeschwindigkeit, v_{e+} : Geschwindigkeit des Positrons.

Neben der Elektronendichte führt auch der Elektronenimpuls zu einer meßbaren Veränderung der Annihilationseigenschaften: die Energie und die Kollinearität der beiden γ -Quanten werden beeinflußt. Dies liegt daran, daß die Annihilation beider Teilchen nur im Schwerpunktsystem unter exakt 180° in zwei Quanten von je 511 keV erfolgt.

Im Laborsystem hingegen verursacht die longitudinale Impulskomponente des Zerstrahlungspaares eine Doppler-Verschiebung der γ -Energie. Da die Einzelergebnisse unabhängig voneinander sind, kommt es im statistischen Mittel zu einer Doppler-Verbreiterung der Annihilationslinie. Diese Breite ist dann ein Maß für den mittleren Longitudinalimpuls der Elektronen am Zerstrahlungsort.

Der Impuls thermalisierter Positronen ist gegenüber typischen Elektronenimpulsen in Festkörpern vernachlässigbar gering, so daß nur noch diese für die Doppler-Verschiebung verantwortlich sind. Das Positron unterliegt zwar wie die Elektronen der Fermistatistik, aber da es von diesen unterscheidbar ist, besetzt es unabhängig den energetisch tiefstmöglichen Zustand im Festkörper. Bei den experimentell verwendeten Quellstärken befindet sich dabei nie mehr als ein Positron gleichzeitig im Festkörper.

Analog zur Doppler-Verbreiterung durch die longitudinale Impulskomponente führt der Transversalimpuls der Elektronen zu einer meßbaren Abweichung von der 180° -Kollinearität.

Im Rahmen dieser Arbeit wird nur die Doppler-Verbreiterung der Annihilationslinie als Meßgröße verwendet. Die Energieverschiebung ΔE ist direkt proportional zum Longitudinalimpuls p_L : $\Delta E = \pm \frac{c}{2} p_L$. Für ein Elektron mit einer Energie von z.B. 5 eV ergibt sich eine Doppler-Verschiebung von $1,1\text{ keV}$. Die nachfolgende Abbildung 2.3 veranschaulicht diesen Sachverhalt.

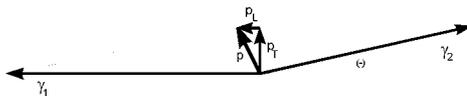


Abbildung 2.3: Abweichung der beiden γ -Quanten von der 180° -Kollinearität und Dopplerverschiebung der Annihilationslinie als Folge des Elektronenimpulses p . Die longitudinale Komponente von p führt zu den γ -Energien $E_{1,2} = m_0c^2 \pm \frac{c}{2} p_L$. Die reale Abweichung von der 180° -Kollinearität liegt im mrad-Bereich und ist damit viel kleiner als in dieser schematischen Darstellung.

2.1.3 Das Positron als Fehlstellensonde

Da sich die elektronischen Eigenschaften in der Umgebung einer Fehlstelle von denen im ungestörten Kristallgitter eines Festkörpers unterscheiden (sowohl Elektronendichte als auch $-impuls$), können durch die Messung der Annihilationsstrahlung Aussagen über die elektronische Struktur von Fehlstellen getroffen werden. Dabei muß berücksichtigt werden, daß Absolutaussagen mit dieser Methode nicht möglich sind. Vielmehr ist es notwendig, den Einfluß einer extern zugänglichen Größe (Temperatur, Druck, unterschiedlich behandelte Proben, usw.) auf die Zerstrahlungseigenschaften zu beobachten und damit die elektronische Struktur als Funktion dieses äußeren Parameters zu untersuchen.

Die Leerstellensensitivität ist vom jeweiligen Leerstellentyp abhängig und ist mit 10^{-6} bis 10^{-7} / Atom sehr hoch. Während Änderungen der Fehlstellenkonzentration oder des Fehlstellentyps mit den Methoden der Positronenannihilation genau ausmeßbar sind, ist eine Fehlstellenspektroskopie, also eine Erkennung und Spezifizierung einer Haftstelle, mit den bisherigen Standardmethoden nur eingeschränkt durchführbar. Dies ist auf die begrenzte experimentelle Auflösung der Meßapparaturen zurückzuführen [Sch81].

2.2 Polarisierete Positronen

Eine besondere, für diese Arbeit unverzichtbare Eigenschaft des β^+ -Zerfalls ist die Tatsache, daß die emittierten Positronen als Folge der Paritätsverletzung [Wu57] longitudinal spinpolarisiert sind. Der Polarisationsgrad $P = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} = \frac{v}{c}$ ist dabei proportional zur Geschwindigkeit der Positronen [Han57, Fra65].

In der Regel wird bei Positronenmessungen diese Eigenschaft nicht ausgenutzt, da gewöhnlich sogenannte *Sandwich-Anordnungen* verwendet werden, bei denen die Positronenquelle zwischen zwei Probenstücken positioniert wird. Da dabei nicht separiert werden kann, in welcher Hälfte die Zerstrahlung stattgefunden hat, beobachtet man im statistischen Mittel das Spektrum unpolarisierter Positronen.

Bringt man hingegen die Positronenquelle und die zu untersuchende Probe in eine feste Geometrie zueinander, bei der nur die Zerstrahlungsereignisse der in Probenrichtung emittierten Positronen detektiert werden, so hat man eine Vorzugsrichtung des Positronenspins geschaffen. Wie dies experimentell realisiert werden kann, wird in Kapitel 3.1 beschrieben.

Da die Zerstrahlungseigenschaften von Positron und Elektron von ihrer relativen Spineinstellung abhängen, ist es von Interesse, Systeme zu untersuchen, bei denen die Elektronen polarisiert werden können, also ferro- oder paramagnetische Substanzen.

Zahlreiche Untersuchungen mit polarisierten Positronen haben an ferromagnetischen Materialien stattgefunden. Dabei ist der Einfluß derjenigen Elektronen an der Annihilation sichtbar geworden, die für die ferromagnetische Eigenschaft dieser Systeme verantwortlich sind [Ber67]. Die Anwendung polarisierter Positronen auf paramagnetische Zentren ist das Thema dieser Arbeit.

Die Messungen an ferro- und paramagnetischen Materialien zeigen anhand ihrer Spinabhängigkeit, daß die Vorzugsrichtung des Positronenspins im Thermalisierungs- und Diffusionsprozeß nicht vollständig verlorengeht. Diese Tatsache, die nicht a priori selbstverständlich ist, ist darauf zurückzuführen, daß die Positronenlebensdauern in Materie erheblich kleiner als die Wechselwirkungszeiten des Positronenspins mit den in Festkörpern existierenden Feldern sind. Messungen an Eisen ergeben durch den Vergleich mit Rechnungen eine verbleibende Polarisation vor der Annihilation von 0,21 im Falle von ^{22}Na [Šob84].

2.3 Positronium

Neben der direkten Zerstrahlung eines Positrons mit einem Elektron tritt im Vakuum sowie in Gasen auch die Bildung von *Positronium* (Ps), einem gebundenen, wasserstoffähnlichen Zustand aus Positron und Elektron, auf. Der erste Ps-Nachweis gelang 1951 [Deu51a], nachdem sich bereits vorher erste Phänomene andeuteten [She49]. Im gleichen Jahr wurde auch erstmals der Drei- γ -Zerfall beobachtet [Deu51b]. Der Name Positronium geht auf A.E. Ruark zurück [Rua45].

In einer Reihe von Isolatoren beobachtet man ebenfalls die Bildung eines gebundenen Zustands aus Positron und Elektron, der häufig als *positroniumähnlich* oder auch als *Quasipositronium* (QPs) bezeichnet wird [Hel64]. Derartige Systeme sind seit langem bekannt [Bel53, Sim58, Dup83].

Die besonderen Eigenschaften der positroniumähnlichen Zustände, insbesondere bei Anwesenheit eines externen Magnetfelds, sollen Gegenstand dieses Kapitels sein. Eine ausführliche Rechnung erfolgte von J. Ehmman [Ehm92].

2.3.1 Allgemeine Eigenschaften von Positronium

Positronium im Vakuum ist ein wasserstoffähnliches Atom. Da die reduzierte Masse $\frac{1}{2}m_e$ beträgt, ist der Abstand beider Teilchen doppelt so groß wie beim H-Atom, die Energien sind hingegen halb so groß.

Der Grundzustand des Ps-Atoms ($n = 1, \ell = 0$) besteht aus zwei verschiedenen Spinzuständen, *Singulett* und *Triplet*, die nachfolgend beschrieben werden. Angeregte Zustände werden hier nicht betrachtet, da sie in Gegenwart von Materie in kurzer Zeit durch thermische Stöße in den Grundzustand übergehen.

Die Spin–Spin–Basisvektoren des Positroniums ergeben sich als direkte Produktzustände aus den Spins von Positron und Elektron zu $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow\rangle$ [Mil75]. Die zugehörigen Eigenvektoren zu den Operatoren \hat{S}_z und \hat{S}^2 sind der antisymmetrische Singulett– und die drei symmetrischen Triplett–Zustände:

$$|\phi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$|\phi_T^{m=0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad |\phi_T^{m=+1}\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad |\phi_T^{m=-1}\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

Spinzustand	Name	Spin	Multiplizität	Zerfall	Zerstrahlungsrate
Singulett	Para–Ps	$S = 0$	1	2γ	$\Gamma = 8 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$
Triplett	Ortho–Ps	$S = 1$	3	3γ	$\Gamma = 7 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$

Die beiden Zustände entsprechen der Hyperfeinstruktur im $1s$ –Zustand eines H–Atoms. Die energetische Aufspaltung ΔW ist hier allerdings viel größer, da das magnetische Moment des Positrons größer als das des Protons ist⁴. Der Triplett–Zustand liegt um $\Delta W = 8,45 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$ energetisch höher [Fer51, Ehm92]⁵.

Die unterschiedlichen Zerstrahlungseigenschaften beider Zustände ergeben sich unmittelbar aus der Anwendung des Operators für die Ladungskonjugation, dessen Erwartungswert bei der elektromagnetischen Wechselwirkung eine Erhaltungsgröße ist [Yan50].

2.3.2 Positronium im externen Magnetfeld

Falls ein externes Magnetfeld auf das Ps–Atom wirkt, muß der Hamiltonoperator um den Term $V_m = -\vec{\mu}\vec{B}$ (magnetisches Moment $\vec{\mu}$, Magnetfeld \vec{B}) erweitert werden. Als Folge davon vergrößert sich die energetische Aufspaltung⁶ von Triplett– und Singulett–Zustand. Im Breit–Rabi–Diagramm entfernen sich die ($m = 0$)–Zustände voneinander, während die Niveaus mit $m = \pm 1$ unverändert bleiben.

Ein weiterer und weitaus wichtigerer Effekt ist das Mischen der beiden ($m = 0$)–Zustände im Magnetfeld. Die beiden Wellenfunktionen $|\phi_T^{m=0}\rangle$ und $|\phi_S\rangle$ sind keine Eigenzustände des neuen Hamiltonoperators. Die Spinquantenzahl S ist keine Erhaltungsgröße mehr, nur noch die magnetische Quantenzahl m . Es entstehen folgende neue Zustände, die häufig auch als *Pseudozustände* bezeichnet werden:

⁴ ΔW ist sogar größer als die Feinstrukturaufspaltung ($2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$) des H–Atoms.

⁵ Hierbei ist neben der Spin–Spin–Wechselwirkung auch die Zerstrahlungswechselwirkung von Positron und Elektron zu berücksichtigen.

⁶ Die Zunahme der energetischen Aufspaltung beträgt für eine Magnetfeldstärke von 3,7 T 42%. 3,7 T ist die experimentell verwendete Magnetfeldstärke.

$$|\Phi_T^B\rangle = c|\phi_T^{m=0}\rangle - yc|\phi_S\rangle$$

$$|\Phi_S^B\rangle = c|\phi_S\rangle + yc|\phi_T^{m=0}\rangle$$

mit den Hilfsgrößen $x = \frac{4\mu_B B_z}{\Delta W}$, $y = \frac{x}{1+\sqrt{1+x^2}}$ und $c = \frac{1}{\sqrt{1+y^2}}$ [Ehm92]. Die ($m = \pm 1$)-Zustände $|\uparrow\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow\rangle$ bleiben unbeeinflusst.

Eine direkte Folge dieser Mischung ist eine Veränderung der Zerstrahlungsraten dieser Zustände gegenüber den ungestörten Vakuumzuständen. Es ergeben sich die nachfolgenden Werte:

$$\Gamma_T^B = c^2\Gamma_T + y^2c^2\Gamma_S \stackrel{B=\pm 3,7\text{ T}}{\approx} 1,2 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$$

$$\Gamma_S^B = c^2\Gamma_S + y^2c^2\Gamma_T \stackrel{B=\pm 3,7\text{ T}}{\approx} 6,9 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$$

Die Zerstrahlungsraten besitzen nun die gleiche Größenordnung im Gegensatz zum feldfreien Fall; dort betrug der Unterschied einen Faktor 1140. Dies liegt an der Tatsache, daß der Pseudo-Triplett-Zustand mit $m = 0$ im Magnetfeld überwiegend über den Zwei- γ -Kanal zerstrahlen kann. Eine Konsequenz hiervon ist der Effekt des *magnetischen Löschens* (*magnetic quenching*) [Hal54, Pag57, Sim58]. Darunter versteht man die Reduzierung der Anzahl der Drei- γ -Zerstrahlungen bei Anwesenheit eines Magnetfelds. In einem starken Magnetfeld zerstrahlen nur noch $\frac{2}{3}$ aller Pseudo-Triplett-Zustände in drei γ -Quanten⁷.

Die Zerstrahlungsraten Γ_T^B und Γ_S^B unterscheiden sich demnach meßbar, folglich auch die Lebensdauern. Die Begründung, wieso auch die Doppler-Verbreiterung der Annihilationslinie einen Meßeffect zeigt, erfolgt im Abschnitt 2.3.3.2 bei der Betrachtung von Quasipositronium.

Die Bildungswahrscheinlichkeiten der Pseudozustände in einem Magnetfeld sind bei Verwendung unpolarisierter Positronen und Elektronen gleichverteilt. Liegt jedoch mindestens eines der beiden Teilchen spinpolarisiert vor, so tritt ein Ungleichgewicht der Bildungswahrscheinlichkeiten auf. Dies wird im Anhang berechnet.

Da die Pseudozustände experimentell anhand der Annihilationseigenschaften unterschieden werden können, ergibt sich aus den Bildungswahrscheinlichkeiten unter anderem die Konsequenz, daß die Positronenpolarisation selbst mit unpolarisierten Elektronen gemessen werden kann [Pag57].

⁷ Die ($m = \pm 1$)-Zustände bleiben im Magnetfeld unverändert und zerstrahlen daher weiterhin in drei γ -Quanten. Starkes Magnetfeld bedeutet, daß z.B. bereits bei 0,2 T ca. 80% der Pseudo-Triplett-Zustände in zwei γ -Quanten zerstrahlen.

2.3.3 Quasipositronium in Materie

Neben dem Vakuumpositronium ist ein ähnlicher Zustand auch in Materie bekannt, der häufig als Quasipositronium (QPs) [Hel64] bezeichnet wird. Die Analogie besteht insbesondere im spinabhängigen Teil der Wellenfunktion, während sich der räumliche Anteil und die Annihilationsraten nennenswert unterscheiden können.

2.3.3.1 Bildung von Quasipositronium

Die Bildung von Positronium in Gasen ist durch ein Modell von Ore beschrieben worden [Ore49], nach dem die kinetische Energie des Positrons nur in einem gewissen Bereich, dem *Ore gap*, diesen Zustand ermöglicht.

Da bei der Ps-Bildung die Bindungsenergie des Positroniums von 6.8 eV frei wird, benötigt das Positron eine kinetische Energie, die größer als $E_i - 6,8 \text{ eV}$ ist (E_i : Ionisationsenergie des Gases), um ein Elektron zu binden. Auf der anderen Seite darf die Energie des Positrons nicht so groß sein, daß eine elektronische Anregung (E_e) des Gases mit seiner Energie möglich wird. Damit ergibt sich das Ore gap als zulässiger Energiebereich der Positronen für die Bildung von Positronium zu:

$$\Delta E_{kin} = E_e - (E_i - 6.8 \text{ eV})$$

Eine analoge Übertragung auf Isolatoren ist möglich [Fer56]. Liegt hier die kinetische Energie des Positrons oberhalb der Bandlücke, so wird das QPs-Atom sofort wieder ionisiert und es entsteht ein Elektron im Leitungsband.

Zur Beschreibung der QPs-Bildung in Festkörpern wird das *spur reaction model* [Mog74] angewendet: Während der Thermalisierung erzeugt das Positron bei einer Energie von ca. 100–200 eV durch Ionisation eine Spur von Elektronen vergleichbarer Energie sowie die zugehörigen Ionen. Anschließend bildet das Positron mit einem der so erzeugten, freien Elektronen das QPs-Atom.

Im Bereich der Isolatoren sind nahezu alle organischen Substanzen [Dup83], Quarz [Ber77] sowie Ionenkristalle [Dup79] bekannte QPs-Bildner. Auf der anderen Seite existieren einige Materialien, die QPs nur in größeren Hohlräumen oder ähnlichen Strukturen bilden, hierzu gehört Al_2O_3 [Has94].

In Metallen wird die Bildung von Quasipositronium ausgeschlossen, da die hohe Dichte an Leitungselektronen zu einer Abschirmung des langreichweitigen Teils der Coulomb-Wechselwirkung führt [Hel64]. Außerdem könnte die Wechselwirkung eines Positrons mit einem einzelnen Elektron nicht länger dauern als das Inverse der Plasmafrequenz der Leitungselektronen ($\approx 10^{-16} \text{ s}$) [Dup83], ein Wert der grob sechs Größenordnungen kleiner als typische Positronenlebensdauern ist. In größeren Leerstellen [Has85] kann sich aber auch in Metallen QPs bilden.

Bei Halbleitern ist die Frage, ob QPs gebildet wird, nicht eindeutig beantwortbar. Einerseits gilt es als nicht nachweisbar [Dup83], andererseits gibt es Messungen, die Anzeichen für QPs liefern [Str91]. Allerdings konnte dabei nicht ausgeschlossen werden, daß es sich eventuell nur um die Bildung an der Oberfläche handelt.

2.3.3.2 Einfluß der Umgebung auf Quasipositronium

Die in Materie existierenden elektrischen Felder wechselwirken nur schwach mit den Spins von Positron und Elektron. Demzufolge ergibt sich für den spinabhängigen Anteil der QPs–Wellenfunktion keine Änderung gegenüber dem Vakuum–Ps, wie es im Kapitel 2.3 beschrieben war.

Allerdings wird der ortsabhängige Anteil der Wellenfunktion durch das umgebende Medium verändert. Dies kann durch den Überlapp der Einteilchenwellenfunktionen von Positron und Elektron quantifiziert werden, der durch die Größe κ als Verhältnis der Elektronendichte am Ort des Positrons gegenüber dem Vakuum–Ps angegeben wird: $\kappa = \frac{|\psi_{QP_s(0)}|^2}{|\psi_{Vakuum-Ps(0)}|^2}$. Mit diesem Dichteparameter skalieren die Annihilationsraten $\Gamma_{S,T}(QPs) = \kappa \Gamma_{S,T}(Vakuum)$ [Dup83].

Das Pauli–Prinzip verlangt, daß die ortsabhängigen Anteile der Wellenfunktionen des Ps–Elektrons und der umgebenden Elektronen orthogonal zueinander sind. Damit wird der Dichteparameter κ kleiner als eins. Die Vergrößerung des Abstands von Elektron und Positron im QPs ist auch anschaulich klar, da die im Festkörper vorhandenen elektrischen Felder eine Kraft auf beide Teilchen ausüben, die entgegengesetzt, gleich groß ist.

Im Gegensatz zum Vakuum kommen in Materie einige Prozesse des Quasipositroniums mit der Umgebung vor, die zu einer Abnahme der Anzahl der Drei– γ –Annihilationen führen. Dazu zählen unter anderem der Spinaustausch mit einem ungepaarten Elektron⁸, der zu einer Ortho–Para–Konversion führt, sowie chemische Reaktionen des QPs–Atoms mit der Umgebung (z.B. Oxidation) [Mil75]. In beiden Fällen kommt es nicht zu einer direkten Zerstrahlung.

Die direkte Zerstrahlung des Positrons im Quasipositronium mit einem Elektron der Umgebung wird als *Pick–off–Prozeß* bezeichnet. Die Pick–off–Rate Γ_{po} ist proportional zur Dichte umgebender Elektronen am Ort des Positrons. Diese Dichte ergibt sich aus der anziehenden Van–der–Waals–Wechselwirkung des QPs mit der Umgebung und der abstoßenden Austauschwechselwirkung [Fer56]. Die Pick–off–Rate liegt im Bereich $\Gamma_{po} \approx 10^8\text{--}10^9 \text{ s}^{-1}$ [Her73, Ehm92] und ist damit

⁸ Bei gepaarten Elektronen kann der Spinflip aufgrund des Pauli–Prinzips nur durch eine elektronische Anregung erfolgen und ist deshalb unwahrscheinlicher. Beim Austausch muß es nicht zum Spinflip des Ps–Elektrons kommen, es kann auch mit einem Elektron gleichen Spins ausgetauscht werden. Für die Abnahme der 2γ –Zerstrahlungen ist dabei nicht die Orientierung dieses Elektrons maßgebend, sondern nur die Tatsache, daß ein Spinaustausch möglich ist [Fer58].

gewöhnlich viel größer als die Selbstzerstrahlungsrate aus dem Triplett-Zustand Γ_T , entspricht aber in etwa dem Wert der Singulett-Zerstrahlungsrate Γ_S .

Da Pick-off-Zerstrahlungen mit Elektronen erfolgen, die im Mittel einen anderen Impuls als die QPs-Elektronen besitzen, ergibt sich eine meßbare Veränderung der Doppler-Verbreiterung der Annihilationslinie.

2.4 Paramagnetische Zentren

Ein spezieller Fehlstellentyp in Festkörpern sind *paramagnetische Zentren*. Hierbei handelt es sich um Fehlstellen mit einer ungeraden Anzahl von Elektronen. Das höchstenergetische Elektron besitzt dann einen nicht abgesättigten Spin. Paramagnetische Zentren können mit der Methode der Elektronenspin-Resonanz⁹ (ESR) untersucht werden [Hau71, Bou83].

2.4.1 Polarisierbarkeit paramagnetischer Zentren

Ein Elektron in einem paramagnetischen Zentrum kann aufgrund seines unabsättigten Spins als frei angesehen werden. In einem äußeren Magnetfeld der Flußdichte B stellt sich der Elektronenspin entweder parallel oder antiparallel zum Feld ein. Die Antiparallelstellung ist dabei für ein Elektron energetisch um den Wert $\mu_B B$ bevorzugt¹⁰. Damit ergibt sich der Polarisationsgrad aus dem Verhältnis von magnetischer und thermischer Energie zu

$$P_{e^-} = \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{N_\uparrow + N_\downarrow} = \frac{N_0(e^{\frac{\mu_B B}{k_B T}} - e^{-\frac{\mu_B B}{k_B T}})}{N_0(e^{\frac{\mu_B B}{k_B T}} + e^{-\frac{\mu_B B}{k_B T}})} = \tanh\left(\frac{\mu_B B}{k_B T}\right) \quad [\text{Wei89}].$$

Beispielsweise erhält man bei einem Magnetfeld von $B = 3,7 \text{ T}$ und einer Temperatur von $T = 1,3 \text{ K}$ einen Polarisationsgrad von $P_{e^-} = 96\%$.

2.4.2 Farbzentren in Alkalihalogeniden

In Ionenkristallen, insbesondere in Alkalihalogeniden, beobachtet man einen speziellen Fehlstellentyp, die sog. *Farbzentren*. Der Name leitet sich von einer, für derartige Kristalle typischen, Absorption im sichtbaren Licht ab.

⁹ Oft auch *electron paramagnetic resonance (EPR)* genannt.

¹⁰ $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$: Bohrsches Magneton. Es gilt: $V_m = -\vec{\mu}_{e^-} \cdot \vec{B}$ mit $\vec{\mu}_{e^-} = -\mu_B \hat{\sigma} \Rightarrow V_m = \mu_B B$. Dabei bezeichnet σ eine Pauli-Spinmatrix. Die Einstellung des Elektronenspins parallel zur Magnetfeldrichtung führt zu einem energetisch höheren Zustand. Folglich ist die Antiparallelstellung energetisch bevorzugt.

Das bestuntersuchte Farbzentrum ist das *F-Zentrum*. Hierbei handelt es sich um eine Anionenleerstelle, in der sich ein einzelnes Elektron befindet. F-Zentren lassen sich leicht durch additive Färbung erzeugen. Hierzu wird der Kristall in einer Alkaliatmosphäre bis nahe an den Schmelzpunkt geheizt. Dadurch lagern sich an der Oberfläche Alkaliatome an. Um den thermodynamischen Grundzustand zu erreichen, diffundieren Halogenatome aus dem Volumen an die Kristalloberfläche. Die zurückbleibenden Anionlücken (Schottky-Defekte) bilden die F-Zentren [Sch63].

F-Zentren sind ideale Beispiele paramagnetischer Zentren. Sie sind detailliert mit der Elektronenspin-Resonanz untersucht worden [Kip53, Pic65, Hau71]. In allen untersuchten Alkalihalogeniden ist der g -Faktor des F-Zentrums-Elektron (KCl 1,995 [Kip53]) nahe dem Wert des freien Elektrons. Aus den Messungen hat man unter anderem eine Vorstellung von der räumlichen Verteilung des Elektrons im F-Zentrum gewonnen. Es zeigt sich, daß das Elektron mit einer großen Zahl von Kernen der Umgebung überlappt. Es besitzt aber auch eine recht hohe Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Fehlstelle. Dort bevorzugt es die Nähe der positiv geladenen Alkaliatome. Dies veranschaulicht Abbildung 2.4.

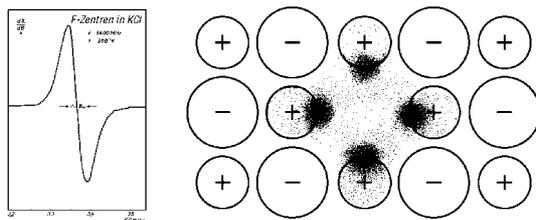


Abbildung 2.4: ESR-Spektrum (aufgetragen ist das differentielle Signal der Suszeptibilität $\frac{d\chi}{dB}$) von F-Zentren in KCl [Pic65] und Bild der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons in einem F-Zentrum [Wei89]. Das ESR-Spektrum zeigt eine breite, nahezu Gaußförmige Resonanzlinie. Der g -Faktor beträgt 1,995 [Kip53]. Berechnet man die Hyperfeinwechselwirkung des Elektrons mit den sechs umgebenden K-Atomen, so ergibt sich ein Spektrum mit 19 HFS-Linien. Die Tatsache, daß das Meßergebnis nur eine breite, unaufgelöste Linie zeigt, wird durch die Wechselwirkung des Elektrons mit Kernen in größerem Abstand (nächste und übernächste Schale) erklärt [Hau71]. Das Elektron befindet sich hauptsächlich in der Fehlstelle, dort bevorzugt es die Nähe der umliegenden Kationen.

F-Zentren sind ebenfalls detailliert mit der Positronenannihilation untersucht worden. Hier zeigte sich entgegen der Aussage von Ferrell [Fer56], der QPs-

Bildung in Ionenkristallen ausschloß, daß die Bildung von Quasipositronium auftritt [Bis63]. Weitere Untersuchungen [Dup70, Bis71, Her73] zeigten, daß F-Zentren Haftstellen für Positronen sind und daß die QPs-Bildung mit den F-Zentrums-Elektronen erfolgt.

Dies legte den Schluß nahe, für erste Untersuchungen mit polarisierten Positronen an paramagnetischen Zentren F-Zentren zu verwenden. 1993 fanden dazu zwei Vorversuche an F-Zentren in KCl statt. Dabei zeigte sich sowohl in einer Dopplermessung [Lau93, Gre94] als auch in einer Lebensdauerermessung [Dec94, Dec95] eine Abhängigkeit der Zerstrahlungsparameter vom Grad der Elektronenpolarisation und der Magnetfeldorientierung. Damit läßt sich das paramagnetische Verhalten von F-Zentren mit der Positronenannihilation zweifelsfrei nachweisen.

Kapitel 3

Experimentelle Vorgehensweise

3.1 Erzeugung spinpolarisierter Positronen

Positronen aus dem β^+ -Zerfall radioaktiver Kerne sind in Flugrichtung longitudinal spinpolarisiert. Dabei ist der Polarisationsgrad $P_{e^+} = \frac{v}{c}$ geschwindigkeitsabhängig [Fra65].

Da die Emission der Positronen räumlich isotrop erfolgt, ist es zur Erzeugung einer Vorzugsrichtung des Spins notwendig, nur die in eine Hälfte (2π) des Raumwinkels — von der Quelle aus gesehen — emittierten Positronen zu verwenden. Dies verlangt eine räumliche Trennung von Probe und Quelle.

Für die hier beschriebenen Experimente wurde hauptsächlich der Positronenstrahler ^{22}Na verwendet. Anfangs erfolgten einige Messungen mit ^{74}As . Wichtige Eigenschaften beider Isotope sind nachfolgend aufgeführt:

	^{22}Na	^{74}As
Anteil der Zerfälle mit Positronen [Led78]	90%	26% ¹
Halbwertszeit [Led78]	2,6 y	17,8 d
Maximalenergie E_{max} / keV [Led78]	544	941
$\overline{P_{e^+}}$ ohne Al-Absorber ²	65%	77%
$\overline{P_{e^+}}$ mit Al-Absorber ²	74%	81%
Anteil des Spektrums mit $E > 140$ keV ²	67%	87%

¹ Ein weiterer Zerfallskanal mit 3% Intensität und höherer Energie ist nicht berücksichtigt.

² Diese Größen sind durch einfache numerische Integration des β^+ -Spektrums berechnet (für ^{22}Na siehe [Dec94]). 140 keV ist die Energie, die zum Durchqueren des Absorbers benötigt wird.

Die mittlere Positronenpolarisation \overline{P}_{e^+} kann leicht dadurch vergrößert werden, daß man den niederenergetischen Anteil des Spektrums durch einen dünnen Absorber abschneidet, und folglich nur Positronen mit einem höheren Polarisationsgrad auf die Probe treffen läßt. Bei beiden Quellen wurde hierzu jeweils ein 100 μm dicker Al-Absorber verwendet. Zum Durchqueren dieses Absorbers benötigen die Positronen ca. 140 keV. Der Polarisationsgrad, der sich durch die Integration von 140 keV bis E_{max} ergibt, ist ebenfalls in der Tabelle aufgeführt.

Bei der bisherigen Berechnung des Polarisationsgrades ist die Projektion auf die Magnetfeldachse als physikalisch relevante Vorzugsrichtung noch nicht berücksichtigt. Eine exakte Berechnung ist insofern nicht einfach, da der Absorptionsprozeß im Aluminium den Öffnungswinkel des Emissionskegels einschränkt. Dieser Vorgang ist aber nur näherungsweise bekannt. Schätzt man ihn mit 90° ab, so ergibt sich ein Korrekturfaktor von 0,85. Damit erhält man als endgültigen Wert des Polarisationsgrades für dieses Experiment $P_{e^+} \approx 0,63$ für ^{22}Na und $P_{e^+} \approx 0,69$ für ^{74}As .

Bei der ^{22}Na -Quelle handelt es sich um 4 MBq (100 μCi) ^{22}Na , das als NaCl-Lösung³ in einer kleinen Einbuchtung des Quellträgers eingetrocknet wurde (siehe Abb. 3.1). Dieser wurde dann in einer Gewindehülse fixiert. Anschließend wurde die Al-Absorberfolie aufgeklebt. Dies gewährleistet eine kontaminationssichere Handhabung.

^{74}As kann leicht über die Reaktion $^{74}\text{Ge}(p,n)^{74}\text{As}$ durch Protonenbestrahlung aus Germanium erzeugt werden [Ton94]. Dazu wurde ein Ge-Scheibchen am Karlsruher Zyklotron mit Protonen einer Energie von 26 MeV bei einem Strahlstrom von 15 μA 50 Minuten lang bestrahlt. Die so erzeugte Aktivität wurde zu 1 mCi abgeschätzt. Anschließend wurde das Ge-Scheibchen in einem Graphittiegel im Vakuum induktiv bei 1200°C eine Stunde lang geheizt. Da der Dampfdruck von Arsen mehrere Größenordnungen höher als der von Ge ist, kann das As aus dem flüssigen Germanium „ausgekocht“ werden und auf einem wassergekühlten Quellträger zu einer kleinen Quelle kondensiert werden [Ton94]. Der aufgefangene Anteil betrug etwa 15% [Sch95]. Damit ergab sich eine Anfangsaktivität von ca. 150 μCi (5,5 MBq) ^{74}As . Der Aufbau beider Quellen ist nahezu identisch.

Die benötigte feste Geometrie zwischen Probe und Quelle wird durch einen speziellen Probenträger gewährleistet [Sch95]. Der Abstand zwischen Quelle und Probe beträgt 24 mm. Die Probe befindet sich in einer Probenhülse, die über zwei Edelstahlstege mit einem Gewinde verbunden ist. Dieses Gewinde läßt sich in den Quellhalter schrauben (siehe Abb. 3.1). Anschließend wird diese Konstruktion über eine lange Probenstange in die Probenkammer geführt, die sich im Innern des Magneten befindet [Dec94, Sch95].

Die Positronen werden von der Quelle mithilfe des Magnetfeldes auf die Probe

³ Amersham Buchler GmbH & Co KG, 38110 Braunschweig.

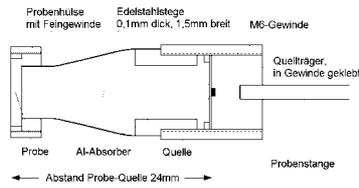


Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau von Quelle und Probe (nach [Sch95]). In die Probenhülse kann eine Probe mit einem Durchmesser von 6–6,5 mm und einer Dicke von max. 2 mm eingesetzt werden. Anschließend wird in das Feingewinde der Probenhülse der Probenhalter (Gewinde, Edelstahlstege, M6-Gewinde für Quellträger) eingeschraubt.

geführt. Bei einem Magnetfeld von $B = 3,7 \text{ T}$ besitzen die Trajektorien einen Radius von maximal 0,8 mm. Abbildung 3.2 veranschaulicht, daß bei dieser Magnetfeldstärke fast alle Positronen die Probe erreichen.

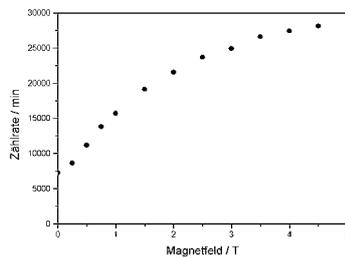


Abbildung 3.2: Gemessene Zählrate der Annihilationen in der Probe als Funktion der Magnetfeldstärke. Mit ansteigendem Magnetfeld wächst die Zahl der Positronen aus dem β^+ -Spektrum, die auf die Probe fokussiert werden. Bei einem Feld von 3,7 T werden fast alle Positronen, die den Al-Absorber durchqueren, auf die Probe geführt.

3.2 Polarisation der Elektronen

Wie in Kapitel 2.4.1 dargestellt worden ist, ergibt sich der Polarisationsgrad der Elektronen in paramagnetischen Zentren zu $P_{e^-} = \tanh(\frac{\mu_B B}{k_B T})$. Da für die Untersuchungen in dieser Arbeit ein hoher Polarisationsgrad der Elektronen erwünscht ist, wird ein starkes Magnetfeld bei tiefer Proben­temperatur benötigt. So erhält man beispielsweise bei einem Magnetfeld von vier Tesla und einer Temperatur von zwei Kelvin eine Polarisation der Elektronen von 87%.

Zur Erzeugung des starken Magnetfelds wurde der supraleitende Magnet⁴ des 12-Detektor-IPAC-Spektrometers [Alf92] im Institut für Strahlen- und Kernphysik verwendet. Dieser liefert bei einer Stromstärke von 49 A eine maximale Magnetfeldstärke von 4,5 T am Probenort. Durch Umpolen des Spulenstroms läßt sich die Magnetfeldrichtung umdrehen.

Die benötigte tiefe Proben­temperatur leistet ein selbstgebauter ⁴He-Verdampferkryostat. Dazu wurde der ⁴He-Vorratstank für den supraleitenden Magneten angezapft, so daß das flüssige Helium über eine Edelstahlkapillare an ein Nadelventil gelangt. Dort verdampft das Helium und wird dann abgepumpt. Dadurch kühlt sich das Nadelventil ab und erzeugt am unmittelbar benachbarten Probenort eine minimale Temperatur von 1,3 K. Der dazu benötigte Abpumpdruck liegt bei etwa 1 mbar. Um eine Ankopplung der Probe an diese Temperatur zu gewährleisten, wird die Probenkammer mit ca. 3 mbar Helium gefüllt.

Die Temperaturmessung erfolgt mit einem Rutheniumoxid-Temperaturmeßwiderstand⁵, der sich durch eine sehr geringe Magnetfeldabhängigkeit auszeichnet⁶. Daneben befindet sich ein Heizwiderstand (3 kΩ), der durch einfaches Gegenheizen eine variable Proben­temperatur bei maximaler Kühlleistung ermöglicht. Die Konstanz dieser Temperatur gewährleistet ein PID-Regler⁷, der in Abhängigkeit vom Ist-Wert (Meßwiderstand) einen Regelstrom an den Heizwiderstand gibt. Eine externe Programmierung des Reglers über einen PC ermöglicht die automatische Durchführung eines Temperaturprogramms. Der Fehler in der Temperaturangabe liegt für Temperaturen unter etwa 5 K bei 0,1 K, zwischen 5 K und 10 K bei ca. 0,3 K und für höhere Temperaturen bei etwa 1 K. Die größeren Fehler bei Temperaturen oberhalb von 5–10 K liegen an der in diesem Bereich nur noch flach verlaufenden Kennlinie des Meßwiderstands. Der Vorteil dieses Widerstands liegt aber umgekehrt in dem recht moderaten Anstieg für Temperaturen bis hinunter zu einem Kelvin, dies ermöglicht erst eine stabile Regelung.

Abbildung 3.3 zeigt ein Gesamtbild des experimentellen Aufbaus.

⁴ Oxford Instruments Ltd., GB-Oxford.

⁵ Typ RO600, Scientific Instruments Inc., West Palm Beach, Florida, USA.

⁶ Für B = 4 T nur 1,8% bei 1,3 K und 0,5% bei 4,2 K.

⁷ Digitalregler, OMRON Electronics GmbH, 40472 Düsseldorf.

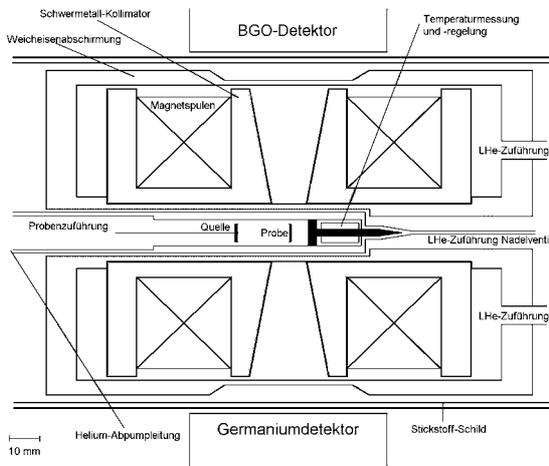


Abbildung 3.3: Experimenteller Aufbau zur Polarisation paramagnetischer Zentren. Der supraleitende Magnet ($B_{\max} = 4,5 \text{ T}$) besteht aus einem Spulenpaar, das von einer Weicheisenabschirmung zur Reduzierung des magnetischen Streufeldes umgeben ist. Ein Schwermetall-Kollimator unterdrückt die γ -Quanten aus der Quelle. Durch die Koinzidenz-anordnung der beiden Detektoren wird gewährleistet, daß nur die γ -Quanten aus der Probe registriert werden. Das axiale Magnetfeld führt die Positronen auf die Probe, die von einem ^4He -Verdampferkryostaten abgekühlt wird ($T_{\min} = 1,3 \text{ K}$).

3.3 γ -Meßtechnik

Für die Messung der Doppler-Verbreiterung der 511 keV -Annihilationslinie benötigt man einen γ -Detektor mit hoher Energieauflösung. Der hier verwendete Germaniumdetektor⁸ mit einer Effizienz von 35% besitzt eine Auflösung von $1,8 \text{ keV}$

⁸ PGC3519, DSG Detector Systems GmbH, 55129 Mainz.

FWHM bei 1332 keV. Damit ergibt sich eine Auflösung von ca. 1,3–1,4 keV für die 511 keV–Linie bei einer Gesamtzählrate von etwa 10 kHz, die der Detektor verarbeiten muß.

Eine Weicheisenkapselung um den supraleitenden Magneten reduziert das magnetische Streufeld am Ort der Detektoren auf weniger als 10^{-4} T. Dadurch ist die Detektorauflösung nur schwach von der Magnetfeldstärke abhängig. Wichtig ist die Tatsache, daß die Auflösung nicht von der Feldpolarität abhängig ist.

Das Meßsignal des Ge–Detektors wird in einem Spektroskopieverstärker⁹ aufgearbeitet und von einem Analog–Digital–Converter¹⁰ (ADC) in ein Digitalspektrum konvertiert, das über eine Vielkanalkarte¹¹ von einem PC ausgelesen wird. Eine etwaige Drift des Detektors oder der anschließenden Elektronik wird von einem Digitalstabilisierer¹² ausgeglichen, der die digitale Position der Annihilationslinie konstant hält. Die stabile Detektorauflösung wird parallel zu jeder Messung durch die Aufzeichnung der 482 keV–Linie des Isotops ¹⁸¹Hf kontrolliert.

Zur Verbesserung des Signal–Untergrund–Verhältnisses ist ein BGO–Szintillator ($2'' \times 2''$) als Koinzidenzdetektor zum Ge–Detektor unter 180° angebracht. Das gemessene Spektrum des Ge–Detektors wird in Abhängigkeit davon, ob der BGO–Detektor zeitgleich ein Signal liefert, nach dem ADC in zwei Spektren aufgeteilt. So enthält das Koinzidenzspektrum die Annihilationsereignisse, die aus der Probe stammen, während sich im nicht koinzidenten Spektrum direkt aus der Quelle stammende γ –Quanten sowie die 482 keV–Kontrolllinie befinden. Die Zahl der detektierten γ –Quanten direkt aus der Quelle oder dem Absorber wird durch einen Schwermetallkollimator im Innern des Magneten, der gleichzeitig als Spulenkörper dient, drastisch reduziert.

Die Koinzidenzzählrate liegt bei 250–300 Ereignissen je Sekunde. Dieser Wert ist vom Probenmaterial abhängig. Proben mit höherer Ordnungszahl reflektieren eine größere Zahl an Positronen, so daß die Zählrate geringer ist.

3.4 Datenauswertung und Darstellung

Die aufgenommenen γ –Spektren, die jeweils mindestens 700.000 (teilweise auch über 1,5 Mio.) Zerstrahlungsereignisse im Koinzidenzspektrum beinhalten, werden durch die Berechnung des *S–Parameters* [Mac83] ausgewertet. Dieser Wert wird häufig als Meßgröße in Doppler–Messungen verwendet. Er ist als Verhältnis der Zählraten eines zentralen Bereichs um den Linienschwerpunkt zur Ge–

⁹ Canberra 2024

¹⁰ Silena 7423

¹¹ Canberra AccuSpec B

¹² Silena 8915

samtzählrate der Linie definiert. Vor der Berechnung erfolgt eine numerische Untergrundkorrektur der Spektren. Abbildung 3.4 verdeutlicht die Definition des S-Parameters.

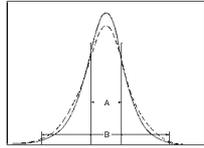


Abbildung 3.4: Definition des S-Parameters. $S = \frac{A}{B}$. Die Wahl der Intervalle ist beliebig, bleibt aber immer für eine Meßreihe fest. Das Intervall A wird so gewählt, daß $S \approx \frac{1}{2}$ ist. Eine schmalere Linie, die einem geringeren, mittleren Elektronenimpuls entspricht, hat mehr Ereignisse im Intervall A. Dadurch ergibt sich ein größerer Wert für S.

Beim S-Parameter handelt es sich nur um eine relative Größe, deren Verlauf erst in Abhängigkeit von einer externen Größe physikalisch relevante Aussagen ermöglicht. So bedeutet ein Ansteigen des S-Parameters definitionsgemäß eine Verringerung der Doppler-Verbreiterung der Annihilationslinie. Dies wiederum zeigt, daß der mittlere Impuls der Elektronen, die mit den Positronen zerstrahlen, geringer wird.

Die in dieser Arbeit dargestellten Meßergebnisse zeigen alle den S-Parameter als Funktion der Proben temperatur für beide Magnetfeldrichtungen. Diese sind in allen Spektren durch die Symbole ▲ für B-Feld parallel zur Positronenpolarisation und ▼ für die umgekehrte Magnetfeldrichtung gekennzeichnet. Dabei ist zu beachten, daß sich die Elektronen in den paramagnetischen Zentren antiparallel zum Magnetfeld einstellen.

Da zwischen den einzelnen Messungen häufig die Meßelektronik verstellt worden ist und dies unmittelbaren Einfluß auf die Detektorauflösung hat, sind die Absolutwerte des S-Parameters bei verschiedenen Messungen in der Regel nicht vergleichbar.

Neben dem S-Parameter der Annihilationslinie wird zur Kontrolle der γ -Meßelektronik auch ein S-Parameter für die 482 keV-Linie des Isotops ^{181}Hf (bzw. für die 595 keV-Linie bei ^{74}As) berechnet. Da deren Linienform sich nicht ändert, kann die Konstanz der Detektorauflösung an diesem S-Parameter beobachtet werden.

Kapitel 4

Messungen an F–Zentren in Alkalihalogeniden

Wie bereits im Abschnitt 2.4.2 beschrieben worden ist, stellen F–Zentren in Alkalihalogeniden eine ideale Kombination aus paramagnetischen Zentren und Positronenhaftstellen dar. Dies macht sie für die Untersuchung mit polarisierten Positronen interessant und führte zu den Vorversuchen 1993 an F–Zentren in KCl [Lau93, Gre94, Dec94, Dec95].

Bei der damaligen Doppler–Messung [Lau93, Gre94] ergaben sich jedoch eine Reihe experimenteller Schwierigkeiten, die dazu führten, daß der Meßeffect recht gering war. Da diese Probleme im Rahmen dieser Arbeit durch apparative Verbesserungen behoben worden sind, soll die Funktionstüchtigkeit der Methode nochmals an F–Zentren in Alkalihalogeniden demonstriert werden.

4.1 F–Zentren in Kaliumchlorid

F–Zentren in Alkalihalogeniden lassen sich leicht durch additive Verfärbung erzeugen (s. Seite 19). Experimentell ist Kaliumchlorid (KCl) gut handhabbar, da es nur schwach hygroskopisch ist.

Die Färbung erfolgt mit einer simplen, selbstgebauten Apparatur. In einem mit Helium gefüllten Edelstahlrohr befindet sich der KCl–Kristall¹, der auf einen Kolben montiert ist, sowie eine mit Kalium gefüllte Glasampulle. Diese Ampulle wird von außen mit dem Kolben zertrümmert, so daß sich der Kristall danach in einer Kalium–Atmosphäre befindet. Das gesamte Edelstahlrohr wird anschließend in einen Ofen gebracht, in dem der Kristall bis nahe an den Schmelzpunkt (770°C

¹ Kristallhandel Kelpin, 69181 Leimen.

[Röm58]) 30 Minuten lang geheizt wird. Danach wird das Rohr außen rasch unter fließendem Wasser abgekühlt. Der Kristall wird nun unter Rotlicht entnommen, frisch gespalten und in die Meßapparatur eingebaut. Eine Behandlung bei normaler Beleuchtung würde zum schnellen Ausbleichen der F-Zentren führen. Die genaue Beschreibung der Färbeapparatur befindet sich in der Diplomarbeit von Petra Schaaff [Sch95].

Als Heiztemperatur wurde hier 750°C verwendet. Damit ergab sich ein Kalium-Dampfdruck von ca. 700 mbar [Mai70]². Daraus läßt sich grob eine F-Zentren-Konzentration von einigen 10^{18} cm^{-3} abschätzen [Sch63]. Die hohe Konzentration ließ sich auch an der tief dunkelblauen Verfärbung des Kristalls erkennen.

Abbildung 4.1 zeigt die Meßergebnisse für diesen KCl-Kristall. Die Messung wurde mit der ^{74}As -Quelle durchgeführt. Deutlich erkennt man den erwarteten und bereits im Vorversuch [Lau93] gemessenen Unterschied zwischen den beiden Magnetfeldrichtungen ($B = \pm 3,7\text{ T}$). Für abnehmende Proben­temperatur steigt die

² Der hohe Dampfdruck war durch eine hinreichende Menge Kalium gewährleistet, die bei der Färbung nicht vollständig verbraucht worden ist. Kaliumreste sind in der Apparatur verblieben.

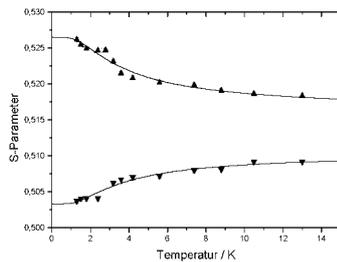


Abbildung 4.1: S-Parameter als Funktion der Proben­temperatur für die beiden Magnetfeld­richtungen bei einem KCl-Kristall mit F-Zentren, gemessen mit ^{74}As bei einem Magnetfeld von $B = \pm 3,7\text{ T}$. Die nach oben zeigenden Dreiecke symbolisieren die bevorzugte Antiparallelstellung von Positron und Elektron, die nach unten zeigenden Dreiecke entsprechen der Parallelstellung. Für jede Magnetfeldrichtung ist das Ergebnis einer Anpassungsrechnung an den Verlauf der Elektronenpolarisation dargestellt. Deutlich erkennt man den Unterschied für die beiden Magnetfeldrichtungen, der für abnehmende Proben­temperatur anwächst. Für $T \rightarrow \infty$ laufen die Werte der beiden Magnetfeldrichtungen nicht zusammen. Eine detaillierte Diskussion dieses Sachverhaltes erfolgt in Kapitel 6.1.

Polarisation der Elektronen in den paramagnetischen Zentren und mithin wächst der Unterschied im S-Parameter. Eine detaillierte Diskussion dieses Ergebnisses erfolgt in Abschnitt 6.1.

Einige Monate später ist derselbe Kristall nochmals untersucht worden (diesmal mit ^{22}Na); dabei ist zum Vergleich auch ein ungefärbter KCl-Kristall gemessen worden. Der gefärbte Kristall war zwar während dieses Zeitraums nicht dem Licht ausgesetzt, dennoch ist eine Veränderung der F-Zentren nicht auszuschließen gewesen. So führt z.B. das Agglomerieren von F-Zentren zur Bildung von sogenannten M-, R- und N-Zentren [Pic65].

Derartige Vorgänge lassen sich jedoch — wenn sie überhaupt stattgefunden haben — nicht an den Meßdaten in Abbildung 4.2 erkennen. Dort zeigt sich ein Verlauf des S-Parameters als Funktion der Temperatur, der dem aus Abb. 4.1 sehr ähnlich ist. Außerdem erkennt man, daß das Färben des Kristalls zu einem Ansteigen des S-Parameters führt, was bedeutet, daß die Positronen wie erwartet in den gebildeten Leerstellen eingefangen werden. Sowohl der gefärbte als auch der ungefärbte Kristall zeigen eine Magnetfeldaufspaltung, die in Kapitel 6.1 bei der detaillierten Diskussion der Meßergebnisse erläutert wird.

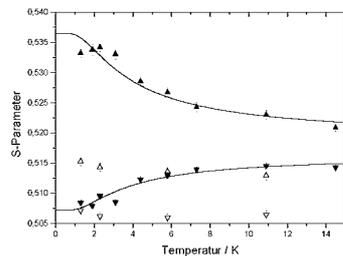


Abbildung 4.2: S-Parameter als Funktion der Proben­temperatur für beide Magnetfeldrichtungen ($B = \pm 3,7 \text{ T}$) für einen KCl-Kristall mit F-Zentren (ausgefüllte Symbole) sowie für einen ungefärbten Referenzkristall (offene Symbole). Der Anstieg des S-Parameters gegenüber der Referenzprobe zeigt das Einfangen der Positronen in den durch die Färbung erzeugten Leerstellen. Die bei beiden Proben auftretende Magnetfeldaufspaltung wird in Kapitel 6.1 erläutert. Die leichte Veränderung des Absolutwertes des S-Parameters gegenüber Abb. 4.1 ist auf eine Verstellung der Meßelektronik zwischen beiden Messungen sowie auf den Wechsel des Isotops (hier ^{22}Na) zurückzuführen.

4.2 F-Zentren in Kaliumbromid

Zur Überprüfung der Funktionstüchtigkeit des Meßverfahrens diene eine unabhängige Messung an F-Zentren in Kaliumbromid (KBr). Die Färbung erfolgte völlig analog zur vorher beschriebenen Färbung von KCl. Da der Schmelzpunkt von KBr (748°C [Röm58]) etwas geringer als der von KCl ist, ist eine Heiztemperatur von 700°C geplant gewesen. Aufgrund eines technischen Problems mit dem Heizofen hat die reale Temperatur allerdings nur bei ca. 650°C gelegen. Der Kalium-Dampfdruck liegt dann bei ca. 200 mbar [Mai70]. Dies führt zu einer F-Zentren-Konzentration von nur etwa 10^{18} cm^{-3} [Sch63]. Der KBr-Kristall³ zeigte dementsprechend eine nicht ganz so tiefdunkle Färbung wie der gefärbte KCl.

Die Meßergebnisse (Positronenquelle: ^{22}Na) für den KBr-Kristall sind in Abb. 4.3 zusammen mit den Anpassungsrechnungen für die Elektronenpolarisation dargestellt. Der Verlauf des S-Parameters mit der Temperatur entspricht nicht ganz so gut wie beim KCl der Abhängigkeit der Elektronenpolarisation. Dennoch erkennt man sehr deutlich den mit sinkender Temperatur anwachsenden Unterschied zwischen den beiden Magnetfeldorientierungen.

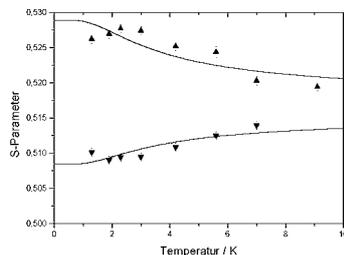


Abbildung 4.3: S-Parameter als Funktion der Proben-Temperatur für die beiden Magnetfeldrichtungen ($B = \pm 3,7 \text{ T}$) bei einem KBr-Kristall mit F-Zentren. Die Rechnung für die Elektronenpolarisation ergibt zwar eine deutlich schlechtere Anpassung als beim KCl, dennoch ist der Magnetfeld- und Temperatureinfluß gut zu erkennen.

Eine Messung an einem ungefärbten KBr-Kristall ist ebenfalls durchgeführt worden. Sie zeigt aber keine signifikante Temperaturabhängigkeit.

³ Kristallhandel Kelpin, 69181 Leimen.

Kapitel 5

Messungen an verschiedenen Materialien

Angesichts der einfachen Identifikation paramagnetischer Zentren am Musterfall F-Zentren in Alkalihalogeniden im vorangegangenen Kapitel bietet es sich an, die Methode der polarisierten Positronen an verschiedenartigen Systemen auf ihre Anwendbarkeit hin zu untersuchen. Dies soll Gegenstand dieses Kapitels sein.

5.1 Einfachleerstellen in Platin

Eine Fragestellung, die in der Festkörperphysik bislang weder experimentell noch theoretisch zweifelsfrei geklärt werden konnte, ist die des möglichen Paramagnetismus von Einfachleerstellen in Metallen. Experimentell scheitern Verfahren wie die Elektronenspin-Resonanz an der fehlenden Sensitivität, die in Metallen aufgrund des Skin-Effektes stark reduziert ist.

Mit der Methode der polarisierten Positronen ist hier ein neuer Zugang zu dieser Fragestellung möglich. Gleichzeitig ist mittlerweile auch ein erster theoretischer Ansatz im Rahmen der lokalen Spindichtenäherung hierzu durchgeführt worden.

Platin (Pt) eignet sich für die hier beschriebenen Untersuchungen besonders, da die Leerstellenbeweglichkeit bei diesem Metall bei Raumtemperatur sehr gering ist. Somit kommt es nicht bereits beim Einbau der Probe in die Meßapparatur, der bei Raumtemperatur stattfindet, zu einem Ausheilen der bei ca. -55°C erzeugten Fehlstellen. Dies findet erst bei etwa $250\text{--}400^{\circ}\text{C}$ statt¹ [Sch68].

¹ Ein weiteres Metall, welches diese Bedingung annähernd erfüllen würde, wäre Gold. Die Erholung, die bereits bei etwa 0°C anfängt, führt zur Bildung von Stapelfehler-Tetraedern [Jai72]. Bei Au wäre deshalb eine Einschleusung der Probe bei ca. -50°C notwendig [Ehr91].

Ein weiterer Vorteil von Platin ist die Tatsache, daß Pt–Proben bei der Messung des S–Parameters als Funktion der Temperatur im thermodynamischen Gleichgewicht einen sehr großen Hub ($\approx 10\%$) zeigen [Sch81].

Einfachleerstellen in Metallen lassen sich leicht durch thermisches Abschrecken erzeugen. Dazu heizt man das Metall auf eine hohe Temperatur. Die dabei im thermodynamischen Gleichgewicht erzeugten Leerstellen werden durch schnelles Abkühlen ($\dot{T} \approx 10^5 \frac{\text{K}}{\text{s}}$) eingefroren.

Als Probe wurde eine $25 \mu\text{m}$ dicke Pt–Folie² (99,95%) verwendet, die als 6 mm breiter und 7 cm langer Streifen an beiden Enden an eine Kupferhalterung gelötet war. Hierüber erfolgte die Stromzuführung zur Heizung der Folie. Die Temperaturbestimmung der Folie erfolgte über die Messung des Spannungsabfalls zwischen zwei Potentialabgriffen, die auf die Folie gepunktet waren. Über den spezifischen Widerstand, dessen Temperaturabhängigkeit genau bekannt ist³, ergab sich dann die Temperatur der Folie.

Um die Temperatur kurz unterhalb des Schmelzpunktes zu erreichen, war ein Strom von 26 A notwendig. Damit wurde die Probe ca. acht Sekunden lang geheizt. Anschließend wurde sie schnell in eine Kältemischung (ca. -55°C) getaucht, die aus mit Trockeneis gekühlter Salzsäure bestand. Die Abschreckvorrichtung war so konstruiert, daß der Aufprall nach dem Eintauchen in die Kältemischung gedämpft wurde, um ein Zerreißen der Pt–Folie zu verhindern [Sch95]. Die Stromzuführung wurde erst beim Eintauchen unterbrochen, damit die Probe nicht schon vorher durch den Luftzug auskühlen konnte.

Die so erzeugte Leerstellenkonzentration kurz unterhalb des Schmelzpunkts kann mit $c_v \approx 3 \cdot 10^{-4}/\text{Atom}$ abgeschätzt werden (siehe Abbildung 5.1). Diesen Wert liefern Messungen mit der Feldionenmikroskopie bei vergleichbaren Abschreckexperimenten.

Für die Messung wurden aus der abgeschreckten Pt–Folie fünf Probenscheibchen geschnitten, die übereinandergelegt als Probe dienten. Mit dieser Dicke war gewährleistet, daß alle Positronen im Platin gestoppt werden.

Neben der abgeschreckten Probe wurde auch eine Pt–Referenzprobe gemessen, die aus dem gleichen Ausgangsmaterial stammte. Um eventuell vorhandene Versetzungen auszuheilen, wurde die Referenzprobe bei 1000°C unter Luft 30 Minuten lang getempert.

Die Ergebnisse der Messungen (mit ^{74}As) für ein Magnetfeld von $B = \pm 3,7 \text{ T}$ sind in Abbildung 5.2 dargestellt. Der deutliche Unterschied zum S–Parameter der Referenzprobe von ca. 6% zeigt, daß die Positronen erwartungsgemäß in den erzeugten Fehlstellen eingefangen worden sind.

² Goodfellow GmbH, 61213 Bad Nauheim.

³ Kurz unterhalb des Schmelzpunktes von Pt (2043 K) beträgt er $\rho=0,59 \mu\Omega\text{m}$ [Bas82].

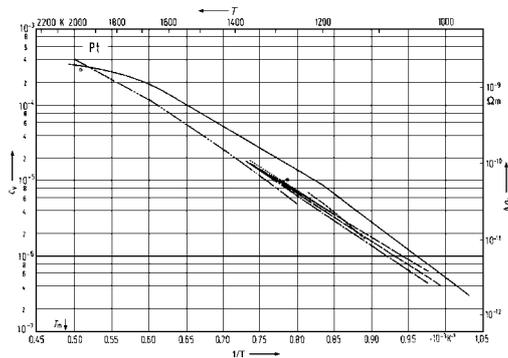


Abbildung 5.1: Leerstellenkonzentration c_v in Platin als Funktion der Temperatur. Dargestellt ist ein experimentell bestimmter Wert (\circ) bei einer Abschrecktemperatur von fast 2000 K. Außerdem sind die Ergebnisse verschiedener Rechnungen sowie ein Meßwert (\bullet) zum spezifischen Widerstands $\Delta\rho_Q$ aufgezeichnet. Deutlich erkennt man ein vermindertes Ansteigen von $\Delta\rho_Q$ für Temperaturen oberhalb von ca. 1600 K. Diagramm nach [Jun91].

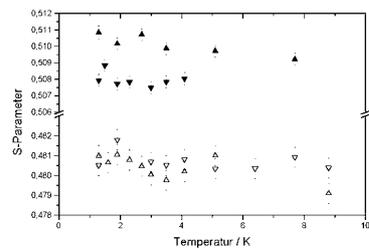


Abbildung 5.2: S-Parameter als Funktion der Probestemperatur für die beiden Magnetfeldrichtungen ($B = \pm 3,7$ T) einer Pt-Probe, die von ≈ 2000 K rasch auf 220 K abgeschreckt worden ist ($\blacktriangle \blacktriangledown$), sowie für eine Referenzprobe ($\triangle \triangledown$). Am deutlich größeren S-Parameter für die abgeschreckte Probe erkennt man das Einfangen der Positronen in den erzeugten Fehlstellen. Es zeigt sich kein klares Anzeichen paramagnetischer Zentren.

Im Gegensatz zu den Messungen in Kapitel 4 verlaufen hier die Meßergebnisse nicht proportional zum Polarisationsgrad von Elektronen in paramagnetischen Zentren. Es ergibt sich demnach kein Anzeichen für ein paramagnetisches Verhalten der erzeugten Leerstellen.

Die Meßergebnisse der abgeschreckten Probe zeigen eine leichte Abhängigkeit von der Magnetfeldrichtung: die Werte für die positive Magnetfeldrichtung sind etwas größer als die für die negative Richtung⁴. Dieser Effekt könnte mit der Bildung von Quasipositronium in größeren Hohlräumen erklärt werden, die durch die hohe Abschrecktemperatur entstanden sein könnten. QPs-Bildung in Hohlräumen von Metallen nach Bestrahlung ist ein bekannter Effekt [Has85].

Da diese Deutung allerdings nicht zweifelsfrei ist und durchaus die Möglichkeit eines schwach paramagnetischen Verhaltens der Fehlstellen in Platin bleibt, sollte eine erneute Messung darüber Aufschluß geben. Eine zwischenzeitlich durchgeführte Messung der Probe nach 15minütigem Anlassen auf 350°C brachte keine neuen Resultate. Es verringerte sich lediglich der Abstand der Meßwerte für die beiden Magnetfeldrichtungen.

Für die neue Messung wurde aber eine geringere Temperatur beim Abschrecken verwendet, um die Bildung von Doppelleerstellen zu verhindern, die bei höheren Temperaturen nicht ausgeschlossen werden können. Dieser Sachverhalt zeigt sich auch am Verlauf des spezifischen Widerstands als Funktion der Temperatur (siehe Abb. 5.1). $\Delta\rho_Q$ wächst ab ca. 1600 K nicht mehr in dem Maße wie bei geringeren Temperaturen.

Deshalb wurde als neue Abschrecktemperatur 1600 K verwendet. Damit ergibt sich eine Fehlstellenkonzentration von $c_v \approx 10^{-4}/\text{Atom}$. Der Abschreckvorgang erfolgte völlig analog zur ersten Probenpräparation. Die benötigten 1600 K erforderten einen Strom von 23 A ($\rho = 0.52 \mu\Omega\text{m}$), der für ca. sechs Sekunden durch die Pt-Folie floß.

Wiederum wurden fünf Scheibchen aus dem Pt-Streifen ausgeschnitten. Diese wurden jetzt mit ^{22}Na als Positronenquelle gemessen. Die Ergebnisse in Abb. 5.3 zeigen diesmal keinen Effekt, der von Magnetfeldrichtung oder Probertemperatur abhängig wäre. Eine Vergleichsmessung an der Referenzprobe zeigt auch hier, daß Fehlstellen gebildet worden sind, die als Haftstellen für die Positronen dienen.

Die Tatsache, daß sich nach diesen Ergebnissen Einfachleerstellen in Platin nicht paramagnetisch verhalten, wird im Kapitel 6.2.1 mit einem ersten theoretischen Ansatz zu diesem Problem im Rahmen einer Spindichtenäherung verglichen.

⁴ Hierbei handelt es sich nicht um eine Magnetfeldabhängigkeit des Germaniumdetektors bzw. dessen Vorverstärkers, da sich die Energieauflösung bei einer Kontrolllinie (595 keV-Linie des verwendeten Isotops ^{74}As) nicht veränderte.

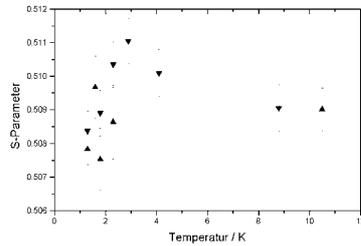


Abbildung 5.3: S-Parameter als Funktion der Probestemperatur für die beiden Magnetfeldrichtungen ($B = \pm 3,7 \text{ T}$) für eine Pt-Probe, die von 1600 K auf 220 K abgeschreckt worden ist. Es zeigt sich keine Temperaturabhängigkeit des S-Parameters, die als Anzeichen paramagnetischer Zentren gedeutet werden könnte. Der Absolutwert des S-Parameters hat gegenüber der vorherigen Messung keine Bedeutung, da zwischenzeitlich die Positronenquelle gewechselt worden ist (hier ^{22}Na).

5.2 Silizium

Die Methode der Positronenannihilation hat im Bereich der Halbleiterphysik eine große Bedeutung. Dies liegt daran, daß die Eigenschaften von Halbleitern sehr stark von Defekten und Verunreinigungen bestimmt werden für die Positronen sensitiv sind.

Eine Reihe von Arbeiten befaßt sich mit der Positronenzerstrahlung in Halbleitern (Übersichten: [Cor95, Wür89a, Abg94]). Dabei werden meistens Positronenlebensdauermessungen durchgeführt, die durch eine Zerlegung der Spektren in mehrere Komponenten eine gewisse Aussage über die Art der Defekte erlauben. Da dies allerdings nur in einem begrenzten Umfang möglich ist [Hau95], stellt sich die Frage, ob durch die Nutzung polarisierter Positronen paramagnetische Zentren detektiert werden können, die auch in Halbleitern bekannte Defekte darstellen [Bou83]. Im Rahmen dieser Arbeit soll dies an Silizium überprüft werden.

5.2.1 Protonenbestrahltes Silizium

Ein geeignetes Verfahren zur Erzeugung von Defekten in Halbleitern ist die Bestrahlung mit hochenergetischen Teilchen. So sind Fehlstellenkonzentrationen deutlich oberhalb der thermischen Gleichgewichtskonzentration möglich.

Aus diesem Grund wurde ein Stück intrinsisches Silizium⁵ am Karlsruher Zyklotron mit 26 MeV-Protonen 30 Minuten lang mit einem Strom von $15 \mu\text{A}$ bestrahlt. Dies entspricht einem Teilchenfluß von $\Phi \approx 10^{17} \text{ cm}^{-2}$. Die Reichweite der Protonen ist mit ca. 3,8 mm [Zie80] deutlich größer als die Probendicke. So ist eine relativ gleichmäßige Schädigung der Probe im für die Positronen sensitiven Bereich (Positronenreichweite $< 1 \text{ mm}$) gewährleistet. Es erfolgte keine nennenswerte Aktivierung des Siliziums, da die Lebensdauern aller möglichen erzeugten Isotope sehr kurz sind. Abb. 5.4 zeigt die Meßergebnisse für diese Probe sowie für eine unbestrahlte Referenzprobe bei einem Magnetfeld von $B = \pm 3,7 \text{ T}$. Die Messung erfolgte mit der ^{74}As -Quelle.

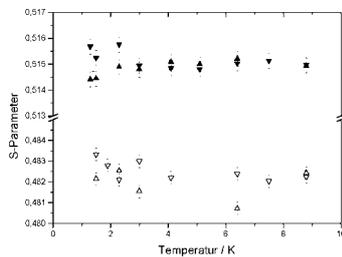


Abbildung 5.4: S-Parameter für protonenbestrahltes (26 MeV p) Silizium ($\blacktriangle \blacktriangledown$) sowie für eine unbestrahlte Referenzprobe ($\triangle \triangledown$) als Funktion der Probentemperatur bei $B = \pm 3,7 \text{ T}$ gemessen mit ^{74}As . Die Vergrößerung des S-Parameters gegenüber der Referenzprobe zeigt die Entstehung von Defekten in der Probe. Es zeigt sich keine klare Magnetfeld- oder Temperaturabhängigkeit, lediglich eine geringe Aufspaltung bei der bestrahlten Probe bei tiefer Probentemperatur.

Man erkennt ein sehr deutliches Ansteigen des S-Parameters (ca. 6%) gegenüber der Referenzprobe. Dies beweist das Einfangen der Positronen in den durch die Bestrahlung erzeugten Defekten. Es zeigt sich kein signifikantes Anzeichen einer Magnetfeld- oder Temperaturabhängigkeit des S-Parameters, das eindeutig auf die Annihilation der Positronen mit paramagnetischen Elektronen zurückzuführen wäre. Allerdings tritt eine geringfügige Aufspaltung des S-Parameters der bestrahlten Probe bei abnehmender Temperatur auf.

Aus diesem Grund wurde anschließend die bestrahlte Probe 30 Minuten lang bei einer Temperatur von 500°C unter Vakuum angelassen. Diese Anlaßtemperatur

⁵ $\rho \approx 2000 \Omega\text{cm}$. Dicke ca. 2 mm.

ergibt sich aus einem Vergleich von Silizium mit ebenfalls protonenbestrahltem Germanium⁶. Die Meßergebnisse sind in Abb. 5.5 dargestellt.

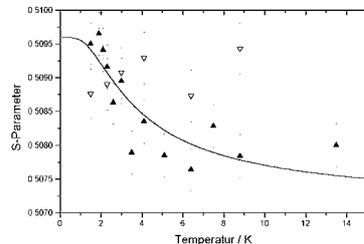


Abbildung 5.5: S-Parameter für die Probe aus Abb. 5.4 nach 30minütigem Anlassen bei 500°C unter Vakuum. Zur besseren Unterscheidung der beiden Magnetfeldrichtungen ($B = \pm 3,7$ T) sind die Werte für $B < 0$ mit offenen Symbolen (∇) dargestellt. Die Messung erfolgte im unmittelbaren Anschluß an die vorherige Messung ebenfalls mit ^{74}As . Für die positive Magnetfeldrichtung (\blacktriangle) ist das Ergebnis einer Anpassungsrechnung an den Verlauf der Elektronenpolarisation (tanh-Funktion) ebenfalls eingezeichnet. Die Werte für die negative Magnetfeldrichtung überschneiden sich mit denen für die positive Richtung. Man erkennt eine sehr schwache Temperaturabhängigkeit auch bei diesen Werten, die allerdings im Rahmen der statistischen Fehler liegt.

Durch das Anlassen auf 500°C ist ein Teil der durch die Bestrahlung erzeugten Defekte ausgeheilt, was man am etwas reduzierten Wert des S-Parameters erkennt, der allerdings immer noch 5% größer als der Wert der Referenzprobe ist. Der S-Parameter folgt gut dem Verlauf der Elektronenpolarisation als Funktion der Proben temperatur, was auf die Existenz paramagnetischer Zentren schließen läßt.

Da die eben beschriebene Bestrahlung mit einer recht hohen Intensität erfolgte, ist anschließend eine Protonenbestrahlung bei geringerer Intensität durchgeführt worden. Gleichzeitig wurde mit 8 MeV auch eine deutlich niedrigere Energie gewählt. Die Reichweite der Protonen (500 μm [Zie80]) entspricht der Dicke

⁶ Messungen der Positronenlebensdauer an protonenbestrahltem Germanium als Funktion der isochronen Anlaßtemperatur zeigen, daß bei Ge bei ca. 200°C eine Ausheilstufe der Strahlenschäden beginnt [Dec94]. An plastisch deformiertem Si und Ge hat sich ergeben, daß die Ausheilvorgänge sehr ähnlich verlaufen [Kra93, Abg94]. Dabei muß man aber bei Si höhere Temperaturen verwenden. Der Ausheilvorgang beginnt dort bei ca. 500°C.

des verwendeten Siliziumwafers⁷. Die Bestrahlung erfolgte am Bonner Isochron-Zyklotron mit einem Strom von 600 nA eine Stunde lang. Dies entspricht einem Teilchenfluß von $\Phi \approx 10^{16} \text{ cm}^{-2}$. Die Probe wurde anschließend 15 Minuten lang bei 300°C an Luft angelassen. Die Meßergebnisse sind in Abb. 5.6 dargestellt.

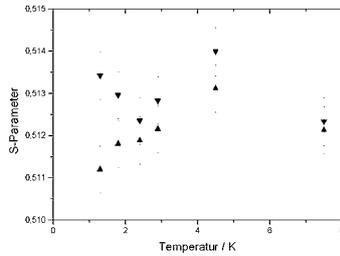


Abbildung 5.6: Intrinsisches Silizium wurde mit 8 MeV-Protonen bei einem Teilchenfluß von $\Phi \approx 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ bestrahlt und anschließend 15 Minuten lang bei 300°C angelassen. Die Messung erfolgte bei einem Magnetfeld von $B = \pm 4, 1 \text{ T}$ mit der ^{22}Na -Quelle. Die Bestrahlung verursacht einen Anstieg des S-Parameters von ca. 3% gegenüber einer Referenzprobe ($S=0,498$). Die Absolutwerte sind nicht mit den vorherigen Messungen vergleichbar. Wenn man die beiden Meßpunkte für 4,5 K unberücksichtigt läßt, ergibt sich eine sehr schwache Aufspaltung für abnehmende Temperatur; dabei zeigt sich jeweils für $B < 0$ der größere S-Parameter.

Die Meßergebnisse zeigen entgegen den Erwartungen kein eindeutiges Zeichen für paramagnetische Zentren; die beobachtbare Aufspaltung ist extrem klein. Diese Messung steht damit im Widerspruch zu ESR-Messungen an protonenbestrahltem Silizium [Bot73]. Dort wurde an (allerdings phosphordotiertem) Si ($\rho = 5 \Omega\text{cm}$) nach einer Bestrahlung mit 9 MeV-Protonen ($\Phi = 10^{17} \text{ cm}^{-2}$) und gleicher Anlaßprozedur ein ESR-Signal detektiert.

5.2.2 Elektronenbestrahltes Silizium

Im Gegensatz zur Protonenbestrahlung von Halbleitern, die zu komplexen Fehlstellenspektren führt, was die Interpretation der Daten erschwert, ermöglicht die

⁷ Intrinsisches Floating-Zone-Material (FZ), $\rho \approx 2000 \Omega\text{cm}$; Hersteller Wacker-Chemie GmbH, 84480 Burghausen.

Elektronenbestrahlung recht definierte Defektzustände [Bou83]. Dies liegt daran, daß der Impuls, den ein Elektron auf ein Gitteratom überträgt, erheblich geringer als bei einem Proton ist. Die benötigten Elektronenenergien liegen im MeV-Bereich.

Für die hier beschriebenen Elektronenbestrahlungen wurde stark phosphordotiertes Silizium⁸ verwendet. Die Leitfähigkeit entspricht einer Phosphordotierung von ca. $5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ [Sze81]. Intrinsisches Silizium scheidet für Elektronenbestrahlungen im Rahmen dieser Arbeit aus, da entstehende Einfachleerstellen bereits unterhalb von Raumtemperatur bei $T \approx 170 \text{ K}$ entweder durch Rekombination mit interstitiell eingebauten Si-Atomen ausheilen⁹ oder sich zu Doppelleerstellen und Leerstellenagglomeraten zusammenlagern [Wür89a, Wür89b]. Ein Vorversuch mit einer Elektronenbestrahlung von intrinsischem Si bei ca. 230 K zeigte anhand der Positronenlebensdauer, daß die erzeugten Einfachleerstellen bereits bei der Bestrahlung ausgeheilt sind. Demzufolge wäre eine Tieftemperaturbestrahlung und ein anschließender Einbau der Probe in die Apparatur bei Flüssig-Stickstoff-Temperatur notwendig, was aber mit dem derzeitigen Aufbau nicht möglich ist.

Im Gegensatz dazu erlaubt P-dotiertes Si die Behandlung der bestrahlten Probe bei Raumtemperatur. Dies liegt daran, daß die entstehenden Leerstellen an den Phosphoratomen gebunden werden. Es bilden sich folglich Phosphor-Leerstellen-Komplexe (P-V), sogenannte E-Zentren, die bis 450 K stabil sind [Mäk92]. Es existieren zwei Ladungszustände: $(\text{P-V})^0$ und $(\text{P-V})^-$.

Es sind zwei Elektronenbestrahlungen an P-dotiertem Si durchgeführt worden:

1. Bestrahlung bei Raumtemperatur mit 3 MeV-Elektronen ($\Phi \approx 6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) am Stuttgarter Pelletron-Beschleuniger¹⁰.
2. Tieftemperaturbestrahlung (10 K) mit Elektronen der Energie 2,5 MeV und einem Fluß $\Phi \approx 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ am Van-de-Graaff-Beschleuniger in Jülich¹¹. Diese Probe wurde nach der Bestrahlung bei 77 K transportiert und für den Einbau in die Apparatur kurz auf Raumtemperatur erwärmt.

Beide Proben wurden nacheinander mit der ^{22}Na -Quelle bei einem Magnetfeld von $B = \pm 3,7 \text{ T}$ untersucht. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.7 dargestellt.

Die Bestrahlungen führen erwartungsgemäß zu einem Anstieg des S-Parameters. Hierbei tritt bei der hohen Dosis der Tieftemperaturbestrahlung ein größerer Anstieg (3% gegenüber 2%) auf. Alle drei Proben zeigen keine Temperaturabhängigkeit der Meßwerte. Demzufolge ergibt sich kein paramagnetisches Signal der erzeugten Defekte. Dieser Sachverhalt wird in Kapitel 6.2 ausführlich diskutiert.

⁸ FZ-Si, $\rho = 0,03 \Omega\text{cm}$, $500 \mu\text{m}$ dünner Wafer; Wacker-Chemie GmbH, 84480 Burghausen.

⁹ Dies ist wahrscheinlich, da die Elektronenbestrahlung hauptsächlich Frenkel-Defekte erzeugt.

¹⁰ Max-Planck-Institut für Metallforschung, 70569 Stuttgart.

¹¹ Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich, 52425 Jülich.

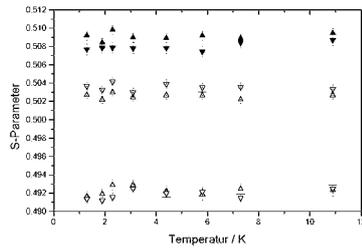


Abbildung 5.7: S-Parameter für zwei P-dotierte Si-Proben, die unterschiedlich mit Elektronen bestrahlt worden sind, sowie für eine unbestrahlte Referenzprobe (offene Symbole Δ und ∇) als Funktion der Probentemperatur. Die hohe Dosis bei der Tieftemperaturbestrahlung (\blacktriangle und \blacktriangledown) von $\Phi \approx 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ führt zu einem größeren Wert des S-Parameters als bei der Raumtemperaturbestrahlung (\triangle und ∇). Es tritt bei allen drei Proben keine Temperaturabhängigkeit des S-Parameters auf. Die geringfügige Magnetfeldaufspaltung der bestrahlten Proben liegt im Rahmen der Fehler.

5.3 Isolatoren SiO_2 , Al_2O_3

Aus dem Bereich der Isolatoren sind Quarzglas (amorphes Siliziumoxid SiO_2) und Saphir (kristallines Aluminiumoxid Al_2O_3) untersucht worden. In der Positronenannihilation ist ein wesentlicher Unterschied zwischen beiden Materialien bekannt. Während sich in SiO_2 Quasipositronium bildet, ist in Al_2O_3 QPs bislang nur in speziellen Modifikationen (pulverartig, Hohlräume nach Bestrahlung) beobachtet worden [Has94].

5.3.1 Quarzglas

Zunächst ist ein Stück amorphes Siliziumoxid untersucht worden, nachdem es am Bonner Zyklotron mit Alpha-Teilchen der Energie 50 MeV bestrahlt worden war. Der Teilchenfluß betrug $\Phi \approx 1,5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$. Gleichzeitig ist auch eine unbestrahlte Referenzprobe ausgemessen worden. Die Ergebnisse (gemessen bei $B = \pm 4,1 \text{ T}$ mit ^{74}As) sind in Abb. 5.8 dargestellt.

Es zeigt sich bei dieser Probe im Gegensatz zu den bislang beschriebenen Meßergebnissen eine deutliche Verringerung des S-Parameters nach der Bestrahlung um

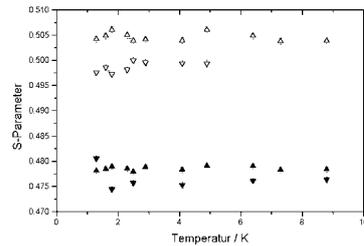


Abbildung 5.8: S-Parameter für α -bestrahltes (volle Symbole) und unbestrahltes (offene Symbole) Quarzglas als Funktion der Probestemperatur bei einem Magnetfeld von $B = \pm 4,1 \text{ T}$, gemessen mit der ^{74}As -Quelle. Es tritt hier im Gegensatz zu den bisherigen Messungen eine deutliche Abnahme des S-Parameters (4,8%) durch die Bestrahlung auf. Die unbestrahlte Referenzprobe zeigt eine recht ausgeprägte Magnetfeldaufspaltung von etwas mehr als 1%, ein klares Indiz für die QPs-Bildung. Diese Aufspaltung zeigt aber für beide Proben keine Temperaturabhängigkeit, die als Anzeichen von paramagnetischen Zentren gedeutet werden könnte. Das Fehlen weiterer Meßpunkte der Referenzprobe (∇) für höhere Temperaturen ist auf ein Problem der Meßelektronik zurückzuführen.

4,8% gegenüber der Referenzprobe. Dies ist aber für SiO_2 ein bekannter Effekt, der in Kapitel 6.2 zusammen mit dem Auftreten von Quasipositronium an dieser Probe näher beschrieben wird. Ein paramagnetisches Verhalten, also ein Anwachsen der Aufspaltung zwischen den beiden Magnetfeldrichtungen für abnehmende Temperatur, kann bei beiden Proben nicht beobachtet werden.

Eine weitere Untersuchung erfolgte an Suprasil 311, das mit einem Excimerlaser UV-bestrahlt worden ist¹², sowie an einer unbestrahlten Referenz. Die Messung des S-Parameters (Abb. 5.9) erfolgte bei $B = \pm 3,7 \text{ T}$ mit ^{22}Na .

Bei dieser Messung zeigt sich ebenfalls eine Abnahme des S-Parameters für die bestrahlte Probe. Diese ist jedoch mit 0,5% deutlich geringer als die Magnetfeldaufspaltung von 1,9%, die auch hier auf die QPs-Bildung zurückzuführen ist. Demzufolge kommt es zu einem Ineinanderliegen der Meßwerte. Auch hier zeigt sich keine systematische Temperaturabhängigkeit der Werte des S-Parameters.

¹² Die Bestrahlung erfolgte beim Hersteller: Heraeus Quarzglas GmbH, 63405 Hanau.

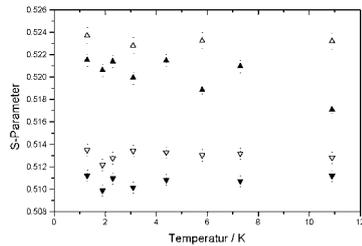


Abbildung 5.9: S-Parameter für UV-bestrahltes Suprasil 311 (ausgefüllte Symbole) sowie für eine unbestrahlte Referenzprobe (offene Symbole). Die Messung, die mit ^{22}Na bei einem Magnetfeld von $B = \pm 3,7$ T durchgeführt wurde, zeigt, daß die UV-Bestrahlung zu einer kleinen Abnahme des S-Parameters führt, die jedoch wesentlich geringer als die Magnetfeldaufspaltung beider Proben als Folge der QPs-Bildung ist. Die Abnahme des S-Parameters der bestrahlten Probe bei pos. Magnetfeld für 5,8 K und 10,9 K ist auf eine Drift in der Meßelektronik zurückzuführen, die sich auch an der ^{181}Hf -Kontrolllinie zeigte.

5.3.2 Saphir

Auch an Saphir¹³ wurden zwei Bestrahlungen durchgeführt. Zunächst erfolgte eine Elektronenbestrahlung¹⁴ mit 2 MeV Elektronen bei Flüssig-Helium-Temperatur. Der Elektronenfluß betrug $\Phi \approx 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$. Die Meßergebnisse bei einem Magnetfeld von $B = \pm 3,7$ T sind in Abb. 5.10 dargestellt.

Anschließend ist eine Bestrahlung am Bonner Zyklotron durchgeführt worden. Dabei wurde ein Saphirstück mit Protonen einer Energie von 8 MeV einem Teilchenfluß von $\Phi \approx 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ ausgesetzt. Diese Probe ist einige Tage später¹⁵ 30 Minuten lang bei 1000°C angelassen worden und anschließend ausgemessen worden; die Ergebnisse sind in Abb. 5.11 dargestellt.

Die Meßergebnisse für beide Bestrahlungen sind im Rahmen der statistischen Fehler gleich: der S-Parameter steigt aufgrund der Bestrahlungen um ca. 2% an. Es zeigt sich bei allen drei Proben keine Temperaturabhängigkeit des S-Parameters. Bei der Referenzprobe zeigt sich eine leichte Magnetfeldabhängigkeit des S-Parameters, während es bei den bestrahlten Proben praktisch zum

¹³ Herkunft: Firma C. Giese KG, 55743 Idar-Oberstein.

¹⁴ Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich, 52425 Jülich.

¹⁵ Eine Störreaktion führte zu einer hohen Aktivität an ^{18}F , die erst abklingen mußte.

Überlapp der Werte für die beiden Richtungen kommt.

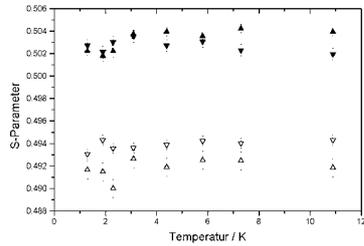


Abbildung 5.10: S-Parameter für einen elektronenbestrahlten Saphir (\blacktriangle \blacktriangledown) und eine unbestrahlte Referenzprobe (helle Symbole) bei einem Magnetfeld von $B = \pm 3,7$ T mit ^{22}Na gemessen. Die Bestrahlung führt zu einem Anwachsen des S-Parameters. Es tritt an beiden Proben keine Temperaturabhängigkeit des S-Parameters auf.

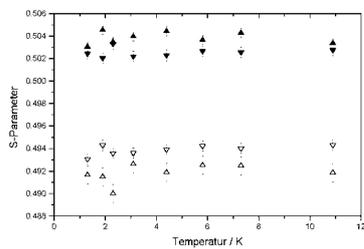


Abbildung 5.11: S-Parameter für einen protonenbestrahlten Saphir nach 30minütigem Anlassen auf 1000°C (ausgefüllte Symbole) sowie für die unbestrahlte Referenzprobe (offene Symbole). Diese Messung erfolgte auch mit ^{22}Na bei $B = \pm 3,7$ T. Wie bei der vorherigen Probe tritt wiederum ein Anwachsen des S-Parameters durch die Bestrahlung auf. Allerdings zeigt sich auch hier keine Temperaturabhängigkeit der Meßwerte.

Da die Referenzprobe keine Magnetfeldaufspaltung zeigen darf (der Grund hierfür wird in Kapitel 6.2 gegeben), muß davon ausgegangen werden, daß es sich hierbei entweder um eine leichte Abhängigkeit der Detektorauflösung von der Magnetfeldrichtung oder um eine unbekannte Veränderung an der Probe handelte. Ein Detektorproblem kann ausgeschlossen werden, da die ^{181}Hf -Kontrolllinie eine stabile Auflösung zeigte.

5.4 Weitere Systeme

Neben den bislang beschriebenen Experimenten sind noch drei weitere Messungen an recht unterschiedlichen Systemen durchgeführt worden, die hier nachfolgend kurz dargestellt werden.

5.4.1 Elektronenbestrahltes Germanium

Ein Germaniumscheibchen ist mit Elektronen einer Energie von 2,5 MeV bei Flüssig-Stickstoff-Temperatur bestrahlt worden¹⁶. Die Elektronendosis betrug $\Phi = 5 \cdot 10^{18} \text{ e}^- \text{ cm}^{-2}$. Eine Referenzprobe stand nicht zur Verfügung. Die Meßergebnisse, die in Abb. 5.12 dargestellt sind, zeigen keine Temperaturabhängigkeit. Eine mögliche Magnetfeldabhängigkeit liegt innerhalb der statistischen Fehler.

¹⁶ Probe von Dr. Roland Würschum, Stuttgart. Die Bestrahlung fand am Dynamitron-Beschleuniger der Universität Stuttgart statt.

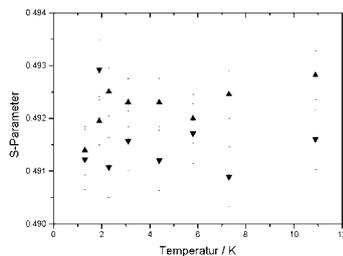


Abbildung 5.12: S-Parameter für elektronenbestrahltes Germanium als Funktion der Temperatur. Es tritt keine Temperaturabhängigkeit auf. Die scheinbare Magnetfeldabhängigkeit liegt im Rahmen der Meßfehler.

5.4.2 Deformiertes Aluminium

Ein Aluminium–Einkristall wurde durch Zug um $\Delta l/l \approx 0,3\%$ plastisch verformt [Hug95]. Der in Abbildung 5.13 dargestellte S–Parameter zeigt keine Magnetfeldabhängigkeit. Die auftretende Temperaturabhängigkeit zeigt nicht das für paramagnetische Zentren typische Verhalten. Stattdessen scheint es sich um den Einfang der Positronen an flachen Störstellen zu handeln, die erst bei sehr tiefen Probestemperaturen Positronenhafte Stellen darstellen. Dieses Verhalten hängt eventuell mit den durch die Verformung erzeugten Versetzungen zusammen.

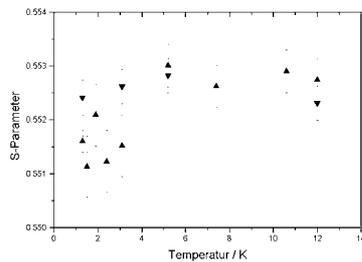


Abbildung 5.13: S–Parameter für plastisch verformtes Aluminium. Die Zugverformung betrug $\Delta l/l \approx 0,3\%$. Es tritt kein Anzeichen paramagnetischer Zentren auf. Der verringerte Wert des S–Parameters bei tiefen Probestemperaturen ist möglicherweise auf den Einfang an Versetzungen zurückzuführen.

5.4.3 Kupfer–Beryllium

Mischt man Kupfer nur geringe Legierungsanteile an Beryllium (50 ppm) bei, so kommt es nicht zu Be–Ausscheidungen wie in technischen Cu/Be–Legierungen, was durch Restwiderstandsmessungen überprüft werden kann. Stattdessen werden die Be–Atome in der Kupfermatrix gelöst. Aufgrund der stark unterschiedlichen Atomradien sollten hier die Be–Fremdatome bei der tiefen Probestemperatur als Positronenhafte Stellen wirken.

Eine Cu/Be–Probe¹⁷ wurde bei 750°C 30 Minuten lang im Vakuum ausgeheizt, um Versetzungen auszuheilen, die im Herstellungsprozeß entstanden sind. Diese

¹⁷ Hergestellt von Herrn Henes am Max–Planck–Institut für Metallforschung, 70569 Stuttgart.

Prozedur wurde auch mit einer Cu–Referenzprobe durchgeführt. Die Meßergebnisse für beide Proben sind in Abb. 5.14 dargestellt.

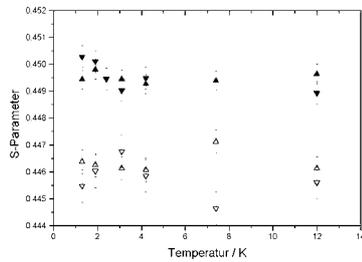


Abbildung 5.14: S–Parameter einer Cu/Be–Probe mit 50 ppm Be (ausgefüllte Symbole) sowie für eine Cu–Referenzprobe (offene Symbole). Der geringfügige Anstieg des S–Parameters von etwa 1% zeigt den Einfang der Positronen an den Be–Atomen. Es tritt kein Anzeichen paramagnetischer Zentren auf.

Es zeigt sich für die Cu/Be–Probe ein um knapp 1% vergrößerter Wert des S–Parameters. Bei den verwendeten, tiefen Meßtemperaturen fungieren folglich die Be–Atome als flache Positronenhaftstellen. Allerdings tritt kein Anzeichen einer Magnetfeld– oder Temperaturabhängigkeit der Meßergebnisse auf.

Kapitel 6

Diskussion der Ergebnisse

In den beiden vorangegangenen Kapiteln sind eine Reihe von Messungen vorgestellt worden. An dieser Stelle soll eine ausführliche Diskussion der Meßergebnisse erfolgen, die mit einer Bewertung der vorgestellten Methode abschließen wird. Da sich die Meßergebnisse in den Kapiteln 4 und 5 qualitativ unterscheiden, erfolgt die Diskussion in zwei eigenen Abschnitten.

6.1 F–Zentren in Alkalihalogeniden

6.1.1 Meßergebnisse an F–Zentren in Alkalihalogeniden

Zunächst sollen die Meßergebnisse an F–Zentren in additiv gefärbten Alkalihalogeniden kurz zusammenfassend dargestellt werden. Es sind drei Proben untersucht worden: 1. KCl mit F–Zentren (zweimal gemessen), 2. KCl ohne F–Zentren und 3. KBr mit F–Zentren.

Bei allen drei Proben zeigt sich bei jeder Meßtemperatur ein deutlicher Unterschied im S–Parameter zwischen den beiden Magnetfeldrichtungen. Dabei tritt der größere Wert immer bei der Magnetfeldrichtung auf, bei der die Antiparallelstellung der Spins von Positron und Elektron bevorzugt eingestellt ist. Bei den gefärbten Kristallen wächst dieser Unterschied mit sinkender Temperatur durch ein Auseinanderlaufen der Meßwerte beider Magnetfeldrichtungen.

Da die Elektronenpolarisation P_{e^-} in den paramagnetischen Zentren durch einen Tangens hyperbolicus als Funktion der Temperatur beschrieben werden kann (siehe Seite 19), liegt es nahe, eine Anpassungsrechnung der Meßwerte an diese funktionale Abhängigkeit durchzuführen. Die sich ergebenden Funktionen sind bereits in den Spektren in Kapitel 4 dargestellt.

In der nachfolgenden Tabelle sind die Ergebnisse dieser Anpassungsrechnung für beide Magnetfeldrichtungen (Δ und ∇) für die drei durchgeführten Messungen dargestellt. Die dafür verwendete Funktion lautet $S = A + B \cdot \tanh(2,48/T[\text{K}])$ mit den Anpassungsparametern A und B . Neben diesen ist auch die Güte χ^2 der jeweiligen Anpassung in der Tabelle dargestellt¹.

Probe	ΔA	B_Δ	B_∇	χ_Δ^2	χ_∇^2
KCl 1. Messung (Abb. 4.1)	0,00573	0,0103	0,0072	3,5	1,9
KCl 2. Messung (Abb. 4.2)	0,00236	0,0177	0,0093	5,0	3,3
KBr (Abb. 4.3)	0,00278	0,0109	0,0067	9,3	3,3

Zunächst soll der Grund für die Aufspaltung des S-Parameters für die beiden Magnetfeldrichtungen, die auch für hohe Temperaturen ($T \rightarrow \infty$) Bestand hat, erläutert werden. Anschließend wird das Anwachsen dieser Aufspaltung für abnehmende Temperatur erklärt.

6.1.2 Bildung von Quasipositronium in den F-Zentren

Die gefärbten Kristalle besaßen eine sehr hohe F-Zentrendichte in der Größenordnung von 10^{18} cm^{-3} . Damit wird der mittlere Abstand zweier Farbzentren zueinander deutlich kleiner als die Diffusionslänge eines thermalisierten Positrons. Folglich wird der überwiegende Teil der Positronen in den F-Zentren eingefangen. Dies ist durch Messungen der Winkelkorrelation an ähnlich stark gefärbten Kristallen nachgewiesen worden [Her73].

Mithin treffen in einem F-Zentrum ein polarisiertes Positron und ein paramagnetisches Elektron aufeinander, die Quasipositronium bilden. Die Bildung von QPs in F-Zentren (unter Verwendung unpolarisierter Teilchen) ist in einer Reihe von Experimenten zweifelsfrei gesichert worden; hierzu zählen das Auftreten einer langen Lebensdauerkomponente [Dup70, Dec94] und einer schmalen Komponente bei der Winkelkorrelation [Her70] sowie Magnetic-quenching-Messungen [Bis71, Her73].

Da im Grenzfall $T \rightarrow \infty$ die Polarisation P_{e^-} der paramagnetischen Elektronen verschwindet, soll in diesem Abschnitt der Fall $P_{e^-} = 0$ betrachtet werden. Die

¹ Der Zahlenwert 2,48 ergibt sich aus der Formel für P_{e^-} durch Einsetzen von $B = \pm 3,7 \text{ T}$ in den Term $\mu_B B / k_B$. Da der Absolutwert des S-Parameters beim Vergleich der verschiedenen Messungen keine physikalische Bedeutung hat (Elektronik umgestellt), ist in der Tabelle nur die Differenz $\Delta A = A_\Delta - A_\nabla$ dargestellt. Sie entspricht der S-Parameter-Differenz beider Magnetfeldrichtungen für $T \rightarrow \infty$. Es zeigt sich, daß die Anpassungsrechnung nur bei der positiven Magnetfeldrichtung des gefärbten KBr-Kristalls nicht ausreichend gut ist; die übrigen Anpassungen sind gut.

Positronenpolarisation ist davon hingegen unabhängig, der Wert $P_{e+} \approx 0,75$ bleibt unverändert².

Unter dem Einfluß des statischen, äußeren Magnetfelds kommt es zur Bildung der in Abschnitt 2.3.2 beschriebenen Pseudo-Ps-Zustände mit den dort angegebenen Bildungswahrscheinlichkeiten. Für $P_{e+} = 0,75$ und $P_{e-} = 0$ ergeben sich die nachfolgenden Zahlenwerte:

Spinzustand	Berechnete Bildungswahrscheinlichkeiten für	
	$B = +3,7 \text{ T}$	$B = -3,7 \text{ T}$
$ \Phi_T^B\rangle$	11,6%	38,4%
$ \Phi_S^B\rangle$	38,4%	11,6%
$ \uparrow\uparrow\rangle$	43,8%	43,8%
$ \downarrow\downarrow\rangle$	6,2%	6,2%

Die Triplettzustände mit $m = \pm 1$ sind vom Magnetfeld unbeeinflusst, ihre Summe ist immer 50% bei unpolarisierten Elektronen. Dies ist auch anschaulich sofort einsichtig, da die Wahrscheinlichkeit, daß ein unpolarisiertes Elektron gerade die gleiche Spinorientierung wie ein gegebenes Positron besitzt, $\frac{1}{2}$ ist. Diese Zustände können nicht in zwei γ -Quanten selbsterstrahlen.

Die beiden ($m = 0$)-Zustände sind hingegen für die Magnetfeldabhängigkeit des S-Parameters verantwortlich. Hierbei unterscheiden sich die Bildungswahrscheinlichkeiten um mehr als den Faktor 3. Diese verhalten sich bei Umpolung des Magnetfelds symmetrisch.

Die Ursache für den im S-Parameter meßbaren Unterschied nach Umpolen des Magnetfelds liegt in der Tatsache, daß sich $|\Phi_T^B\rangle$ und $|\Phi_S^B\rangle$ in ihren Zerstrahlungseigenschaften unterscheiden. Auf Seite 16 sind die Zerstrahlungsraten der beiden Zustände für $B = \pm 3,7 \text{ T}$ angegeben: $\Gamma_S^B \approx 6,9 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$ und $\Gamma_T^B \approx 1,2 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$. Neben diesen Selbsterstrahlungsraten muß aber noch die Pick-off-Rate Γ_{po} berücksichtigt werden, die für beide Zustände gleich groß ist. Da Γ_T^B kleiner als Γ_S^B ist, ist der Einfluß der Pick-off-Rate beim Pseudo-Triplett-Zustand größer. Pick-off-Zerstrahlungen erfolgen mit Elektronen der umgebenden Atome, die im Mittel einen größeren Impuls als ein F-Zentrums-Elektron besitzen. Dies führt zu einer Verringerung des S-Parameters bei $|\Phi_T^B\rangle$ gegenüber $|\Phi_S^B\rangle$.

Wie die Tabelle zeigt, ist die Bildungswahrscheinlichkeit von $|\Phi_T^B\rangle$ für $B = -3,7 \text{ T}$ größer als die für $|\Phi_S^B\rangle$. Demzufolge ergibt sich in Übereinstimmung mit dem Experiment ein kleinerer Wert für den S-Parameter als bei $B > 0$, wo sich die Verhältnisse genau umkehren.

Damit ist die Magnetfeldaufspaltung des S-Parameters im Falle der Bildung von Quasipositronium erklärt. Eine Quantifizierung dieses Effektes ist nicht möglich,

² Die Werte für P_{e+} in Kap. 3 sind nur grob abgeschätzt gewesen.

da hierzu selbst bei genauer Kenntnis von Γ_{p0} und dem Parameter κ , der den Unterschied der räumlichen Ausdehnung des QPs gegenüber dem Vakuum-Ps angibt, der quantitative Einfluß auf den S-Parameter unbekannt ist.

Der Effekt tritt nicht nur in den F-Zentren auf. Der ungefärbte KCl und auch zwei weitere Proben (mehr dazu im Kapitel 6.2) zeigen ebenfalls dieses Verhalten. Für ungefärbtes KCl ist die Bildung eines positroniumähnlichen Zustandes experimentell verifiziert [Her72, Are76, Dup79].

6.1.3 Detektierung paramagnetischer Zentren

Um das Anwachsen der Aufspaltung im S-Parameter bei abnehmender Proben-temperatur an den gefärbten Kristallen zu verstehen, muß der zusätzliche Effekt, den die Polarisation der Elektronen in den paramagnetischen Zentren bewirkt, berücksichtigt werden.

Die Polarisation der paramagnetischen Zentren im externen Magnetfeld ergibt sich zu $P_{e^-} = \tanh(\frac{\mu_B B}{k_B T}) = \pm \tanh(2,48/T[\text{K}])$. Setzt man diesen Term in die Bildungswahrscheinlichkeiten der verschiedenen Pseudo-Ps-Zustände ein, so erhält man nachfolgende Werte³:

Spinzustand	Berechnete Bildungswahrscheinlichkeiten für	
	$B = +3,7 \text{ T}$	$B = -3,7 \text{ T}$
$ \Phi_T^B\rangle$	$11,6\% + 1,0\% \cdot \tanh(T)$	$38,4\% - 36,6\% \cdot \tanh(T)$
$ \Phi_S^B\rangle$	$38,4\% + 36,6\% \cdot \tanh(T)$	$11,6\% - 1,0\% \cdot \tanh(T)$
$ \uparrow\uparrow\rangle$	$43,8\% - 43,8\% \cdot \tanh(T)$	$43,8\% + 43,8\% \cdot \tanh(T)$
$ \downarrow\downarrow\rangle$	$6,2\% + 6,2\% \cdot \tanh(T)$	$6,2\% - 6,2\% \cdot \tanh(T)$

Da der Wertebereich des Tangens hyperbolicus zwischen 0 und 1 liegt⁴ (0 für $T \rightarrow \infty$ und 1 für $T \rightarrow 0$), kann man an der Tabelle leicht den Variationsbereich der Bildungswahrscheinlichkeiten als Funktion der Temperatur erkennen.

Zunächst soll der Fall $B > 0$ betrachtet werden. Während die Bildungswahrscheinlichkeit für $|\Phi_T^B\rangle$ nur unwesentlich verändert wird, ist der Einfluß der wachsenden Elektronenpolarisation auf $|\Phi_S^B\rangle$ sowie auf die ($m = \pm 1$)-Zustände groß.

Für abnehmende Temperatur wird mit dem Pseudo-Singulett ein Zustand stärker erzeugt, der aufgrund seiner hohen Selbstzerstrahlungsrates Γ_S^B überwiegend mit kleinem Elektronenimpuls zerstrahlt, folglich wächst der S-Parameter. Dieser Anstieg wird durch das Verhalten der Bildungswahrscheinlichkeiten der ($m = \pm 1$)-Zustände unterstützt. Hier ist nur die Summe beider Zustände von Belang, die

³ $\tanh(T)$ steht abkürzend für $\tanh(2,48/T[\text{K}])$.

⁴ Der apparativ zugängliche Bereich für P_{e^-} liegt zwischen 0,16 ($T=15 \text{ K}$) und 0,96 ($T=1,3 \text{ K}$).

mit abnehmender Temperatur von 50% auf 12% abfällt. Da diese Zustände durch Pick-off-Zerstrahlungen den S-Parameter absenken, führt die Reduktion ihrer Bildung zu einem zusätzlichen Anstieg des S-Parameters für $B > 0$ bei abnehmender Probestemperatur.

Für die umgekehrte Magnetfeldrichtung ($B < 0$) ist das Verhalten der Bildungswahrscheinlichkeiten des Pseudo-Triplett-Zustands und der ($m = \pm 1$)-Zustände wichtig. $|\Phi_T^B\rangle$ wird mit abnehmender Temperatur deutlich weniger gebildet (Abnahme von 38% auf 2%). Dies verringert die Anzahl der Pick-off-Zerstrahlungen. Dieser Effekt wird aber durch die ($m = \pm 1$)-Zustände überkompensiert, deren Bildungswahrscheinlichkeit (auch hier ist nur die Summe von phys. Relevanz) stark von 50% auf 88% ansteigt. Da diese Zustände ausschließlich über Pick-off zerstrahlen, der Pseudo-Triplett-Zustand hingegen nur zu einem gewissen Anteil über Pick-off zerstrahlt, führt die Veränderung in den Bildungswahrscheinlichkeiten insgesamt zu einem Ansteigen der Anzahl der Pick-off-Zerstrahlungen. Dies führt dann zu einer Abnahme des S-Parameters.

Da für $B > 0$ der Anstieg der $|\Phi_S^B\rangle$ -Bildungswahrscheinlichkeit und der Abfall der ($m = \pm 1$)-Bildungswahrscheinlichkeit beide zu einem Anstieg des S-Parameters für abnehmende Temperatur führen und sich damit unterstützen, ergibt sich eine größere Variation des S-Parameters als für $B < 0$. Hier wirken diese Prozesse entgegengerichtet auf den S-Parameter und schwächen sich dadurch ab. Dieser Sachverhalt stimmt sehr schön mit den Ergebnissen der Anpassungsrechnungen (Seite 50) für alle drei Messungen überein, bei denen der Hub für die positive Magnetfeldrichtung etwa einen Faktor 1,5 größer als für die negative Richtung ist.

An den Meßergebnissen zeigt sich folglich auf eindrucksvolle Weise, daß in den F-Zentren von Alkalihalogeniden Quasipositronium mit den F-Zentrums-Elektro-
nen gebildet wird. Das paramagnetische Verhalten der Zentren kann mit polarisierten Positronen nachgewiesen werden.

6.2 Sonstige untersuchte Systeme

Vergleicht man die Meßergebnisse an den F-Zentren in KCl und KBr mit den Ergebnissen an den übrigen untersuchten Systemen (Kap. 5), so fällt ein wichtiger qualitativer Unterschied auf: Abgesehen von einer Messung an protonenbestrahltem Silizium zeigen die Meßergebnisse keine klaren Anzeichen von paramagnetischen Defekten in den untersuchten Proben im Gegensatz zu den Messungen an F-Zentren. Dieser Sachverhalt soll hier detailliert analysiert werden.

6.2.1 Platin

Die beiden an diesem Material durchgeführten Messungen (Abb. 5.2 und 5.3) zeigen nicht den typischen Verlauf des S-Parameters, der auf ein paramagnetisches Verhalten der erzeugten Einfachleerstellen in Platin schließen lassen würde.

Seit kurzem ist es möglich, dieses Ergebnis mit einer theoretischen Rechnung im Rahmen der lokalen Spindichtenäherung und der Linearen-Muffin-Tin-Orbitaltheorie zu vergleichen. Die so erzielten Ergebnisse sollen hier kurz skizziert werden [Bör95, Dec96].

Bei dieser Methode wird das magnetische Moment pro Pt-Atom als Funktion der Gitterkonstante des kubisch-flächenzentrierten Platins berechnet. Dies geschieht zunächst für das ideale Kristallgitter. Anschließend werden Fehlstellen in das Gitter eingebaut. Dazu wird mit einer 32-Atom-Superzelle (31 Atome, eine Fehlstelle) gerechnet, die beliebig oft aneinandergesetzt wird. Das Ergebnis dieser Rechnungen zeigt Abb. 6.1.

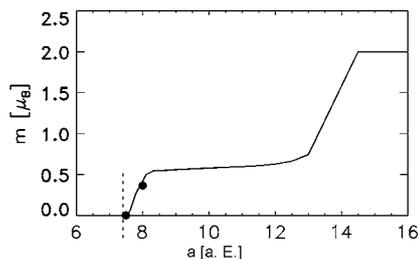


Abbildung 6.1: Ergebnisse der Rechnung des magnetischen Moments als Funktion der Pt-Gitterkonstante in atomaren Einheiten. Die durchgezogene Kurve ist für fcc-Pt ohne Fehlstelle gerechnet. Der Anstieg des magnetischen Moments auf $2\mu_B$ für große Gitterkonstanten entspricht dem Grenzfall freier Pt-Atome. Die beiden Punkte, die mit einer Superzellenrechnung (31 Pt-Atome, eine Fehlstelle) berechnet worden sind, stellen den Wert des magnetischen Moments mit Leerstellen für zwei verschiedene Gitterkonstanten dar. Da sie recht genau mit den Werten für den idealen Kristall übereinstimmen, kann man im Rahmen dieser Rechnung sagen, daß Einfachleerstellen in Pt nicht paramagnetisch sind. Ebenfalls dargestellt ist der experimentelle Wert der Gitterkonstante für Pt: $3,92 \text{ \AA} = 7,41$ atomare Einheiten (gestrichelte Linie).

Da die Werte des magnetischen Moments bei Pt mit Leerstellen recht genau denen für den idealen Kristall entsprechen, kann man sagen, daß der Einbau der Leerstellen nicht dazu führt, daß Platin dadurch sein magnetisches Verhalten ändert. Dies läßt den Schluß zu, daß diese Rechnung das experimentelle Ergebnis bestätigt, wonach sich Einfach Leerstellen in Pt nicht paramagnetisch verhalten.

Ein weiteres Ergebnis dieser Rechnung ist, daß Pt bei etwas vergrößerter Gitterkonstante ferromagnetisch wird. Der geringe Abstand bis zum Ferromagnetismus wird durch den Einbau der Leerstellen allerdings nicht geringer.

Im Rahmen dieser Rechnung ist die Umgebung der Leerstelle nicht relaxiert worden. Der daraus resultierende Einfluß ist nicht bekannt. Das magnetische Moment in der Nähe der Fehlstelle ist größer als im restlichen Kristall. Von den stark lokalisierten d-Elektronen befinden sich im Mittel 0,26 in der Leerstelle. Insgesamt sind im Mittel 1,14 Elektronen in der Leerstelle.

6.2.2 Silizium

Im Rahmen dieser Arbeit sind drei Messungen an protonenbestrahltem Silizium und zwei Messungen an elektronenbestrahltem Si durchgeführt worden, deren Ergebnisse nachfolgend kurz zusammengefaßt werden:

1. Bestrahlung mit 26 MeV Protonen, $\Phi \approx 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ (Abb. 5.4). Es ergibt sich keine systematische Temperaturabhängigkeit der Meßwerte, die deutlich gegenüber der Referenzprobe angestiegen sind.
2. Probe 1 nach 30minütigem Anlassen auf 500°C (Abb. 5.5). Die Meßwerte zeigen eine Temperaturabhängigkeit, die dem Verlauf der Elektronenpolarisation gut folgt. Der Hub der Kurve beträgt etwa 0,5%.
3. Bestrahlung mit 8 MeV Protonen ($\Phi \approx 10^{16} \text{ cm}^{-2}$) mit anschließendem Anlassen bei 300°C für 15 Minuten (Abb. 5.6). Es tritt eine sehr kleine Magnetfeldaufspaltung im Rahmen der statistischen Fehler auf, die für abnehmende Temperatur leicht anwächst.
4. Elektronenbestrahlung, $\Phi \approx 6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ (Abb. 5.7). Es kommt zu einem Anstieg des S-Parameters im Vergleich zur Referenzprobe. Es zeigt sich keine Temperaturabhängigkeit des S-Parameters. Eine geringfügige Magnetfeldabhängigkeit der Meßwerte liegt im Rahmen der statistischen Fehler.
5. Tieftemperatur-Elektronenbestrahlung, $\Phi \approx 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-2}$ (Abb. 5.7). Die hohe Dosis führt zu einem weiteren Ansteigen des S-Parameters gegenüber der Referenzprobe. Es tritt keine Temperaturabhängigkeit auf. Auch hier tritt eine sehr kleine Magnetfeldaufspaltung auf, die kleiner als der statistische Fehler ist.

6.2.2.1 Paramagnetische Zentren nach Protonenbestrahlung

Die Ergebnisse für die beiden protonenbestrahlten Proben können relativ einfach beschrieben werden. Durch die massive Ionenbestrahlung sind sehr komplexe Defektspektren erzeugt worden. Diese führen zu einer großen Anzahl von verschiedenartigen Positronenhaftstellen. Aufgrund der tiefen Meßtemperatur ist die kinetische Energie der Positronen gegenüber gewöhnlichen Messungen stark reduziert, so daß alle Arten von Haftstellen auch tatsächlich von Positronen besetzt werden. Dadurch wird das möglicherweise paramagnetische Verhalten von Einfachleerstellen überdeckt.

Durch das thermische Anlassen wird ein Teil der erzeugten Defekte soweit beweglich, daß sie ausheilen können. Folglich wird die Anzahl an verschiedenen Defekten geringer und es besteht eventuell eine größere Wahrscheinlichkeit, daß ein Positron auf eine paramagnetische Haftstelle trifft.

Der beobachtete Hub im S-Parameter für die erste Probe nach dem Anlassen ist mit ca. 0,5% recht groß. Die Tatsache, daß die Meßwerte für F-Zentren in Alkali-halogeniden eine wesentlich deutlichere Temperaturabhängigkeit zeigen (der Hub bei der ersten KCl-Messung war viermal so groß), ist aufgrund der sehr großen Fehlstellendichte, die in diesen Proben vorhanden war, nicht verwunderlich.

Bei der zweiten Protonenbestrahlung (8 MeV) ist sehr wahrscheinlich ein noch komplexeres Fehlstellenspektrum entstanden, da die Protonen die größte Schädigung in etwa in der Tiefe der Probe erzeugt haben, die der Reichweite der meisten Positronen aus dem ^{22}Na -Spektrum entspricht. Bei der ersten Bestrahlung hingegen war die Energie der Protonen (26 MeV) so hoch, daß es im wesentlichen zum sogenannten elektronischen Bremsen kam, das kaum massive Strahlenschäden verursacht. Die Reichweite der Protonen war etwa achtmal so groß wie bei der zweiten Bestrahlung⁵.

6.2.2.2 Ergebnisse der Elektronenbestrahlungen

Bei den beiden Elektronenbestrahlungen an phosphordotiertem Silizium tritt keinerlei Temperaturabhängigkeit der Meßergebnisse auf, die als Anzeichen paramagnetischer Zentren gedeutet werden könnte. Es stellt sich die Frage, ob überhaupt paramagnetische Zentren in diesen Proben vorhanden waren.

Aus ESR-Messungen ist bekannt, daß E-Zentren, darunter versteht man Phosphor-Leerstellen-Komplexe (P-V), in P-dotiertem FZ-Silizium die dominierenden Defekte nach Elektronenbestrahlung darstellen. Dabei tritt das E-Zentrum

⁵ Die Reichweite der Positronen aus dem ^{74}As -Spektrum ist hingegen nur um einen Faktor zwei größer als die von ^{22}Na .

nicht im Anfangsstadium der Bestrahlung auf, sondern erst nachdem der Elektronenfluß so groß geworden ist, daß das Fermi-niveau durch die in diesem Falle kompensierend wirkende Bestrahlung ungefähr in den Bereich $(E_c - 0,4)$ eV abgefallen ist⁶ und so das Akzeptorniveau ionisiert wird: $(P-V)^0$. Befindet sich das Niveau hingegen im negativen Ladungszustand, so beobachtet man kein paramagnetisches Verhalten aufgrund der geraden Anzahl der Elektronen [Wat64].

Das hier verwendete Material ist stark P-dotiert ($\approx 5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) gewesen. Damit lag das Fermi-niveau weit über dem Ionisationsniveau für den Übergang negativ nach neutral (-/0). Die erste und höchstwahrscheinlich auch die zweite Bestrahlung besaßen eine zu geringe Dosis, um den neutralen Ladungszustand des Defekts zu erreichen. Höhere Elektronendosen waren experimentell nicht verfügbar. Bei der Betrachtung muß berücksichtigt werden, daß aufgrund der tiefen Meßtemperatur eine Erhöhung des Fermi-niveaus auftritt. Dieses Verhalten zeigt sich auch in Messungen der Positronenlebensdauer an diesem System [Mäk92]. Diese ergeben einen Anstieg der Lebensdauer (dies entspricht der Ionisation des Niveaus) entweder durch höhere Bestrahlungsdosen oder durch eine höhere Meßtemperatur.

Die bei beiden Elektronenbestrahlungen auftretende, sehr schwache Magnetfeldabhängigkeit ist zu gering, um als Anzeichen für die Bildung von Quasipositronium gedeutet werden zu können. Die Unterschiede im S-Parameter liegen mit 0,2% (zum Vergleich: erste KCl-Messung 1,2% für $T \rightarrow \infty$) im Bereich der statistischen Fehler.

Zur Klärung der Frage, ob in diesen Proben Quasipositronium gebildet worden ist, wurde die bei 10 K elektronenbestrahlte Probe mit dem Verfahren der Positronenspin-Depolarisation [Str91] untersucht. Hierbei wird ein möglicher Unterschied in der Doppler-Verbreiterung der Annihilationslinie beim Umpolen eines externen Magnetfeldes als Funktion der Magnetfeldstärke gemessen. Dabei zeigte sich kein Anzeichen der Bildung von Quasipositronium an dieser Probe [Geß96].

6.2.3 Isolatoren

Bei den untersuchten Isolatoren SiO_2 und Al_2O_3 sind jeweils zwei Messungen nach unterschiedlichen Bestrahlungen durchgeführt worden. Bei diesen Messungen zeigte sich keinerlei signifikante Temperaturabhängigkeit, die auf die Erzeugung paramagnetischer Zentren in diesen Proben hindeuten würde. Aus diesem Grund sind hier zur weiteren Diskussion der Meßergebnisse nur die Mittelwerte der S-Parameter in der nachfolgenden Tabelle zusammengestellt:

⁶ E_c : Unterkante des Leitungsbandes.

Probe	\overline{S}_Δ	\overline{S}_∇
SiO ₂ α -bestrahlt (Abb. 5.8)	0,4785 (4)	0,4764 (21)
SiO ₂ Referenzprobe (Abb. 5.8)	0,5046 (9)	0,4987 (10)
Suprasil311 UV-bestrahlt (Abb. 5.9)	0,5202 (16)	0,5107 (5)
Suprasil311 Referenz (Abb. 5.9)	0,5232 (4)	0,5130 (4)
Al ₂ O ₃ e ⁻ -bestrahlt (Abb. 5.10)	0,5032 (10)	0,5027 (5)
Al ₂ O ₃ p-bestrahlt (Abb. 5.11)	0,5038 (6)	0,5025 (4)
Al ₂ O ₃ Referenz (Abb. 5.10, 5.11)	0,4918 (9)	0,4939 (4)

6.2.3.1 Quarzglas

Zunächst erkennt man den interessanten Effekt, daß beide SiO₂-Proben nach der Bestrahlung einen geringeren Wert des S-Parameters als die jeweiligen Referenzproben aufweisen. Dieses Verhalten, das völlig im Gegensatz zu allen anderen untersuchten Proben steht, ist jedoch für SiO₂ ein bekannter Effekt, der auch schon an neutronenbestrahltem Quarzglas beobachtet worden ist. Dort zeigt sich eine Verringerung der Positronenlebensdauer und eine Verbreiterung der Winkelkorrelationskurve nach Bestrahlung [Has95]; dies sind gleichbedeutende Effekte.

Ursache für dieses Phänomen ist die weitgehende Unterdrückung der Zerstrahlung des Positrons aus dem Quasipositronium. QPs kann sich aufgrund der recht offenen Struktur in amorphem SiO₂ leicht bilden. Die Reduktion der QPs-Zerstrahlung ist darauf zurückzuführen, daß als Folge der Bestrahlung in der amorphen Struktur reaktive OH⁻-Bindungen entstehen (Wasserstoff tritt als Hauptverunreinigung in vielen Quarzglassorten auf), die das QPs-Atom ionisieren. Es kommt dann zu einer Zerstrahlung des Positrons mit einem Elektron der Umgebung, was aufgrund des größeren Impulses gegenüber dem QPs-Elektron zu einer Verringerung des S-Parameters führt.

Die Unterdrückung der QPs-Bildung zeigt sich sehr schön an der verringerten Magnetfeldaufspaltung für die α -bestrahlte Probe. Dort beträgt die Aufspaltung nur noch 0,4% gegenüber 1,2% an der Referenzprobe. Der Wert von 1,2% ist genauso groß wie die Aufspaltung für $T \rightarrow \infty$ bei der ersten KCl-Messung.

Das Ergebnis für das UV-bestrahlte Suprasil kann mit einer Messung an laserbestrahlten SiO₂-Schichten auf Si-Substrat verglichen werden [Fuj95]. Dort tritt nach der Laserbestrahlung (UV-Licht) ebenfalls eine Verringerung des S-Parameters gegenüber der unbestrahlten Schicht auf. Der Effekt ist dort mit 5% sehr deutlich. Bei der hier durchgeführten Messung beträgt der Hub hingegen nur 0,5%. Dies ist auf die hohe Transmission des verwendeten Suprasil 311 bis in den tiefen UV-Bereich zurückzuführen [Her94], was folglich nur zu einer schwachen Schädigung führt.

Die eben beschriebene chemische Reaktion des QPs-Atoms mit den reaktiven OH^- -Gruppen könnte auch die Tatsache erklären, warum sich in diesen Messungen keine Anzeichen paramagnetischer Zentren andeuten im Gegensatz zu ESR-Messungen (z.B. [Tsa88]). Trifft ein Positron auf einen Hohlraum in der amorphen Struktur, so kommt es mit hoher Wahrscheinlichkeit zur Bildung eines QPs-Atoms. Dieser Zustand wird aber von den reaktiven OH^- -Gruppen, die sich bevorzugt an der inneren Oberfläche von Hohlräumen aufhalten, zerstört. Dadurch geht die Polarisation der Positronen verloren, und die paramagnetischen Zentren können nicht mehr detektiert werden.

6.2.3.2 Saphir

Beide Messungen an bestrahltem Saphir zeigen ein Ansteigen des S-Parameters um ca. 2% gegenüber der Referenzprobe, was ein klares Indiz für das Einfangen der Positronen in den induzierten Fehlstellen ist. Eine Temperaturabhängigkeit des S-Parameters tritt weder an den beiden bestrahlten Proben noch an der Referenzprobe auf. Die bestrahlten Proben zeigen praktisch keine Magnetfeldaufspaltung. Bei der Referenzmessung hingegen zeigt sich unerwarteterweise eine Magnetfeldaufspaltung von ca. 0,4%.

Da die Bildung von Quasipositronium in unbehandeltem Al_2O_3 trotz zahlreicher Messungen noch nie beobachtet worden ist, sollte diese Magnetfeldaufspaltung, zumal sie recht klein ist, nicht als Signal einer Bildung von QPs gedeutet werden. Experimentelle Gründe, die diese Aufspaltung erklären, waren bereits in Kapitel 5.3 genannt.

Die Tatsache, daß sich in den bestrahlten Proben keine Magnetfeldabhängigkeit des S-Parameters zeigt (für das protonenbestrahlte Al_2O_3 ergibt sich ein winziger Effekt), kann darauf zurückgeführt werden, daß die Bestrahlungsdosen nicht hoch genug waren (höhere Dosen waren experimentell leider nicht verfügbar), um ausreichend große Hohlräume für QPs zu bilden. Untersuchungen an neutronenbestrahltem Al_2O_3 , die die Bildung von QPs zeigen, wurden mit einem erheblich größeren Teilchenfluß durchgeführt [Has94].

6.3 Polarisierte Positronen: Geeignete Sonden zur Detektion paramagnetischer Zentren?

In diesem Kapitel soll die abschließende Bewertung der Anwendbarkeit polarisierter Positronen zur Untersuchung von paramagnetischen Zentren erfolgen. In der Darstellung der Meßergebnisse sowie in ihrer Diskussion in den beiden vorherigen Abschnitten zeigte sich ein qualitativer Unterschied zwischen den Messungen an

den F-Zentren in Alkalihalogeniden, die ein sehr deutliches Signal paramagnetischer Zentren ergaben, und den übrigen untersuchten Systemen, die kein klares paramagnetisches Signal lieferten.

Es stellt sich folglich die Frage, worin der Unterschied zwischen den F-Zentren und den sonstigen untersuchten Fehlstellen besteht, der derartige Auswirkungen auf die Positronenannihilation besitzt. Ein Versuch der Beantwortung dieser Frage soll nachfolgend durchgeführt werden.

6.3.1 Erklärung für das unterschiedliche Verhalten

Zunächst müssen mögliche Ursachen für das Nichtauftreten eines paramagnetischen Effektes in den meisten Proben diskutiert werden, die mit dem Prozeß der Thermalisierung und Diffusion der Positronen im Festkörper zusammenhängen.

Eine mögliche Erklärung könnte der Verlust der Spin-Vorzugsrichtung der Positronen vor dem Einfang in eine Haftstelle sein. Diese Variante, die schon in Kapitel 2.2 ausgeschlossen wurde, kann aufgrund der Messungen an den F-Zentren sowie der Messung an Silizium in Abb. 5.5 verworfen werden. Typische Spinrelaxationszeiten sind bei den verwendeten Meßtemperaturen mehrere Größenordnungen größer als die Lebensdauern der Positronen.

Eine weitere Ursache könnte darin liegen, daß keine paramagnetischen Fehlstellen in der Mehrzahl der untersuchten Proben vorhanden waren. Dies ist trotz der im vorherigen Abschnitt gegebenen Erklärungsversuche zu den einzelnen Proben eher unwahrscheinlich, da in sehr vielen Materialien in der Umgebung von Defekten eine ungepaarte Elektronenkonfiguration vorherrscht, die sich in ESR-Messungen paramagnetisch verhält.

Allerdings ist es möglich, daß die bevorzugten Positronenhaftstellen nicht paramagnetisch sind. Angesichts der im Experiment verwendeten tiefen Meßtemperaturen fungieren eine Reihe von Defekten als Haftstellen, die das möglicherweise paramagnetische Verhalten bestimmter Defekte überdecken. Hierbei muß berücksichtigt werden, daß die Positronen fast ausschließlich von Leerstellen mit negativem Ladungszustand eingefangen werden. Positiv geladene Defekte, die hingegen ebenfalls ein Signal in der Elektronenspin-Resonanz zeigen, werden von den Positronen nicht gesehen (siehe auch Abb. 2.2).

Da diese denkbaren Begründungen nicht ausreichend sind, um das nur sehr schwache Auftreten von Signalen paramagnetischer Zentren zu erklären, muß die Ursache hierfür im Verhalten der Positronen in den paramagnetischen Zentren selbst gesucht werden. Trifft ein Positron auf eine derartige Fehlstelle mit ihrem ungepaarten Elektron, so können die beiden Teilchen ein gemeinsames System mit paralleler oder antiparalleler Spinorientierung bilden. Dabei braucht es sich nicht

um Quasipositronium als gebundenen Zustand zu handeln. Es ist auch möglich, daß das Zwei-Teilchen-System durch die bloße Existenz der Leerstelle zusammenhält.

Kommt es nicht zur Bildung von Quasipositronium, so ist ein hochkorrelierter Zustand beider Teilchen mit einem großen Überlapp der Wellenfunktionen notwendig, damit das ungepaarte Elektron seinen „paramagnetischen Einfluß“ auf die Zerstrahlung ausüben kann. Im Falle von QPs ergibt sich die benötigte Korrelation hingegen aus der gegenseitigen Coulomb-Anziehung beider Teilchen.

In Abb. 6.2 sind die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für ein Elektron und ein Positron am Beispiel der paramagnetischen Einfachleerstelle V_{Si}^- in Silizium dargestellt. Man erkennt deutlich, daß der Bereich, in dem sich die Wellenfunktionen beider Teilchen überlappen, nicht sehr groß ist.

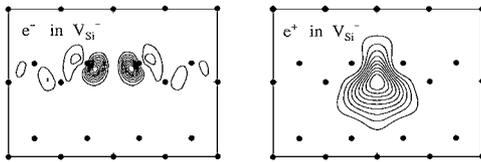


Abbildung 6.2: Berechnete Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für das paramagnetische Elektron und ein Positron in der Umgebung einer negativ geladenen Silizium-Einfachleerstelle V_{Si}^- in der (110)-Ebene. Der dargestellte Bereich entspricht der für die Rechnung verwendeten Superzelle. Die Konturlinien stellen jeweils ein Zehntel des Maximalwerts dar. Deutlich erkennt man den geringen Überlapp beider Wellenfunktionen durch die stark delokalisierte Elektronenwellenfunktion. Abbildung aus [Ala93].

Für die Positronenlebensdauer in V_{Si}^- sind Berechnungen für die beiden relativen Spineinstellungen durchgeführt worden. Sie ergeben einen Unterschied von 20 ps (238 ps und 258 ps) [Ala93]. Die derzeitigen experimentellen Möglichkeiten erlauben keine Trennung beider Lebensdauern in den Spektren. Messungen mit der Magnetic-quenching-Methode haben bislang entgegen den Erwartungen keine schlüssigen Resultate geliefert [Ala93].

Prinzipiell wäre die Verwendung von polarisierten Positronen und Elektronen der richtige Weg, um eine Unterscheidung beider Zustände zu ermöglichen und so paramagnetische Elektronen zu erkennen, indem man die Parallel- bzw. Antiparallelstellung über das externe Magnetfeld bevorzugt einstellt. Aber auch dann wäre der Unterschied wahrscheinlich nur anhand der Positronenlebensdauer meßbar, da die Impulsunterschiede zwischen den paramagnetischen Elektronen und

den übrigen Elektronen längst nicht so groß sind wie beim Quasipositronium, wo sich Pick-off-Zerstrahlungen und Selbstzerstrahlung deutlich unterscheiden.

Im Gegensatz zu dieser Methode stellt eine ausgedehnte Elektronenwellenfunktion für die Detektion paramagnetischer Zentren mit der Elektronenspin-Resonanz keinen Nachteil dar.

6.3.2 Bewertung der Anwendbarkeit der Methode

Aus dem vorherigen Abschnitt ergeben sich die Anforderungen, die die paramagnetischen Zentren erfüllen müssen, damit sie mit der im Rahmen dieser Arbeit vorgestellten Methode der polarisierten Positronen detektiert werden können:

- Das System muß paramagnetische Zentren enthalten, in die Positronen eingefangen werden. Aufgrund der experimentell benötigten, tiefen Proben-temperatur entfallen damit positiv geladene Fehlstellen.
- In den paramagnetischen Zentren sollte Quasipositronium mit dem paramagnetischen Elektronen gebildet werden, damit sich über die Bildungswahrscheinlichkeit der QPs-Zustände der paramagnetische Einfluß optimal auf die Zerstrahlungsparameter auswirken kann.
- Dies ist aber nur dann möglich, wenn die Zerstrahlung tatsächlich aus dem QPs-Zustand heraus stattfindet. Kommt es vor der Annihilation zu einer chemischen Reaktion des QPs-Atoms mit seiner Umgebung, so geht die Information über den Positronenspin verloren.
- Bildet das System hingegen kein Quasipositronium, so ist es von großem Belang, daß der Überlapp der Wellenfunktionen von paramagnetischem Elektron und Positron groß genug ist, damit sich die spinabhängigen Zerstrahlungen meßbar vom Untergrund der übrigen Annihilationen abheben. Dies setzt eine eng an die Fehlstelle lokalisierte Elektronenwellenfunktion voraus.

Aufgrund dieser komplexen Anforderungen, die die paramagnetischen Zentren erfüllen müssen, damit sie mit diesem Verfahren untersucht werden können, ist die praktische Anwendbarkeit dieser Methode stark eingeschränkt.

Zwar hat sich gezeigt, daß F-Zentren ideale Systeme für das Verfahren sind; diese sind aber umgekehrt nicht von anwendungsnaher Bedeutung.

Nach den erfolgreichen Vorversuchen an den F-Zentren sind eine Reihe von Systemen als technologisch interessante Fragestellungen für diese Methode ausgesucht worden. Hierzu zählen insbesondere Silizium, SiO_2 und Al_2O_3 . Bei diesen

Materialien wäre eine Verbesserung der spektroskopischen Eigenschaften der Positronenannihilation besonders wünschenswert.

Der Einfluß der paramagnetischen Elektronen in diesen Systemen auf die Zerstrahlungseigenschaften ist nicht mit dem Fall der Elektronen in F-Zentren zu vergleichen. Allerdings kann angenommen werden, daß mit wachsender Lokalisierung der Wellenfunktionen beider Teilchen der Effekt stärker auftritt. Folglich könnte die Methode bei Leerstellen in III-V- beziehungsweise II-VI-Halbleitern eventuell eher erfolgreich sein.

Angesichts der im Rahmen dieser Arbeit erzielten Ergebnisse darf allerdings auch bei derartigen Materialien bezweifelt werden, ob die Methode bei der Untersuchung paramagnetischer Zentren wertvolle Informationen liefern kann, die über das bisher bekannte Maß hinausgehen.

Während qualitative Aussagen bedingt möglich sind, bleiben quantitative Informationen mit dieser Methode unzugänglich. Die Anwendbarkeit dieses Verfahrens bleibt damit auf das bessere Verständnis der Vorgänge von Positronen in Materie selbst beschränkt.

Anhang A

Bildungswahrscheinlichkeiten von Quasipositronium im Magnetfeld

In diesem Abschnitt sollen die Bildungswahrscheinlichkeiten für die Pseudopositronium-Zustände $|\Phi_T^B\rangle$ und $|\Phi_S^B\rangle$ sowie $|\uparrow\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow\rangle$ bei Verwendung spinpolarisierter Positronen und Elektronen bestimmt werden. Hierzu wird der Dichtematrix-Formalismus [Sch88] verwendet. Eine detaillierte Rechnung findet sich in [Ehm92].

Für eine gegebene Quantisierungsachse z sei die Polarisation durch $P = \frac{N^+ - N^-}{N^+ + N^-}$ gegeben, wobei N^\pm die Zahl der jeweiligen Teilchen mit der Komponente $\pm\frac{1}{2}$ ist.

Aus der Definition von P ergibt sich durch eine einfache Umformung, daß das Verhältnis $N^\pm/N_{ges} = \frac{1}{2}(1 \pm P)$ ist. Damit hat die Spin-Dichtematrix für die Zustände $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ die Gestalt $\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+P & 0 \\ 0 & 1-P \end{pmatrix}$.

Für die direkten Produktzustände ($|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow\rangle$) ergibt sich dann die Anfangsdichtematrix ρ :

$$\rho = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} (1+P_{e+})(1+P_{e-}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (1+P_{e+})(1-P_{e-}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (1-P_{e+})(1+P_{e-}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1-P_{e+})(1-P_{e-}) \end{pmatrix}$$

Zunächst muß mithilfe einer Basistransformation ein Wechsel auf die Eigenzustände der Operatoren \hat{S}_z und \hat{S}^2 durchgeführt werden. Da der Operator für das magnetische Spinmoment des Positroniums $\vec{\mu}_{Ps} = \mu_B \cdot (\vec{\sigma}_+ - \vec{\sigma}_-)$ [Lan70] die beiden Zustände $|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ nicht beeinflusst, werden nachfolgend nur noch die Zustände $\{|\phi_S\rangle, |\phi_T^{m=0}\rangle\}$ berücksichtigt. Damit ergibt sich dann eine neue Spin-Dichtematrix für die Ps-Eigenzustände:

$$\rho_{Ps} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 - P_{e^+}P_{e^-} & P_{e^+} - P_{e^-} \\ P_{e^+} - P_{e^-} & 1 - P_{e^+}P_{e^-} \end{pmatrix}$$

In einem Magnetfeld sind die Vakuum-Positronium-Zustände keine Eigenzustände des neuen Hamiltonoperators mehr. Die neuen Pseudopositronium-Zustände ergeben sich als Linearkombination der Vakuum-Ps-Zustände zu

$$|\Phi_S^B\rangle = c|\phi_S\rangle + yc|\phi_T^{m=0}\rangle$$

$$|\Phi_T^B\rangle = c|\phi_T^{m=0}\rangle - yc|\phi_S\rangle$$

mit den Hilfsgrößen $x = \frac{4\mu_B B_z}{\Delta W}$, $y = \frac{x}{1+\sqrt{1+x^2}}$ und $c = \frac{1}{\sqrt{1+y^2}}$ [Ehm92].

Aufgrund dieser Mischung muß zur Bestimmung der Bildungswahrscheinlichkeiten erneut eine Basistransformation durchgeführt werden; diesmal in die Basis $\{|\Phi_T^B\rangle, |\Phi_S^B\rangle\}$. Es ergibt sich folgende Matrix:

$$\rho^B = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 - 2yc^2(P_{e^+} - P_{e^-}) - P_{e^+}P_{e^-} & (c^2 - y^2c^2)(P_{e^+} - P_{e^-}) \\ (c^2 - y^2c^2)(P_{e^+} - P_{e^-}) & 1 + 2yc^2(P_{e^+} - P_{e^-}) - P_{e^+}P_{e^-} \end{pmatrix}$$

Die Diagonalelemente der Matrix ergeben die Bildungswahrscheinlichkeiten für die Basiszustände im Magnetfeld. Die Werte sind in der nachfolgenden Tabelle zusammengefaßt. Gleichzeitig sind dort auch Zahlenwerte für den Fall vollständig polarisierter Positronen ($P_{e^+} = 1$) und unpolarisierter Elektronen ($P_{e^-} = 0$) bei einem Magnetfeld von $B = +3,7$ T angegeben¹:

Spinzustand	Bildungswahrscheinlichkeiten	Zahlenwerte
$ \Phi_S^B\rangle$	$\frac{1}{4}[1 + 2yc^2(P_{e^+} - P_{e^-}) - P_{e^+}P_{e^-}]$	42,8%
$ \Phi_T^B\rangle$	$\frac{1}{4}[1 - 2yc^2(P_{e^+} - P_{e^-}) - P_{e^+}P_{e^-}]$	7,2%
$ \uparrow\uparrow\rangle$	$\frac{1}{4}(1 + P_{e^+})(1 + P_{e^-})$	50%
$ \downarrow\downarrow\rangle$	$\frac{1}{4}(1 - P_{e^+})(1 - P_{e^-})$	0%

Die Bildungswahrscheinlichkeiten für die vier Zustände sind im Magnetfeld also nicht mehr gleichverteilt, selbst bei Verwendung unpolarisierter Elektronen. Wenn man das Magnetfeld umkehrt, dabei aber die Polarisationsrichtung der Positronen beibehält², so vertauschen sich die Bildungswahrscheinlichkeiten für $|\Phi_T^B\rangle$ und $|\Phi_S^B\rangle$.

¹ Für ein Magnetfeld von $B = \pm 3,7$ T ergeben sich für die Hilfsgrößen die folgenden Werte: $x = \pm 1,01$, $y = \pm 0,42$ und $c = 0,92$.

² Die Polarisationsrichtung der Positronen ist durch die räumliche Geometrie der Apparatur und nicht durch das Magnetfeld vorgegeben. Beim Umpolen kehrt sich neben dem Vorzeichen für y auch das Vorzeichen des Elektronenpolarisationsgrads P_{e^-} um.

Literaturverzeichnis

- [Abg94] T. Abgarjan; *Untersuchungen von induzierten Defekten an Element- und Verbindungshalbleitern mittels Positronenannihilation*; Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 1994
- [Ala93] M. Alatalo, M.J. Puska, R.M. Nieminen; *J. Phys. Condens. Matter* 5 (1993), L307–L314
- [Alf92] I. Alfter, E. Bodenstedt, B. Hamer, J. van den Hoff, W. Knichel, H. Munning, S. Piel, J. Schüth, R. Sajok; *Nucl. Instr. and Meth. A* 321 (1992), 506–520
- [And33] C.D. Anderson; *Phys. Rev.* 43 (1933), 491–494
- [Are76] K.P. Aref'ev, S.A. Vorob'ev, V.P. Kileev; *Sov. Phys. Solid State* 18 (1976), 386–388
- [Bas82] J. Bass; in Landolt-Börnstein New Series III/15a *Metals: Electronic Transport Phenomena*; Springer, Berlin, 1982
- [Bel53] R.E. Bell, R.L. Graham; *Phys. Rev.* 90 (1953), 644–654
- [Ber67] S. Berko; *Positron Annihilation in Ferromagnetic Solids*; in *Positron Annihilation*; Ed.: A.T. Stewart, L.O. Roellig; Academic Press, New York, 1967
- [Ber77] S. Berko, M. Haghgoie, J.J. Mader; *Phys. Lett.* 63A (1977), 335–338
- [Bis63] A. Bisi, A. Fiorentini, L. Zappa; *Phys. Rev.* 131 (1963), 1023–1024
- [Bis71] A. Bisi, A. Dupasquier, L. Zappa; *J. Phys. C* 4 (1971), L33–L36
- [Bör95] N. Börnsen, M. Fähnle; private Mitteilung, 1995
- [Bot73] V.A. Botvin, Yu.V. Gorelkinskii, V.O. Sigle, M.A. Chubisov; *Sov. Phys. Semiconductors* 6 (1973), 1453–1456

- [Bou83] J. Bourgoin, M. Lannoo; *Point Defects in Semiconductors II*; Springer Series in Solid-State Sciences 35; Springer, Berlin, 1983
- [Bra77] W. Brandt, R. Paulin; Phys. Rev. B 15 (1977), 2511–2518
- [Cor95] C. Corbel, P. Hautojärvi; Proc. Internat. School of Physics 'Enrico Fermi' 125 (1995), 533–562
- [DeB50] S. DeBenedetti, C.E. Cowan, W.R. Konneker, H. Primakoff; Phys. Rev. 77 (1950), 205–212
- [DeB52] S. DeBenedetti, H.J. Richings; Phys. Rev. 85 (1952), 377–378
- [Dec94] C. Deckers; *Aufbau und Erprobung eines Positronen-Lebensdauer-spektrometers sowie Messung mit polarisierten Elektronen*; Diplomarbeit, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, 1994
- [Dec95] C. Deckers, H. Greif, W. Knichel, K. Maier, M. Tongbhoyai, A. Siegle, J. Ehmman, H. Schneider; Phys. Lett. A 197 (1995), 179–182
- [Dec96] C. Deckers, K. Maier, P. Schaaff, N. Börnsen, M. Fähnle; Verhandl. DPG (VI) 31 (1996), 1697
- [Deu51a] M. Deutsch; Phys. Rev. 82 (1951), 455–456
- [Deu51b] M. Deutsch; Phys. Rev. 83 (1951), 866–867
- [Dir30a] P.A.M. Dirac; Proc. Roy. Soc. A 126 (1930), 360–365
- [Dir30b] P.A.M. Dirac; Proc. Camb. Phil. Soc. 26 (1930), 361–375
- [Dup70] A. Dupasquier; Lett. Nuovo Cimento 4 (1970), 13–15
- [Dup79] A. Dupasquier; *Positrons in Ionic Solids*; in *Positrons in Solids*; Ed.: P. Hautojärvi; Springer, Berlin, 1979
- [Dup83] A. Dupasquier; Proc. Internat. School of Physics 'Enrico Fermi' 83 (1983), 510–564
- [Ehm92] J. Ehmman; *Bildung und Zerstrahlung von Positronium in starken Magnetfeldern*; Diplomarbeit, Universität Stuttgart; 1992
- [Ehr91] P. Ehrhart; in Landolt-Börnstein New Series III/25 *Atomic Defects in Metals*; Springer, Berlin, 1991
- [Fer50] E. Fermi; *Nuclear Physics*; rev. ed.; Chicago Press, 1950
- [Fer51] R.A. Ferrell; Phys. Rev. 84 (1951), 858–859

- [Fer56] R.A. Ferrell; Rev. Mod. Phys. 28 (1956), 308–337
- [Fer58] R.A. Ferrell; Phys. Rev. 110 (1958), 1355–1357
- [Fra65] H. Frauenfelder, R.M. Steffen; *The Helicity of β -particles*; in K. Siegbahn; *Alpha-, Beta- and Gamma-Ray Spectroscopy*; North-Holland, Amsterdam, 1965
- [Fuj95] M. Fujinami, N.B. Chilton; Materials Science Forum Vols. 175 – 178 (1995), 157–160
- [Geß96] T. Geßmann; private Mitteilung, 1996
- [Gre94] H. Greif; *Aufbau und Erprobung eines mobilen Positronenstrahls*; Diplomarbeit, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, 1994
- [Hal54] O. Halpern; Phys. Rev. 94 (1954), 904–907
- [Han57] S.S. Hanna, R.S. Preston; Phys. Rev. 106 (1957), 1363–1364
- [Has85] M. Hasegawa, Y.J. He, K.R. Hoffmann, R.R. Lee, S. Berko, T. Takeyama; in Positron Annihilation. Proceedings of the Seventh International Conference, 260–262; World Scientific, Singapore, 1985
- [Has94] M. Hasegawa, Y. Nagashima, K. Kawashima, T. Hyodo, S. Yamaguchi, M. Forster, H.E. Schaefer; Nucl. Instr. and Meth. B 91 (1994), 263–268
- [Has95] M. Hasegawa, M. Tabata, T. Miyamoto, Y. Nagashima, T. Hyodo, M. Fujinami, S. Yamaguchi; Materials Science Forum Vols. 175 – 178 (1995), 269–278
- [Hau71] A. Hausmann, W. Sander *Study of structural defects by spin resonance methods*; in *The electronic structure of point defects*; Defects in crystalline solids 4; North-Holland, Amsterdam, 1971
- [Hau79] P. Hautojärvi, A. Vehanen; *Introduction to Positron Annihilation*; in *Positrons in Solids*; Ed.: P. Hautojärvi; Springer, Berlin, 1979
- [Hau95] P. Hautojärvi; Materials Science Forum Vols. 175 – 178 (1995), 47–58
- [Hei54] W. Heitler; *The Quantum Theory of Radiation*; Clarendon Press, Oxford, 1954
- [Hel64] A. Held, S. Kahana; Can. J. Phys. 42 (1964), 1908–1913
- [Her70] D. Herlach, F. Heinrich; Phys. Lett. 31A (1970), 47–48
- [Her72] D. Herlach; Helv. Phys. Acta 45 (1972), 894–896

- [Her73] D. Herlach; *Positronenannihilation in Gitterdefekten in KCl*; Dissertation, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, 1973
- [Her94] Heraeus Quarzglas GmbH; *Quarzglas für die Optik, Daten und Eigenschaften*; POL-O/106, Hanau, 1994
- [Hug95] C. Hugenschmidt; *Ortsaufgelöste Lebensdauerspektroskopie von Positronen im Festkörper*; Diplomarbeit, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, 1995
- [Jai72] K.C. Jain, R.W. Siegel; *Phil. Mag.* **26** (1972), 637–647
- [Jun91] P. Jung; in Landolt-Börnstein New Series III/25 *Atomic Defects in Metals*; Springer, Berlin, 1991
- [Kip53] A.F. Kip, C. Kittel, R.A. Levy, A.M. Portis; *Phys. Rev.* **91** (1953), 1066–1071
- [Kra93] R. Krause-Rehberg, M. Brohl, H.S. Leipner, Th. Drost, A. Polity, U. Beyer, H. Alexander; *Phys. Rev. B* **47** (1993), 13266–13276
- [Kub75] P. Kubica, A.T. Stewart; *Phys. Rev. Lett.* **34** (1975), 852–855
- [Lan70] L.D. Landau, E.M. Lifschitz; *Lehrbuch der Theoretischen Physik: Band IVa, Relativistische Quantentheorie*; Akademie, Berlin, 1970
- [Lau93] U. Lauff, J. Major, A. Seeger, H. Stoll, A. Siegle, Ch. Deckers, H. Greif, K. Maier, M. Tongbhoyai; *Phys. Lett. A* **182** (1993), 165–168
- [Led78] C.M. Lederer, V.S. Shirley; *Table of Isotopes*; John Wiley & Sons, New York, 7th ed., 1978
- [Lee55] G.E. Lee-Whiting; *Phys. Rev.* **97** (1955), 1557–1558
- [Mäk92] J. Mäkinen, P. Hautojärvi, C. Corbel; *J. Phys. Condens. Matter* **4** (1992), 5137–5154
- [Mac83] I.K. MacKenzie; *Proc. Internat. School of Physics 'Enrico Fermi'* **83** (1983), 196–264
- [Mai70] L.I. Maissel, R. Glang; *Handbook of Thin Film Technology*; McGraw-Hill, New York, 1970
- [Mil75] A.P. Mills, Jr.; *J. Chem. Phys.* **62** (1975), 2646–2659
- [Mog74] O.E. Mogensen; *J. Chem. Phys.* **60** (1974), 998–1004
- [Nie79] R.M. Nieminen, M.J. Manninen; *Positrons in Imperfect Solids: Theory*; in *Positrons in Solids*; Ed.: P. Hautojärvi; Springer, Berlin, 1979

- [Nie80] R.M. Nieminen, J. Oliva; Phys. Rev. B 22 (1980), 2226–2247
- [Ore49] A. Ore; Naturvitenskapelig rekke 9 (1949), Univ. Bergen Årbok, 1–15
- [Pag57] L.A. Page, M. Heinberg; Phys. Rev. 106 (1957), 1220–1224
- [Per70] A. Perkins, J.P. Carbotte; Phys. Rev. B 1 (1970), 101–107
- [Pic65] H. Pick; *Struktur von Störstellen in Alkalihalogenidkristallen*; Springer Tracts in modern Physics 38; Springer, Berlin, 1965
- [Pus94] M.J. Puska, R.M. Nieminen; Rev. Mod. Phys. 66 (1994), 841–897
- [Röm58] H. Römpp; *Chemielexikon*; Franckh'sche Verlagshandlung, Stuttgart, 4. Aufl., 1958
- [Rua45] A.E. Ruark; Phys. Rev. 68 (1945), 278
- [Sch63] J.H. Schulman, W.D. Compton; *Color centers in solids* (International series of monographs on solid state physics 2); Pergamon, Oxford, 1963
- [Sch68] D. Schumacher, A. Seeger, O. Härlin; phys. stat. sol. 25 (1968), 359–371
- [Sch81] H.E. Schaefer; *Gitterlücken und Positronenzerstrahlung in Metallen*; Habilitationsschrift, Universität Stuttgart, 1981
- [Sch88] F. Schwabl; *Quantenmechanik*; Springer, Berlin, 1988
- [Sch92] G. Schatz, A. Weidinger; *Nukleare Festkörperphysik*; Teubner, Stuttgart, 2. Aufl., 1992
- [Sch95] P. Schaaff; *Polarisierte Positronen als Sonde für paramagnetische Zentren*; Diplomarbeit, Rheinische Friedrich–Wilhelms–Universität Bonn, 1995
- [She49] J.W. Shearer, M. Deutsch; Phys. Rev. 76 (1949), 462
- [Sim58] L. Simons; *Positronium*; in *Handbuch der Physik*; Hrsg.: S. Flügge; XXXIV, 139–165; Springer, Berlin, 1958
- [Šob84] M. Šob, S. Szuszkiewicz, M. Szuszkiewicz; phys. stat. sol. (b) 123 (1984), 649–652
- [Str91] O. Stritzke; *Untersuchung von Positronium in Materie mit Hilfe der Positronenspindepolarisation*; Dissertation, Universität Stuttgart, 1991

- [Sze81] S.M. Sze; *Physics of Semiconductor Devices*; John Wiley & Sons, New York, 2nd ed., 1981
- [Ton94] M. Tongbhoyai; *Herstellung kleiner Positronenquellen und Untersuchung der Fehlstellenkonzentration von festem, flüssigem und flüssig unterkühltem Nickel*; Diplomarbeit, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, 1994
- [Tro93] T. Troev, V. Pavlov; *Hyperf. Interact.* 80 (1993), 999–1003
- [Tsa88] T.E. Tsai, D.L. Griscom, M.E. Gingerich; *Nucl. Instr. and Meth. B* 32 (1988), 377–382
- [Wat64] G.D. Watkins, J.W. Corbett; *Phys. Rev.* 134 (1964), A1359–A1377
- [Wei89] Ch. Weißmantel, C. Hamann; *Grundlagen der Festkörperphysik*; VEB, Berlin, 3. Aufl., 1989
- [Wes73] R.N. West; *Adv. Phys.* 22 (1973), 263–383
- [Wu57] C.S. Wu, E. Ambler, R.W. Hayward, D.D. Hoppes, R.P. Hudson; *Phys. Rev.* 105 (1957), 1413–1415
- [Wür89a] R. Würschum, *Untersuchung von Fehlstellen in Halbleitern mit der Positronenzerstrahlung*, Dissertation, Universität Stuttgart, 1989
- [Wür89b] R. Würschum, W. Bauer, K. Maier, A. Seeger, H.E. Schaefer; *J. Phys. Condens. Matter* 1 (1989), SA33–SA48
- [Yan50] C.N. Yang; *Phys. Rev.* 77 (1950), 242–245
- [Zie80] J.F. Ziegler; *The Stopping and Ranges of Ions in Matter*; Pergamon Press, New York

Danksagung

Viele Freunde und Kollegen haben auf sehr verschiedene Art und Weise ihren Beitrag zu dieser Arbeit und der schönen Zeit am Institut für Strahlen- und Kernphysik geleistet. Ihnen möchte ich an dieser Stelle ein Dankeschön sagen:

Meinem Doktorvater *Karl Maier* danke ich für die stets ausgezeichnete Betreuung sowohl fachlicher als auch persönlicher Natur während der Zeit von Diplomarbeit und Promotion.

Prof. Dr. Peter Herzog gilt mein Dank für zahlreiche fruchtbare Diskussionen, die mein Verständnis für die Thematik dieser Arbeit vertieften, sowie für wertvolle Hinweise zur Tieftemperaturphysik. Außerdem danke ich ihm für die Übernahme des Korreferates.

Meinen langjährigen Freunden *Holger Greif* und *Martin Tongbhoyai*, die mit mir „das Team der ersten Stunde“ der Arbeitsgruppe Maier bildeten, danke ich für ein sehr freundschaftliches und produktives Miteinander, das sehr dabei half, kleine und große Probleme zu meistern.

Für die ausgezeichnete Zusammenarbeit in der Aufbauphase dieses Projektes möchte ich *Petra Schaaff* meinen Dank aussprechen. Ohne sie wären eine Reihe von Messungen dieser Arbeit nicht möglich gewesen.

Der gesamten Arbeitsgruppe, die mir neben fachlichen und technischen Hilfestellungen auch durch ihre menschlich sympathische Art in guter Erinnerung bleiben wird, gilt mein Dank. Dies gilt sowohl der aktuellen Besetzung als auch den Ehemaligen. Danke an *Frank Emert*, *Bernd Didinger*, *Joachim Reske*, *Dieter Platzeck*, *Frank Keuser*, *Christoph Hugenschmidt*, *Carsten Bühner*, *Thomas Albrecht*, *Dr. Uwe Holzwarth*, *Ulrike Männig*, *Sabine Hansen*, *Tobias Wider* und *Matthias Haaks*. Es war einfach königlich!

Prof. Dr. Erwin Bodenstedt bin ich dankbar für die freundliche Überlassung seines supraleitenden Magneten sowie für sein Interesse am Fortgang dieser Arbeit. Bei seinen Mitarbeitern *Ingo Alfter*, *Wolfgang Knichel* und *Joachim Schüth* bedanke ich mich für die freundliche Einweisung in diese Apparatur und ihre stete Hilfsbereitschaft bei Fragen.

Viele Angestellte des Instituts haben diese Arbeit konkret durch technische Hilfestellungen unterstützt. Die *Zyklotronmannschaft*, das Team der *Elektronikwerkstatt*, das *Massenseparator-Team* und die *Feinmechanische Werkstatt* haben wichtige Aufgaben übernommen. Im administrativen Bereich danke ich unseren *Sekretärinnen*.

Für das gute Institutsklima möchte ich mich insbesondere bei *Doris Theisen, Stefan Birkenbach, John Harlow, Herbert Lenz, Paul Noller* und *Jörg Seul* bedanken, die mich tatkräftig bei der Organisation des Betriebsausfluges und des Sommerfestes unterstützt haben.

Mein Dank gilt auch den *Diplomanden und Doktoranden* der anderen Arbeitsgruppen, die ebenfalls an der positiven Gestaltung des Institutsklimas beteiligt waren.

In der unmittelbaren Umgebung des Instituts waren *Herr Schmitz* und *Herr Hanf-land* stets hilfreich bei der Flüssiggasversorgung meiner Apparatur. *Frau Mühl* aus der Bibliothek ließ sich auch durch Fragen nach ausgefallenster Literatur nicht abschrecken.

Beim Max-Planck-Institut für Metallforschung in Stuttgart danke ich *Andreas Siegle, Dr. Hendrik Schneider* und *Dr. Jörg Ehmann*. Neben wichtigen Vorarbeiten zu diesem Projekt waren sie auch stets hilfsbereit bei Fragen und Wünschen. Meinen Dank möchte ich auch *Nils Börnsen* und *Prof. Dr. Manfred Fähnle* für ihre Rechnungen zu den Leerstellen in Platin aussprechen.

Für Probenbereitstellung und Probenbearbeitung schulde ich *Michael Bechtel, Rolf Henes, Dr. Janos Major* und *Dr. Roland Würschum* in Stuttgart, *Herrn Dr. Dworschak* in Jülich, *Herrn Dr. Thomas* in Hanau sowie *Michael Rüb* in Jena Dank.

Meinem Physiklehrer *Herrn Dr. Hans Engels* danke ich dafür, daß er mir die Begeisterung für die Physik nahegebracht hat.

Der *Deutschen Forschungsgemeinschaft* gilt mein Dank für die Unterstützung dieses Projektes unter der Förderungsnummer Ma 1689/1-1 und Ma 1689/1-2.

Meinen Eltern danke ich für die Unterstützung und Zuversicht, mit der sie meinen bisherigen Lebensweg begleitet haben.

Mein ganz herzlicher Dank gilt der lieben *Monika*.

Danke!

Lebenslauf

Name: Christoph Klaus Gert Deckers
Anschrift: Julius-Leber-Straße 39, 53340 Meckenheim
Geburtsdatum: 30.04.1968
Geburtsort: Mönchengladbach
Familienstand: ledig

Aug. 74 – Juli 76 Gemeinschaftsgrundschule Regentenstraße,
Mönchengladbach
Aug. 76 – Juni 78 Deutsche Grundschule Budel, Niederlande
Aug. 78 – Juni 80 Gymnasium St. Wolfhelm, Schwalmtal
Aug. 80 – Juli 81 Städtisches Gymnasium, Rheinbach
Sep. 81 – Mai 87 Konrad-Adenauer-Gymnasium, Meckenheim
Mai 87 Abschluß Abitur

Juli 87 – Sep. 88 Grundwehrdienst

Okt. 88 Immatrikulation im Fach Physik (Diplom) an der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn
Okt. 90 Vordiplomprüfung in Physik
Juli 92 – Okt. 92 Teilnahme am Sommerstudentenprogramm des
Hahn-Meitner-Instituts, Berlin
Dez. 92 Hauptdiplomprüfung in Physik, Nebenfach Informatik
Jan. 93 – Jan. 94 Diplomarbeit in Experimentalphysik zum Thema
„Aufbau und Erprobung eines Positronen-Lebensdauer-
spektrometers sowie Messung mit polarisierten Elektronen“
unter der Leitung von Prof. Dr. K. Maier am Institut
für Strahlen- und Kernphysik
Jan. 94 Erlangung des Physik-Diploms
Feb. 94 – April 94 Forschungsaufenthalt an der Universität Lissabon und am
Forschungszentrum INETI bei Lissabon, Portugal
Mai 94 Beginn der Promotion in Experimentalphysik bei
Prof. Dr. K. Maier am Institut für Strahlen- und Kernphysik
seit Juli 94 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Strahlen-
und Kernphysik der Universität Bonn