Untersuchungen zum Bau eines Fabry-Pérot Interferometers für Mössbauerstrahlung

Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereichs Physik
der Universität Hamburg

vorgelegt von

Michael Lerche

aus Hamburg

Hamburg, 2004

Gutachter der Dissertation:	PD Dr. Yu.V. Shvyd'ko Prof. Dr. E. Gerdau
Gutachter der Disputation:	PD Dr. Yu.V. Shvyd'ko Prof. Dr. W. Wurth
Datum der Disputation:	12. August 2004
Vorsitzender der Prüfungsausschusses:	Prof. Dr. F.W. Büßer
Vorsitzender der Promotionsausschusses:	Prof. Dr. R. Wiesendanger
Dekan des Fachbereichs Physik:	Prof. Dr. G. Huber

Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit besteht im wesentlichen aus zwei Themenkomplexen, die gemeinsam die Grundlage für den Bau eines kombinierten Fabry-Pérot Interferometers für sichtbares Licht und für Mössbauer Strahlung bilden. Ein solches Instrument könnte in der Metrologie genutzt werden, um die Lücke zwischen sichtbarem Licht und Röntgenlicht zu schließen.

Die wichtigsten Komponenten eines Fabry-Pérot Interferometers sind zwei Spiegel, die parallel zueinander ausgerichtet sind. Um die benötigten Spiegel für die ^{57}Fe Mössbauerstrahlung zu realisieren, kann der $(1\,3\,\bar{4}\,28)$-Reflex in Saphir (α-Al_2O_3) genutzt werden. Bei exakter Rückstreuung an diesem Reflex werden jedoch zwei zusätzliche Reflexe angeregt. Zusammen mit dem transmittierten Strahl handelt es sich somit um einen Vier-Strahlfall. Bragg-Reflexe, welche die exakte Rückstreuung begleiten, treten immer paarweise auf. Daraus folgt, dass der Vier-Strahlfall der Mehrstrahlfall mit der kleinsten Anzahl an gestreuten Wellen ist. Dieser spezielle Fall wird im ersten Themenkomplex dieser Arbeit theoretisch sowie experimentell behandelt. Die zusätzlich angeregten Wellen reduzieren die Reflektivität in den (gewünschten) Rückstreukanal. Um diesen Reflex für die Fabry-Pérot Interferometer-Spiegel zu nutzen, ist es daher notwendig zu verstehen, wie die zusätzlich angeregten Strahlen unterdrückt werden können. Darüberhinaus ist es von fundamentalem Interesse, den Mehrstrahlfall mit der kleinsten Anzahl an gestreuten Wellen genauer zu verstehen.

Um mit einem kombinierten Fabry-Pérot Interferometer die (metrologische) Lücke zwischen sichtbarem Licht und Röntgenlicht zu schließen, soll die Wellenlänge der ^{57}Fe Mössbauerstrahlung an die sehr genau bekannte Wellenlänge eines Jod-stabilisierten Helium-Neon Lasers gekoppelt werden. Der Abstand der kombinierten Fabry-Pérot Interferometer-Spiegel muss dann allerdings variabel sein. Eine weitere Voraussetzung ist, dass die reflektierenden Atomebenen der Spiegel im nrad-Bereich parallel zueinander sind. Die Erfahrung zeigt, dass diese Parallelität nur stabil erreicht werden kann, wenn das gesamte Fabry-Pérot Interferometer aus *einem* Kristall hergestellt wird. Im zweiten Themenkomplex dieser Arbeit werden die theoretischen Grundlagen von optischen und Röntgen-Fabry-Pérot Interferometern besprochen. Aus diesen Grundlagen werden die Anforderungen an ein solches kombiniertes, monolithisches Fabry-Pérot Interferometer hergeleitet.

Es wird ein mögliches Design für ein solches Instrument vorgeschlagen. Dieser Vorschlag wurde mithilfe der Methode der finiten Elemente (FEM), hinsichtlich der aufgestellten Anforderungen, optimiert.

Abstract

The work presented here consists basically of two parts, which provide the basement for the construction of a combined Fabry-Pérot interferometer for visible light and for the Mössbauer radiation of ^{57}Fe. Such instruments could be used in the field of metrology to bridge the gap between visible light and x-rays.

The main components of a Fabry-Pérot interferometer are two mirrors, aligned parallel and separated by a gap. For the realization of the desired mirrors for the Mössbauer radiation, the $(1\,3\,\bar{4}\,28)$-reflex in sapphire (α-Al_2O_3) can be used. However, at the position of exact backscattering this reflex is accompanied by two additional beams. Together with the transmitted beam this particular case is a four-beam case. Bragg reflections accompanying a back-reflection are excited always in pairs. As a result, the four-beam case is the simplest multiple-beam Bragg diffraction case with one reflection in backscattering. This special case is treated both, experimentally and theoretically in the first part of this thesis. The waves excited additionally reduce the reflectivity into the desired backscattering channel. In order to use the $(1\,3\,\bar{4}\,28)$-reflex for the mirrors of an x-ray Fabry-Pérot interferometer for Mössbauer radiation, it is essential to understand how the occurrence of the additional beams may be suppressed. Furthermore, it is of fundamental scientific interest to study this multiple-beam case with the minimum number of diffracted waves.

To bridge the (metrological) gap between visible light and x-rays, the wavelength of the ^{57}Fe Mössbauer radiation shall be connected to the well known wavelength of an iodine-stabilized He-Ne laser. For this purpose the gap-width between the mirrors of the combined Fabry-Pérot interferometer must be variable. An additional issue is, that the reflecting atomic planes of the x-ray mirrors must be parallel within some nrad. This parallelism can only be reached by building the whole Fabry-Pérot interferometer out of *one* sapphire-crystal, as experience shows. In the second part of the present work the basic principles of an optical and an x-ray Fabry-Pérot interferometer are treated theoretically. The requirements which such a combined, monolithic Fabry-Pérot interferometer must meet are deduced from these principles.

A possible design for such an instrument is presented. This design was optimized, with regard to the requirements to be met, by the method of finite elements (FEM).

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **1**

2 Vier-Strahlfall: Theorie **5**
2.1 Allgemeine Betrachtung 6
2.2 Die dynamische Theorie 10
2.2.1 Grundlagen 10
2.2.2 Der Ein-Strahlfall 12
2.2.3 Der Zwei-Strahlfall 13
2.2.4 Das Wellenfeld innerhalb des Kristalls und im Vakuum 17
2.2.5 Näherung für dicke Kristalle 19
2.3 Mehrstrahlfall bei exakter Rückstreuung 24
2.3.1 Kinematische Betrachtung 24
2.3.2 Dynamische Betrachtung des n-Strahlfalles 26
2.3.3 Der Vier-Strahlfall in Rückstreugeometrie 26
2.4 Beispielrechnungen 28
2.4.1 Zwei-Strahlfall 28
2.4.2 Vier-Strahlfall 29

3 Vier-Strahlfall: Experiment **37**
3.1 Experimenteller Aufbau 39
3.2 Durchführung 41
3.3 Ergebnisse 43
3.3.1 Winkelabhängigkeit der Reflektivität 43
3.3.2 Energieabhängigkeit der Reflektivität 45

4 Fabry-Pérot Interferometer **47**
4.1 Planares optisches Fabry-Pérot Interferometer 48
4.2 Planares Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer 52
4.2.1 Grundlagen 52
4.2.2 Optisches vs. Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer . . 55
4.3 Nicht perfektes Fabry-Pérot Interferometer 57

4.3.1 Die Oberflächenrauigkeit der inneren Kristalloberflächen 57
4.3.2 Inhomogene Kristalldicke 57
4.3.3 Nicht exakt parallele Kristalle 58
4.3.4 Temperaturunterschiede 58

5 Kombiniertes Fabry-Pérot Interferometer 61
5.1 Anforderungen an ein XFPI 63
5.1.1 Die Breite des Spalts d_g 63
5.1.2 Rauigkeit der inneren Kristalloberflächen 63
5.1.3 Inhomogene Kristalldicke 64
5.1.4 Nicht exakt parallele Atomebenen 64
5.1.5 Temperaturunterschiede 64
5.1.6 Der Verstellweg des beweglichen Fabry-Pérot Interferometer-Spiegels 65
5.2 Grundlagen der Nanopositionierung 66
5.2.1 Parallelfedern 66
5.2.2 Doppel-Parallelfedern 67
5.2.3 Federgelenke 68
5.3 Designstudien mit der Methode finiter Elemente 71
5.3.1 Beispiel eines einfachen Befestigungsbalkens 71
5.3.2 Allgemeine Betrachtung 73
5.4 Berechnungen von verschiedenen Entwürfen 75
5.4.1 Erstellen und Vernetzen des Konstruktionsentwurfs . . 75
5.4.2 Regeln für die Berechnungen der Eigenschaften eines Konstruktionsentwurfs 78
5.4.3 Entwurf 1 82
5.4.4 Entwurf 2 84
5.4.5 Vergleich beider Entwürfe 90

6 Zusammenfassung und Ausblick 93
6.1 Zusammenfassung der Ergebnisse des Vier-Strahlfalls 93
6.2 Zusammenfassung der FEM Simulationen 94
6.3 Ausblick 94

Literatur 95

Danksagung 103

Abbildungsverzeichnis

2.1 Illustration der Streugeometrie 9
2.2 Geometrie des Laue- und des Bragg-Falls 16
2.3 Skizze der möglichen Streugeometrien 17
2.4 Die Reflektivität R in Abhängigkeit von y und α 21
2.5 Geometrische Konstruktion des Vierfachstreufalls. 25
2.6 Zwei-Strahlfall 28
2.7 Zwei-Strahlfall nahe exakter Rückstreuung 29
2.8 Streugeometrie des untersuchten Vier-Strahlfalls 30
2.9 Berechnete Winkelabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission. 31
2.10 Berechnete Energieabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission. 33
2.11 Berechnete Winkelabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission. 34
2.12 Berechnete Energieabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission. 35

3.1 Skizze des experimentellen Aufbaus. 39
3.2 Berechnete Laueaufnahme eines Saphirkristalls 41
3.3 Gemessene Winkelabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission. 44
3.4 Reflektivität als Funktion der Photonenenergie. 45

4.1 Konstruktion der Vielstrahlinterferenz an einem FPI. 48
4.2 Gesamt-Transmission T_{FP} als Funktion von ϕ 51
4.3 Schema eines Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer 53

5.1 Einfache Parallelfeder 67
5.2 Einfache Doppel-Parallelfeder 67
5.3 Federelement im Bereich der Nanopositionierung 68
5.4 Doppel-Parallelfeder aus Federelementen 69

5.5 Ausgelenkte Doppel-Parallelfeder 69
5.6 Balken der in vier Elemente unterteilt ist 71
5.7 Einzelnes Element 72
5.8 Erstellen des Entwurfs aus einem Block 75
5.9 Erstellen des Entwurfs aus mehreren Quadern 76
5.10 Vernetztes einzelnes Volumen mit verknüpften Oberflächen . . 77
5.11 Vernetzte Doppelparallelfeder 78
5.12 Verschiedene Randbedingungen bei der FEM Analyse 80
5.13 FEM Analysen bei verschiedenen Randbedingungen 81
5.14 Erster Entwurf für das monolithische Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer 82
5.15 Skizze der untersuchten Parallelfeder 84
5.16 Randbedingungen beim Vergleich der Deformierung des Balkens 85
5.17 Seitenansicht des verformten Balkens mit Röntgenspiegel . . . 85
5.18 Verformung der Basis 86
5.19 Skizze der modifizierten Parallelfeder 87
5.20 Verformung des beweglichen Balkens 88
5.21 Skizze der zweifach modifizierten Parallelfeder 88
5.22 Skizze des endgültigen Entwurfs 89
5.23 Verformung des beweglichen Balkens des endgültigen Entwurfs 89
5.24 Verformung des endgültigen Entwurfs, 1:200 90
5.25 Verformung des endgültigen Entwurfs unter dem Einfluss der Gravitation 91

Tabellenverzeichnis

5.1 Die Ergebnisse der FEM-Simulationen für den ersten Entwurf 83
5.2 Die Ergebnisse der FEM-Simulationen für den zweiten Entwurf 86
5.3 Ergebnisse der FEM-Simulationen für den endgültigen Entwurf 89

Kapitel 1

Einleitung

In dieser Arbeit werden verschiedene Aspekte behandelt, welche die Grundlage für den Bau eines Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers bilden.

In der modernen Optik sind Fabry-Pérot Interferometer unentbehrlich geworden. Im 20. Jahrhundert sind solche Instrumente z.B. genutzt worden, um Wellenlängen des sichtbaren Spektrums mit hoher Präzision zu bestimmen. Die hohe Auflösung erlaubt es unter anderem, Fein- und Hyperfeinaufspaltungen in der Atomspektroskopie zu bestimmen. Kavitäten vom Fabry-Pérot Typ sind die Grundlage der Laserphysik (Vaughan, 1989). Hochauflösende Instrumente dieser Art wären auch im Röntgenbereich des elektromagnetischen Spektrums sehr nützlich. Eine spektrale Auflösung im μeV-Bereich ist denkbar. Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer könnten als Interferenzfilter mit hoher Auflösung eingesetzt werden, z.B. um dynamische Vorgänge in Festkörpern, Flüssigkeiten, Polymeren oder in biologischen Makromolekülen zu untersuchen. Ein erster Röntgenresonator des Fabry-Pérot-Typs ist von Shvyd'ko et al. (2003) vorgestellt worden.

Die wichtigsten Komponenten eines Fabry-Pérot Interferometers sind zwei Spiegel hoher Reflektivität, die durch einen Spalt getrennt und parallel zueinander ausgerichtet sind. Dieses System wird trotz der hohen Reflektivität der Spiegel durchsichtig, wenn die Resonanzbedingung für eine stehende Welle innerhalb des trennenden Spalts erfüllt ist.

Die Größe des Spalts ist üblicherweise konstant, ein veränderlicher Spalt würde es erlauben das Fabry-Pérot Interferometer auf gewünschte Wellenlängen abzustimmen. Ein Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer mit verstellbarem Spiegelabstand ist eine interessante aber noch nicht bewältigte Herausforderung.

Im Gegensatz zur Optik im Bereich des sichtbaren Lichts ist es im Röntgenbereich ein zentrales Problem, Spiegel hoher Reflektivität herzustellen. Um die benötigten Spiegel zu realisieren, kann die Bragg-Streuung an Kristallen genutzt werden. Für den Bau eines Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers kommt es auf die exakte Rückstreuung der γ-Quanten im Röntgenbereich an. In Kapitel 2 werden die Grundlagen der Bragg-Streuung besprochen, sowie die dynamische Theorie der Röntgenstreuung vorgestellt.

Die exakte Rückstreuung von γ-Quanten wurde erstmals von Kohra und Matsushita (1972) theoretisch behandelt. Der wesentliche Vorteil der Rückstreuung gegenüber der Braggstreuung unter kleineren Winkeln, wurde bereits in dieser Veröffentlichung herausgestellt: die Winkelakzeptanz eines Reflexes ist bei Rückstreuung maximal und kann bis zu 1000 mal größer sein als bei kleineren Einfallswinkeln. Außerdem ist die relative Energiebreite eines Reflexes winkelunabhängig und daher ist seine absolute Energiebreite in Rückstreuung minimal. Wegen dieser Eigenschaften wurden die Untersuchungen der Rückstreuung theoretisch sowie experimentell intensiv weiterbetrieben (Brümmer et al., 1979; Caticha und Caticha-Ellis, 1982; Graeff und Materlik, 1982; Kushnir und Suvorov, 1986). Cusatis et al. (1996) beobachteten als Erste die exakte Rückstreuung von γ-Quanten, dazu benutzten sie den Si(1 1 1)-Reflex bei einer Photonenenergie von 1,9 keV. Shvyd'ko et al. (1998) berichteten über die exakte Rückstreuung der 14,4 keV Mössbauer-Strahlung von ^{57}Fe an Saphirkristallen und verglichen die Ergebnisse mit den Vorhersagen der dynamischen Theorie. Kikuta et al. (1998) betrachteten den Si(9 9 1)-Reflex in Rückstreugeometrie. In dieser Untersuchung wurde eine starke Abnahme der Intensität der rückgestreuten Strahlung beobachtet, die ihre Ursache in der Anregung zusätzlicher Braggreflexe hat. Solche Mehrstrahlfälle treten bei der Rückstreuung systematisch auf. Dies wird ebenfalls in Kapitel 2 besprochen.

In Kristallen mit kubischem Kristallgitter wie Silizium treten Mehrstrahlfälle bei der Bragg-Rückstreuung besonders häufig auf. Dies ist in der hohen Symmetrie von kubischen Kristallen begründet. Ausserdem gibt es nur relativ wenige Rückstreureflexe in einem gegebenen Energieintervall, weil die Braggenergien stark "entartet" sind. Saphirkristalle ($\alpha-Al_2O_3$) dagegen besitzen aufgrund ihrer hexagonalen Struktur eine geringere Symmetrie, die zu den Vorteilen führt, dass Mehrfachstreuung deutlich seltener ist und dass die relative Anzahl von Rückstreureflexen in einem gegebenen Energieintervall wesentlich höher ist. Ausserdem ist die Reflektivität von Saphirkristallen bei hohen Photonenenergien höher als die von Siliziumkristallen.

Fabry-Pérot Interferometer bieten eine sehr hohe Energieauflösung, die Energiebreite der Resonanzen liegt im Fall von Röntgenstrahlung im μeV-Bereich. Der Nachweis von derart schmalen Resonanzen kann mit heutigen Mitteln nur durch die Nutzung von Mössbauer Strahlung gelingen.

Die Strahlung des 14,4 keV Mössbauerübergangs in ^{57}Fe hat eine Energiebreite von 4,7 neV. Selbst bei Hyperfeinaufspaltung liegt der energetische

Abstand der sechs Linien im μeV-Bereich. Dieses sind hervorragende Voraussetzungen zur Ermittlung der Energiebreite von Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer-Resonanzen. Der $(1\,3\,\bar{4}\,28)$-Reflex[1] in $\alpha-Al_2O_3$ bietet die Möglichkeit, die Mössbauerstrahlung von ^{57}Fe bei einer Kristalltemperatur von ca. 100° C zurückzustreuen. Dieser Rückreflex wird von zwei weiteren Reflexen begleitet, so dass es sich hier zusammen mit dem transmittierten Strahl um einen Vierstrahlfall handelt. Dieser spezielle Fall ist im Rahmen dieser Arbeit experimentell untersucht worden, er wird in Kapitel 3 vorgestellt.

In Kapitel 4 werden die grundlegenden Gleichungen, die ein optisches Fabry-Pérot Interferometer beschreiben, hergeleitet. Mithilfe der dynamischen Theorie gelingt dies auch für ein Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer, die Ergebnisse für beide Fälle werden verglichen. Ferner wird besprochen, wie groß eventuelle Abweichungen beim Bau eines realen Fabry-Pérot Interferometers von den angenommenen idealen Bedingungen sein dürfen, um die Fabry-Pérot Interferometer-Resonanzen nicht zu zerstören.

Ein Ziel dieser Untersuchungen ist es, ein kombiniertes Fabry-Pérot Interferometer für sichtbares Licht und für Mössbauer Strahlung zu realisieren. Ein solches Instrument könnte in der Metrologie genutzt werden, um die Lücke zwischen sichtbarem Licht und Röntgenlicht zu schließen. So könnte ein neuer Längenstandard[2] im Angströmbereich etabliert werden, da die Wellenlänge der Mössbauerstrahlung von ^{57}Fe ohne großen experimentellen Aufwand mit einer relativen Genauigkeit von etwa 3×10^{-13} reproduziert werden kann (Shvyd'ko, 2004). Der absolute Wert der Mössbauer-Wellenlänge ist jedoch noch nicht mit so großer Genauigkeit bekannt (Shvyd'ko et al., 2000; Xiaowei et al., 2000). Mit einem kombinierten Fabry-Pérot Interferometer für Mössbauerstrahlung von ^{57}Fe und dem Licht eines Jod stabilisierten Helium Neon Lasers könnte der absolute Wert der ^{57}Fe-Mössbauerwellenlänge genauer bestimmt werden. Die Wellenlänge eines Jod stabilisierten Helium Neon Lasers ist mit einer relativen Genauigkeit von 10^{-13} bekannt, allerdings bei Integrationszeiten von 100 s (Boyko et al., 1999). Das Interesse, Laser-Wellenlängen mit immer besserer Genauigkeit zu reproduzieren ist unvermindert groß, wie z.B. Ma et al. (2004) zeigen. Die Entwicklung dieses und anderer Längenstandards wurde von Quinn (2003) zusammengefasst, s. auch Referenzen dort. Insgesamt könnte mit dieser Methode zur Bestimmung der ^{57}Fe Mössbauerwellenlänge eine relative Genauigkeit von $10^{-9}-10^{-10}$ erreicht

[1] Kristalle mit hexagonaler Kristallstruktur können auch durch ein rhomboedrisches Gitter beschrieben werden. Zur Unterscheidung der Gittervektoren und -ebenen, wird bei der Beschreibung im hexagonalen Fall ein vierter Miller-Index zur Charakterisierung eines Reflexes $(\mathsf{h\,k\,i\,l})$ hinzugefügt mit der Bedingung: $\mathsf{h}+\mathsf{k}+\mathsf{i}=0$.

[2] Genaugenommen muss hier von einem *sekundären* Längestandard gesprochen werden. *Der* gültige SI-Längenstandard ist das Meter (m).

werden. Der üblicherweise verwendete Längenstandard im Angströmbereich, die Gitterkonstante von Silizium, kann dagegen höchstens mit einer relativen Genauigkeit von 10^{-8} bestimmt werden. Diese maximale relative Genauigkeit liegt in der Herstellung der Si-Referenzkristalle begründet: selbst bei den besten Kristallen variiert der relative Wert der Gitterkonstante innerhalb des Kristalls um 10^{-8} (Bergamin et al., 1999).

Um mit einem kombinierten Fabry-Pérot Interferometer die Wellenlänge der ^{57}Fe Mössbauerstrahlung an die sehr genau bekannte Wellenlänge eines Jod-stabilisierten Helium-Neon Lasers zu koppeln, muss der Abstand der kombinierten Spiegel variabel sein. Eine weitere Voraussetzung ist, dass die reflektierenden Atomebenen der Spiegel im nrad-Bereich parallel zueinander sind. Die Erfahrung aus dem in (Shvyd'ko et al., 2003) vorgestellten Experiment zeigt, dass diese Parallelität am einfachsten erreicht werden kann, wenn das gesamte Fabry-Pérot Interferometer aus *einem* Kristall hergestellt wird.[3] In Kapitel 5 wird ein Modell für ein solches monolithisches Instrument vorgestellt. Dieses Modell wurde mithilfe der Methode der finiten Elemente (FEM) optimiert. Das grundlegende Prinzip der FEM-Methode wird vorgestellt, sowie die Grundlagen der "Nanopositionierung", die es erlaubt, Bewegungen mit einer absoluten Genauigkeit im nm-Bereich zu realisieren.

[3] Die Erfahrungen zeigen, dass ein anderer Weg extrem schwierig ist.

Kapitel 2

Vier-Strahlfall: Theorie

Elektromagnetische Wellen bestehen aus zwei gekoppelten, oszillierenden Feldern, dem elektrischen Feld $\boldsymbol{E}$ und der magnetischen Induktion $\boldsymbol{B}$. Diese Wellen wechselwirken mit elektrischen Ladungen, z.B. von Protonen und Elektronen und mit magnetischen Dipolmomenten, z.B. von Neutronen, Protonen und Elektronen. Die elektrische Wechselwirkung ist um einige Größenordnungen stärker als die magnetische, welche im folgenden vernachlässigt wird. Die Intensität der an einem Teilchen der Masse m gestreuten Strahlung ist proportional zu $1/m^2$, wenn man nur Coulombstreuung betrachtet. Die Masse des Protons ist rund 2000-mal größer als die des Elektrons, es soll deswegen nur die Streuung an Elektronen betrachtet werden.

Zunächst wird die elastische Streuung an Kristallen allgemein betrachtet und die Braggbedingung aufgestellt, siehe z.B.: Kittel (1993), Christman (1992). Eine genauere Beschreibung der Streuung an Kristallen ist mit der dynamischen Theorie möglich, die ebenfalls diskutiert wird. Es wird dabei auch der Fall exakter Rückstreuung besprochen, sowie das dabei mögliche Auftreten von Mehrstrahlfällen.

2.1 Allgemeine Betrachtung

Betrachtet man eine ebene Welle,

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \tag{2.1}$$

die elastisch an den Elektronen innerhalb eines Kristallen am Ort $\boldsymbol{r}'$ gestreut wird, so ist $\boldsymbol{r}'$ der Ausgangspunkt einer Kugelwelle:

$$\psi_s(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}',t) = \frac{A'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|-\omega t)}. \tag{2.2}$$

In den Gl. 2.1 und 2.2 bedeutet:

$$\omega = 2\pi\nu, \tag{2.3}$$

$$|\boldsymbol{k}| = k = 2\pi/\lambda, \tag{2.4}$$

wobei ν die Frequenz der Welle und λ ihre Wellenlänge ist. Wenn man sich in einem großen Abstand von der Probe befindet, d.h. wenn $|\boldsymbol{r}| \gg |\boldsymbol{r}'|$ gilt, dann kann man annehmen, dass $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ nahezu konstant ist. Gl. 2.2 kann daher durch die Annahme ebener Wellen am Ort $\boldsymbol{r}$ vereinfacht werden zu:

$$\psi_s(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}',t) = A_s\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')-\omega t]}, \tag{2.5}$$

hierin ist $\boldsymbol{k}'$ parallel zu der Ausbreitungsrichtung, wobei $|\boldsymbol{k}'| = k$ gilt. Die Streuamplitude A_s ist proportional zur Amplitude der einfallenden Strahlung, also zu $A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}')}$. Gleichung 2.5 wird damit:

$$\begin{aligned}\psi_s(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}',t) &= Af_{\Delta\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}')}\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')-\omega t]}\\ &= Af_{\Delta\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'-\omega t)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\\ &= Af_{\Delta\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}'}\\ &= A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}f_{\Delta\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}.\end{aligned} \tag{2.6}$$

Die Änderung des Wellenvektors bedingt durch die Streuung ist

$$\Delta\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k}. \tag{2.7}$$

Der Proportionalitätsfaktor $f_{\Delta\boldsymbol{k}}$ ist vom Streuobjekt abhängig, er wird Atomformfaktor genannt.

Bisher wurde nur die bei $\boldsymbol{r}'$ gestreute Welle betrachtet. Die durch Streuung am gesamten Kristall resultierende Welle Ψ_s ergibt sich durch die Superposition aller Wellen:

$$\Psi_s(\boldsymbol{r},t) = \int \psi_s(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}',t)\mathrm{d}^3r'. \tag{2.8}$$

Wieder davon ausgehend, dass der Beobachtungsort $\boldsymbol{r}$ weit von $\boldsymbol{r}'$ entfernt ist und somit $\boldsymbol{k}'$ als konstant angenommen werden kann, vereinfacht sich Gl. 2.8 wegen Gl. 2.6 zu:

$$\Psi_s(\boldsymbol{r},t) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}\int f_{\Delta\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3r'. \tag{2.9}$$

Wegen der regelmäßigen Struktur eines Kristalls kann die Integration auch als Summation über alle Atome des Kristalls ausgeführt werden. Jeder Gitterpunkt lässt sich als Linearkombination der drei Grundvektoren des Kristallgitters $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ und $\boldsymbol{c}$ darstellen. Jedem dieser Gitterpunkte können mehrere Atome zugeordnet sein, ihre Lage relativ zum Gitterpunkt wird durch die Basisvektoren $\boldsymbol{p}_m$ dargestellt. Aus Gl. 2.9 wird dann:

$$\Psi_s(\boldsymbol{r},t) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}\sum_{n_1}\sum_{n_2}\sum_{n_3}\sum_{m} f^{(m)}_{\Delta\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Delta\boldsymbol{k}\cdot(n_1\boldsymbol{a}+n_2\boldsymbol{b}+n_3\boldsymbol{c}+\boldsymbol{p}_m)}. \tag{2.10}$$

Die Summation der ganzzahligen n_i geht über alle Gitterpunkte, die über m geht über alle Atome einer Basis die zu diesem Gitterpunkt gehört. Alle Einheitszellen des Gitters sind identisch, somit ist die Summe

$$F_{\Delta\boldsymbol{k}} = \sum_{m} f^{(m)}_{\Delta\boldsymbol{k}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}_m} \tag{2.11}$$

für alle Zellen gleich, $F_{\Delta\boldsymbol{k}}$ wird Strukturfaktor genannt. Wird er in Gl. 2.10 ausgeklammert, so ergibt sich:

$$\Psi_s(\boldsymbol{r},t) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}F_{\Delta\boldsymbol{k}}\left(\sum_{n_1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n_1\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}}\right)\left(\sum_{n_2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n_2\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}}\right)\left(\sum_{n_3}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n_3\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{c}}\right). \tag{2.12}$$

Die einzelnen Summen in Gl. 2.12 bilden geometrische Reihen, sie können geschlossen berechnet werden. Dabei wird die Summation jeweils von 0 bis $N_i - 1$ ausgeführt, wobei N_i die Gesamtzahl der Gitterpunkte in Richtung des entsprechenden Grundvektors angibt. Es ist:

$$\begin{aligned}
\sum_{n_1=0}^{N_1-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n_1\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a}} &= \frac{\sin(\frac{1}{2}N_1\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a})}{\sin(\frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a})}\\
\sum_{n_2=0}^{N_2-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n_2\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}} &= \frac{\sin(\frac{1}{2}N_2\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b})}{\sin(\frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b})}\\
\sum_{n_3=0}^{N_3-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n_3\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{c}} &= \frac{\sin(\frac{1}{2}N_3\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{c})}{\sin(\frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{c})}.
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Aus Gl. 2.13 folgt also für die Intensität:

$$|\Psi_s|^2 = |A|^2|F_{\Delta k}|^2 \left[\frac{\sin(\frac{1}{2}N_1\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a})}{\sin(\frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a})}\right]^2 \left[\frac{\sin(\frac{1}{2}N_2\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b})}{\sin(\frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b})}\right]^2 \left[\frac{\sin(\frac{1}{2}N_3\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{c})}{\sin(\frac{1}{2}\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{c})}\right]^2. \tag{2.14}$$

Untersucht man die Faktoren in Gl. 2.14, so zeigt sich, dass für $\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a} = 2\mathsf{h}\pi$, $\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b} = 2\mathsf{k}\pi$ und $\Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{c} = 2\mathsf{l}\pi$ (für ganzzahlige h,k,l) jeweils der entsprechende Faktor maximal wird. Ein Maximum des Produktes liegt also für:

$$\begin{aligned} \Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{a} &= 2\mathsf{h}\pi \\ \text{und } \Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b} &= 2\mathsf{k}\pi \\ \text{und } \Delta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{c} &= 2\mathsf{l}\pi \end{aligned} \tag{2.15}$$

vor. Mit der Definition der Grundvektoren des reziproken Gitters:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A} &= 2\pi\frac{\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}}{V} \\ \boldsymbol{B} &= 2\pi\frac{\boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a}}{V} \\ \boldsymbol{C} &= 2\pi\frac{\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}}{V}, \end{aligned} \tag{2.16}$$

wobei

$$V = \boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}), \tag{2.17}$$

das Volumen der Einheitszelle ist, kann Gl. 2.15 umgeschrieben werden zu:

$$\Delta\boldsymbol{k} = \mathsf{h}\boldsymbol{A} + \mathsf{k}\boldsymbol{B} + \mathsf{l}\boldsymbol{C}, \tag{2.18}$$

dies ist die Lauebedingung, d.h. $\Delta\boldsymbol{k}$ ist dann ein reziproker Gittervektor:

$$\boldsymbol{H} = \mathsf{h}\boldsymbol{A} + \mathsf{k}\boldsymbol{B} + \mathsf{l}\boldsymbol{C} = \Delta\boldsymbol{k}. \tag{2.19}$$

Aus Gl. 2.19 folgt direkt:

$$\boldsymbol{k'} = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{H}. \tag{2.20}$$

Quadriert man Gl. 2.20 und berücksichtigt, dass bei elastischer Streuung gilt:

$$|\boldsymbol{k}| = |\boldsymbol{k}^{'}|, \quad \boldsymbol{k}^2 = \boldsymbol{k}'^2. \tag{2.21}$$

dann erhält man die *Braggbedingung* in Vektorform:

$$2\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{H} + \boldsymbol{H}^2 = 0. \tag{2.22}$$

Die Braggbedingung bestimmt für welche Ausbreitungsrichtung der einfallenden Welle die Reflektivität maximal ist.

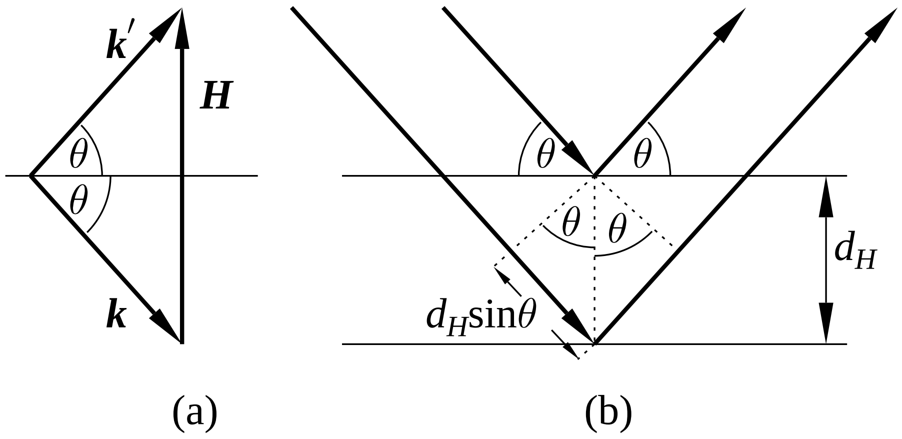


Abb. 2.1: Illustration der Streugeometrie. (a) Die einfallende Welle mit dem Wellenvektor $\boldsymbol{k}$ schließt den Winkel θ mit der Gitterebene ein. Die gestreute Welle mit dem Wellenvektor $\boldsymbol{k'}$ ebenfalls. Die Differenz der beiden Wellenvektoren ist $\boldsymbol{H}$. (b) Streuung an zwei parallelen Gitterebenen. Die einfallenden und ausfallenden Wellen schließen den Winkel θ mit den Gitterebenen ein. Der Abstand der Gitterebenen ist d_H. Die Wegdifferenz beider Wellen beträgt insgesamt $2d_H \sin\theta$.

Aus Gl. 2.22 folgt für die Beträge der Vektoren $\boldsymbol{k}$ und $\boldsymbol{H}$:

$$H = 2k \sin\theta, \tag{2.23}$$

darin ist θ der Winkel zwischen dem Wellenvektor $\boldsymbol{k}$ und der reflektierenden Gitterebenen welche senkrecht auf $\boldsymbol{H}$ stehen. In Abb. 2.1(a) ist diese Streugeometrie illustriert. Setzt man Gl. 2.4 in Gl. 2.23 ein dann folgt:

$$2d_H \sin\theta = \lambda, \qquad d_H = \frac{2\pi}{|\boldsymbol{H}|}. \tag{2.24}$$

Diese Gleichung verbindet die Wellenlänge und den Einfallswinkel der einfallenden Welle für maximale Reflektivität. In Gl. 2.24 hat d_H die Dimension einer Länge, dies ist der Abstand d_H der streuenden Gitterebenen. In Abb. 2.1(b) ist die geometrische Bedeutung von Gl. 2.24 gezeigt. Es ist zu erkennen, dass der Wegunterschied zweier an benachbarten Gitterebenen gestreuten Wellen insgesamt $2d_H \sin\theta$ beträgt. Maximale Reflektivität liegt daher genau dann vor, wenn dieser Wegunterschied der Wellenlänge λ entspricht.

2.2 Die dynamische Theorie

In der dynamischen Theorie wird die Streuung einer ebenen elektromagnetischen Welle an einem Kristall als Streuung an einem Medium räumlich periodischer Suszeptibilität χ beschrieben.

Die Diskussion erfolgt im wesentlichen nach Shvyd'ko (2004).

2.2.1 Grundlagen

Ausgangspunkt sind die makroskopischen Maxwell-Gleichungen in differentieller Form:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D} = 4\pi\rho \tag{2.25}$$

$$\nabla \times \hat{\boldsymbol{H}} - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j} \tag{2.26}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} = 0 \tag{2.27}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0, \tag{2.28}$$

hierin sind $\boldsymbol{D}$ die dielektrische Verschiebung, $\boldsymbol{E}$ die elektrische Feldstärke, $\hat{\boldsymbol{H}}$ die magnetische Feldstärke und $\boldsymbol{B}$ die magnetische Induktion, siehe z.B.: Jackson (1975). Die Ladungsdichte ρ der freien Ladungen und die Stromdichte $\boldsymbol{j}$ des freien Stromes sind die Ursachen der Felder. Frei bedeutet in diesem Zusammenhang, dass die Ladungen und die Ströme nicht an einen bestimmten Ort gebunden sind.

Eine ebene monochromatische elektromagnetische Welle

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{E}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{K}_H \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)} \tag{2.29}$$

soll von einem perfekten Einkristall gestreut werden. Um die in dem Kristall angeregte Welle $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r})$ zu erhalten, muss folgende Gleichung gelöst werden:

$$(-\boldsymbol{\Delta} - k^2)\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r}) = k^2\chi(r)\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r}), \tag{2.30}$$

welche sich aus den Maxwell-Gleichungen ergibt. Weil $\chi(\boldsymbol{r})$ periodisch ist, ist die Lösung dieser Gleichung eine Bloch-Welle:

$$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{H}} \boldsymbol{D}_H \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{K}_H \cdot \boldsymbol{r}} \tag{2.31}$$

$$\boldsymbol{K}_H = \boldsymbol{K}_0 + \boldsymbol{H}. \tag{2.32}$$

Die Wellenvektoren $\boldsymbol{K}_0$ und $\boldsymbol{K}_H$ beziehen sich auf die einfallende bzw. gestreute Welle innerhalb des Kristalls. Die Fourier Reihenentwicklung der Suszeptibilität, welche dieselbe Periodizität wie das Kristallgitter hat lautet:

$$\chi(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{H}} \chi_H \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{H} \cdot \boldsymbol{r}}. \tag{2.33}$$

Die Fourier Komponenten der Suszeptibilität sind durch:

$$\chi_H = -\frac{r_e \lambda^2}{\pi V} F_H, \tag{2.34}$$

gegeben, darin ist r_e der klassische Elektronenradius. Setzt man die Reihenentwicklung Gl.2.33 zusammen mit dem Lösungsansatz Gl. 2.31 in Gl. 2.30 ein, so ergibt sich:

$$\frac{K_H^2 - k_0^2}{k_0^2} \boldsymbol{D}_H = \sum_{\boldsymbol{L}} \chi_{H-L} \boldsymbol{D}_L, \tag{2.35}$$

hierin ist $\boldsymbol{k}_0$ der Wellenvektor der einfallenden Welle im Vakuum, die Summe wird über alle reziproken Gittervektoren $\boldsymbol{L}$ ausgeführt. Da $\boldsymbol{H}$ beliebige Werte annehmen kann, stellt Gl. 2.35 ein in $\boldsymbol{D}$ lineares unendliches Gleichungssystem dar. Man kann allerdings annehmen, dass es nur für n reziproke Gittervektoren $\boldsymbol{H}$, für die $K_0 \approx K_H$ gilt, einen nennenswerten Beitrag zu der Summe in Gl. 2.35 gibt. ($\boldsymbol{K}_H, \boldsymbol{K}_0$ und $\boldsymbol{H}$ sind über Gl. 2.32 verknüpft.) Wird Gl. 2.35 skalar mit $\boldsymbol{K}_H$ multipliziert, so folgt damit:

$$0 = (k_0^2 - K_H^2)(\boldsymbol{K}_H \cdot \boldsymbol{D}_H). \tag{2.36}$$

Da i.allg. $k_0^2 - K_H^2 \neq 0$ gilt, folgt also $\boldsymbol{K}_H \cdot \boldsymbol{D}_H = 0$, d.h. $\boldsymbol{D}$ ist eine Transversalwelle. Dieses ist auch eine Folge der Annahme, dass keine freie Ladung im Inneren des Kristalls vorhanden ist, Gl. 2.25 wird dann zu $\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{D} = 0$.

Die einzelnen Transversalwellen $\boldsymbol{D}_H$ können in zwei senkrecht aufeinanderstehende Komponenten zerlegt werden. Die beiden Komponenten sollen parallel zu den Einheitsvektoren

$$\boldsymbol{s}_H = \frac{\boldsymbol{e}_H \times \boldsymbol{e}_0}{|\boldsymbol{e}_H \times \boldsymbol{e}_0|} \tag{2.37}$$

$$\boldsymbol{p}_H = \boldsymbol{e}_H \times \boldsymbol{s}_H \tag{2.38}$$

sein, dabei ist $\boldsymbol{e}_H$ der Einheitsvektor in Richtung von $\boldsymbol{K}_H$. Der Einheitsvektor in Richtung von $\boldsymbol{K}_0$ ist $\boldsymbol{e}_0$. Auf diese Weise erhält man $2n$ Gleichungen mit den $2n$ Unbekannten D_{Gs} und D_{Gp}:

$$\sum_{\boldsymbol{L}} \chi_{H-L} \Big(D_{Lp} \pi_{LH}^{pp} + D_{Ls} \pi_{LH}^{sp} \Big) = 0 \tag{2.39}$$

$$\sum_{\boldsymbol{L}} \chi_{H-L} \Big(D_{Lp} \pi_{LH}^{ps} + D_{Ls} \pi_{LH}^{ss} \Big) = 0. \tag{2.40}$$

Es ist $D_{Hp} = \boldsymbol{D}_H \cdot \boldsymbol{p}_H$, $D_{Hs} = \boldsymbol{D}_H \cdot \boldsymbol{s}_H$, $\pi_{LH}^{pp} = \boldsymbol{p}_L \cdot \boldsymbol{p}_H$, $\pi_{LH}^{ps} = \boldsymbol{p}_L \cdot \boldsymbol{s}_H$ usw. Gleichung 2.39 und 2.40 sind die fundamentalen Gleichungen der dynamischen

Theorie, sie bilden ein homogenes lineares Gleichungssystem dessen Lösung nur dann nichttrivial ist, wenn die Determinante der Koeffizientenmatrix verschwindet. Quadriert man Gl. 2.32, so kann $K_H^2 = K_0^2 + H^2 + 2\boldsymbol{K}_0 \cdot \boldsymbol{H}$ in der Determinante ersetzt werden, diese ist dann von der Ordnung $4n$ in K_0. Die $4n$ (diskreten) Werte für K_0, bei denen die Determinante verschwindet, ergeben jeweils einen Satz von Lösungen $(D_{H_1 s}, \ldots, D_{H_n s}, D_{H_1 p}, \ldots, D_{H_n p})$. Um die exakte Lösung für die Felder innerhalb und außerhalb des Kristalls zu erhalten, müssen die allgemeinen Randbedingungen:

$$(\boldsymbol{D}_2 - \boldsymbol{D}_1) \cdot \boldsymbol{e}_n = 4\pi\sigma \tag{2.41}$$

$$(\boldsymbol{B}_2 - \boldsymbol{B}_1) \cdot \boldsymbol{e}_n = 0 \tag{2.42}$$

$$(\boldsymbol{E}_2 - \boldsymbol{E}_1) \times \boldsymbol{e}_n = 0 \tag{2.43}$$

$$(\hat{\boldsymbol{H}}_2 - \hat{\boldsymbol{H}}_1) \times \boldsymbol{e}_n = -\frac{4\pi}{c}\boldsymbol{J} \tag{2.44}$$

erfüllt werden. Die Indizes beziehen sich jeweils auf ein Medium, $\boldsymbol{e}_n$ ist der Flächennormaleneinheitsvektor der Grenzfläche von Medium 1 zu Medium 2. In den meisten Fällen kann angenommen werden, dass keine freie Oberflächenladungsdichte σ und keine freie Oberflächenstromdichte $\boldsymbol{J}$ vorhanden ist. Da die Randbedingungen zeitlich uneingeschränkt gelten müssen, sind die Frequenzen der Wellen in beiden Medien gleich, außerdem springt die Tangentialkomponente des Wellenvektors beim Übergang nicht. Für die Tangentialkomponente k_{0t} des Wellenvektors außerhalb des Kristalls und die Tangentialkomponente K_{0t} des Wellenvektors innerhalb des Kristalls folgt somit:

$$\boldsymbol{k}_{0t} = \boldsymbol{K}_{0t} \tag{2.45}$$

Zusammen mit den Randbedingungen Gl. 2.41-2.44 und Gl. 2.45 kann aus den Gl. 2.39, 2.40 die Amplitude der gestreuten Welle berechnet werden, wenn die der einfallenden Welle bekannt ist.

2.2.2 Der Ein-Strahlfall

Betrachtet man den Fall n=1, so betrachtet man einfache Vorwärtsstreuung. Die Beträge der Wellenvektoren innerhalb und außerhalb des Kristalls unterscheiden sich im Fall von Röntgenstrahlung nur in der Größenordnung von $\lesssim 10^{-4}$, daher kann der Ansatz:

$$K_0 = k_0(1 + \delta_0) \tag{2.46}$$

gemacht werden. Darin ist $(1 + \delta_0) = (1 + \mathfrak{Re}(\chi_0)/2$ der Brechungsindex, er unterscheidet sich nur geringfügig von 1, so dass für das Betragsquadrat die

Näherung:

$$K_0^2 \approx k_0^2(1+2\delta_0) \tag{2.47}$$

angenommen werden kann. Die Tangentialkomponente der Wellenvektoren ist stetig, d.h. für den Wellenvektor außerhalb des Kristalls $\boldsymbol{k}_0$ und innerhalb des Kristalls $\boldsymbol{K}_0$ kann folgender Zusammenhang angenommen werden:

$$\boldsymbol{K}_0 = \boldsymbol{k}_0 + \Lambda \boldsymbol{e_n}, \tag{2.48}$$

hierin ist $\boldsymbol{e_n}$ der normierte Normalenvektor der Kristalloberfläche. Aus den Gl. 2.46, 2.47 und 2.48 erhält man eine quadratische Gleichung für den Parameter Λ:

$$\Lambda^2 + 2\gamma_0 k_0 \Lambda - 2\delta_0 k_0^2 = 0, \tag{2.49}$$

mit den zwei Lösungen:

$$\Lambda_1 = -\gamma_0 k_0 + k_0\sqrt{\gamma_0^2 - 2\delta_0}, \quad \Lambda_2 = -\gamma_0 k_0 - k_0\sqrt{\gamma_0^2 - 2\delta_0}. \tag{2.50}$$

Dabei ist:

$$\gamma_0 = \boldsymbol{k}_0 \cdot \boldsymbol{e}_n / k_0 \tag{2.51}$$

der Kosinus des von $\boldsymbol{k}_0$ und $\boldsymbol{e}_n$ eingeschlossenen Winkels. Ist nun dieser Winkel hinreichend weit von 90° entfernt, also vom streifenden Einfall, so ist $\gamma_0^2 \gg |\delta_0|$ und der quadratische Term in Λ kann in Gl. 2.49 vernachlässigt werden. Die daraus resultierende einzige Lösung für Λ lautet:

$$\Lambda = k_0 \frac{\delta_0}{\gamma_0}. \tag{2.52}$$

Für die Wellenvektoren außerhalb und innerhalb des Kristall ergibt sich in diesem Fall:

$$\boldsymbol{K}_0 = \boldsymbol{k}_0 + k_0 \frac{\delta_0}{\gamma_0} \boldsymbol{e}_n. \tag{2.53}$$

2.2.3 Der Zwei-Strahlfall

Beim allgemeinen Zwei-Strahlfall wird genau eine einfallende und genau eine gestreute Welle betrachtet. Es wird üblicherweise davon ausgegangen, dass im wesentlichen $\boldsymbol{D}_0$ und $\boldsymbol{D}_H$ zur elektrischen Verschiebung innerhalb des Kristalls beitragen. $\boldsymbol{D}_0$ ist über die Randbedingungen mit der einfallenden Welle außerhalb des Kristalls verbunden, sowie $\boldsymbol{D}_H$ mit der gestreuten Welle außerhalb. Analog zum Ein-Strahlfall werden folgende Annahmen gemacht:

$$K_0 = k_0(1+\delta_0) \quad \text{und} \quad K_H = k_0(1+\delta_H) \tag{2.54}$$

$$K_0^2 \approx k_0^2(1+2\delta_0) \quad \text{und} \quad K_H^2 \approx k_0^2(1+2\delta_H). \tag{2.55}$$

Man kann nun auch für die einfallende Welle die Polarisationsvektoren $\boldsymbol{s}_0$ und $\boldsymbol{p}_0$ in Analogie zu den Gl. 2.37, 2.38 definieren. Wählt man diese dann so, dass die Vektoren $\boldsymbol{s}_0$, $\boldsymbol{s}_H$ senkrecht und $\boldsymbol{p}_0$, $\boldsymbol{p}_H$ parallel zur der von $\boldsymbol{K}_0$ und $\boldsymbol{K}_H$ aufgespannten Streuebene liegen, so ist:

$$\boldsymbol{s}_0 \cdot \boldsymbol{s}_H = 1, \quad \boldsymbol{p}_0 \cdot \boldsymbol{p}_H = \cos 2\theta \quad \text{und} \quad \boldsymbol{s}_0 \cdot \boldsymbol{p}_H = \boldsymbol{s}_H \cdot \boldsymbol{p}_0 = 0. \tag{2.56}$$

Hierin ist θ der Einfallswinkel auf die streuenden Ebenen, die durch $\boldsymbol{H}$ definiert sind. Mit der Näherung Gl. 2.55 wird Gl. 2.39 zu:

$$(\chi_0 - 2\delta_0)D_{0p} + (\chi_{\bar{H}} \cos 2\theta)D_{Hp} = 0 \tag{2.57}$$
$$(\chi_H \cos 2\theta)D_{0p} + (\chi_0 - 2\delta_H)D_{Hp} = 0 \tag{2.58}$$

und Gl. 2.40 lässt sich umformen zu:

$$(\chi_0 - 2\delta_0)D_{0s} + \chi_{\bar{H}} D_{Hs} = 0 \tag{2.59}$$
$$\chi_H D_{0s} + (\chi_0 - 2\delta_H)D_{Hs} = 0. \tag{2.60}$$

Die Fourierkomponente $\chi_{\bar{H}} = \chi_{-H}$ erscheint in den Gleichungen, obwohl der Gittervektor, der die Streuung beschreibt $+\boldsymbol{H}$ ist. Dies ist der Fall, weil auf diese Weise auch Mehrfachstreuungen berücksichtigt werden. Die $\boldsymbol{s}$ und $\boldsymbol{p}$ Komponenten von $\boldsymbol{D}$ sind nun entkoppelt, außerdem unterscheiden sich die Gleichungen für die einzelnen Polarisationsrichtungen lediglich durch den Faktor $\cos 2\theta$ bei $\chi_{\pm H}$. Mit dem Lösungsansatz $\boldsymbol{K}_0 = \boldsymbol{k}_0 + \Lambda \boldsymbol{e}_n$, s. Gl. 2.48 erhält man:

$$\Lambda = \frac{k_0 \delta_0}{\gamma_0}. \tag{2.61}$$

Man erhält dann:

$$\delta_H = \frac{1}{b}\delta_0 + \frac{1}{2}\alpha. \tag{2.62}$$

Der *Asymmetrieparameter* b ist durch:

$$b = \frac{\boldsymbol{e}_n \cdot \boldsymbol{k}_0}{\boldsymbol{e}_n \cdot (\boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{H})} = \frac{\gamma_0}{\gamma_H}, \tag{2.63}$$

gegeben. Der *Abweichungsparameter* α lautet:

$$\alpha = \frac{2\boldsymbol{k}_0 \cdot \boldsymbol{H} + \boldsymbol{H}^2}{k_0^2}. \tag{2.64}$$

Gleichung 2.62 setzt voraus, dass $b = 0$ oder $b = \infty$ ausgeschlossen werden müssen. Diese Fälle entsprechen der Situation, dass die einfallende oder die gestreute Welle sich parallel zur Oberfläche ausbreitet. Diese Spezialfälle sollen hier nicht behandelt werden. Die Determinante der Koeffizientenmatrix der Gl. 2.57-2.60 muss verschwinden, damit es nichttrivale Lösungen für $\boldsymbol{D}$ gibt. Daraus ergibt sich die Gleichung:

$$(2\delta_0 - \chi_0)\left(\frac{2}{b}\delta_0 - \chi_0 + \alpha\right) = C^2 \chi_H \chi_{\bar{H}}. \qquad (2.65)$$

Für die $\boldsymbol{s}$-Polarisation ist $C = 1$ und für die $\boldsymbol{p}$-Polarisation gilt $C = \cos 2\theta$. Aus Gl. 2.65 folgt:

$$\delta_{0(1)} = \frac{1}{2}\left(\chi_0 - \zeta + \sqrt{q + \zeta^2}\right), \quad \delta_{0(2)} = \frac{1}{2}\left(\chi_0 - \zeta - \sqrt{q + \zeta^2}\right), \qquad (2.66)$$

es ist

$$\zeta = \frac{1-b}{2}\chi_0 + \frac{b}{2}\alpha \qquad (2.67)$$

$$q = bC^2 \chi_H \chi_{\bar{H}}. \qquad (2.68)$$

Ist nun die Determinante gleich Null, so ergibt sich die Lösung für die elektrischen Verschiebungen bis auf einen konstanten Faktor zu:

$$x_s = \frac{D_{Hs}}{D_{0s}} = \frac{2\delta_0 - \chi_0}{C\chi_{\bar{H}}}. \qquad (2.69)$$

Aus Gl. 2.66 ergeben sich die Lösungen:

$$x_1 = \frac{-\zeta + \sqrt{q + \zeta^2}}{C\chi_{\bar{H}}}, \quad x_2 = \frac{-\zeta - \sqrt{q + \zeta^2}}{C\chi_{\bar{H}}}. \qquad (2.70)$$

Jetzt kann man die dielektrischen Verschiebungen der einfallenden bzw. der gestreuten Welle innerhalb des Kristalls schreiben als:

$$\boldsymbol{D}_0 = (D_{0(1)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_1 z} + D_{0(2)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_2 z})\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r} - \omega_0 t)} \qquad (2.71)$$

$$\boldsymbol{D}_H = (x_1 D_{0(1)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_1 z} + x_2 D_{0(2)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_2 z})\mathrm{e}^{\mathrm{i}[(\boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{H})\cdot\boldsymbol{r} - \omega_0 t]}. \qquad (2.72)$$

Dabei ist $z = \boldsymbol{e}_n \cdot \boldsymbol{r}$ die Eindringtiefe der Welle in den Kristall. Für ϕ gilt:

$$\phi_{1,2} = (k_0 \delta_{0(1,2)})/\gamma_0. \qquad (2.73)$$

Durch die Randbedingungen Gl. 2.41-2.44 sind die dielektrischen Verschiebungen der einfallenden Welle innerhalb und außerhalb des Kristalls miteinander verknüpft. Liegt die Oberflächennormale in der Streuebene, so sind die $\boldsymbol{s}$-Komponenten von $\boldsymbol{D}$ parallel zur Kristalloberfläche und man kann die Stetigkeit der Tangentialkomponente von $\boldsymbol{E}$ (vergl. Gl. 2.43) benutzen. Nutzt

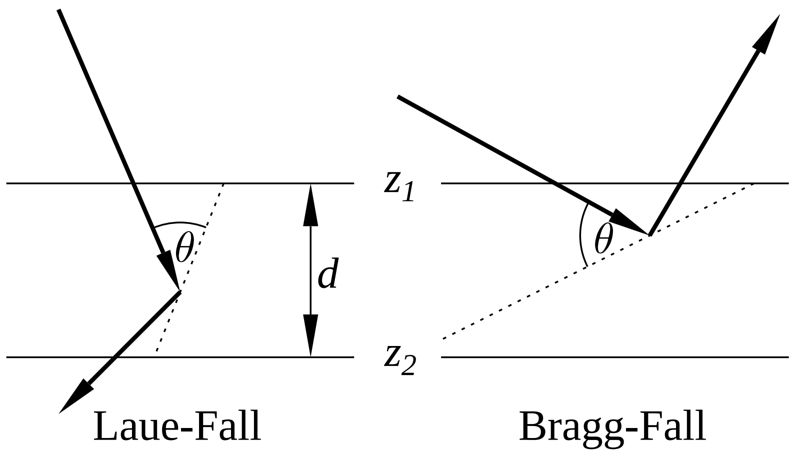


Abb. 2.2: Geometrie des Laue- und des Bragg-Falls

man wieder aus dass $1+\delta_0 \approx 1+\delta_H \approx 1$ gilt, so ergibt sich aus der ersten Randbedingung:

$$D_{0(1)} + D_{0(2)} = E_0^{\mathrm{vac}}, \tag{2.74}$$

wobei E_0^{vac} die Amplitude der einfallenden Welle im Vakuum ist. Die Randbedingung, die nun die gestreute Welle innerhalb des Kristalls mit der außerhalb verbindet, kann zwei Formen annehmen:

Der Laue-Fall Die gestreute Welle verlässt den Kristall über die untere Fläche, für die $\boldsymbol{e}_n \cdot \boldsymbol{r} = z_2$ gilt, dann ist $b > 0$

Der Bragg-Fall Die gestreute Welle verlässt den Kristall über die obere Fläche, für die $\boldsymbol{e}_n \cdot \boldsymbol{r} = z_1$ gilt, dann ist $b < 0$.

Beide Fälle sind in Abb. 2.2 skizziert. Die Gesamtdicke des Kristalls ist $d = z_2 - z_1$. Der Fall, dass eine der Wellen sich parallel zu einer der Oberflächen ausbreitet, soll ausgeschlossen werden. Die zweite Randbedingung wird dann im Laue-Fall zu:

$$x_1 D_{0(1)} + x_2 D_{0(2)} = 0, \tag{2.75}$$

bzw. im Bragg-Fall zu:

$$c_1 x_1 D_{0(1)} + c_2 x_2 D_{0(2)} = 0, \tag{2.76}$$

hierin ist: $c_{1,2} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_{1,2} d}$.

In beiden Fällen sind bereits analytische Lösungen für die Amplitude der gestreuten Welle innerhalb des Kristalls vorhanden (Batterman und Cole, 1964). Im folgendem werden die Wellenfelder innerhalb und außerhalb des Kristalls für den Bragg-Fall besprochen.

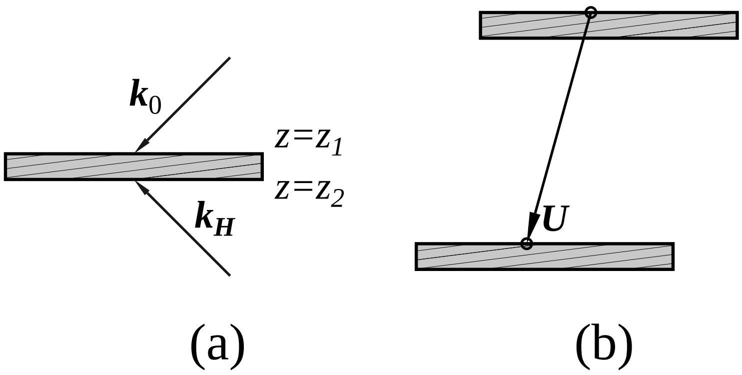


Abb. 2.3: Skizze der möglichen Streugeometrien. (a) Einfall auf die vordere bzw. hintere Kristalloberfläche. (b) Verschiebung des Kristalls

2.2.4 Das Wellenfeld innerhalb des Kristalls und im Vakuum

Für die später folgenden Betrachtungen über das Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer soll ein geschlossener Ausdruck für das Amplituden-Verhältnis x im Zwei-Strahlfall (s. Gl. 2.69), hergeleitet werden. Es werden zwei Fälle, wie in Abb. 2.3(a) gezeigt, unterschieden: eine auf die vordere Kristallfläche eintreffende Welle mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}_0$ und eine auf die hintere Kristallfläche eintreffender Welle mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}_H$. Abschließend soll noch der Einfluss einer Verschiebung des Kristalls besprochen werden, s. Abb. 2.3(b).

Einfall auf die vordere Oberfläche

Die Lösung Gl. 2.72 kann mit den Randbedingungen Gl. 2.74 und 2.76 für die beiden Grenzflächen bei $z = z_1$ und $z = z_2$ umgeschrieben werden zu:

$$c_1 D_{0(1)} + c_2 D_{0(2)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1 z_1} D_{0(1)} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2 z_1} D_{0(2)} = E_0^{\mathrm{vac}} \tag{2.77}$$

$$c_1 D_{H(1)} + c_2 D_{H(2)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1 z_2} D_{H(1)} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2 z_2} D_{H(2)} = 0. \tag{2.78}$$

Jetzt kann das Wellenfeld der vorwärtsgestreuten Welle $D_0(z)$ und der Bragg-Fall gestreuten Welle $D_H(z)$ innerhalb des Kristalls bei einer Tiefe z aufgestellt werden:

$$D_0(z) = E_0^{\mathrm{vac}} \frac{x_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2(z-d)} - x_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1(z-d)}}{x_1 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_2 d} - x_2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_1 d}} \tag{2.79}$$

$$D_H(z) = E_0^{\mathrm{vac}} \frac{x_1 x_2 \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2(z-d)} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1(z-d)}\right)}{x_1 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_2 d} - x_2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi_1 d}}. \tag{2.80}$$

Nun sollen allgemeine Ausdrücke für die Amplituden-Reflexions-, bzw. Transmissionskoeffizienten aufgestellt werden. An den beiden Kristalloberflächen, also an den Orten $\boldsymbol{r}_1$ und $\boldsymbol{r}_2$, folgen aus den obigen Gleichungen die Feldkomponenten des reflektierten Feldes D_r, und des transmittierten Feldes D_t:

$$D_r(\boldsymbol{r}_1) = E_0^{\mathrm{vac}} r^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_0+\boldsymbol{H})\cdot\boldsymbol{r}_1} \tag{2.81}$$

$$D_t(\boldsymbol{r}_2) = E_0^{\mathrm{vac}} t^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}_2}. \tag{2.82}$$

Es sind:

$$r^+ = x_1 x_2 \frac{1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1-\phi_2)d}}{x_2 - x_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1-\phi_2)d}} \tag{2.83}$$

$$t^+ = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1 d} \frac{x_2 - x_1}{x_2 - x_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1-\phi_2)d}}, \tag{2.84}$$

hierin ist r^+ der gesuchte Amplituden-Reflexionskoeffizient und t^+ der gesuchte Amplituden-Transmissionskoeffizient für eine von vorn einfallende Welle. Wegen der Stetigkeit des Wellenfeldes an den Kristalloberflächen kann auch das Feld im Vakuum an einem beliebigen Ort $\boldsymbol{r}$ bestimmt werden:

$$E_0(\boldsymbol{r}) = E_0^{\mathrm{vac}} t^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\cdot\boldsymbol{r}} \tag{2.85}$$

$$E_H(\boldsymbol{r}) = E_0^{\mathrm{vac}} \varrho^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_0+\boldsymbol{H})\cdot\boldsymbol{r}}, \tag{2.86}$$

mit

$$\varrho^+ = r^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz_1\alpha/2\gamma_H}. \tag{2.87}$$

Einfall auf die hintere Kristalloberfläche

Es soll nun angenommen werden, dass eine Welle mit dem Wellenvektor $\boldsymbol{k}_H$ und der Amplitude E_H^{vac} auf die hintere Kristalloberfläche ($z = z_2$) trifft. Man erhält analog zu den obigen Betrachtungen für das Wellenfeld innerhalb des Kristalls:

$$D_0(z) = E_H^{\mathrm{vac}} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2 z} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1 z}}{x_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2 d} - x_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1 d}} \tag{2.88}$$

$$D_H(z) = E_H^{\mathrm{vac}} \frac{x_2(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2 z} - x_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1 d})}{x_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2 d} - x_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1 d}}. \tag{2.89}$$

Daraus ergeben sich der Amplituden-Reflexionskoeffizient r^- für eine auf die hintere Kristalloberfläche eintreffende Welle und der Amplituden-Transmissionskoeffizient t^- zu:

$$r^- = \frac{1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1-\phi_2)d}}{x_2 - x_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1-\phi_2)d}} \tag{2.90}$$

$$t^- = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2 d} \frac{x_2 - x_1}{x_2 - x_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1-\phi_2)d}}. \tag{2.91}$$

Wegen der Stetigkeit des Wellenfeldes an den Kristalloberflächen kann auch hier das Feld im Vakuum an einem beliebigen Ort $\boldsymbol{r}$ bestimmt werden:

$$E_H(\boldsymbol{r}) = E_H^{\text{vac}} t^- \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_H\cdot\boldsymbol{r}} \tag{2.92}$$

$$E_H(\boldsymbol{r}) = E_H^{\text{vac}} \varrho^- \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}}, \tag{2.93}$$

mit

$$\varrho^- = r^- \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz_2\alpha/2\gamma_H}. \tag{2.94}$$

Einfluss einer Verschiebung des Kristalls

Wird der streuende Kristall verschoben um den Vektor $\boldsymbol{U}$, so gilt für die Suszeptibilität: $\chi(\boldsymbol{r}) \rightarrow \chi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{U})$. Für deren Fourierkomponenten ergibt sich also:

$$\chi_H \rightarrow \chi_H \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{U}}. \tag{2.95}$$

Für die oben gefundenen Amplituden-Reflexionskoeffizienten gilt daher:

$$\tilde{r}^+ = r^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{U}}, \quad \tilde{r}^- = r^- \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{U}}. \tag{2.96}$$

Die Amplituden-Transmissionskoeffizienten ändern sich durch die Verschiebung nicht. Wenn man $\boldsymbol{U}$ als ganzzahlige Linearkombination der Gittervektoren $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ und $\boldsymbol{c}$ darstellen kann, so ist das Skalarprodukt $\boldsymbol{H} \cdot \boldsymbol{U}$ ein ganzzahliges Vielfaches von 2π und die Amplituden-Reflexionskoeffizienten ändern sich durch die Verschiebung ebenfalls nicht. Bei den Amplituden-Transmissionskoeffizienten im Vakuum ϱ ist zusätzlich noch zu beachten, dass sich die Positionen der Kristalloberflächen ebenfalls ändern. Diese sind in den Formeln für ϱ^+ und ϱ^- explizit enthalten und müssen daher ebenfalls verändert werden.

2.2.5 Näherung für dicke Kristalle

Im folgenden Abschnitt wird ausschließlich der Bragg Fall behandelt. Ist b nicht genau -1, dieses ist der symmetrische Bragg Fall, so sind die (geometrischen) Querschnitte S_0 und S_H des einfallenden und des gestreuten Strahls in Vakuum unterschiedlich. Aus geometrischen Gründen ergibt sich: $S_H/S_0 = 1/|b|$. Die Reflektivität R ist mit den Intensitäten des einfallenden und des gestreuten Strahls I_0 und I_H, definiert durch:

$$R = \left(\frac{S_H}{S_0}\right)\left(\frac{I_H}{I_0}\right), \quad I_H = |D_H|^2, \quad I_0 = |E_0^{\text{vac}}|^2. \tag{2.97}$$

Setzt man Gl. 2.81 in Gl. 2.97 ein so erhält man:

$$R = \frac{1}{|b|}|r^+|^2. \tag{2.98}$$

Wegen Gl.2.83 ist Gl. 2.98 schwer interpretierbar.

Im folgenden soll angenommen werden, dass die Kristalldicke d hinreichend groß im Vergleich zu der effektiven Eindringtiefe d_e ist, d.h. dass gilt: $d \gg d_e$. Die Eindringtiefe ergibt sich aus Gl. 2.83 und 2.84 zu:

$$d_e = \frac{1}{\mathfrak{Im}(\phi_1 - \phi_2)}. \tag{2.99}$$

Mit dieser Annahme kann Gl. 2.83 in guter Näherung geschrieben werden als: $r^+ = x_1$. Nimmt man desweiteren an, dass keine Absorption auftritt und die Kristallstruktur punktsymmetrisch ist, d.h. dass $\mathfrak{Im}\chi = 0$ und $\chi_{H} = \chi_{\bar{H}}$ gilt, dann gilt für die Eindringtiefe:

$$d_e(y) = d_e(0)\frac{1}{\mathfrak{Im}\sqrt{y^2-1}}, \tag{2.100}$$

wobei

$$d_e(0) = \frac{\sqrt{\gamma_0|\gamma_H|}}{k|C\chi_H|} \tag{2.101}$$

die *Extinktionslänge* ist und

$$y = \frac{\chi_0(1-b)+\alpha b}{2C\chi_H\sqrt{|b|}}. \tag{2.102}$$

Aus den Gl. 2.66, 2.81, 2.98 und 2.102 erhält man die Näherung für halbunendliche Kristalle:

$$R(y) = \left|-y \pm \sqrt{y^2-1}\right|^2. \tag{2.103}$$

Der Graph von $R(y)$ ist in Abb. 2.4 gezeigt, in dem Bereich $-1 \leq y \leq +1$ gilt $R = 1$ d.h. Totalreflexion. Die Reflektivität lässt sich wegen Gl. 2.102 auch als Funktion des Abweichungsparameters α darstellen, wie ebenfalls in Abb. 2.4 dargestellt ist. Der Bereich in dem Totalreflexion auftritt liegt zwischen:

$$\alpha_{-1} \geq \alpha \geq \alpha_{+1}, \tag{2.104}$$

aus Gl. 2.102 folgt:

$$\alpha_{\pm 1} = \alpha_c \mp \frac{2|C\chi_H|}{\sqrt{|b|}} \tag{2.105}$$

$$\alpha_c = \mathfrak{Re}(\chi_0)\left(1 - \frac{1}{b}\right) \tag{2.106}$$

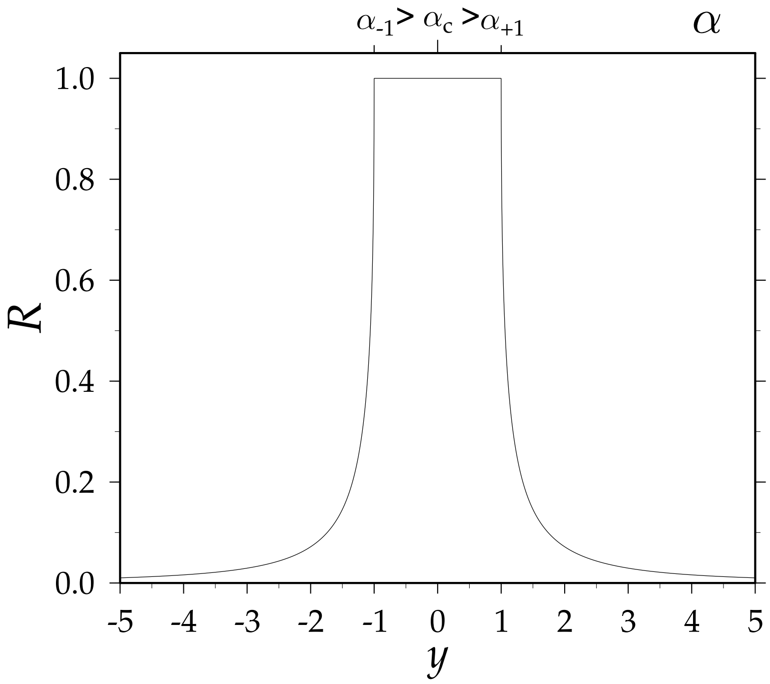


Abb. 2.4: Die Reflektivität R in Abhängigkeit von y und vom Abweichungsparameter α

Das Zentrum der Totalreflexion ist bei α_c zu finden, die Breite der Region $\Delta\alpha$ in der Totalreflexion auftritt ergibt sich mit Gl. 2.105 zu:

$$\Delta\alpha = |\alpha_{-1} - \alpha_{+1}| = 4|C\chi_H|/\sqrt{|b|}. \qquad (2.107)$$

Wegen Gl. 2.24 und Gl.2.64 folgt für den Abweichungsparameter:

$$\alpha = 4\left(\frac{\lambda}{2d_H}\right)\left(\frac{\lambda}{2d_H} - \sin\theta\right). \qquad (2.108)$$

Diese Gleichung wurde von Shvyd'ko et al. (1998) angegeben. Mit der Photonenenergie $E = hc/\lambda$ kann man auch schreiben:

$$\alpha = 4\frac{E_H}{E}\left(\frac{E_H}{E} - \sin\theta\right), \qquad (2.109)$$

wobei

$$E_H = \frac{1}{2}H\hbar c = \frac{hc}{2d_H} \qquad (2.110)$$

die *Braggenergie* ist. Wird eine feste Wellenlänge $\lambda = const$ verwendet, so ergibt sich:

$$\alpha = 4\sin\theta_{\mathcal{B}}(\sin\theta_{\mathcal{B}} - \sin\theta), \qquad (2.111)$$

wobei der Braggwinkel $\theta_{\mathcal{B}}$ durch Gl. 2.24 definiert ist.

Mit der Definition:

$$w_H = -2\mathfrak{Re}\chi_0 \frac{d_H^2}{\lambda^2} \frac{b-1}{2b}, \tag{2.112}$$

kann das Zentrum der Region, in der Totalreflexion auftritt, einfacher dargestellt werden. Für die zentrale Energie E_c, den zentralen Winkel θ_c und die zentrale Wellenlänge λ_c ergibt sich:

$$E_c \sin\theta_c = E_H(1 + w_H) \tag{2.113}$$

$$2d_H \sin\theta_c = \lambda_c(1 + w_H). \tag{2.114}$$

Gleichung 2.114 ist die *dynamische* Braggbedingung, sie unterscheidet sich nur durch den Term w_H von Gl. 2.24.

Für die relative Breite der Photonenenergie ε_H gilt wegen Gl. 2.107 und Gl. 2.108:

$$\varepsilon_H = \frac{\Delta\alpha}{4\sin^2\theta} = \frac{|C\chi_H|}{\sqrt{|b|}\sin^2\theta} = \frac{\Delta E}{E}. \tag{2.115}$$

Weil nach Gl. 2.34 χ_H proportional zu λ^2 ist und $\lambda^2/\sin^2\theta = 4d_H^2$ ist, ist die relative Energiebreite ε_H eines Reflexes eine Konstante.

Entwickelt man $\sin\theta$ in einer Taylorreihe um $\theta_{\mathcal{B}}$, so erhält man:

$$\sin\theta = \sin\theta_{\mathcal{B}} + (\theta - \theta_{\mathcal{B}})\cos\theta_{\mathcal{B}} - \frac{1}{2}(\theta - \theta_{\mathcal{B}})^2 \sin\theta_{\mathcal{B}} - \cdots \tag{2.116}$$

Berücksichtigt man nur den linearen Term in $(\theta - \theta_{\mathcal{B}})$, so wird Gl. 2.111 zu:

$$\alpha = 2(\theta_{\mathcal{B}} - \theta)\sin 2\theta_{\mathcal{B}}, \tag{2.117}$$

dies ist aber für $\theta_{\mathcal{B}} \approx 90°$ nicht mehr praktikabel, denn dann ist $\cos\theta_{\mathcal{B}} \approx 0$ und der Term in $(\theta - \theta_{\mathcal{B}})^2$ nicht mehr vernachlässigbar. Für den Fall $\theta_{\mathcal{B}} \approx 90°$ kann die Näherung:

$$\alpha = 2(\Theta^2 - 2\varepsilon) \tag{2.118}$$

mit

$$\Theta = \theta - 90° \quad \text{und} \quad \varepsilon = \frac{E - E_H}{E_H} \tag{2.119}$$

benutzt werden, wie von Caticha und Caticha-Ellis (1982) hergeleitet wurde.

Die Breite der Reflexionskurve kann nun in Abhängigkeit von θ über Gl. 2.117 bzw. Gl. 2.118 abgeschätzt werden. Für die Winkelbreite im Fall $\theta < 90°$ ergibt sich:

$$\Delta\theta = \frac{\Delta\alpha}{2\sin 2\theta} = \frac{2|C\chi_H|}{\sqrt{|b|}\sin 2\theta}. \tag{2.120}$$

Für die Winkelbreite im Rückstreufall, $\theta \simeq 90°$ gilt:

$$\Delta\theta = \sqrt{\Delta\alpha} = 2\sqrt{|C\chi_H|}. \tag{2.121}$$

Die Winkelbreite für den Rückstreufall ist proportional zu $\sqrt{|\chi_H|}$ und nicht wie im Fall $\theta < 90°$ proportional zu $|\chi_H|$. Da bei den hier betrachteten Photonenenergien $|\chi_H| \leq 10^{-5}$ gilt, ist die Winkelbreite im Falle der Rückstreuung deutlich größer als bei der Braggstreuung mit $\theta < 90°$. Die relative Energiebreite ist in beiden Fällen gleich, allerdings ist die absolute Energiebreite bei der Rückstreuung am kleinsten, weil dort E_c für einen gegebenen Reflex am kleinsten ist.

2.3 Mehrstrahlfall bei exakter Rückstreuung

Die Braggbedingung kann für mehrere reziproke Gittervektoren gleichzeitig erfüllt sein, was zu Mehrstrahl-Braggstreuung führt. Dies passiert normalerweise nur in Ausnahmefällen, wenn allerdings eine der gestreuten Wellen eine exakt rückgestreute Welle ist, dann ist Mehrstrahl-Braggstreuung eher die Regel als die Ausnahme.

Betrachtet man Mehrstrahlfälle unter der Bedingung, dass eine der Wellen eine rückgestreute Welle ist, so treten zusätzliche Reflexionen immer paarweise auf (Shvyd'ko, 2004; Sutter, 2000; Stepanov et al., 1991). Im folgenden Abschnitt wird dieser Umstand mithilfe der kinematischen Näherung besprochen. Es schließen sich Betrachtungen im Rahmen der dynamischen Theorie an, beide Diskussionen folgen im wesentlichen Shvyd'ko (2004).

2.3.1 Kinematische Betrachtung

Ist die Braggbedingung für die exakte Rückstreuung mit dem reziproken Gittervektor $\boldsymbol{N}$ für eine einfallende Welle mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}_0$ erfüllt, dann gilt:

$$\boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{N} = \boldsymbol{k}_N = -\boldsymbol{k}_0 \Rightarrow \boldsymbol{k}_0 = -\boldsymbol{N}/2. \tag{2.122}$$

Wenn die Braggbedingung nun gleichzeitig auch noch für einen anderen reziproken Gittervektor $\boldsymbol{B}$ erfüllt ist, dann kann man das Braggsche Gesetz in vektorieller Form, Gl. 2.22, schreiben als:

$$\boldsymbol{B^2} + 2\boldsymbol{B}\boldsymbol{k}_0 = 0. \tag{2.123}$$

Mithilfe von Gl. 2.122 kann Gl. 2.123 verändert werden zu:

$$\boldsymbol{B^2} - \boldsymbol{B}\boldsymbol{N} = 0. \tag{2.124}$$

Gleichung 2.124 ist die Bedingung für die gleichzeitige Braggstreuung mit den reziproken Gittervektoren $\boldsymbol{N}$ und $\boldsymbol{B}$. Ist Gl. 2.124 gültig, dann ist die Braggbedingung ebenfalls für einen weiteren reziproken Gittervektor $\boldsymbol{L}$ erfüllt:

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{N} - \boldsymbol{B}. \tag{2.125}$$

Diese Behauptung kann durch Einsetzen von Gl. 2.125 in Gl. 2.124 bewiesen werden. Das Ergebnis dieser Umformung ist eine Gleichung für $\boldsymbol{L}$ die Gl. 2.124 entspricht:

$$\boldsymbol{L^2} - \boldsymbol{L}\boldsymbol{N} = 0. \tag{2.126}$$

Wenn also eine zusätzliche Reflexion mit Streuvektor $\boldsymbol{B}$ existiert, dann ist

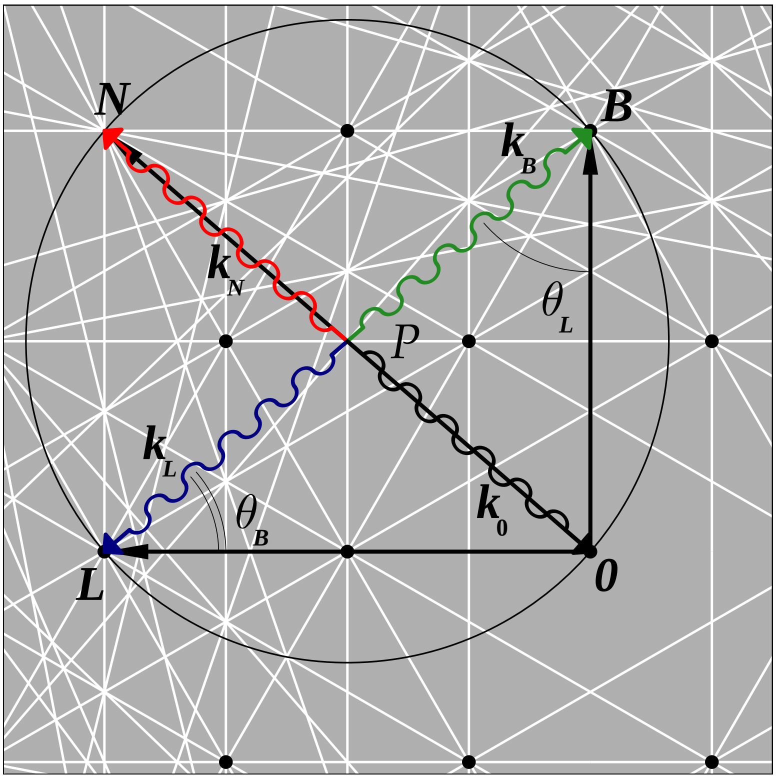


Abb. 2.5: Zweidimensionales hexagonales Gitter, geometrische Konstruktion des Vierfachstreufalls. Die reziproken Gittervektoren $\boldsymbol{N}$, $\boldsymbol{B}$ und $\boldsymbol{L}$ sind die Streuvektoren für die einfallende Welle mit Wellenvektor $\boldsymbol{k}_0$. Die Wellenvektoren der gestreuten Wellen sind $\boldsymbol{k}_N$, $\boldsymbol{k}_B$ und $\boldsymbol{k}_L$. Der Ursprung der Streuvektoren ist der Knotenpunkt P. Die Braggbedingung ist für alle drei Streuvektoren erfüllt. Die Winkel θ_B bzw. θ_L sind die Braggwinkel der Bragg- Reflexionen mit den Streuvektoren $\boldsymbol{B}$ bzw. $\boldsymbol{L}$.

diese gleichzeitig von einer weiteren Reflexion mit Streuvektor $\boldsymbol{L}$ begleitet. Aus Gl. 2.124, 2.125 und 2.126 erhält man:

$$\boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{B}^2 = \boldsymbol{N}^2. \tag{2.127}$$

Gleichungen 2.125 und 2.127 zeigen, dass $\boldsymbol{N}$, $\boldsymbol{B}$ und $\boldsymbol{L}$ ein rechtwinkliges Dreieck bilden mit:

$$\boldsymbol{B} \perp \boldsymbol{L}, \qquad \boldsymbol{N} = \boldsymbol{B} + \boldsymbol{L}. \tag{2.128}$$

Die drei reziproken Gittervektoren $\boldsymbol{N}$, $\boldsymbol{B}$ und $\boldsymbol{L}$ liegen in einer Ebene, der *Grundebene.* Die Wellenvektoren der zusätzlichen Wellen sind durch:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{k}_B &= \boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{B}, \\ \boldsymbol{k}_L &= \boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{L} \end{aligned} \tag{2.129}$$

gegeben. Kombiniert man Gl. 2.122, 2.128 und 2.129 erhält man:

$$\boldsymbol{k}_B = -\boldsymbol{k}_L, \tag{2.130}$$

d.h. die zusätzlichen Wellen breiten sich in entgegengesetzten Richtungen aus.

Gleichung 2.128 zeigt, dass zusätzliche Reflexionen immer paarweise gefunden werden. In Abb. 2.5 ist dies für ein zweidimensionales hexagonales Kristallgitter illustriert.

2.3.2 Dynamische Betrachtung des n-Strahlfalles

Die fundamentalen Gleichungen 2.39, 2.40 bilden zusammen mit den Randbedingungen Gl. 2.41 bis 2.44 und Gl.2.45 den allgemeinen Ausgangspunkt für die Diskussion des n-Strahlfalles. Wie bereits in Abschnitt 2.2.1 erwähnt, kann die allgemeine Lösung der Gl. 2.39 und 2.40 aus der Bedingung gewonnen werden, dass die Determinante der Koeffizientenmatrix verschwindet. Diese Determinante hat die Ordnung $4n$, eine einfach Lösung des Problems ist daher meist nur numerisch möglich. Wenn man allerdings die gleichen Annahmen wie bei der Diskussion des Zwei-Strahlfalls in Gl. 2.55 macht, so reduziert sich die Koeffizientenmatrix auf die Ordnung $2n$.

Betrachtet man zusätzlich noch den Vier-Strahlfall in Rückstreuung, so sind die vier Streuvektoren koplanar. Die Polarisationsvektoren können somit wie bei der Diskussion des Zwei-Strahlfalles gewählt werden, vergl. Gl. 2.56. Die Koeffizientenmatrix kann dann auf die Ordnung n reduziert werden, dieses soll im folgenden Abschnitt genauer betrachtet werden.

2.3.3 Der Vier-Strahlfall in Rückstreugeometrie

Für die Streuvektoren wird die gleiche Bezeichnung wie in Abschnitt 2.3.1 benutzt. Für den Streuvektor der Rückstreuung $\boldsymbol{N}$ und die Streuvektoren der zusätzlichen Reflexionen $\boldsymbol{B}$ und $\boldsymbol{L}$ gilt: $\boldsymbol{N} = \boldsymbol{B} + \boldsymbol{L}$ mit $\boldsymbol{B} \perp \boldsymbol{L}$. Aus dem Braggschen Gesetz folgt unter der Bedingung exakter Rückstreuung in der kinematischen Näherung: $\boldsymbol{k}_0 \simeq -\boldsymbol{N}/2$. In Anlehnung an die Diskussion in Abschnitt 2.2.3 kann der Wellenvektor durch eine kleine Abweichung von $-\boldsymbol{N}/2$ beschrieben werden:

$$\boldsymbol{k}_0 = -\boldsymbol{N}/2 + \boldsymbol{q} \quad \text{mit} \quad |\boldsymbol{q}| \ll N. \tag{2.131}$$

Zur weiteren Beschreibung wird ein Koordinatensystem eingeführt, das mit den Streuvektoren verknüpft ist und durch die Einheitsvektoren:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{e}_n &= \boldsymbol{N}/N \\ \boldsymbol{e}_\perp &= \boldsymbol{L} \times \boldsymbol{B}/|\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{B}| \\ \boldsymbol{e}_\parallel &= \boldsymbol{e}_n \times \boldsymbol{e}_\perp \end{aligned} \tag{2.132}$$

aufgespannt wird. Jetzt kann die Abweichung $\boldsymbol{q}$ auch geschrieben werden als:

$$\boldsymbol{q}/k = \Theta_\parallel \boldsymbol{e}_\parallel + \Theta_\perp \boldsymbol{e}_\perp - \left[\varepsilon - \frac{1}{2}\left(\Theta_\parallel^2 + \Theta_\perp^2\right)\right] \boldsymbol{e}_n. \tag{2.133}$$

In der obigen Gleichung wurde die Näherung: $\cos\Theta \simeq 1 - \Theta^2/2$ für kleine Winkel benutzt. Die Winkel $\Theta_\parallel$, $\Theta_\perp$ beschreiben die Abweichung vom senkrechten Einfall auf die durch $\boldsymbol{N}$ beschriebenen Streuebenen. Der in Abschnitt 2.2.3 eingeführte Abweichungsparameter α kann wegen Gl. 2.64, 2.131 und 2.129 allgemein geschrieben werden als:

$$\alpha_H = \frac{\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{H}}{k^2}, \tag{2.134}$$

wobei für $\boldsymbol{H}$ die Vektoren $\boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{N}$, $\boldsymbol{B}$ und $\boldsymbol{L}$ stehen können. Mit Gl. 2.133 und 2.134 kann der Abweichungsparameter α_H als Funktion der Winkelabweichungen $\Theta_\parallel$ und $\Theta_\perp$ und der Energieabweichung $\varepsilon = (E - E_N)/E_N$ dargestellt werden. Die Braggenergie E_N ist durch: $E_N = |\boldsymbol{N}|hc/4\pi$ gegeben, wobei c die Vakuumlichtgeschwindigkeit ist. Für die Reflexionen mit Streuvektoren $\boldsymbol{N}, \boldsymbol{B}$ und $\boldsymbol{L}$ ergibt sich für die entsprechenden Abweichungsparameter:

$$\begin{aligned} \alpha_N &= 2\left(\Theta_\parallel^2 + \Theta_\perp^2\right) - 4\varepsilon \\ \alpha_B &= 2\Theta_\parallel \sin(2\theta_B) + \left[2\left(\Theta_\parallel^2 + \Theta_\perp^2\right) - 4\varepsilon\right] \sin^2\theta_B \\ \alpha_L &= -2\Theta_\parallel \sin(2\theta_L) + \left[2\left(\Theta_\parallel^2 + \Theta_\perp^2\right) - 4\varepsilon\right] \sin^2\theta_L. \end{aligned} \tag{2.135}$$

In Gl. 2.135 ist zu sehen, dass gilt: $\alpha_N = \alpha_B + \alpha_L$, weil $\theta_B + \theta_L = 90°$ ist. Wählt man die Polarisationsrichtungen wie in Abschnitt 2.2.3 besprochen, dann reduzieren sich wegen Gl. 2.56 die fundamentalen Gleichungen der dynamischen Theorie, Gl. 2.39 und 2.40, auf die Ordnung $n = 4$ und somit hat die Determinante der Koeffizientenmatrix ebenfalls die Ordnung $n = 4$. Das Eigenwertproblem kann durch Einbeziehung der Randbedingungen numerisch gelöst werden. Das Fortran-Programm NIMBUS bietet diese Möglichkeit (Shvyd'ko, 2003). Die Berechnungen im folgenden Abschnitt 2.4.2 und die des in Kapitel 3 vorgestellten Vier-Strahlfalles basieren auf diesem Programm.

2.4 Beispielrechnungen

Um die Eigenschaften der Bragg-Streuung unter Winkeln von $\theta \simeq 90°$ im Vergleich zur Bragg-Streuung unter kleineren Winkeln deutlich zu machen, werden zwei Zwei-Strahlfälle in α-Al_2O_3 bei gleicher Photonenenergie der einfallenden Welle verglichen.

Außerdem wird der Vier-Strahlfall, der bei der $(1\ 3\ \bar{4}\ 28)$-Rückstreuung in α-Al_2O_3 auftritt, besprochen. Dieser Reflex erlaubt es, wie bereits erwähnt, die Mössbauerstrahlung von ^{57}Fe zurückzustreuen und ist daher für den Bau eines kombinierten Fabry-Pérot Interferometers geeignet.

Die Rechnungen basieren auf der dynamischen Theorie, es werden keine Näherungen benutzt.

2.4.1 Zwei-Strahlfall

In Abb. 2.6 ist die mithilfe der dynamischen Theorie berechnete Winkel- bzw. Energieabhängigkeit der Transmission und der Reflektivität des $(2\ 2\ \bar{4}\ 0)$-Braggreflexes in α-Al_2O_3 gezeigt. Es wurde eine Kristalldicke von d = 1 mm angenommen, sowie eine Energie der einfallenden Photonen von E_c = 14310 eV. Weiterhin wird vorausgesetzt, dass die reflektierenden Atomebenen parallel zur Kristalloberfläche sind. Die Winkelabhängigkeit ist als Funktion des Einfallswinkels θ und als Funktion der Abweichung dieses Winkels von

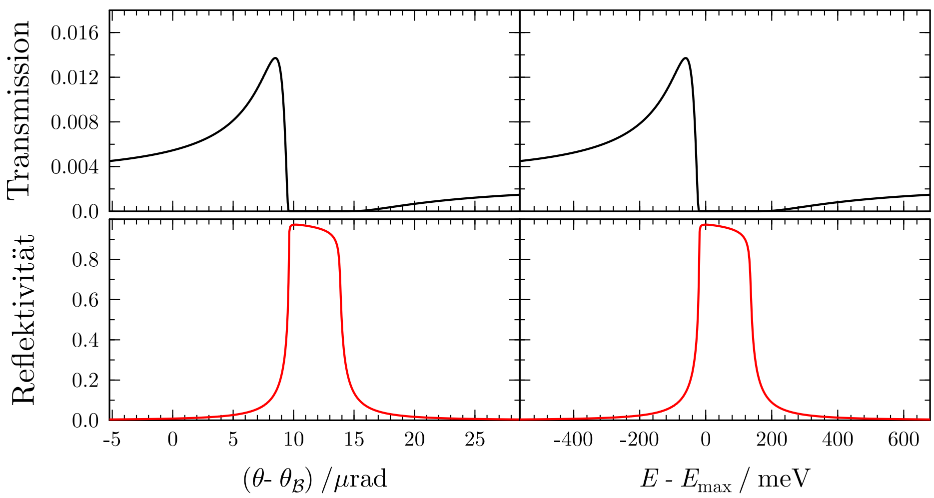


Abb. 2.6: Berechnete Transmission und Reflektivität des $(2\ 2\ \bar{4}\ 0)$-Reflexes von einem 1 mm dicken Saphir-Kristall. Links: Winkelabhängigkeit bei einer Photonenenergie von $E = 14310$ eV. Rechts: Energieabhängigkeit bei einem Einfallswinkel von $\theta = 21,35°$.

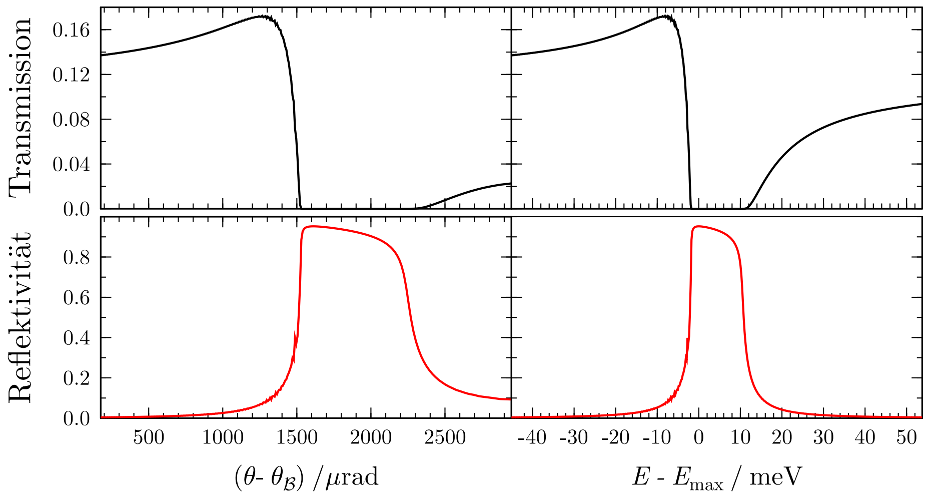


Abb. 2.7: Berechnete Transmission und Reflektivität des (0 0 0 30)-Reflexes von einem 1 mm dicken Saphir-Kristall. Links: Winkelabhängigkeit bei einer Photonenenergie von $E = 14310$ eV. Rechts: Energieabhängigkeit bei einem Einfallswinkel von θ nahe zu 90°.

dem Braggwinkel $\theta_{\mathcal{B}}$ aus der kinematischen Theorie Gl. 2.24, dargestellt. Die Energieabhängigkeit ist als Funktion der Photonenenergie E und als Funktion der Abweichung der Energie von der Energie $E_{\max}$, bei der die Reflektivität maximal ist, gezeigt. Die Breite der Reflexionskurven beträgt 4,52 μrad bzw. 165 meV.

In Abb. 2.7 ist die berechnete Winkel- bzw. Energieabhängigkeit der Transmission und der Reflektivität des (0 0 0 30)-Braggreflexes in α-Al_2O_3 gezeigt. Die angenommene Energie der einfallenden Photonen und die Kristalldicke ist wie im obigen Fall. Bei dieser Energie beträgt der Einfallswinkel $\theta \simeq 90°$. Die Winkelbreite der Reflexionskurve ist also durch Gl. 2.121 gegeben. Die Breite der Reflexionskurven beträgt hier 870 μrad bzw. 13,1 meV. Eine Eigenschaft der Rückstreuung wird hier im Vergleich nochmals deutlich: die hohe Winkelakzeptanz bei gleichzeitig kleiner Energiebreite, die für den Bau von Instrumenten mit hoher Energieauflösung wichtig ist.

2.4.2 Vier-Strahlfall

Gleichzeitig mit dem (1 3 $\bar{4}$ 28)-Reflex in Rückstreuung können zwei weitere Reflexe mit den Streuvektoren:

$$\boldsymbol{B} = [\bar{1}\ 1\ 0\ 28] \tag{2.136}$$

$$\boldsymbol{L} = [2\ 2\ \bar{4}\ 0] \tag{2.137}$$

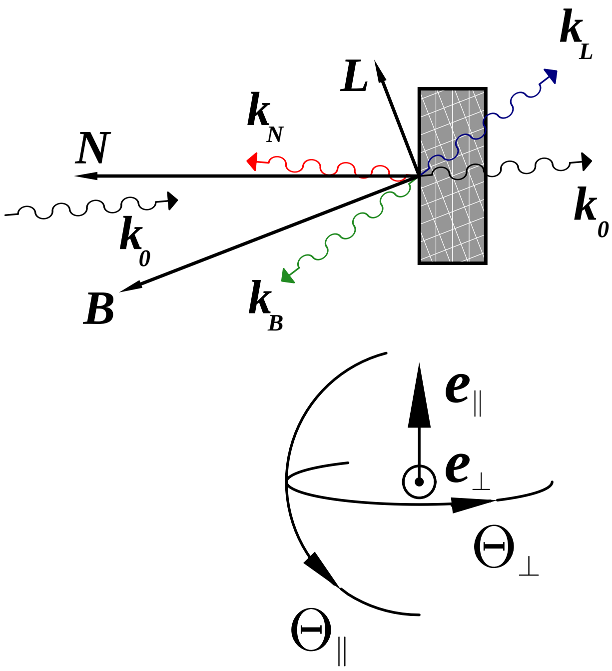


Abb. 2.8: Angenommene Streugeometrie, die den Rechnungen zugrundeliegt. Die Streuvektoren $\boldsymbol{N}$, $\boldsymbol{B}$ und $\boldsymbol{L}$ liegen in der Grundebene. $\Theta_\parallel$ ist eine der beiden Winkelabweichungen vom senkrechten Einfall von $\boldsymbol{k}_0$ auf die reflektierenden $(1\ 3\ \bar{4}\ 28)$-Atomebenen. Diese Winkelabweichung liegt in der Grundebene. $\Theta_\perp$ ist die zweite der beiden Winkelabweichungen vom senkrechten Einfall, sie liegt in einer Ebene senkrecht zu der Grundebene. Die Kristalloberfläche ist parallel zu den rückreflektierenden Atomebenen.

angeregt werden.

Die Reflektivität und die Transmission wird als Funktion der in Abschnitt 2.3.3 definierten Parameter $\Theta_\parallel$ und $\Theta_\perp$ berechnet. Die Parameter entsprechen zwei Winkelabweichungen vom senkrechten Einfall der einfallenden Welle auf die zu $\boldsymbol{N}$ senkrechten Streuebenen.

In Abb. 2.8 ist die Streugeometrie gezeigt, die für die Rechnungen angenommen wurde. Die Grundebene fällt mit der Zeichenebene zusammen. $\Theta_\parallel$ ist eine der beiden Winkelabweichungen vom senkrechten Einfall von $\boldsymbol{k}_0$ auf die reflektierenden $(1\ 3\ \bar{4}\ 28)$-Atomebenen. Die Richtung dieser Winkelabweichung ist parallel zu der Grundebene, d.h. sie entspricht einer Drehung um eine Achse senkrecht zu der Grundebene und zu dem Streuvektor $\boldsymbol{N}$.

$\Theta_\perp$ ist die zweite der beiden Winkelabweichungen vom senkrechten Einfall. Sie entspricht einer Drehung um eine Achse parallel zu der Grundebene und senkrecht zu dem Streuvektor $\boldsymbol{N}$, d.h. die Richtung dieser Winkelabweichung ist senkrecht zu der Grundebene. Die Kristalloberfläche soll parallel zu

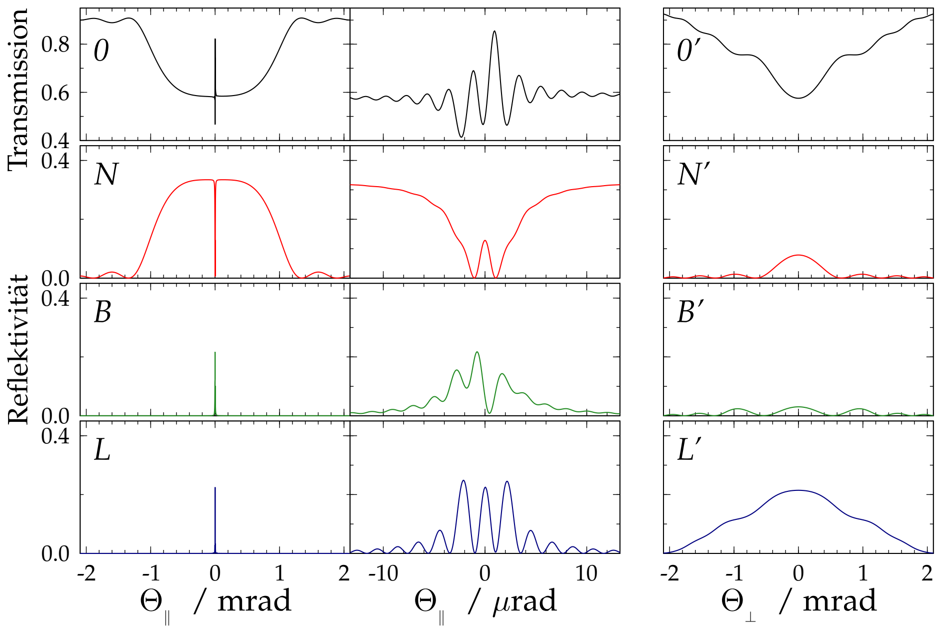


Abb. 2.9: Berechnete Winkelabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission. Die Streugeometrie ist in Abb. 2.8 gezeigt. Die Rechnungen wurden für eine Welle der Photonenenergie E=14,419 keV ausgeführt, die auf einen 50 μm dicken perfekten Saphir-Einkristall fällt. Die errechnete Winkelabhängigkeit der Transmission als Funktion von $\Theta_\parallel$, mit $\Theta_\perp = 0$ ist in *0* dargestellt. Für die rückgestreute, die Bragg-Fall gestreute und die Laue-Fall gestreute Welle ist die Reflektivität in N, B bzw. L dargestellt. In der rechten Spalte ist die Winkelabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission von $\Theta_\perp$ zu sehen, (mit $\Theta_\parallel = 0$).

den reflektierenden $(1\,3\,\bar{4}\,28)$-Atomebenen sein. In dieser Anordnung sind die gestreuten Wellen mit den Wellenvektoren $\boldsymbol{k}_B$ bzw. $\boldsymbol{k}_L$ ein Bragg-Streufall bzw. ein Laue-Streufall.

In Abb. 2.9 sind die Ergebnisse der Rechnungen dargestellt. Die Rechnungen wurden für eine Welle der Photonenenergie E_c=14,419 keV ausgeführt, die auf einen 50 μm dicken perfekten α-Al_2O_3-Einkristall fällt. Die Kristalldicke von 50 μm wurde zum besseren Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen im folgenden Kapitel gewählt.

Die errechnete Winkelabhängigkeit der Reflektivität für die rückgestreute Welle als Funktion von $\Theta_\parallel$, mit $\Theta_\perp = 0$ ist in Abb. 2.9 (N) gezeigt. Die maximale Reflektivität von 37% wird über einen breiten Winkelbereich von etwa 1,3 mrad erreicht. In der Umgebung von $\Theta_\parallel = 0$ jedoch ist die Reflektivität über einen Winkelbereich von 4 μrad (FWHM) sehr stark reduziert.

Die errechnete Winkelabhängigkeit der Reflektivität für die Bragg-Fall gestreute Welle und die Laue-Fall gestreute Welle als Funktion von $\Theta_{\|}$, mit $\Theta_{\perp} = 0$, ist in Abb. 2.9 (B) bzw. (L) dargestellt. Die Winkelbreite der Region, in der die Reflektivität der beiden zusätzlichen Wellen nicht verschwindet, beträgt etwa 10 μrad. Die Maximalreflektivitäten betragen 17% bzw. 36% für den Bragg-Fall bzw. für den Laue-Fall. Die Interferenz von Wellen die von der vorderen und der hinteren Kristalloberfläche reflektiert werden führt zu einer zusätzlichen Struktur auf den Reflexionskurven.

Wenn $\Theta_{\|}$ bei $\Theta_{\|} = 0$ festgehalten wird und $\Theta_{\perp}$ variiert wird, kann eine Reflektivität von 37% in den Rückstreukanal überhaupt nicht erreicht werden, die Maximalreflektivität beträgt ungefähr 8% (vergl. Abb. 2.9(N').) Die Maximalreflektivität für den Bragg-Streufall ist 3% (Abb. 2.9(B')). Die Reflektivität in die Lauefall gestreute Welle dominiert, sie ist etwa 21%, siehe Abb. 2.9(L'). Der Winkelbereich in dem die zusätzlichen Wellen die Reflektivität in den Rückstreukanal beeinflussen ist um drei Größenordnungen breiter als im Fall der $\Theta_{\|}$-Abhängigkeit.

Der deutliche Unterschied zwischen den Ergebnissen für die $\Theta_{\|}$-Abhängigkeit und die $\Theta_{\perp}$-Abhängigkeit kann mit Gl. 2.135 erklärt werden, sie zeigt, dass α_N und somit die Kristall-Reflektivität für die rückgestreute Welle quadratisch von $\Theta_{\|}$ und $\Theta_{\perp}$ abhängt. α_B und α_L hängen ebenfalls quadratisch von $\Theta_{\perp}$ ab, allerdings hängen sie linear von $\Theta_{\|}$ ab. Eine Änderung von $\Theta_{\|}$ hat deswegen einen viel stärkeren Einfluss auf die Reflektivitäten als eine Änderung von $\Theta_{\perp}$.

Die Energieabhängigkeit für diesen Vier-Strahlfall ist in Abb. 2.10 gezeigt. Es zeigt sich, dass die maximale Reflektivität von 37% in den Rückstreukanal auch durch eine Variation der Photonenenergie bei exakter Rückstreuung nicht erreicht werden kann. Die maximale Reflektivität beträgt 25% bei einer Energiebreite von 17 meV (FWHM), s. Abb. 2.10(N). Für den Bragg-Streufall beträgt die Maximalreflektivität 19% bei einer Breite von 16 meV (FWHM), s. Abb. 2.10(B). Die Energiebreite des Laue-Streufalls beträgt 200 meV, die Reflektivität für diesen Fall wird durch die beiden anderen Streufälle deutlich beeinträchtigt, allerdings kann eine Maximalreflektivität von 39% bei Energien erreicht werden, die außerhalb des Bereichs liegen, in denen die beiden anderen Streufälle nennenswerte Reflektivitäten aufzeigen.

Die Reflektivität in den Rückstreukanal kann bis zu 90% betragen, wenn der Kristall mindestens 100 μm dick ist. In Abb. 2.11 ist die errechnete Winkelabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission für den gleichen Fall gezeigt, allerdings bei einer Kristalldicke von 1 mm. Es ergibt sich ein ähnliches Bild wie für den dünneren Kristall: bei einer Variation von $\Theta_{\|}$ wird die Maximalreflektivität (hier 88%) über einen großen Winkelbereich von etwa 1,2 mrad erreicht. Nur in der direkten Umgebung von $\Theta_{\|} = 0$ verringert sich

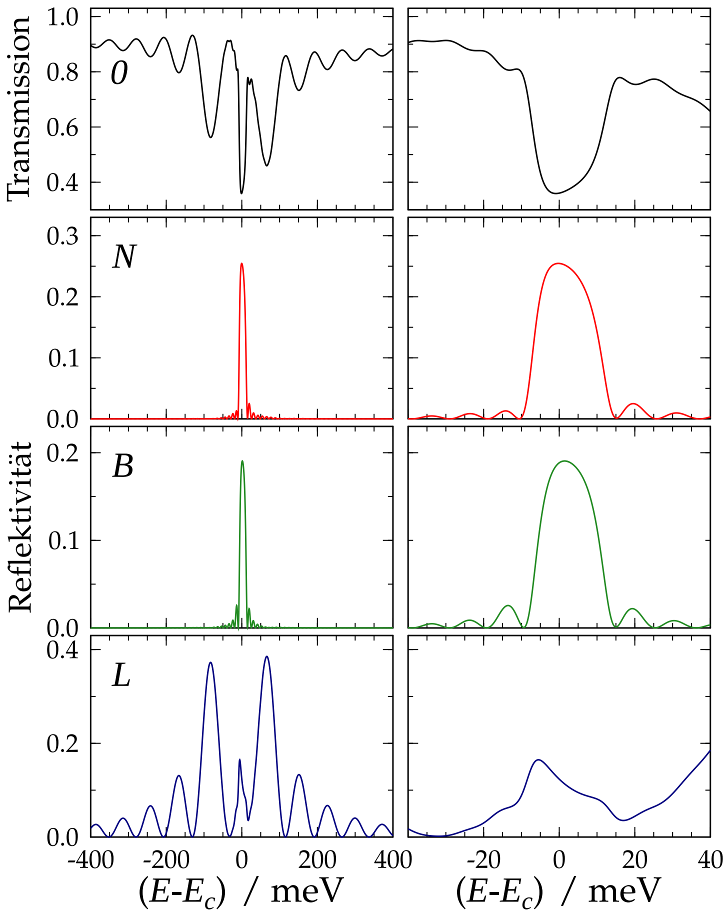


Abb. 2.10: Berechnete Energieabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission. Die Streugeometrie ist in Abb. 2.8 gezeigt. Die Rechnungen wurden für die exakte Rückstreuung von einem 50 μm dicken perfekten Saphir-Einkristall ausgeführt. Die errechnete Energieabhängigkeit der Transmission als Funktion der Energiedifferenz $E - E_c$ ist in *0* dargestellt. Für die rückgestreute, die Bragg-Fall gestreute und die Laue-Fall gestreute Welle ist die Reflektivität in N, B bzw. L dargestellt.

die Reflektivität in den Rückstreukanal auf bis zu 0% durch die Anregung der beiden zusätzlichen Wellen. Bis auf diese Verringerung entspricht die in Abb. 2.11(N) gezeigte Reflektivität gut der in Abb. 2.4 gezeigten Voraussage der dynamischen Theorie. Auch hier kann bei festem $\Theta_{\parallel} = 0$ die Maximalreflektivität in den Rückstreukanal durch eine $\Theta_{\perp}$-Variation nicht erreicht werden.

Abbildung 2.12 zeigt die dazugehörige Energieabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission. Auch hier ergibt sich qualitativ das gleiche Bild

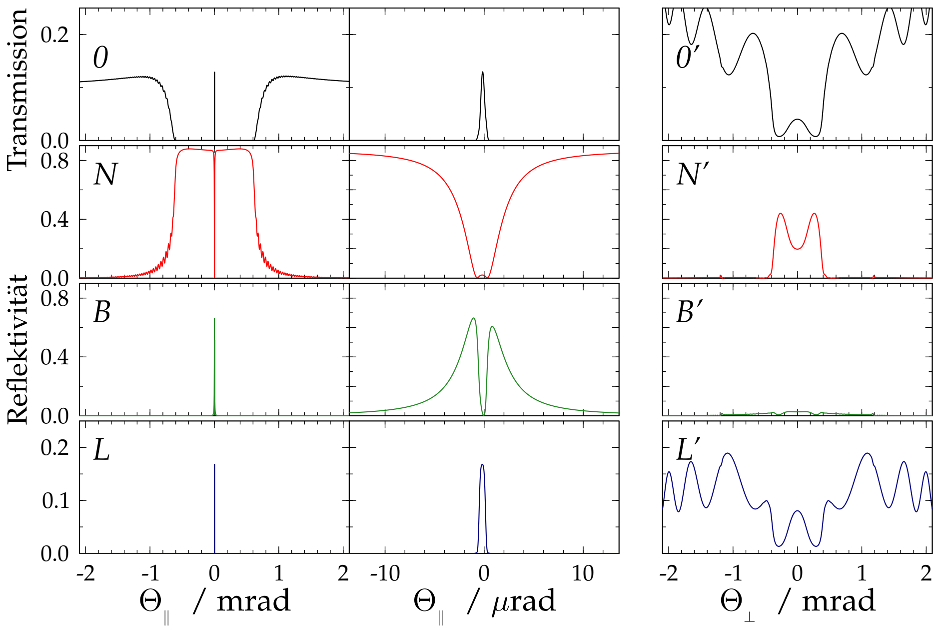


Abb. 2.11: Berechnete Winkelabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission. Die Streugeometrie ist in Abb. 2.8 gezeigt. Die Rechnungen wurden für eine Welle der Photonenenergie E=14,419 keV ausgeführt, die auf einen 1 mm dicken perfekten Saphir-Einkristall fällt. Die Notationen sind wie in Abb. 2.9

wie für den dünneren Kristall, die Energiebreiten der Reflexionskurven sind nahezu gleich, auch kann die Maximalreflektivität von 88% in den Rückstreukanal nicht erreicht werden.

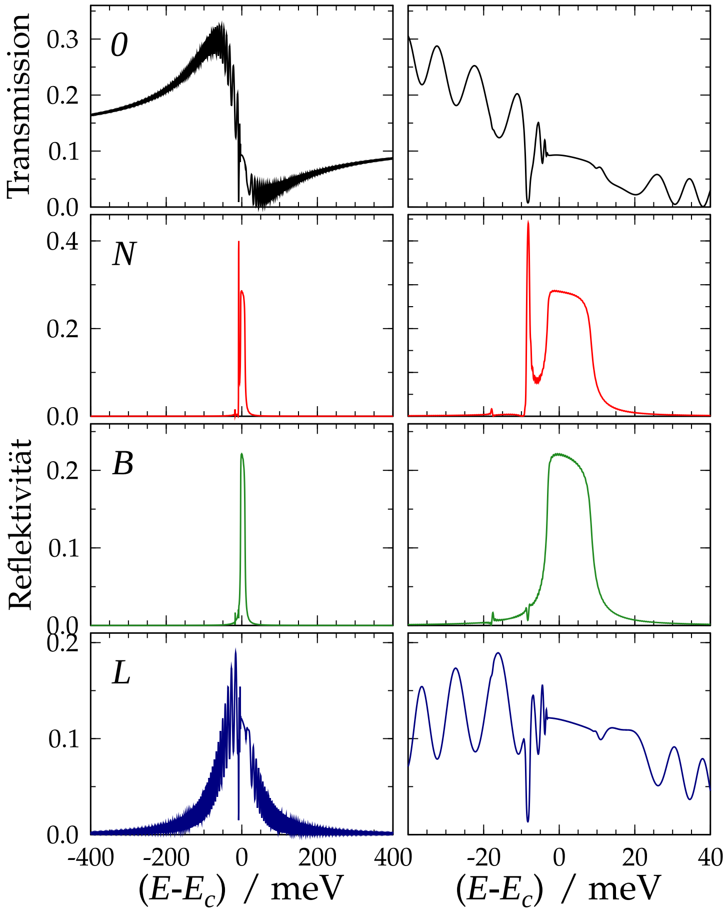


Abb. 2.12: Berechnete Energieabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission. Die Streugeometrie ist in Abb. 2.8 gezeigt. Die Rechnungen wurden für die exakte Rückstreuung von einem 1 mm dicken perfekten Saphir-Einkristall ausgeführt.

Kapitel 3

Vier-Strahlfall: Experiment

Mehrstrahlfälle wurden schon früher theoretisch und auch experimentell behandelt, allerdings nur bei Kristallen mit kubischem Gitter. Ein Vier-Strahlfall in Silizium wurde von Steyerl und Steinhauser (1979) theoretisch betrachtet. Sie kamen zu dem Ergebnis, dass der Einfluss der zusätzlichen Wellen auf die rückgestreute Welle durch eine kleine Winkelabweichung (10^{-4} rad) in beliebiger Richtung von exakter Rückstreuung verhindert werden kann.

Colella und Luccio (1984) gaben eine kurze Analyse für Vier-Strahlfälle, die auf einem von Colella (1974) entwickelten Formalismus beruht. Stepanov et al. (1991) haben einen Vier-Strahlfall in Germanium untersucht unter der Bedingung des streifenden Einfalls. Die theoretischen Betrachtungen von Stepanov et al. zeigen deutlich den Einfluss der zusätzlichen Reflexionen, welcher allerdings von ihnen experimentell nicht nachgewiesen werden konnte. Dies gelang Giles und Cusatis (1991) erstmals durch die Untersuchung des transmittierten Strahls. Ein Sechs-Strahlfall in Silizium wurde von Kohn et al. (1999) theoretisch untersucht. Ein 24-Strahlfall in Silizium wurde ausführlich von Sutter (2000) theoretisch sowie experimentell behandelt, siehe auch (Sutter et al., 2001).

In dieser Arbeit werden erstmals experimentelle Untersuchungen eines Mehrstrahlfalls in Saphir (α-Al_2O_3) vorgestellt. Saphir hat im Gegensatz zu Silizium und Germanium ein rhomboedrisches Kristallgitter. Untersucht wurde der Vier-Strahlfall, der bei der ($1\ 3\ \bar{4}\ 28$) Rückstreuung auftritt. Es wurden alle vier Reflexionen gleichzeitig betrachtet. Weil der Vier-Strahlfall der Mehrstrahlfall der kleinsten Ordnung ist, ist es von fundamentalem wissenschaftlichen Interesse, diesen Fall genauer zu untersuchen.

Darüberhinaus ist die ($1\ 3\ \bar{4}\ 28$) Rückstreuung in Saphir von Interesse, weil sie es erlaubt, die 14,4 keV Mössbauer Strahlung von ^{57}Fe zu reflektieren. Der ($1\ 3\ \bar{4}\ 28$) Rückstreureflex bietet somit die in Kapitel 1 erwähnte Möglichkeit, ein kombiniertes Fabry-Pérot Interferometer zu realisieren. Das praktische Ziel der Untersuchung ist es daher, einen Weg aufzuzeigen, wie die Anregung zusätzlicher Reflexionen und die damit einhergehende Verminderung der Rückstreuintensität, zu vermeiden ist. Die von Steyerl und Steinhauser (1979) gemachte Analyse ist bezüglich dieses Problems unvollständig.

3.1 Experimenteller Aufbau

Abb. 3.1 zeigt den schematischen Aufbau des Experiments. Die Messungen wurden an der Wiggler-Beamline BW4 am HASYLAB (DESY-Hamburg) durchgeführt. Röntgenstrahlung mit einer Photonenenergie von 14,419 keV wird von einem hochauflösenden Monochromator (HRM) auf eine Bandbreite von 7 meV monochromatisiert. Die so monochromatisierte Strahlung fällt auf den 50 μm dicken Saphirkristall (Al_2O_3). Ein Kristall hoher Qualität wurde durch Röntgentopographie mit weißer Synchrotronstrahlung ausgesucht (Chen et al., 2003). Die Oberfläche des Kristalls ist parallel zu den (0 0 0 1)-Atomebenen.

Die vertikale Divergenz des Röntgenstrahls ist durch den Monochromator bestimmt, sie beträgt 10 μrad. Die horizontale Divergenz wurde mithilfe der (1 1 1) Bragg-Reflexion eines Siliziumkristalles im channel-cut Design, der allerdings in Abb. 3.1 nicht gezeigt ist, auf etwa 20 μrad begrenzt.

Der semitransparente Detektor D weist einfallende und rückgestreute Röntgenpulse voneinander getrennt nach. Wegen der unterschiedlichen Flugzeit der Pulse können diese getrennt beobachtet werden. Die Dauer eines Pulses beträgt 150 ps. Durch die Verwendung einer 0,2 mm Lochblende als Autokollimator (A), der ca. 9 m entfernt vom Kristall aufgebaut ist, kann die Position der exakten Rückstreuung mit einer Genauigkeit von einigen

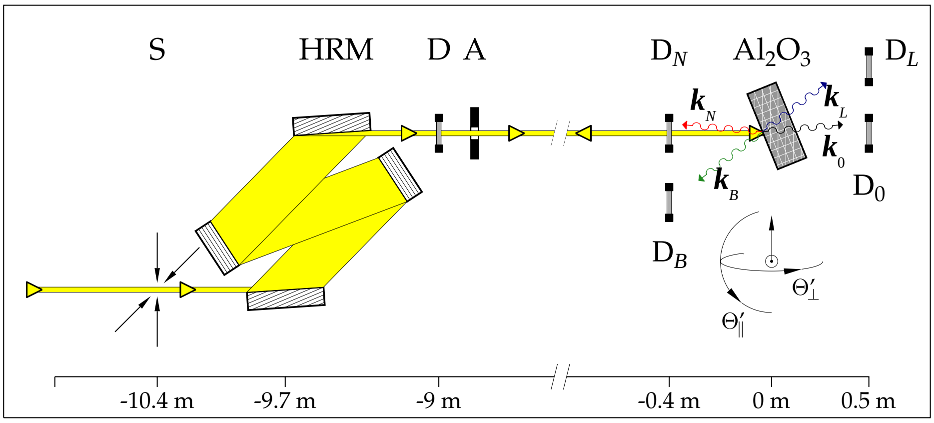


Abb. 3.1: Skizze des experimentellen Aufbaus. HRM: hochauflösender Monochromator mit einem Bandpass von 7 meV (FWHM); D_N, D_B, D_L und D_0: Detektoren, Avalanche Photo Dioden (APD) ; D: semitransparente APD die es zusammen mit dem Autokollimator A erlaubt, die Position der exakten Rückstreuung zu bestimmen; $\boldsymbol{k}_0$: Wellenvektor der einfallenden und der transmittierten Welle; $\boldsymbol{k_N}$, $\boldsymbol{k_B}$ und $\boldsymbol{k_L}$: Wellenvektoren der rückgestreuten, der Bragg-Fall gestreuten und der Laue-Fall gestreuten Welle. Während der Messungen wurde jeweils nur einer der beiden Winkel $\Theta'_\parallel$ und $\Theta'_\perp$ variiert.

μrad bestimmt werden. Die Intensität aller vier Bragg-gestreuten Wellen wird gleichzeitig von den Detektoren D_N, D_B, D_L und D_0 gemessen.

Die Reflektivität und die Transmission des Kristalls wird als Funktion der beiden Winkel $\Theta'_\perp$ und $\Theta'_\parallel$ gemessen (vergl. Abb. 3.1). Die Rotationsachse von $\Theta'_\perp$ ist senkrecht, die von $\Theta'_\parallel$ waagerecht. Beide Achsen liegen senkrecht zu der Richtung des einfallenden Strahls.

3.2 Durchführung

Zur Orientierung des Kristalls wurde eine Laueaufnahme in Rückstreuanordnung gemacht. Abbildung 3.2 zeigt eine für einen Saphirkristall berechnete Aufnahme, die dreifache Kristall-Symmetrie bezüglich der c-Achse ist gut zu erkennen. Die [-1 1 0 0]-Achse in deren Richtung der ($\bar{1}$ 1 0 28)-Reflex zu finden ist, ist leicht zu identifizieren. Die Lage der von den Streuvektoren aufgespannten Grundebene ist somit ebenfalls bekannt. Der Kristall wurde so montiert, dass die Rotationsachsen von $\Theta'_\perp$ und $\Theta'_\parallel$ mit den Rotationsachsen von $\Theta_\perp$ bzw. $\Theta_\parallel$, welche im vorigen Abschnitt definiert wurden, zusammenfallen.

Für die Messung der Winkelabhängigkeit der Reflektivität wurde jeweils nur einer der beiden Winkel variiert. Der jeweils andere Winkel wurde bei der Position exakter Rückstreuung festgehalten. Die Position exakter Rückstreu-

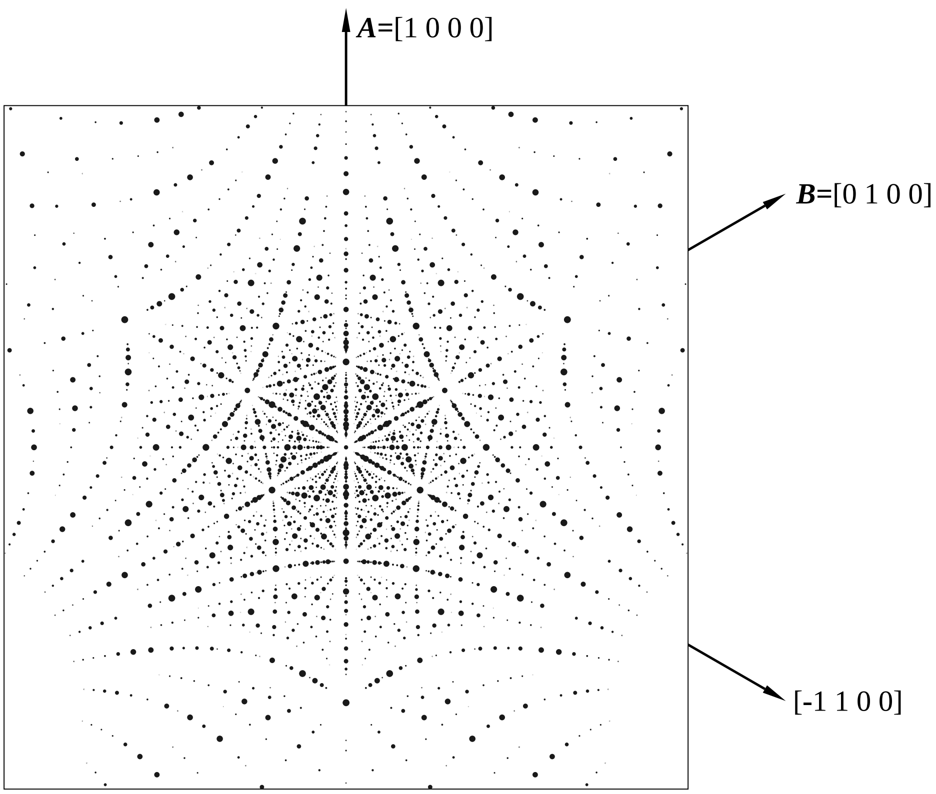


Abb. 3.2: Berechnete Laueaufnahme eines Saphirkristalls. Die Bildebene ist parallel zu den (0 0 0 n)-Kristallebenen, die Hauptachsen [1 0 0 0] und [0 1 0 0] sowie die Achse [$\bar{1}$ 1 0 0] sind gezeigt. Die dreifache Kristallsymmetrie bezüglich der c-Achse ([0 0 0 1]-Achse) ist deutlich zu erkennen.

ung wurde mit dem Autokollimator vor jeder Messung eingestellt.

Für die Messung der Energieabhängigkeit der Reflektivität wurde die Photonenenergie der einfallenden Strahlung variiert. Der Winkel $\Theta'_\perp$ wurde bei der Position exakter Rückstreuung festgehalten. Es wurden mehrere Messungen für unterschiedliche Winkeleinstellungen von $\Theta'_\parallel$ gemacht.

Für die Auswertung wird die Zählrate der APD-Detektoren auf die von dem Detektor D_N gemessene Einfallszählrate normiert. Die Detektoren waren vertikal ausgerichtet, daher trafen die Wellen außer bei den Detektoren D_B und D_L senkrecht auf die Detektoren auf. Da in den beiden Fällen der Einfallswinkel $\beta = 42,36^\circ$ beträgt, erhöht sich die Nachweiswahrscheinlichkeit der Detektoren um den Faktor $1/\cos\beta$. Die Zählrate beider Detektoren wird deswegen mit einem Faktor $\mathfrak{f}_{BL} = \cos\beta \simeq 0,74$ korrigiert. Die Transmission T_{D_N} der im einfallenden Strahl stehenden APD D_N wird mit dem dahinter stehenden Detektor D_0 bestimmt. Die Zählraten der anderen Detektoren wird mit dem Faktor $\mathfrak{f} = 1/T_{D_N} \simeq 1,71$ korrigiert, weil der auf sie einfallende Fluss durch den Detektor D_N um T_{D_N} verringert wird.

Für die Messung der rückgestreuten Strahlung wird ebenfalls die APD D_N genutzt, allerdings werden dafür nur die Photonen gezählt die ca. 2 ns nach dem Eintreffen des prompten Pulses auf den Detektor treffen. Es zeigt sich, dass durch das Setzen des dafür benötigten elektronischen Vetos nicht alle rückgestreuten Photonen erfasst werden. Der notwendige Korrekturfaktor $\mathfrak{f}_N$ ist durch die Annahme, dass die Summe aller gemessenen Reflektivitäten über den gesamten Messbereich konstant ist, bestimmbar. Aus den gemessenen Daten ergibt sich ein Wert von $\mathfrak{f}_N = 6,2$.

Die oben angegebenen Korrekturfaktoren sind bei jeder Auswertung unverändert berücksichtigt.

3.3 Ergebnisse

Die gemessenen Ergebnisse werden mit den Ergebnissen der dynamischen Theorie verglichen, welche mit dem Programm NIMBUS berechnet werden.

3.3.1 Winkelabhängigkeit der Reflektivität

In Abb. 3.3 ist die gemessene Winkelabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission mit Punkten dargestellt. Durchgehende Linien repräsentieren Berechnungen mithilfe der dynamischen Theorie, bei denen die Eigenschaften der einfallenden Strahlung berücksichtigt wurden. In den beiden linken Spalten ist die Abhängigkeit der Reflektivität und der Transmission von $\Theta'_{\|}$ auf unterschiedlichen Skalen gezeigt, mit festem Winkel $\Theta'_{\perp} = 0$. Die Transmission der vorwärts gestreuten Welle ist in Abb. 3.3($\mathit{0}$), die Reflektivität der rückgestreuten, der Bragg-Fall gestreuten und der Laue-Fall gestreuten Welle ist in Abb. 3.3(N),(B) bzw. (L), gezeigt. Die Photonenenergie beträgt $E_c = 14,42$ keV. In der rechten Spalte ist die Abhängigkeit der Transmission und der Reflektivität von $\Theta'_{\perp}$ gezeigt, mit festem Winkel $\Theta'_{\|} = 0$. Die experimentellen Ergebnisse stimmen gut mit den Ergebnissen der theoretischen Berechnungen überein.

Die beste Anpassung der Rechnungen an die experimentellen Ergebnisse wird erzielt, wenn man annimmt, dass der Kristall beim Einbau so arretiert wurde, dass die Grundebene um 1,2° im Uhrzeigersinn um $\boldsymbol{N}$ gegen die Senkrechte geneigt ist. Die Rotationsachsen von $\Theta'_{\|}$ und $\Theta'_{\perp}$ fallen also nicht genau, wie in Abschnitt 2.4.2 angenommen, mit denen von $\Theta_{\|}$ und $\Theta_{\perp}$ zusammen.

Die Winkelabhängigkeit der Reflektivität als Funktion von $\Theta'_{\|}$ mit festgehaltenem $\Theta'_{\perp} = 0$ zeigt, dass die Maximalreflektivität für die rückgestreute Welle 36% beträgt. Diese Reflektivität wird in einem Winkelbereich von 1,2 mrad erreicht, s. Abb. 3.3(N).

In der Umgebung von $\Theta'_{\|} = 0$ nimmt die Reflektivität in den Rückstreukanal auf 18% ab. Diese Abnahme findet in einem Winkelbereich von 13 μrad (FWHM) statt und zwar genau dort, wo die Intensität der beiden zusätzlichen Wellen deutlich zunimmt, s. Abb. 3.3(B), (L). Eine Winkelabweichung von der Position der exakten Rückstreuung von ca. 7 μrad reicht aus, um die Maximalreflektivität in den Rückstreukanal wiederzuerlangen.

Die Winkelabhängigkeit der Reflektivität als Funktion von $\Theta'_{\perp}$ zeigt, dass die Maximalreflektivität von 36% nicht erzielt werden kann, wenn $\Theta'_{\|}$ bei $\Theta'_{\|} = 0$ festgehalten wird. Eine Maximalreflektivität von 30% kann nur bei zwei *festen* Winkeln $\Theta'_{\perp} = -0,5$ mrad und $\Theta'_{\perp} = +0,5$ mrad erreicht werden. Der Winkelbereich, in dem die zusätzlich angeregten Wellen die Reflektivität

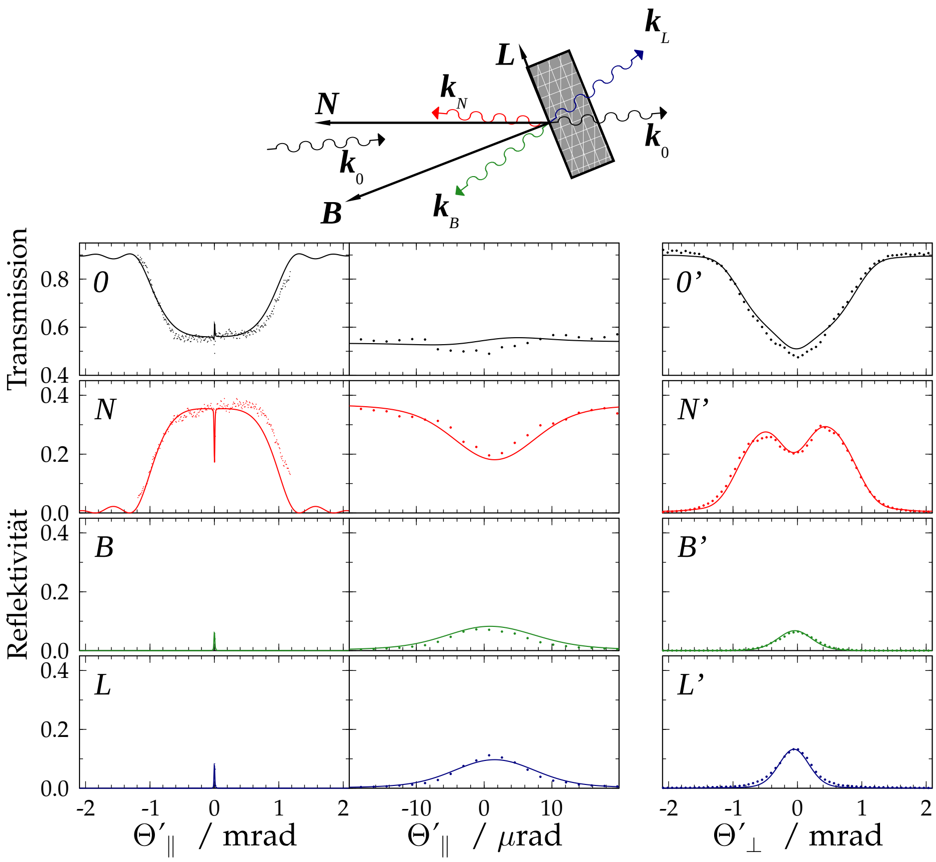


Abb. 3.3: Winkelabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission. Durchgehende Linien repräsentieren Berechnungen mithilfe der dynamischen Theorie, bei denen die Eigenschaften der einfallenden Strahlung berücksichtigt wurden. Die experimentellen Ergebnisse sind als Punkte dargestellt. In den beiden linken Spalten ist die Abhängigkeit der Reflektivität und der Transmission von $\Theta'_\parallel$ auf unterschiedlichen Skalen gezeigt, $\Theta'_\perp$ ist unverändert bei $\Theta'_\perp = 0$. Die Photonenenergie beträgt $E_c = 14,42$ keV. Die Transmission der vorwärts gestreuten Welle ist in *0*, die Reflektivität der rückgestreuten, der Bragg-Fall gestreuten und der Laue-Fall gestreuten Welle ist in N,B bzw. L, gezeigt. In der rechten Spalte ist die Abhängigkeit der Transmission und der Reflektivität von $\Theta'_\perp$ gezeigt, mit festem Winkel $\Theta'_\parallel$ bei $\Theta'_\parallel = 0$. Die Streugeometrie ist über den Grafen gezeigt.

in den Rückstreukanal beeinträchtigen, ist deutlich größer als im vorigen Fall, vergl. Abb. 3.3.

Um eine Beeinträchtigung der Intensität der rückgestreuten Welle zu vermeiden, muss eine Winkelabweichung von exakter Rückstreuung in Richtung der Grundebene angewendet werden, d.h. $\Theta_\parallel$ muss verändert werden. Durch eine Winkelabweichung senkrecht zur Grundebene, also durch eine Änderung von $\Theta_\perp$ kann die Maximalreflektivität in den Rückstreukanal *nicht* erreicht werden.

3.3.2 Energieabhängigkeit der Reflektivität

Abb. 3.4 zeigt die Reflektivität als Funktion der Photonenenergie bei verschiedenen Werten für $\Theta'_\parallel$ mit $\Theta'_\perp = 0$.

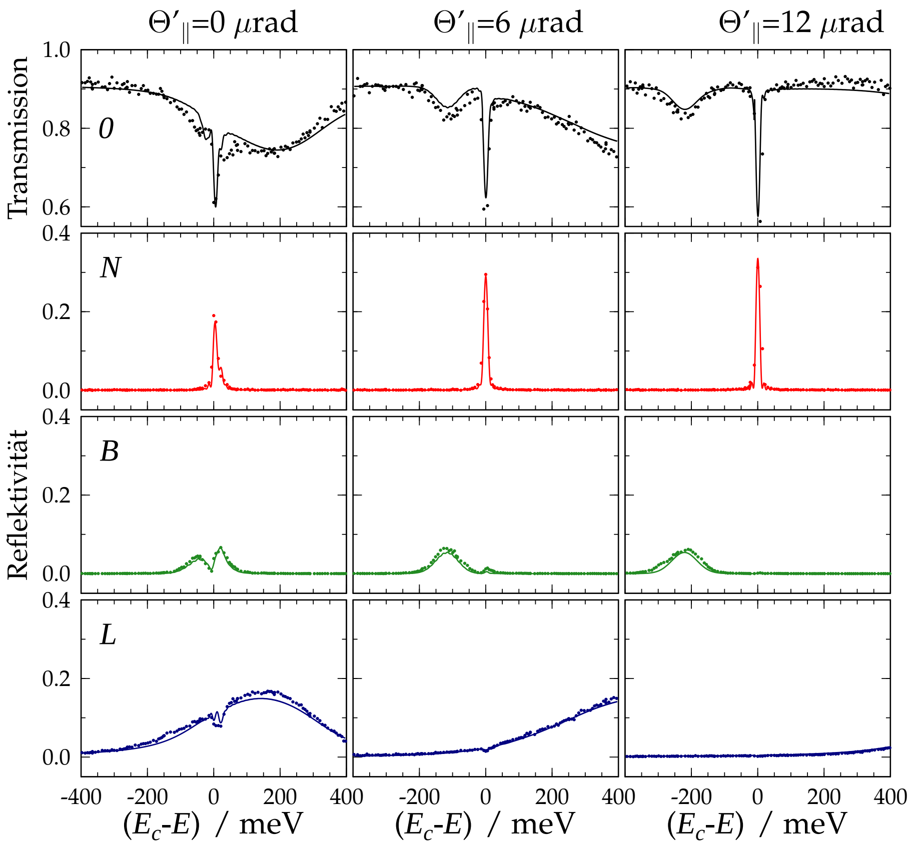


Abb. 3.4: Reflektivität als Funktion der Photonenenergie bei verschiedenen Werten für $\Theta'_\parallel$ mit $\Theta'_\perp = 0$. In der linken Spalte ist die Energieabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission für alle vier gestreuten Wellen gezeigt, wobei $\Theta'_\parallel$ den Wert $\Theta'_\parallel = 0$ hat. In der mittleren und der rechten Spalte sind die Ergebnisse für $\Theta'_\parallel = 6\ \mu$rad und für $\Theta'_\parallel = 12\ \mu$rad dargestellt. Die gemessenen Daten sind als Punkte dargestellt, durchgehende Linien sind die Ergebnisse der Berechnungen auf Grundlage der dynamischen Theorie. Die Transmission ist in Zeile *0* zu sehen. Die Reflektivität für die rückgestreute, die Bragg-Fall gestreute und die Laue-Fall gestreute Welle ist in den Zeilen N, B bzw. L gezeigt. $E_c = 14,419$ keV.

In der linken Spalte ist die Energieabhängigkeit der Reflektivität und der Transmission für alle vier gestreuten Wellen für $\Theta'_{\|} = 0$ gezeigt. In der mittleren bzw. der rechten Spalte sind die Ergebnisse für $\Theta'_{\|} = 6$ μrad bzw. für $\Theta'_{\|} = 12$ μrad gezeigt. Die gemessenen Daten sind als Punkte dargestellt, durchgehende Linien sind die Ergebnisse der Berechnungen auf Grundlage der dynamischen Theorie.

Die relative Position der Reflexionsmaxima für die Bragg-Fall (B) und die Laue-Fall (L) gestreute Welle verschiebt sich für verschiedene Winkel $\Theta'_{\|}$. Mit steigendem $\Theta'_{\|}$ ist das Reflexionsmaximum für die Bragg-Fall gestreute Welle bei kleineren Photonenenergien zu finden, das Reflexionsmaximum für die Laue-Fall gestreute Welle dagegen wandert zu höheren Energien.

Bei dem vorliegenden Versuchsaufbau bedeutet ein größerer Winkel $\Theta'_{\|}$ gleichzeitig auch einen größeren bzw. kleineren Einfallswinkel von $\boldsymbol{k_0}$ auf die reflektierenden Atomebenen, die senkrecht zu $\boldsymbol{B}$ bzw. $\boldsymbol{L}$ liegen. Ein größerer bzw. kleinerer Einfallswinkel auf die reflektierenden Atomebenen bedeutet nach dem Braggschen Gesetz, dass das Reflexionsmaximum für die reflektierte Welle bei einer kleineren bzw. größeren Photonenenergie zu finden ist.

Das Reflexionsmaximum für die rückgestreute Welle (N) liegt bei $E_c = 14,419$ keV. Je näher man der Position der exakten Rückstreuung kommt, d.h. für $\Theta'_{\|} \to 0$, desto kleiner wird das Reflexionsmaximum. Bei exakter Rückstreuung beträgt die maximale Reflektivität 18%, sie steigt auf bis zu 36% bei einer Winkelabweichung von 12 μrad in $\Theta_{\|}$.

Die experimentellen Ergebnisse, die mit der Energievariation ermittelt wurden, bestätigen die Ergebnisse, die mithilfe der Winkelvariation erhalten wurden, vergl. Abb. 3.3.

Kapitel 4

Fabry-Pérot Interferometer

Interferometer des 1899 von Fabry und Pérot vorgestellten Typs sind Standardinstrumente in der modernen Optik. Fabry-Pérot Interferometer wurden genutzt, um optische Wellenlängen und spektrale Linienbreiten mit hoher Genauigkeit zu messen. Sie wurden als schmale Bandpassfilter genutzt und sind die notwendige Grundlage für den Bau von Lasern. Die Eigenschaften eines optischen Fabry-Pérot Interferometers sind in (Vaughan, 1989) hergeleitet, es werden viele Sonderfälle besprochen, und es sind dort auch viele weitere Referenzen und der geschichtliche Hintergrund zu finden.

Hochauflösende Instrumente dieser Art wären auch im Röntgenbereich des elektromagnetischen Spektrums sehr nützlich. Bereits 1979 wurde von Steyerl und Steinhauser (1979) ein Vorschlag zum Bau eines Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers gemacht. Dabei wurde von exakter Rückstreuung an den (14 6 0)-Ebenen eines Siliziumkristalls ausgegangen, auch das Auftreten von zwei zusätzlichen Reflexen wurde kurz diskutiert. Caticha und Caticha-Ellis (1990) erweiterten die Theorie auf beliebige Einfallswinkel und behandelten die Theorie eines Fabry-Pérot Interferometers für thermische Neutronen (Caticha und Caticha-Ellis, 1996). In beiden Fällen verwendeten die Autoren ein System aus beliebig vielen dünnen Kristallen als Diskussionsgrundlage. Diese Theorie wurde von Shvyd'ko und Gerdau (1999) überarbeitet, dabei wurde ein fehlender Phasenfaktor eingeführt. Kohn et al. (2000) haben die Theorie eines Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers als Spezialfall der dynamischen Bragg-Streuung an einem System aus Kristalllagen entwickelt, dabei wurden auch mögliche Imperfektionen behandelt. Die Zeitabhängigkeit der Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer-Resonanzen wurde von Shvyd'ko (2004) behandelt, dort sind auch weitere ausführliche Analysen eines Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers zu finden.

4.1 Theorie eines planaren optischen Fabry-Pérot Interferometers

Der theoretische Hintergrund eines Fabry-Pérot Interferometers, soll im wesentlichen nach (Vaughan, 1989) vorgestellt werden.

Ein Fabry-Pérot Interferometer besteht im wesentlichen aus zwei parallelen Spiegeln hoher Reflektivität, die durch einen Spalt voneinander getrennt sind. Eine ebene Welle, die auf ein solches System trifft, wird zwischen den beiden Spiegeln hin und her reflektiert werden. In diesem Falle werden alle vom System reflektierten sowie alle transmittierten Strahlen miteinander interferieren. Auf der linken Seite von Abb. 4.1 ist der schematische Aufbau eines Fabry-Pérot Interferometers gezeigt, es besteht aus zwei Spiegeln die im Abstand d_g parallel zueinander ausgerichtet sind. Die auf das Fabry-Pérot Interferometer einfallende Welle hat die Amplitude E_0 und fällt unter dem Winkel θ auf den ersten Spiegel ein, sie wird zwischen den Spiegeln hin und her reflektiert. Das Material zwischen den beiden Spiegeln hat den Brechungsindex n_g, das umgebende Medium hat den Brechungsindex n. Um die Eigenschaften des Fabry-Pérot Interferometers zu beschreiben, werden für die Amplituden-Reflexions- bzw. Transmissionkoeffizienten r und t folgende

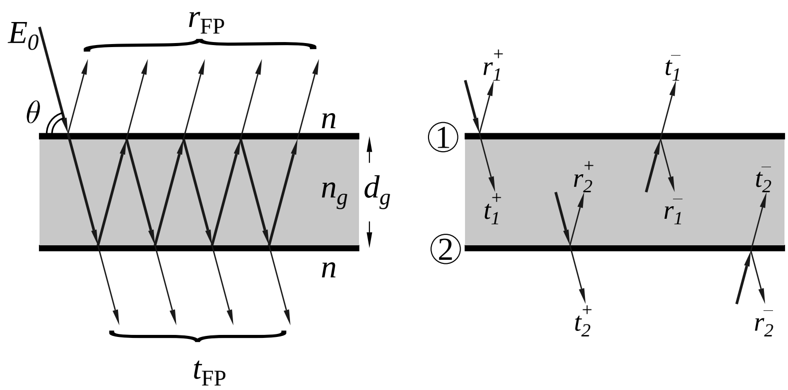


Abb. 4.1: Konstruktion der Vielstrahlinterferenz an einem Fabry-Pérot Interferometer. Zwei Spiegel hoher Reflektivität sind parallel zueinander justiert und durch einen Spalt voneinander getrennt. Die einfallende Welle mit Amplitude E_0 und der Wellenlänge λ_0 wird zwischen den Spiegeln hin und her reflektiert. Der Glanzwinkel ist θ, der Brechungsindex zwischen den Spiegeln ist n_g und n außerhalb. Die vom System reflektierten Wellen interferieren miteinander, was zu einem Amplituden-Reflexionskoeffizienten r_{FP} des Systems führt. Die vom System transmittierten Wellen interferieren ebenfalls, daraus resultiert der Amplituden-Transmissionskoeffizient t_{FP} des Systems. Auf der rechten Seite ist die verwendete Nomenklatur für die einzelnen Amplituden-Reflexions- und Amplituden-Transmissionkoeffizienten dargestellt.

Indizes verwendet: eine tiefgestellte Zahl beschreibt den reflektierenden Spiegel und ein hochgestelltes Vorzeichen beschreibt die Seite, auf der die Welle auf den Spiegel einfällt. Zur Verdeutlichung ist dies auf der rechten Seite von Abb. 4.1 gezeigt.

Die optische Wegdifferenz Δd zwischen zwei aufeinanderfolgenden Reflexionen ist durch:

$$\Delta d = 2d_g\sqrt{n_g^2 - n^2\cos^2\theta} \tag{4.1}$$

gegeben. Daraus resultiert eine Phasendifferenz φ von:

$$\varphi = 2\pi\Delta d/\lambda. \tag{4.2}$$

Die Gesamtamplitude E_t der transmittierten Strahlung ergibt sich als Summe über alle transmittierten Strahlen:

$$E_t = \sum_{j=0}^{\infty} E_{jt} = E_0 t_1^+ t_2^+ \left[1 + \sum_{j=1}^{\infty}(r_1^- r_2^+)^j \mathrm{e}^{\mathrm{i}j\varphi}\right]. \tag{4.3}$$

Gleichung (4.3) ist eine geometrische Reihe:

$$E_t = t_{\mathrm{FP}} E_0, \quad t_{\mathrm{FP}} = \frac{t_1^+ t_2^+}{1 - r_1^- r_2^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}} \tag{4.4}$$

Nun kann die transmittierte Intensität I_t berechnet werden:

$$I_t = |E_t|^2 = T_{\mathrm{FP}} E_0^2, \quad T_{\mathrm{FP}} = \frac{|t_1^+ t_2^+|^2}{1 + |r_1^- r_2^+|^2 - 2|r_1^- r_2^+|\cos\phi}. \tag{4.5}$$

Die Phase ϕ wird *Airy-Phase* genannt sie ist durch:

$$\phi = \varphi + \psi, \quad \psi = \arg(r_1^-) + \arg(r_2^+) \tag{4.6}$$

gegeben, wobei ψ mögliche Phasensprünge bei der Reflexion beschreibt. Mit den Definitionen

$$T = |t_1^+ t_2^+| \quad \text{und} \quad R = |r_1^- r_2^+|, \tag{4.7}$$

kann der Transmissionskoeffizient T_{FP} für diesen Fall wegen Gl. 4.5 auch geschrieben werden als:

$$\begin{aligned} T_{\mathrm{FP}} &= \frac{T^2}{1 + R^2 - 2R\cos\phi} \\ &= \frac{T^2}{(1-R)^2 - 4R\sin^2\phi/2} \\ &= \frac{T^2}{(1-R)^2}\frac{1}{1 + 4R/(1-R)^2\sin^2\phi/2}. \end{aligned} \tag{4.8}$$

Definiert man weiterhin:

$$F = \frac{4R}{(1-R)^2}, \qquad H = \frac{T^2}{(1-R)^2} \tag{4.9}$$

dann folgt:

$$T_{\mathrm{FP}} = H\mathcal{A}, \quad \mathcal{A} = [1 + F\sin^2(\phi/2)]^{-1}. \tag{4.10}$$

Gleichung (4.10) wird auch als Airy Formel bezeichnet. Die Funktion $\mathcal{A}(\phi)$ heißt *Airy Hüllenfunktion.*

Auf ähnliche Weise können auch der Amplituden-Reflexionskoeffizient r_{FP} und der Reflexionskoeffizient R_{FP} berechnet werden, es ergibt sich:

$$r_{\mathrm{FP}} = r_1^+ \frac{t_1^+ r_2^+ t_1^-}{1 - r_1^- r_2^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}} \tag{4.11}$$

$$R_{\mathrm{FP}} = F\sin^2(\phi/2)\mathcal{A}(\phi). \tag{4.12}$$

In Abb. 4.2 ist die Transmission T_{FP} für verschiedene Werte von F bzw. R als Funktion von ϕ dargestellt. T_{FP} ist eine periodische Funktion mit der Periode 2π. Die Halbwertsbreite $\Delta\phi$ eines Maximums kann mit:

$$\Delta\phi = \phi^+ - \phi^-, \qquad T_{\mathrm{FP}}(\phi^+) = T_{\mathrm{FP}}(\phi^-) = 0,5 \tag{4.13}$$

berechnet werden.

Das Verhältnis $\mathcal{F} = \Delta\phi/2\pi$ wird *Finesse* genannt. Für große F kann die Finesse mithilfe der Gl. (4.10) und (4.13) angenähert werden durch:

$$\mathcal{F} = \frac{\pi\sqrt{F}}{2} = \frac{\pi\sqrt{R}}{1-R}. \tag{4.14}$$

Im Falle des senkrechten Einfalls auf die Spiegel und bei sich nicht unterscheidenden Brechungsindizes ($n = n_g = 1$), folgt aus Gl. 4.1 für die Airy-Phase:

$$\phi = 4\pi d_g/\lambda + \psi \tag{4.15}$$

Aus (4.10) erhält man, dass das Fabry-Pérot Interferometer immer dann maximal durchlässig ist, wenn die Airy-Phase ein ganzzahliges Vielfaches von 2π ist:

$$\phi_m = 2\pi m. \tag{4.16}$$

Für die entsprechenden Wellenlängen λ_m, gilt:

$$\lambda_m = \frac{2d_g}{m} + \frac{\psi}{2\pi}, \tag{4.17}$$

Die Differenz zweier benachbarter Wellenlängen λ_m und λ_{m+1} ist der *freie Spektralbereich* des Fabry-Pérot Interferometers. Der freie Spektralbereich auf der Wellenlängen-, der Energie- und der Frequenzskala ist somit gegeben durch:

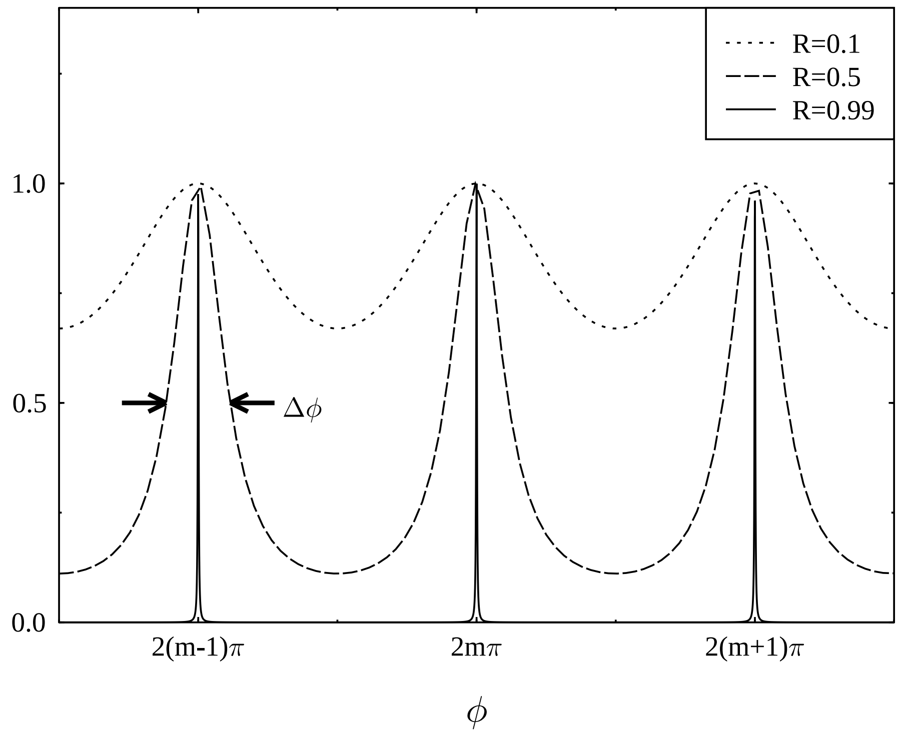


Abb. 4.2: Gesamt-Transmission T_{FP} als Funktion von ϕ für verschiedene $F-$ bzw. $R-$Werte. Immer, wenn ϕ ein ganzzahliges Vielfaches von 2π ist, dann ist das Fabry-Pérot Interferometer maximal transparent. Die Halbwertsbreite $\Delta\phi$ eines Maximums ist für $R = 0,5$ gezeigt.

$$\lambda_f = \frac{2d_g}{m} - \frac{2d_g}{m+1} = \frac{2d_g}{m(m+1)} \tag{4.18}$$

$$E_f = E_{m+1} - E_m = \frac{hc}{2d_g} \tag{4.19}$$

$$\nu_f = \frac{E_f}{h} = \frac{c}{2d_g} \tag{4.20}$$

gegeben.

Das Auflösungsvermögen Γ eines Fabry-Pérot Interferometers ist definiert durch:

$$\Gamma = \frac{E_f}{\mathcal{F}}. \tag{4.21}$$

4.2 Planares Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer

Für die Reflexion von Röntgenstrahlung kann Streuung unter streifendem Einfall oder Braggstreuung von Kristallen genutzt werden. Nur im Falle der Braggstreuung ist exakte Rückstreuung möglich. Die Spiegel eines planaren Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers können also zwei Kristallen sein, deren reflektierende Atomebenen parallel zueinander ausgerichtet sind.

Die theoretischen Grundlagen für ein Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer werden unter der Berücksichtigung der dynamischen Theorie der Röntgenstreuung nach (Kohn et al., 2000; Shvyd'ko, 2004) dargestellt. Die Unterschiede zwischen optischem Fabry-Pérot Interferometer und Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer werden kurz diskutiert. Abschließend werden mögliche Imperfektionen im Falle des Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers und deren Auswirkungen behandelt.

4.2.1 Grundlagen

Das Schema eines Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers ist links in Abb. 4.3 gezeigt: zwei Kristalle sind im Abstand d_g parallel zueinander ausgerichtet. Die Kristalle können unterschiedlich dick sein, sollen aber aus dem gleichen Material bestehen. Die reflektierenden Atomebenen des einen Kristalls sind exakt parallel zu denen des anderen Kristalls, allerdings sind sie nicht zwingend parallel zu den Kristalloberflächen. Die räumliche Lage der beiden Kristalle zueinander kann durch den Vektor $\boldsymbol{U}$ beschrieben werden. In diesem Zusammenhang soll $\boldsymbol{U} = 0$ heißen, dass die beiden vorderen Kristalloberflächen zusammenfallen *und* zusätzlich, dass die Atomebenen beider Kristalle zusammenfallen. Auf der rechten Seite von Abb. 4.3 ist die mehrfache Streuung der einfallenden Welle skizziert, die einzelnen Amplituden-Reflexions- und Transmissionskoeffizienten sind dargestellt, der Streuvektor ist $\boldsymbol{H}$, der Normaleneinheitsvektor der Kristalloberflächen $\boldsymbol{e}_z$.

Die einzelnen Amplituden-Reflexions- und Transmissionskoeffizienten der Braggstreuung sind aus der Diskussion in Abschnitt 2.2.4 bekannt. Der Amplituden-Transmissionskoeffizient bei der Durchquerung durch den Spalt in Richtung von Kristall 1 zu Kristall 2 ist allgemein durch: $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_1}$ gegeben. Der Amplituden-Transmissionskoeffizient bei der Durchquerung in Richtung von Kristall 2 zu Kristall 1 lautet entsprechend: $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_2}$. Das Medium innerhalb des Spalts habe die Suszeptibilität χ_g. Ersetzt man in Gl. 2.84 und 2.90 χ_0 durch

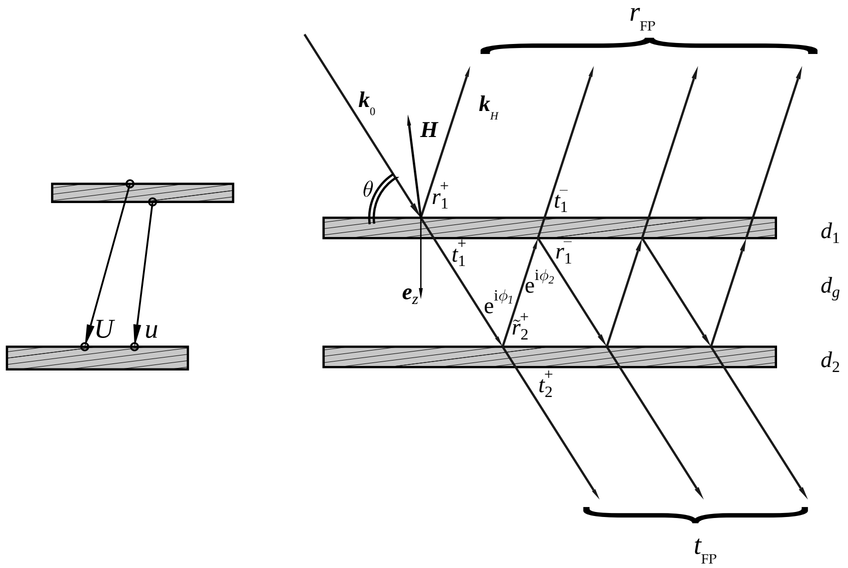


Abb. 4.3: Schema eines Fabry Pérot Interferometers. Zwei Saphirkristalle der Dicke d_1 und d_2 sind im Abstand d_g parallel zueinander ausgerichtet. Der Normalenvektor auf die Kristalloberfläche ist $\boldsymbol{e}_z$. Der Streuvektor $\boldsymbol{H}$ steht senkrecht auf den reflektierenden Atomebenen. Die Atomebenen beider Kristalle sind ebenfalls parallel zueinander. Der Wellenvektor $\boldsymbol{k}_0$ der einfallenden Welle schließt den Glanzwinkel θ mit den reflektierenden Atomebenen ein.

χ_g und setzt $\chi_H = 0$, dann folgt für die Phasen:

$$\varphi_1 = \frac{kd_g\chi_g}{2\gamma_0}, \quad \varphi_2 = \frac{kd_g(\alpha - \chi_g)}{2\gamma_H}. \tag{4.22}$$

Normiert man die Amplitude der einfallenden Strahlung und beachtet, dass der zweite Kristall im Bezug auf den ersten um den Vektor $\boldsymbol{U}$ verschoben ist, so kann in Anlehnung an Gl. 4.3 der Amplituden-Transmissionskoeffizient t_{FP} des Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers geschrieben werden:

$$\begin{aligned} t_{\mathrm{FP}} &= t_1^+ t_2^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_1} \left[1 + \sum_{j=1}^{\infty} (r_1^- \tilde{r}_2^+)^j \mathrm{e}^{\mathrm{i}j(\varphi_1+\varphi_2)} \right] \\ &= \frac{t_1^+ t_2^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_1}}{1 - r_1^- \tilde{r}_2^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varphi_1+\varphi_2)}} \\ &= \frac{t_1^+ t_2^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_1}}{1 - r_1^- r_2^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varphi_1+\varphi_2+\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{U})}}. \end{aligned} \tag{4.23}$$

Um die letzte Zeile in Gl. 4.23 zu erhalten, wurde Gl. 2.96 benutzt. Für die weitere Diskussion ist es bequem, einen weiteren Verschiebungsvektor $\boldsymbol{u}$

zu definieren, der die beiden einander zugewandten Kristalloberflächen und gleichzeitig gleiche Atomplätze verbindet, (s. Abb. 4.3). Für $\boldsymbol{u}$ folgt damit:

$$\boldsymbol{U} - \boldsymbol{u} = n_1\boldsymbol{a} + n_2\boldsymbol{b} + n_3\boldsymbol{c} \tag{4.24}$$

$$\Rightarrow \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{U}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{u}} \tag{4.25}$$

$$\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{e}_z = d_g. \tag{4.26}$$

Jetzt kann der Transmissionskoeffizient t_{FP} durch die Definition der *Röntgen-Airy-Phase*:

$$\begin{aligned}\phi &= \varphi_1 + \varphi_2 + \boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{u} \\ &= \varphi_1(1-b) + kd_g\alpha/2\gamma_H + \boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{u}\end{aligned} \tag{4.27}$$

geschrieben werden als:

$$t_{\mathrm{FP}} = \frac{t_1^+ t_2^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_1}}{1 - r_1^- r_2^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}}. \tag{4.28}$$

In Gl. 4.27 ist α der in Abschnitt 2.2.3 eingeführte Abweichungsparameter. Auf analoge Weise erhält man für den Amplituden-Reflexionskoeffizienten:

$$\begin{aligned}r_{\mathrm{FP}} &= r_1^+ + t_1^+\tilde{r}_2^+ t_1^- \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_1+\varphi_2}\left[1 + \sum_{j=1}^{\infty}(r_1^-\tilde{r}_2^+)^j \mathrm{e}^{\mathrm{i}j(\varphi_1+\varphi_2)}\right] \\ &= r_1^+ + \frac{t_1^+ t_1^- r_2^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}}{1 - r_1^- r_2^+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}}.\end{aligned} \tag{4.29}$$

Zur weiteren Betrachtung werden in Anlehnung an Gl. 4.7 die Parameter T und R definiert, hierbei ist zu beachten, dass die Amplituden-Reflexions- und Transmissionskoeffizienten komplexe Größen sind:

$$T = |t_1^+ t_2^+|\mathrm{e}^{-\mathfrak{Im}(\varphi_1)} \tag{4.30}$$

$$R = |r_1^- r_2^+|\mathrm{e}^{-\mathfrak{Im}(\varphi_1)(1-b)} \tag{4.31}$$

Jetzt kann die Reflektivität und die Transmission eines Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers berechnet werden:

$$T_{\mathrm{FP}} = \frac{H}{1 + F\sin^2(\phi/2)}, \quad R_{\mathrm{FP}} = 1 - T_{\mathrm{FP}} - A_{\mathrm{FP}} \tag{4.32}$$

Hierin ist A_{FP} die Absorption,

$$F = \frac{4R}{(1-R)^2} \quad \text{und} \quad H = \frac{T^2}{(1-R)^2}. \tag{4.33}$$

4.2.2 Optisches vs. Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer

Die in Abschnitt 4.2.1 gefundenen Ausdrücke sind formal die gleichen wie für das optische Fabry-Pérot Interferometer (s. S. 50), es ist jedoch u.a. zu beachten, dass die Amplituden-Reflexionskoeffizienten r_1^-, r_2^+ und somit R nur hinreichend große Werte erreichen, wenn die Bragg-Bedingung für die einfallende Strahlung erfüllt ist. Daher ist R also eine Funktion der Photonen Energie E, des Einfallwinkels θ und über den Abstand der reflektierenden Atomebenen auch der Kristalltemperatur T.

Die Transmission und Reflektivität kann in beiden Fällen als Funktion der Airy-Phase dargestellt werden. Die konkreten Ausdrücke für die Airy-Phase unterscheiden sich im Falle eines optischen und im Falle eines Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers allerdings voneinander.

Nimmt man an, dass die Bedingung für Totalreflexion (s. Abschnitt 2.2.5) erfüllt ist, dann kann man für die Röntgen-Airy-Phase Gl. 4.27 wegen Gl. 2.106 und Gl. 4.26 auch schreiben:

$$\phi = \boldsymbol{H} \cdot \boldsymbol{u} - \frac{k\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{e}_z}{2|\gamma_{_H}|} \mathfrak{Re}(\chi_{_0} - \chi_{_g}) \left(1 - \frac{1}{b}\right). \tag{4.34}$$

Der erste Term in Gl. 4.34 ist vergleichbar mit Gl. 4.15: wird die Spaltbreite um d_H in Richtung von $\boldsymbol{H}$ verändert, so ändert sich die Phase um 2π. Der zweite Term in Gl. 4.34 beschreibt eine Phasendifferenz die ihre Ursache in den unterschiedlichen Brechungsindizes des Kristalls und des Mediums innerhalb des Spalts hat. Dieser Term ändert sich üblicherweise wesentlich langsamer mit $\boldsymbol{u}$ als der erste Term. Nimmt man z.B. an, dass gilt: $\mathfrak{Re}(\chi_0) = 10^{-5}$, $\mathfrak{Re}(\chi_g) = 0$ und $\lambda = 0,1$nm, so muss d_g um ca. 10μm verändert werden, um die Phase um 2π zu ändern.

Aus Gl. 4.34 ist ersichtlich, dass es möglich ist, durch eine Parallelverschiebung des einen Kristalls d.h. senkrecht zu $\boldsymbol{e}_z$ die Phase zu ändern, wenn $\boldsymbol{H}$ und $\boldsymbol{e}_z$ nicht parallel sind.

Vernachlässigt man den zweiten Term in Gl. 4.34 und ist $\boldsymbol{H} \parallel \boldsymbol{e}_z$, so ergibt sich für den Fall senkrechten Einfalls auf die reflektierenden Atomebenen ($\theta = 90°$) die erste Näherung für den freien Spektralbereich auf der Energie- bzw. Wellenlängenskala:

$$E_f^0 = hc/2d_g \tag{4.35}$$
$$\lambda_f^0 = 2d_H^2/d_g. \tag{4.36}$$

Der freie Spektralbereich E_f^0 unterscheidet sich nicht von dem freien Spektralbereich im optischen Fall, Gl. 4.19. Allerdings wird bei Bragg-Streuung nicht unmittelbar an der Kristalloberfläche reflektiert sondern innerhalb des Kristalls an den Atomebenen, dieses Eindringen in den Kristall wird durch die Extinktionslänge d_e beschrieben. Bei genauerer Betrachtung ergibt sich:

$$E_f = \frac{E_f^0}{1 + d_e/d_g} = \frac{hc}{2d_g + 2d_H/(\pi|\chi_H|)} \tag{4.37}$$

$$\lambda_f = \frac{hc}{E_f} = 2d_g + \frac{2d_H}{\pi|\chi_H|}. \tag{4.38}$$

Analog zum optischen Fall ist hier die Finesse allgemein durch:

$$\mathcal{F} = \frac{2\pi}{\Delta\phi} = \frac{\pi\sqrt{F}}{2} = \frac{\pi\sqrt{R}}{1-R} \tag{4.39}$$

gegeben und somit auch das Auflösungsvermögen, $\Gamma = E_f/\mathcal{F}$.

4.3 Nicht perfektes Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer

Im folgenden soll kurz beschrieben werden, welche Abweichungen von einem perfekten Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer, die bei dem Bau und dem Betrieb eines realen Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers eventuell auftreten können, die Funktionsfähigkeit des Instrumentes beeinträchtigen können. Dazu müssen alle eventuellen Abweichungen von einem perfekten Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer betrachtet werden, die zu einer Änderung der Airy-Phase führen können. Dies sind im Einzelnen Unebenheiten der Kristalloberflächen, Inhomogenitäten in der Dicke der Kristalle, Abweichungen von der exakten Parallelität beider Kristalle zueinander und Temperaturunterschiede zwischen den beiden Kristallen. Eine konkrete numerische Behandlung folgt im nächsten Kapitel.

4.3.1 Die Oberflächenrauigkeit der inneren Kristalloberflächen

Die Rauigkeit der inneren Kristalloberflächen soll durch die Abweichung δz vom Mittelwert beschrieben werden. Durch diese Abweichung wird die Spaltbreite verändert. Betrachtet man die Extremfälle für die Spaltbreite $d_g + \delta z$ und $d_g - \delta z$, dann kann die daraus resultierende Änderung der Phase $\delta\phi$ mit Gl. 4.34 abgeschätzt werden:

$$\delta\phi = 2k\delta_z \left[\mathfrak{Re}(\chi_0) - \mathfrak{Re}(\chi_g)\right]. \tag{4.40}$$

Diese Änderung muss, damit die Fabry-Pérot-Resonanzen nicht verwischt werden, deutlich kleiner sein als die Breite $\Delta\phi = 2\pi/\mathcal{F}$; daraus folgt die Bedingung[1]:

$$\delta z \ll \frac{d_H}{\mathcal{F}|\mathfrak{Re}(\chi_0) - \mathfrak{Re}(\chi_g)|}. \tag{4.41}$$

4.3.2 Inhomogene Kristalldicke

Änderungen in der Dicke der einzelnen Kristalle führen zu einer Änderung des Phasensprungs

$$\phi_R = \arg(r_1^- r_2^+), \tag{4.42}$$

[1]Aus Gl. 4.41 folgt, dass die Oberflächenrauigkeit keine Rolle spielt wenn $\mathfrak{Re}(\chi_0) = \mathfrak{Re}(\chi_g)$, d.h. wenn der Spalt mit einem Medium gefüllt ist, das den gleichen Brechungsindex hat wie der Kristall (Steyerl und Steinhauser, 1979).

bei der Reflexion. Durch Einsetzen der Gl. 2.83 und 2.90 in Gl. 4.42 kann diese Änderung im Einzelfall exakt berechnet werden. Die Frage nach der Oberflächenrauigkeit der äußeren Kristalloberflächen kann somit auch beantwortet werden. Sie ist durch die Differenz der Abweichung von der Kristalldicke und der Oberflächenrauigkeit der inneren Kristalloberflächen gegeben.

4.3.3 Nicht exakt parallele Kristalle

Die Frage nach nicht exakt parallelen inneren Kristalloberflächen ist in Abschnitt 4.3.1 schon indirekt behandelt worden. Hier soll daher diskutiert werden, wie parallel die reflektierenden Atomebenen des einen Kristalls zu denen des anderen Kristalls sein müssen. Betrachtet man eine kleine Drehung, ψ des einen Kristalls um eine Achse senkrecht zur Oberflächennormalen $\boldsymbol{e}_z$, vergl. Abb.4.3, so resultiert daraus eine Änderung von $\boldsymbol{u}$. Definiert man ein Koordinatensystem, so dass dessen z-Achse normal zu der Kristalloberfläche ist und die y-Achse die Drehachse ist, dann ist die Änderung von $\boldsymbol{u}$ eine Funktion der x- und z-Koordinaten:

$$\delta u_x = -z\psi, \quad \delta u_z = x\psi, \tag{4.43}$$

Mit Gl. 4.34 kann die daraus resultierende Änderung der Phase berechnet werden:

$$\delta\phi(x) = \boldsymbol{H} \cdot \delta\boldsymbol{u}(x) = 2\pi\gamma_0 x\psi/d_H. \tag{4.44}$$

Bei senkrechtem Einfall auf die Kristallebenen ist $\gamma_0 = 1$ und die maximale Phasenänderung $\delta\phi_{\max}$ ist:

$$\delta\phi_{\max} = (2\pi\psi/d_H)X, \tag{4.45}$$

wobei X die lineare Ausdehnung der beleuchteten Kristalloberfläche in Richtung der x-Achse ist. Damit die Resonanzen nicht gestört werden, muss diese Phasenveränderung kleiner als die Resonanzbreite sein. Die Forderung an die Parallelität der Atomebenen ist somit:

$$\psi < \frac{d_H}{2\pi X}\Delta\phi = \frac{d_H}{X}\frac{1}{\mathcal{F}}. \tag{4.46}$$

4.3.4 Temperaturunterschiede

Ein weiteres Problem ist die Temperaturabhängigkeit des Ebenenabstandes d_H. Haben die beiden Kristalle ein unterschiedliche Temperatur, so ergeben sich unterschiedliche Ebenenabstände. Die Breite der Region, in der Totalreflexion auftritt, Gl. 2.107 kann, in Einheiten von α, mit $b = -1$ (symmetrischer Bragg-Fall) und $|C| = 1$ ($\boldsymbol{s}$-Polarisation) zu:

$$\Delta\alpha = 4|\chi_H| \tag{4.47}$$

abgeschätzt werden. Die Differenz der Kristalltemperaturen sei δT und der (temperaturabhängige) Ausdehnungskoeffizient sei $\beta_H(T)$. Dann folgt aus Gl. 2.108 für eine temperaturbedingte Änderung des Parameters α:

$$\delta\alpha = -4\beta_H(T)\delta T. \tag{4.48}$$

Damit sich die Bereiche der Totalreflexion beider Kristalle überschneiden, muss also gelten:

$$\delta T \ll |\chi_{_H}|/\beta_H(T). \tag{4.49}$$

Ein zusätzliches Problem tritt auf, wenn die Kristalloberflächen nicht exakt parallel zu den reflektierenden Atomebenen sind. Der Winkel zwischen der Kristalloberfläche und den Atomebenen sei η. Unter der Annahme elastischer Streuung:

$$|\boldsymbol{k}_0|^2 = |\boldsymbol{k}_H|^2 = k^2 \tag{4.50}$$

ergibt sich aus Gl. 2.62, 2.64 und 2.54:

$$\boldsymbol{k}_H = \boldsymbol{k}_0 + (\boldsymbol{H} - k\frac{\alpha}{2\gamma_{_H}}\boldsymbol{e}_z) = \boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{H}'. \tag{4.51}$$

Der Winkel η ist gleichzeitig auch der Winkel zwischen der Oberflächennormalen $\boldsymbol{e}_z$ und dem reziproken Streuvektor $\boldsymbol{H}$. Aus Gl. 4.51 folgt daher $\boldsymbol{H} \nparallel \boldsymbol{H}'$, wenn $\eta \neq 0$. Der Winkel ψ zwischen $\boldsymbol{H}$ und $\boldsymbol{H}'$ beträgt:

$$\psi = k\frac{|\alpha|}{2H|\gamma_{_H}|}\sin\eta. \tag{4.52}$$

Eine Temperaturdifferenz δT führt daher zu einer Winkeldifferenz $\delta\psi$:

$$\delta\psi = k\frac{|\delta\alpha|}{2H|\gamma_{_H}|}\sin\eta = \beta_H(T)\delta T\tan\eta. \tag{4.53}$$

Um das endgültige Ergebnis zu erhalten wurde benutzt, dass nahe exakter Rückstreuung gilt: $k \simeq 2H$ und $|\gamma_H| \simeq \cos\eta$. Wieder muss gelten, dass $\delta\psi \ll \delta\phi$, daraus folgt:

$$\delta T \ll \frac{d_H}{X\mathcal{F}\beta_H(T)\tan\eta}. \tag{4.54}$$

Kapitel 5

Kombiniertes Fabry-Pérot Interferometer für optische und Mössbauer-Photonen

Erste Experimente mit einem Interferometer für Röntgenstrahlung wurden von Bonse und Hart (1965b) gemacht. Eine Behandlung der Prinzipien und des Designs dieses Laue-Fall Röntgeninterferometers wurde von den Autoren im gleichen Jahr vorgelegt (Bonse und Hart, 1965a). Drei Jahre später folgte das erste Röntgeninterferometer welches aus zwei getrennten Kristallen bestand (Bonse und te Kaat, 1968). Deslattes (1969) stellte bereits ein Jahr später erste Messungen mit einem kombinierten Interferometer für Röntgenstrahlung und optisches Licht vor. 1973 gelangen dann zusammen mit A. Henins die ersten Präzisionsmessungen der Si-Gitterkonstante mit einem kombinierten Interferometer. Dabei verknüpften Deslattes und Henins (1973) ein Laue-Laue-Laue (LLL) Röntgeninterferometer mit einem optischen Fabry-Pérot Interferometer. Bis heute werden auf diese Weise Präzisionsmessungen der Si-Gitterkonstante vorgenommen, siehe z.B.: (Deslattes et al., 1974; Becker et al., 1981, 1987; Bergamin et al., 1989; Basile et al., 1994, 2000). Bergamin et al. (1999) behandelten ausführlich den Einfluss systematischer Fehler bei der Messung.

Ein Ziel der folgenden Untersuchungen ist es, ein kombiniertes Fabry-Pérot Interferometer für sichtbares Licht und für Mössbauer Strahlung zu realisieren. Als Spiegel für die Mössbauerstrahlung von ^{57}Fe soll der $(1\,3\,\bar{4}\,28)$-Reflex in α-Al_2O_3 benutzt werden. Dieses Instrument soll darüberhinaus die Möglichkeit bieten, die Spaltbreite d_g zu variieren, damit die Wellenlänge der Mössbauerstrahlung von ^{57}Fe an die Wellenlänge der benutzten optischen Strahlung gekoppelt werden kann. Auf diese Weise könnte die Wellenlänge der Mössbauerstrahlung sehr genau bestimmt werden und längerfristig die

Si-Gitterkonstante als Referenzlänge in der Röntgenoptik ablösen.

Die Anforderungen an ein Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer sind, wegen der kleineren Wellenlänge der benutzten Strahlung, entsprechend strenger als die an ein optisches Fabry-Pérot Interferometer. Im folgenden werden nur die Anforderungen an ein Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer für Mössbauer-Photonen aufgestellt, welches zusätzlich die Möglichkeit bietet, die Spaltbreite d_g zu variieren. Es werden Entwürfe davon vorgestellt, wie so ein Instrument aussehen könnte; diese Entwürfe wurden mithilfe der Methode der finiten Elemente (FEM) optimiert. Die Grundlagen der FEM, sowie die von hochgenauen Verschiebeeinrichtungen, werden diskutiert, um abschließend einen Entwurf für ein monolithisches Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer vorzustellen, das die gewünschten Anforderungen erfüllt und technisch auch herstellbar ist.

5.1 Anforderungen an ein Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer für Mössbauer-Photonen

Aufbauend auf die Diskussion in Abschnitt 4.3, werden im folgenden die Anforderungen an ein Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer für Mössbauer-Photonen aufgestellt.

5.1.1 Die Breite des Spalts d_g

Mit Gl. 4.27 und Gl. 2.118 kann die Röntgen-Airy-Phase als Funktion des Winkels θ geschrieben werden. Dann kann man mit Gl. 4.39 die Winkelbreite $\Delta\theta$ der Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer-Resonanzen bei senkrechtem Einfall abschätzen:

$$\Delta\theta = 2\sqrt{\frac{d_H|\gamma_H|}{d_g\mathcal{F}}}. \tag{5.1}$$

Um aus Gl. 5.1 eine konkrete Bedingung für die Spaltbreite zu erhalten, muss die Finesse $\mathcal{F}$ bekannt sein. Mit Gl. 4.32 kann man berechnen, dass eine sinnvolle Kristalldicke im Bereich von $d = 90 - 110\mu$m liegt. Es soll daher angenommen werden, dass beide Kristalle die Dicke 100μm haben, dann ist $T_{\mathrm{FP}} \simeq 40\%$ und $\mathcal{F} \simeq 9$.[1]

Setzt man $\mathcal{F} = 9$, $d_H = 0,043$ nm und $|\gamma_H| = 1$ in Gl. 5.1 ein, so erhält man:

$$\Delta\theta \simeq 140\mu\mathrm{rad}\sqrt{\mathrm{mm}/d_g}. \tag{5.2}$$

Bei einer Spaltbreite zwischen 0,5 und 1 mm liegt die Winkelbreite also zwischen 200 und 140 μrad und damit deutlich über der Divergenz von üblicherweise 20μrad an modernen Synchrotronstrahlungsquellen. Im folgenden wird von einer Spaltbreite von d_g=0,5 mm ausgegangen.

5.1.2 Rauigkeit der inneren Kristalloberflächen

Nimmt man wieder eine Finesse von $\mathcal{F} = 9$ an, dann wird die Anforderung an die Oberflächenrauigkeit, Gl. 4.41 zu:

$$\delta z \ll \frac{2d_H}{\mathcal{F}|\mathfrak{Re}(\chi_0)|} = \frac{0,086 \text{ nm}}{7,1\cdot 10^{-5}} = 1,2\ \mu\mathrm{m}, \tag{5.3}$$

wenn $\mathfrak{Re}(\chi_g) = 0$ ist, d.h. sich die Kristalle im Vakuum befinden. Mit modernen Poliermethoden ist eine Unebenheit von unter $0,1\ \mu$m zu erreichen.

[1]Wenn Reflexe höherer Reflektivität genutzt werden können, z.B. (0 0 0 30), dann kann die Finesse bis zu $\mathcal{F} \simeq 30$ betragen.

5.1.3 Inhomogene Kristalldicke

Wie bereits erwähnt, führen Änderungen in der Kristalldicke zu einer Änderung des Phasensprungs ϕ_R bei der Reflexion. Hier soll nur kurz abgeschätzt werden, wie groß die Änderungen in der Kristalldicke sein dürfen, damit die Fabry-Pérot Interferometer-Resonanzen nicht gestört werden. Beträgt die Wellenlänge der einfallenden Welle $\lambda = 2\pi/k \simeq 1$ Å und haben α und χ_0 die Größenordnung 10^{-6}, dann ergibt sich, bei einer Finesse von $\mathcal{F} \simeq 9$, dass die Resonanzen nicht gestört werden, wenn die Abweichung der Kristalldicke vom Mittelwert $\leq 10\mu$m beträgt (Shvyd'ko, 2004). Diese Bedingung ist somit ebenfalls durch das Polieren der Kristalle erfüllbar.

5.1.4 Nicht exakt parallele Atomebenen

Aus Gl. 4.46 wird mit den entsprechenden Werten für diesen Fall:

$$\psi < \frac{d_H}{X}\frac{1}{\mathcal{F}} = \frac{4,8\text{pm}}{X} = 4,8\text{nrad}\frac{\text{mm}}{X}. \tag{5.4}$$

Bei einer Strahlbreite von $X = 1$ mm muss die Abweichung von exakter Parallelität also kleiner als 4,8 nrad sein.

5.1.5 Temperaturunterschiede

Der lineare Ausdehnungskoeffizient $\beta_H(T)$ bei T=375,0 K ist bekannt (Shvyd'ko et al., 2002; Lucht et al., 2003). Mit $\beta_H(375\text{ K}) = 5,8 \cdot 10^{-6}\text{K}^{-1}$ folgt aus Gl. 4.49 dann die Forderung:

$$\delta T \ll 1,7 \cdot 10^5\text{K}|\chi_H| = 70\text{ mK}. \tag{5.5}$$

Wie in Abschnitt 4.3.4 besprochen, tritt ein weiterer Aspekt bei Temperaturunterschieden auf, wenn die Kristalloberflächen nicht parallel zu den Atomebenen sind. Mit den bekannten Werten für die Finesse und den Ausdehnungskoeffizienten ergibt sich bei einer Strahlbreite von $X = 1$ mm aus Gl. 4.54:

$$\delta T \ll 0,73\text{mK}/\tan\eta. \tag{5.6}$$

Der herstellungsbedingte Winkel η zwischen der Kristalloberfläche und den Atomebenen liegt üblicherweise im Bereich $0 - 1°$, bei $\eta = 1°$ folgt:

$$\delta T \ll 40\text{mK}. \tag{5.7}$$

Diese Forderung ist strenger als die, die sich wegen der Temperaturabhängigkeit der Atomebenenabstände ergibt, sie ist aber mit heutigen Temperaturregelungen leicht einzuhalten (Lucht, 1998).

5.1.6 Der Verstellweg des beweglichen Fabry-Pérot Interferometer-Spiegels

Das Verhältnis zwischen den Wellenlängen eines Jod-stabilisierten He-Ne Lasers $\lambda_{^{127}J_2}$ und der ^{57}Fe -Mössbauerstrahlung λ_{M} beträgt etwa:

$$\frac{\lambda_{^{127}J_2}}{\lambda_{\mathrm{M}}} \simeq \frac{633\mathrm{nm}}{0,086\mathrm{nm}} = 7360,5. \tag{5.8}$$

Experimentell kann dieses Verhältnis durch eine Variation Δd_g der Spaltbreite eines kombinierten Fabry-Pérot Interferometers bestimmt werden. Der Abstand zweier Transmissionsmaxima des optischen Fabry-Pérot Interferometers entspricht einer Variation von $\Delta d_g = \lambda_{^{127}J_2}/2$. Die Anzahl der bei dieser Variation überstrichenen Transmissionsmaxima des Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers entspricht dann dem Verhältnis der verglichenen Wellenlängen. Bei vorherigen Experimenten konnte bei der Bestimmung dieses Verhältnisses eine absolute Genauigkeit von 0,001 erreicht werden (Becker et al., 1981; Basile et al., 1994). Bei diesen Experimenten wurde ein LLL-Interferometer genutzt, die Intensitätsverteilung des Interferenzmusters ist sinusförmig. Man kann erwarten, dass die Intensitätsverteilung eines Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers, wie in Abb. 4.2 gezeigt, eine noch genauere Bestimmung zulassen wird. Mit der absoluten Mindestgenauigkeit von 0,001 ergibt sich eine relative Mindestgenauigkeit bei der Messung über *eine halbe* optische Wellenlänge von: $0,001/7361 = 1,36 \times 10^{-7}$.

Um eine relative Genauigkeit von mindestens 10^{-8} zu erreichen, muss daher eine Messung über 14 halbe optische Wellenlängen möglich sein, dies entspricht einem Verstellweg des beweglichen Fabry-Pérot Interferometer-Spiegels von 4,4 μm. Um eine höhere Genauigkeit zu erreichen und andere eventuelle Messfehler zu kompensieren, wird im folgenden ein Verstellbereich von 10μm zugrundegelegt.

5.2 Grundlagen der Nanopositionierung

Bereits beim Bau der ersten Röntgeninterferometer musste die Frage beantwortet werden, wie man hochpräzise Verstelleinrichtungen herstellen kann. Solche Verstelleinrichtungen müssen eine stetige vibrationsfreie genaue Verstellung ohne Spiel erlauben. Dieses kann mit parallelen Blattfedern erreicht werden. Eine erste Anwendung von parallelen Blattfedern wurde von Clay (1937) beschrieben. Diese Methode wurde von Jones (1951) genauer untersucht, fünf Jahre später folgte eine detailliertere Arbeit, bei der ungewünschte zusätzliche Bewegungen qualitativ und quantitativ behandelt wurden (Jones und Young, 1956). Die erste Anwendung im Bereich der Röntgeninterferometrie erfolgte dann von Hart (1968). Dabei wurden alle Elemente des Interferometers aus einem Kristallblock gefertigt. Für den Bau des ersten kombinierten Interferometers wurde eine deutlich komplexere Verstelleinrichtung aus einem Metallblock gefertigt, an dem dann die optischen Elemente beider Teilinterferometer befestigt wurden (Deslattes, 1969). Es folgten theoretische Arbeiten über das Verhalten solcher Federn sowie praktische Arbeiten zur Verbesserung des Designs von hochpräzisen Verstelleinrichtungen (Tanaka, 1983; Basile et al., 2000). Neue Verfahren und bessere Maschinen führten zu neuen Möglichkeiten in der Herstellung (Shu et al., 1999). Auch werden die numerischen Voraussagemöglichkeiten des Verhaltens von neuen Designs immer mehr genutzt (Basile et al., 2000).

Im folgenden wird anhand von einfachen Modellen das Konzept von Parallelfedern und das Konzept von Doppel-Parallelfedern kurz erläutert. Danach wird dargestellt, wie Federelemente aus massiven Kristall- bzw. Metallblöcken herausgearbeitet werden können.

5.2.1 Parallelfedern

In Abb. 5.1(a) ist eine einfache Parallelfeder skizziert, zwei parallel angeordnete Blattfedern sind an ihren beiden Enden jeweils über einen Block miteinander verbunden. Wenn der untere Block (1) die Basis darstellt, so kann der obere Block (2) in erster Näherung parallel zum unteren verschoben werden. Allerdings wird der lotrechte Abstand der beiden Blöcke zueinander abnehmen, wie in Abb. 5.1(b) gezeigt. Außerdem werden sich auch die Blöcke elastisch verformen und die Federn werden sich herstellungsbedingt nicht exakt gleich verhalten, diese unerwünschten zusätzlichen Bewegungen wurden ebenfalls von Jones und Young (1956) behandelt.

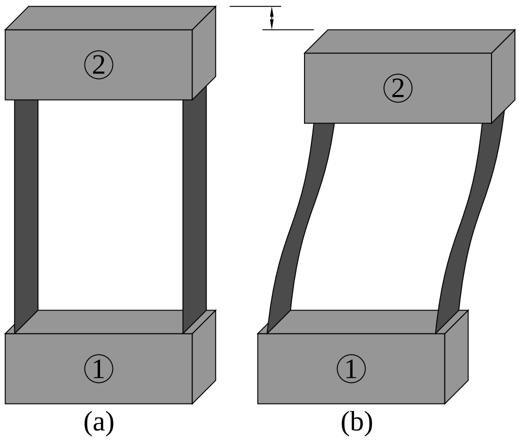


Abb. 5.1: (a) Skizze einer einfachen Parallelfeder, zwei Blattfedern sind über zwei Blöcke miteinander verbunden. (b) Die Konstruktion erlaubt in erster Näherung eine Parallelverschiebung des beweglichen Blocks (2) zu Block (1), der die Basis bildet. Der Abstand der Blöcke zueinander nimmt dabei allerdings ab.

5.2.2 Doppel-Parallelfedern

Eine Möglichkeit, zumindest die Zusatzbewegung senkrecht zur gewünschten Verschiebung zu verhindern, ist ein Aufbau bei dem zwei Parallelfedern hintereinander eingesetzt werden. In Abb. 5.2(a) ist der Aufbau einer solchen Doppel-Parallelfeder gezeigt. Bei der Auslenkung des beweglichen Blocks (2), bewegt sich dieser in erster Näherung parallel und ohne Höhenversatz zur Basis (1), Abb. 5.2(b). Da die gewünschte Bewegung aber auch einem Aufbiegen

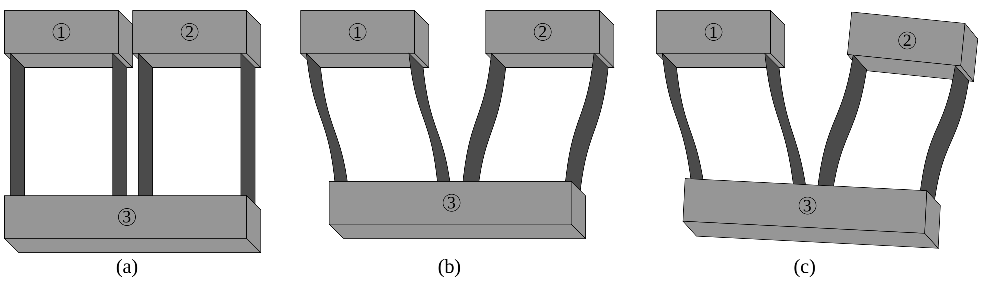


Abb. 5.2: (a) Skizze einer einfachen Doppel-Parallelfeder. Die feste Basis (1) ist über eine Parallelfeder mit Block (3) verbunden, eine zweite Parallelfeder stellt die Verbindung zu dem beweglichen Block (2) her. (b) In erster Näherung ist eine Parallelverschiebung von Block (2) zur Basis (1) ohne Höhenversatz möglich. (c) Allerdings entspricht diese Verschiebung auch einem Aufbiegen der Gesamtkonstruktion, woraus auch eine unerwünschte Zusatzbewegung resultiert.

der Gesamtkonstruktion entspricht, wird sich der bewegliche Block (2) ohne zusätzliche Korrekturen, auf einem Kreisabschnitt bewegen, Abb. 5.2(c).

5.2.3 Federgelenke

Federelemente, wie sie in den beiden vorigen Abschnitten vorgestellt wurden, können auf ähnliche Weise auch in massiven Bauteilen wie z.B. großen Siliziumkristallen realisiert werden. Dabei werden die Federelemente, die Basis sowie die beweglichen Teile aus einem Bauteil herausgearbeitet. Abbildung 5.3 zeigt ein Federelement, das eine Blattfeder aus den vorigen Abschnitten ersetzt. Ein Hebelarm ist durch zwei dünne Stege mit der Basis bzw. dem beweglichen Teil verbunden, dabei wirken die Stege in erster Näherung wie Gelenke die allerdings aus dünnen Federn bestehen (solange man sich im Bereich der elastischen Verformung befindet). Das Verhalten solcher Elemente wurde von Tanaka (1983) untersucht (s. auch Referenzen dort). Mit einem Federelement dieser Art können Verschiebeeinrichtungen hergestellt werden, die denen in Abschnitt 5.2.1 und 5.2.2 entsprechen. In Abb. 5.4 ist eine Alternative zu der in Abb. 5.2 skizzierten Doppel-Parallelfeder gezeigt.[2]

Bei einer Bewegung des Balkens (1), der an den Federgelenken aufgehängt

[2]Der gezeigte Konstruktionsentwurf kann *nicht* mit normalbeweglichen Gelenken hergestellt werden, da der Balken dann frei beweglich wäre.

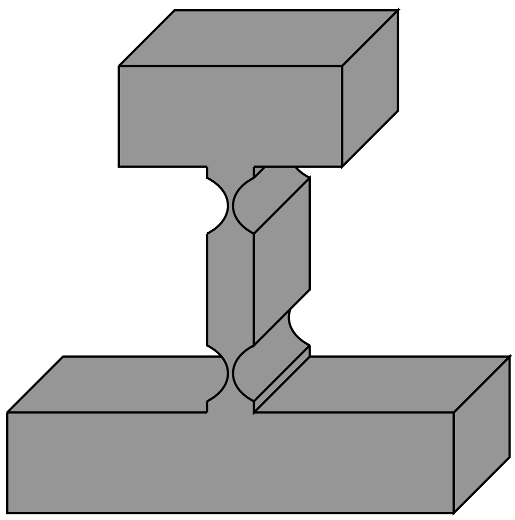


Abb. 5.3: Federelement wie es aus massiven Bauteilen herausgearbeitet werden kann. Ein Hebelarm ist durch zwei dünne Stege mit der Basis bzw. dem beweglichen Teil verbunden, dabei wirken die Stege in erster Näherung wie Gelenke.

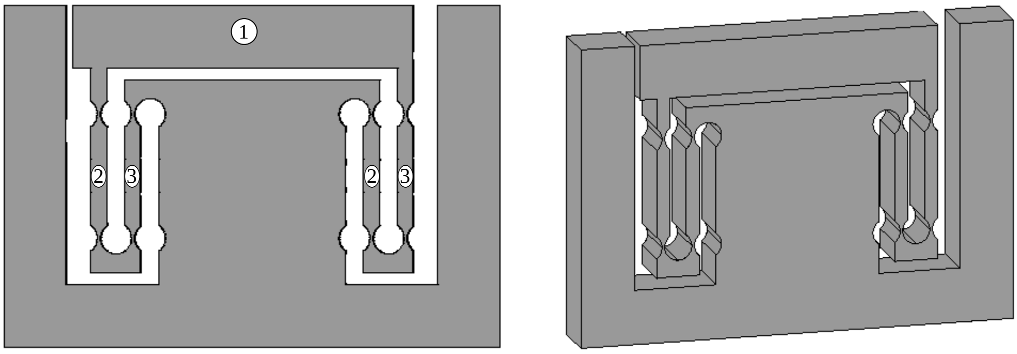


Abb. 5.4: Doppel-Parallelfeder aus Federelementen.

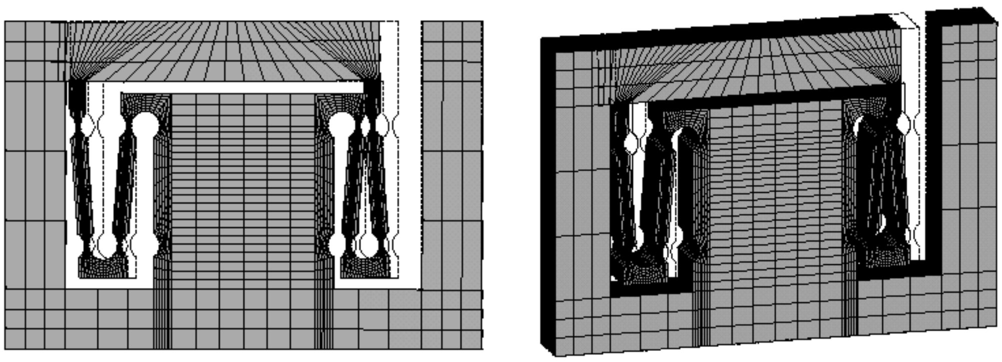


Abb. 5.5: Ausgelenkte Doppel-Parallelfeder aus Federelementen. Die Auslenkung ist 100-fach vergrößert dargestellt. Die undeformierte Position ist als gestrichelte Linie gezeigt. Die Verformung wurde mit der Methode der finiten Elemente berechnet, weitere Details dazu werden in den folgenden Abschnitten behandelt.

ist, werden sich (in erster Näherung) jeweils die linken (2) bzw. rechten Stege (3) der einzelnen Federn parallel zueinander bewegen und so eine Parallelverschiebung des Balkens erlauben, vergl. Abb. 5.5. Allerdings wird sich auch in diesem Fall der Balken auf einer Kreisbahn bewegen, um dies zu verhindern stellten Hoffrogge und Rademacher (1973) eine *doppelte* Doppel-Parallelfeder vor, bei der auf beiden Seiten des beweglichen Balkens identische Parallelfedern angebracht sind.

Scire und Teague (1978) präsentierten eine Doppel-Parallelfeder bei welcher allerdings der Kraftübertrag über zusätzliche Federelemente realisiert wird um unerwünschte Zusatzbewegungen zu vermeiden.

5.3 Designstudien mit der Methode finiter Elemente

Zunächst sollen die grundlegenden Prinzipien der Methode der finiten Elemente (FEM) an einem einfachen Beispiel vorgestellt werden. Das Beispiel ist von Moaveni (1999) ausführlich besprochen. Eine wesentlich ausführlichere Behandlung der FEM und ihrer Geschichte gibt Zienkiewicz (1975).

5.3.1 Beispiel eines einfachen Befestigungsbalkens

Die FEM ist eine numerische Methode, mit der Eigenschaften von Konstruktionsentwürfen bestimmt werden können. Als einfaches Beispiel soll ein Balken dienen, der an seiner Oberseite befestigt ist und an dessen Unterseite die äußere Kraft $\boldsymbol{P}$ wirkt. Der Balken habe einen nichtkonstanten Querschnitt und eine beliebige Länge. In Abb. 5.6(a) ist die Vorderansicht des Balkens gezeigt. Der Balken wird in vier einfache Segmente unterteilt (Abb. 5.6(b)). Jedes Segment wird durch ein Element angenähert, dessen Querschnitt dem mittleren Querschnitt des entsprechenden Segments entspricht[3] (Abb. 5.6(c)). Betrachtet man zunächst nur ein einzelnes Element (Abb. 5.7) mit der Höhe h und dem Querschnitt A auf das die Kraft $\boldsymbol{F}$ wirke, dann ist die mittlere (mechanische) Spannung σ gegeben durch:

$$\sigma = \frac{|\boldsymbol{F}|}{A} = \frac{F}{A}. \tag{5.9}$$

[3]Die Elemente die zur Berechnung mit der FEM benutzt werden haben immer eine einfache Geometrie wie z.B. Quader oder Tetraeder.

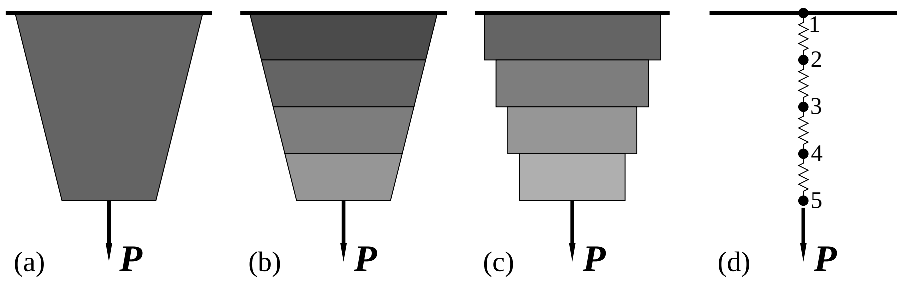


Abb. 5.6: Ein Balken mit nicht konstantem Querschnitt ist zur Berechnung seiner Eigenschaften in vier Segmente unterteilt. Der Balken sei an seiner Oberseite befestigt und an seiner Unterseite wirke die äußere Kraft $\boldsymbol{P}$. Die Segmente werden durch quaderförmige Elemente angenähert. Jedes der vier Elemente kann als elastische Feder mit zwei End- bzw. Knotenpunkten aufgefasst werden.

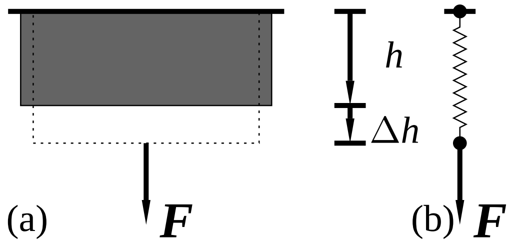


Abb. 5.7: Einzelnes Element der Länge h, auf das die Kraft $\boldsymbol{F}$ wirkt. Die resultierende Längenänderung sei Δh, das Element kann als elastische Feder mit zwei Knotenpunkten aufgefasst werden.

Die mittlere Dehnung ϵ ist mit der Änderung der Länge Δh definiert zu:

$$\epsilon = \frac{\Delta h}{h}. \tag{5.10}$$

Im Falle elastischer Verformung gilt das Hookesche Gesetz:

$$\sigma = \epsilon E, \tag{5.11}$$

hier ist E das Elastizitätsmodul des Materials. Aus den Gl. 5.9-5.11 folgt:

$$F = \left(\frac{AE}{h}\right) \Delta h. \tag{5.12}$$

Gleichung 5.12 beschreibt eine elastische Feder mit der Federkonstanten k, wobei k gegeben ist durch:

$$k = \frac{AE}{h}. \tag{5.13}$$

Aus dieser Betrachtung folgt, dass die Elemente des Balkens wie in Abb.5.6(d) skizziert als Reihe elastischer Federn mit je zwei End- bzw. *Knotenpunkten* aufgefasst werden können. Die Federkonstante der i-ten Feder sei k_i, ihre Auslenkung beträgt $u_{i+1} - u_i$, aus der Gleichgewichtsbedingung folgt dann für die fünf Knotenpunkte:

$$\begin{aligned} R_1 - k_1(u_2 - u_1) &= 0 \\ k_1(u_2 - u_1) - k_2(u_3 - u_2) &= 0 \\ k_2(u_3 - u_2) - k_3(u_4 - u_3) &= 0 \\ k_3(u_4 - u_3) - k_4(u_5 - u_4) &= 0 \\ k_4(u_5 - u_4) - P &= 0. \end{aligned} \tag{5.14}$$

R_1 ist die Reaktionskraft an dem ersten Knoten, also der Aufhängung. Es muss nicht zwingend gelten, dass $R_1 = P$ gilt, wenn man formal zulassen möchte, dass weitere Reaktionskräfte auftreten können, um die äußere Kraft zu kompensieren. Das Gleichungssystem 5.14 kann mit einer kurzen Umformung auch in Matrizenschreibweise geschrieben werden:

$$\begin{Bmatrix} -R_1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} = \begin{pmatrix} k_1 & -k_1 & 0 & 0 & 0 \\ -k_1 & k_1+k_2 & -k_2 & 0 & 0 \\ 0 & -k_2 & k_2+k_3 & -k_3 & 0 \\ 0 & 0 & -k_3 & k_3+k_4 & -k_4 \\ 0 & 0 & 0 & -k_4 & k_4 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ P \end{Bmatrix} \tag{5.15}$$

bzw. allgemeiner:

$$\{\boldsymbol{R}\} = (\boldsymbol{K})\{\boldsymbol{u}\} - \{\boldsymbol{F}\}. \tag{5.16}$$

In Worten bedeutet Gl. 5.16, dass die Reaktionsmatrix das Produkt aus Steifigkeitsmatrix und Auslenkungsmatrix minus der Matrix der äußeren Kräfte ist. Mit der Randbedingung $u_1 = 0$ kann Gl. 5.15 in zwei Gleichungen aufgeteilt werden:

$$R_1 = k_1 u_2 \tag{5.17}$$

und:

$$\begin{pmatrix} k_1+k_2 & -k_2 & 0 & 0 \\ -k_2 & k_2+k_3 & -k_3 & 0 \\ 0 & -k_3 & k_3+k_4 & -k_4 \\ 0 & 0 & -k_4 & k_4 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ P \end{Bmatrix}. \tag{5.18}$$

Durch das Lösen von Gl. 5.18 erhält man die einzelnen Verschiebungen der Knotenpunkte 2 bis 5. Aus Gl. 5.17 folgt dann die Größe der Reaktionskraft R_1.

5.3.2 Allgemeine Betrachtung

Bei der Unterteilung eines Körpers in Elemente, können diese auch mehr als nur zwei Knotenpunkte besitzen. Zunächst soll jedoch nur ein Element mit zwei Knotenpunkten eines Körpers der in m Elemente mit insgesamt n Knotenpunkten unterteilt ist, betrachtet werden. Für die internen Kräfte f_i und f_j an den beiden Knotenpunkten i und j dieses Elements gilt:

$$\begin{Bmatrix} f_i \\ f_j \end{Bmatrix} = \begin{pmatrix} k_{ii} & k_{ij} \\ k_{ji} & k_{jj} \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} u_i \\ u_j \end{Bmatrix}. \tag{5.19}$$

Darin entspricht k_{ij} der Federkonstanten am Knotenpunkt i in Richtung der Verschiebung u_j. Wenn der Knotenpunkt mehr als zwei Freiheitsgrade bzw.

das Element mehr als zwei Knotenpunkte hat, dann sind die dazugehörigen Komponenten k_{ij} selbst quadratische Matrizen (Zienkiewicz, 1975). Aus Symmetriegründen gilt:

$$k_{ij} = k_{ji}. \tag{5.20}$$

Schreibt man die Steifigkeitsmatrix für dieses Element als $(n \times n)$-Matrix, wobei die Federkonstante k_{ij} in der i-ten Zeile und der j-ten Spalte zu finden ist, dann ist die Steifigkeitsmatrix des Körpers durch die Summe aller Element-Steifigkeitsmatrizen definiert (Zienkiewicz, 1975). Im allgemeinen wird die Steifigkeitsmatrix auf diese Weise berechnet bzw. aufgestellt.

Betrachtet man ein Problem, bei dem die Elemente unterschiedlich viele Knotenpunkte haben, so hat die Steifigkeitsmatrix eines Elements p^2 von 0 verschiedene Koeffizienten, wenn das Element p Knoten hat.

5.4 Berechnungen von verschiedenen Entwürfen

Zunächst werden einige Regeln aufgestellt bzw. erläutert, die bei der Berechnung der Eigenschaften von Konstruktionsentwürfen mit der FEM zu beachten sind. Anschließend werden zwei Entwürfe vorgestellt, deren Eigenschaften mit der FEM berechnet wurden. Diese Entwürfe werden hinsichtlich der in Abschnitt 5.1 erhaltenen Anforderungen überprüft.

5.4.1 Erstellen und Vernetzen des Konstruktionsentwurfs

Das benutzte FEM-Programm ANSYS erlaubt, wie andere FEM-Programme auch, das Erstellen von Konstruktionsentwürfen und die Berechnung ihrer Eigenschaften. Bei dem Erstellen eines Entwurfs muss zunächst darauf geachtet werden, dass dieser Entwurf, eventuell auch mit modernen Techniken, zu realisieren ist. Vor dem Erstellen des Entwurfs sollte ein vollständiges Bild davon bestehen, wie der Entwurf aussehen soll. Bereits beim Erstellen des Entwurfs kann und sollte sogar auf die spätere Unterteilung dieses Entwurfs in Elemente, das "Vernetzen" (*meshing*), Einfluss genommen werden. Dies soll im folgenden genauer beschrieben werden. Als Beispiel dient der Entwurf, der in Abb. 5.4 gezeigt ist. Der Entwurf hat eine (angenommene) Länge von 8 cm, ist 5,5 cm hoch und 1 cm stark. In Abb.5.8 ist ein Beispiel gezeigt, wie dieser Entwurf erstellt werden kann. Ausgangspunkt ist ein einfaches quaderförmiges Volumen mit den gleichen Außenmaßen wie der Entwurf.

Aus diesem Quader können dann in weiteren Schritten kleinere Volumina

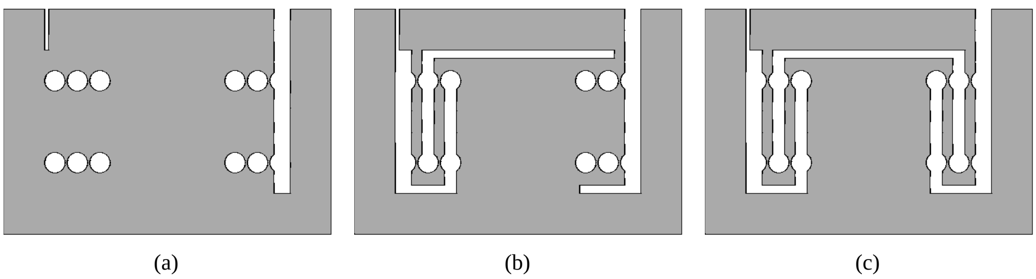


Abb. 5.8: Erstellen des Entwurfs aus einem Block. Durch das Subtrahieren (Heraustrennen) von Volumina von dem Ausgangsquader entsteht der fertige Konstruktionsentwurf. In (a) und (b) sind Zwischenschritte gezeigt, in (c) der fertige Entwurf.

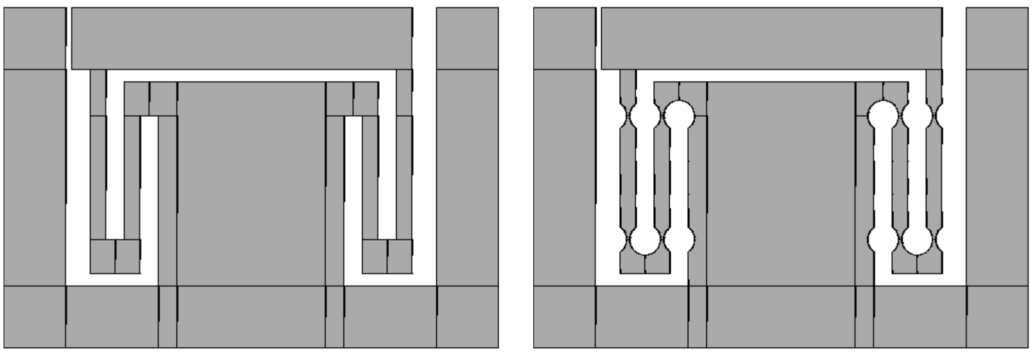
herausgetrennt (*subtracted*) werden, was bei der realen Herstellung Fräsen und Bohren entspräche. In Abb. 5.8(a) und (b) sind zwei Zwischenschritte gezeigt. Der so erstellte Entwurf (Abb. 5.8(c)) besteht dann aus einem Volumen. Dieser Entwurf bietet keine Möglichkeit der "geplanten" (*mapped*) Vernetzung. Die Unterteilung in Elemente wird vom Programm selbständig durchgeführt, dabei wird die Symmetrie des Entwurfs nicht berücksichtigt. Diese "freie" (*free*) Vernetzung hat drei Nachteile:

- Eine unsymmetrische Vernetzung eines symmetrischen Entwurfs führt auch bei symmetrischen Randbedingungen fast immer zu unsymmetrischen Lösungen.

- Eine Verbesserung der Vernetzung, wie z.B. das Verfeinern des Netzes in bestimmten Bereichen des Entwurfs, die besonders wichtig sind, ist nicht ohne weiteres möglich.

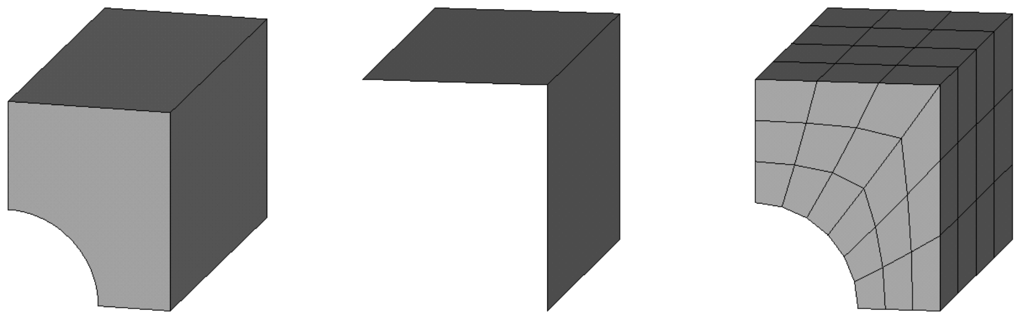
- Die Anzahl von Elementen und Knotenpunkten und somit die benötigte Rechnerzeit ist deutlich höher.

Das geplante Vernetzen eines Entwurfs ist nur dann möglich, wenn es aus hexaedrischen Volumina besteht. Auf den ersten Blick scheint dies für den betrachteten Entwurf nicht möglich zu sein, es ist aber mit einigen Schritten zu erreichen. In Abb. 5.9 sind diese Schritte skizziert. Ausgangspunkt sind 29 Quader die "zusammengeklebt" (*glued*) sind, die Federgelenke wer-



(a) (b)

Abb. 5.9: Erstellen des Entwurfs aus mehreren Quadern. (a) 29 Quaderförmige Volumina werden zusammengeklebt. (b) Durch Subtraktion von zylindrischen und quaderförmigen Volumina entsteht der gewünschte Konstruktionsentwurf.



(a) (b) (c)

Abb. 5.10: (a) Eines der beiden Volumina welche die Parallelfedern mit dem mittleren Block verbinden. Das Volumen hat sieben Oberflächen und kann daher nicht geplant vernetzt werden. Verknüpft man die in (b) dargestellten Flächen zu einer einzelnen Fläche, so wird das Volumen nur noch von sechs Flächen begrenzt. (c) Das Ergebnis der nun möglichen geplanten Vernetzung.

den wie oben durch das Subtrahieren von zylindrischen und quaderförmigen Volumina erzeugt.

Hat ein neues Einzelvolumen nun mehr als die gewünschten sechs Grenzflächen, so werden in einem weiteren Schritt einzelne Flächen des Volumens miteinander "verknüpft" (*concatenated*), solange bis das Volumen nur von sechs Flächen begrenzt wird. In Abb. 5.10 ist dies für eines der beiden Volumina welche die Parallelfedern mit dem mittleren Block verbinden gezeigt. Abbildung 5.10(a) zeigt die Form des Volumens. In Abb. 5.10(b) sind die Flächen gezeigt, die verknüpft werden. Das Ergebnis der Verknüpfung beim Vernetzen ist in Abb. 5.10(c) zu sehen. Der Einfluss der neu geschaffenen Fläche ist an der Form der Elemente zu erkennen.

Der komplett vernetzte Entwurf, bei dem die obigen Regeln beachtet wurden, ist in Abb. 5.11(a) dargestellt. Abbildung 5.11(b) zeigt eine der Parallelfedern etwas vergrößert.

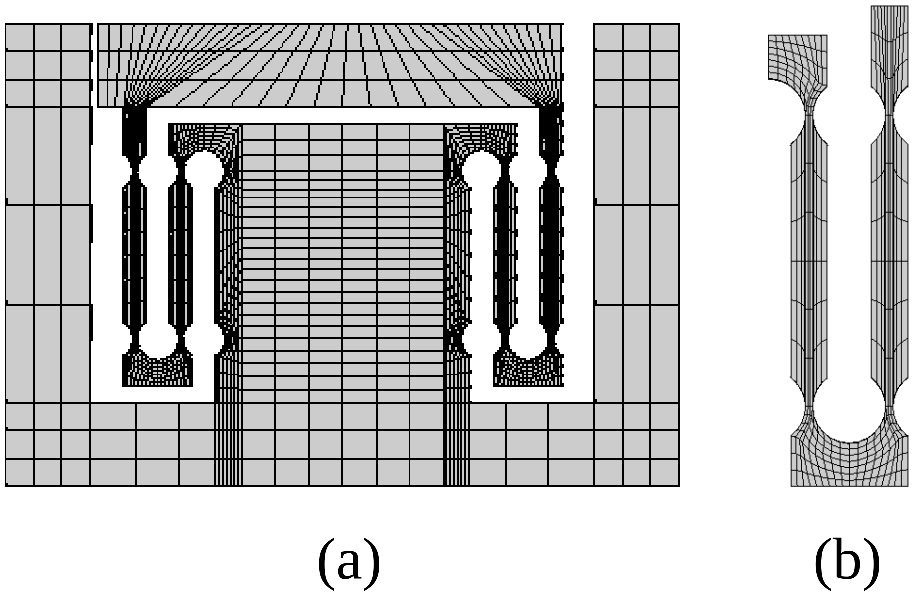


Abb. 5.11: (a) Vernetzte Doppelparallelfeder. (b) Detailansicht des vernetzten rechten Federelements.

5.4.2 Regeln für die Berechnungen der Eigenschaften eines Konstruktionsentwurfs

Das Programm erlaubt es, beliebige Randbedingungen aufzustellen. Bei der Berechnung der Eigenschaften eines Entwurfs können daher Randbedingungen aufgestellt werden, die unrealistisch sind oder die nicht den realen Möglichkeiten entsprechen, z.B. bei der Befestigung der auf diesem Entwurf basierenden Konstruktion. Anhand eines Beispiels soll dies genauer erläutert werden, untersucht wurde wieder der Entwurf, der in Abb. 5.4 gezeigt ist. Der Entwurf soll aus einem Saphir-Einkristall hergestellt werden. Das Elastizitätsmodul ist bekannt (Tefft, 1966). Die Federgelenke sind an ihrer dünnsten Stelle 0,5 mm stark. Abbildung 5.12(a) bis (c) zeigt drei unterschiedliche Randbedingungen, die für die folgenden Simulationen angenommen wurden:

(a) Der mittlere Block (2) des Entwurfs ist an seinem linken und rechtem Rand starr mit der Außenwelt verbunden. Auf den Balken (1) wirkt eine Gesamtkraft von 10 N.[4]

[4]Diese Kraft soll 1 mm von den unteren Ende des Balkens angreifen; da an dieser Stelle kein Knotenpunkt vorhanden ist, wurde die Kraft auf die beiden nächsten Knotenpunkte aufgeteilt, um dies zu erreichen.

(b) Der mittlere Block des Entwurfs ist ebenfalls an seinem linken und rechtem Rand starr mit der Außenwelt verbunden. Auf den Balken wirkt ebenfalls eine Kraft von 10 N, auf die gegenüberliegende Seite des Rahmens (3) wirkt die entgegengesetzte Kraft.

(c) Der mittlere Block des Entwurfs ist nur an einem Punkt starr mit der Außenwelt verbunden, an zwei weiteren Punkten wurde die Bewegungsfreiheit nur in zwei Richtungen bzw. in eine Richtung eingeschränkt um Rotationen zu verhindern. Auf Balken und Rahmen wirkt das gleiche Kräftepaar wie in (b).

In Abb. 5.12(d) sind die Symbole, welche die Randbedingungen beschreiben gezeigt. Die drei Punkte 4 bis 6 sind jeweils in eine Bewegungsrichtung fixiert. Dabei wird Punkt 4 horizontal festgehalten und Punkt 5 vertikal. Punkt 6 ist senkrecht zur Zeichenebene fixiert.

In Abb. 5.13 sind die Verformungen des Entwurfs unter den obigen Bedingungen gezeigt, die Auslenkung ist 50 000-fach vergrößert dargestellt. Die Teile, die stark ausgelenkt werden, wie der Balken, die Gelenke und der rechte Teil des Rahmens, sind hier nicht gezeigt weil eine derart starke Vergrößerung ihrer Verformung bzw. Auslenkung nicht sinnvoll ist.

Weil Voraussagen darüber fehlen, wie sich eine etwaige Konstruktion verhält, die eine von außen wirkende Kraft überträgt, ist es sinnvoll immer mit Kräftepaaren zu arbeiten, bei denen beide Einzelkräfte am Konstruktionsentwurf angreifen. Vergleicht man Abb. 5.13 (a) und (b), so ist zu sehen, dass die Verwendung eines Kräftepaares zu einem anderen Ergebnis führt als die Annahme einer äußeren Kraft. Durch die Verwendung des Kräftepaares wird die linke Seite des Rahmens um 600 nrad im Uhrzeigersinn gebogen, Abb. 5.13(b). Die undeformierte Position ist durch eine gestrichelte Linie gekennzeichnet.

Abbildungen 5.13(b) und (c) zeigen die Ergebnisse für das gleiche Kräftepaar, allerdings für verschiedene Randbedingungen. Der mittlere Block des Entwurfs ist entweder an seinem linken und rechtem Rand starr mit der Außenwelt verbunden, wie in Abb. 5.12(b), oder er wird wie in Abb. 5.12(c) nur an drei Punkten gehalten. Nur ein Punkt ist dabei völlig unbeweglich, die beiden anderen werden nur in zwei Richtungen bzw. in eine Richtung festgehalten, so dass keine Rotationen auftreten können, aber eine Bewegung in Richtung des unbeweglichen Punktes möglich ist. Diese Dreipunktbefestigung unterdrückt daher keine mögliche Verformung des Entwurfs. Obwohl in beiden Fällen dasselbe Kräftepaar wirkt, sind die Lösungen sehr unterschiedlich. Der linke Teil des Rahmens wird in unterschiedliche Richtungen ausgelenkt. Die Winkelabweichung beträgt insgesamt 900 nrad.

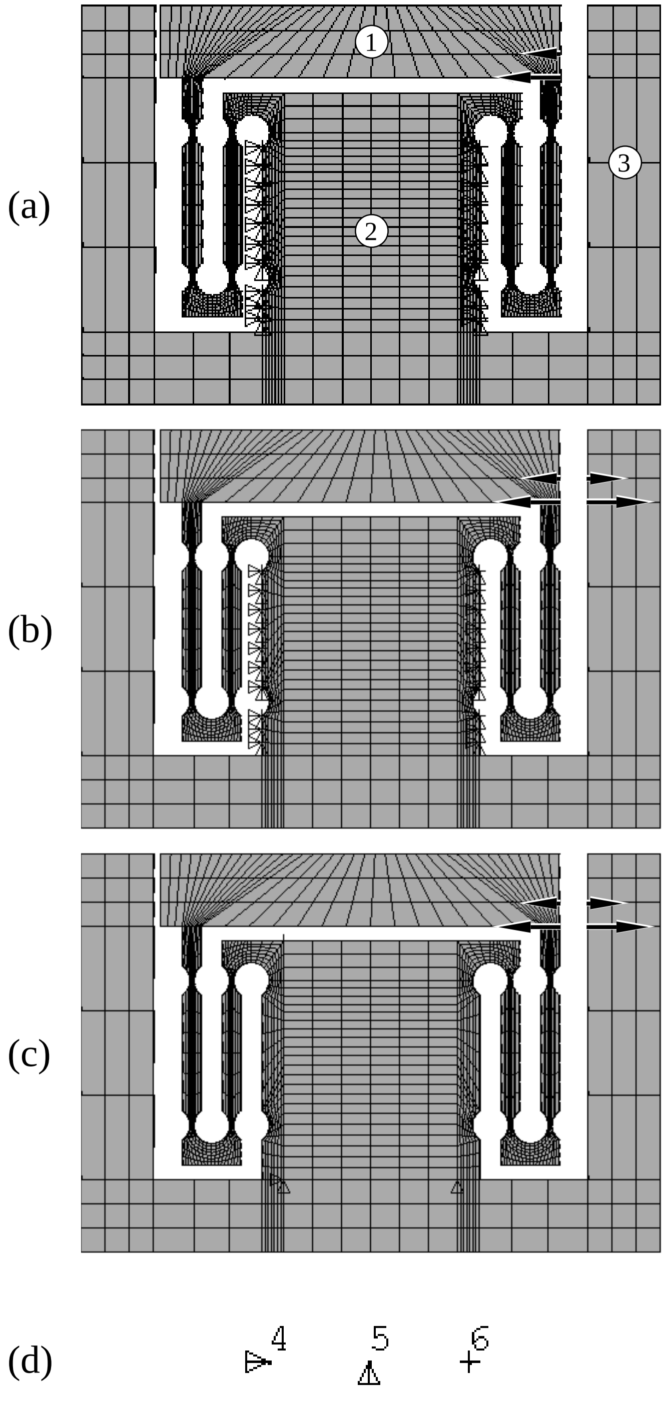


Abb. 5.12: (a), (b), (c) Verschiedene Randbedingungen bei der FEM Analyse. (d) Symbole, welche die Randbedingungen beschreiben. Die drei Punkte 4 bis 6 sind jeweils in eine Bewegungsrichtung fixiert. Punkt 4 ist horizontal fixiert und Punkt 5 vertikal. Punkt 6 ist in Richtung senkrecht zur Zeichenebene fixiert.

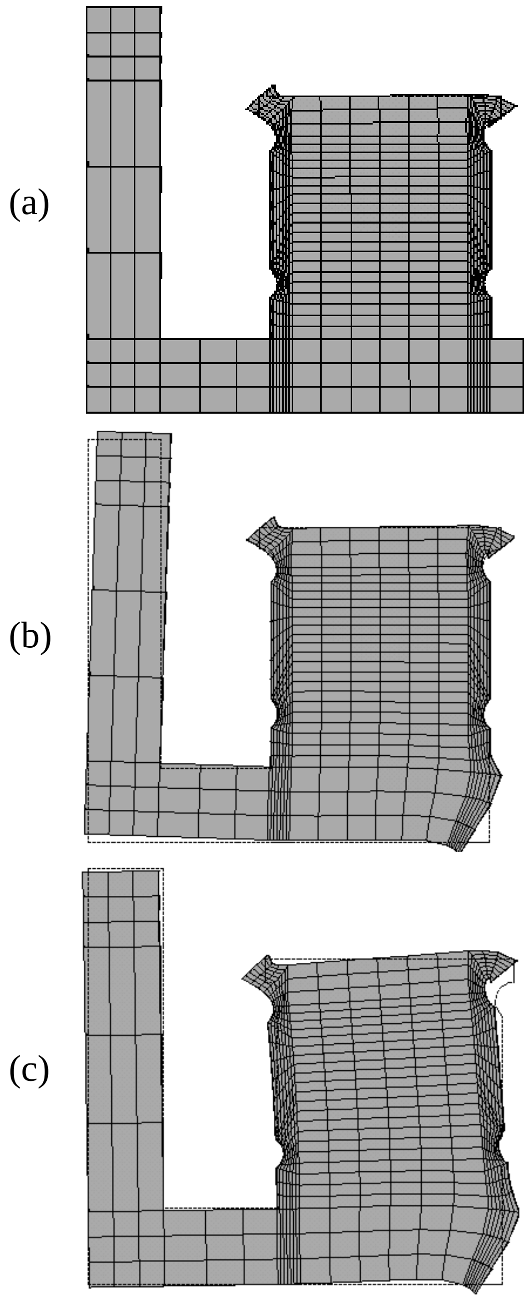


Abb. 5.13: Ergebnisse der FEM Analyse bei verschiedenen Randbedingungen.

Der richtige Einsatz von Randbedingungen ist immer dann von großer Bedeutung, wenn das Verhalten einer Befestigung (die durch Randbedingungen beschrieben wird) nicht absolut sicher bekannt ist. Betrachtet man die linke Seite des Rahmens und die aus der Verformung resultierende Winkeländerung bei den verschiedenen Randbedingungen, so sind die Unterschiede in den Lösungen im Vergleich zu den Anforderungen an die Winkelabweichung aus Abschnitt 5.1 deutlich zu groß.

5.4.3 Entwurf 1

Der erste Entwurf eines monolithischen Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers, beruht auf der bereits besprochenen Doppelparallelfeder. Hier wurden zwei Federn unter einem rechten Winkel zusammengesetzt, s. Abb. 5.14(a). Der Entwurf ist 8 cm lang, 5,5 cm breit und hoch, der bewegliche Balken ist 1 cm breit und hoch.

Ermittelt wurde der Einfluss einer Verschiebung des Angreifpunktes auf die daraus resultierende Winkeländerung zwischen den Spiegeln. Außerdem wurde die untere Eigenfrequenz des Systems ermittelt. Die Eigenfrequenz kann aus dem Elastizitätsmodul und der Dichte des Materials berechnet werden. Dabei wurden verschiedene Stegbreiten, also Stärken der Federgelenke angenommen.

Für die Untersuchung wurde von einem Verstellweg von 10 μm ausgegangen. Um dies zu erreichen ist, bei 0,3 mm starken Stegen, eine Kraft von 3,4 N erforderlich. Um zu ermitteln welchen Einfluss eine Verschiebung des

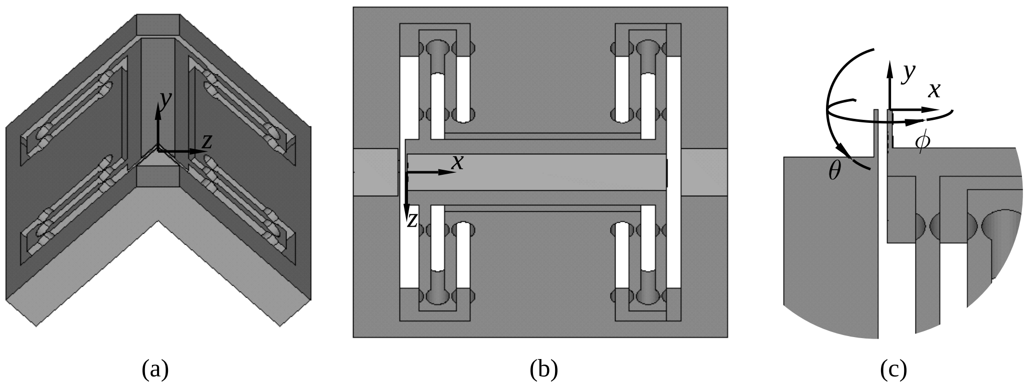


Abb. 5.14: Erster Entwurf für das monolithische Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer. (a) Zwei Doppelparallelfedern sind unter einem rechten Winkel zueinander zusammengesetzt. (b) Aufsicht. (c) Seitenansicht der beiden Röntgenspiegel die sich sich im Abstand 1 mm gegenüberstehen.

Angreifpunktes der Kraft hat, wurde dieser variiert und die daraus resultierenden Winkeländerungen $\Delta\theta$ und $\Delta\phi$ zwischen den Spiegeln berechnet. In Abb. 5.14(c) ist die Geometrie für diese Untersuchung skizziert. Eine Änderung Δy der Höhe des Angreifpunktes verursacht eine Winkeländerung $\Delta\theta$. Eine Änderung Δz des Angreifpunktes führt zu einer Winkeländerung $\Delta\phi$.

Die wichtigsten Ergebnisse sind in Tab. 5.1 zusammengefasst. In der ersten Spalte von Tab. 5.1 ist die Stegbreite der Federgelenke aufgeführt, in der zweiten Spalte die jeweils niedrigste Eigenfrequenz des Entwurfs. Eine Abschirmung von niederfrequenten Schwingungen, wie z.B. Trittschall, ist extrem schwierig. Die Erfahrung zeigt, dass die niedrigste Eigenfrequenz um 1000 Hz liegen sollte (Kuetgens, 2002), damit störende Erschütterungen gut abgeschirmt werden können.

In der dritten Spalte von Tab. 5.1 steht die Winkelempfindlichkeit $\Delta\theta/\Delta y$ in den Einheiten nrad/mm. Die Winkelempfindlichkeit in diesen Einheiten gibt an, welche absolute Winkeländerung in nrad auftritt wenn der Angreifpunkt der Kraft um 1 mm in y-Richtung verschoben wird. Die vierte Spalte zeigt entsprechend die Winkelempfindlichkeit $\Delta\phi/\Delta z$. Aus der Tabelle ist zu erkennen, dass eine Stegbreite von 0,1 mm, wegen der niedrigen Eigenfrequenz nicht praktikabel ist.

Für den späteren Betrieb des Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers ist es notwendig, den idealen Angreifpunkt der Kraft so genau wie möglich zu treffen. Im folgenden soll angenommen werden, dass dies mit einer Genauigkeit von ± 1 μm möglich ist. Bei einer Stegbreite von 0,3 mm folgt, dass sich der Winkel der Spiegel zueinander bereits um ca. 120 nrad ändert, wenn der Angreifpunkt der Kraft um 0,1 mm verschoben wird. Aus Gl. 5.4 folgt daher, dass der verwendete Synchrotronstrahl dann einen maximalen Querschnitt von 40×34 μm^2 haben darf, um die Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer-Resonanzen nicht zu verschmieren.

Stegbreite/mm	ν_{eig}/Hz	$\frac{\Delta\theta}{\Delta y} / \frac{\mathrm{nrad}}{\mathrm{mm}}$	$\frac{\Delta\phi}{\Delta z} / \frac{\mathrm{nrad}}{\mathrm{mm}}$
0,1	160	700	800
0,3	1500	1200	1400
0,5	3000	1500	1700

Tab. 5.1: Die wichtigsten Ergebnisse der FEM-Simulationen für den ersten Entwurf im Vergleich.

5.4.4 Entwurf 2

Bei der Abstandsänderung der Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer-Spiegel darf der bewegliche Röntgenspiegel durchaus eine zusätzliche Bewegung senkrecht zu der gewünschten Bewegung ausführen. Eine einfache Parallelfeder, wie in Abb. 5.1 gezeigt, kann also auch als Grundlage für das monolithische Fabry-Pérot Interferometer dienen. Abbildung 5.15 zeigt den Ausgangsentwurf.

Es wurden verschiedene Stegbreiten, Breiten des gesamten Entwurfs und verschiedene Formen des beweglichen Balkens untersucht. Der Entwurf ist 8 cm lang, 6 cm hoch und 1,5 cm tief. Um ein geplantes Vernetzen und ein schnelles Verändern des Entwurfs zu ermöglichen, wurde er zunächst aus 176 quaderförmigen Einzelvolumina erstellt. Der bewegliche Röntgenspiegel ist in der Mitte des beweglichen Balkens angebracht, weil an dieser Stelle die geringste Winkelempfindlichkeit zu erwarten ist.

In Abb. 5.16 sind die Randbedingungen gezeigt: der zentrale Teil (2) des Entwurfs wird mit der Dreipunktmethode festgehalten. Der Angreifpunkt der Kraft wird für die Berechnung der Eigenschaften des Konstruktionsentwurfs variiert. Um einen Verstellweg von 10 μm zu erreichen, wird eine Kraft von 5,4 N, bei einer Stegbreite von 0,3 mm, benötigt. Greift die Kraft noch in Höhe des Balkens (1) an, Position (a) in Abb. 5.16, so verformt sich der Balken S-förmig wie in Abb. 5.17(a) gezeigt. Die geringste Deformierung des Balkens ist zu erwarten, wenn die Kraft auf der halben Höhe der Federgelenke angreift, Position (b) in Abb. 5.16 (Jones und Young, 1956). Die Verformung für diesen Fall ist in Abb. 5.17(b) gezeigt.

Zunächst wurde ermittelt, wie hoch die Eigenfrequenz des Entwurfs bei Stegbreiten von 0,1 mm, 0,3 mm und 0,5 mm ist. Hier ergab sich eine Eigenfrequenz von ν_{eig}=160 Hz bei einer Stegbreite von 0,1 mm. Bei einer Stegbreite von 0,3 mm, bzw. 0,5 mm lag die niedrigste Eigenfrequenz bei

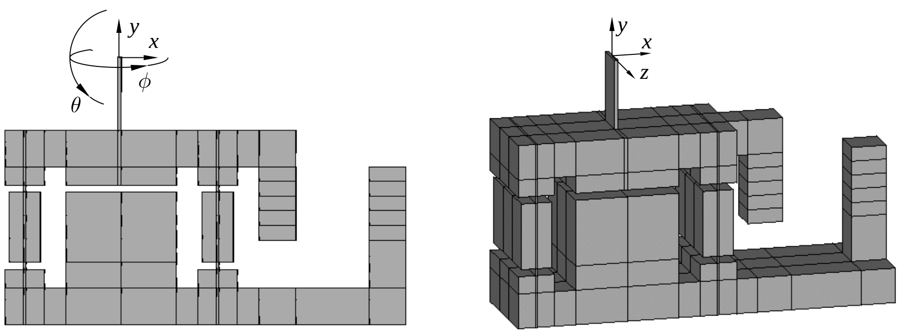


Abb. 5.15: Skizze der untersuchten Parallelfeder.

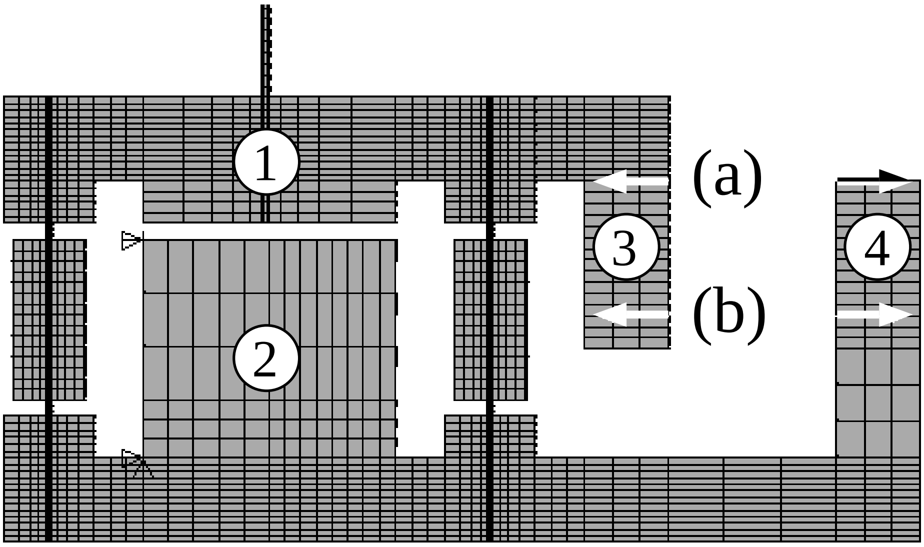


Abb. 5.16: Randbedingungen für den Entwurf, welcher mit der Dreipunktmethode an dem zentralen Block (2) gehalten wird. Die verursachende Kraft greift entweder direkt am Balken (1) an, Position (a), oder an der Verlängerung (3) des Balkens in Höhe der Mitte der Federgelenke an, Position (b). Die entgegengesetzte Kraft greift entsprechend an den Rahmen (4) an.

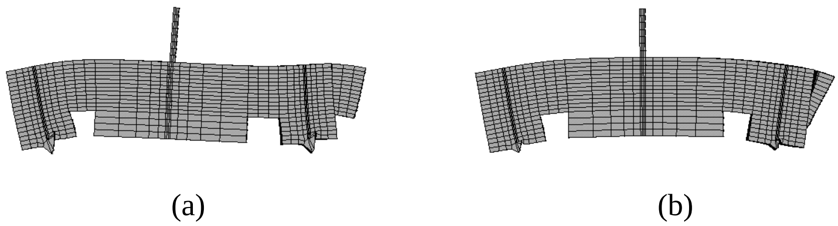


Abb. 5.17: Seitenansicht der Verformung des beweglichen Balkens. Die Auslenkung ist 50 000-fach vergrößert dargestellt. (a) Die verursachende Kraft greift direkt am Balken an. (b) Die Kraft greift an der Verlängerung des Balkens in Höhe der Mitte der Federgelenke an.

820 Hz bzw. bei 1800 Hz.

Weil die niedrigste Eigenfrequenz um 1000 Hz liegen sollte, wurde die Winkelempfindlichkeit bezüglich der Änderung der y- bzw. der z-Koordinate des Angreifpunktes nur bei Stegbreiten von 0,3 mm und 0,5 mm ermittelt. Die Ergebnisse sind in Tab. 5.2 zusammengefasst. Da die Winkelempfindlichkeit des Entwurfs mit einer Stegbreite von 0,5 mm viermal so groß wie bei einer

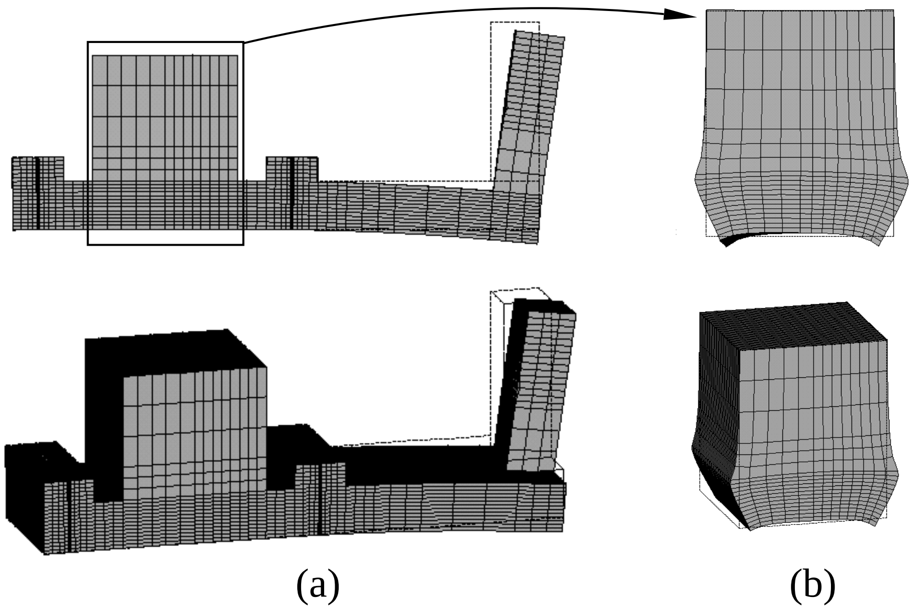


Abb. 5.18: Verformung der Basis. (a) 5 000-fach vergrößerte Auslenkung und (b) zentraler Teil, 500 000-fach vergrößerte Auslenkung.

Stegbreite von 0,3 mm ist, wird nur noch der Entwurf mit einer Stegbreite von 0,3 mm betrachtet.

Es zeigt sich außerdem, dass der obere Teil des zentralen Blocks (2) sich (praktisch) nicht verformt. Der zweite (unbewegliche) Röntgenspiegel kann daher durch eine Verlängerung dieses Blocks realisiert werden. Abbildung 5.18(a) zeigt die Verformung der Basis, die Auslenkung ist 5 000-fach vergrößert dargestellt. Die Verformung des zentralen Blocks (2) ist in Abb. 5.18(b) nochmals gezeigt, allerdings mit einer zusätzlichen 100-fachen Vergrößerung der Auslenkung. Es ist selbst bei 500 000-facher Vergrößerung gut zu er-

Stegbreite/mm	ν_{eig}/Hz	$\frac{\Delta\theta}{\Delta y}\Big/\frac{\text{nrad}}{\text{mm}}$	$\frac{\Delta\phi}{\Delta z}\Big/\frac{\text{nrad}}{\text{mm}}$
0,1	160	—	—
0,3	820	150	250
0,5	1800	600	1000

Tab. 5.2: Die wichtigsten Ergebnisse der FEM-Simulationen für den zweiten Entwurf im Vergleich.

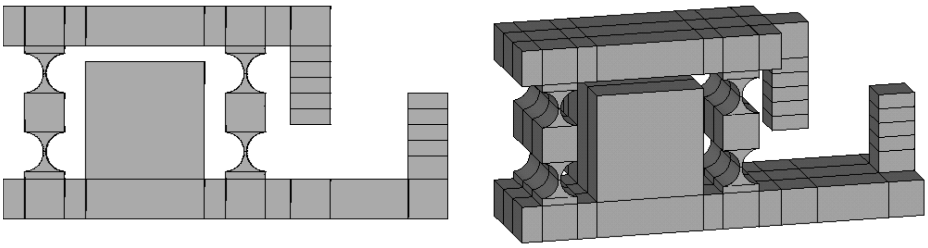


Abb. 5.19: Skizze der modifizierten Parallelfeder. Es wurden nur die Federelemente verändert, damit diese technisch realisierbar sind.

kennen, dass der obere Teil des zentralen Blocks sich nicht verformt, die gestrichelten Linien zeigen die jeweils undeformierte Form.

Mit diesem Wissen ist der Entwurf so modifiziert worden, dass die Federgelenke auch durch Bohrungen herstellbar sind, wie in Abb. 5.19 gezeigt. Die Breite der Stege an der schmalsten Stelle, beträgt ebenfalls 0,3 mm. Allerdings wird die Konstruktion dadurch etwas steifer, was zu einer Erhöhung der Eigenfrequenz auf 1140 Hz führt.

Erste Simulationen ergaben ein deutlich größere Winkelempfindlichkeit bezüglich ϕ. Die Ursache ist eine Verdrehung des beweglichen Balkens (1), die auftritt wenn die Kraft nicht mittig bezüglich z angreift. Der Röntgenspiegel am beweglichen oberen Balken (1) wurde bei den Simulationen zunächst nicht berücksichtigt.

Bezüglich y greift die Kraft immer auf halber Höhe der Federgelenke an, (Position (b) in Abb. 5.16). In Abb. 5.20(a) ist die Verformung des Balkens gezeigt, die durch eine Kraft von 5,4 N verursacht wird, welche 2,5 mm entfernt vom Mittelpunkt bezüglich z angreift. Wegen der starken Verformung wurde der Balken zunächst, wie in Abb. 5.21 gezeigt, verstärkt. In Abb. 5.20(b) ist seine Verformung für die gleiche Kraft wie in Abb. 5.20(a) gezeigt. Schließlich wurde die in Abb. 5.22 gezeigte Form des Balkens untersucht, das Ergebnis ist in Abb. 5.23(a) dargestellt. Es tritt fast keine Verdrehung des Balkens auf. Die Verstärkung des Balkens hat einen weiteren günstigen Effekt: wegen der erhöhten Stabilität nimmt auch die Winkelempfindlichkeit in θ ab, s. auch Abb. 5.23(b). Die Verstärkung des Balkens hat allerdings auch eine Zunahme seiner Masse zur Folge, daher sinkt die niedrigste Eigenfrequenz auf 880 Hz.

Abbildung 5.22 zeigt den optimierten Entwurf. Der gezeigte (endgültige) Entwurf ist 8 cm lang, 6 cm hoch und 2,25 cm tief, wobei der bewegliche Teil 1,5 cm tief ist. Die Verformung des Entwurfs ist in Abb. 5.24 gezeigt. Die Auslenkung ist 200-fach vergrößert dargestellt, der zweite Röntgenspiegel ist zur besseren Darstellung nicht gezeigt. Der bewegliche Balken und somit

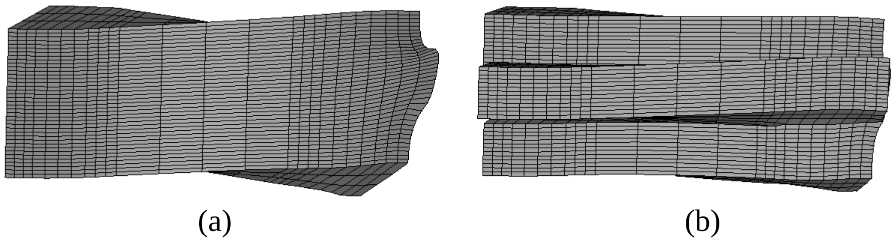


Abb. 5.20: Verformung des beweglichen Balkens (Aufsicht), die Auslenkung ist 200 000-fach vergrößert dargestellt. (a) Balken wie in Abb. 5.19 gezeigt. (b) Balken wie in in Abb. 5.21. Verursacht wurde die Deformierung durch eine Kraft von 5,4 N die 2,5 mm außerhalb der Mitte des Konstruktionsentwurfs bezüglich z angreift.

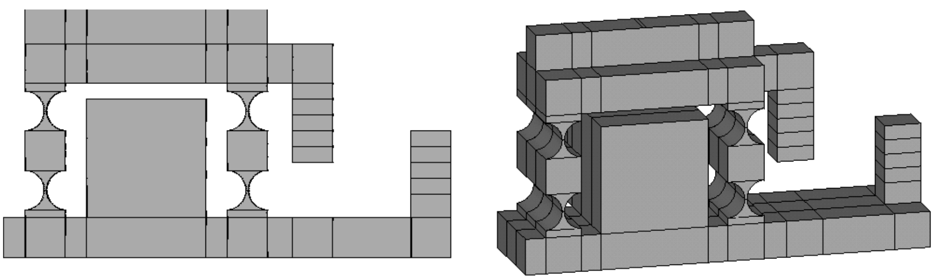


Abb. 5.21: Skizze der zweifach modifizierten Parallelfeder.

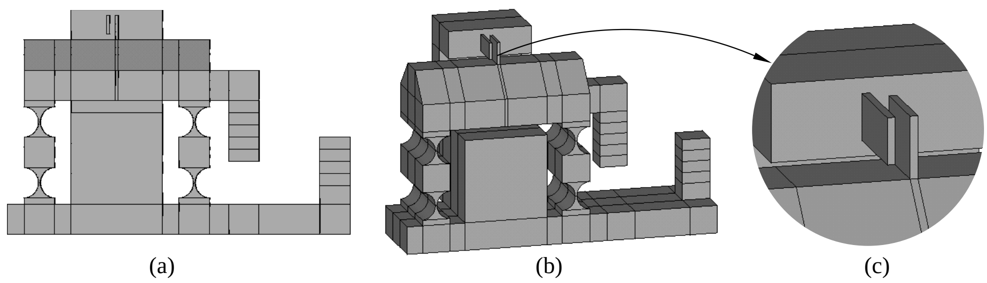


Abb. 5.22: Skizze des endgültigen Entwurfs. (a) Seitenansicht. (b) Perspektivische Ansicht. (c) Detailansicht der beiden Röntgenspiegel.

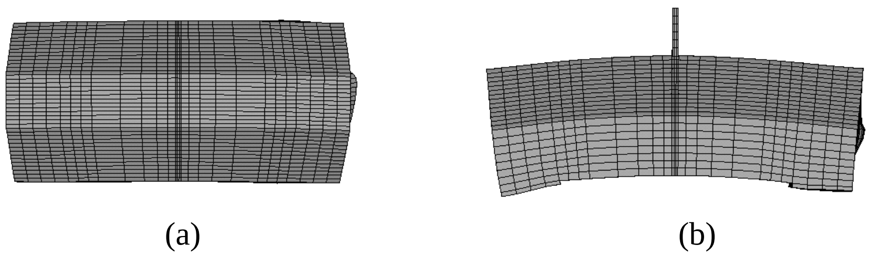


Abb. 5.23: Verformung des beweglichen Balkens des endgültigen Entwurfs aus Abb. 5.22. Die Auslenkung ist 200 000-fach vergrößert dargestellt. (a) Aufsicht. (b) Seitenansicht.

auch der bewegliche Röntgenspiegel wird 10 μm ausgelenkt.

In Tab. 5.3 sind die wichtigsten Ergebnisse für diesen Entwurf zusammengefasst. Aus Tab. 5.3 und Gl. 5.4 folgt, dass sich unter der Annahme, dass der Angreifpunkt der Kraft auf etwa 0,1 mm genau bestimmt werden kann, für die zulässige Ausdehnung des verwendeten Synchrotronstrahls $1500 \times 140 \mu\mathrm{m}^2$ ergibt.

Der gewünschte Mindestverstellweg von 10 μm ist mit dem Entwurf leicht zu erreichen, da man sich bis zu einem Verstellweg von 30 μm noch im elastischen Bereich befindet. Dabei wurde von einem Elastizitätsmodul von $4,25 \times 10^{11}$ Pa und einer Bruchfestigkeit von 2×10^8 Pa ausgegangen (Stettler-SA, 2004).

Stegbreite/mm	ν_{eig}/Hz	$\frac{\Delta\theta}{\Delta y} / \frac{\mathrm{nrad}}{\mathrm{mm}}$	$\frac{\Delta\phi}{\Delta z} / \frac{\mathrm{nrad}}{\mathrm{mm}}$
0,3	860	$\simeq$30	330

Tab. 5.3: Die Ergebnisse der FEM-Simulationen für den endgültigen Entwurf.

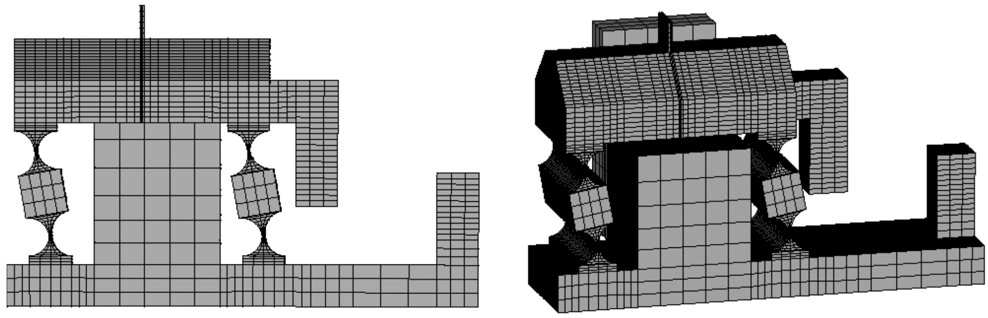


Abb. 5.24: Verformung des endgültigen Entwurfs, mit 200-fach vergrößerter Auslenkung dargestellt.

5.4.5 Vergleich beider Entwürfe

Für beide Entwürfe wurde ermittelt, welche maximale Ausdehnung der beim Experiment verwendete Synchrotronstrahl haben darf, um die Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer-Resonanzen nicht zu verschmieren. Ohne Fokussierung des Synchrotronstrahls kann typischerweise eine Strahlgröße von etwa $200 \times 1000\ \mu\mathrm{m}^2$ erreicht werden. Eine Fokussierung auf deutlich kleinere Querschnitte ist nur bei gleichzeitiger Erhöhung der Strahldivergenz möglich. Eine Erhöhung der Divergenz bedeutet, dass gleichzeitig der Abstand der Spiegel kleiner werden muss (s. Abschnitt 5.1.1), diese Möglichkeit soll deswegen nicht weiter verfolgt werden.

Für den in Abschnitt 5.4.3 besprochenen Entwurf 1 bedeutet dies, dass er nicht geeignet ist. Der verwendete Synchrotronstrahl darf nur einen maximalen Querschnitt von $70 \times 60\ \mu\mathrm{m}^2$ haben, das ist ohne zusätzliche Fokussierung selbst an modernen Quellen (noch) nicht möglich.

Entwurf 2, welcher in Abschnitt 5.4.4 besprochen wurde, bietet dagegen eine mögliche Lösung. Hier sollte der verwendete Synchrotronstrahl einen Querschnitt von höchstens $1500 \times 140\ \mu\mathrm{m}^2$ haben. Die geringe Ausdehnung von 140 μm ist allerdings nur senkrecht zur Synchrotronringebene zu erreichen. Die auf diesem Entwurf basierende Konstruktion müsste daher so aufgestellt werden, dass die x-y-Ebene der Konstruktion parallel zu der Ebene des Synchrotronringes liegt.

Um den Einfluss der Schwerkraft auf den so angeordneten Entwurf zu berechnen, wird die Erdbeschleunigung von 9,81 $\mathrm{m/s}^2$ in z-Richtung angenommen, die daraus resultierende Verformung ist, mit 500 000-facher Vergrößerung der Auslenkung, in Abb. 5.25 zu sehen. Der aus dieser Verformung entstandene Winkel ϕ zwischen den Spiegeln beträgt 50 nrad, durch eine Verschiebung des Angriffpunktes von 150 μm kann dies korrigiert werden. Die

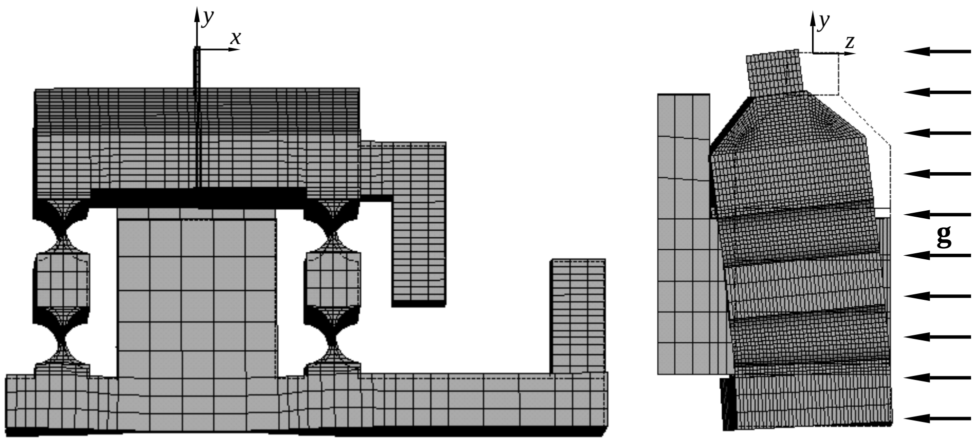


Abb. 5.25: Verformung des endgültigen Entwurfs unter dem Einfluss der Gravitation. Die Auslenkung ist 500 000-fach vergrößert gezeigt. Die Erdbeschleunigung **g** steht senkrecht auf der x-y-Ebene des Entwurfs.

Winkeländerung in θ beträgt nur 0,7 nrad. Allerdings wird der bewegliche Spiegel zusätzlich um 250 nrad um die x-Achse verdreht. Sind die reflektierenden Atomebenen nicht exakt parallel zu der Spiegeloberfläche, so beträgt die daraus resultierende Winkelabweichung höchstens 4,3 nrad, wenn der Winkel zwischen Spiegeloberfläche und den reflektierenden Atomebenen nicht größer als 1° ist. Diese mögliche Winkelabweichung liegt allerdings unter der Mindestforderung an die Parallelität von 4,8 nrad, wenn eine Strahlbreite von 1 mm verwendet wird.

Zusätzlich wurde noch untersucht, wie sich eine Änderung der Breite des Entwurfs auswirkt. Zunächst wurde ein 1 cm breiterer Entwurf betrachtet. Dabei zeigt sich, dass die zu erwartende Abnahme der Winkelempfindlichkeit in ϕ lediglich 14% beträgt. Die Herstellung würde wegen der erhöhten Breite deutlich erschwert werden und die Materialkosten wären etwa um 50% höher. Betrachtet man dagegen einen nur 1 cm breiten Entwurf, so zeigt sich, dass sich die Winkelempfindlichkeit in ϕ etwa verdoppelt. Der in Abb. 5.22 gezeigte 1,5 cm breite Entwurf ist somit eine gute Möglichkeit, ein monolithisches Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer zu realisieren.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

6.1 Zusammenfassung der Ergebnisse des Vier-Strahlfalls

In Kapitel 3 wurde die Mehrstrahl-Braggstreuung unter der Bedingung, dass eine der Braggreflexionen eine Rückreflexion ist, untersucht. Unter dieser Voraussetzung treten zusätzliche Reflexionen immer paarweise auf, s. Abschnitt 2.3.1. Mit dem Vier-Strahlfall wurde der Mehrstrahlfall in Rückstreugeometrie mit der kleinstmöglichen Anzahl von Reflexionen untersucht. Die Ergebnisse der Messungen und die Berechnungen auf Grundlage der dynamischen Theorie der Röntgenstreuung stimmen gut überein.

Die Streuvektoren liegen in einer Ebene, der *Grundebene*. Die Streuvektoren der beiden zusätzlichen Wellen stehen senkrecht aufeinander und ihre Summe ist der Streuvektor der rückgestreuten Welle.

Die maximale Reflektivität in den Rückstreukanal wird über einen großen Winkelbereich des Einfallswinkels von 1,2 mrad erzielt.

Bei exakter Rückstreuung sinkt die experimentell gemessene Intensität der rückgestreuten Welle um 50%. Die vergleichenden Rechnungen mithilfe der dynamischen Theorie zeigen, dass für weniger divergente Einfallsstrahlung dieses Absinken sogar noch stärker sein kann, s. Abb. 2.9.

Durch eine kleine Winkelabweichung von der Position exakter Rückstreuung in der Größe von 5-10 μrad kann die maximale Reflektivität wieder erreicht werden. Diese Winkelabweichung muss allerdings *in der Grundebene* stattfinden: $\Theta_{\|}$ muss verändert werden, vergl. Abb. 2.8

Wenn $\Theta_{\|}$ bei $\Theta_{\|} = 0$ fixiert ist, kann die maximal mögliche Reflektivität in den Rückstreukanal auch nicht durch Verändern von $\Theta_{\perp}$ erreicht werden.

6.2 Zusammenfassung der FEM Simulationen

In Kapitel 5 wurden zwei unterschiedliche Entwürfe für den Bau eines Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers vorgestellt. Die Eigenschaften beider Entwürfe wurden mit der Methode der finiten Elemente untersucht. Die Grundlagen dieser Methode wurden ebenfalls kurz dargestellt.

Die berechneten Eigenschaften beider Entwürfe wurden mit den Anforderungen, die an ein solches Instrument gestellt werden müssen, verglichen. Bei beiden Entwürfen wurde davon ausgegangen, dass der Verstellweg des beweglichen Röntgenspiegels 10 μm beträgt. Die Ergebnisse sind in den Tabellen 5.1 und 5.3 zusammengefasst. Es zeigt sich, dass nur der zweite Entwurf die Anforderungen erfüllen kann.

Der gewünschte Mindestverstellweg von 10 μm ist mit dem Entwurf leicht zu erreichen.

6.3 Ausblick

Wegen der Schärfe ihrer Resonanzen sind Fabry-Pérot Interferometer ein unentbehrliches Werkzeug in der Optik im Bereich des sichtbaren Lichts. Das Interesse daran, dieses Werkzeug auch für die Röntgenoptik zu nutzen, ist seit der ersten Veröffentlichung von Steyerl und Steinhauser (1979) zu diesem Thema unvermindert groß.

Das erste erfolgreiche Experiment an einem Testaufbau von Shvyd'ko et al. (2003) zeigte, dass ein Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer machbar ist. Gleichzeitig zeigte sich im Verlauf des Experiments, welche Probleme noch zu bewältigen sind. Die wichtigste Anforderung an ein Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer ist die an die Parallelität der Röntgenspiegel. Dieses Problem ist durch einen monolithischen Aufbau lösbar. In dieser Arbeit wurden zwei Entwürfe für ein solches Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer aus α-Al_2O_3 vorgestellt. Es konnte ein Konstruktionsentwurf entwickelt werden, welcher den notwendigen Anforderungen entspricht und der realisierbar ist. Die Untersuchungen zeigen außerdem, wie ein Röntgen-Fabry-Pérot Interferometer dieses Typs betrieben werden kann.

Da α-Al_2O_3 durchsichtig ist, kann es auch als Basismaterial für ein optisches Fabry-Pérot Interferometer dienen, wenn man die optischen Spiegel z.B. durch aufgedampfte Dielektrika realisiert. Auf diese Weise wäre ein kombiniertes Fabry-Pérot Interferometer für optische und Mössbauer-Photonen herstellbar.

Für die nötige Rückreflexion der Mössbauerstrahlung kann der $(1\,3\,\bar{4}\,28)$-Reflex in α-Al_2O_3 genutzt werden. Dieser Reflex ist in Rückstreuung allerdings ein Vier-Strahlfall. Die zusätzlichen Reflexe können, wie bereits erwähnt, die Reflektivität in den gewünschten Rückstreukanal vermindern. Dieses Problem kann durch eine kleine Winkelabweichung, in eine bestimmte Richtung, von exakter Rückstreuung gelöst werden.

Ausreichend große α-Al_2O_3 Kristalle für den Bau des vorgeschlagenen monolithischen Röntgen-Fabry-Pérot Interferometers sind erhältlich (Schmid et al., 1994). Die Qualität von α-Al_2O_3 Kristallen kann durch Röntgentopographie überprüft werden (Chen et al., 2003). Die Technik zur Herstellung von dünnen und verspannungsfreien Röntgenspiegeln aus α-Al_2O_3 ist bekannt (Lerche, 2000).

Das Ziel, ein kombiniertes Fabry-Pérot Interferometer zu realisieren, rückt mit den vorliegenden Ergebnissen in greifbare Nähe. Die mit diesem Instrument angestrebte Anwendung in der Metrologie ist möglich.

Der zukünftige Weg dorthin wird allerdings zunächst von der Bewältigung der technischen Probleme bei der Herstellung eines solchen monolithischen kombinierten Fabry-Pérot Interferometers dominiert werden.

Literaturverzeichnis

ANSYS. ANSYS Inc., Canonsburg, PA; U.S.A., October 2002. Release 7.0.

G. Basile, P. Becker, A. Bergamin, G. Cavagnero, A. Franks, K. Jackson, U. Kuetgens, G. Mana, E.W. Palmer, C.J. Robbie, M. Stedman, J. Stümpel, A. Yacoot, and G. Zosi. Combined optical and X-ray interferometry for high-precision dimensional metrology. *Proc. R. Soc. London*, A 456: 701–729, 2000.

G. Basile, A. Bergamin, G. Cavagnero, G. Mana, E. Vittone, and G. Zosi. Measurement of the Silicon (2 2 0) Lattice Spacing. *Phys. Rev. Lett.*, 72: 3133–3136, 1994.

B.W. Batterman and H. Cole. Dynamical diffraction of X rays by perfect crystals. *Rev. of Mod. Phys.*, 36:681–717, 1964.

P. Becker, K. Dorenwendt, G. Ebeling, R. Lauer, W. Lucas, R. Probst, H.-J. Radermacher, G. Reim, P. Seyfried, and H. Siegert. Absolute Measurement of the (2 2 0) Lattice Plane Spacing in a Silicon Crystal. *Phys. Rev.*, 46: 1540, 1981.

P. Becker, P. Seyfried, and H. Siegert. Translation stage for a scanning x-ray optical interferometer. *Rev. Sci. Instrum.*, 58:207–211, 1987.

A. Bergamin, G. Cavagnero, and G. Mana. Lattice bending in x-ray interferometers. *Z. für Physik*, B 76:25–31, 1989.

A. Bergamin, G. Cavagnero, G. Mana, and G. Zosi. Scanning X-ray interferometry and the silicon lattice parameter: towards 10^{-9} relative uncertainty? *Eur. Phys. Journal*, B 9:225–232, 1999.

U. Bonse and M. Hart. Principles and Design of Laue-Case X-ray Interferometers. *Z. f. Physik*, 188:154–164, 1965a.

U. Bonse and M. Hart. An x-ray interferometer. *Appl. Phys. Letters*, 6:155, 1965b.

U. Bonse and E. te Kaat. A Two-Crystal X-Ray Interferometer. *Z. f. Physik*, 214:16–21, 1968.

O.V. Boyko, A.M. Negriyko, and L.P. Yatsenko. Iodine-stabilized He-Ne laser pumped by transverse rf-discharge. *Semiconductor Phys.*, 2:133–141, 1999.

O. Brümmer, H.R. Höche, and J. Nieber. X-Ray Diffraction in the Bragg Case at Bragg Angles of about $\pi/2$. *Phys. Status Solidi*, A53:565, 1979.

A. Caticha and S. Caticha-Ellis. Dynamical theory of x-ray diffraction at Bragg angles near $\pi/2$. *Phys. Rev.*, B25(2):971–983, 1982.

A. Caticha and S. Caticha-Ellis. A fabry-perot interferometer for hard x-rays. *phys. stat. sol. (a)*, 119:643–654, 1990.

A. Caticha and S. Caticha-Ellis. A thermal neutron interferometer of the fabry-perot type. *phys. stat. sol. (a)*, 153:29–46, 1996.

W.M. Chen, P.J. McNally, Yu.V. Shvyd'ko, T. Tuomi, A.N. Danilewsky, and M. Lerche. Dislocation analysis for heat-exchanger method grown sapphire with white beam synchrotron X-ray topography. *J. Cryst. Growth*, 252: 113–119, 2003.

J.R. Christman. *Festkörperphysik: die Grundlagen*. Oldenbourg, München, 1 edition, 1992.

R.S. Clay. The mechanical development of the microscope. *J. Roy. Micr. Soc.*, 57:1–7, 1937.

R. Colella. Multiple diffraction of x-rays and the phase problem. Computational procedures and comparison with experiment. *Acta Cryst.*, A30(3): 413–423, 1974.

R. Colella and A. Luccio. Proposal for a free electron laser in the x-ray region. *Opt. Commun.*, 50:41–44, 1984.

C. Cusatis, D. Udron, I. Mazzaro, C. Giles, and H. Tolentino. X-ray back-diffraction profiles with a si (1 1 1) plate. *Acta Cryst*, A52:614, 1996.

R. Deslattes and A. Henins. X-Ray to Visible Wavelength Ratios. *Phys. Rev. Lett.*, 31:972–975, 1973.

R. Deslattes, A. Henins, H.A. Bowman, R.M. Schoonover, C.L. Carroll, I.L. Barnes, L.A. Machlan, L.J. Moore, and W.R. Shields. Determination of the Avogadro Constant. *Phys. Rev. Lett.*, 33:463–466, 1974.

R.D. Deslattes. Optical and X-Ray Interferometry of a Silicon Lattice Spacing. *Appl. Phys. Lett.*, 15:386–388, 1969.

C. Giles and C. Cusatis. Measurement of transmitted diffraction profiles on Bragg angles at $\pi/2$. *Apl. Phys. Lett.*, 59(6):641–643, 1991.

W. Graeff and G. Materlik. Millielectron Volt Energy Resolution in Bragg Backscattering. *Nucl. Instr. Methods Phys. Res.*, 195:97, 1982.

M. Hart. An ångström ruler. *J. Physics*, D1:1405, 1968.

Chr. Hoffrogge and H.-J. Rademacher. Eine Doppelparallelfeder als Präzisionsführung. *PTB Mitt.*, 83:79–82, 1973.

J.D. Jackson. *Classical electrodynamics*. John Wiley and Sons, New York, 2 edition, 1975.

R.V. Jones. Parallel and rectilinear spring movements. *J. Sci. Instrum.*, 28: 38–41, 1951.

R.V. Jones and I.R. Young. Some parasitic deflexions in parallel spring movements. *J. Sci. Instrum.*, 33:11–15, 1956.

S. Kikuta, Y. Imai, T Iizuka, Y. Yoda, X.-W. Zhang, and K. Hirano. X-ray diffraction with a bragg angle near $\pi/2$ and its applications. *J. Synchrotron Rad.*, 5:670, 1998.

C. Kittel. *Einführung in die Festkörperphysik*. Oldenbourg, München, 10 edition, 1993.

V.G. Kohn, I.V. Kohn, and E.A. Manykin. Diffraction of x-rays at a Bragg angle of $\pi/2$ (back reflection) with consideration of multi-wave effects. *JETP*, 89:500, 1999.

V.G. Kohn, Yu.V. Shvyd'ko, and E. Gerdau. On the theory of an x-ray fabry-perot interferometer. *phys. stat. sol. (b)*, 221:597–615, 2000.

K. Kohra and T. Matsushita. Some Characteristics of Dynamical Diffraction at a Bragg Angle of about $\pi/2$. *Z. Naturforsch.*, A27:484, 1972.

U. Kuetgens. private communication, 2002. PTB Braunschweig.

V.I. Kushnir and E.V. Suvorov. Experimental observation of a half-degree angular interval of x-ray reflection in backscattering ($\theta \approx \pi/2$) from a high quality crystal. *JETP Lett.*, 44:262, 1986.

M. Lerche. Untersuchung von Saphireinkristallen. Diplomarbeit, Universität Hamburg, 2000.

M. Lucht. Eine hochstabile Temperaturregelung. Diplomarbeit, Universität Hamburg, 1998.

M. Lucht, M. Lerche, H.C. Wille, Yu.V. Shvyd'ko, H.D. Rüter, E. Gerdau, and P. Becker. Precise measurement of the lattice parameters of al_2o_3 in the temperature range 4.5-250 k using the mössbauer wavelength standard. *J. Appl. Cryst.*, 36:1075–1081, 2003.

L.-S. Ma, L. Robertsson, S. Picard, M. Zucco, Z. Bi, S. Wu, and R.S. Windeler. First international comparison of femtosecond laser combs at the international bureau of weights and measures. *Opt. Lett.*, 29:641–643, 2004.

S. Moaveni. *Finite Element Analysis*. Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 1999.

T.J. Quinn. Practical realization of the definition of the metre, including recommended radiations of other optical frequency standards (2001). *Metrologia*, 40:103–133, 2003.

F. Schmid, C. P. Khattak, and D. M. Felt. Producing Large Sapphire for Optical Applications. *The American Ceramic Society Bulletin*, 73(2):39–44, 1994.

F.E. Scire and E.C. Teague. Piezodriven 50 μm range stage with subnanometer resolution. *Rev. Sci. Instrum.*, 49:1735–1740, 1978.

D. Shu, T.S. Toellner, and E.E. Alp. Design of a High-Resolution High-Stability Positioning Mechanism for Crystal Optics. *J. Sync. Rad.*, 1999.

Yu.V. Shvyd'ko. *NIMBUS, Normal incidence multiple-beam x-ray Bragg diffraction*, 2003. Fortran77 source code.

Yu.V. Shvyd'ko. *X-ray Optics. High Energy-Resolution Applications*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo, Hong Kong, Barcelona, Budapest, 2004.

Yu.V. Shvyd'ko and E. Gerdau. Backscattering mirrors for x rays and Mößbauer radiation. *Hyperfine Interactions*, 123/124:741, 1999.

Yu.V. Shvyd'ko, E. Gerdau, J. Jäschke, O. Leupold, M. Lucht, and H.D. Rüter. Exact Bragg backscattering of x rays. *Phys. Rev.*, B57:4968–4971, 1998.

Yu.V. Shvyd'ko, M. Lerche, J. Jäschke, M. Lucht, E. Gerdau, M. Gerken, H.D. Rüter, H.-C. Wille, P. Becker, E.E. Alp, W. Sturhahn, J. Sutter, and T.S. Toellner. γ-Ray Wavelength Standard for Atomic Scales. *Phys. Rev. Lett.*, 85:495–498, 2000.

Yu.V. Shvyd'ko, M. Lerche, H.-C. Wille, E. Gerdau, M. Lucht, H.D. Rüter, E.E. Alp, and R. Khachatryan. X-ray Interferometry with Microelectronvolt Resolution. *Phys. Rev. Lett.*, 90:013904, 2003.

Yu.V. Shvyd'ko, M. Lucht, E. Gerdau, M. Lerche, E.E Alp, W. Sturhahn, J.P. Sutter, and T.S. Toellner. Measuring wavelengths and lattice constants with the Mössbauer wavelength standard. *J. Synchrotron Rad.*, 9:17–23, 2002.

S.A. Stepanov, E.A. Kondrashkina, and D.V. Novikov. X-ray surface back diffraction. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.*, A301:350–357, 1991.

Stettler-SA. Characteristics of verneuil corundum (sapphire). www.stettler-saphir.ch, 2004.

A. Steyerl and K.-A. Steinhauser. Proposal of a Fabry-Perot-Type Interferometer forX-Rays. *Zeitschrift für Physik*, B 34:221–227, 1979.

J.P. Sutter. *Applications of Special X-Ray Diffraction Cases in Silicon Crystals*. Dissertation, Purdue University, 2000.

J.P. Sutter, E.E. Alp, M.Y. Hu, P.L. Lee, H. Sinn, W. Sturhahn, and T.S. Toellner. Multiple-beam x-ray diffraction near exact backscattering in silicon. *Phys. Rev.*, B 63:094111, 2001.

M. Tanaka. The Dynamic Properties of a Monolithic Mechanism with Notch Flexure Hinges for Precision Control of Orientation and Position. *Jap. J. Appl. Phys.*, 22:193–200, 1983. translated version.

W.E. Tefft. Elastic Constants of Synthetic Single Crystal Corundum. *J. Res. NBS*, 70A:277–280, 1966.

J.M. Vaughan. *The Fabry-Perot Interferometer*. Adam Hilger, Bristol and Philadelphia, 1989.

Z. Xiaowei, Y. Yoda, and Y. Imai. Precision wavelength measurement of the 14.4 kev Mössbauer photon. *J. Synchrotron Rad.*, 7:189–195, 2000.

O.C. Zienkiewicz. *Methode der finiten Elemente*. Carl Hanser Verlag, München und Wien, 1975. übersetzte Fassung.

Danksagung

Nach der nun hinter mir liegenden Arbeit in der Forschungsgruppe Hyperfeinwechselwirkung des Instituts für Experimentalphysik der Universität Hamburg, gilt es meinen Dank denen auszusprechen, ohne die das Zustandekommen dieser Arbeit nicht möglich gewesen wäre. Die folgende Aufzählung kann auf keine Fall den Anspruch erheben vollständig zu sein oder meine sehr oft tief empfundene Dankbarkeit getreu wiederzugeben. Dennoch will ich den Versuch wagen.

Für die gute Betreuung und die Hilfe während der ganzen Promotionszeit sei PD Dr. Yu.V. Shvyd'ko sehr herzlich gedankt, vor allem aber auch für die Hilfe dabei meinen weiteren wissentschaftlichen Weg zu suchen und zu finden.

Prof. Dr. E. Gerdau, dem ehemaligen Leiter der Gruppe, gilt mein Dank für seine Anteilnahme am Fortschreiten der Arbeit, sowie für seinen Einsatz am Ende der Promotion, der mir einiges sehr erleichtert hat.

Ich möchte Dr. H.D. Rüter danken für die Durchsicht der Arbeit, die manchmal auch für die ein oder andere Erheiterung sorgte und für viele andere kleine und große Hilfen.

Frau B. Lohl gilt ein besonderer Dank, nicht nur für die Versorgung mit Kaffee, Tee und Naschwerk, sondern auch für die vielen kleinen und großen Hilfen bei organisatorischen Dingen und das ein oder andere aufmunternde Wort zur richtigen Zeit. Unvergessen auch der Mittagstisch aus der "Partypfanne".

Hans-Christian Wille trug auch aus Grenoble zu der manchmal benötigten Motivation bei, dafür und für manch' heitere Stunde möchte ich mich bedanken.

Sehr herzlich danke ich dem Konstrukteur Herrn B. Frensche und seinen Mitarbeiterinnen für die schnelle und zuverlässige Konstruktion von ungezählten Aufträgen.

Herrn S. Fleig dem Leiter der mechanischen Werkstatt und allen seinen Mitarbeitern sei hier, für die prompte und exakte Herstellung von vielen Geräten gedankt ohne die Vieles nicht möglich gewesen wäre.

Für die Reparatur und den stets schnellen Bau benötigter Elektronikbauteile, bedanke ich mich bei Herrn A. Spikowsky, dem Leiter der Elektronik-Werkstatt und seinen Mitarbeitern.

An Verbundenheit, trotz einiger Nasenstupser, nicht zu übertreffen war Horst, Danke dafür.

Dafür, daß ich nicht von der sprichwörtlichen Hand in den Mund leben musste und für ihre Geduld und Anteilnahme bedanke ich mich bei meiner Mutter.

Da es nicht möglich ist in Worte zu fassen, was meine geliebte Pia in der doch manchmal nicht leichten Zeit für mich getan hat, versuche ich es garnicht erst und sage nur: Danke!