

# Depolarisationserscheinungen bei der Röntgenbeugung in Mosaikkristallen

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt der

Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät  
(mathematisch-naturwissenschaftlicher Bereich)  
der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

von Michael Kolbe

geb. am: 15.11.1973    in: Halle (Saale)

Gutachter:

1. Prof. Dr. Hans-Reiner Höche / Halle (Saale)
2. Prof. Dr. Heinrich Graener / Halle (Saale)
3. Prof. Dr. Hans-Jürgen Ullrich / Dresden

Halle (Saale), den 19. September 2002

**urn:nbn:de:gbv:3-000004027**

[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=nbn%3Ade%3Agbv%3A3-000004027>]



---

## Inhaltsverzeichnis

<b>1. EINLEITUNG</b>	<b>3</b>
<b>2. AUFGABENSTELLUNG</b>	<b>12</b>
<b>3. THEORETISCHE GRUNDLAGEN</b>	<b>13</b>
<b>3.1. Elektromagnetische Wellen</b>	<b>13</b>
3.1.1. Vollständig polarisierte monochromatische Wellen	13
3.1.2. Teilweise polarisierte Wellen	14
3.1.3. Beschreibung des Polarisationszustands mit Hilfe der Stokes-Parameter	15
<b>3.2. Geometrische Beugungstheorie</b>	<b>17</b>
<b>3.3. Intensitätstransfergleichungen</b>	<b>20</b>
<b>3.4. Kopplung der Polarisationskomponenten</b>	<b>24</b>
3.4.1. Erweiterung des Polarisationsensors	24
3.4.2. Transfer der Intensität über die Polarisationsvektoren	25
<b>4. EXPERIMENTELLER AUFBAU</b>	<b>30</b>
<b>4.1. Synchrotronstrahlung und ihre Polarisationsseigenschaften</b>	<b>30</b>
<b>4.2. Röntgenoptische Komponenten</b>	<b>33</b>
4.2.1. Analysator	33
4.2.2. Lambdaviertelplättchen / Phasenschieber	34
<b>4.3. Divergenz der Strahlung</b>	<b>34</b>
<b>4.4. Deformation der Probenkristalle</b>	<b>37</b>
<b>4.5. CEMO Beamline im HASYLAB – Aufbau und Strahlengang</b>	<b>37</b>
4.5.1. Strahlführung an der Beamline	37
4.5.2. Einstellung der Lambdaviertelplättchen	41

---

4.5.3.	Justage der Probenkristalle	45
<b>5.</b>	<b>DISKUSSION DER EXPERIMENTELLEN ERGEBNISSE</b>	<b>47</b>
5.1.	Polarisationsuntersuchungen im Zweistrahlfall	47
5.2.	Untersuchungen bei angeregten Mehrstrahlfällen	50
5.2.1.	Anregung mit linear polarisierter Strahlung	50
5.2.2.	Anregung mit zirkular polarisierter Strahlung	57
5.2.3.	Bestimmung des zirkularen Polarisationsgrades	60
5.2.4.	Gleichzeitiger Einsatz beider Phasenschieber	60
<b>6.</b>	<b>ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK</b>	<b>62</b>
<b>7.</b>	<b>LITERATURVERZEICHNIS</b>	<b>65</b>
	<b>ANHANG – HÄUFIG VERWENDETE SYMBOLE</b>	<b>68</b>
	<b>ANHANG - BERECHNUNG MÖGLICHER MEHRSTRAHLFÄLLE UND IHRER <math>\psi</math> - POSITION</b>	<b>70</b>
	<b>ABBILDUNGSVERZEICHNIS</b>	<b>71</b>

## 1. Einleitung

Der erste Nobelpreis für Physik wurde im Jahre 1901 an Wilhelm Conrad Röntgen verliehen in Anerkennung seiner außerordentlichen Verdienste um die Entdeckung der bemerkenswerten Strahlen, die später nach ihm benannt wurden. Das Interesse an dieser Strahlung war sehr groß, da sie Fortschritte in der Medizin versprach, damals besonders den, ohne Öffnen des Körpers in diesen hineinschauen zu können.

Die Erforschung der entdeckten Strahlung unter anderen Aspekten wurde von Physikern vorangetrieben. So konnte 1905 C.G. Barkla mit dem Nachweis der Polarisation dieser Strahlung sie ebenso wie das Licht dem Spektrum der elektromagnetischen Wellen zuordnen. Diese Analogie zum Licht animierte zu weiteren aus der Lichtoptik bekannten Versuchen mit der Röntgenstrahlung.

Elektromagnetische Wellen sind Transversalwellen. Das bedeutet, dass die intensitätsbestimmenden Vektoren, nämlich der elektrische und der magnetische Feldvektor, senkrecht zur Ausbreitungsrichtung schwingen. Dabei bauen sich elektrisches und magnetisches Feld immer senkrecht zueinander auf. Aus diesem Grunde ist es ausreichend, nur einen dieser beiden Feldvektoren in seinem Schwingungsverhalten zu betrachten. Die zur Schwingungsebene des elektrischen Feldvektors senkrechte Ebene, die die Ausbreitungsrichtung enthält, wurde zunächst als Polarisationssebene definiert [BERGMANN, SCHAEFER 1987]. Heutzutage wird vielfach auch diese Schwingungsebene selbst als Polarisationssebene bezeichnet. Im Folgenden wird nur noch der elektrische Feldvektor als der die Polarisation charakterisierende Vektor der Strahlung betrachtet. Beschreibt der Feldvektor im zeitlichen Mittel eine geschlossene Bahn um die Ausbreitungsrichtung, so ist die elektromagnetische Welle polarisiert. Im allgemeinen Fall ist die Welle elliptisch polarisiert. Der Polarisationsvektor beschreibt dann eine elliptische Bahn um den Ausbreitungsvektor. Zirkular und linear polarisierte Strahlung können als Grenzfälle einer elliptisch polarisierten Welle betrachtet werden. Im ersten Fall entartet die Ellipse zu einem Kreis, im zweiten zu einer Linie.

Die Polarisationsseigenschaften einer Strahlung hängen zum einen von ihrer Quelle ab. Zum anderen kann man durch den Einbau optischer Komponenten in den Strahlweg unpolarisierte Strahlung in polarisierte ändern. Polarisierte Röntgenstrahlung hat eine besondere Bedeutung unter anderem bei der Untersuchung magnetischer Eigenschaften von Kristallen.

Die in den Laboren eingesetzten Röntgenröhren emittieren charakteristische Strahlung und Bremsstrahlung. Letztere ist aufgrund der auf die Anode gerichteten Vorwärtsbewegung der Elektronen zum Teil polarisiert. Die charakteristische Strahlung ist unpolarisiert. Es existiert also keine Vorzugsrichtung für den Polarisationsvektor. Um

solche Strahlung zu polarisieren, müssen optische Komponenten eingesetzt werden. Damit ist immer ein Intensitätsverlust verbunden.

Anders ist die Situation bei der Nutzung von Synchrotronstrahlung. Diese ist nämlich wegen der gerichteten Bahn der geladenen Teilchen, die aufgrund ihrer Beschleunigung die Synchrotronstrahlung emittieren, polarisiert. Die Art der Polarisation ist abhängig von der Bahn, die das geladene Teilchen (Elektron oder Positron) durchläuft. Man unterscheidet verschiedene insertion devices (Strahlkonditionierer): Zum einen werden Krümmungsmagnete, Wiggler und Undulatoren eingesetzt. Bei diesen Einrichtungen werden die Teilchen durch Magnetfelder auf eine Bahn parallel zum Speicherring gezwungen und emittieren die Strahlung in dieser Ebene. Die Polarisationseigenschaften der Synchrotronstrahlung sind abhängig von dem vertikalen Emissionswinkel  $\xi$ . Bei einer Abstrahlung genau in der Ebene ( $\xi = 0$ ) ist die Strahlung vollständig linear polarisiert. Ober- und unterhalb der Ebene tritt elliptische Polarisation auf. Der Winkelbereich der Emission der Synchrotronstrahlung ist abhängig von der Energie der Teilchen und hat eine Größenordnung von  $10^{-4}$  rad.

Zum anderen gibt es Strahlkonditionierer, die zirkular polarisierte Strahlung aussenden können. Zu diesem Zweck sind helikale Undulatoren und Wiggler entwickelt worden, in denen die geladenen Teilchen spiralförmige Bahnen durchlaufen und dadurch elliptisch polarisierte Synchrotronstrahlung emittieren. Eine andere Möglichkeit ist die Verwendung asymmetrischer Quellen, die in positiver und negativer Richtung unterschiedlich große Felder erzeugen. Es gab auch Überlegungen, zwei ebene Undulatoren senkrecht zueinander anzuordnen, um dann durch Interferenz der emittierten linear polarisierten Strahlen zirkular polarisierte Strahlung zu erhalten.

Eine weitere Möglichkeit zur Produktion von linear polarisierter Strahlung ist die Anwendung des Brewstergesetzes. Dieses Gesetz besagt, dass der reflektierte Strahl senkrecht zur Reflexionsebene linear polarisiert ist, wenn er mit dem gebrochenen Strahl den Winkel  $90^\circ$  einschließt. Der Brechungsindex von Festkörpern für Röntgenstrahlung ist allerdings nahezu eins ( $10^{-5}$  kleiner als 1), so dass keine spiegelnde Reflexion an der Oberfläche stattfindet. Die Intensität dieser Reflexion beträgt nur  $10^{-10}$  der Eingangsstrahlung. Aufgrund der periodischen Anordnung der Bausteine in einem Kristall wird die Röntgenstrahlung durch die Interferenz der an den Elektronenhüllen gestreuten Strahlung reflektiert. In der Beugung von Röntgenstrahlung am Kristallgitter drückt sich ein allgemeines Prinzip der Physik aus. Dieses besagt, dass das Messinstrument einen Eigenmaßstab in der Größenordnung der zu messenden Größe haben muss. Hier trifft dieses Verhältnis zwischen der Wellenlänge der Röntgenstrahlung und dem Abstand der Gitterpunkte im Kristall zu.

Der die Interferenzbeugung beschreibende Zusammenhang zwischen der Wellenlänge  $\lambda$ , dem Beugungswinkel und dem Kristallgitter, charakterisiert durch den Abstand zwischen den beugenden Netzebenen  $d$ , wird durch die Braggsche Gleichung<sup>1</sup> angegeben:

$$(1-1) \quad 2d \sin \theta_B = n\lambda$$

$\theta_B$  heißt der Braggwinkel und bezeichnet den Winkel zwischen einfallender Strahlung und der beugenden Netzebene,  $n$  ist die Ordnung der Beugung.

Erfüllt der so reflektierte Strahl nun die Bedingung von Brewster, wird also der Strahl unter einem rechten Winkel ( $2\theta_B = 90^\circ$ ) abgelenkt, so ist er senkrecht zur Beugungsebene linear polarisiert [MARK, SZILARD 1926]. Im Gegensatz zur Lichtoptik muss allerdings nicht die Normale der Oberfläche in der von einfallendem und reflektiertem Strahl aufgespannten Beugungsebene liegen, sondern die Normale der reflektierenden Netzebene muss diese Bedingung erfüllen. Fallen beide Normalen zusammen, so handelt es sich um einen symmetrischen Reflex.

Bei der Beschreibung der Polarisation der Strahlung unterscheidet man zwei Komponenten. Diese beiden Komponenten liegen immer senkrecht zueinander und außerdem jeweils senkrecht zur Ausbreitungsrichtung der elektromagnetischen Strahlung. Die Festlegung der Komponenten basiert auf der Lage zur Beugungsebene. Die eine Komponente, die senkrecht zur Beugungsebene steht, wird mit  $\sigma$  und die andere in dieser Ebene liegende Komponente mit  $\pi$  bezeichnet. Somit verändert sich die elektrische Feldrichtung der  $\sigma$ -Komponente beim Beugungsvorgang im Gegensatz zur  $\pi$ -Komponente nicht. Bei der theoretischen Betrachtung des Beugungsgeschehens können diese beiden Komponenten als entkoppelt betrachtet werden. Der Polarisationsfaktor  $C$  ist für  $\sigma$  und  $\pi$  unterschiedlich. Für die senkrecht zur Beugungsebene polarisierten Wellenanteile gilt  $C_\sigma = 1$ , und für die  $\pi$  Anteile gilt  $C_\pi = \cos(2\theta_B)$ . In diesem Faktor zeigt sich auch die theoretische Beschreibung des Brewstergesetzes für die Röntgenstrahlung. Bei einem doppelten Braggwinkel von  $90^\circ$  wird  $C_\pi = 0$  und damit ist der reflektierte Strahl vollständig  $\sigma$ -polarisiert.

Werden zusätzlich zu einer Beugung weitere Netzebenen gleichzeitig in Beugungsposition gebracht, so wird ein Mehrstrahlfall angeregt. Neben dem einfallenden und dem gebeugten Strahl existieren weitere gebeugte Strahlen, die die Intensität des zuerst gebeugten Strahls beeinflussen. Diese Umweganregung wurde erstmals von Renninger beschrieben und kann zur Intensitätsverringerung oder Intensitätsverstärkung führen. Die Bezeichnung der  $\sigma$  – und  $\pi$  – Komponenten dieser zusätzlichen Strahlen bezieht sich auf

---

<sup>1</sup> Im Jahre 1915 haben Vater und Sohn, Sir William Henry und William Lawrence Bragg, für ihre Verdienste bei der Analyse von Kristallstrukturen mit Hilfe von Röntgenstrahlen den Nobelpreis für Physik erhalten.

die Beugungsebene des Primärreflexes, so dass alle  $\pi$  – Komponenten in dieser Ebene liegen. Die  $\sigma$ –Komponenten sind immer senkrecht zu  $\pi$ – Komponenten und der Ausbreitungsrichtung orientiert.

Um aus linear polarisierter Strahlung zirkular polarisierte Strahlung herzustellen, benötigt man in Analogie zur Lichtoptik Lambdaviertelplättchen. Diese Phasenschieber ändern die Phasenbeziehung zwischen den beiden Komponenten  $\sigma$  und  $\pi$  so, dass eine resultierende Phasendifferenz von  $90^\circ$  entsteht. Damit zirkular polarisierte Strahlung entsteht, müssen beide Komponenten gleich stark angeregt werden, da sonst zwar eine Phasenverschiebung auftritt, aber aufgrund der unterschiedlichen Amplituden elliptisch polarisierte Strahlung entsteht.

Für die Entwicklung von Phasenschiebern für die Röntgenwellen unterscheidet man zunächst die Beugung in den beiden möglichen Geometrien. In der Bragggeometrie verlässt die gebeugte Welle den Kristall durch dieselbe Oberfläche, durch die die einfallende auf die beugende Netzebene trifft. Im Lauefall verlässt der reflektierte Strahl den Kristall an der gegenüberliegenden Oberfläche. Die Beugungs- und Polarisationsvorgänge müssen getrennt voneinander für diese beiden unterschiedlichen Fälle betrachtet werden.

In der Lauegeometrie werden innerhalb des Kristalls der dynamischen Theorie entsprechend vier Wellenfelder angeregt, die sich miteinander überlagern und dadurch Pendellösungserscheinungen hervorrufen. Die Dispersionsfläche, die die möglichen Anregungspunkte der Wellen innerhalb des Kristalls kennzeichnet, weist für  $\sigma$ - und  $\pi$ -polarisierte Wellen unterschiedliche Anregungspunkte aus, so dass sich diese Wellen mit unterschiedlichen Wellenvektoren  $\mathbf{K}$  innerhalb des Kristalls ausbreiten.

Im Lauefall existieren für die Anregung der Wellenfelder im Kristall immer 2 Schalen pro Polarisationskomponente. Die Teilwellen eines Wellenfelds werden gleich stark absorbiert, der Kristall besitzt einen Absorptionskoeffizienten für die Strahlung. Für die Wellenfelder, deren Anregungspunkte auf den beiden unterschiedlichen Schalen liegen, gilt aber eine unterschiedlich starke Absorption. Dieses Phänomen wird als anomale Absorption bezeichnet. Die Wellen, welche auf der Schale 2 der Dispersionsfläche angeregt werden, werden deutlich geringer absorbiert als Wellen, die auf der Schale 1 angeregt werden. Dieser Effekt der anomalen Absorption, wurde nach seinem Entdecker als Borrmann-Effekt bezeichnet. Außerdem werden die  $\pi$ -polarisierten stärker als die  $\sigma$ -polarisierten Wellen absorbiert.

Die experimentelle Trennung der Wellenfelder kann mit Hilfe von dicken Kristallen vorgenommen werden, da aufgrund des Borrmann-Effekts das Wellenfeld 1 bei dicken Kristallen absorbiert wird. Durch die stärkere Absorption der  $\pi$ -Komponente der beiden Wellenfelder, die der Schale 2 zuzuordnen sind, kann auch auf diese Weise aus unpolarisierter Strahlung  $\sigma$ -polarisierte Strahlung gewonnen werden.

Die Phasendifferenz  $\phi$  zwischen den  $\sigma$ - und  $\pi$ -Komponenten ist abhängig von der Differenz der  $\mathbf{K}$ -Vektoren  $\Delta\mathbf{K}$  zwischen den Polarisationszweigen einer Schale der Dispersionsfläche. Diese Differenz der  $\mathbf{K}$ -Vektoren hängt vom Einfallswinkel ab und ist in der Mitte des Interferenzbereichs maximal. Bei größerem Abstand von dem die Beugungsbedingung erfüllenden Einfallswinkel wird die Differenz der  $\mathbf{K}$ -Vektoren zu null. Diese Differenz ist für beide Schalen der Dispersionsfläche von gleich großem Betrag, aber mit entgegengesetztem Vorzeichen.

Die Phasendifferenz  $\phi$  zwischen den zueinander senkrecht polarisierten Komponenten ist zudem abhängig von der effektiven Weglänge  $t_{eff}$  im Kristall:

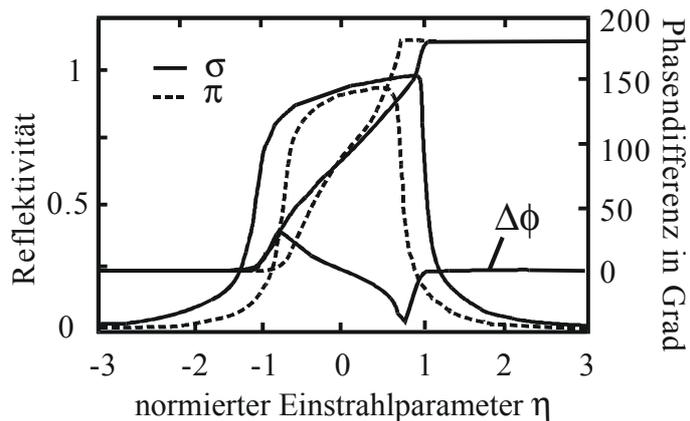
$$(1-2) \quad \phi = 2\pi\Delta\mathbf{K}t_{eff}$$

Die zur Erzeugung einer Phasenverschiebung von  $2\pi$  zwischen  $\sigma$  und  $\pi$  notwendige Kristalldicke wird auch Periode der Phasendifferenz genannt.

Zur Erzeugung von zirkular polarisierter Strahlung aus einer linear polarisierten Strahlung muss die Phasendifferenz  $\phi = \pi/2$  betragen. Die Kristalldicke ist dementsprechend zu wählen. Dabei ist aber die Tatsache zu beachten, dass bei geringen Kristalldicken stets die Wellen beider Schalen existieren, die aufgrund der gleichgroßen, aber entgegengesetzten Phasendifferenz bei Überlagerung aus zwei helikal entgegengesetzt zirkular polarisierten Wellen wieder eine linear polarisierte entstehen lassen. So kann es sinnvoll sein, aufgrund von anomal starker Absorption ein ungerades Vielfaches  $2m+1$  von  $\pi/2$  zu wählen, um zirkular polarisierte Strahlung zu erhalten. Dabei ist zu beachten, dass die Helizität wechselt. So haben die Vielfachen, für die gilt  $2m+1 = 4n+1$ , eine zu denen mit  $2m+1 = 4n-1$  entgegengesetzte Helizität.

Im Braggfall werden im Gegensatz zum Lauefall nur die Wellenfelder einer Schale in Abhängigkeit vom Einfallswinkel angeregt. Anomal stark oder schwach absorbierte Wellen werden bei Drehung des Kristalls nacheinander angeregt. Außerdem gibt es dabei einen Winkelbereich, nämlich den Interferenztotalreflexionsbereich, in dem keine reellen Anregungspunkte auf der Dispersionsfläche von der einfallenden Strahlung erreicht werden. Aus diesem Grunde unterscheidet man die Winkel innerhalb und außerhalb des Interferenztotalreflexionsbereichs. Ohne Interferenztotalreflexion wird die Phasendifferenz zwischen  $\sigma$ - und  $\pi$ -Komponente wie in der Lauegeometrie aus der Dispersionsfläche bestimmt.

Im Interferenztotalreflexionsbereich existiert kein Schnittpunkt der Oberflächennormalen mit der Dispersionsfläche. Dadurch gibt es nur imaginäre Anregungspunkte, und eine Ausbreitung von Wellen ist innerhalb des Kristalls nicht möglich. Im Unterschied dazu haben räumlich gedämpfte (evanescente) Wellen bei der Absorption immer auch eine Komponente in den Kristall hinein.



**Abbildung 1-1** Berechnete Phasenverschiebung und Reflektivität des reflektierten Strahls für die symmetrische 2 2 0 Bragg-Reflexion von Germanium bei der Wellenlänge  $\lambda = 1,55 \text{ \AA}$

[BATTERMAN 1992]

Abweichungen vom exakten Braggwinkel führen in der Bragggeometrie dazu, dass immer nur eine Schale der Dispersionsfläche zur Anregung der Wellenfelder dient. So ist bei einem Braggwinkel, der kleiner als  $45^\circ$  ist, bei negativen Abweichungen nur das stark absorbierte Wellenfeld vorhanden, während bei positiven Abweichungen anomal schwache Absorption vorliegt. In der Abbildung 1-1 ist die sich ergebende asymmetrische Rockingkurve gezeigt. Ist der Braggwinkel größer als  $45^\circ$ , so kehren sich diese Verhältnisse um.

Zwischen den Wellenfeldern, die an den unterschiedlichen Schalen angeregt werden, existiert eine Phasendifferenz von  $\pi$ . Beim Übergang zwischen den beiden Schalen der Dispersionsfläche ändert sich die Phasenlage stetig in Abhängigkeit vom Einfallswinkel.

Der Winkelbereich dieses Übergangs zwischen den beiden Schalen ist für die  $\sigma$ - und die  $\pi$ -Komponente unterschiedlich groß. Die Breite des Interferenztotalreflexionsbereichs ist proportional zu  $C^2$ , also für die  $\pi$ -Komponente um den Faktor  $\cos^2(2\theta_B)$  reduziert, und somit entsteht zwischen den beiden Komponenten in Abhängigkeit von dem Einfallswinkel innerhalb des Reflexionsbereichs eine Phasendifferenz. Diese Phasendifferenz ist in den Randbereichen am größten und beschränkt sich auf wenige Winkelsekunden der Divergenz. Die maximal mögliche Phasendifferenz von  $\pi/2$  wird nur bei einem Braggwinkel von  $45^\circ$  erreicht. Dieser Braggwinkel bedeutet aber gleichzeitig das Verschwinden der  $\pi$ -Komponente. So ist zur Gewinnung zirkular polarisierter Strahlung eine mehrfache Braggbeugung unter gleichen Bedingungen notwendig. Analog zur Lichtoptik, bei der eine Phasenverschiebung von  $\pi/2$  durch mehrfache Interferenztotalreflexion im Prisma erreicht wird, nennt man dieses Verfahren auch „Braggfall – Fresnelrhombus“.

Da sich die Richtung des reflektierten Strahls als Funktion des von der Wellenlänge abhängigen Braggwinkels nicht fixieren lässt, sind für experimentelle Untersuchungen die reflektierten Strahlen weniger von Interesse. Der transmittierte Strahl ist aufgrund seiner ortsfesten Lage experimentell einfacher zugänglich.

Für den transmittierten Strahl außerhalb des Reflexionsgebiets ergibt sich die Phasendifferenz bei großen Abweichungen vom Braggwinkel aus:

$$(1-3) \quad \phi(\Delta\theta_B) \approx \frac{\pi\chi_h\chi_{\bar{h}} \sin(2\theta_B)}{2\lambda\gamma_0} \frac{t}{\Delta\theta_B}$$

mit dem Kosinus des Winkels zwischen dem Wellenvektor der einfallenden Strahlung und der Oberflächennormalen  $\gamma_0$  und den Suszeptibilitäten  $\chi$ . Mit zunehmender Dicke  $t$  wächst die Phasenverschiebung. Allerdings ist die Intensität mit zunehmender Kristalldicke deutlich kleiner. Eine geringe Änderung der Phasenverschiebung kann im Experiment bei einfallender divergenter Strahlung mit dickeren Kristallen realisiert werden.

Das Analogon in der Optik des sichtbaren Lichtes ist ein Satz von Glasplatten. Der durch eine Glasplatte transmittierte Strahl ist nur teilweise polarisiert, auch wenn das Licht unter dem Brewsterwinkel einfällt und der reflektierte Strahl vollständig polarisiert ist. Fällt der transmittierte Strahl nun nacheinander unter demselben Winkel auf einen Satz von Glasplatten, so wird der unpolarisierte Anteil in jeder Glasplatte weiter geschwächt. In diesem Fall ist auch der transmittierte Strahl polarisiert.

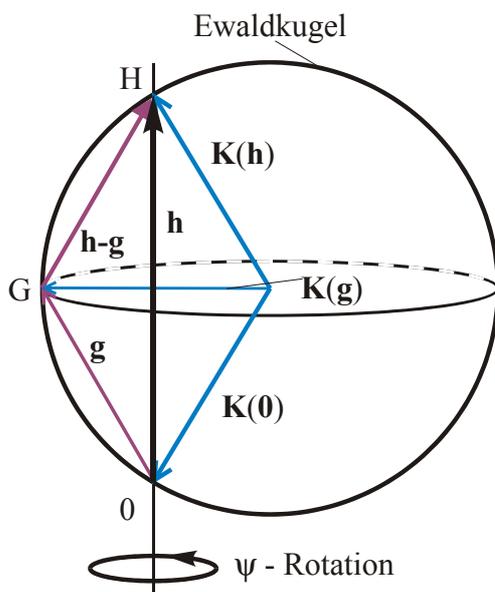
Zur vollständigen Polarisationsanalyse werden ein Analysator und ein Phasenschieber benötigt. Als Analysator kann gemäß des weiter vorn beschriebenen Brewstergesetzes die Reflexion des Strahls um  $90^\circ$  genutzt werden. Weil der in der Beugungsebene polarisierte Anteil verschwindet, kann bei Drehung des Analysators um den bezüglich seiner Polarisationsrichtungen zu charakterisierenden Strahl die Lage der Polarisationsellipse bestimmt werden. So ist es aber bei einer zirkularen Verteilung der Intensität um diesen Strahl nicht möglich, zwischen unpolarisierter und zirkular polarisierter Strahlung zu unterscheiden, da die Phasenbeziehung zwischen den beiden senkrecht zueinander polarisierten Komponenten nicht erkannt werden kann. Um die Phasenbeziehung zu bestimmen, wird die Phase mit Hilfe des Phasenschiebers um  $\pi/2$  geschoben – der Phasenschieber wirkt als Lambdaviertelplättchen – und dann wird erneut die Analyse durchgeführt. Liegt nun keine feste Phasenbeziehung vor, ist weiterhin keine Vorzugsrichtung in der Verteilung um den Strahl erkennbar und die Strahlung ist unpolarisiert. Bei vollständiger zirkularer Polarisation ist nach Einschub des Lambdaviertelplättchens eine lineare Polarisation zu erwarten. Die Intensitätsverteilung um den linear polarisierten Strahl folgt dem Gesetz von Malus.

So ist es mit Hilfe der vollständigen Analysatoranordnung bestehend aus Analysator und Phasenschieber möglich, die Polarisationsrichtungen eines Röntgenstrahls zu bestimmen.

In der Röntgenkristallographie hat die an einer Netzebene gebeugte Welle in Bezug auf die einfallende Welle veränderte Polarisationsrichtungen. Diese lassen sich mit Hilfe des Polarisationsfaktors aus dem Polarisationszustand der einfallenden Strahlung ableiten.

Im Gegensatz dazu stehen die theoretischen Beschreibungen von Belyakov und Dmitrienko, die sich in einer Arbeit mit Polarisationsphänomenen in der Röntgenoptik befassen und sich dabei besonders der Depolarisation bei Beugung in Mosaikkristallen zuwenden [BELYAKOV, DMITRIENKO 1989]. Sie kommen bei ihren theoretischen Betrachtungen zu dem Schluss, dass die in einem imperfekten Kristall gebeugte Welle teilweise depolarisiert. Diese Behauptung wird durch Überlegungen unterstützt, die Polarisation des einfallenden Strahls ändere sich mit der Ausbreitung durch den Kristall, so dass sich die in verschiedenen Tiefen gebeugten Wellen aufgrund der unterschiedlichen Polarisation inkohärent überlagern. Diese nach der Theorie zu erwartende Depolarisation soll bei Mosaikkristallen besonders deutlich innerhalb der sekundären Extinktionslänge auftreten, die die teilweise Interferenzabschirmung durch gleichorientierte Mosaikblöcke kennzeichnet. Ein experimenteller Nachweis für die Depolarisation bei Beugung in imperfekten Kristallen konnte aber noch nicht erbracht werden.

Ein Mehrstrahlfall tritt auf, wenn neben dem eigentlich angeregten Reflex ein oder mehrere weitere Reflexe durch den einfallenden Strahl gleichzeitig angeregt werden. Dieses wurde erstmals von RENNINGER 1937 beschrieben. In dem von ihm vorgestellten Experiment untersucht er den  $(2\ 2\ 2)$  Reflex in Diamant, der aufgrund der Kristallstruktur von Diamant nicht auftreten darf. Bei Anregung eines weiteren Reflexes tritt trotz des Verbots Intensität in Richtung der von der  $(2\ 2\ 2)$  Netzebene gebeugten Welle auf. Dieses Phänomen wird Umweganregung genannt, da die beiden Reflexe über den Differenzreflex in Verbindung stehen. In dem Kristall, in dem er entsteht, wirkt ein reflektierter Strahl wie ein zweiter Primärstrahl. Erfüllt in dem Kristall mehr als eine Netzebene die Reflexionsbedingung für den einfallenden Primärstrahl, so existiert für die reflektierten Strahlen eine Netzebene, die für diese Strahlen die Reflexionsbedingung erneut erfüllt. Anschaulich lässt sich die Anregung eines Mehrstrahlfalls im reziproken Raum mit Hilfe des Bildes der Ewaldkugel darstellen.



**Abbildung 1-2** Veranschaulichung der Anregung eines Mehrstrahlfalls im reziproken Raum mit Hilfe der Ewaldkugel

Die einfallende Welle  $\mathbf{K}(0)$  trifft das reziproke Gitter bei 0. Um den Ursprung von  $\mathbf{K}(0)$  wird jetzt eine Kugel – die Ewaldkugel – mit der Länge von  $\mathbf{K}(0)$  als Radius gelegt. Liegt neben dem Gitterursprung 0 des Kristalls noch ein weiterer Punkt H des reziproken Gitters auf dem Rand der Ewaldkugel, so ist für den durch diesen Punkt bezeichneten Reflex die Braggbedingung erfüllt. Die Welle  $\mathbf{K}(0)$  wird in die Welle  $\mathbf{K}(h)$  gebeugt. Der Vektor  $\mathbf{h}$  symbolisiert die Netzebenennormale der die Beugungsbedingung erfüllenden Netzebene. Durch Drehung um diese Netzebenennormale ( $\psi$ -Rotation oder auch Renningerscan) ist es nun möglich, einen oder mehrere weitere reziproke Gitterpunkte G auf dem Rand der Ewaldkugel zu positionieren und somit weitere Netzebenen in

Reflexionsstellung zu bringen. Die an dieser durch die Normale  $\mathbf{g}$  gekennzeichneten Netzebene gebeugte Welle  $\mathbf{K}(g)$  wirkt für die durch  $\mathbf{h-g}$  gekennzeichnete Netzebene als einfallende Welle. Die Interferenzreflexion dieses Strahls erfolgt in Richtung  $\mathbf{K}(h)$ , so dass über diesen Umweg die Intensität des zuerst im Zweistrahlfall reflektierten Strahls geändert wird.

Je nach Stärke der einzelnen Reflexion – bestimmt durch den Strukturfaktor – kommt es zu einer Verstärkung bzw. Verminderung der Intensität der zuerst gebeugten Welle. Aus der Form der Intensitätsprofile entlang des  $\psi$ -Scans ist es möglich, Rückschlüsse auf die Strukturphasen zu ziehen. Dieses Verfahren der Bestimmung der Strukturphasen aus den Mehrstrahlfallprofilen wird zur Strukturaufklärung verwendet [WECKERT, HÜMMER 1997].

Die Intensität der möglichen Strahlen innerhalb eines Mehrstrahlfalls kann aber neben den durch den Strukturfaktor des Kristalls bestimmten Schwächungen auch wegen der Polarisations-eigenschaften der Strahlung geschwächt sein. So ist es möglich, eigentlich starke Reflexe durch Wahl der Lage der jeweiligen Beugungsebene gezielt zu schwächen [STETSKO ET AL. 2000].

## 2. Aufgabenstellung

In der hier vorliegenden Arbeit sollen Depolarisationserscheinungen bei der Röntgenbeugung an Mosaikkristallen untersucht werden.

Dabei soll in einem ersten Teil die experimentelle Untersuchung der von Belyakov und Dmitrienko theoretisch vorausgesagten teilweisen Depolarisation bei der Beugung in imperfekten Kristallen im Vordergrund stehen. Es soll diese Depolarisation in Abhängigkeit von Kristallstörungen untersucht werden. Eine Erhöhung der Defektdichte sollte theoretisch eine stärkere Depolarisation des reflektierten Strahls zeigen. Dabei soll die Defektdichte durch eine mechanische Deformation der Probenkristalle erhöht werden. Die Untersuchungen werden an Lithiumfluoridkristallen durchgeführt, da diese bei Zimmertemperatur leicht verformbar sind.

Ziel der Untersuchungen soll der experimentelle Nachweis der Depolarisation sein.

In einem zweiten Teil soll der Frage nachgegangen werden, ob die gleichzeitige Anregung von mehreren Reflexen eine Veränderung der Polarisations-eigenschaften der primär gebeugten Welle verursacht. Bei Anregung mit linear polarisierter Strahlung ist zu klären, ob die gebeugte Welle weiterhin linear polarisiert bleibt oder ob diese durch die Umweganregungen depolarisiert wird. Im letzteren Falle würde die Bahn des Polarisationsvektors im zeitlichen Mittel nicht mehr durch eine Linie, sondern durch eine Ellipse beschrieben. Diese Frage hat eine besondere Bedeutung für die Anwendung von Analysatorkristallen im Bereich der Röntgenbeugung und –spektroskopie.

In einem dritten Punkt ist zu klären, ob eine mögliche Depolarisation bei der Mehrstrahlfallanregung zu einem unpolarisierten oder zu einem elliptisch polarisierten Strahl führt. Dazu ist zu untersuchen, ob eine Phasenbeziehung zwischen den beiden senkrecht zueinander stehenden Polarisationskomponenten der reflektierten Strahlung vorhanden ist. Von diesen Untersuchungen ist die Beschreibung des Beugungsvorganges in einer angeregten Mehrstrahlgeometrie abhängig. Besteht eine feste Phasenbeziehung zwischen den Komponenten, können die an den verschiedenen Netzebenen gebeugten Wellen kohärent interferieren. Ist keine Phasenbeziehung mehr vorhanden, so ist der gesamte Beugungsprozess durch eine inkohärente Überlagerung der Strahlen zu beschreiben.

### 3. Theoretische Grundlagen

#### 3.1. Elektromagnetische Wellen

Synchrotronstrahlung lässt sich mit der Theorie elektromagnetischer Wellen beschreiben. Die Ausbreitungsrichtung der Wellen steht dabei senkrecht auf der Richtung der Feldvektoren für die magnetische und elektrische Feldstärke. Es handelt sich in diesem Fall um transversale Wellen. Transversale Wellen zeichnen sich durch ihre Polarisierbarkeit aus. Diese Polarisierbarkeit ist in dem zusätzlichen Freiheitsgrad der Orientierung der Feldvektoren senkrecht zum Wellenvektor begründet. Da die Vektoren der magnetischen und der elektrischen Feldstärke stets senkrecht zueinander stehen, genügt es, zunächst nur einen von beiden zu betrachten.

##### 3.1.1. Vollständig polarisierte monochromatische Wellen

In einem rechtwinkligen Koordinatensystem wird eine ebene monochromatische Welle durch die Komponenten ihres elektrischen Feldvektors beschrieben.

$$(3-1) \quad E_x = a_1 \cos(\tau + \delta_1) \quad E_y = a_2 \cos(\tau + \delta_2) \quad E_z = 0$$

Dabei kennzeichnen  $a_1$  und  $a_2$  die Amplituden parallel zur x- und y-Achse,  $\tau = 2\pi(\nu t - \mathbf{kr})$  den zeit- und ortsabhängigen Teil der Phase und  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  den festen Phasenwinkel. Haben die beiden Komponenten  $E_x$  und  $E_y$  bei konstanten Amplituden eine feste Phasenbeziehung zueinander, ist die Welle vollständig polarisiert. Im allgemeinen Fall beschreibt der Feldvektor als Funktion der Zeit in der x-y-Ebene eine Ellipse.

$$(3-2) \quad \left(\frac{E_x}{a_1}\right)^2 + \left(\frac{E_y}{a_2}\right)^2 - 2\frac{E_x E_y}{a_1 a_2} \cos \delta = \sin^2 \delta \quad \delta = \delta_2 - \delta_1$$

Die Hauptachsen dieser Polarisationsellipse sowie der Neigungswinkel gegenüber den Koordinatenachsen lassen sich aus den Amplituden und der Phasendifferenz berechnen. Neben dem allgemeinen elliptischen Fall unterscheidet man Spezialfälle, die sich aus den Gleichungen ableiten lassen. Ist die Phasendifferenz  $\delta$  ein ganzzahliges Vielfaches von  $\pi$ , so tritt Linearpolarisation auf. Die Ellipse entartet dann zu einer Linie. Für den Fall, dass die Phasendifferenz  $\frac{1}{2}$  mal ein ungeradzahliges Vielfaches von  $\pi$  ist und gleichzeitig die Amplituden  $a_1$  und  $a_2$  gleich groß sind, entartet die Polarisationsellipse zu einem Kreis. Diese Welle heißt zirkular polarisiert.

Diese Betrachtungen galten unter der Voraussetzung einer vollständig polarisierten Welle.

### 3.1.2. Teilweise polarisierte Wellen

Sind die Amplituden oder die Phasen der beiden Wellenfelder nicht mehr konstant, sondern zeitlich verändert, so ist die Welle nicht mehr vollständig polarisiert. Dieses Phänomen tritt zum Beispiel auf, wenn sich nicht kohärente oder nicht monochromatische Wellen überlagern. Bei kleinen Schwankungen der Größen kann die Welle analog zu Gleichung (3-1) mit Hilfe von zeitabhängigen Größen beschrieben werden:

$$(3-3) \quad E_j = a_i(t) \cos(\tau(t) + \delta_i(t)) = a_i(t) \cos(2\pi(\nu_m t - \mathbf{k}(t) \cdot \mathbf{r} + \delta_i(t)))$$

mit  $i = 1, 2$  und  $j = x, y$

$2\pi\nu_m = \omega_m$  bezeichnet hier die mittlere Kreisfrequenz. Die auf die x-y-Ebene projizierte Bewegung des Feldvektors wird im allgemeinen Fall nicht mehr durch eine in sich geschlossene Kurve beschrieben. Die Bewegung des Feldvektors ist bei unpolarisierter (natürlicher) Strahlung völlig regellos.

Betrachtet man nun den Fall von geringen zeitlichen Veränderungen der Amplituden und Frequenzen, so spricht man von quasimonochromatischen ebenen Wellen. Die Polarisations-eigenschaften werden mit Hilfe einer komplexwertigen Kohärenzmatrix  $J$  beschrieben.

$$(3-4) \quad J = \begin{bmatrix} J_{xx} & J_{xy} \\ J_{yx} & J_{yy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle E_x E_x^* \rangle & \langle E_x E_y^* \rangle \\ \langle E_y E_x^* \rangle & \langle E_y E_y^* \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle a_1^2 \rangle & \langle a_1 a_2 e^{i(\phi_1 - \phi_2)} \rangle \\ \langle a_1 a_2 e^{-i(\phi_1 - \phi_2)} \rangle & \langle a_2^2 \rangle \end{bmatrix}$$

Die Diagonalelemente von  $J$  sind reell und repräsentieren die Intensitäten der Komponenten in x- bzw. y- Richtung. Somit ist die Spur der Matrix equivalent der totalen Intensität.

$$(3-5) \quad Sp(J) = J_{xx} + J_{yy} = \langle E_x E_x^* \rangle + \langle E_y E_y^* \rangle$$

Die Nichtdiagonalelemente sind zueinander konjugiert komplex – also ist die Kohärenzmatrix eine hermitesche Matrix.

Betrachtet man die Amplituden der Welle in einer beliebigen Richtung (Winkel  $\alpha$  gegenüber der x-Richtung), so ist die Gesamtamplitude folgendermaßen von  $\alpha$  abhängig:

$$(3-6) \quad E = E_x \cos \alpha + E_y \sin \alpha$$

Die Intensität ist in dieser Richtung:

$$(3-7) \quad I(\alpha, \phi) = J_{xx} \cos^2 \alpha + J_{yy} \sin^2 \alpha + 2 \cos \alpha \sin \alpha \cdot \Re(J_{xy} e^{-i\phi})$$

$\phi$  entspricht einer zusätzlichen Phasenverschiebung zwischen der x- und der y-Komponente.

Zur experimentellen Bestimmung der vier Elemente der Kohärenzmatrix sind sechs Messungen bei verschiedenen Polarisatorwinkleinstellungen  $\alpha$  und einer zusätzlich eingebrachten Phasenverschiebung  $\phi$  notwendig.

$$\begin{aligned}
 J_{xx} &= I(\alpha = 0^\circ, \phi = 0) \\
 J_{yy} &= I(90^\circ, 0) \\
 (3-8) \quad J_{xy} &= \frac{1}{2} \{ I(45^\circ, 0) - I(-45^\circ, 0) \} + \frac{1}{2} i \{ I(45^\circ, \frac{\pi}{2}) - I(-45^\circ, \frac{\pi}{2}) \} \\
 J_{yx} &= \frac{1}{2} \{ I(45^\circ, 0) - I(-45^\circ, 0) \} - \frac{1}{2} i \{ I(45^\circ, \frac{\pi}{2}) - I(-45^\circ, \frac{\pi}{2}) \}
 \end{aligned}$$

Liegt eine vollständig unpolarisierte Welle vor, so ist  $I$  für alle Polarisatorrichtungen  $\alpha$  unabhängig von einer evt. vorhandenen zusätzlichen Phasenverschiebung  $\phi$  konstant.

Für die Matrixelemente gilt:

$$\begin{aligned}
 (3-9) \quad J_{xx} &= J_{yy} \\
 J_{xy} &= J_{yx} = 0 \\
 J_{xx} + J_{yy} &= I_0
 \end{aligned}
 \quad J = \frac{1}{2} I_0 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Ist die streng monochromatische Strahlung vollständig polarisiert, so gilt mit  $\delta = \phi_1 - \phi_2$ :

$$(3-10) \quad J = \begin{bmatrix} a_1^2 & a_1 a_2 e^{i\delta} \\ a_1 a_2 e^{-i\delta} & a_2^2 \end{bmatrix} \quad |J| = J_{xx} J_{yy} - J_{xy} J_{yx} = 0$$

Bei einer vollständigen linearen Polarisation wird daraus:

$$(3-11) \quad (\delta = m\pi \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)) \quad J = \begin{bmatrix} a_1^2 & (-1)^m a_1 a_2 \\ (-1)^m a_1 a_2 & a_2^2 \end{bmatrix}$$

und bei vollständiger zirkularer Polarisation:

$$(3-12) \quad a_1 = a_2 \quad , \quad \delta = m \frac{\pi}{2} \quad (m = \pm 1, \pm 3, \dots) \quad J = \frac{1}{2} I \begin{bmatrix} 1 & \pm i \\ \mp i & 1 \end{bmatrix}$$

### 3.1.3. Beschreibung des Polarisationszustands mit Hilfe der Stokes-Parameter

Für die Charakterisierung des Polarisationszustands einer Welle sind immer drei voneinander unabhängige Größen notwendig. In den Absätzen 3.1.1 und 3.1.2 wurde die Welle in Abhängigkeit von den beiden Amplituden  $a_1$  und  $a_2$  sowie der Phasendifferenz  $\delta$  beschrieben. Zur Vereinfachung hat Stokes 1852 in seinen das teilweise polarisierte Licht betreffenden Untersuchungen neue Parameter zur Beschreibung des Polarisationszustands eingeführt, die alle dieselbe physikalische Dimension besitzen [BORN, WOLF 1980].

Die Stokes-Parameter sind wie folgt definiert:

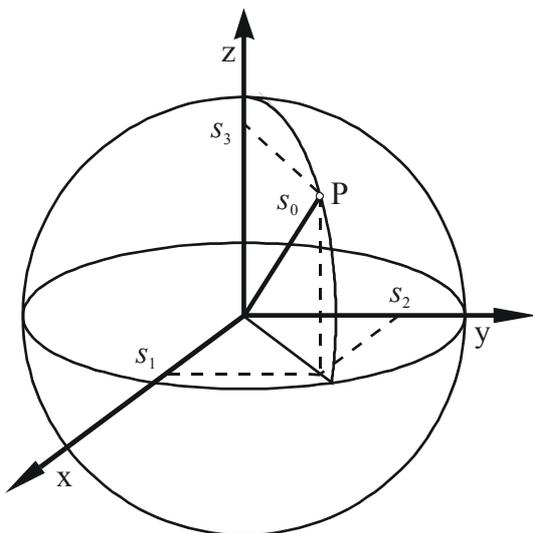
$$(3-13) \quad \begin{aligned} s_0 &= a_1^2 + a_2^2 \\ s_1 &= a_1^2 - a_2^2 \\ s_2 &= 2a_1a_2 \cos \delta \\ s_3 &= 2a_1a_2 \sin \delta \end{aligned}$$

Für eine vollständig polarisierte Welle sind nur drei dieser Parameter unabhängig voneinander und es gilt:  $s_0^2 = s_1^2 + s_2^2 + s_3^2$ . Der Parameter  $s_0$  ist gleich der Intensität der Welle. Die Verbindung mit den Elementen der im Absatz 3.1.2 beschriebenen Kohärenzmatrix ist durch die folgenden Beziehungen gegeben:

$$(3-14) \quad \begin{array}{ll} (a) & \begin{aligned} s_0 &= J_{xx} + J_{yy} \\ s_1 &= J_{xx} - J_{yy} \\ s_2 &= J_{xy} + J_{yx} \\ s_3 &= i(J_{yx} - J_{xy}) \end{aligned} \\ (b) & \begin{aligned} J_{xx} &= \frac{1}{2}(s_0 + s_1) \\ J_{yy} &= \frac{1}{2}(s_0 - s_1) \\ J_{xy} &= \frac{1}{2}(s_2 + is_3) \\ J_{yx} &= \frac{1}{2}(s_2 - is_3) \end{aligned} \end{array}$$

Aus den Gleichungen (3-8) und (3-14) zeigt sich, dass die Stokes-Parameter reell und experimentell nach folgenden Regeln bestimmbar sind:

$$(3-15) \quad \begin{aligned} s_0 &= I(\alpha = 0^\circ, \phi = 0) + I(90^\circ, 0) \\ s_1 &= I(0^\circ, 0) - I(90^\circ, 0) \\ s_2 &= I(45^\circ, 0) - I(-45^\circ, 0) \\ s_3 &= I(45^\circ, \frac{\pi}{2}) - I(-45^\circ, \frac{\pi}{2}) \end{aligned}$$



**Abbildung 3-1** Poincaré-Kugel zur Darstellung der Polarisationseigenschaften einer Strahlung

Anhand der Poincaré-Kugel kann die Darstellung des Polarisationszustands mit Hilfe der Stokes-Parameter veranschaulicht werden (siehe Abbildung 3-1). Dazu wird um den Ursprung eines orthogonalen Koordinatensystems eine Kugel mit dem Radius  $s_0$  gezeichnet. Jeder Punkt auf dem Rand dieser Kugel kennzeichnet eine vollständig polarisierte Welle. In der Äquatorebene der Poincaré-Kugel geben  $s_1$  und  $s_2$  die x- bzw. y-Koordinaten des Punktes P wieder, und die Koordinate senkrecht zum Äquator ist  $s_3$ . Alle Punkte, für die  $s_3 = 0$  gilt, liegen in der Äquatorebene. Sie repräsentieren linear polarisierte Wellen. Gilt  $s_1 = s_2 = 0$ , so ist die Welle zirkular polarisiert. Die Lage auf dem

Nord- bzw. Südpol der Kugel wird durch die Helizität der Welle bestimmt. Der Grad der linearen Polarisation und der Grad der zirkularen Polarisation lassen sich in Abhängigkeit von den Stokes-Parametern durch folgende Gleichungen beschreiben:

$$(3-16) \quad P_{lin} = \sqrt{\left(\frac{s_1}{s_0}\right)^2 + \left(\frac{s_2}{s_0}\right)^2}, \quad P_{zirk} = \frac{s_3}{s_0}$$

Alle Punkte innerhalb der Kugel verkörpern teilweise polarisierte Wellen. Allgemein gilt:  $s_0^2 \geq s_1^2 + s_2^2 + s_3^2$ . Zur Beschreibung beliebig polarisierter Wellen wird folgende Tatsache genutzt. Die Stokes-Parameter einer Mischung voneinander unabhängiger Wellen sind gleich der Summe der entsprechenden Stokes-Parameter der Einzelwellen. Aus diesem Grunde kann jede teilpolarisierte Welle in eine vollständig polarisierte und eine unpolarisierte Teilwelle zerlegt werden. Aus den Gleichungen (3-9) und (3-14) folgt für die unpolarisierte Welle  $s_1 = s_2 = s_3 = 0$ . Die beiden Teilwellen sind wie folgt durch die Stokes-Parameter charakterisiert:

$$(3-17) \quad \begin{aligned} \vec{s} &= s_0, s_1, s_2, s_3 = \vec{s}_{unpol} + \vec{s}_{pol} \\ \vec{s}_{unpol} &= s_0 - \sqrt{s_1^2 + s_2^2 + s_3^2}, 0, 0, 0 \\ \vec{s}_{pol} &= \sqrt{s_1^2 + s_2^2 + s_3^2}, s_1, s_2, s_3 \end{aligned}$$

Daraus folgt für den Polarisationsgrad der Gesamtwellen bestimmt aus den Stokes-Parametern:

$$(3-18) \quad P = \frac{I_{polar}}{I_{total}} = \frac{\sqrt{s_1^2 + s_2^2 + s_3^2}}{s_0}$$

### 3.2. Geometrische Beugungstheorie

Wie in der Einleitung beschrieben, sind sowohl das sichtbare Licht als auch die Röntgenstrahlen elektromagnetische Wellen. Deshalb lassen sich die Interferenzerscheinungen bei der Beugung von Röntgenstrahlen analog zu den Beugungserscheinungen des sichtbaren Lichts behandeln. Die in diesem Abschnitt verwendete Ableitung des Reflexionsvermögens unter Verwendung der geometrischen Theorie folgt der von DRÄGER 1976 gegebenen.

Die Streuung der Röntgenstrahlen findet an den Elektronen im Kristall statt. Für die Streuung einer einfallenden polarisierten Welle an einem einzelnen Elektron gilt die Thomsonsche Streuformel:

$$(3-19) \quad I_e = \left(\frac{e^2}{c^2 m_0}\right)^2 \frac{\sin^2 \vartheta}{R^2} I_0$$

mit der gestreuten Intensität  $I_e$  im Aufpunkt  $\mathbf{R}$ , der Intensität der einfallenden Welle  $I_0$ , der Elementarladung  $e$ , der Lichtgeschwindigkeit  $c$ , der Elektronenruhemasse  $m_0$  und dem Streuwinkel  $\vartheta$ .

Ist die Strahlung unpolarisiert, so wird der Winkel  $\vartheta$  unbestimmt und der Faktor  $\sin^2 \vartheta$  muss durch seinen Durchschnittswert ersetzt werden. Es gilt dann:

$$(3-20) \quad I_e = \left( \frac{e^2}{c^2 m_0} \right)^2 \frac{1 + \cos^2 \vartheta}{2} \frac{1}{\mathbf{R}^2} I_0$$

Dabei ist  $\vartheta$  der Winkel zwischen Einfall- und Streurichtung, so dass die Streuung rotationssymmetrisch zur einfallenden Strahlung stattfindet.

In einem Kristall wird die einfallende Welle am Kristallgitter gestreut. Diese dreidimensional periodische Anordnung der Atome und damit der Elektronen hat zur Folge, dass die gestreuten Wellen miteinander interferieren.

Für eine einfallende Welle  $E_e = E_0 e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}\mathbf{r})}$  mit der Wellenlänge  $\lambda = k^{-1}$  und der Frequenz  $\nu$ , die am  $n$ -ten Elektron mit dem Ortsvektor  $\mathbf{r}_n$  gestreut wird, gilt:

$$E_n = -\frac{e^2}{c^2 m_0} \frac{\sin \vartheta}{\mathbf{r}_n} E_e e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_n))}$$

Die Summation über alle streuenden Elektronen ergibt für die Streuwelle:

$$E = \sum E_n = -\frac{e^2}{c^2 m_0} \frac{\sin \vartheta}{\mathbf{r}_s} E_e e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}\mathbf{r}_s)} \sum_n e^{2\pi i\mathbf{k}(\mathbf{r}_n, \mathbf{s} - \mathbf{s}_0)}$$

mit der Streurichtung  $\mathbf{r}_s$  und den Einheitsvektoren  $\mathbf{s}$  in Streurichtung und  $\mathbf{s}_0$  in Richtung der einfallenden Welle.

Die resultierende Intensität ist:

$$(3-21) \quad I = E^2 = I_e \left| \sum_n e^{2\pi i\mathbf{k}(\mathbf{r}_n, \mathbf{s} - \mathbf{s}_0)} \right|^2$$

Für die Beugung an den Elektronen eines Atoms wird die Intensität der an einem Elektron gestreuten Strahlung mit dem Atomformfaktor  $|f|^2$  multipliziert, wobei die Atomformamplitude  $f$  unter Beachtung der kontinuierlichen Elektronenverteilung am Ort des Atoms aus dem Interferenzglied der Gleichung (3-21) abgeleitet wird. Für die Intensität bei Streuung an einem Atom gilt:

$$(3-22) \quad I = I_e |f|^2 = I_e \left| \int_{\text{Atomvolumen}} \left( -\frac{\rho}{e} \right) \exp[2\pi i\mathbf{k}(\mathbf{r}, \mathbf{s} - \mathbf{s}_0)] d\tau \right|^2$$

Die Streuung einer Röntgenwelle an der Elementarzelle eines Kristallgitters wird analog zur Gleichung (3-22) beschrieben, wobei die Streuzentren für die Röntgenstrahlung die Plätze der Atome sind. Die Intensität der gebeugten Welle wird beschrieben durch:

$$(3-23) \quad I = I_e |F|^2 = I_e \left| \sum_n f_n e^{2\pi i \mathbf{k}(\mathbf{r}^{(n)}, \mathbf{s}-\mathbf{s}_0)} \right|^2$$

mit dem Strukturfaktor  $|F|^2$  und der Strukturamplitude  $F$ .  $\mathbf{r}^{(n)}$  bezeichnet den Ortsvektor des  $n$ -ten Atoms.

Die Interferenz der Röntgenstrahlen in einem Kristall ist durch die dreidimensional periodische Anordnung der Elementarzellen im Kristallgitter diskret. Die Unterschiede in der Phase der interferierenden Teilwellen ergeben sich aus der geometrischen Anordnung der Streuelemente<sup>2</sup>. Entsprechend den vorangegangenen Betrachtungen ist der Interferenzterm von der Gitteramplitude  $G$  abhängig:

$$(3-24) \quad G = \sum_{m_1} \sum_{m_2} \sum_{m_3} e^{2\pi i \mathbf{k} \{m_1(\mathbf{a}_1, \mathbf{s}-\mathbf{s}_0) + m_2(\mathbf{a}_2, \mathbf{s}-\mathbf{s}_0) + m_3(\mathbf{a}_3, \mathbf{s}-\mathbf{s}_0)\}}$$

In der Gitteramplitude wird über alle Gitterpunkte summiert. Der Ortsvektor zu den Gitterpunkten ist gegeben durch  $\mathbf{r}_{m_1 m_2 m_3} = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3$  mit den Grundtranslationsvektoren  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ .

Die Intensität der am Kristallgitter gestreuten Röntgenstrahlung berechnet sich demnach aus:

$$(3-25) \quad I = I_e |F|^2 |G|^2$$

mit dem Gitterfaktor  $|G|^2$ .

Aus diesem Gitterfaktor ergibt sich bei einer genügend großen Anzahl von Gitterpunkten die Interferenzbedingung für die Reflexion von Röntgenstrahlen in Kristallen nach Laue:

$$(3-26) \quad \frac{\mathbf{s} - \mathbf{s}_0}{\lambda} = \mathbf{h}$$

mit der notwendigen Bedingung, dass  $\mathbf{h}$  ein ganzzahliger Vektor des reziproken Gitters ist. Mit Hilfe der Ewaldkonstruktion lässt sich die Gleichung (3-26), die der Bragg'schen Gleichung (1-1) entspricht, anschaulich darstellen. Es gilt  $\vartheta = 2\theta_B$ .

Für die Betrachtung von Polarisations-eigenschaften der Strahlung ist es sinnvoll, den Polarisationsfaktor in der Gleichung (3-25) gemäß (3-20) zu separieren und die Primärintensität, den Lorentzfaktor zur Korrektur von Winkeldivergenz und Wellenlängendispersion, den Debye-Waller-Faktor sowie einen Absorptionsfaktor in einem Vorfaktor  $K$  zusammenzufassen. Die reflektierte Intensität berechnet sich dann wie folgt:

$$(3-27) \quad I = KC^2 |F|^2 |G|^2$$

---

<sup>2</sup> geometrische Theorie der Röntgeninterferenzen

$C^2$  bezeichnet den Polarisationsfaktor in Abhängigkeit von dem Polarisationszustand der Strahlung und der Beugungsgeometrie.

### 3.3. Intensitätstransfergleichungen

Die Theorie für die Polarisations-eigenschaften von Röntgenstrahlen ist für den Fall perfekter Kristalle gut entwickelt und basiert auf der dynamischen Beugungstheorie. Auch im Falle von imperfekten Kristallen sind die Eigenschaften der Strahlung von der Beugung abhängig. Die dynamischen Gleichungen sind aber nicht direkt anwendbar.

Eine andere Herangehensweise zur Beschreibung der Vorgänge bei definierten Typen von imperfekten Kristallen (Mosaikkristallen) wurde ursprünglich von Darwin vorgeschlagen. Darwins Näherung basiert auf den Transfergleichungen für die Intensitäten des einfallenden und des reflektierten Strahls.

$$(3-28) \quad \begin{aligned} \frac{\partial I_0}{\partial t_1} &= -\sigma I_0 + \sigma I \\ \frac{\partial I}{\partial t_2} &= -\sigma I + \sigma I_0 \end{aligned}$$

Zur Ableitung dieser Gleichungen wird davon ausgegangen, dass die Streuung in den einzelnen Mosaikblöcken inkohärent stattfindet [DMITRIENKO, BELYAKOV 1980].

Bei der Verwendung von beliebig polarisierter Strahlung werden in den Transfergleichungen die Intensitäten durch die Polarisations-tensoren (Kohärenzmatrix, Gleichung (3-4), siehe 3.1.2) der einfallenden und gebeugten Strahlung ersetzt [CHANDRASEKHAR 1950]. Wie in Abschnitt 3.1.2 beschrieben, gibt die Spur des Tensors die Gesamtintensität wieder. Die Richtungen  $x$  und  $y$  sind durch die Beugungsgeometrie festgelegt. Die Richtung der  $x$ -Achse steht senkrecht zur Beugungsebene. Die Komponente in diese Richtung wird mit  $\sigma$  bezeichnet und die in der Beugungsebene liegende Komponente mit  $\pi$ . Der Polarisations-tensor ist gegeben durch:

$$(3-29) \quad \hat{j} = \begin{bmatrix} J_{\sigma\sigma} & J_{\sigma\pi} \\ J_{\pi\sigma} & J_{\pi\pi} \end{bmatrix}$$

$J_{\sigma\sigma}$  und  $J_{\pi\pi}$  sind die Intensitäten der  $\sigma$ - bzw.  $\pi$ -Komponente. Die Nichtdiagonalelemente  $J_{\sigma\pi} = J_{\pi\sigma}^*$  enthalten das Produkt der Amplituden der beiden senkrecht zueinander polarisierten Komponenten. Ihre physikalische Bedeutung ist durch folgende Bezeichnungen gegeben:

$\Im J_{\sigma\pi}$  ist gleich der Intensität des zirkular polarisierten Anteils.

$\Re J_{\sigma\pi}$  ist gleich der Intensität des linear polarisierten Anteils mit einem elektrischen Feldvektor, der um  $45^\circ$  gegen  $\sigma$  und  $\pi$  geneigt ist. Der Polarisations-tensor enthält die Strahlintensität und alle Polarisations-eigenschaften. Die Lösung der Transfergleichungen

für Polarisationsensoren beschreibt und verbindet die Intensität und den Polarisationszustand sowohl des einfallenden als auch des reflektierten Strahls. Ist die Strahlung vollständig  $\sigma$ - oder  $\pi$ -polarisiert oder völlig unpolarisiert, so genügt es, die Transfergleichungen für die Intensitäten zu lösen.

Für den Transfer von Röntgenstrahlung in Mosaikkristallen gibt es verschiedene Näherungen [ZACHARIASEN 1967, BECKER 1977]. Mosaikkristalle sind Kristalle mit kleinen perfekten Kristallbereichen, die leicht gegeneinander verschwenkt sind. Man unterscheidet zwei Typen von Mosaikkristallen. Beim Mosaikkristall Typ I ist der typische Winkel der Fehlorientierung deutlich größer als die Winkelbreite bei der Beugung in dem perfekten Bereich.

In dieser Arbeit wird das Modell von Darwin betrachtet. Bei diesem wird die Größe der Mosaikblöcke als so klein angenommen, dass in jedem Einzelblock von einer Beugung der Röntgenstrahlung entsprechend dem kinematischen Modell ausgegangen werden kann. Das bedeutet, die Dicke des perfekten Kristallbereichs ist kleiner als die Extinktionslänge. Die Extinktionslänge  $\Lambda$  ist hier wie folgt definiert:

$$(3-30) \quad \Lambda = \sqrt{\frac{\lambda}{Q \sin 2\theta_B}} \quad \text{mit der reziproken Länge } Q = \frac{\lambda^3}{\sin 2\theta_B} \left( \frac{e^2}{V m_0 c^2} \right)^2 |F_H|^2$$

(Volumen der Einheitszelle  $V$ , Elementarladung  $e$ , Elektronenruhemasse  $m_0$ , Lichtgeschwindigkeit  $c$ )

Für den direkten und für den reflektierten Strahl ergibt sich aus der Verallgemeinerung der Transfergleichungen nach Darwin:

$$(3-31) \quad \begin{aligned} \frac{\partial \hat{J}^0}{\partial s_0} &= -\mu \hat{J}^0 + \frac{i}{2} (\sigma_0 \hat{K}^2 \hat{J}^0 - \sigma_0^* \hat{J}^0 \hat{K}^2) + \sigma_{0H} \hat{K} \hat{J}^H \hat{K} \\ \frac{\partial \hat{J}^H}{\partial s_H} &= -\mu \hat{J}^H + \frac{i}{2} (\sigma_H \hat{K}^2 \hat{J}^H - \sigma_H^* \hat{J}^H \hat{K}^2) + \sigma_{H0} \hat{K} \hat{J}^0 \hat{K} \end{aligned}$$

$s_0$  und  $s_H$  sind die Koordinaten entlang des einfallenden Strahls bzw. des reflektierten Strahls und  $\mu$  ist der Schwächungskoeffizient. Der Tensor  $\hat{K}$  beschreibt die Polarisations-eigenschaften und ist gegeben durch:

$$(3-32) \quad \hat{K} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & C \end{bmatrix} \quad \text{mit dem Polarisationsfaktor } C = \cos 2\theta_B$$

$\sigma_{H0}$  und  $\sigma_{0H}$  sind die Streuquerschnitte der Braggstreuung von direktem zu reflektiertem Strahlengang und umgekehrt. Analog zu den Gleichungen von Darwin sind sie gegeben durch:

$$(3-33) \quad \begin{aligned} \sigma_{H_0}(\Delta\theta) &= \frac{\lambda^3}{\sin 2\theta_B} \left( \frac{e^2}{Vm_0c^2} \right)^2 |F_H|^2 W(\Delta\theta) \\ \sigma_{0H}(\Delta\theta) &= \frac{\lambda^3}{\sin 2\theta_B} \left( \frac{e^2}{Vm_0c^2} \right)^2 |F_{-H}|^2 W(\Delta\theta) \end{aligned}$$

mit der Abweichung  $\Delta\theta = \theta - \theta_B$  vom exakten Braggwinkel, den Strukturamplituden  $F_H$  und  $F_{-H}$ , sowie der Orientierungsverteilungsfunktion der Mosaikblöcke im Kristall  $W$ .  $\sigma_{H_0}$  und  $\sigma_{0H}$  werden auch als mittlere Beugungskräfte bezeichnet.

Die Imaginär- und Realteile der komplexen Koeffizienten  $\sigma_0, \sigma_H$  beschreiben die mittlere Schwächung aufgrund der Beugung bzw. Doppelbrechung in einem Mosaikkristall und sind gegeben durch:

$$(3-34) \quad \begin{aligned} \sigma_0(\Delta\theta) &= \frac{\lambda^3}{\sin 2\theta_B} \left( \frac{e^2}{Vm_0c^2} \right)^2 F_H F_{-H} [\tilde{W}(\Delta\theta) + iW(\Delta\theta)] \\ \sigma_H(\Delta\theta) &= \frac{\lambda^3}{\sin 2\theta_B} \left( \frac{e^2}{Vm_0c^2} \right)^2 F_H F_{-H} [-\tilde{W}(\Delta\theta) + iW(\Delta\theta)] \end{aligned}$$

$\tilde{W}(\Delta\theta)$  ist über folgende Relation mit der Verteilungsfunktion  $W(\Delta\theta)$  verknüpft:

$$(3-35) \quad \tilde{W}(\Delta\theta) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{W(\Delta\theta') d\Delta\theta'}{\Delta\theta' - \Delta\theta}$$

Diese Beziehung ergibt sich aus der Kramers-Kronig-Dispersionsrelation für die dielektrische Konstante unter der Annahme  $F_{-H} = F_H^*$ .  $\Re\sigma_0$  und  $\Im\sigma_0$  sind demnach in Abhängigkeit von der Frequenz wie folgt verknüpft:

$$(3-36) \quad \Re\sigma_0(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Im\sigma_0(\omega') d\omega'}{\omega' - \omega}$$

Die Braggbeziehung  $2d \sin \theta_B = n\lambda$  lehrt, dass wegen  $\Delta(\Delta\theta) = (\Delta\omega/\omega) \tan \theta_B$  Frequenz- und Winkelabweichung zueinander proportional sind. Damit gilt unter Vernachlässigung der Konstanten  $\tan \theta_B$ :

$$(3-37) \quad \Re\sigma_0(\Delta\theta) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Im\sigma_0(\Delta\theta') d\Delta\theta'}{\Delta\theta' - \Delta\theta}$$

Aus der Annahme  $F_{-H} = F_H^*$  ergibt sich auch:

$$(3-38) \quad \Im\sigma_0 = \Im\sigma_H = \sigma_{0H} = \sigma_{H0} = QW(\Delta\theta)$$

Die Tensorgleichung (3-31) kann nun für die Elemente der Polarisationsensoren geschrieben werden:

$$(3-39) \text{ a) } \quad \frac{\partial J_{\sigma\sigma}^0}{\partial s_0} = -(\mu + QW)J_{\sigma\sigma}^0 + QWJ_{\sigma\sigma}^H$$

$$(3-39) \text{ b) } \quad \frac{\partial J_{\sigma\sigma}^H}{\partial s_H} = -(\mu + QW)J_{\sigma\sigma}^H + QWJ_{\sigma\sigma}^0$$

$$(3-40) \text{ a) } \quad \frac{\partial J_{\pi\pi}^0}{\partial s_0} = -(\mu + C^2QW)J_{\pi\pi}^0 + C^2QWJ_{\pi\pi}^H$$

$$(3-40) \text{ b) } \quad \frac{\partial J_{\pi\pi}^H}{\partial s_H} = -(\mu + C^2QW)J_{\pi\pi}^H + C^2QWJ_{\pi\pi}^0$$

$$(3-41) \text{ a) } \quad \frac{\partial J_{\sigma\pi}^0}{\partial s_0} = -\left[ \mu + (1+C^2)\frac{QW}{2} + i(1-C^2)\frac{Q\tilde{W}}{2} \right] J_{\sigma\pi}^0 + CQWJ_{\sigma\pi}^H$$

$$(3-41) \text{ b) } \quad \frac{\partial J_{\sigma\pi}^H}{\partial s_H} = -\left[ \mu + (1+C^2)\frac{QW}{2} - i(1-C^2)\frac{Q\tilde{W}}{2} \right] J_{\sigma\pi}^H + CQWJ_{\sigma\pi}^0$$

Die Gleichungen für  $J_{\pi\sigma}$  sind weggelassen, da  $J_{\pi\sigma} = J_{\sigma\pi}^*$  gilt.

Aus den Gleichungen (3-39) bis (3-41) kann man erkennen, dass die Berechnungen für die Diagonal- und die Nichtdiagonalelemente nicht miteinander gekoppelt sind. Für die Intensitäten (Diagonalelemente) gelten die Transfergleichungen (3-39) und (3-40) nach Darwin. Die Randbedingungen für die Nichtdiagonalelemente sind dieselben wie für die Intensitäten. An den Kristallgrenzen sind die  $J_{\sigma\pi}$  stetig.

Schwieriger ist es bei Anregung von mehr als einer Reflexion. Lässt sich das Beugungsgeschehen bei Mehrstrahlinterferenzen nicht in einer komplanaren Beugungsebene beschreiben, so sind die beiden senkrecht zueinander polarisierten Komponenten nicht mehr entkoppelt.

Die Gleichungen (3-31) und der Polarisationsstensor  $\hat{K}$  müssen erweitert werden:

(3-42)

$$\frac{\partial \hat{J}^0}{\partial s_0} = -\mu \hat{J}^0 + \frac{i}{2} (\sigma_0 \hat{K}^2 \hat{J}^0 - \sigma_0^* \hat{J}^0 \hat{K}^2) + \sigma_{0H} \hat{K} \hat{J}^H \hat{K} + \sigma_{0G_1} \hat{K} \hat{J}^{G_1} \hat{K} + \sigma_{0G_2} \hat{K} \hat{J}^{G_2} \hat{K}$$

$$\frac{\partial \hat{J}^H}{\partial s_H} = -\mu \hat{J}^H + \frac{i}{2} (\sigma_H \hat{K}^2 \hat{J}^H - \sigma_H^* \hat{J}^H \hat{K}^2) + \sigma_{H0} \hat{K} \hat{J}^0 \hat{K} + \sigma_{HG_1} \hat{K} \hat{J}^{G_1} \hat{K} + \sigma_{HG_2} \hat{K} \hat{J}^{G_2} \hat{K}$$

$$\frac{\partial \hat{J}^{G_1}}{\partial s_{G_1}} = -\mu \hat{J}^{G_1} + \frac{i}{2} (\sigma_{G_1} \hat{K}^2 \hat{J}^{G_1} - \sigma_{G_1}^* \hat{J}^{G_1} \hat{K}^2) + \sigma_{G_10} \hat{K} \hat{J}^0 \hat{K} + \sigma_{G_1H} \hat{K} \hat{J}^H \hat{K} + \sigma_{G_1G_2} \hat{K} \hat{J}^{G_2} \hat{K}$$

$$\frac{\partial \hat{J}^{G_2}}{\partial s_{G_2}} = -\mu \hat{J}^{G_2} + \frac{i}{2} (\sigma_{G_2} \hat{K}^2 \hat{J}^{G_2} - \sigma_{G_2}^* \hat{J}^{G_2} \hat{K}^2) + \sigma_{G_20} \hat{K} \hat{J}^0 \hat{K} + \sigma_{G_2H} \hat{K} \hat{J}^H \hat{K} + \sigma_{G_2G_1} \hat{K} \hat{J}^{G_1} \hat{K}$$

Der erweiterte Polarisationsstensor ergibt sich mit den Polarisationsfaktoren  $C$  für die gekoppelten Komponenten wie folgt:

$$(3-43) \quad \hat{K} = \begin{bmatrix} C_{ssss} & C_{psss} & C_{spss} & C_{ppss} \\ C_{sssp} & C_{pssp} & C_{spsp} & C_{ppsp} \\ C_{ssps} & C_{psps} & C_{spps} & C_{ppps} \\ C_{sspp} & C_{pspp} & C_{sppp} & C_{pppp} \end{bmatrix}$$

Die Indizes s und p stehen für die  $\sigma$ - und die  $\pi$ -Komponenten der einzelnen Strahlen.

### 3.4. Kopplung der Polarisationskomponenten

#### 3.4.1. Erweiterung des Polarisationsensors

Im Zweistrahlfall gilt für die Einheitsvektoren der  $\pi$ - und der  $\sigma$ -polarisierten Komponenten, dass der  $\pi$ -Vektor in der Beugungsebene<sup>3</sup> liegt und der Vektor der  $\sigma$ -Komponente senkrecht auf dieser steht. Für Mehrstrahlfälle im Allgemeinen ist diese Definition nicht anwendbar, da außer im komplanaren Fall mehrere Beugungsebenen existieren. Hier gilt die Festlegung, dass alle  $\pi$ -Vektoren in der zum Primärreflex gehörenden Beugungsebene liegen. Die  $\sigma$ -Komponenten sind immer senkrecht sowohl zur jeweiligen  $\pi$ -Komponente als auch zur jeweiligen Ausbreitungsrichtung  $s$ .

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{s} \times \boldsymbol{\sigma}$$

Die Kopplung zwischen den beiden senkrecht zueinander polarisierten Komponenten findet im Mehrstrahlfall über den Umweg der zusätzlichen Reflexe statt. Sie lässt sich durch die Skalarprodukte der beteiligten Komponenten beschreiben [SCHWEGLE 1993]. Im Zweistrahlfall ist das Ergebnis der skalaren Multiplikation der jeweiligen Komponenten gleich dem Polarisationsfaktor. So gilt:

$$(3-44) \quad \hat{K} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma}_0 \boldsymbol{\sigma}_h & \boldsymbol{\sigma}_0 \boldsymbol{\pi}_h \\ \boldsymbol{\pi}_0 \boldsymbol{\sigma}_h & \boldsymbol{\pi}_0 \boldsymbol{\pi}_h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos 2\theta_B \end{bmatrix}$$

Im Mehrstrahlfall treten neben diesen Skalarprodukten weitere auf, da die Komponenten  $\sigma$  und  $\pi$  über den Umweg gekoppelt werden. Diese Umwegkomponenten können durch ein doppeltes Skalarprodukt dargestellt werden. Betrachtet man nun den H-Strahl, so folgt am Beispiel eines Vierstrahlfalls die Gleichung (3-45), bei der die Skalarprodukte, die aufgrund der Lage der Vektoren zueinander null ergeben, bereits weggelassen sind:

---

<sup>3</sup> aufgespannt durch einfallenden und reflektierten Strahl, auch die Normale der reflektierenden Netzebene liegt in der Beugungsebene

$$(3-45) \quad \hat{K} = \begin{bmatrix} C_{\sigma\sigma} & C_{\sigma\pi} \\ C_{\pi\sigma} & C_{\pi\pi} \end{bmatrix} \quad \text{mit}$$

$$C_{\sigma\sigma} = \sigma_0 \sigma_h + \sigma_0 \sigma_{g1} \sigma_{g1} \sigma_h + \sigma_0 \sigma_{g2} \sigma_{g2} \sigma_h \quad C_{\sigma\pi} = \sigma_0 \sigma_{g1} \sigma_{g1} \pi_h + \sigma_0 \sigma_{g2} \sigma_{g2} \pi_h$$

$$C_{\pi\sigma} = \pi_0 \sigma_{g1} \sigma_{g1} \sigma_h + \pi_0 \sigma_{g2} \sigma_{g2} \sigma_h \quad C_{\pi\pi} = \pi_0 \pi_h + \pi_0 \sigma_{g1} \sigma_{g1} \pi_h + \pi_0 \pi_{g1} \pi_{g1} \pi_h + \pi_0 \sigma_{g2} \sigma_{g2} \pi_h + \pi_0 \pi_{g2} \pi_{g2} \pi_h$$

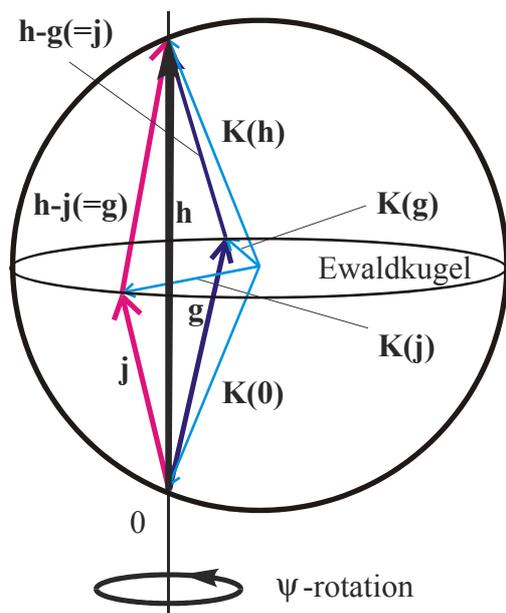
Die im Zweistrahlfall zu Null werdenden Nichtdiagonalelemente  $C_{\sigma\pi} = C_{\pi\sigma} = 0$  sind im nicht komplanaren Mehrstrahlfall ungleich null und damit kommt es zu einer Kopplung zwischen den  $\pi$ - und  $\sigma$ -Komponenten von einfallender und gebeugter Welle.

### 3.4.2. Transfer der Intensität über die Polarisationsvektoren

Im Zweistrahlfall werden die Polarisationskomponenten entkoppelt voneinander betrachtet. Die Intensität der beiden Komponenten wird unter Berücksichtigung der entsprechenden Polarisationsfaktoren berechnet. Die beiden Polarisationskomponenten sind immer nur in Bezug auf die Beugungsebene festzulegen.

In diesem Abschnitt soll die Intensität der beiden Komponenten für einen Mehrstrahlfall durch sukzessive Berechnung der beiden Komponenten dargestellt werden. Dieses ist möglich, wenn nur die Intensität und nicht die Phase der Komponenten betrachtet wird. Es wird dabei davon ausgegangen, dass sich die einzelnen über verschiedene Wege gebeugten Wellen inkohärent überlagern. So ist es möglich, die Mehrstrahlfälle als eine Folge von Zweistrahlfällen zu betrachten. Der reflektierte Strahl des ersten „Teilzweistrahlfalls“ ist der einfallende Strahl für den zweiten „Teilzweistrahlfall“. Die Polarisationskomponenten müssen entsprechend der Beugungsgeometrie transferiert werden.

Zur Beschreibung des Polarisationszustands einer Strahlung mit Hilfe der Stokes-Parameter werden entsprechend Gleichung (3-15) die Intensitäten in Abhängigkeit vom Azimutwinkel bei  $\alpha = -45^\circ, 0^\circ, 45^\circ, 90^\circ$  benötigt. Für den Parameter  $s_3$  zur Bestimmung des zirkularen Polarisationsgrades muss eine zusätzliche Phasendifferenz von  $\pi/2$  zwischen den beiden Polarisationskomponenten erzeugt werden. Die Intensitäten für  $0^\circ$  und  $90^\circ$  stimmen mit dem Quadrat der Amplituden der  $\pi$ - und der  $\sigma$ -Komponente überein.



**Abbildung 3-2** Lage der Vektoren im reziproken Raum für einen symmetrischen Vierstrahlfall

Der Rechenweg für einen symmetrischen Vierstrahlfall unter Beteiligung des primären Reflexes  $(4\ 0\ 0)$  und der zusätzlichen Reflexe  $(2\ 0\ 2)$  und  $(2\ 0\ -2)$  soll im folgenden aufgezeigt werden. Dabei wird das Beugungsgeschehen im reziproken Raum betrachtet. Die beteiligten Reflexe sind durch die Gittervektoren  $\mathbf{h}$   $[4\ 0\ 0]$ ,  $\mathbf{g}$   $[2\ 0\ 2]$  und  $\mathbf{j}$   $[2\ 0\ -2]$  gekennzeichnet, wobei in diesem speziellen Fall  $\mathbf{h} - \mathbf{g} = \mathbf{j}$  und  $\mathbf{h} - \mathbf{j} = \mathbf{g}$  gilt. Die Abbildung 3-2 dient der Veranschaulichung der Geometrie. Im Bild der Ewaldkugel sind die beteiligten reziproken Gittervektoren eingezeichnet.  $\mathbf{h}$ ,  $\mathbf{j}$  und  $\mathbf{g}$  liegen in einer Ebene.

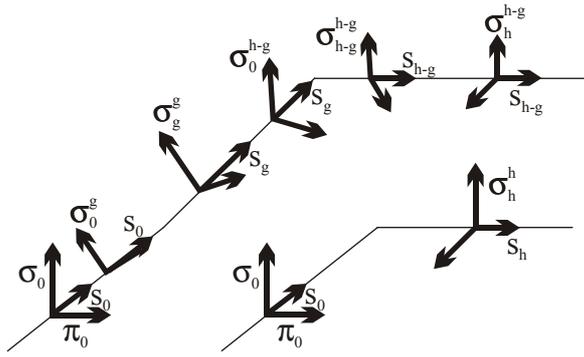
Zunächst wird die Ausbreitungsrichtung der einfallenden Welle  $\mathbf{K}(\mathbf{0})$  gemäß der im Anhang angegebenen Gleichung (8-1) nach EWALD & HÉNO (1968) bestimmt.  $\bar{\mathbf{s}}_0$  ist der Einheitsvektor<sup>4</sup> in dieser Richtung. Im reziproken Raum gilt für die Ausbreitung der gebeugten Wellen  $\mathbf{K}(\mathbf{h}) = \mathbf{K}(\mathbf{0}) + \mathbf{h}$ ,  $\mathbf{K}(\mathbf{g}) = \mathbf{K}(\mathbf{0}) + \mathbf{g}$  und  $\mathbf{K}(\mathbf{j}) = \mathbf{K}(\mathbf{0}) + \mathbf{j}$  sowie für die Umwegreflexe  $\mathbf{K}(\mathbf{h} - \mathbf{g}) = \mathbf{K}(\mathbf{g}) + \mathbf{h} - \mathbf{g}$  und  $\mathbf{K}(\mathbf{h} - \mathbf{j}) = \mathbf{K}(\mathbf{j}) + \mathbf{h} - \mathbf{j}$ . Betrachtet werden die Polarisations-eigenschaften der in Richtung  $\mathbf{K}(\mathbf{h})$  gebeugten Welle.  $\bar{\mathbf{s}}_h, \bar{\mathbf{s}}_g, \bar{\mathbf{s}}_j, \bar{\mathbf{s}}_{h-g}, \bar{\mathbf{s}}_{h-j}$  bezeichnen die jeweiligen Einheitsvektoren.

Die Einheitsvektoren der Polarisationskomponenten werden als nächstes bestimmt. Es gilt:

$$(3-46) \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0 = \bar{\mathbf{s}}_0 \times \bar{\mathbf{s}}_h = \bar{\boldsymbol{\sigma}}_h, \quad \bar{\boldsymbol{\pi}}_0 = \bar{\mathbf{s}}_0 \times \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0 \quad \text{sowie} \quad \bar{\boldsymbol{\pi}}_h = \bar{\mathbf{s}}_h \times \bar{\boldsymbol{\sigma}}_h$$

Im Mehrstrahlfall gilt die Definition, dass die  $\boldsymbol{\pi}$ -Komponenten aller beteiligten Strahlen in der von  $\mathbf{K}(\mathbf{0})$  und  $\mathbf{K}(\mathbf{h})$  aufgespannten Ebene liegen. Die Berechnung des  $\boldsymbol{\pi}$ -Vektors eines zusätzlichen Strahls  $\mathbf{K}(\mathbf{i})$  erfolgt dann gemäß  $\boldsymbol{\pi}_i = (\mathbf{s}_0 \mathbf{s}_i) \mathbf{s}_h - (\mathbf{s}_h \mathbf{s}_i) \mathbf{s}_0$  und es gilt:  $\boldsymbol{\sigma}_i = \boldsymbol{\pi}_i \times \mathbf{s}_i$ .

<sup>4</sup> Einheitsvektoren sind in diesem Abschnitt durch  $\bar{\mathbf{s}}$  gekennzeichnet.



**Abbildung 3-3** Veranschaulichung der beteiligten  $\mathbf{s}$ - und  $\boldsymbol{\sigma}$ -Vektoren für die direkte Beugung an  $\mathbf{h}$  (rechts unten) und der Umwegbeugung über  $\mathbf{g}$

In der hier vorgenommenen Beschreibung des Mehrstrahlfalls als Folge von Zweistrahlfällen wird diese Definition jedoch nicht angewendet, da die Behandlung der Polarisationskomponenten im Zweistrahlfall nach der in der jeweiligen Beugungsebene liegenden Komponente und der senkrecht zur Beugungsebene stehenden Komponente entkoppelt vorgenommen wird. Aus diesem Grunde sind auch die Komponenten der einfallenden Strahlung für jeden einzelnen Beugungsvorgang unabhängig voneinander zu bestimmen. Dementsprechend gilt:

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_0^g = \bar{\mathbf{s}}_0 \times \bar{\mathbf{s}}_g = \bar{\boldsymbol{\sigma}}_g^g, \quad \bar{\boldsymbol{\pi}}_0^g = \bar{\mathbf{s}}_0 \times \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0^g \quad \text{sowie}$$

$\bar{\boldsymbol{\pi}}_g^g = \bar{\mathbf{s}}_g \times \bar{\boldsymbol{\sigma}}_g^g$  und  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_0^j = \bar{\mathbf{s}}_0 \times \bar{\mathbf{s}}_j = \bar{\boldsymbol{\sigma}}_j^j$ ,  $\bar{\boldsymbol{\pi}}_0^j = \bar{\mathbf{s}}_0 \times \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0^j$  sowie  $\bar{\boldsymbol{\pi}}_j^j = \bar{\mathbf{s}}_j \times \bar{\boldsymbol{\sigma}}_j^j$ . Auch für die folgenden Zweistrahlfälle sind die Richtungen der Polarisationskomponenten nach diesem Muster festzulegen:

$$(3-47) \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0^{h-g} = \bar{\mathbf{s}}_g \times \bar{\mathbf{s}}_{h-g} = \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{h-g}^{h-g}, \quad \bar{\boldsymbol{\pi}}_0^{h-g} = \bar{\mathbf{s}}_g \times \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0^{h-g} \quad \text{sowie} \quad \bar{\boldsymbol{\pi}}_{h-g}^{h-g} = \bar{\mathbf{s}}_{h-g} \times \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{h-g}^{h-g}$$

$$(3-48) \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0^{h-j} = \bar{\mathbf{s}}_j \times \bar{\mathbf{s}}_{h-j} = \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{h-j}^{h-j}, \quad \bar{\boldsymbol{\pi}}_0^{h-j} = \bar{\mathbf{s}}_j \times \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0^{h-j} \quad \text{sowie} \quad \bar{\boldsymbol{\pi}}_{h-j}^{h-j} = \bar{\mathbf{s}}_{h-j} \times \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{h-j}^{h-j}$$

Nachdem die für die einzelnen Beugungen zu verwendenden Polarisationsvektoren festgelegt sind, ist es notwendig, die Polarisations-eigenschaften der einfallenden Strahlung in diesen Geometrien darzustellen. Aufgrund der Beugungsgeometrie für den H-Strahl mit einer Beugungsebene parallel zur Ebene des Synchrotronspeicherrings sind die Hauptachsen der Polarisationsellipse der einfallenden Welle für diese Beugung gleich den Polarisationskomponenten  $\boldsymbol{\sigma}_0$  und  $\boldsymbol{\pi}_0$ :

$$(3-49) \quad \boldsymbol{\sigma}_0 = I_s \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0 \quad \boldsymbol{\pi}_0 = I_p \bar{\boldsymbol{\pi}}_0$$

Für die beiden zusätzlichen Reflexionen an den durch die reziproken Gittervektoren  $\mathbf{g}$  und  $\mathbf{j}$  gekennzeichneten Netzebenen wird die Größe der Polarisationskomponenten der einfallenden Strahlung durch Projektion auf die entsprechenden Vektoren bestimmt:

$$(3-50) \quad \boldsymbol{\sigma}_0^g = \left( |\boldsymbol{\sigma}_0 \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0^g| + |\boldsymbol{\pi}_0 \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0^g| \right) \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0^g \quad \boldsymbol{\pi}_0^g = \left( |\boldsymbol{\sigma}_0 \bar{\boldsymbol{\pi}}_0^g| + |\boldsymbol{\pi}_0 \bar{\boldsymbol{\pi}}_0^g| \right) \bar{\boldsymbol{\pi}}_0^g$$

$$(3-51) \quad \boldsymbol{\sigma}_0^j = \left( |\boldsymbol{\sigma}_0 \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0^j| + |\boldsymbol{\pi}_0 \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0^j| \right) \bar{\boldsymbol{\sigma}}_0^j \quad \boldsymbol{\pi}_0^j = \left( |\boldsymbol{\sigma}_0 \bar{\boldsymbol{\pi}}_0^j| + |\boldsymbol{\pi}_0 \bar{\boldsymbol{\pi}}_0^j| \right) \bar{\boldsymbol{\pi}}_0^j$$

Das gleiche Verfahren wird auf die Polarisationskomponenten der beiden reflektierten Strahlen angewandt, um die Komponenten entsprechend der folgenden Beugungsgeometrie zu bestimmen:

$$(3-52) \quad \sigma_0^{h-g} = \left( \left| \sigma_g^g \bar{\sigma}_0^{h-g} \right| + \left| \pi_g^g \bar{\sigma}_0^{h-g} \right| \right) \bar{\sigma}_0^{h-g} \quad \pi_0^{h-g} = \left( \left| \sigma_g^g \bar{\pi}_0^{h-g} \right| + \left| \pi_g^g \bar{\pi}_0^{h-g} \right| \right) \bar{\pi}_0^{h-g}$$

$$(3-53) \quad \sigma_0^{h-j} = \left( \left| \sigma_j^j \bar{\sigma}_0^{h-j} \right| + \left| \pi_j^j \bar{\sigma}_0^{h-j} \right| \right) \bar{\sigma}_0^{h-j} \quad \pi_0^{h-j} = \left( \left| \sigma_j^j \bar{\pi}_0^{h-j} \right| + \left| \pi_j^j \bar{\pi}_0^{h-j} \right| \right) \bar{\pi}_0^{h-j}$$

Eine solche Projektion der Komponenten erfolgt auch nach der Beugung über den Umweg auf die Komponenten des H-Strahls. Die Größe dieser ergibt sich aus der Summe der Komponenten der Teilwellen, projiziert auf die Komponenten der direkt gebeugten Welle:

$$(3-54) \quad \sigma_h^{ges} = \left( \underbrace{\left| \sigma_{h-g}^{h-g} \bar{\sigma}_h \right| + \left| \pi_{h-g}^{h-g} \bar{\sigma}_h \right| + \left| \sigma_{h-j}^{h-j} \bar{\sigma}_h \right| + \left| \pi_{h-j}^{h-j} \bar{\sigma}_h \right|}_{\text{Umweg-}} + \underbrace{\left| \sigma_h \right|}_{\text{direkter}} \right) \bar{\sigma}_h$$

$$\pi_h^{ges} = \left( \underbrace{\left| \sigma_{h-g}^{h-g} \bar{\pi}_h \right| + \left| \pi_{h-g}^{h-g} \bar{\pi}_h \right| + \left| \sigma_{h-j}^{h-j} \bar{\pi}_h \right| + \left| \pi_{h-j}^{h-j} \bar{\pi}_h \right|}_{\text{anteil}} + \underbrace{\left| \pi_h \right|}_{\text{Anteil}} \right) \bar{\pi}_h$$

Um die Betrachtung der Komponenten zu vervollständigen, ist noch der Intensitätsübertrag bei den einzelnen Beugungsvorgängen zu betrachten. Im Zweistrahlfall gilt die Entkopplung der beiden Komponenten. So kann von einer  $\pi$ -Komponente des einfallenden Strahls auch nur Intensität in die  $\pi$ -Komponente des reflektierten Strahls übertragen werden. Dasselbe gilt für die  $\sigma$ -Komponenten. Der Übertrag kann mit Hilfe des Polarisationsfaktors  $C$  beschrieben werden. Dieser ist unterschiedlich für  $\sigma$  und  $\pi$ . Gemäß Gleichung (3-44) ist der Polarisationsfaktor gleich dem Skalarprodukt der Komponentenvektoren. Da die  $\sigma$ -Komponenten von einfallendem und reflektiertem Strahl in dieselbe Richtung zeigen, gilt für die Einheitsvektoren  $C_{\sigma\sigma} = \bar{\sigma}_0 \bar{\sigma}_h = 1$ . Die  $\pi$ -Komponenten schließen jedoch genau wie die Ausbreitungsrichtungen den doppelten Braggwinkel ein. Daraus folgt:  $C_{\pi\pi} = \bar{\pi}_0 \bar{\pi}_h = \cos(2\theta_B)$ . Neben den Polarisations-eigenschaften der Strahlung wird das Reflexionsvermögen der unterschiedlichen Reflexe innerhalb eines Kristalls durch die Struktur des Kristalls bestimmt (Gleichung (3-27)). Dieser Abhängigkeit wird in den Berechnungen durch die Strukturamplitude Rechnung getragen. Die anderen beschriebenen Faktoren wie Gitter- und Lorentzfaktor sind nicht von einem speziellen Reflex abhängig. Da bei der Untersuchung des Polarisationszustands nur die Intensitäten relativ zueinander betrachtet werden, genügt es, für den Transfer der Intensitäten bei einer Beugung Polarisations- und Strukturfaktor einzubeziehen. Daraus folgt:

$$(3-55) \quad \sigma_h = \sigma_0 |F_h|^{kd} \quad \text{und} \quad \pi_h = \pi_0 \cos^{kd}(2\theta_B) |F_h|^{kd}$$

Der Exponent  $kd$  in dieser Gleichung ist für die geometrische und die dynamische Theorie unterschiedlich groß. Für die geometrische Theorie gilt:  $kd=2$  und für die dynamische:  $kd=1$ . Die Anwendung der beiden Theorien ist abhängig von der Perfektion des Kristalls. Ein perfekter Kristall, bei dem die periodische Anordnung nicht gestört ist, unterliegt der dynamischen Theorie. In dieser werden die Extinktion und Brechung der Strahlung sowie eine mögliche Mehrfachreflexion vom reflektierten zurück in den transmittierten Strahl ohne zusätzliche Annahmen berücksichtigt. Sind in dem zu untersuchenden Kristall Störungen in der Periodizität vorhanden, so ist die Größe der kohärent streuenden Bereiche begrenzt. In Mosaikkristallen ist ein solcher Bereich durch die festabgegrenzten Mosaikblöcke gegeben. Dabei weist jeder Block gegenüber seinen Nachbarblöcken eine gewisse Verschwenkung auf. Diese Verschwenkung ist bei idealen Mosaikkristallen so groß, dass die Extinktion vernachlässigt werden kann. Diese Mosaikkristalle folgen eher der geometrischen Theorie.

Auf diesen Betrachtungen beruht die Möglichkeit, die Perfektion von Kristallen mit Hilfe polarisierter Strahlung zu bestimmen. Dabei wird experimentell der Polarisationsfaktor für die  $\pi$ -Komponente und somit der Exponent  $kd$  bestimmt [CHANDRASEKARAN 1959].

Die Berechnung des linearen Polarisationsgrads nach Gleichung (3-16) erfolgt unter Verwendung von  $s_2$ . Dieser Stokes-Parameter ergibt sich gemäß den Gleichungen (3-15) aus den Intensitäten bei  $\alpha = 45^\circ$  und  $\alpha = 135^\circ$ . Der in diesem Abschnitt aufgezeichnete Weg des Vektorübertrags führt dazu, dass die Intensitäten unter diesen beiden Winkeln gleich groß sind und somit  $s_2 = 0$  gilt. Der Grad der linearen Polarisation berechnet sich hier wie folgt:

$$(3-56) \quad P_{lin} = \sqrt{\left(\frac{s_1}{s_0}\right)^2} = \frac{s_1}{s_0} = \frac{I(0^\circ, 0) - I(90^\circ, 0)}{I(0^\circ, 0) + I(90^\circ, 0)} = \frac{I(\sigma_h^{ges}) - I(\pi_h^{ges})}{I(\sigma_h^{ges}) + I(\pi_h^{ges})}$$

## 4. Experimenteller Aufbau

In diesem Abschnitt soll die experimentelle Anordnung zur Messung der integralen Intensitäten bei der Untersuchung des Polarisationszustands der Röntgenstrahlung beschrieben werden. Dabei wird speziell auf den Aufbau der polarisationsoptischen Bank für Röntgenstrahlung und die Beugungsgeometrie eingegangen. Des Weiteren wird in diesem Abschnitt die Handhabung der Lambdaviertelplättchen erklärt. Die in dieser Arbeit vorgestellten Experimente wurden im Hamburger Synchrotronstrahlungslabor (HASYLAB am DESY) an der Beamline CEMO durchgeführt. Zunächst wird auf die Synchrotronstrahlung und ihre Polarisations-eigenschaften eingegangen.

### 4.1. Synchrotronstrahlung und ihre Polarisations-eigenschaften

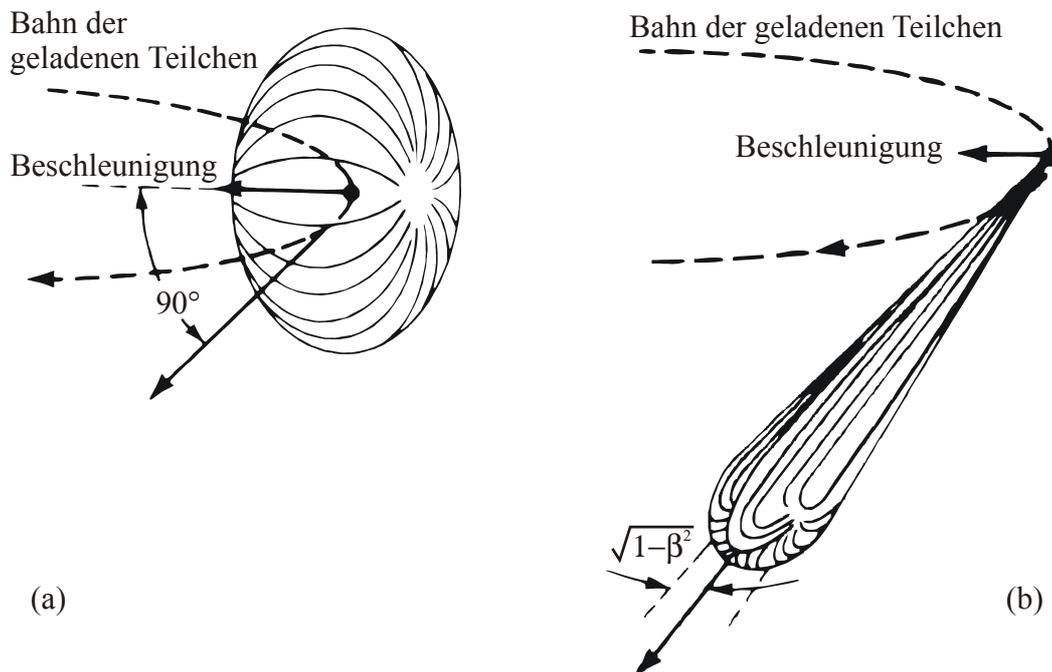
Die Intensität der von konventionellen Röntgenröhren erzeugten Strahlung reicht für Experimente oft nicht aus. Diese Tatsache betrifft insbesondere den Einsatz von polarisierter Röntgenstrahlung. Die charakteristische Strahlung hat keine Vorzugsrichtung, ist also unpolarisiert. Eine Polarisierung dieser Strahlung müsste über zusätzliche intensitätsschwächende polarisationsoptische Komponenten vorgenommen werden.

Es ist seit dem Bau von Synchrotron-speicherringen möglich, die mit deutlich höherer Intensität vorhandene Röntgenstrahlung einer solchen Anlage für polarisationsabhängige Messungen zu verwenden. Synchrotronstrahlung wird bei der Beschleunigung von elektrisch geladenen Teilchen (Elektronen oder Positronen) emittiert. Die Teilchen werden dabei auf eine relativistische Geschwindigkeit beschleunigt. Für Ladungen, die keine relativistische Geschwindigkeit besitzen, wird die Strahlung isotrop um die Richtung der Beschleunigung emittiert. Erst bei Verwendung relativistischer Energien

$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} = \gamma m_0 c^2$  mit  $\beta = \frac{v}{c} \approx 1$  und dem relativistischen Massekoeffizienten

$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \gg 1$  wird die Strahlung in Richtung der Bewegung der strahlenden Ladung

in einem kleinen Winkelbereich  $\sqrt{1-(\frac{v}{c})^2}$  emittiert. In der Abbildung 4-1 sind die beiden Abstrahlverhalten dargestellt.



**Abbildung 4-1** Emissionscharakteristik für Synchrotronstrahlung **(a)**: für ein langsames Elektron  $\beta = \frac{v}{c} \ll 1$  (klassisches Bild) und **(b)**: für ein relativistisch beschleunigtes Elektron  $\beta \approx 1$  mit einem Abstrahlwinkel  $\sqrt{1 - \beta^2}$  [KOCH 1983]

Bei Synchrotronspeicherringen werden die Teilchen zunächst in einem Linearbeschleuniger auf eine relativistische Geschwindigkeit beschleunigt und dann in einem Magnetfeld auf einer geschlossenen Bahn gehalten. Die an den Umlenkmagneten, Wiggler und Undulatoren abgehende Strahlung besitzt ein kontinuierliches Spektrum. Sie breitet sich vorzugsweise in der Orbitalebene des Speicherrings aus. Der vertikale Abstrahlungswinkel  $\xi$  der Synchrotronstrahlung ist umgekehrt proportional zur Energie der geladenen Teilchen.

$$(4-1) \quad \xi \approx \frac{1}{\gamma} = \frac{m_0 c^2}{E}$$

( $E$ ..Energie,  $m_0$ .. Ruhemasse der geladenen Teilchen,  $c$ ..Lichtgeschwindigkeit)

Bei einer Energie von  $E = 4,5$  GeV, wie sie im HASYLAB erreicht wird, errechnet sich die Divergenz der Strahlung zu  $\sim 10^{-4}$  rad. Die Brillianz der Strahlung (Anzahl von Photonen einer einheitlichen Energie pro Raumwinkel und Zeit) ist damit sehr hoch.

Bei der Betrachtung der Polarisations-eigenschaften muss man die Form der Bahn der emittierenden Teilchen berücksichtigen. In einem Krümmungsmagneten durchlaufen die

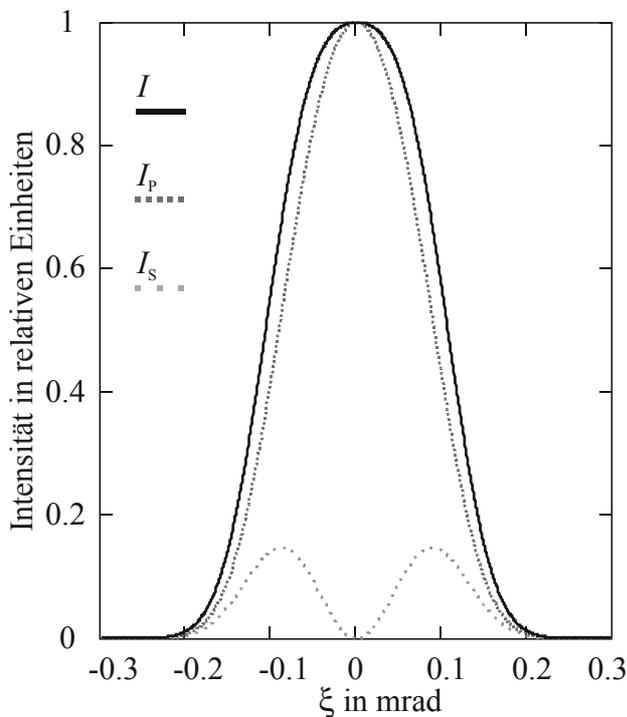
geladenen Teilchen eine Kreisbahn. Die Intensität der Strahlung senkrecht und parallel zum Speicherring kann für eine bestimmte Wellenlänge  $\lambda$  abhängig vom offset Winkel  $\xi$  folgendermaßen berechnet werden:

$$(4-2) \quad I_s(\lambda, \xi) = \frac{27}{32\pi^3} \frac{e^2 c}{R^3} \left(\frac{\lambda_c}{\lambda}\right)^4 \gamma^8 [1 + (\gamma\xi)^2]^2 \cdot K_{\frac{2}{3}}^2 \left(\frac{\lambda_c}{2\lambda} [1 + (\gamma\xi)^2]^{\frac{3}{2}}\right)$$

$$I_p(\lambda, \xi) = \frac{27}{32\pi^3} \frac{e^2 c}{R^3} \left(\frac{\lambda_c}{\lambda}\right)^4 \gamma^8 [1 + (\gamma\xi)^2]^2 \cdot \left[ \frac{(\gamma\xi)^2}{1 + (\gamma\xi)^2} \cdot K_{\frac{2}{3}}^2 \left(\frac{\lambda_c}{2\lambda} [1 + (\gamma\xi)^2]^{\frac{3}{2}}\right) \right]$$

mit  $\lambda_c = \frac{4}{3} \pi \frac{R}{\gamma^3}$

$\lambda_c$  bezeichnet die cut off Wellenlänge,  $e$  die Elementarladung,  $R$  den Krümmungsradius der Teilchenbahn und  $K_{\frac{1}{3}}, K_{\frac{2}{3}}$  die MacDonaldische Funktion der Ordnung  $\frac{1}{3}$  bzw.  $\frac{2}{3}$ . Strahlung, die in der Ebene der Teilchenbahn emittiert wird, ist linear polarisiert. Der Polarisationsvektor liegt in dieser Ebene. Ober- und unterhalb der Beugungsebene ist die Phasenverschiebung zwischen den beiden Komponenten verschieden von null, zum einen positiv und zum anderen negativ. Über den Emissionswinkel der Strahlung ist also der Polarisationsgrad und ihre Helizität festgelegt.



Die Abbildung 4-2 zeigt die Intensitätsverteilung der Synchrotronstrahlung, wie sie für den Krümmungsmagneten (bending magnet) an der CEMO Beamline im HASYLAB nach den Gleichungen (4-2) berechnet werden kann. Die Energie der Teilchen beträgt dabei 4,5 GeV und die Wellenlänge 1,0 Å. In der Orbitebene emittierte Strahlung ist also linear polarisiert, während die außerhalb dieser Ebene emittierte Strahlung elliptisch polarisiert ist. Sind die beiden senkrecht zueinander polarisierten Anteile gleich groß, erhält man zirkular polarisierte Strahlung. Die Intensität dieser ist durch den großen offset aber gering.

**Abbildung 4-2** Berechnete Abstrahlcharakteristik für die verwendete Synchrotronstrahlung am Krümmungsmagneten der CEMO Beamline

Durch den Doppelmonochromator, der seine Beugungsebene senkrecht zur Speicherringebene hat, wird die vertikale Komponente ( $I_s$ ) der Synchrotronstrahlung um den Polarisationsfaktor stärker geschwächt als die horizontale Komponente ( $I_p$ ).

Soll zirkular polarisierte Strahlung in den Experimenten verwendet werden, besteht die Möglichkeit, an einer mit speziellen Undulatoren ausgerüsteten Beamline zu arbeiten. In diesen helikalen Undulatoren durchlaufen die emittierenden geladenen Teilchen das Magnetfeld auf Schraubenbahnen. Steht eine solche Beamline nicht zur Verfügung, muss die Polarisation der Strahlung mit Hilfe von Phasenschiebern in eine zirkulare verändert werden. Diese zweite Variante wurde in der hier vorliegenden Arbeit genutzt.

Bewegen sich die geladenen Teilchen innerhalb des Krümmungsmagneten nicht exakt auf einer ebenen Kreisbahn, wird der Quellpunkt der Strahlung vergrößert. Dadurch und durch Streuprozesse ist die Synchrotronstrahlung immer auch zu einem Teil unpolarisiert. Des weiteren muss bei dem Einsatz optischer Elemente, wie zum Beispiel eines Monochromators, die Änderung der Polarisationsseigenschaften durch diese berücksichtigt werden.

## 4.2. Röntgenoptische Komponenten

### 4.2.1. Analysator

Zur Analyse des Polarisationszustands der Röntgenstrahlung ist eine Einrichtung gebaut worden, bei der über einen symmetrischen Reflex mit einem doppelten Braggwinkel von  $90^\circ$  die integrale Intensität der Rockingkurve gemessen wurde. Durch den festgelegten Braggwinkel von  $45^\circ$  mussten je nach Wellenlänge die Analysatorkristalle gewechselt werden. Für die hier vorgestellten Ergebnisse wurde bei zwei verschiedenen Wellenlängen ( $1,4778 \text{ \AA}$  und  $1,0003 \text{ \AA}$ ) gearbeitet. Für die erste Wellenlänge wurde ein Siliziumkristall mit (1 1 1) Oberfläche verwendet, bei dem der (3 3 3) Reflex zur Beugung um  $90^\circ$  angeregt wurde. Für die Wellenlänge von  $1,0003 \text{ \AA}$  kam ein Siliziumkristall mit (5 5 3) Oberfläche zum Einsatz. Dieser Analysatorkristall konnte gekoppelt mit dem Analysator so um den zu untersuchenden Strahl gedreht werden, dass die gemessene Intensität in Abhängigkeit von der Polarisation dieses Strahls aufgezeichnet werden konnte. Dabei wurde immer die gesamte Reflexionskurve des Siliziumanalysatorkristalls vermessen, da aufgrund verschiedener Divergenzen (vergleiche Absatz 4.3) in horizontaler und vertikaler Ebene unterschiedliche Halbwertsbreiten auftreten. Da die Einstrahlbedingungen trotz einer Lochblende von 1 mm Durchmesser bei einem Abstand von ca. 70 cm vom Probenkristall nicht konstant waren, änderte sich die Braggwinkelposition des Analysatorreflexes bei der Drehung um den zu untersuchenden Strahl geringfügig.

Der Winkel  $\alpha$  kontrolliert die Rotation um den zu untersuchenden Strahl. Dieser Winkel bezieht sich in dieser Arbeit immer auf die Ebene des Synchrotronspeicherrings, die gleichzeitig parallel zur Beugungsebene der in den Probenkristallen angeregten Primärreflexionen liegt. Bei  $\alpha = 0^\circ$  wird der zu untersuchende Strahl am Silizium-analysatorkristall in der Ebene des Speicherings und bei  $\alpha = 90^\circ$  senkrecht dazu nach oben reflektiert.

#### 4.2.2. Lambdaviertelplättchen / Phasenschieber

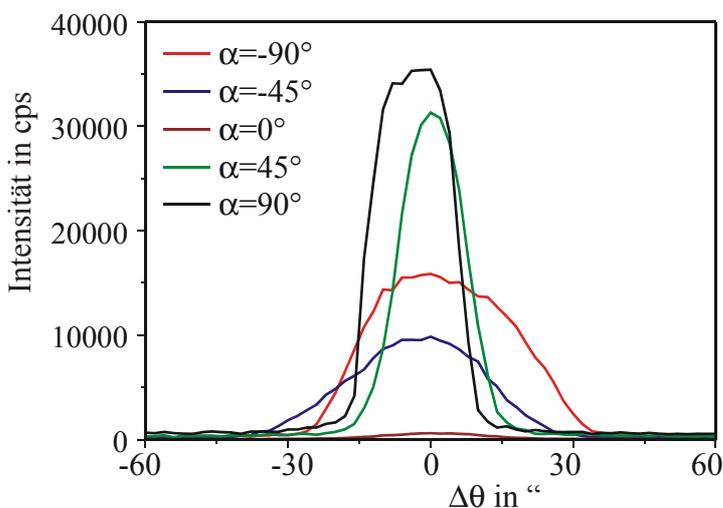
Um außer den Versuchen mit linear polarisierter Strahlung Experimente mit zirkular polarisierter Strahlung durchzuführen, musste ein Phasenschieber in den Strahlengang eingebracht werden, der die Phasen der Komponenten um  $\pi/2$  gegeneinander verschob. Dieses Lambdaviertelplättchen wurde über eine (2 0 0) Braggreflexion an einem LiF-Kristall realisiert. Für die Experimente wurde der transmittierte Strahl dieser Reflexion genutzt, um eine Geradeausgeometrie zu gewährleisten [LEITENBERGER ET AL. 1997]. Die Komponenten sollen gleich stark angeregt werden. Aus diesem Grunde ist die Beugungsebene des Lambdaviertelplättchens um  $45^\circ$  gegen den Speicherring gekippt [BATTERMAN 1992]. Die Kippung des LiF-Kristalls ist mit Hilfe einer Schaukel realisiert worden, auf der der Kreis zum Einstellen des Braggwinkels des Lambdaviertelplättchens befestigt ist. Der Kristall ist auf diesem Kreis mit Hilfe eines Goniometerkopfes justiert. Die Phasendifferenz, die mit dieser Anordnung zwischen den beiden senkrecht zueinander polarisierten Komponenten erreicht wird, hängt, wie in der Einleitung beschrieben, von der Dicke, der Wellenlänge, dem Reflex und der Abweichung von der exakten Winkelposition ab. Die Einstellung der exakten Winkelposition erfolgte für die als Phasenschieber verwendeten Kristalle im Primärstrahl. Die Änderung des Polarisationszustands der einfallenden Strahlung ist in Absatz 4.5.2 beschrieben.

Der Probenkristall kann so mit linear oder zirkular polarisierter Strahlung untersucht werden. Zur Analyse des gebeugten Strahls wird ein weiteres Lambdaviertelplättchen benötigt, um zwischen zirkular polarisierter und unpolarisierter Strahlung zu unterscheiden. Es kann mit diesem festgestellt werden, ob weiterhin eine Phasenbeziehung zwischen den Wellenkomponenten besteht. Dieser zweite Phasenschieber wurde direkt vor dem Analysator angebracht. Die Beugungsebene des Phasenschieberkristalls ist um  $45^\circ$  gegen die Beugungsebene des Probenkristalls geneigt.

#### 4.3. Divergenz der Strahlung

Zur Bestimmung des Polarisationszustands unter Verwendung der Stokes-Parameter ist es notwendig, die Intensitäten bei verschiedenen Analysatorwinkeln  $\alpha$  zu bestimmen.

Dabei ist zu beachten, dass die Strahlung eine gewisse Divergenz aufweist. Diese Divergenz ist für die vertikale und die horizontale Komponente unterschiedlich groß, und damit variiert die Breite der Rockingkurven des Analysatorreflexes in Abhängigkeit vom Azimutwinkel  $\alpha$ . Zur Bestimmung von Polarisationsseigenschaften ist die integrale Intensität zu messen [BRÜMMER, EISENSCHMIDT, NIEBER 1982]. Aus diesem Grunde ist es nicht ausreichend, den Analysatorreflex in der Position der maximalen Intensität des reflektierten Strahls zu positionieren. Die Intensität muss über die gesamte Rockingkurvenbreite integriert werden.



**Abbildung 4-3** Beispiele für Reflexionskurven des (3 3 3) Reflexes des Siliziumanalysatorkristalls in Abhängigkeit vom Azimutwinkel  $\alpha$  bei einer Wellenlänge von 1,4778 Å

Die Abbildung 4-3 zeigt die Rockingkurven des Analysatorkristalls aufgenommen bei verschiedenen Azimutwinkeln  $\alpha$ . In dieser Abbildung ist deutlich die unterschiedliche Divergenz der Strahlung zu erkennen. Bei  $\alpha = 0^\circ$  verursacht die horizontale Divergenz eine Verbreiterung<sup>5</sup> der Rockingkurve. Die senkrecht dazu reflektierte Strahlung weist deutlich geringere Halbwertsbreiten auf und bei  $\alpha \neq 0^\circ, 90^\circ$  ist die Divergenz der Strahlung eine Mischung aus vertikalem und horizontalem Anteil.

Zusätzlich wird die Breite der Rockingkurven durch die Dispersion beeinflusst. Diese ist abhängig von der Anordnung der Kristalle des Doppelmonochromators zu der des Analysatorkristalls. In dem in der Abbildung 4-3 gezeigten Beispiel werden in den beiden Monochromatorkristallen und dem Analysatorkristall jeweils der (3 3 3) Reflex mit einer Wellenlänge von 1,4778 Å angeregt.

Bei  $\alpha = \pm 90^\circ$  liegt die Beugungsebene des Analysatorkristalls parallel zu der des Doppelmonochromators. Aufgrund der (n, -n) Anordnung der beiden Kristalle innerhalb des Doppelmonochromators ist dieser dispersionsfrei. Bei Betrachtung der Anordnung der beiden Monochromatorkristall zu der des Analysatorkristalls sind für  $\alpha = \pm 90^\circ$  in

<sup>5</sup> bestimmt aus der Halbwertsbreite

Bezug auf die Dispersion zwei Einstellungen zu unterscheiden. Für  $\alpha = +90^\circ$  stehen die drei Kristalle in (n, -n, n) Anordnung und haben somit eine geringere Dispersion als in der dispersiven (n, -n, -n) Anordnung, die für  $\alpha = -90^\circ$  existiert. Diese Dispersion bewirkt eine zusätzliche Verbreiterung der Rockingkurven des Analysatorkristalls für alle Azimutwinkel  $\alpha \neq +90^\circ$ . Die Berechnung des Einflusses der Divergenz und der Dispersion in Abhängigkeit vom Azimutwinkel  $\alpha$  ist in [EISENSCHMIDT 1984] und [HEYROTH 1995] angegeben. Aus den Rechnungen zeigt sich, dass das Maximum der Halbwertsbreite der Rockingkurve des Analysatorkristalls nicht bei  $\alpha = -90^\circ$ , sondern in Abhängigkeit von horizontaler und vertikaler Divergenz zwischen  $\alpha = 0^\circ$  und  $\alpha = -90^\circ$  liegt.

Die Halbwertsbreiten der Reflexionskurven des Analysatorkristalls betragen 16 bis 40 Winkelsekunden. Die intrinsische Rockingkurvenbreite für Silizium liegt in der Größenordnung von 5 Winkelsekunden.

Bei der Einstellung der Lambdaviertelplättchen, wie sie in Abschnitt 4.5.2 beschrieben wird, konnte die Messung der Intensität nicht über den gesamten Bereich der Rockingkurve integriert vorgenommen werden, da die Intensität in Abhängigkeit von der Abweichung des Braggwinkels am Phasenschieberkristall aufgezeichnet werden musste (siehe Abbildung 4-9).

In diesem Falle ist eine Divergenzkorrektur vorzunehmen [LEITENBERGER 1997]. Dazu wird für die unterschiedlichen Azimuteinstellungen am Analysator ein Korrekturfaktor aus dem Wert der maximalen und dem Wert der integralen Intensität bestimmt:

$$K_{div}(\alpha) = \frac{I_{int}(\alpha)}{I_{max}(\alpha)}$$

Die mit Hilfe des Korrekturfaktors aus dem Intensitätsmaximalwert bestimmte integrale Intensität ermöglicht dann eine genauere Bestimmung des Polarisationszustands. Bei den in dieser Arbeit vorgestellten Messungen ist die Intensität nur bei der Einstellung der Lambdaviertelpositionen nicht integral gemessen worden.

#### 4.4. Deformation der Probenkristalle



Abbildung 4-4 Kristallpresse

Zur Erhöhung der Defektdichte in den Probenkristallen werden diese einer mechanischen Deformation unterworfen. Zu diesem Zweck sind Formen gefertigt worden, in denen die Kristalle entlang einer Richtung gebogen wurden. Ihre Krümmungsradien betragen 1 m, 0,5 m, 0,2 m und 0,1 m. Den Kristallen wurden so unterschiedlich große Krümmungsradien aufgezwungen. Die Deformation fand in einer Presse statt, deren Druck durch einen Federkraftmesser kontrolliert wurde. Um die Zerstörung der Kristalle durch Bruch zu vermeiden, wurde der Druck jeweils nur in kleinen Schritten erhöht.

Die Abbildung 4-4 zeigt ein Bild der Kristallpresse.

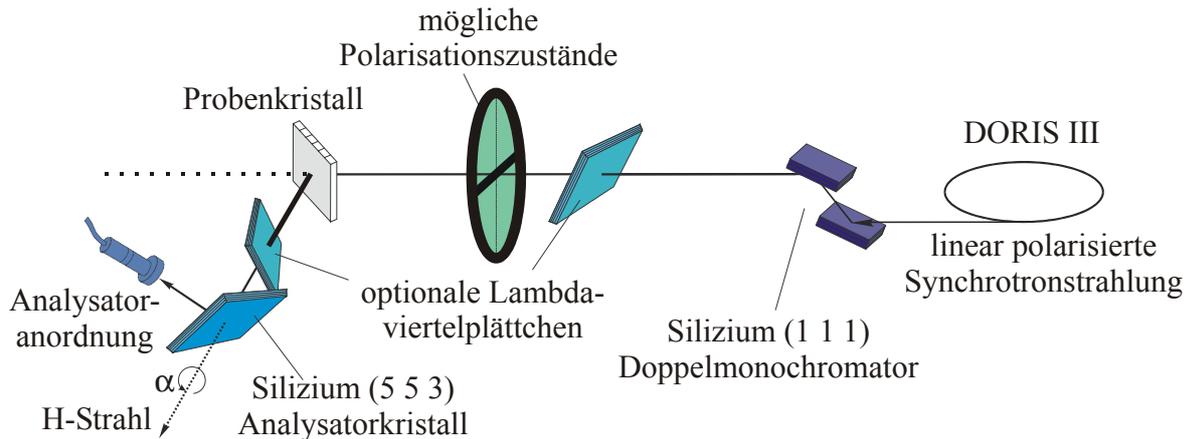
#### 4.5. CEMO Beamline im HASYLAB – Aufbau und Strahlengang

Im HASYLAB existiert ein Synchrotron der zweiten Generation. Im Speicherring Doris III kreisen Positronen, die auf 4,5 GeV beschleunigt sind. Bei dem jetzigen Stand von Doris III wird ein Strahlstrom von bis zu 160 mA bei einer Strahllebensdauer von bis zu 12 h erreicht.

##### 4.5.1. Strahlführung an der Beamline

CEMO ist eine vielfältig verwendbare Beamline [HASYLAB 2000]. Sie liefert einen monochromatischen Röntgenstrahl im Energiebereich von 6 bis 45 keV und kann für Röntgenbeugung, stehende Wellen, EXAFS, anomale Dispersion und magnetische Streuung eingesetzt werden. Die Photonenquelle mit einer Quellgröße von  $0.9 \times 2.8 \text{ mm}^2$  ist ein Krümmungsmagnet. Der Abstand zwischen Photonenquelle und Probenkristall im Zentrum der Experimentierhütte beträgt 37 m.

Zwischen der Photonenquelle und der Experimentierhütte ist es möglich, den Strahl durch Spalte zu begrenzen und ihn mittels eines vertikal angeordneten Spiegels im Zentrum der Hütte zu fokussieren. Eingangsseitig befindet sich in der Experimentierhütte der Monochromatortank. Dieser ist zum Schutz vor Oxidationsvorgängen auf den Monochromatorkristallen, zur Verringerung des Streuuntergrunds und der Absorption mit Helium gefüllt. Man kann den Doppelmonochromator sowohl mit (3 1 1) als auch (1 1 1) Siliziumkristallen bestücken. Für die Experimente in dieser Arbeit wurde der Silizium (1 1 1) Doppelmonochromator genutzt. Dieser erlaubte Arbeiten im Bereich von 6 bis 20 keV (0,5 bis  $1,8 \text{ \AA}$ ). Die spektrale Breite der Primärstrahlung nach dem Doppelmonochromator beträgt  $\frac{\Delta E}{E} = 1 \cdot 10^{-4}$ . Die Beugungsebenen der Monochromatorkristalle sind



**Abbildung 4-5** Prinzipdarstellung des Strahlengangs und Versuchsaufbaus bei den Experimenten an der CEMO-Beamline für die Wellenlänge  $\lambda = 1,0003\text{\AA}$

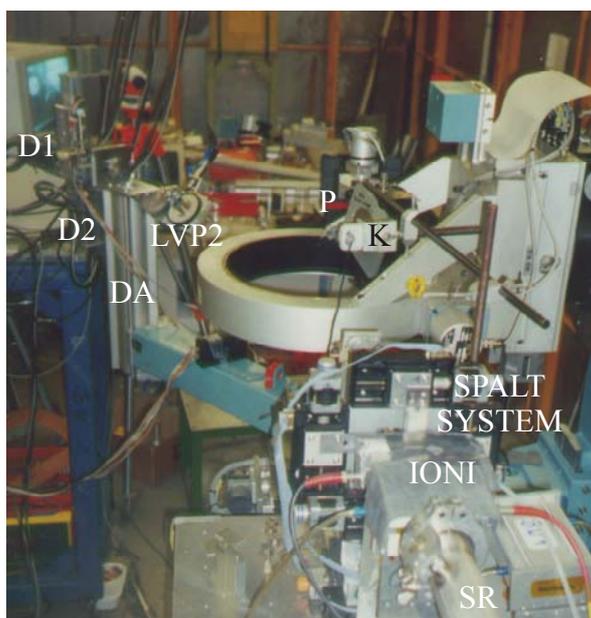
vertikal zur Ebene des Synchrotrons angeordnet, und die beiden wassergekühlten Siliziumkristalle werden in symmetrischer (n, -n) Geometrie verwendet. Aufgrund dieser Geometrie und der strahlwegseitigen vertikalen Divergenz ist die Einfallrichtung an verschiedenen Stellen auf dem Kristall leicht unterschiedlich. Wegen der dispersionsfreien Doppelkristallanordnung (n, -n) der Monochromatorkristalle gibt es einen einfallswinkelabhängigen Wellenlängenbereich, der transmittiert wird. Bei dieser Einstellung werden neben der gewünschten Wellenlänge auch höhere Harmonische, d.h. höhere Beugungsordnungen des Monochromatorreflexes, durchgelassen. Das bedeutet für den Silizium (1 1 1) Reflex, dass hinter dem Monochromator auch die Wellenlängen  $\frac{\lambda}{3}, \frac{\lambda}{4} \dots$  vorgefunden werden. Dieses wird vermieden, indem auf der Flanke der Reflexionskurve des Monochromatorreflexes gearbeitet wird, da die Halbwertsbreite mit höherer Energie (kleinerer Wellenlänge) abnimmt. Bei leichter Verkippung der Kristalle gegenüber dem Reflexionsmaximum nimmt somit das integrale Reflexionsvermögen  $R(\theta_B) \cdot R(\theta_B + \Delta\theta)$  für die höheren Harmonischen ab.

Auf den Einsatz des Spiegels wurde verzichtet, da fokussierende optische Einrichtungen generell die zwei Polarisationskomponenten mischen [MATERLIK 1984].

Der polychromatische Strahl vom Krümmungsmagneten fällt direkt auf den ersten Monochromatorkristall, der dadurch stark erwärmt wird. Der Veränderung des Kristalls und der daraus resultierenden Verschiebung des Braggreflexes wird mit Hilfe eines Monochromatorstabilisators Rechnung getragen. Mit Hilfe dieser Stabilisatoreinrichtung wurde der Monochromatorkristall durch Piezostellglieder so auf der Flanke der Reflexionskurve gehalten, dass die Intensität 80 % der Maximalintensität des Reflexes entsprach. Neben dieser auf thermische Effekte zurückzuführenden Drift der Strahlung gab es ein weiteres Problem, nämlich eine Drift der Strahlage und damit auch der Wellenlänge. Gründe dafür können neben der durch den Abfall des Ringstroms

abnehmenden thermischen Last auf dem Monochromator auch geringfügige Änderungen der Strahlposition im Speicherring sein. Da der Monochromatortank in der Experimentierhütte steht, kam es bei Justagearbeiten oder Fotoaufnahmen stets zu einer Unterbrechung des Röntgenstrahls im Monochromatortank und damit zu einer Abkühlung der Kristalle. So ist außer bei Filmaufnahmen, bei denen das aufgrund eines fehlenden Shutters in der Experimentierhütte nicht möglich war, immer erst eine thermische Stabilisierung des Monochromators abgewartet worden.

An der Beamline CEMO steht ein RISØ - Diffraktometer mit Eulerwiege zur Verfügung. Die beiden Kreise  $\theta$  und  $2\theta$  sind so angeordnet, dass die Beugungsebene senkrecht zu der Ebene des Speicherrings (parallel zur Monochromatorbeugungsebene) liegt. Allerdings kann mit Hilfe anderer Kreise auch in der von uns genutzten Ebene parallel zum Speicherring gearbeitet werden. So waren alle für unsere Experimente notwendigen Freiheitsgrade vorhanden.



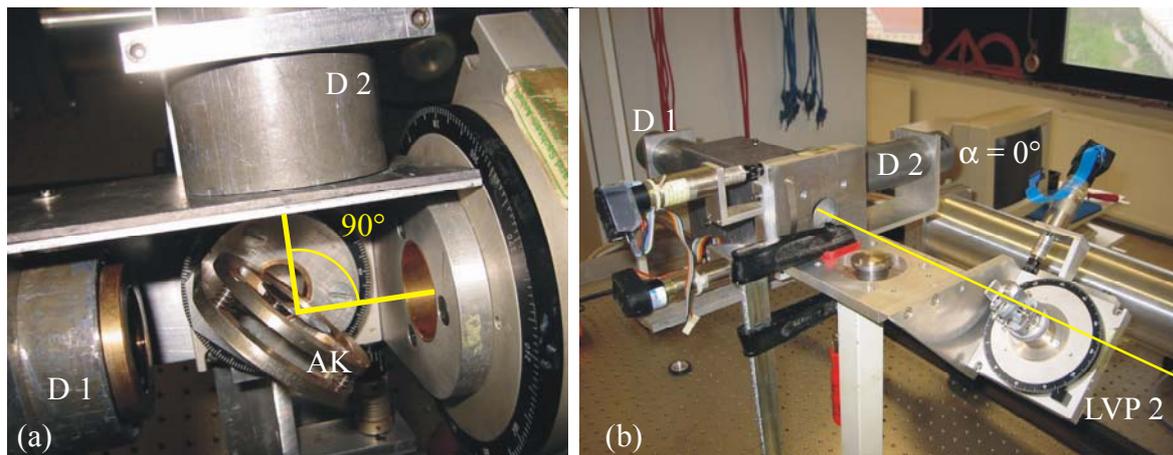
**Abbildung 4-6** Experimentelle Anordnung an der Beamline CEMO mit dem vom Doppelmonochromator kommenden Strahlrohr (SR), der Ionisationskammer (IONI), dem Spaltsystem, der Probe (P) im Zentrum der Eulerwiege und der Kamera (K). Links im Bild ist der Analysator (A) auf dem Detektorarm (DA) mit den Detektoren (D 1, D 2) und dem zweiten Lambdaviertelplättchen (LVP 2) zu sehen.

Der  $\chi$ -Kreis der Eulerwiege diente in unseren Experimenten zur Einstellung des Braggwinkels  $\theta_B$ . Mit Hilfe des  $\phi$ -Kreises konnte der Probenkristall um die Normale der Beugungsebene gedreht werden. Dieses ermöglicht den sogenannten Renninger ( $\psi$ ) - Scan. Zur systematischen Untersuchung ist diese Möglichkeit der Kristallpositionierung unverzichtbar. Die Feinjustage der Probenkristalle erfolgte dabei am Goniometerkopf.

Zur Eichung der Kreise wurde zunächst die Zentrierung der Achsen durch Minimierung der Positionsverschiebungen einer Spitze anstelle des Probenkristalls bei  $180^\circ$ -Rotationen mit Hilfe eines Theodoliten exakt eingestellt.

Die zu untersuchenden H-Reflexe wurden mit Hilfe eines nah (ca. 10 cm) an den Kristall in Richtung des doppelten Braggwinkels positionierten Detektors grob justiert. Dabei wird die Reflexsuche durch die (1 0 0) Spaltflächen an den LiF-Probenkristallen erleichtert.

Zwischen den Austrittsspalten des



**Abbildung 4-7 (a)** Anordnung des Analysatorkristalls (AK) im Analysator und **(b)** Anordnung des zweiten Phasenschiebers (LVP 2) auf dem Detektorarm vor dem Analysator

Monochromatortanks und dem Diffraktometer liegt eine Strecke von ca. 2 m. Der Strahl wird zunächst in einem mit Helium gefüllten Rohr geführt und wird nach seinem Austritt durch ein Spaltsystem mit vier unabhängig voneinander verschiebbaren Spaltbacken auf den gewünschten Strahlquerschnitt beschränkt. Zwischen dem Spaltsystem und der Eulerwiege ist Platz für weitere optische Aufbauten vorhanden. An dieser Stelle kann ein Phasenschieberkristall in den Strahlengang positioniert werden. Bei Experimenten mit linear polarisierter Strahlung wirkt dieser Kristall in der sogenannten BraggOFFStellung als Absorber.

Danach werden die Strahlung am Probenkristall erneut reflektiert. Der Primärreflex (H) liegt auch bei Mehrstrahlfalluntersuchungen immer in der Ebene parallel zu der Ebene des SynchrotronSpeicherrings.

Der Abstand zwischen Probenkristall im Zentrum des Diffraktometers und dem Detektor auf dem  $2\theta$ - Arm beträgt 67 cm. Dadurch wird auch an dieser Position der Aufbau röntgenoptischer Einrichtungen ermöglicht. An dieser Stelle ist ein weiteres Lambdaviertelplättchen in den Strahlengang positioniert worden, das als Phasenschieber oder ausschließlich als Absorber eingesetzt werden kann.

Um den Polarisationszustand der Strahlung festzustellen, ist auf dem Detektorarm die in Absatz 4.2.1 beschriebene Analysatoreinrichtung montiert. In Abbildung 4-7 (a) ist der Strahlengang im Analysator demonstriert. Der Strahl fällt in der Abbildung von rechts kommend auf den Analysatorkristall und wird durch Braggreflexion um  $90^\circ$  in den Detektor (D 2) abgelenkt.

Die Abbildung 4-7 (b) zeigt die Anordnung des Lambdaviertelplättchens mit einer um  $45^\circ$  geneigten Beugungsebene vor der Analysatoranordnung auf dem Detektorarm.

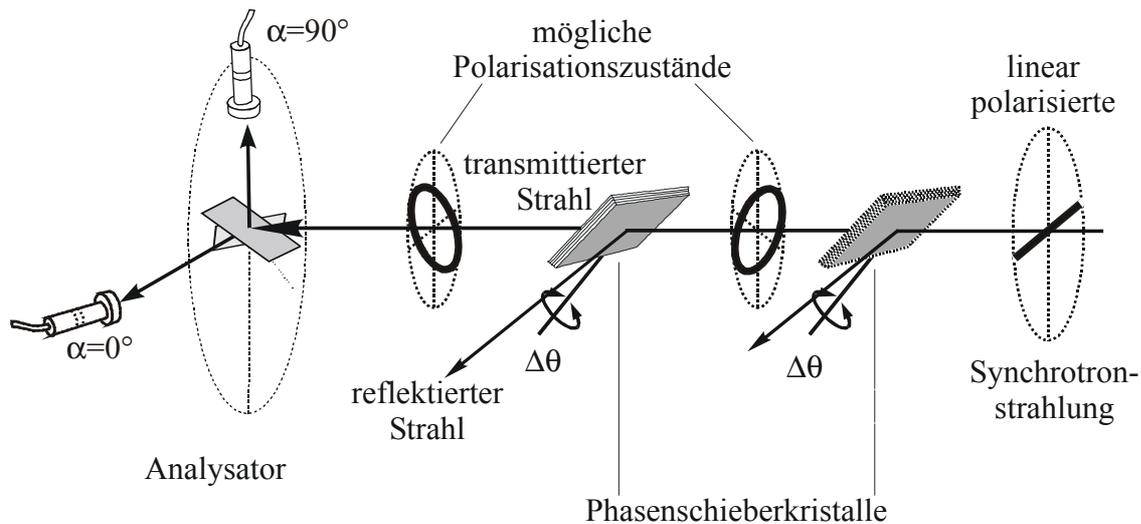
### 4.5.2. Einstellung der Lambdaviertelplättchen

In dieser Arbeit wurden zwei Lambdaviertelplättchen verwendet. Gemäß den Ausführungen in Absatz 4.2.2 wurden zwei Lithiumfluoridkristalle von 1100  $\mu\text{m}$  Dicke verwendet. Bei einer Wellenlänge von 1,0003  $\text{\AA}$  wurde der (2 0 0) Reflex des Phasenschiebers eingestellt. Dabei wurde die Beugungsebene um  $45^\circ$  gegenüber dem Synchrotronspeicherring geneigt. So ist eine gleichstarke Anregung der beiden Polarisationskomponenten für diese Beugung gewährleistet.

Die Einstellung der Phasenplättchen wurde so gewählt, dass die maximal mögliche Phasendifferenz von  $\frac{\pi}{2}$  zwischen den beiden senkrecht zueinander polarisierten Komponenten erreicht wurde. Die Kontrolle dabei erfolgte über die Transmissionskurven der beiden Wellen, die über den Analysator für  $\alpha = 0^\circ$  und  $\alpha = 90^\circ$  gemessen wurden.

Die Bezeichnung der  $\pi$ - und  $\sigma$ -Komponente einer Beugung bezieht sich immer auf die Beugungsebene. Da die Beugungsebenen von Probenkristall und Phasenschieber um  $45^\circ$  gegeneinander gekippt sind, soll an dieser Stelle darauf hingewiesen werden, dass sich in dieser Arbeit  $\pi$  und  $\sigma$  immer auf die Beugungsebene des Probenkristalls beziehen. Für die Polarisationskomponenten in Bezug auf die Beugungsebene am Phasenschieber wird  $\pi_{\text{PS}}$  und  $\sigma_{\text{PS}}$  verwendet.

Die Transmissionskurven der beiden Komponenten werden über die Stellung maximaler Intensität des am Analysatorkristall reflektierten Strahls gemessen. Wegen der Linearpolarisation der einfallenden Strahlung trägt die  $\pi$ -Komponente ohne Einfluss des Phasenschiebers fast die gesamte Intensität. Im Bereich der Rockingkurve des Phasenschieberkristalls ändern sich die Verhältnisse. Die Intensität der  $\pi$ -Kurve fällt ab, während die Intensität der  $\sigma$ -Komponente ansteigt. Der Intensitätsverlauf dieser beiden einzeln gemessenen Komponenten lässt Rückschlüsse über die Änderung der Phasenverschiebung gegeneinander zu. Bei Annäherung an den Bereich der Bragginterferenztotalreflexion vergrößert sich die relative Phasendifferenz zwischen den beiden Wellenfeldern. Dadurch ändert sich im Bild der Polarisationsellipse das Verhältnis der beiden Halbachsen zueinander. Eine Phasenverschiebung von  $90^\circ$  wird erreicht, wenn für alle Azimutwinkel die Amplituden der Komponenten und damit die Intensitäten gleich groß sind. Schneiden sich also die beiden Transmissionskurven, so ist deren Amplitude gleich groß und die Polarisation der transmittierten Strahlung sollte nahezu zirkular sein. Dieses gilt natürlich nur für vollständig polarisierte Strahlung. Für eine Phasenverschiebung von  $180^\circ$  muss die  $\sigma$ -Komponente größer als die  $\pi$ -Komponente sein, da die Polarisationsebene der Strahlung in diesem Fall um  $90^\circ$  gedreht wird. Für die bei einem Azimutwinkel von  $\alpha = 90^\circ$  gemessene Kurve ( $\pi$ -Komponente) tritt also ein Intensitätsminimum auf, während bei  $\alpha = 0^\circ$  ein Maximum auftritt. Nähert man sich dem Braggwinkel weiter an, sollte es zu einer weiteren Vergrößerung der Phasenverschiebung



**Abbildung 4-8** schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus zur Einstellung der Lambdaviertelpositionen der Phasenschieber

kommen, die man aufgrund des starken Anstiegs der Phasenverschiebung und der Winkeldivergenz der einfallenden Strahlung aber nicht experimentell nachweisen kann.

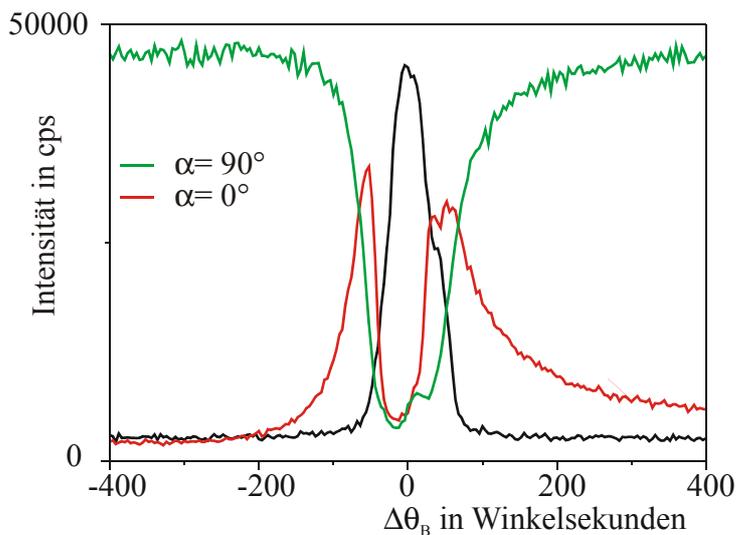
An den Schnittpunkten der beiden gemessenen Transmissionskurven kann man zirkulare Polarisation der Strahlung erwarten.

Im Folgenden sollen kurz die Ergebnisse der Experimente zur Einstellung der Lambdaviertelplättchen dargestellt werden, die bei der Untersuchung der Probenkristalle die Verwendung zirkular polarisierter Strahlung und die Bestimmung des vollständigen Polarisationszustands ermöglichten. Die Grundlagen der Vorgänge in den Phasenschiebern wurden bereits von LEITENBERGER (1997) beschrieben. In der Abbildung 4-8 ist der Versuchsaufbau zur Justierung der Lambdaviertelplättchen schematisch dargestellt.

Die hier vorgestellten Experimente wurden bei einer Wellenlänge von  $1,0003 \text{ \AA}$  mit dem entsprechenden Analysatorkristall durchgeführt.

Wie bereits beschrieben, wird die Beugungsebene des Phasenschieberkristalls  $45^\circ$  gegen die Polarisationssebene des einfallenden Strahls gekippt, um eine gleich starke Anregung der  $\pi_{\text{PS}}$ - und  $\sigma_{\text{PS}}$ -Komponenten zu erreichen. Die Analysatoreinrichtung wird in den transmittierten Strahl gestellt. Zur Einstellung der Position, in der der Phasenschieber zirkular polarisierte Strahlung erzeugt, werden die Intensitäten der senkrechten und parallelen Komponenten<sup>6</sup> vermessen. Dazu wird der Analysatorkristall bei den Winkeleinstellungen  $\alpha = 0^\circ$  bzw.  $90^\circ$  auf das Maximum der gebeugten Intensität gestellt

<sup>6</sup> bezogen auf die Ebene des Synchrotron-speicherrings



**Abbildung 4-9** Darstellung der Intensität der beiden senkrecht zueinander polarisierten Komponenten des vom Phasenschieberkristall transmittierten Strahls gemessen über den Analysatorkristall in Abhängigkeit von der Abweichung vom Braggwinkel des Phasenschiebers

schwingt. Die Intensität dieser Komponente ist abseits des Einflussbereichs des Phasenschiebers deutlich größer als die der senkrecht dazu polarisierten Komponente. Die schwarze Kurve zeigt den simultan aufgenommenen H-Strahl. Die Intensität dieser Kurve unterliegt einer anderen Skala als der auf der Ordinate angegebenen.

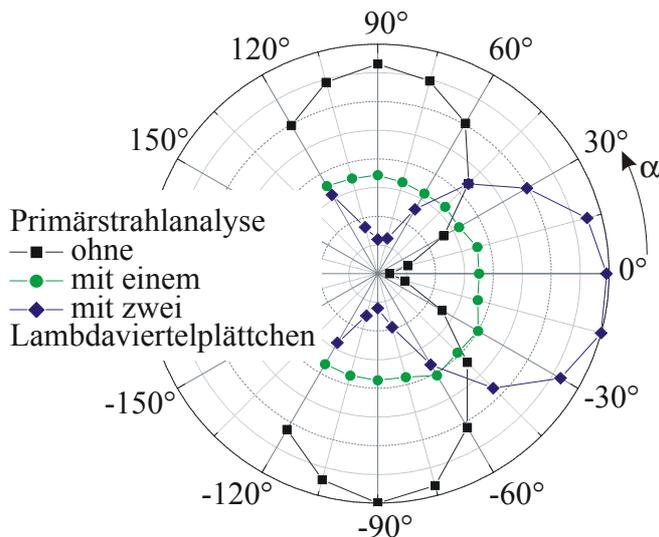
Im Bereich der Reflexion am Phasenschieber ändert sich die Intensität der beiden Komponenten des transmittierten Strahls. Mit der Annäherung an die Braggwinkelposition erhöht sich die Intensität der senkrechten ( $\alpha = 0^\circ$ ) Komponente, während sich die Intensität der anderen Komponente verringert.

Die Maxima der roten Kurve ( $\alpha = 0^\circ$ ) repräsentieren Winkelpositionen, an denen der transmittierte Strahl linear polarisiert ist. Die experimentell bestimmten Winkelpositionen der Maxima dieser Kurve entsprechen einer Phasenverschiebung zwischen den beiden Komponenten von  $+\pi$  (rechts, anomal starke Absorption) bzw.  $-\pi$  (links, anomal schwache Absorption), so dass die Polarisationssebene um  $90^\circ$  gegen die des einfallenden Strahls gedreht ist. Die Positionen, an denen die beiden Kurven in der Abbildung 4-9 gleich große Intensitäten aufweisen, zeigen für den transmittierten Strahl eine Phasenverschiebung von  $+\pi/2$  bzw.  $-\pi/2$  zwischen den beiden Komponenten an. Zirkular polarisierte Strahlung wird für den transmittierten Strahl an den Schnittpunkten der roten und der grünen Kurve erzeugt.

und der vom Phasenschieber transmittierte Strahl in Abhängigkeit von der Abweichung vom Braggwinkel vermessen.

Die Abbildung 4-9 zeigt eine solche Messung. Auf der rechten Seite in diesem Bild liegt der Bereich der anomal starken Absorption und auf der linken Seite der der anomal schwachen Absorption. Die grüne Kurve ist bei einem Azimutwinkel des Analysators von  $90^\circ$  und die rote bei  $\alpha = 0^\circ$  gemessen worden. Die grüne Kurve zeigt die Komponente der einfallenden linear polarisierten Strahlung, in der der Polarisationsvektor

Eine Fehlerquelle für die Einstellung der Lambdaviertelpositionen entsteht bei diesem Verfahren allerdings durch die feste Justage des Analysatorkristalls auf das Intensitätsmaximum, die die unterschiedliche vertikale und horizontale Divergenz der Strahlung nicht berücksichtigt. Die Winkelpositionen, die aus den Intensitätsmaxima bestimmt wurden, können deshalb um bis zu 10 Winkelsekunden von denen der integrierten Intensitäten abweichen.



**Abbildung 4-10** Polarisationsanalyse des einfallenden Strahls ohne und mit Phasenschiebern

auch mit einem bzw. zwei Lambdaviertelplättchen gezeigt. Es wurden in einem Winkelintervall  $-120^\circ \leq \alpha \leq 120^\circ$  für  $\Delta\alpha = 15^\circ$  die integralen Intensitäten des (5 5 3) Siliziumoberflächenreflexes bestimmt. In der Darstellung sind die Kurven normiert, um die unterschiedlichen Absorptionen unberücksichtigt zu lassen.

Die schwarze Kurve mit den Quadraten gibt den Polarisationszustand des einfallenden, von dem Doppelmonochromator monochromatisierten Strahls wieder. Der Polarisationsvektor schwingt vornehmlich in der horizontalen Ebene. Der Grad der linearen Polarisation wurde aus den Messungen zu 90,2 % bestimmt.

Die grüne Kurve, bei der die gefüllten Kreise die Messergebnisse darstellen, wurde unter Verwendung eines Phasenschieberkristalls in Lambdaviertelposition aufgenommen. Es ist nicht möglich, eine ausgezeichnete Richtung für die Schwingungsebene des Polarisationsvektors zu erkennen. Der Strahl ist zirkular polarisiert. Der aus den Daten bestimmte noch von der Eingangspolarisation vorhandene Anteil an Linearpolarisation beträgt nur 3 %.

Daher ist es notwendig, den Polarisationszustand der Strahlung nach Einstellung der Phasenschieber nochmals zu untersuchen. Dazu genügt es meist schon, die integralen Intensitäten des Analysatorreflexes bei den Winkelseinstellungen  $\alpha = 0^\circ$  und  $\alpha = 90^\circ$  zu bestimmen. Sind diese beiden Intensitäten gleich groß, so ist die Strahlung in der beschriebenen Anordnung zirkular polarisiert.

In der Abbildung 4-10 ist die Polarisationsanalyse des Primärstrahls sowohl ohne als

Die blaue Kurve mit den Rhomben zeigt die Intensitätsverteilung bei der Verwendung von zwei Phasenschiebern. Wie aus der Abbildung 4-10 zu erkennen ist, hat sich die durch die Lambdaviertelplättchen hinzugefügte Phasendifferenz addiert. Die effektive Phasenverschiebung beträgt in diesem Fall  $180^\circ$ . Die Schwingungsebene des Polarisationsvektors hat sich um  $90^\circ$  gedreht. Der aus den Messwerten ermittelte lineare Polarisationsgrad beträgt 73,5 %.

Die Zahlenwerte lassen sich unter anderem mit der unterschiedlichen horizontalen und vertikalen Divergenz der Strahlung erklären. Zusätzlich ist zu beachten, dass bei einer Neigung der Beugungsebene um  $45^\circ$  die Komponenten zwar gleich stark angeregt werden, dass aber dabei die stärkere Absorption der  $\pi_{PS}$ -Komponente nicht berücksichtigt ist. Um diesem Einfluss gerecht zu werden, hätte die Beugungsebene in Abhängigkeit vom Braggwinkel unter einem von  $45^\circ$  verschiedenen Neigungswinkel gewählt werden müssen. Für die in dieser Arbeit vorgestellten Experimente ist die mit den Lambdaviertelplättchen erreichte Phasenverschiebung aber ausreichend.

Für die Analysen der vom Probenkristall reflektierten Strahlen wurde das zweite Lambdaviertelplättchen, dessen Halterung fest mit dem Detektorarm verbunden war, mit der Analysatoranordnung in dem Strahlengang dieses Strahls positioniert. Die Einstellung der Lambdaviertelposition erfolgte allerdings ohne einen Probenkristall im Primärstrahl. Aufgrund dessen kann es bei abweichenden Einstrahlbedingungen zu einer von  $\frac{\pi}{2}$  abweichenden Phasenverschiebung zwischen den beiden senkrecht zueinander polarisierten Komponenten kommen. Die Einstellung des zweiten Phasenschiebers im reflektierten Strahl ist nicht möglich, da der Polarisationszustand dieses Strahls nicht bekannt ist.

### 4.5.3. Justage der Probenkristalle

Bei den Probenkristallen handelte es sich um Lithiumfluoridkristalle. Lithiumfluorid kristallisiert in der Natriumchloridstruktur, d.h. beide Elementuntergitter sind kubisch flächenzentriert und gegeneinander um eine halbe Raumdiagonale verschoben. Die Gitterkonstante beträgt  $4,025 \text{ \AA}$ . Die Kristalle lassen sich bei Zimmertemperatur plastisch deformieren und ermöglichen so eine leichte Änderung der Defektdichte im Kristall.

Die untersuchten Kristalle sind durch  $(1\ 0\ 0)$  Spaltflächen begrenzt. Um sowohl mit  $(n\ 0\ 0)$  als auch  $(n\ n\ 0)$  artigen Reflexen<sup>7</sup> arbeiten zu können, wurden die Kristalle so im Goniometerkopf befestigt, dass bei Drehung um  $45^\circ$  die eine bzw. die andere Einstellung erreicht werden konnte. Die Kristalle wurden in Lauegeometrie untersucht.

---

<sup>7</sup> n ist die Ordnung der Reflexe. Für die vorgestellten Experimente ist n entweder 2 oder 4.

Zur Justage der Mehrstrahlfälle ist es notwendig, einen  $\psi$ -Scan (Renningerscan), d.h. einen Scan um die Netzebenennormale der Primärreflexion, durchzuführen. Um diesen Scan mit einem einzelnen Kreis durchführen zu können, muss die Netzebenennormale der reflektierenden Netzebene mit der Drehachse übereinstimmen. Die Justage des Kristalls erfolgt innerhalb dieses Kreises. Da die Konstruktion des Diffraktometers eine solche Drehung nur mittels des Kreises zuließ, auf dem der Kristall im Goniometerkopf befestigt wurde, musste die Justage von Hand am Goniometerkopf vorgenommen werden.

## 5. Diskussion der experimentellen Ergebnisse

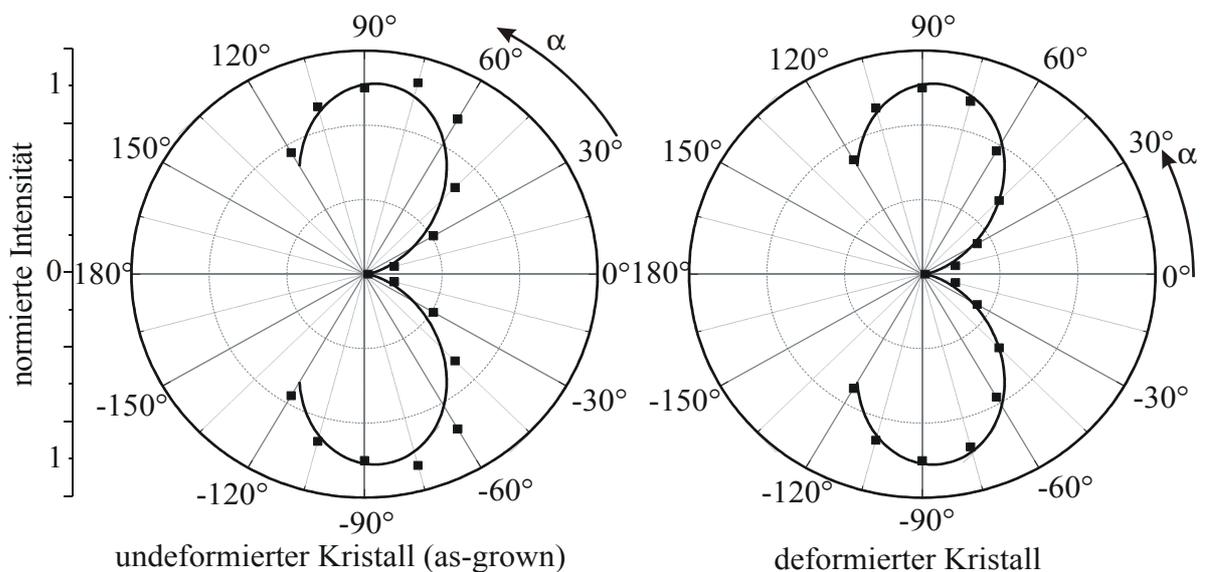
In diesem Abschnitt werden zunächst die experimentellen Ergebnisse zur Untersuchung einer Depolarisation in Abhängigkeit von Kristallstörungen vorgestellt.

Danach werden die experimentellen Ergebnisse der Polarisationsuntersuchungen in Abhängigkeit von der Anregung eines Mehrstrahlfalls gezeigt.

### 5.1. Polarisationsuntersuchungen im Zweistrahlfall

Wie in der Aufgabenstellung beschrieben, soll eine Depolarisation des reflektierten Strahls aufgrund der Imperfektionen eines Kristalls nachgewiesen werden. Dazu wurde der Versuchsaufbau ohne zusätzliche Phasenschieber verwendet, so dass nur die Verringerung des Linearpolarisationsgrads gezeigt wird.

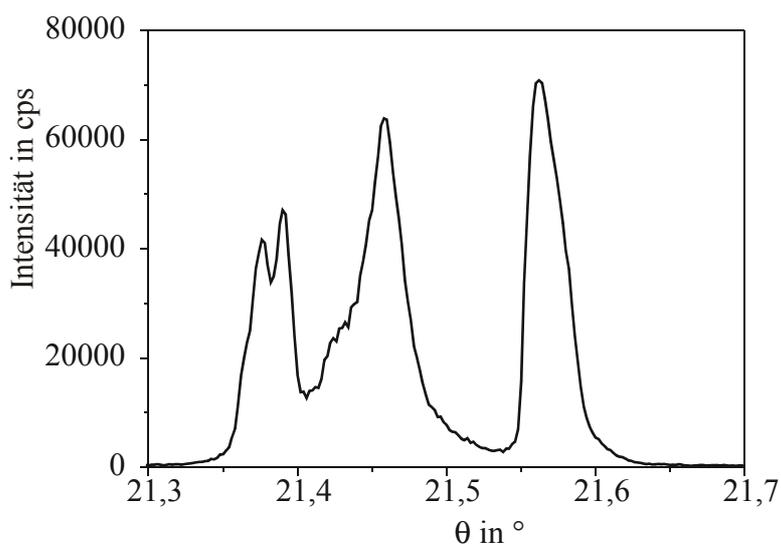
Es werden Experimente an zwei Lithiumfluoridkristallen vorgestellt, die durch Spaltung aus einem Kristall entstanden sind. Nach der Spaltung wurde die eine Probe ohne weitere Behandlung verwendet, also im originalen Zustand nach der Züchtung (as-grown). Der zweite Kristall wurde zunächst einer Deformation mit dem in Absatz 4.4 beschriebenen Deformationsgerät unterzogen und in mehreren Schritten auf den kleinsten vorhandenen Radius gekrümmt und anschließend wieder gerade gebogen.



**Abbildung 5-1** Vergleich der mit dem Analysator unter verschiedenen Winkeln  $\alpha$  integral gemessenen Intensitäten bei der Untersuchung eines undeformierten und eines stark deformierten Kristalls

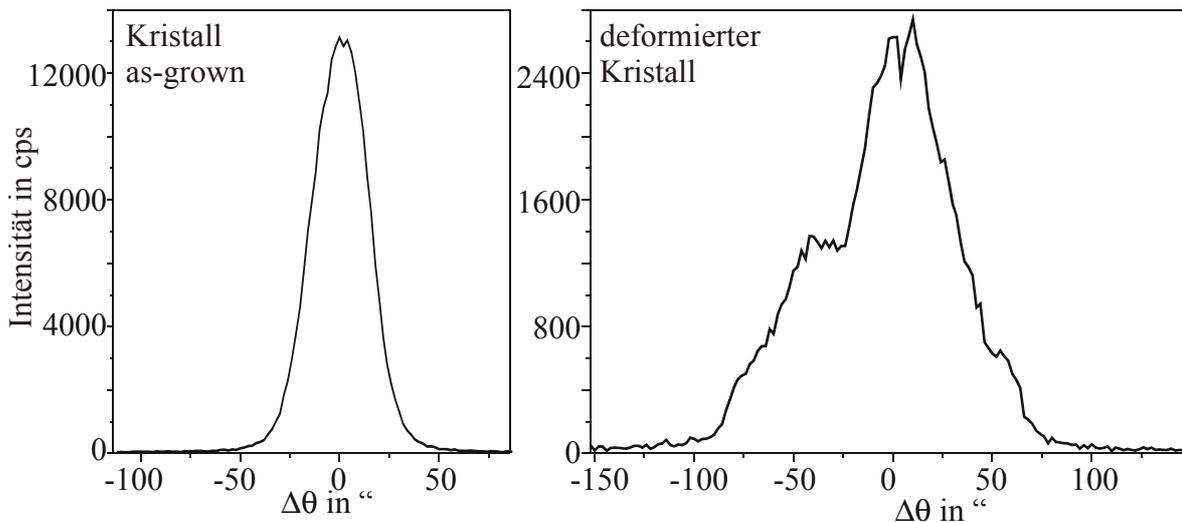
In beiden Kristallen wurde jeweils ein (2 0 0) Reflex in Lauegeometrie angeregt und der reflektierte Strahl mit Hilfe des Analysatoraufbaus bezüglich seines Polarisationszustands charakterisiert. In Abbildung 5-1 sind die Polarisationsanalysen verglichen. Der Polarisationsgrad beträgt in beiden Fällen ca. 96% und ist unabhängig von der veränderten inneren Struktur des Kristalls. Zu beachten ist allerdings, dass im deformierten Kristall nicht nur ein Bereich angeregt wird, sondern mehrere gegeneinander verschwenkte Bereiche. Durch die Deformation des Kristalls ist der Winkelbereich, in dem dieser Kristall bei der angebotenen Wellenlänge beugend wirken kann, deutlich verbreitert, da die Kristallite bei der Drehung des Mosaikkristalls nacheinander die Beugungsposition erreichen. Bei der Untersuchung des Polarisationszustands der reflektierten Strahlung ist nur der reflektierte Strahl von einem dieser Bereiche betrachtet worden. In diesem Fall ist das der Strahl, der bei einem Winkel von  $21,57^\circ$  in Abbildung 5-2 reflektiert wird. Die anderen Bereiche sind durch ihre veränderte Winkelposition bei den Untersuchungen deutlich getrennt wahrnehmbar.

Die Winkelverstellung erfolgt um eine Drehachse senkrecht zu der Beugungsebene. Die Beugungsebene am Analysatorkristall ist bei einem Azimutwinkel  $\alpha$  von  $0^\circ$  parallel zu der Beugungsebene am Probenkristall. Bei  $\alpha = \pm 90^\circ$  stehen beide Beugungsebenen senkrecht aufeinander. Die Abbildung 5-3 zeigt die Rockingkurven des Analysatorreflexes für die beiden untersuchten Kristalle bei einem Azimutwinkel  $\alpha = -90^\circ$ . Dabei können die auf den Ordinaten angegebenen Intensitäten nicht direkt miteinander verglichen werden, da die Kurven unter verschiedenen experimentellen Bedingungen (Intensität des Synchrotronstrahls, unterschiedliche Absorber) gemessen wurden. Im rechten Teil der Abbildung ist die Kurve für den deformierten Kristall dargestellt. Es ist



**Abbildung 5-2** Reflexionskurve des (2 0 0) Reflexes des deformierten Kristalls bei einer Wellenlänge von  $1,4778 \text{ \AA}$

zu erkennen, dass nicht nur in der Beugungsebene verschiedene Kristallite vom einfallenden Strahl getroffen werden. Durch die vertikale Ausdehnung der einfallenden Strahlung werden auch übereinander liegende Kristallbereiche getroffen. Die Aufspaltung der Richtung der gebeugten Wellen ist nur bei nicht parallelen Beugungsebe-



**Abbildung 5-3** Rockingkurven des Analysatorreflexes bei einem Azimutwinkel  $\alpha = -90^\circ$  für den vom undeformierten und deformierten Kristall an der (2 0 0) Netzebene bei einer Wellenlänge von  $1,4778\text{\AA}$  reflektierten Strahl – die unterschiedlichen Intensitäten sind durch verschiedene Filter und den Abfall der Intensität der vom Speicherring kommenden Strahlung bedingt

nen zu erkennen. Sind die Beugungsebenen an Proben- und Analysatorkristall parallel zueinander, ist nur ein Peak in der Rockingkurve des Analysators zu erkennen. Die Intensität der reflektierten Strahlen von den übereinanderliegenden Mosaikblöcken wird dabei im gleichen Winkelbereich gemessen. Für die Polarisationsanalysen ist es wichtig, unabhängig vom Azimutwinkel  $\alpha$  immer über die gesamte gebeugte Intensität zu integrieren. Die Winkelbereiche des Analysatorkristalls wurden dementsprechend bei den Untersuchungen angepasst.

Dieses Beispiel ist exemplarisch für die Untersuchungen, die im Zweistrahlfall durchgeführt wurden, bei denen die Kristalle einerseits as-grown verwendet wurden und andererseits mittels der in Abschnitt 4.4 beschriebenen Deformationseinrichtung gebogen wurden. Bei den Messungen konnte keine Abhängigkeit des Polarisationszustands des reflektierten Strahls von der Deformation der Kristalle gefunden werden.

Dieses Verhalten lässt sich mit Hilfe des Intensitätstransfers beschreiben. Die Polarisationskomponenten der in einem Kristallit reflektierten Strahlung werden entkoppelt betrachtet. Gemäß der Theorie wird dabei die  $\pi$ -Komponente aufgrund des von 1 verschiedenen Polarisationsfaktors im Gegensatz zur  $\sigma$ -Komponente geschwächt. Dieser Vorgang findet in allen Mosaikblöcken, in denen gleichzeitig aufgrund der Divergenz der Strahlung und der Verschwenkung der Blöcke gegeneinander der Reflex angeregt wird, getrennt voneinander statt. Daher kann die Ausbreitungsrichtung der

reflektierten Strahlen variieren. Die von den verschiedenen Mosaikblöcken gestreuten Strahlen besitzen wegen der unterschiedlichen im Kristall zurückgelegten Wege keine Beziehung mehr zueinander. Folglich können sie deshalb nicht mehr miteinander interferieren. Die reflektierte Strahlung ist eine Überlagerung der in den verschiedenen Kristalliten gebeugten Wellen, die alle für sich polarisiert sind. Die Intensitäten der Polarisationskomponenten dieser Einzelstrahlen werden summiert. Bei der Untersuchung des Polarisationszustands des H-Strahls wird über die Intensität in Abhängigkeit vom Azimutwinkel integriert. Der Beugungsvorgang lässt sich mit Hilfe von Intensitäts-  
transfergleichungen beschreiben. Dabei wird allerdings, anders als im Absatz 3.4.2 beschrieben, die Intensität nicht über die verschiedenen Reflexe in die Richtung des H-Strahls transferiert, sondern durch die Reflexion in verschiedenen Mosaikblöcken. Bei diesen Betrachtungen darf die Divergenz der Strahlung nicht vernachlässigt werden, um eine Anregung in den zueinander verschwenkten Bereichen zu ermöglichen.

## 5.2. Untersuchungen bei angeregten Mehrstrahlfällen

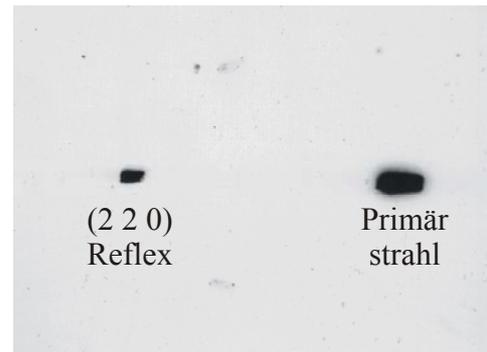
Wie im vorherigen Absatz beschrieben, hatte die Deformation der Kristalle keinen Einfluss auf die Änderung des Polarisationszustands des reflektierten Strahls. Der Einfluss der Deformation beschränkte sich in den beschriebenen Messungen auf eine deutliche Verbreiterung der Reflexionskurve, die zu ausgedehnten Integrationsintervallen führte. Aus diesem Grunde wurden für die weiteren Untersuchungen im Mehrstrahlfall möglichst undeformierte Kristalle verwendet.

Zunächst wurde nur mit dem Analysator gearbeitet, um festzustellen, ob eine Änderung des Polarisationszustands stattfindet. In weiteren Versuchen wurde dann auch mit Phasenschiebern gearbeitet, die eine Anregung der Reflexion mit zirkular polarisierter Strahlung erlaubten bzw. eine vollständige Polarisationsanalyse zuließen.

### 5.2.1. Anregung mit linear polarisierter Strahlung

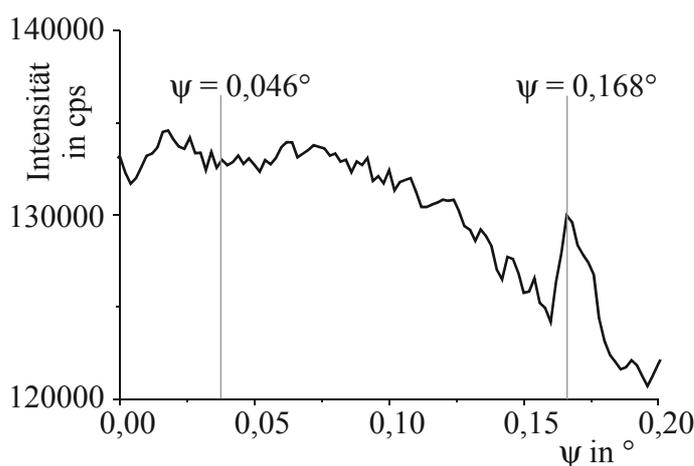
Bei den in diesem Abschnitt vorgestellten experimentellen Ergebnissen wurde die Linearpolarisation der einfallenden Strahlung erst durch Ausnutzung einer doppelten  $90^\circ$  Ablenkung am Doppelmonochromator gewonnen, da der vom Synchrotron kommende Strahl nicht ausreichend polarisiert war. Dazu wurden die beiden Siliziummonochromatorkristalle mit ihren (1 1 1) Oberflächen so eingestellt, dass der (3 3 3) Reflex in beiden angeregt wurde. Mit Hilfe des Braggwinkels von  $44,987^\circ$  wurde eine Wellenlänge von  $\lambda = 1,4778 \text{ \AA}$  für die weiteren Messungen selektiert. Bei der Nutzung des (3 3 3) Reflexes ist es schwierig, die höheren Harmonischen zu unterdrücken. Der Polarisationsgrad, der durch die doppelte rechtwinklige Ablenkung der Strahlung erreicht wurde, betrug für die angegebene Wellenlänge 96 %.

Mit dieser Strahlung wurde der (2 2 0) Reflex in dem Lithiumfluoridkristall in symmetrischer Lauegeometrie angeregt. Der Braggwinkel für diese Reflexion beträgt  $31,281^\circ$ . In der Abbildung 5-4 sind der reflektierte und der transmittierte Strahl gezeigt. Die Beugungsebene für diesen Versuch war so gewählt, dass der Polarisationsvektor der einfallenden Strahlung in dieser Ebene lag. Zur Einstellung des Zweistrahlfalls und des Mehrstrahlfalls wurde der Kristall um die Netzebenennormale der primär reflektierenden Netzebene in einem  $\psi$ -Scan gedreht. In der Abbildung 5-5 ist die Intensität des reflektierten Strahls in Abhängigkeit von der Winkelposition  $\psi$  gezeigt. Die Abbildung 5-4



**Abbildung 5-4** Polaroidaufnahme des transmittierten und des reflektierten Strahls bei Anregung des (2 2 0) Reflexes, aufgenommen in einem Abstand von ca. 4 cm vom Probenkristall

korrespondiert mit der Winkelposition  $\psi = 0,046^\circ$ . Im Verlauf dieses Renningerscans zeigt sich eine deutliche Abweichung vom Intensitätsverlauf bei  $\psi = 0,168^\circ$ . Bei dieser Winkelposition werden neben dem (2 2 0) Reflex noch weitere Reflexionen angeregt, die über die bereits in der Einleitung beschriebene Umweganregung die Intensität in Richtung des ursprünglich angeregten Reflexes erhöhen. Die Abbildung 5-6 zeigt die Polaroidaufnahme bei dieser Winkelposition. Neben den bereits aus Abbildung 5-4 bekannten Spots sind vier weitere Reflexe zu erkennen. Allerdings sind die beiden



**Abbildung 5-5** Intensität des reflektierten Strahls in Abhängigkeit von der Position des  $\psi$ -Winkels der Rotation um die Netzebenennormale der beugenden (2 2 0) Netzebene

kleineren durch Reflexion einer höheren Harmonischen, d.h. durch die Wellenlänge  $\lambda = \frac{3}{5} \lambda_0 = 0,8867 \text{ \AA}$  entstanden. Der einfallende Strahl dieser Wellenlänge wird bei dieser  $\psi$ -Position gleichzeitig an der (4 2 0) und an der (2 4 0) Netzebene reflektiert.

Der angeregte Mehrstrahlfall bei der vorgesehenen Wellenlänge von  $1,4778 \text{ \AA}$  ist durch zusätzliche Reflexion des einfallenden Strahls an der (2 0 0) und der (0 2 0) Netzebene entstanden. Dieser Mehrstrahlfall

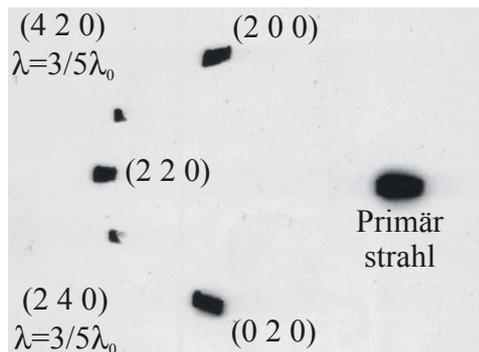
((2 2 0)/(2 0 0)/(0 2 0)) ist ein systematischer Vierstrahlfall, der bei jeder Wellenlänge bei angeregtem (2 2 0) Reflex unter dem theoretischen Wert  $\psi=0^\circ$  auftritt. Dieser Nullpunkt der  $\psi$ -Rotation ist bei den theoretischen Betrachtungen so gewählt, dass die (0 0 1) Kristallrichtung bei  $\psi=0^\circ$  in der Beugungsebene des (2 2 0) Reflexes liegt.

Mit Hilfe der in Absatz 4.2.1 beschriebenen Analysatoranordnung ist der reflektierte Strahl hinsichtlich seiner Polarisierungseigenschaften sowohl im Zweistrahlfall bei  $\psi=0,046^\circ$  als auch im Vierstrahlfall bei  $\psi=0,168^\circ$  charakterisiert worden. Die Abbildung 5-7 zeigt die integrale Intensität des am (3 3 3) Reflex des Siliziumanalysatorkristalls gebeugten Strahls in Abhängigkeit vom Analysatorwinkel  $\alpha$ .

Im Zweistrahlfall ist, wie schon aus den im Absatz 5.1 beschriebenen Experimenten bekannt ist, keine Änderung des Polarisationszustands zu erwarten. Der Polarisationsgrad beträgt in dem hier gezeigten Fall 96 %. Es hat keine Änderung des Polarisationszustands zwischen dem linear polarisierten einfallenden Strahl und dem nur an der (2 2 0) Netzebene reflektierten Strahl stattgefunden.

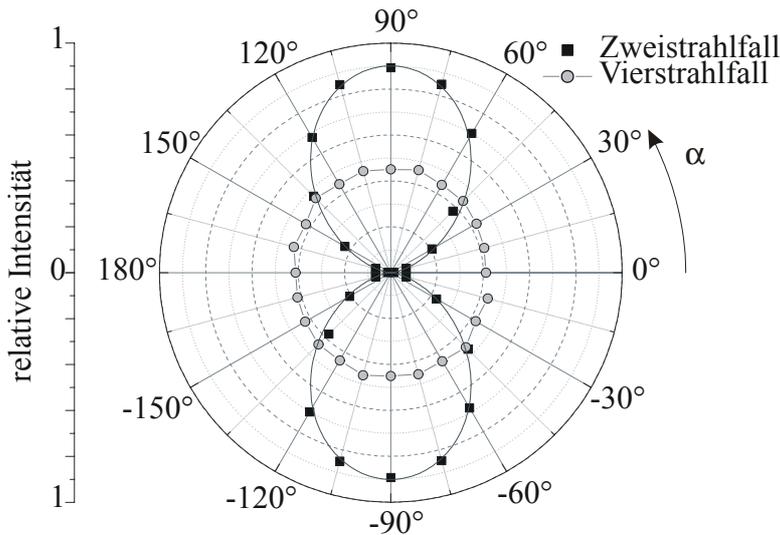
Die Anregung der beiden zusätzlichen Reflexe hingegen ändert den Polarisationszustand des primär reflektierten Strahls. Wie in der Abbildung deutlich zu erkennen ist, ist keine Richtung um den Strahl mehr ausgezeichnet. Die Intensität variiert kaum in Abhängigkeit von  $\alpha$ .

Für diesen Mehrstrahlfall führt also die Anregung der beiden zusätzlichen Reflexe zu einer Depolarisation des reflektierten Strahls. Der Grad der linearen Polarisierung beträgt hier nur noch 5 %. Die Anregung dieses nicht komplanaren<sup>8</sup> Vierstrahlfalls erzwingt die Änderung der Polarisierungseigenschaften des reflektierten Strahls.



**Abbildung 5-6** Polaroidaufnahme des transmittierten und der reflektierten Strahlen bei Anregung des (2 2 0)/(2 0 0)/(0 2 0) Mehrstrahlfalls aufgenommen in einem Abstand von ca. 4 cm vom Probenkristall

<sup>8</sup> Die Beugungsebenen der drei angeregten Reflexionen sind nicht parallel zueinander.

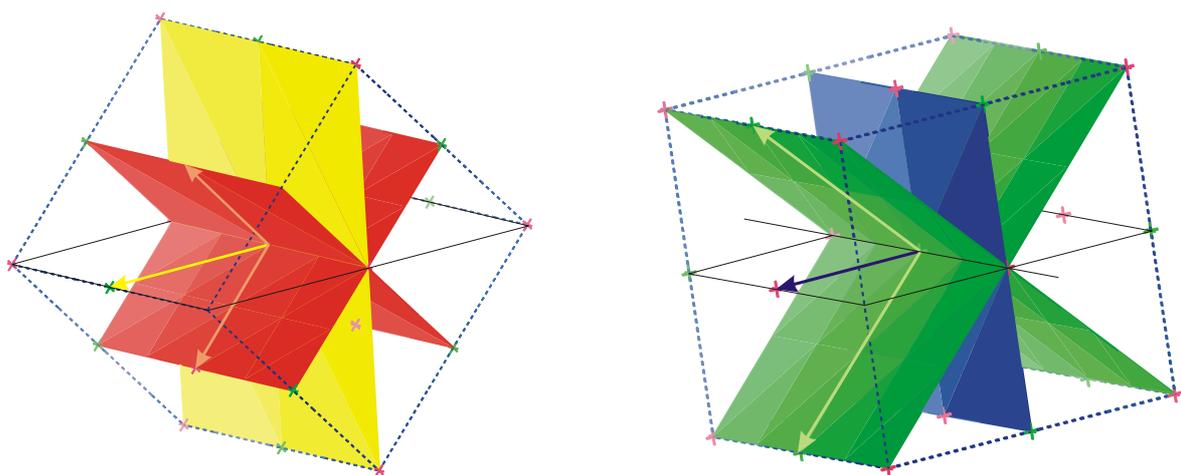


**Abbildung 5-7** Vergleich der integral gemessenen Intensitäten in Abhängigkeit vom Winkel  $\alpha$  der Analysatoranordnung zur Bestimmung des Polarisationszustands im Zweistrahlfall (2 2 0) und im Vierstrahlfall (2 2 0)/(2 0 0)/(0 2 0)

Nicht gezeigt werden kann mit Hilfe des für dieses Experiment verwendeten Versuchsaufbaus, ob der Strahl unpolarisiert ist oder ob sich die Polarisation wie in einem Lambdaviertelplättchen in eine zirkulare geändert hat. Dieser Frage wird in Absatz 5.2.2 nachgegangen.

Neben dem (2 2 0)/(2 0 0)/(0 2 0) wurde ein weiterer systematischer Vierstrahlfall analysiert. Untersucht wurde dabei der von der (4 0 0) Netzebene reflektierte Strahl. Zusätzlich

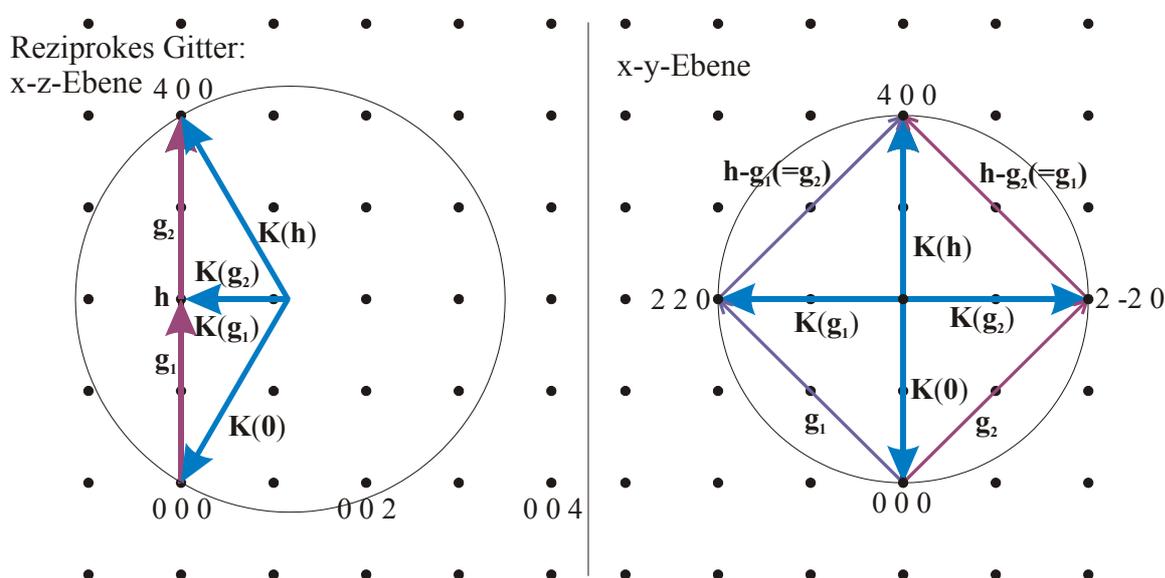
wurden der (2 2 0) und der (2 -2 0) Reflex angeregt. In diesem Fall ist die Geometrie dem bereits beschriebenen Fall sehr ähnlich. Die Netzebenen der zusätzlich angeregten Reflexe bilden mit der Netzebene des primär vorhandenen Reflexes einen Winkel von  $45^\circ$ .



**Abbildung 5-8** Schematische Darstellung der Geometrie der in Reflexionsstellung stehenden Netzebenen für die systematischen Vierstrahlfälle, links: (2 2 0)/(2 0 0)/(0 2 0) und rechts: (4 0 0)/(2 2 0)/(2 -2 0)

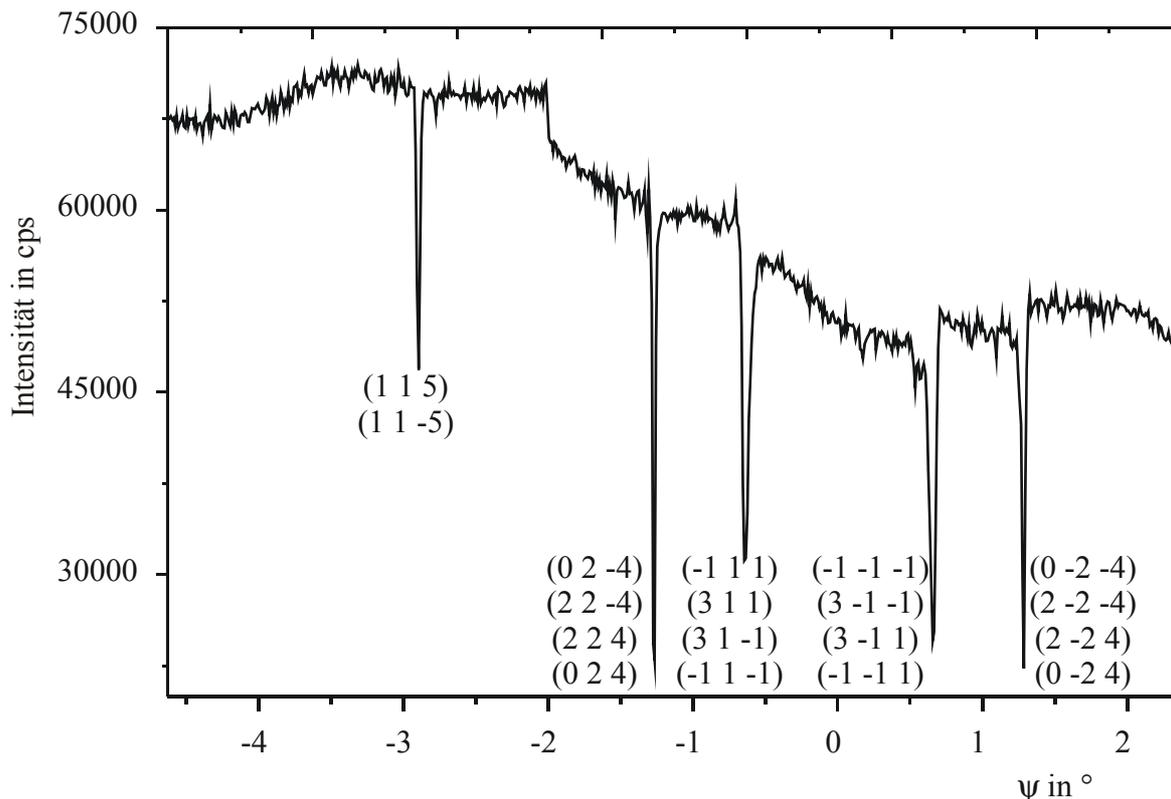
In der Abbildung 5-8 ist die Geometrie der am Beugungsprozess beteiligten Netzebenen für die beiden systematischen Vierstrahlfälle dargestellt. Die eingezeichneten Vektoren symbolisieren die Netzebenennormalen. Die schwarz umrandete Fläche kennzeichnet die Beugungsebene des primär angeregten Reflexes.

In der Abbildung 5-9 ist die Anregung des  $(4\ 0\ 0)/(2\ 2\ 0)/(2\ -2\ 0)$  Vierstrahlfalls im Bild des reziproken Raums dargestellt. Im linken Teil der Abbildung ist die x-z-Ebene gezeichnet. In dieser Projektion liegen die Netzebenennormalen der reflektierenden Netzebenen hintereinander. Sie bilden eine Ebene parallel zur x-y-Ebene, die im rechten Teil gezeigt ist. Man kann deutlich die Nichtkomplanarität der Wellenvektoren  $\mathbf{K}(0)$ ,  $\mathbf{K}(h)$ ,  $\mathbf{K}(g_1)$  und  $\mathbf{K}(g_2)$  erkennen.



**Abbildung 5-9** Darstellung des angeregten Vierstrahlfalls  $(4\ 0\ 0)/(2\ 2\ 0)/(2\ -2\ 0)$  im reziproken Raum, links: x-z-Ebene des reziproken Gitters, rechts: x-y-Ebene

Neben diesen systematischen Mehrstrahlfällen wurden für die beiden angeregten Primärreflexe  $(2\ 2\ 0)$  und  $(4\ 0\ 0)$  noch andere Mehrstrahlfälle untersucht, bei denen allerdings immer mehrere Reflexe zusätzlich angeregt wurden. Zum Auffinden der Mehrstrahlfallpositionen wurde, wie bereits beschrieben, die gebeugte Intensität in Abhängigkeit vom Winkel  $\psi$  der Rotation um die Netzebenennormale gemessen.



**Abbildung 5-10** Intensität des H-Strahls bei einem  $\psi$ - oder Renningerscan um die Normale der (2 0 0) Netzebene in LiF bei einer Wellenlänge von 1,4778 Å

Die Abbildung 5-10 zeigt einen solchen Scan um die Normale der (2 0 0) Netzebene von Lithiumfluorid. In einem Winkelbereich von  $7^\circ$  sind 5 Mehrstrahlpositionen erkennbar. In der gewählten Anordnung der Beugungsgeometrie wird in allen gezeigten Fällen die Intensität des (2 0 0) H-Strahls durch die zusätzlich angeregten Reflexe verringert. Die an den einzelnen Positionen möglichen zusätzlichen Reflexe<sup>9</sup> sind in der Abbildung angegeben. Diese Mehrstrahlfälle sind nicht systematisch und ändern in Abhängigkeit von der Wellenlänge auch ihre Position in einem Renningerscan. Die Position der bereits genannten systematischen Vierstrahlfälle ist immer  $\psi = 0^\circ$ .

In dem im Absatz 3.4.2 vorgestellten Modell des Intensitätstransfers über die Polarisationsvektoren der bei den Reflexionen auftretenden Strahlen wird eine phasengenaue Überlagerung nicht berücksichtigt. Wendet man nun das Modell auf die bei den systematischen Vierstrahlfällen gewonnenen Ergebnisse an, lassen sich zunächst die Polarisationsvektoren der einfallenden Strahlung für die drei möglichen Reflexionen aus dem Polarisationszustand der Primärstrahlung bestimmen. Mit diesen Vektoren

<sup>9</sup> bestimmt entsprechend Gleichung (8-1) im Anhang

können dann entsprechend der Vorgehensweise im Absatz 3.4.2 die Komponenten der reflektierten Strahlen über die verschiedenen Beugungswege bestimmt werden. Diese Komponenten werden dann auf die Polarisationskomponenten des H-Strahls projiziert und summiert. Auf diese Weise erhält man die Gesamtpolarisationskomponenten dieses H-Strahls und kann daraus den linearen Polarisationsgrad entsprechend Gleichung (3-56) berechnen.

Dieser beträgt für die beiden systematischen Vierstrahlfälle zwischen 0 und 1 %: Die Linearpolarisation der Strahlung geht also verloren. Dieses Verhalten zeigt sich auch in den Ergebnissen der Experimente.

Des Weiteren sind die folgenden nicht systematischen Mehrstrahlfälle untersucht worden:

$$(4\ 0\ 0)/(5\ -1\ 1)/(5\ 1\ 1)/(-1\ 1\ 1)/(-1\ -1\ 1)/(2\ -4\ 4)/(2\ 4\ 4)$$

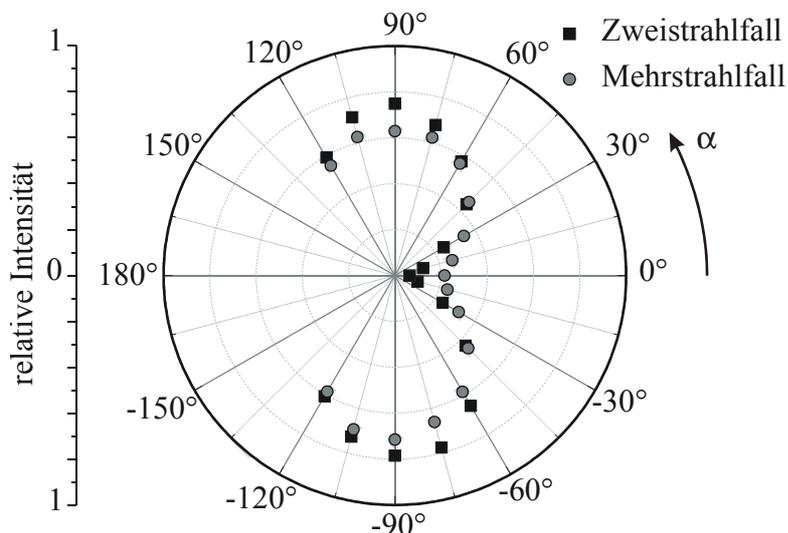
$$(4\ 0\ 0)/(3\ 1\ 3)/(1\ 1\ 3)/(3\ -1\ 3)/(1\ -1\ 3)$$

$$(4\ 0\ 0)/(-2\ 4\ 0)/(6\ -4\ 0)/(-2\ -4\ 0)/(6\ 4\ 0)$$

$$(2\ 2\ 0)/(3\ -1\ 1)/(3\ -1\ -1)$$

$$(2\ 2\ 0)/(-3\ 1\ 3)/(1\ 5\ 3)/(1\ 5\ -3)/(-3\ 1\ -3)$$

Dabei ist immer der Polarisationszustand des reflektierten Strahls des in jeder Zeile zuerst angegebenen Primärreflexes bestimmt worden. Auch die bei diesen Mehrstrahlpositionen gefundenen Ergebnisse bestätigten beim Vergleich mit den theoretischen Rechnungen das Modell des nicht kohärenten Beugungsvorgangs.



**Abbildung 5-11** Polarisationsanalyse des primär reflektierten Strahls im  $(4\ 0\ 0)$  Zweistrahlfall und im  $(4\ 0\ 0)/(3\ 1\ 3)/(1\ 1\ 3)/(3\ -1\ 3)/(1\ -1\ 3)$  Mehrstrahlfall

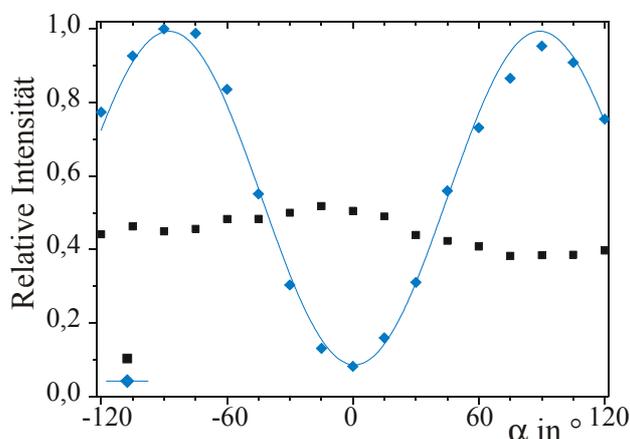
Exemplarisch für einen nicht systematischen Mehrstrahlfall ist in Abbildung 5-11 die Polarisationsanalyse des an der  $(4\ 0\ 0)$  Netzebene reflektierten Strahls für die zusätzliche Anregung der Reflexe  $(3\ 1\ 3)/(1\ 1\ 3)/(3\ -1\ 3)/(1\ -1\ 3)$  gezeigt. In diesem Fall ist die Strahlung nicht vollständig depolarisiert. Der Grad der Linearpolarisation wurde zu 53% bestimmt. Dieses Ergebnis wird auch durch das Modell der inkohärenten Überlagerung bestätigt. Zum Vergleich ist in der

Abbildung mit schwarzen Quadraten die Analyse im Zweistrahlfall gezeigt. Entscheidend für die Stärke der Depolarisation ist die Lage der Beugungs- und damit Netzebenen zueinander. Sind die Beugungsebenen nur leicht gegeneinander verkippt, so wird der reflektierte Strahl in geringerem Maße depolarisiert.

### 5.2.2. Anregung mit zirkular polarisierter Strahlung

Die Frage nach einer Phasenbeziehung zwischen den Komponenten des H-Strahls konnte im letzten Abschnitt (5.2.1) nicht geklärt werden, da die depolarisierte Strahlung bei Anregung eines Mehrstrahlfalls nicht ausschließlich mit Hilfe eines Analysators vollständig zu charakterisieren ist. In diesem Abschnitt soll nun die weitere Untersuchung des Polarisationszustands bei angeregten Mehrstrahlfällen diskutiert werden. Dabei wird zusätzlich ein Phasenschieber zur Bestimmung der Phasendifferenz zwischen den beiden senkrecht zueinander polarisierten Komponenten benötigt. Die Ergebnisse unter Verwendung der in Absatz 4.2.2 beschriebenen Lambdaviertelplättchen werden im folgenden vorgestellt.

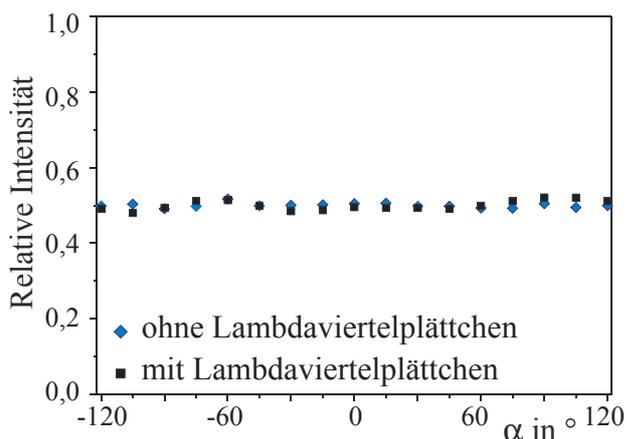
Für diese Experimente wurde das erste Phasenplättchen in dem Strahlengang positioniert. Gemäß Absatz 4.5.2 wurden für diesen Kristall die Winkelpositionen für eine Phasenverschiebung von  $\pi/2$  sowie eine weitere Position, an der dieser Kristall als Absorber ohne Einfluss auf den Polarisationszustand der transmittierten Strahlung wirkte, festgestellt. Um die Intensitätsschwächung in der Absorberposition gering zu halten, wurde die effektive Dicke des Kristalls verringert. Aufgrund der geringeren Winkelempfindlichkeit des Lambdaviertelplättchens auf der Seite der starken Absorption wurde diese Seite der Rockingkurve in den Experimenten verwendet. Dabei ist der Nachteil der unterschiedlichen Absorption der beiden Seiten, wie in Abbildung 4-9 zu sehen ist, gegenüber dem Vorteil einer geringeren Winkelempfindlichkeit zu vernachlässigen. Die motorgesteuerte Drehung des Kristalls ermöglichte einen schnellen Wechsel zwischen linear und zirkular polarisierter einfallender Strahlung.



**Abbildung 5-12** Intensität in Abhängigkeit vom Analysatorwinkel  $\alpha$  für (4 0 0) Zweistrahlfall bei Anregung mit linear (blaue Rhomben) und zirkular polarisierter (schwarze Quadrate) Strahlung

Die Abbildung 5-12 zeigt zum Vergleich die Polarisationsanalyse des reflektierten Strahls bei Anregung des (4 0 0) Reflexes mit linear und mit zirkular polarisierter Strahlung. In dieser Darstellung ist die Intensität normiert worden. Dabei wurde aber der Einfluss der Absorption aufgrund der unterschiedlichen effektiven Dicke des Phasenschieberkristalls vernachlässigt. Der aus den experimentellen Ergebnissen entsprechend Gleichung (3-56) bestimmte Grad der linearen Polarisation beträgt 84,8 % bzw. 5,9 %. Bei der Anregung mit zirkular polarisierter Strahlung wird die Komponente parallel zur Beugungsebene ( $\pi$ -Komponente) geschwächt, so dass der Polarisationsvektor des von der zirkular polarisierten Strahlung reflektierten Strahls eine leichte Vorzugsrichtung aufweist. Die resultierende elliptische Polarisation basiert auf den durch den verschiedenen Polarisationsfaktor bedingten unterschiedlichen Amplituden der Komponenten.

Im Zweistrahlfall ist wie erwartet nur die den unterschiedlichen Polarisationsfaktoren der beiden Komponenten zugeschriebene Änderung im Polarisationszustand der reflektierten Strahlung aufgetreten.



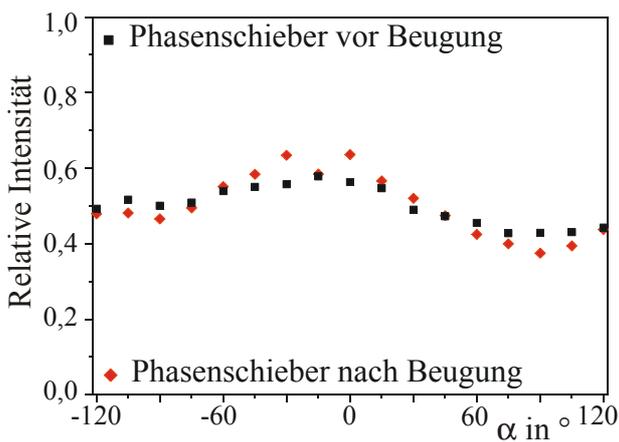
**Abbildung 5-13** Intensität in Abhängigkeit vom Analysatorwinkel  $\alpha$  für (4 0 0)/(2 2 0)/(2 -2 0) Vierstrahlfall bei Anregung mit linear (blaue Rhomben) und zirkular polarisierter (schwarze Quadrate) Strahlung

Der Vergleich der Anregung eines Mehrstrahlfalls mit zirkular und linear polarisierter Strahlung ist in Abbildung 5-13 gegeben. Dabei ist wieder der systematische (4 0 0)/(2 2 0)/(2 -2 0) Vierstrahlfall angeregt worden. Sowohl bei der Anregung mit linear als auch mit zirkular polarisierter Strahlung zeigt die Intensität des insgesamt reflektierten Strahls nur statistische Abweichungen von der Rotations-symmetrie. Der nach Gleichung (3-16) bestimmte Linearpolarisationsgrad beträgt für die Anregung mit linear polarisierter Strahlung 15,2% und mit der zirkular polarisierten 6,7%. Dieser Unterschied lässt sich mit den

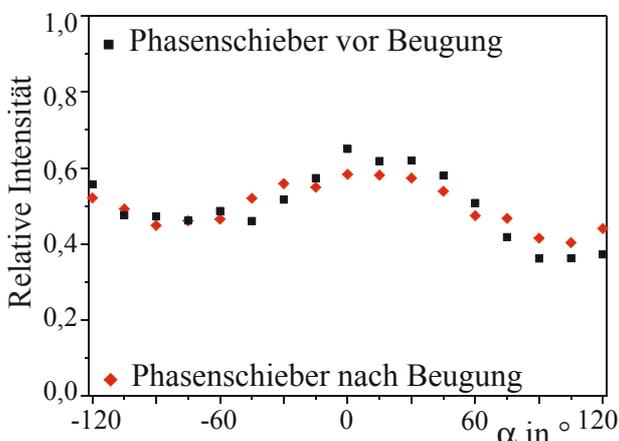
Divergenzen und den Messunsicherheiten erklären. Für die Anregung mit unterschiedlich polarisierter Strahlung ist also im Mehrstrahlfall in beiden Fällen keine bevorzugte Richtung des Polarisationsvektors festzustellen. Dieses Verhalten lässt sich durch das Modell der inkohärenten Überlagerung der direkt und über die Umwege reflektierten Strahlung erklären. Würden die Strahlen kohärent interferieren, hätte der Polarisationsvektor des reflektierten Strahls bei Anregung des Mehrstrahlfalls mit zirkular

polarisierter einfallender Strahlung eine Vorzugsrichtung aufweisen müssen. In dem Falle würde linear polarisierte einfallende in zirkular polarisierte ausfallende und zirkular polarisierte einfallende in linear polarisierte ausfallende Strahlung geändert. Dieses ist aber nicht der Fall.

Für den Intensitätstransfer ist es unerheblich, ob der Phasenschieber vor oder nach der



**Abbildung 5-14** Vergleich Phasenschieber vor und nach der Beugung im Zweistrahlfall



**Abbildung 5-15** Vergleich Phasenschieber vor und nach der Beugung im Mehrstrahlfall

Beugung wirkt. Ist der Beugungsvorgang inkohärent, so ist die reflektierte Strahlung unpolarisiert. Durch eine Verschiebung der Phasen der beiden Komponenten wird die statistische Verteilung der Intensität um den Strahl nicht verändert.

In der Abbildung 5-14 ist im Zweistrahlfall der Einsatz eines Phasenschiebers als Lambdaviertelplättchen vor und nach der Beugung miteinander verglichen. Es sind nur geringe Abweichungen zwischen der Intensität der beiden Fälle erkennbar. Die aus den Daten ermittelten linearen Polarisationsgrade betragen 15,7 % und 18,4 %. Die Abbildung 5-15 zeigt den Vergleich für einen Mehrstrahlfall. Angeregt wurden in diesem Fall neben dem (4 0 0) Primärreflex die Reflexe (-2 4 0)/(-6 -4 0)/(-2 -4 0)/(6 4 0). Auch hier zeigen sich nur geringe Unterschiede. Die linearen Polarisationsgrade betragen 16,9% und 19%. Daraus ergibt sich, dass kein Unterschied zwischen dem Einsatz eines Lambdaviertelplättchens vor oder nach dem Beugungsvorgang besteht. Da das Lambdaviertelplättchen im reflektierten Strahl aber im Primärstrahl justiert wurde, ist davon auszugehen,

dass die Verschiebung der Phasen der Komponenten beim Einsatz des Phasenschiebers im einfallenden Strahl genauer mit dem Wert  $\pi/2$  übereinstimmt. Bei dem auf Winkelsekunden begrenzten Bereich, in dem die Phasenverschiebung den exakten Wert besitzt, sind die Einstrahlungsbedingungen auf den Phasenschieber von großer

Bedeutung. Da diese beim Phasenschieber im reflektierten Strahl nicht genau bestimmbar sind, sind in den Versuchen mit nur einem Phasenschieber die Resultate mit dem Lambdaviertelplättchen im einfallenden Strahl zur weiteren Auswertung herangezogen worden.

### 5.2.3. Bestimmung des zirkularen Polarisationsgrades

Neben der Möglichkeit der Anregung mit zirkular polarisierter Strahlung ist erst durch das Lambdaviertelplättchen die vollständige Charakterisierung des Polarisationszustands möglich. Entsprechend den Gleichungen (3-15) und (3-16) kann somit auch der zirkulare Polarisationsgrad bestimmt werden. Die Intensitäten wurden dabei für die Azimutwinkel  $\alpha = 45^\circ$  und  $\alpha = -45^\circ$  bei zirkular polarisierter einfallender Strahlung vermessen. Für den in Abschnitt 5.2.1 ausführlich behandelten Vierstrahlfall  $(2\ 2\ 0)/(2\ 0\ 0)/(0\ 2\ 0)$  ist auf diese Weise ein zirkularer Polarisationsgrad von weniger als 1 % bestimmt worden. Somit ist der Gesamtpolarisationsgrad, der sich aus der Summe des linearen und zirkularen Polarisationsgrads berechnet, kleiner als 6 Prozent.

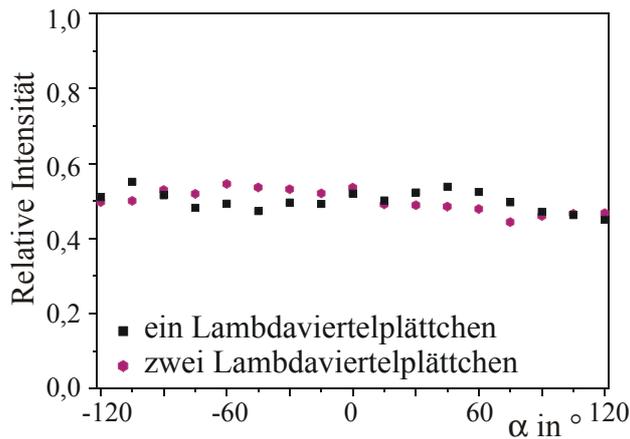
Auch der andere systematische Vierstrahlfall  $(4\ 0\ 0)/(2\ 2\ 0)/(2\ -2\ 0)$  hat einen zirkularen Polarisationsgrad kleiner als 1 %. Der lineare Polarisationsgrad, der wie der zirkulare aus den in der Abbildung 5-13 gezeigten Messungen bestimmt wurde, beträgt 1 %. Daraus ergibt sich ein Gesamtpolarisationsgrad kleiner als 2 %.

Für die beiden systematischen Vierstrahlfälle wird damit das Modell der inkohärenten Beugung, welches die Betrachtung der Intensitäten unabhängig von der Phase erlaubt, bestätigt.

Die Bestimmung der zirkularen und anschließend gesamten Polarisationsgrade für die anderen in Kapitel 5.2.1 angegebenen Mehrstrahlfälle bestätigte ebenfalls beim Vergleich mit den theoretischen Rechnungen das Modell des nicht kohärenten Beugungsvorganges.

### 5.2.4. Gleichzeitiger Einsatz beider Phasenschieber

Der Einsatz beider Lambdaviertelplättchen gleichzeitig in einem Experiment ermöglicht die Beantwortung der Frage, ob bei zirkular polarisierter einfallendem Strahl die Komponenten des reflektierten Strahls eine Phasenbeziehung zueinander aufweisen. Aufgrund der bisherigen Erkenntnisse ist eine solche Beziehung im Mehrstrahlfall aber nicht zu erwarten, und so soll das Ergebnis der Vollständigkeit halber nur kurz dargestellt werden.



**Abbildung 5-16** Vergleich des Einsatzes von einem bzw. zwei Lambdaviertelplättchen beim Mehrstrahlfall  
 $(4\ 0\ 0)/(3\ 1\ 3)/(1\ 1\ 3)/(3\ -1\ 3)/(1\ -1\ 3)$

Die Abbildung 5-16 zeigt exemplarisch die Intensität in Abhängigkeit vom Azimutwinkel  $\alpha$  für den Einsatz von einem oder zwei Lambdaviertelplättchen. Der lineare Polarisationsgrad für die beiden Kurven liegt zwischen 5 und 9 %. Der Stokes-Parameter  $s_2$  ist der Parameter  $s_3$  der anderen Kurve, da sich die beiden Messungen durch eine zusätzliche Phasenverschiebung von  $\pi/2$  unterscheiden. Die daraus bestimmten zirkularen Polarisationsgrade betragen ca. 5 %.

Wie schon am Anfang dieses Absatzes erläutert, werden durch den Einsatz eines zweiten Phasenschiebers keine neuen Erkenntnisse gewonnen. Die Mehrstrahlbeugung innerhalb der Mosaikkristalle findet inkohärent statt, so dass die Phasenbeziehung zwischen den Komponenten verloren geht.

## 6. Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Modell entwickelt, das die Polarisationsverhältnisse bei der Beugung in Kristallen verschiedener Perfektionsgrade beschreibt. Diese Vorgänge im Mosaikkristall lassen sich verstehen, wenn man von der inkohärenten Überlagerung der reflektierten Strahlen ausgeht. In der Folge kann die Intensität der Polarisationskomponenten durch Transfergleichungen beschrieben werden. Dieses Modell wird durch die Resultate der am Synchrotron durchgeführten Experimente im Zwei- und Mehrstrahlfall bestätigt.

Im Zweistrahlfall zeigen die Interferenzexperimente bei der Untersuchung des Polarisationszustands der reflektierten Strahlung als Funktion der Perfektion des Kristalls für die verwendeten unterschiedlich stark deformierten Kristalle keine Unterschiede in den Resultaten. Die von Belyakov und Dmitrienko aufgrund theoretischer Überlegungen vorhergesagte teilweise Depolarisation der Strahlung bei Verwendung von Mosaikkristallen konnte experimentell im Rahmen der zur Verfügung stehenden Möglichkeiten nicht nachgewiesen werden. Der Polarisationsgrad der Strahlung wies keine signifikanten Unterschiede in Abhängigkeit von der Stärke der Deformation der verwendeten Kristalle auf. Je stärker der Kristall gestört wurde, um so größer musste der Integrationsbereich für die Bestimmung der integralen Intensität gewählt werden, da hier mehrere gegeneinander verschwenkte Kristallite von der einfallenden Strahlung getroffen worden sind. Die Anordnung der Kristallite bewirkt nämlich leicht unterschiedliche Ausbreitungsrichtungen für die reflektierten Strahlen. Die Beugungsgeometrie variiert für die in den unterschiedlichen Mosaikblöcken reflektierten Strahlen. Innerhalb dieser Kristallite kann man die Polarisationskomponenten als entkoppelt auffassen. Die reflektierten Strahlen sind bei einfallender linear polarisierter Strahlung jeder für sich linear polarisiert. Die Strahlen haben zueinander keine kohärente Beziehung. Deswegen kann für die resultierende gebeugte Gesamtwelle die Phasenbeziehung zwischen den in den verschiedenen Kristalliten reflektierten Strahlen außer Acht gelassen werden. Es finden keine Interferenzeffekte zwischen den in unterschiedlichen Kristalliten gebeugten Wellen statt, so dass bei der Überlagerung der Strahlen über die Intensitäten der Polarisationskomponenten summiert werden kann.

Die Anregung eines Mehrstrahlfalls wurde für verschiedene Geometrien beschrieben. Bei der Justage der Kristalle auf maximale Intensität wurde meist schon eine Mehrstrahlfallposition eingestellt. Dieses gilt insbesondere für die beiden vorgestellten systematischen Vierstrahlgeometrien  $(4\ 0\ 0)/(2\ 2\ 0)/(2\ -2\ 0)$  und  $(2\ 2\ 0)/(0\ 2\ 0)/(2\ 0\ 0)$ , bei denen der Rotationswinkel um die Netzebenennormale gleich Null ist. Bei allen untersuchten Mehrstrahlfällen handelt es sich um nichtkomplanare Beugungsgeometrien. Daraus ergibt sich die Möglichkeit, dass die Intensitäten der Polarisationskomponenten über die Komponenten der Umwegreflexe übertragen werden können. Es sind die

Polarisationseigenschaften der primär gebeugten Welle untersucht worden. Für eine Mehrstrahlfallanregung ist in allen untersuchten Fällen eine Depolarisation feststellbar. Die Stärke dieser Depolarisation hängt von der Geometrie und der Stärke der beteiligten Reflexe ab. So ist der reflektierte Gesamtstrahl bei den systematischen Vierstrahlfällen vollständig unpolarisiert, während sich für den beschriebenen  $(4\ 0\ 0)/(3\ 1\ 3)/(1\ 1\ 3)/(3\ -1\ 3)/(1\ -1\ 3)$  Mehrstrahlfall der Grad der linearen Polarisation auf ca. 50 % verringert. Ohne zusätzliche Phasenschieber konnte zunächst nur gezeigt werden, dass der reflektierte Strahl eines linear polarisierten einfallenden Strahls nach der Beugung in Mehrstrahlgeometrie einen deutlich geringeren Grad an linearer Polarisation aufweist.

In weiteren Experimenten wurden Lambdaviertelplättchen für die Röntgenstrahlung eingesetzt. Um die Geradeausgeometrie nicht zu verändern, wurde der von den Phasenschieberkristallen transmittierte Strahl genutzt. Daraus ergab sich die Möglichkeit, weitere Untersuchungen mit zirkular polarisierter einfallender Strahlung durchzuführen, und auch der reflektierte Strahl konnte mit Hilfe eines zweiten Phasenschiebers bezüglich seines Polarisationszustands vollständig beschrieben werden. Da die Position für eine Phasenverschiebung von  $\pi/2$  nur im durchgehenden Strahl bestimmt werden konnte, ist die Angabe der Größe der Phasenverschiebung durch das zweite Lambdaviertelplättchen aufgrund der leicht unterschiedlichen Einstrahlbedingungen mit größerer Unsicherheit behaftet. Bei den Resultaten unter Verwendung nur eines Phasenschiebers hat sich aber gezeigt, dass qualitativ keine unterschiedlichen Ergebnisse erhalten werden.

Die Anwendung der Phasenschieber ermöglicht die Bestimmung aller Stokes-Parameter und damit die Unterscheidung zwischen zirkular polarisierter und unpolarisierter Strahlung.

Die experimentellen Ergebnisse haben gezeigt, dass im Falle der gleichzeitigen Anregung mehrerer Reflexe mit polarisierter Strahlung die gebeugte Gesamtwelle zu einem großen Anteil unpolarisiert ist. Zwischen den zueinander senkrecht stehenden Komponenten existiert keine feste Phasenbeziehung. Das bedeutet, dass die über den Umweg  $\mathbf{k}_g$ ,  $\mathbf{k}_{h-g}$  gebeugten Wellen nicht mit der primär gebeugten Welle  $\mathbf{k}_h$  interferieren. Die Phasenbeziehung untereinander geht verloren. Die Wellen sind inkohärent zueinander und es ist ausreichend, über die Intensitäten projiziert auf die Komponenten zu summieren. Die Amplituden der über verschiedene Wege innerhalb der verwendeten Mosaikkristalle gestreuten Wellen können getrennt von der Phase betrachtet werden.

Die in dieser Arbeit gewonnenen Erkenntnisse zur Depolarisation der gebeugten Welle sind bei spektroskopischen Untersuchungen, bei denen u.a. zur Fokussierung des Strahls gebogene Lithiumfluoridkristalle als Analysatorkristalle verwendet werden, zu beachten. Wie sich in den hier vorgestellten Experimenten gezeigt hat, werden bei Justierung dieser Kristalle auf das Intensitätsmaximum zumeist mehrere Reflexe gleichzeitig angeregt.

Besonders bei gebogenen Kristallen hat sich gezeigt, dass die Bereiche, in denen eine Mehrstrahlanregung stattfindet, eine größere Ausdehnung haben. Dieses hat zur Konsequenz, dass der reflektierte Gesamtstrahl depolarisiert ist und damit die Berechnung der Intensitäten nicht mehr mit dem üblichen Verfahren der Anwendung des Polarisationsfaktors vorgenommen werden kann.

Das im Absatz 3.4.2 vorgestellte Modell des Intensitätsübertrags über die Polarisationsvektoren wird durch die experimentellen Ergebnisse bestätigt. Es handelt sich bei dem gesamten Beugungsvorgang in der Mehrstrahlgeometrie um eine inkohärente Überlagerung der reflektierten Strahlen.

In diesem Zusammenhang ist zu klären, weshalb die Strahlen ihre Kohärenz zueinander verlieren. Bei Anwendung der dynamischen Theorie wird eine Kopplung der Polarisationskomponenten bei der Anregung eines oder mehrerer zusätzlicher Reflexe im Ansatz berücksichtigt. Nach dieser Theorie ist der in der exakten Mehrstrahlposition, also in einem Winkelbereich  $\psi \leq 0,05''$ , reflektierte Strahl nicht unpolarisiert. Ob die Inkohärenz zum einen der Imperfektion der verwendeten Kristalle oder zum anderen der zu großen Divergenz der Strahlung geschuldet ist, konnte im Rahmen dieser Arbeit experimentell nicht geklärt werden. Allerdings weist der Winkelbereich, in dem die Kopplung der Polarisationskomponenten in der dynamischen Theorie vorhanden ist, in Relation zu den gegebenen experimentellen Bedingungen mit deutlich größeren Divergenzen darauf hin, dass die Divergenz den entscheidenden Einfluss auf das Entstehen der Inkohärenz besitzt.

## 7. Literaturverzeichnis

- BARUCHEL, J., HODEAU, J.L., LEHMANN, M.S., REGNARD, J.R., SCHLENKER, C.(1993). „Neutron and synchrotron radiation for condensed matter studies“, *Les Editions de Physique*, Les Ulis – *Springer-Verlag*, Berlin Heidelberg
- BATTERMAN, B.W.(1992). „X-ray phase plate“, *Phys. Rev.* **B 45**, 12677–12681
- BECKER, P., COPPENS, P. (1974). „Extinction within the Limit of Validity of the Darwin Transfer Equations, I“, *Acta Cryst.* **A30**, 129 – 147
- BECKER, P., COPPENS, P. (1974). „Extinction within the Limit of Validity of the Darwin Transfer Equations, II“, *Acta Cryst.* **A30**, 148 – 153
- BECKER, P. (1977). „The Theoretical Models of Extinction. Their Domain of Applicability“, *Acta Cryst.* **A33**, 243 – 249
- BELIAKOV, V.A. & DMITRIENKO, V.E. (1989). „Polarization phenomena in x-ray optics“, *Sov. Phys. Usp.* 32(8), 697 – 719
- BERGMANN, L. & SCHAEFER, C. (1987). „Optik“, *Walter de Gruyter Verlag*, Berlin
- BORN, M. UND WOLF, E. (1980). „Principles of Optics“, *University Press*, Cambridge (1998)
- BRÜMMER, O., EISENSCHMIDT, CH. and NIEBER, J. (1982). „The Influence of the Dispersion and Vertical Divergence on the Reflection Curve of a Double-crystal Arrangement“, *Crystal Res. & Technol.* **17**(4), 509 – 513
- BRÜMMER, O., EISENSCHMIDT, CH. AND HÖCHE, H.-R. (1984). „Polarization Phenomena of X-rays in the Bragg Case“, *Acta Cryst.* **A40**, 394 – 398
- CHANDRASEKARAN, K.S. (1959). „Study of Perfection of Crystals Using Polarized X-rays“, *Acta Cryst.* **A12**, 916 – 922
- CHANDRASEKHAR, S. (1950). „Radiative Transfer“, Oxford University Press
- DMITRIENKO, V.E. AND BELIAKOV, V.A. (1980). „On the Polarization of X-rays Diffracted in Mosaic Crystals“, *Acta Cryst.* **A36**, 1044 – 1050
- DRÄGER, G. in BRÜMMER, O., STEPHANIK, H. (1976). „Dynamische Interferenztheorie“, *Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig KG*, Leipzig
- EISENSCHMIDT, C. (1984). „Untersuchungen zum Polarisationszustand von Röntgenstrahlen im Interferenzfall“, *Dissertation*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
- EWALD, P.P., HÉNO, Y. (1968). „X-ray Diffraction in the Case of Three Strong Rays. I. Crystal Composed of Non-Absorbing Point Atoms“, *Acta Cryst.* **A24**, 5 – 15

- HASYLAB WWW (2000) Meßplatzbeschreibung CEMO Beamline:  
[http://www-hasylab.desy.de/facility/experimental\\_stations/stations/C.htm](http://www-hasylab.desy.de/facility/experimental_stations/stations/C.htm)
- HEYROTH, F. (1995). „Analyse von polarisierter Röntgenstrahlung“, *Diplomarbeit*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
- HEYROTH, F. (2000). „Röntgentopographischer Kontrast im Dreistrahlfall der Interferenz“, *Dissertation*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
- HÖCHE, H.-R., KOLBE, M., EISENSCHMIDT, CH. (2002). „Change of the X-ray polarisation state by diffraction”, *Crystal Res. & Technol.* **37**(7), 665 – 675
- HÜMMER, K., BILLY, H. (1986). „Experimental Determination of Triplet Phases and Enantiomorphs of Non-centrosymmetric Structures. I. Theoretical Considerations”, *Acta Cryst.* **A42/1**, 127 – 133
- HÜMMER, K., WECKERT, E. (1995). „Enantiomorphism and 3-beam X-ray-diffraction - Determination of the absolute structure”, *Acta Cryst.* **A51**, 431 – 438
- JURETSCHKE, H.J. (1986). „Anomalous Asymmetries in X-Ray  $\pi$ -Modes near  $n$ -Beam Interactions”, *phys. stat. sol. (b)* **135**, 455 – 466
- KILLEAN, R.C.G., LAWRENCE, J.L., SHARMA, V.C. (1972). „Extinction in Lithium Fluoride – A Comment on Zachariasen’s Theory of Extinction”, *Acta Cryst.* **A28**, 405 – 407
- KOCH, E.-E., EASTMAN, D.E., FARGE, Y. (1983). „Synchrotron radiation – a powerful tool in science” in KOCH, E.-E. (ed.) „Handbook on Synchrotron Radiation”, *North-Holland Publishing Company*, Amsterdam, New York, Oxford
- Kolbe, M. (1998). „Röntgenographische Untersuchungen von gebondeten Siliziumwafern“, *Diplomarbeit*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
- KSHEVETSKII, S.A., STETSKO, Y.P., SHELUD’KO, S.A. (1985). „Indirect excitation of x-ray reflections forbidden by polarization”, *Sov. Phys. Cryst.* **30**(3), 270 – 272
- LEITENBERGER, W. (1997). „Polarisationserscheinungen bei der dynamischen Röntgenbeugung“, *Dissertation*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
- LEITENBERGER, W., EISENSCHMIDT, CH. AND HÖCHE, H.-R. (1997). „Lithium Fluoride Transmission Phase-Retarder for X-rays”, *J. Appl. Cryst.* **30**, 164-170
- MARK, H., SZILARD, L. (1926). „Die Polarisierung von Röntgenstrahlen durch Reflexion an Kristallen”, *Z. Physik* **35**, 743 – 747
- MATERLIK, G., SUORTTI, P. (1984). „Measurement of the polarization of X-rays from a synchrotron source”, *J. Appl. Cryst.* **17**, 7-12
- MORELHÃO, S.L. and AVANCI, L.H. (2001). „Strength tuning of multiple waves in crystals”, *Acta Cryst.* **A57**, 192 – 196

- OLEKHNOVICH, N.M. AND PUSHKAREV, A.V. (1990). „Birefringence and Depolarization Effects of X-Ray Scattering in Laue Geometry for Highly distorted Crystals”, *phys. stat. sol. (a)* **119**, 27-34
- RAOUX, D. (1993). „Introduction to synchrotron radiation and to the physics of storage rings”, in BARUCHEL ET AL.
- RENNINGER, M. (1937). „Röntgenometrische Beiträge zur Kenntnis der Ladungsverteilung im Diamantgitter“, *Z. Kristallogr.* **97**, 107-121
- SCHWEGLE, W.F. (1993). „Theoretische und Experimentelle Untersuchungen an Mehrstrahlinterferenzen“, *Dissertation*, Universität Karlsruhe
- SHEN, Q., FINKELSTEIN, K. D.(1992). „Complete determination of x-ray polarization using multiple-beam Bragg diffraction“, *Phys. Rev. B* **45**, 5075–5078
- STETSKO, Y.P., JURETSCHKE, H.J. et al. (2000). „The phenomenon of polarization suppression of X-ray *Umweg* multiple waves in crystals”, *Acta Cryst.* **A56**, 394 – 400
- WARREN, B.E. (1969, 1990). „X-ray diffraction”, Dover Publications
- WECKERT, E., HÜMMER, K. (1997). „Multiple-beam X-ray diffraction for physical determination of reflection phases and its applications”, *Acta Cryst.* **A53**, 108 – 143
- ZACHARIASEN, W.H. (1967). „A General Theory of X-Ray Diffraction in Crystals”, *Acta Cryst.* **23**, 558 – 564

## Anhang – Häufig verwendete Symbole

$\theta_B$	exakter Braggwinkel
$\Delta\theta_B$	Abweichung vom Braggwinkel
$\lambda$	Wellenlänge
$d$	Netzebenenabstand
$\pi$ & $\sigma$	Parallel- & Senkrechtkomponente der Polarisierung bezogen auf die Beugungsebene des Probenkristalls
$\pi_{PS}$ & $\sigma_{PS}$	Parallel- & Senkrechtkomponente der Polarisierung bezogen auf die Beugungsebene des Phasenschiebers
$\phi$	Phasendifferenz zwischen den Komponenten $\sigma$ und $\pi$
$C_\pi$ & $C_\sigma$	Polarisationsfaktoren
$\alpha$	Azimutwinkel / Analysatorwinkel
$\eta$	normierter Einstrahlparameter
$E$	elektrischer Feldvektor
$V$	Volumen der Einheitszelle
$e$	Elementarladung
$m_0$	Elektronenruhemasse
$c$	Lichtgeschwindigkeit
$\vartheta$	Streuwinkel
$\delta$	Phasenwinkel
$J$	Kohärenzmatrix
$s_0, s_1, s_2, s_3$	Stokes-Parameter
$P_{lin}$ & $P_{zirk}$	linearer und zirkularer Polarisationsgrad
<b>h, g</b>	reziproke Gittervektoren der beugenden Netzebenen
<b>k, K</b>	Wellenvektoren im Vakuum und im Kristall
<b>r, R</b>	Ortsvektoren
$\Delta\mathbf{K}$	Differenz der Wellenvektoren
<b>n</b>	Oberflächennormale des Kristalls
$t_{eff}$	effektive Weglänge im Kristall
$t$	Kristalldicke / Zeit
$G$	Gitteramplitude

---

$f$	Atomformamplitude
$F_H, F_{-H}$	Strukturamplitude des Reflexes $H$ bzw. $-H$
$\chi_h$	Suszeptibilität von $\mathbf{h}$
$\gamma_0, \gamma_h$	Kosinus des Winkels zwischen dem Wellenvektor der einfallenden / reflektierten Strahlung und der Oberflächennormalen $\mathbf{n}$
$W$	Orientierungsverteilungsfunktion der Mosaikblöcke im Kristall
$\psi$	Winkel der Drehung um die Netzebenennormale
$I_0, I$	Primärintensität / gestreute Intensität
$\bar{\mathbf{s}}$	Einheitsvektor in Streurichtung
$\rho$	Elektronendichte
$\sigma_0, \sigma_h$	Streuquerschnitt
$\Lambda$	Extinktionslänge
$Q$	reziproke Länge definiert in Gleichung (3-30)
H-Strahl	primär reflektierter Strahl
$v$	Geschwindigkeit
$\nu$	Frequenz

## Anhang - Berechnung möglicher Mehrstrahlfälle und ihrer $\psi$ -Position

Zur Berechnung der Mehrstrahlfälle benötigt man die beteiligten reziproken Gittervektoren  $\mathbf{h}$ ,  $\mathbf{g}$ ,.. sowie den Wellenvektor der einfallenden Strahlung. Der Bereich einer Mehrstrahlinterferenz ist der Bereich, bei dem die geometrische Beugungsbedingung für alle beteiligten reziproken Gittervektoren erfüllt ist. Im Vakuum ist diese Bedingung am Lauepunkt erfüllt. Zur Berechnung des Lauepunkts nach der von EWALD & HÉNO 1968 angegebenen Formel sind zwei reziproke Gittervektoren  $\mathbf{h}$  und  $\mathbf{g}$  notwendig.

$$(8-1) \quad \mathbf{P}_{Laue} = \frac{g^2 (h^2 - \mathbf{h}\mathbf{g})\mathbf{h} + h^2 (g^2 - \mathbf{h}\mathbf{g})\mathbf{g} \pm \sqrt{4(\mathbf{h} \times \mathbf{g})^2 k_0^2 - h^2 g^2 (\mathbf{h} - \mathbf{g})^2} (\mathbf{h} \times \mathbf{g})}{2(\mathbf{h} \times \mathbf{g})^2}$$

Diese Formel ermöglicht die Berechnung der Lage des Vektors der einfallenden Strahlung im reziproken Raum bei der gleichzeitigen Anregung von zwei Reflexen und damit die Bestimmung des Winkels  $\psi$  relativ zu einer vorgegebenen Nullposition. Sinnvollerweise legt man  $\psi=0$  so fest, dass eine Hauptachse des Kristalls in der Beugungsebene des H-Reflexes liegt.

## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1 Berechnete Phasenverschiebung und Reflektivität des reflektierten Strahls für die symmetrische 2 2 0 Bragg-Reflexion von Germanium bei der Wellenlänge $\lambda = 1,55 \text{ \AA}$	8
Abbildung 1-2 Veranschaulichung der Anregung eines Mehrstrahlfalls im reziproken Raum mit Hilfe der Ewaldkugel	11
Abbildung 3-1 Poincaré-Kugel zur Darstellung der Polarisations-eigenschaften einer Strahlung	16
Abbildung 3-2 Lage der Vektoren im reziproken Raum für einen symmetrischen Vierstrahlfall	26
Abbildung 3-3 Veranschaulichung der beteiligten $\mathbf{s}$ - und $\mathbf{\sigma}$ -Vektoren für die direkte Beugung an $\mathbf{h}$ (rechts unten) und der Umwegbeugung über $\mathbf{g}$	27
Abbildung 4-1 Emissionscharakteristik für Synchrotronstrahlung (a): für ein langsames Elektron $\beta = \frac{v}{c} \ll 1$ (klassisches Bild) und (b): für ein relativistisch beschleunigtes Elektron $\beta \approx 1$ mit einem Abstrahlwinkel $\sqrt{1-\beta^2}$ [KOCH 1983]	31
Abbildung 4-2 Berechnete Abstrahlcharakteristik für die verwendete Synchrotronstrahlung am Krümmungsmagneten der CEMO Beamline	32
Abbildung 4-3 Beispiele für Reflexionskurven des (3 3 3) Reflexes des Siliziumanalysatorkristalls in Abhängigkeit vom Azimutwinkel $\alpha$ bei einer Wellenlänge von $1,4778 \text{ \AA}$	35
Abbildung 4-4 Kristallpresse	37
Abbildung 4-5 Prinzipdarstellung des Strahlengangs und Versuchsaufbaus bei den Experimenten an der CEMO-Beamline für die Wellenlänge $\lambda = 1,0003 \text{ \AA}$	38
Abbildung 4-6 Experimentelle Anordnung an der Beamline CEMO mit dem vom Doppelmonochromator kommenden Strahlrohr (SR), der Ionisationskammer (IONI), dem Spaltsystem, der Probe (P) im Zentrum der Eulerwiege und der Kamera (K). Links im Bild ist der Analysator (A) auf dem Detektorarm (DA) mit den Detektoren (D 1, D 2) und dem zweiten Lambdaviertelplättchen (LVP 2) zu sehen.	39
Abbildung 4-7 (a) Anordnung des Analysatorkristalls (AK) im Analysator und (b) Anordnung des zweiten Phasenschiebers (LVP 2) auf dem Detektorarm vor dem Analysator	40

- Abbildung 4-8 schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus zur Einstellung der Lambdaviertelpositionen der Phasenschieber 42
- Abbildung 4-9 Darstellung der Intensität der beiden senkrecht zueinander polarisierten Komponenten des vom Phasenschieberkristall transmittierten Strahls gemessen über den Analysatorkristall in Abhängigkeit von der Abweichung vom Braggwinkel des Phasenschiebers 43
- Abbildung 4-10 Polarisationsanalyse des einfallenden Strahls ohne und mit Phasenschiebern 44
- Abbildung 5-1 Vergleich der mit dem Analysator unter verschiedenen Winkeln  $\alpha$  integral gemessenen Intensitäten bei der Untersuchung eines undeformierten und eines stark deformierten Kristalls 47
- Abbildung 5-2 Reflexionskurve des (2 0 0) Reflexes des deformierten Kristalls bei einer Wellenlänge von 1,4778 Å 48
- Abbildung 5-3 Rockingkurven des Analysatorreflexes bei einem Azimutwinkel  $\alpha = -90^\circ$  für den vom undeformierten und deformierten Kristall an der (2 0 0) Netzebene bei einer Wellenlänge von 1,4778Å reflektierten Strahl – die unterschiedlichen Intensitäten sind durch verschiedene Filter und den Abfall der Intensität der vom Speicherring kommenden Strahlung bedingt 49
- Abbildung 5-4 Polaroidaufnahme des transmittierten und des reflektierten Strahls bei Anregung des (2 2 0) Reflexes, aufgenommen in einem Abstand von ca. 4 cm vom Probenkristall 51
- Abbildung 5-5 Intensität des reflektierten Strahls in Abhängigkeit von der Position des  $\psi$  - Winkels der Rotation um die Netzebenennormale der beugenden (2 2 0) Netzebene 51
- Abbildung 5-6 Polaroidaufnahme des transmittierten und der reflektierten Strahlen bei Anregung des (2 2 0)/(2 0 0)/(0 2 0) Mehrstrahlfalls aufgenommen in einem Abstand von ca. 4 cm vom Probenkristall 52
- Abbildung 5-7 Vergleich der integral gemessenen Intensitäten in Abhängigkeit vom Winkel  $\alpha$  der Analysatoranordnung zur Bestimmung des Polarisationszustands im Zweistrahlfall (2 2 0) und im Vierstrahlfall (2 2 0)/(2 0 0)/(0 2 0) 53
- Abbildung 5-8 Schematische Darstellung der Geometrie der in Reflexionsstellung stehenden Netzebenen für die systematischen Vierstrahlfälle, links: (2 2 0)/(2 0 0)/(0 2 0) und rechts: (4 0 0)/(2 2 0)/ (2 -2 0) 53
- Abbildung 5-9 Darstellung des angeregten Vierstrahlfalls (4 0 0)/(2 2 0)/(2 -2 0) im reziproken Raum, links: x-z-Ebene des reziproken Gitters, rechts: x-y-Ebene 54

---

Abbildung 5-10	Intensität des H-Strahls bei einem $\psi$ - oder Renningerscan um die Normale der (2 0 0) Netzebene in LiF bei einer Wellenlänge von 1,4778 Å	55
Abbildung 5-11	Polarisationsanalyse des primär reflektierten Strahls im (4 0 0) Zweistrahlfall und im (4 0 0)/(3 1 3)/(1 1 3)/(3 -1 3)/(1 -1 3) Mehrstrahlfall	56
Abbildung 5-12	Intensität in Abhängigkeit vom Analysatorwinkel $\alpha$ für (4 0 0) Zweistrahlfall bei Anregung mit linear (blaue Rhomben) und zirkular polarisierter (schwarze Quadrate) Strahlung	57
Abbildung 5-13	Intensität in Abhängigkeit vom Analysatorwinkel $\alpha$ für (4 0 0)/(2 2 0)/(2 -2 0) Vierstrahlfall bei Anregung mit linear (blaue Rhomben) und zirkular polarisierter (schwarze Quadrate) Strahlung	58
Abbildung 5-14	Vergleich Phasenschieber vor und nach der Beugung im Zweistrahlfall	59
Abbildung 5-15	Vergleich Phasenschieber vor und nach der Beugung im Mehrstrahlfall	59
Abbildung 5-16	Vergleich des Einsatzes von einem bzw. zwei Lambdaviertelplättchen beim Mehrstrahlfall (4 0 0)/(3 1 3)/(1 1 3)/(3 -1 3)/(1 -1 3)	61

## Danksagung

An dieser Stelle möchte ich all denjenigen danken, die zum Gelingen der hier vorliegenden Dissertation beigetragen haben. Mein besonderer Dank gilt dabei zunächst Herrn Prof. Dr. H.-R. Höche für die interessante Themenstellung, die stetige Förderung der Arbeit und nicht zuletzt für die Unterstützung bei den Experimenten im HASYLAB.

Herrn Dr. Christian Eisenschmidt danke ich für die Mitwirkung bei den Experimenten, die aufschlussreichen Diskussionen und die kritischen Hinweise zum Manuskript dieser Arbeit.

Für die Gespräche über die Resultate der Experimente, die bei der Lösung der Aufgabenstellung halfen, und die Hilfe bei der Bewältigung von Problemen mit der Computertechnik bin ich Herrn Dr. Frank Heyroth sehr dankbar.

Den Mitarbeitern der feinmechanischen und elektronischen Werkstatt des Fachbereichs Physik danke ich für die Unterstützung beim Bau und der Erweiterung der experimentellen Anordnungen.

Für die erwiesene Unterstützung beim Betrieb des Messplatzes im HASYLAB danke ich dem Betreuer der CEMO Beamline, Herrn Dr. D. Novikov.

Für das förderliche Arbeitsklima und die gute Zusammenarbeit danke ich allen Mitarbeitern des Kristall-Labors und des Zentrums für Materialwissenschaften.

## Lebenslauf

- 15.11.1973 in Halle (Saale) geboren
- 1980-1988 Polytechnische Oberschule in Halle(Saale)
- 1988-1992 Altsprachenklasse am Landesgymnasium "Latina August-Hermann-Francke" in Halle (Saale)
- 1992 Abschluss der Schulausbildung mit dem Abitur
- 1992 Auslandspraktikum bei Prof. Dr. W. Brostow am 'Center of Materials Characterisation' der 'University of North Texas' Denton, USA
- 1993-1994 Zivildienst
- 1994-1998 Studium der Physik an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg  
Forschungsbeleg: "Aufbau eines Doppelkristallspektrometers"  
Diplomarbeit in der Fachgruppe Kristallphysik zum Thema: "Röntgenographische Untersuchungen an gebondeten Siliziumwafern"  
(betreut von Prof. Dr. H.-R. Höche)
- 1998 Teilnahme am 29. Ferienkurs des Instituts für Festkörperforschung (Forschungszentrum Jülich) zum Thema „Physik der Nanostrukturen“
- Juni 1998 Abschluss des Diplomstudienganges Physik mit dem Diplom
- seit Juli 1998 Promotionsstudent an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg und wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Fachgruppe Kristallphysik  
wissenschaftlicher Betreuer: Prof. Dr. H.-R. Höche  
experimentelle Arbeiten im HASYLAB und in der ESRF
- 1999 Teilnahme am Fachkurs "HIGHER EUROPEAN RESEARCH COURSE FOR USERS OF LARGE EXPERIMENTAL SYSTEMS" in Grenoble, Frankreich  
DAAD Stipendium zur wissenschaftlichen Aus- und Fortbildung im Ausland

## **Erklärung**

Hiermit erkläre ich, Michael Kolbe, an Eides statt, daß ich die vorliegende Arbeit selbstständig, ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus anderen Werken wörtlich oder inhaltlich übernommenen Daten, Fakten und Konzepte sind unter der Angabe der entsprechenden Quelle gekennzeichnet.

Halle (Saale), den 14. Mai 2002

Michael Kolbe