

**HAMBURGER
SYNCHROTRONSTRAHLUNGSLABOR**

HASYLAB

am

Deutschen Elektronen-Synchrotron DESY

JAHRESBERICHT 1981

Eigentum der Property of	DESY	Bibliothek library
Zugang: Accessions:	4. FEB. 1982	
Leihfrist: Loan period:	7	Tage days



HASYLAB

HAMBURGER SYNCHROTRONSTRAHLUNGLABOR HASYLAB

am

Deutschen Elektronen-Synchrotron DESY

Jahresbericht 1981

Inhalt

- Vorwort
- Überblick über die Meßplätze
- DASSY (Datennahme-, Auswerte- und Sammel-System)
- Bericht: Europäisches Laboratorium für Molekularbiologie
- An den Experimenten beteiligte Institute
- Verzeichnis der Beiträge der Arbeitsgruppen
 - Atom- und Molekülphysik
 - Festkörper- und Oberflächenphysik
 - Strukturuntersuchungen
 - Neue Methoden und angewandte Forschung
- Veröffentlichungen
 - A) Beiträge in Büchern, Zeitschriften und Konferenzproceedings
 - B) Diplomarbeiten, Dissertationen, Habilitationsschriften und Staatsexamensarbeiten (teilweise als Interne Berichte)
 - C) Interne Berichte und Technische Notizen
- Vorträge

HAMBURGER SYNCHROTRONSTRAHLUNGSLABOR HASYLAB

am

Deutschen Elektronen-Synchrotron DESY

Jahresbericht 1981

Der Speicherring DORIS ist eine der stärksten Quellen für Synchrotronstrahlung auf der Welt. Synchrotronstrahlung ist elektromagnetische Strahlung, die von einem gespeicherten Elektronenstrahl mit hoher Intensität abgestrahlt wird. Diese wird im weichen (Vakuum-Ultraviolett) und harten Röntgengebiet für die Untersuchung der elektronischen und geometrischen Struktur der Materie und für technologische Anwendungen genutzt. Durch die hohe Energie der Elektronen in DORIS wird ein Spektrum emittiert, das bis in den sehr harten Röntgenbereich um 100 keV reicht.

Am Deutschen Elektronen-Synchrotron besteht eine mehr als 15jährige Tradition in der Anwendung der Synchrotronstrahlung. Diese fand ihren Niederschlag beim Aufbau der 24 neuen Meßplätze in der großen Experimentierhalle des HASYLAB, an der viele auswärtige Gruppen mit großem Einsatz und teilweise langjähriger Erfahrung mitwirkten. Während am Anfang des Berichtsjahres nur 5 Meßplätze in Betrieb waren, konnten in den letzten Monaten 19 Meßplätze mit Strahlung versorgt werden. Auch wenn viele der ganz neuen Instrumente noch über einen längeren Betrieb hin weiterentwickelt werden müssen, kann man das Jahr 1981 als das Jahr des Übergangs von der Aufbauphase in die Betriebsphase charakterisieren. Das kam auch bei der offiziellen Einweihung des HASYLAB am 29. Januar zum Ausdruck. Die feierliche Einweihung in Gegenwart der Vertreter des BMFT, der Hansestadt Hamburg und vieler befreundeter Institutionen am Vormittag ging am Nachmittag in ein wissenschaftliches Statusseminar über, das ganz im Zeichen der geplanten Experimente stand.

Im Berichtsjahr wurde DORIS ausschließlich für Experimente mit Synchrotronstrahlung betrieben. Die Gesamtbetriebszeit betrug 5040 Stunden, davon war die Maschine 4047 Stunden, d.h. 80 %, für Experimente bereit. Die Zeit war wie folgt verteilt (gerundet): 1 % Maschinenanlauf, 5 % e^+ Strahl für EMBL (European Molecular Biology Laboratory), 13 % e^- Strahl für das Institut für

Festkörpertechnologie der Fraunhofergesellschaft, 25 % EMBL/HASYLAB e^+/e^- Strahl im 12-Stunden-Wechsel, 37 % e^- Strahl für HASYLAB. Besonders fruchtbar waren die letzten beiden Betriebsmonate Oktober/November, da zum Schluß 19 Meßplätze mit Strahlung versorgt wurden. An den Experimenten waren insgesamt 226 Wissenschaftler, Ingenieure und Techniker beteiligt. Davon waren überwiegend ständig in Hamburg anwesend 61 Personen (einschließlich Diplomanden und Doktoranden der Universität Hamburg), 165 Gäste kamen während der Messungen von außerhalb. (Diese Zahlen beinhalten nicht die EMBL-Experimente und nicht die Untersuchungen der Fraunhofergesellschaft.)

Wie bisher hatte HASYLAB enge Kontakte mit der Außenstelle des Europäischen Labors für Molekularbiologie, EMBL. Ein Meßplatz von EMBL in der HASYLAB Halle ging bereits in Betrieb, zwei weitere sind im Aufbau. Dort wird in Zukunft auch der Schwerpunkt der EMBL-Aktivität liegen, so daß künftig in Hauptbenutzerzeiten für Synchrotronstrahlung nur noch Elektronen gespeichert zu werden brauchen.

Außerdem bestehen gute Kontakte zur Fraunhofergesellschaft, die in einem eigenen Labor am DORIS gemeinsam mit der Industrie Kopierverfahren für Mikrostrukturen entwickelt. Mit der Berliner Speicherring GmbH für Synchrotronstrahlung, BESSY, werden Fragen von gemeinsamem Interesse regelmäßig beraten.

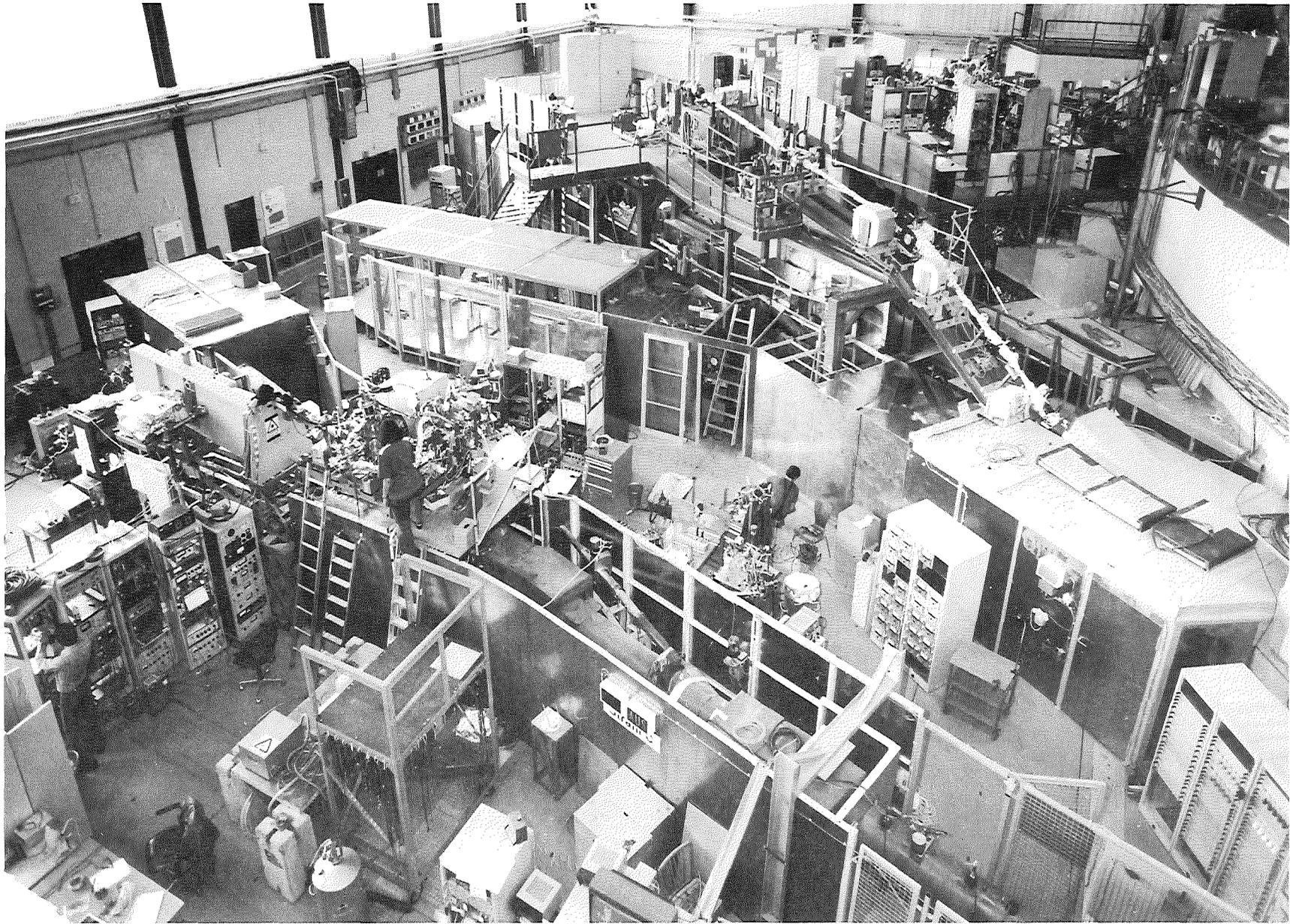
Während sich in der Aufbauphase die fehlende Kapazität bei der viel zu kleinen Stammanschaft von HASYLAB durch Vergabe von Aufträgen an Fremdfirmen und Verlagerung des Geräteaufbaus an die beteiligten Institute etwas ausgleichen ließ, macht sich dieser Mangel jetzt in der Betriebsphase drastisch bemerkbar. Die große Zahl der auswärtigen Nutzer konnte nicht immer optimal betreut werden, und die Beseitigung technischer Pannen war nicht immer - wie es ein effizienter Experimentierbetrieb erfordert - sofort möglich. Die Sorgen, daß das vom Konzept her allen qualifizierten Experimenten offenstehende Labor so nicht betrieben werden kann, wie es im Interesse der immer wachsenden Gemeinde von Nutzern geschehen sollte, hat uns auch 1981 nicht verlassen. Mit letztlich unbefriedigenden Improvisationen über eine geringe Zahl von Zeitstellen wird versucht, das Nötigste zu tun.

Wie in den vergangenen beiden Jahren haben die einzelnen Gruppen über ihre Arbeiten in kurzen Beiträgen berichtet. Der bei weitem größte Teil kann erste Ergebnisse vorstellen. Darunter sind viele hervorragende neue Untersuchungen,

die zeigen, daß das mühsam aufgebaute Instrumentarium die Anstrengung gelohnt hat und HASYLAB zur Zeit auf vielen Gebieten international voll konkurrenzfähig ist.



Einweihung von HASYLAB am 29. Januar 1981 -
Ansprache von Min.Dir. Dr. Lehr (Vorsitzender
des DESY Verwaltungsrats)



BLICK IN DIE HASYLAB HALLE - AUGUST 1981

Überblick über die Meßplätze

Tabelle 1: Meßplätze für Photonenenergien 5-50 eV

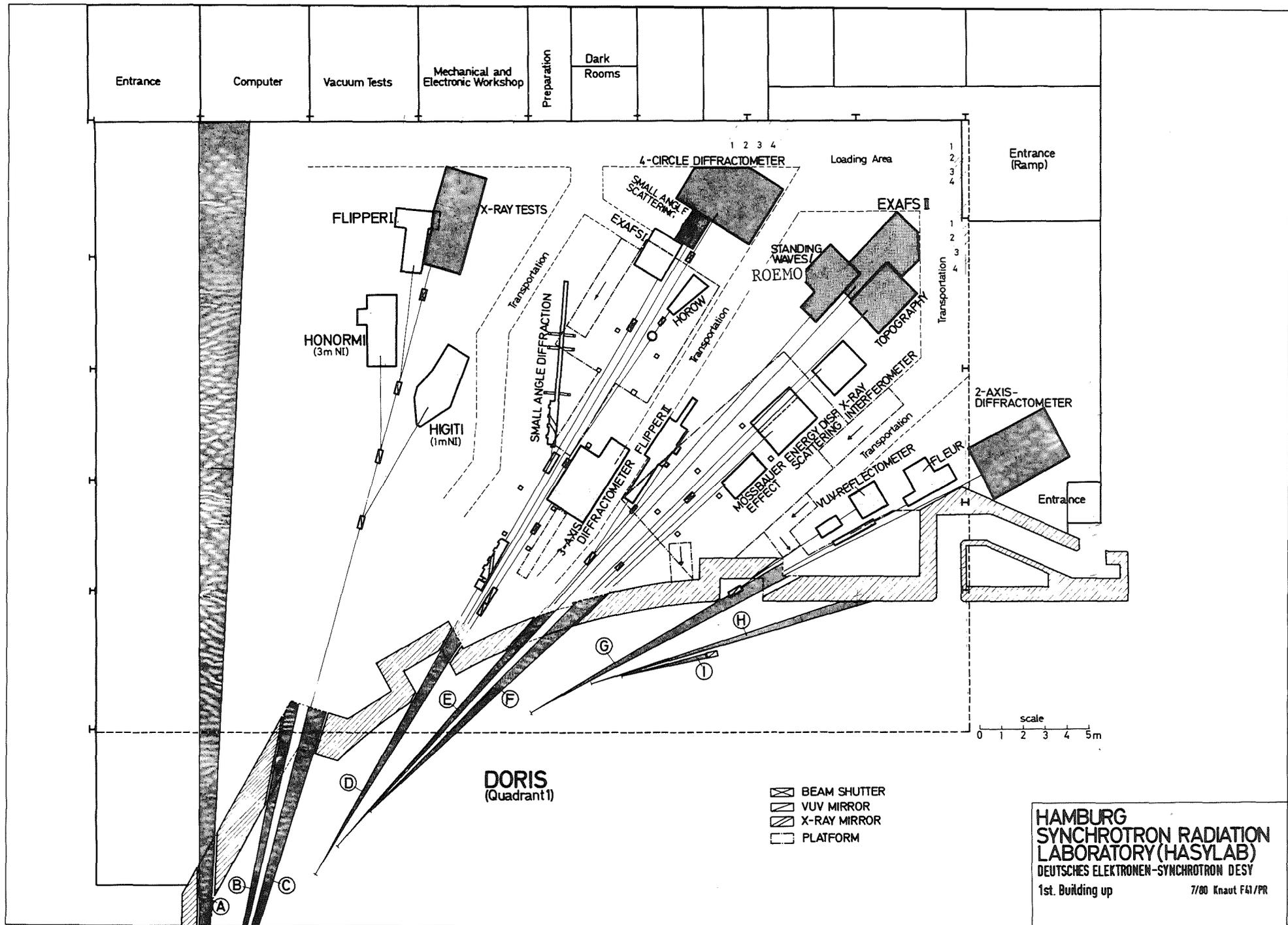
Meßplatz	Bereich [eV]	horizontaler Anteil am Synchrotron- strahl [mrad]	an Planung, Auf- bau u. Nutzung beteiligte Institute
1 HONORMI 3 m Monochromator für hochaufgelöste Spektroskopie (in Betrieb)	5-35	1	HASYLAB U München U Kiel U Kaiserslautern U Hamburg
2 HIGITI 1 m Monochromator für Fluoreszenz- spektroskopie (in Betrieb)	5-35	1	U Hamburg U Kaiserslautern FU Berlin HASLAB
3 SUPERLUMI 2 m Monochromator für Fluoreszenz- und Photoemissions- spektroskopie (in Betrieb)	5-35	50	U Kiel U Hamburg
4 1 m Seya Monochromator mit Elektronenspektrometer für winkelaufgelöste Photoemission (in Betrieb)	5-50	6	HASYLAB U Hamburg verschiedene Kollaborationen
5 Weißer Strahl für Zeitauflösung (im Aufbau)	2-10		HASYLAB MPI Göttingen

Tabelle 2: Meßplätze für Photonenenergien 20-1000 eV

Meßplatz	Bereich [eV]	horizontaler Anteil am Synchrotron- Strahl [mrad]	an Planung, Auf- bau u. Nutzung beteiligte Institute
1 FLIPPER I bei variablem Winkel arbeitender Mono- chromator für Photo- emissionsmessungen (in Betrieb)	20-400	1	U Hamburg
2 FLIPPER II bei variablem Winkel arbeitender Mono- chromator für Photo- emissionsmessungen (in Betrieb)	20-400	2	MPI Stuttgart
3 Toroidgittermono- chromator für Photoemission an Atomen und Molekülen (in Betrieb)	30-250	10	U Hamburg U Freiburg
4 GLEISPIMO-VUV Reflektometer bei variablem Winkel arbeitender Monochro- mator für Reflexions- messungen (in Betrieb)	20-300	1	U Hamburg HASLAB
5 HOROW 2 m-Rowland- monochromator (in Betrieb)	20-400	1	U Hamburg
6 FLEUR 2 m-Rowland für für Röntgenfluoreszenz (im Aufbau)	20-400	1	U München

Tabelle 3: Röntgenmeßplätze

	Meßplatz	horizontaler Anteil am Synchrotronstrahl mrad	an Planung, Aufbau und Nutzung beteiligte Institute
1	2-Achsen-Diffraktometer (in Betrieb)	3	U Dortmund U Saarbrücken
2	4-Kreis-Diffraktometer (in Betrieb)	1	U Göttingen und verschiedene Kollaborationen
3	3-Achsen-Diffraktometer (in Betrieb)	1	U Kopenhagen Risø Nat.Res.Inst.
4	Röntgentopographie (in Betrieb)	2	Fritz-Haber-Inst. U Berlin HASYLAB
5	Energiedispersive Röntgenbeugung (in Betrieb)	2	U Kopenhagen Risø Nat.Res.Inst. HASYLAB
6	Fokussierter Röntgenstrahl für EXAFS (II) (im Aufbau)	4	U Kiel und verschiedene Kollaborationen
7	RÖMO Röntgenmonochromator ohne Fokussierung (in Betrieb)	2	KFA-Jülich HASYLAB
8	Proteinkristallographie (im Aufbau)	2	EMBL
9	Kleinwinkelbeugung (in Betrieb)	1	EMBL
10	Fokussierter Röntgenstrahl für EXAFS (im Aufbau)	4	EMBL
11	Teststand für Mößbauereffekt (in Betrieb)	2	U Hamburg
12	Röntgeninterferometer (in Betrieb)	1	U Dortmund
13	Röntgenteststand (in Betrieb)	1	HASYLAB



DASSY (Datennahme- Auswerte- und Sammel-System im HASYLAB):

O.Beimgraben, HASYLAB

G.Sprüssel, Universität Kiel

ABB.1 zeigt die Rechnerkonfiguration im HASYLAB. Zur Zeit sind in der Halle ca. 12 Experimenterechner (PDP 11/03 bzw. 11/23) (EC's) angeschlossen. Ein weiterer EC steht im Rechnerraum des Bürogebäude für Auswertung zur Verfügung und ein weiterer für Hard- und Software-Entwicklungen. Diese besitzen ebenfalls eine MININET-Verbindung zur 11/34. An der 11/34 ist seit Dez.81 ein Magnetband-Laufwerk (800/1600 BpI) angeschlossen. Dieses kann z.Z. nur unter RT11 angesprochen werden. Auch bestehen z.Z. noch nicht endgültig geklärte Kompatibilitätsschwierigkeiten zu anderen Laufwerken. Die Software-Installation in RSX11M soll Anfang 82 erfolgen.

A) Auf dem Software-Sektor ist folgender Stand erreicht: Die beiden Datenerfassungs- und -verarbeitungsprogramme "EXPER" und "DSPLAY", die auf der PDP11/45 für die Experimente HONORMI, FLIPPER I und HIGITY am Strahl C laufen, wurden dahingehend erweitert, daß beide Programme gleichzeitig im Rechner laufen können. Die Datennahme erfolgt dabei mit hoher Priorität im Vordergrund ("EXPER") und die Spektrenbearbeitung im Hintergrund ("DSPLAY"). In "DSPLAY" wurden zusätzliche Möglichkeiten bei den arithmetischen und den Glättungsroutinen eingebaut, außerdem weit mehr abrufbare Hilfsinformation zur Bedienung des Programmes, so daß es weitgehend selbst erklärend geworden ist. Außerdem wurde "DSPLAY" auch für die bei HASYLAB nun verwendeten TEKTRONIX (bzw. mit ihnen kompatiblen) Terminals neu programmiert, so daß dieses umfassende Spektrenbearbeitungsprogramm seit Mitte des Jahres auch an allen EC's eingesetzt werden kann. Auch das von der 11/45 stammende Plotterprogramm "PLOTT" für den HP7221A-Plotter von HEWLETT-PACKARD kann an den EC's uneingeschränkt eingesetzt werden. Zu beachten ist allerdings, daß alle angebotenen Spektrenverarbeitungsprogramme nur das Standard-HASYLAB-Datenformat benutzen. Dazu existiert das leicht erweiterte Subroutine-Paket "IRDWRT".

Die Version 4 von RT11 ist mit den erforderlichen Patches versehen und wird bei den meisten EC's auch schon eingesetzt. Es bietet folgende Verbesserungen:

DASSY: Daten- Auswerte- und Sammel-System im HASYLAB (Stand: Dec 81)

DESY - IBM Channel

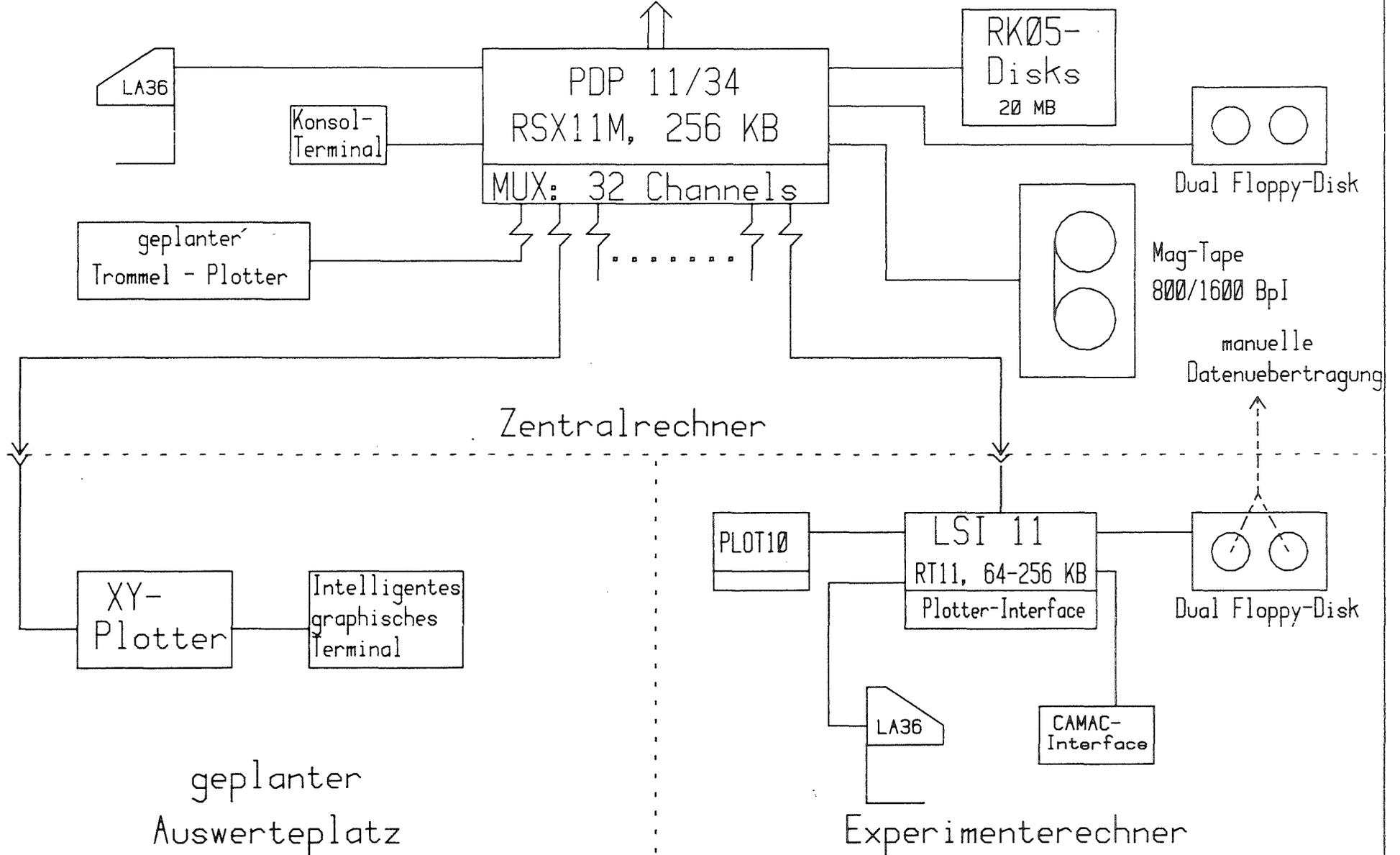


Fig. 1

Man kann den Ausdruck von Text auf dem Drucker über einen sog. Spooler laufen lassen, so daß man während des Druckens mit dem Rechner weiterarbeiten kann.

Man kann Datensätze gegen versehentliches Löschen schützen. Mit dem Vorhandensein eines VT100-Terminals (auch mit PLOT10-Grafik-Zusatz lieferbar) kann man auch einen Full-Screen-Editor benutzen, der das Erstellen von Quelltext erheblich vereinfacht.

Die Unterprogramm-Bibliothek "TKLIB" (PLOT10) wurde für den WATANABE Plotter WX4671 erweitert, so daß man jetzt mit denselben Aufrufen auch den Plotter ansprechen kann. Dieses wird durch die Angabe eines einzigen Parameters bei der Grafik-Initialisierung bewirkt und kann im Programm jederzeit wieder umgeschaltet werden. Die Bibliothek hat nun den Namen "GRFLIB". Dazu wurden auch einige Demonstrationsprogramme geschrieben.

Die CAMAC-Bibliothek "CALIB" ist erweitert und korrigiert worden: Es existiert ein 8-Bit-Zugriff in CAMAC, außerdem kann eine BCD-Information jetzt auch mit Vorzeichen und zusätzlichen Info-Bits gelesen werden. Zugriff auf eine nicht CAMAC-Adresse wird jetzt abgefangen. Bei 24-Bit Transfer wird z.Z. die Möglichkeit eingebaut, alternativ zum REALx4-Transfer einen INTEGERx4-Transfer zu wählen.

Für das von uns entwickelte Interrupt-Register (16 Bit) in CAMAC (s.u.) wurde ein umfangreiches Testprogramm entwickelt, das diese Kassette komplett in allen Funktionen durchtestet.

Nach Bau eines Programmiergerätes für EPROM's der Typen 2716 und 2732 in CAMAC durch einen Werkstudenten wurde ein Programm geschrieben, mit dem man diese EPROM's programmieren kann (binär, oktal oder hexadezimal). Da der erste EPROM-Typ bei HASYLAB als Programmspeicher für den Mikroprozessor MC14500 von MOTOROLA in den allgemeinen Pumpensteuerungen und in der Vakuuminterlocksteuerung benutzt wird, wurde ein Crosscompiler speziell für diesen Mikroprozessor entwickelt. Dieser ermöglicht es jetzt der technischen Gruppe von HASYLAB, relativ einfach und schnell neue Programme für diese Steuerungen zu entwickeln.

B) Auf dem Hardware-Sektor ist folgender Stand erreicht:
Die Entwicklung eines Interrupt-Register in CAMAC mit 16 unabhängigen Eingängen wurde abgeschlossen. Diese Kassette hat im Vergleich zu industriellen Geräten ähnlicher Art folgenden Vorteil:
Neben der üblichen Programmierbarkeit (jeder Eingang kann einzeln maskiert werden) bietet sie speziell für FORTRAN-Programmierer die Möglichkeit, die einzelnen Eingänge direkt durch Angabe ihrer Nummer anzusprechen (setzen, löschen, maskieren). Dadurch wird der Programmieraufwand in FORTRAN erheblich verringert.

Die Verkabelung zwischen den LSI-Kleinrechnern in der Halle und der PDP11/34 im Rechnerraum wurde inzwischen nahezu abgeschlossen.

Für den CAMAC-Prozessor der 11/45 wurde ein Kontroll-Panel gebaut, das ständig alle Informationen auf dem CAMAC-Highway festhält. Damit steht bei auftretenden Fehlern im CAMAC-System ein wesentliches Hilfsmittel zur schnellen Erkennung zur Verfügung.

Für Stepmotoren bis zu einer Stromaufnahme von 1.5 A ist die Entwicklung einer Endstufe mit elektronischer Untersetzung abgeschlossen. Sie ermöglicht durch eine SINUS- COSINUS-förmige Ansteuerung den ruhigen Lauf wie bei einem Gleichstrommotor. Außerdem wird auch gleichzeitig die Drehgeschwindigkeit untersetzt.

Zur Zeit werden folgende Entwicklungen betrieben:

Ein 4-Kanal-Addierspeicher in CAMAC, der durch einen einzigen CAMAC-Befehl den Inhalt von ADC's oder TDC's in CAMAC zur Verbesserung der Statistik aufaddieren kann. Ein vergleichbarer Vorgang im Rechner durch ein Programm erfordert mindestens die doppelte Zeit. Damit kann also eine deutliche Beschleunigung des Meßverfahrens erreicht werden.

Ein Interface, um das Digitalisiergerät, das z.Z noch an einer alten PDP8E arbeitet, an einen EC anzuschließen.

Ein Mikroprozessor-gesteuertes V24-Interface, um den vorhandenen CALCOMP-Trommelplotter in wesentlichen Funktionen analog zu den WATANABE-Plottern ansteuern zu können.

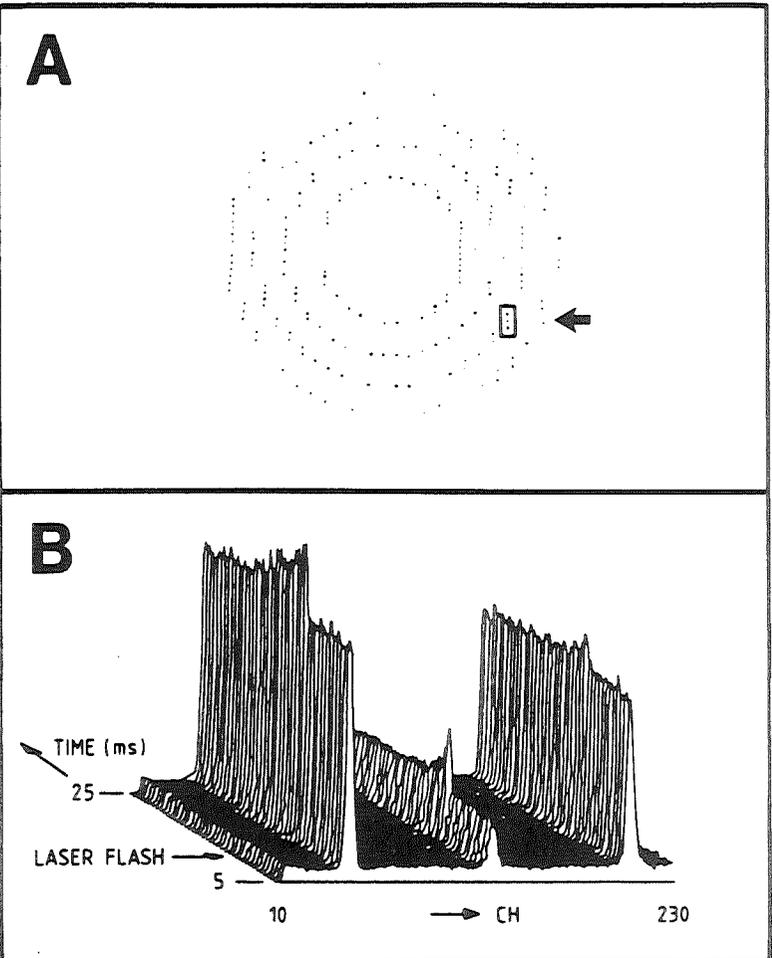
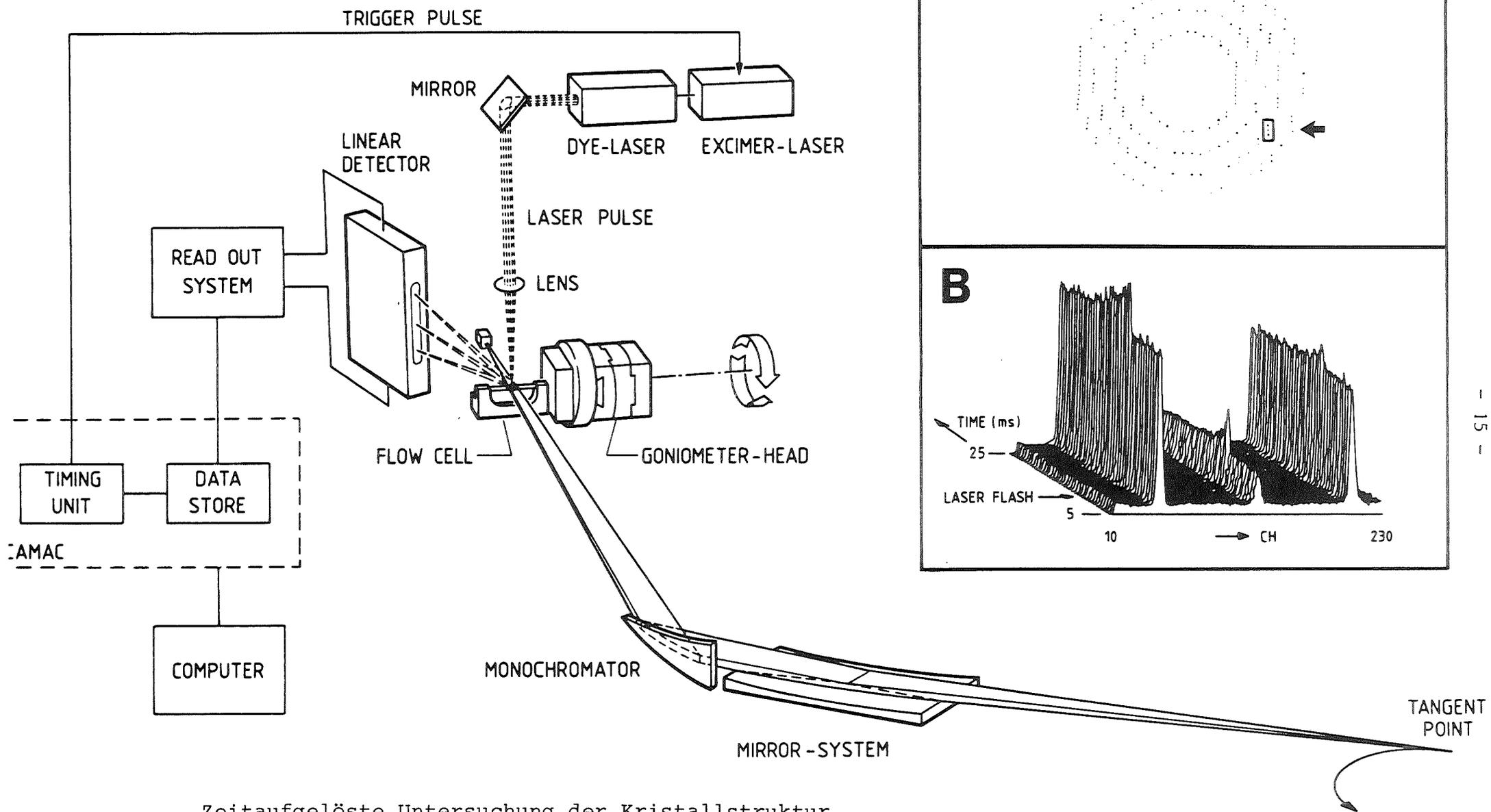
Europäisches Laboratorium für Molekularbiologie
- Außenstelle Hamburg -

Die Entwicklung der neuen EMBL-Instrumente im HASYLAB hat im zweiten Halbjahr 1981 schnelle Fortschritte gemacht. Eine neue, doppelfokussierende (Monochromator-Spiegel) Kamera wurde im Oktober in Betrieb genommen. Die Kamera ist mit einem symmetrisch geschnittenen Ge(111)-Monochromator und (stromabwärts) mit einem segmentierten Spiegel ausgerüstet. Erste Ergebnisse zeigen, daß mit dieser Anordnung eine noch höhere Intensität und ein günstigeres Signal-zu-Untergrund-Verhältnis erreicht wird als an der bis jetzt verwendeten Kamera X13 im Bunker IV. Die Fokusgröße ist $0.8 \times 1 \text{mm}^2$. Weitere, doppelfokussierende Instrumente (für Proteinkristallographie und EXAFS) sind im Aufbau. Der Schwerpunkt der EMBL-Experimente soll nach dem Wiederbeginn von DORIS im HASYLAB liegen.

Forschungsanwendungen wurden 1981 im Bunker IV in den folgenden Bereichen durchgeführt :

- zeitaufgelöste Messungen an Muskeln und Proteinaggregationen
- Proteinkristallographie (insbesondere bei tiefen Temperaturen und zeitaufgelöste zur Untersuchung dynamischer Prozesse)
- EXAFS (vor allem an Zn- und Cu-Proteinen)
- Ultra-Kleinwinkelstreuung; eine neue Kamera des Bonse-Hart-Typs mit zwei Kristallen wurde aufgebaut. Zellabmessungen bis 20 000 Å können aufgelöst werden
- Anomale Kleinwinkelstreuung.

Weiter wurde erheblicher Fortschritt bei der Entwicklung ortsauflösender Röntgendetektoren erreicht. Zwei Systeme



Zeitaufgelöste Untersuchung der Kristallstruktur von CO-Myoglobin während der Rekombination des Liganden nach Laserpuls-Photolyse.
(Instrument X11/EMBL)

mit Parallelauslösung für Zählraten bis zu 20 MHz wurden in Betrieb genommen. Erste erfolgreiche Testanwendungen eines Flächenzählers wurden durchgeführt.

Diese Arbeiten werden im Jahresbericht des EMBL ausführlich beschrieben.

An der Vorbereitung und Durchführung von Experimenten beim Hamburger
Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB sind folgende Institute beteiligt:

Rhein.-Westf. TH Aachen

Institut für Kristallographie

H. Arnold
K. Kosten

University of Aarhus

Institute of Physics

N. Hertel
B. Johansson

Freie Universität Berlin

H. Baumgärtel	G. Hildebrandt
H. Bradaczek	G. Kaindl
J. Feldhaus	M. Kratzat
K.H. Frank	H. Oertel
G. Jähnig	G. Wortmann

Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft Berlin

A.M. Bradshaw	C. Mariani
Y. Chikaura	H.U. Middelman
K. Horn	J.D. Stephenson
M. Iwan	M. Umeno

Hahn-Meitner-Institut für Kernforschung, Berlin

H. Böttcher	W.F. Schmidt
N.K. Hansen	J.R. Schneider

Universität Bonn

Mineralogisch-Petrologisches Institut
Lehrstuhl für Mineralogie und Kristallographie

E. Hinze	W. Nuding
J. Lauterjung	G. Will

Universität Dortmund

Lehrstuhl für Experimentalphysik I

U. Bonse	K. Olthoff-Münter
I. Hartmann-Lotsch	W. Schülke
H. Lotsch	Chr. Steinbach

Universität Düsseldorf

Phys. Institut

K. Syassen

Universität - GH Duisburg

Labor für Festkörperphysik

A. Goldmann

Universität Freiburg

Fakultät für Physik

H. Derenbach

W. Kronast

R. Malutzki

W. Mehlhorn

V. Schmidt

Universität Göttingen

Mineralogisch-Kristallographisches Institut

V. Kupcik

A. Pähler

I. Valena

M. Wendschuh

R. Wulf

MPI für Biophysikalische Chemie, Göttingen

Abteilung Molekulare Biologie

T.M. Jovin

G. Striker

MPI für Experimentelle Medizin, Göttingen

Abteilung Chemie

W. Saenger

Institut Laue-Langevin Grenoble

H.-J. Lauter

B. Dorner

European Molecular Laboratory EMBL

Außenstelle Hamburg

H.-D. Bartunik

J. Bordas

M.-J. Koch

J.C. Phillips

H. Stuhrmann

Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY, Hamburg
Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB

O. Beimgraben	G. Materlik
R. Bruhn	H. Möller
W. Graeff	V. Saile
U. Hahn	R. Zietz
E.E. Koch	

Universität Hamburg

Institut für Angewandte Physik

H.-G. Danielmeyer	P. Klews
M. Harsdorff	D. Pruss
G. Huber	

Institut für Anorganische und Angewandte Chemie

A. Knöchel	G. Tolkiehn
W. Kaminsky	H.G. Zachmann
W. Petersen	G. Elsner

II. Institut für Experimentalphysik

J. Bahrtdt	R. Kammerer
J. Bahrth	C. Kunz
S. Bernstorff	H.-J. Lau
K. Boller	M. Lübcke
R. Engelhardt	T. Moeller
C.-A. Feldmann	T. Permien
J.-H. Fock	E. Roick
P. Funke	W. Rose
E. Gerdau	R. Ruffer
F. Gerken	E. Schmidt
C.-C. Glüer	J. Schmidt-May
G. Gründler	H. Schröder
P. Gürtler	F. Senf
R.-P. Haelbich	F. Slottke
S. Hoermann	B. Sonntag
H. Hogrefe	K.-G. Wagner
W. Jark	H.-E. Wetzell
B. Jordan	H. Winkler
	G. Zimmerer

Harvard University, Cambridge, Mass., USA

J. Collett
P. Persham

University of Helsinki, Dept. of Physics, Finland

M. Blomberg
O. Keski-Rahkonen
K. Naukkarinen
P. Suortti
T. Tuomi

Instrument Laboratory, Technical Research Centre of Finland

V. Kelhä

University of Jerusalem, Israel

U. Asaf
R. Reininger
I.T. Steinberger

Kernforschungsanlage Jülich

B. Lengeler

Universität Kaiserslautern

Fachbereich Physik

J. Ganz	B. Lewandowski
J. Imschweiler	W. Ruf
H. Hotop	H. Schmoranzner

Forschungsanstalt Karlsruhe

Europäisches Institut für Transurane

U. Benedict

Universität Kiel

Institut für Experimentalphysik

H.U. Aust	P. Rabe
W. Böhmer	N. Schwentner
R. Haensel	M. Skibowski
W. Malzfeldt	G. Sprüssel
N. Niemann	K. Völkert

University of Copenhagen, Denmark

J. Staun-Olsen
S. Steenstrup

Linköping University, Linköping, Schweden

A. Flodström
L.I. Johansson

Massachusetts Inst. Tech. (MIT), USA

J.D. Litster

Haldor Topsoe Res. Lab., Lyngby, Dänemark

B. Clausen

Technical University of Denmark, Lyngby

L. Gerward

Universität München

Sektion Physik

T. Bolze	R. Schnell
R. Eisberg	W. Steinmann
H. Peisl	W. Weber
H. Penzkofer	G. Wiech
D. Rieger	

Technische Universität München

Physik Department

R.L. Mößbauer	C. Hermes
F. Parak	

Gesamthochschule Paderborn

Fachbereich 6 - Experimentalphysik

W.A. Großhans	H. Olijnyk
W.B. Holzapfel	

Université Paris-Nord

LIMPH, Villetaneuse

M.-C. Castex
H. Chergui

Université Paris-Sud

Lab. Phys. Plasmas, Orsay

M. Pouey

CEN Saclay, Gif-sur-Yvette, Frankreich

J. LeCalvé

Risø National Laboratory, Roskilde, Dänemark

J. Als-Nielsen
J. Bohr
B. Buras
F. Christensen

K. Kjaer
B. Lebech
M. Nielsen
A. Skriver

Universität des Saarlandes, Saarbrücken

Fachrichtung 17.5 - Kristallographie

K.-H. Ehses
K. Fischer
S. Heinrich

L. Dietrich
H. Ruppertsberg

CNRS, Equipe de Spectroscopie, St. Etienne, Frankreich

P. Laporte

Karolinska Institute, Stockholm, Schweden

R. Rigler

MPI für Festkörperforschung, Stuttgart

R.D. Bringans
M. Cardona
S.L. Chang
F.S. Han
H.D. Hochheimer
H. Hoehst

R.L. Johnson
L. Ley
J. Reichardt
H. Schulz
A. Werner

Tartu Estonian SSR, UdSSR

I. Kuusmann

Brookhaven National Lab., Upton, N.Y. / USA

J. McTague

Gesamthochschule Wuppertal

Fachbereich 9 - Physikalische Chemie

D. Haaks

Verzeichnis der Beiträge der Arbeitsgruppen

ATOM- und MOLEKÜLPHYSIK

Photoemissionsspektroskopie an Metalldämpfen - Erste Messungen mit dem Toroidgittermonochromator (TGM)

(R. Bruhn, E. Schmidt, H. Schröder, B. Sonntag, K.-G. Wagner, H.-E. Wetzel)

Photoionisation von Barium-Atomen im Bereich der 5p-Anregungen

(B. Lewandowski, J. Ganz, H. Hotop und M.W. Ruf)

Elektronenspektrometrie mit monochromatisierter Synchrotronstrahlung

(H. Derenbach, R. Malutzki und V. Schmidt)

Messung des Alignments von Photoionen

(W. Kronast und W. Mehlhorn)

Messung von Lebensdauern und Stoßlöschquerschnitten selektiv angeregter Zustände des molekularen Wasserstoffs

(H. Schmoranzner und J. Imschweiler)

Elektronische Struktur des Cl₂-Moleküls

(T. Moeller, P. Gürtler, B. Jordan, G. Zimmerer, D. Haaks, J. LeCalvé und M.C. Castex)

Moleküldynamik in Excimer-Systemen

(B. Jordan, G. Zimmerer, D. Haaks, J. LeCalvé und M.C. Castex)

Fragmentation kleiner Moleküle

(H. Baumgärtel, M. Kratzat, H. Oertel)

Partielle Wirkungsquerschnitte und Zustandsdichte-Effekte bei der Photoemission von polykristallinen Aufdampfschichten kleiner organischer und anorganischer Moleküle

(J.-H. Fock, H.-J. Lau, F. Senf und E.E. Koch)

Lichtstarke Vakuum-UV-Strahlführung und Matrixisolationsspektroskopie

(W. Böhmer, R. Haensel, N. Schwentner und H. Wilcke)

UHV-Rowland-Monochromator für Matrixspektroskopie
(M. Lübcke, G. Gründler und B. Sonntag)

Photoeffects in Fluid Xenon
(R. Reininger, U. Asaf, P. Laporte, V. Saile and I.T. Steinberger)

Photoleitung unpolarer organischer Flüssigkeiten
(H. Böttcher und W.F. Schmidt)

FESTKÖRPER- und OBERFLÄCHENPHYSIK

Hochaufgelöste Reflexion und Photoemission im Bereich 5 - 50 eV
(H.U. Aust, G. Sprüssel, K. Völkert und M. Skibowski)

Photoemission aus angeregten Zuständen in festen Edelgasen
(S. Bernstorff, V. Saile, D. Rieger und W. Steinmann)

Erste Ergebnisse an der Lumineszenz-Apparatur SUPERLUMI. Lumineszenz freier
Exzitonen in festen Edelgasen und Alkalihalogeniden
(P. Gürtler, E. Roick, W. Rose und G. Zimmerer)

Ein optimierter Meßplatz für winkelaufgelöste Photoemission im Bereich
 $5 \text{ eV} \leq h\nu \leq 50 \text{ eV}$
(C.-A. Feldmann, R. Engelhardt, T. Permien, M. Iwan, V. Saile und E. E. Koch)

Winkelaufgelöste Valenzband-Photoemission von Pb-Phthalocyanin-Filmen auf
Cu(100)-Flächen
(T. Permien, R. Engelhardt, C.-A. Feldmann, M. Iwan und E. E. Koch)

Gitterrelaxationsprozesse nach Anregung von Rumpfexzitonen in Lithium- und Na-
triumhalogeniden
(J. Bahrtdt, J. Barth, F. Gerken, C. Kunz)

Elektronische Struktur von Metalloberflächen
(J. Barth, F. Gerken, A. Flodström, L. Johansson, R. Kammerer, C. Kunz)

Interschalen-Wechselwirkung in Photoemission an Festkörpern
(J. Barth, F. Gerken, C. Kunz, J. Schmidt-May und F. Slotke)

Kantennahe Struktur von α - und λ -Cer

(B. Lengeler, G. Materlik und J. Müller)

Röntgenabsorptionsspektroskopie am Valenzübergang von SmS

(K.H. Frank, J. Feldhaus, G. Wortmann, G. Kaindl und G. Materlik)

Photoemissionsuntersuchungen zur elektronischen Struktur von adsorbiertem und festen Pyridin auf Silber

(J.-H. Fock, F. Gerken, J. Schmidt-May und E.E. Koch)

Beobachtung des Überganges vom adiabatischen zum "sudden"-Bereich im Photoelektronenspektrum des Nickel 3p-Rumpfniveaus

(M. Iwan, K. Horn, C. Mariani und H.U. Middelmann)

Untersuchungen von Satellitenstrukturen im Valenz-Photoelektronenspektrum von CO auf Cu(110)

(H.U. Middelmann, C. Mariani, M. Iwan und K. Horn)

Oberflächen- und volumenempfindliche Photoemission an Cu: "shake-up"-Strukturen im Valenzband- und Rumpfniveaubereich

(M. Iwan und R. Engelhardt)

Photoemissions-Untersuchungen mit Synchrotronstrahlung

(R.D. Bringans, H. Höchst, R.L. Johnson, L. Ley und J. Reichardt)

Aufbau eines Photoemissionsmeßplatzes mit dem Planspiegelmonochromator

FLIPPER II

(R.L. Johnson, H. Kölln, L. Ley und J. Reichardt)

Testexperimente mit einem zweidimensionalen Analysator für winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie an Festkörperoberflächen

(D. Rieger, V. Saile, R. Schnell und W. Steinmann)

Emissionsspektroskopie im Bereich der ultraweichen Röntgenstrahlen

(R. Eisberg und G. Wiech)

Abstandsabhängige Abschirmeffekte bei Elektronenemission aus physisorbierten Kr-Schichten auf Cu(110)

(T. Mandel, G. Kaindl, M. Iwan, K. Horn, C. Mariani und H. U. Middelmann)

STRUKTURUNTERSUCHUNGEN

Triple Axis Spectrometer (Reports of the Groups from Risø, Denmark)

1. Liquid Crystals

1.1 Smectic-A Surface of the Nematic and Isotropic Bulk Phase

(J. Als-Nielsen, F. Christensen and P.S. Persham)

1.2 Hexagonal Layer Stacking in Smectic-B phase of 70.7

(J. Collett, P.S. Persham, J.D. Litster and J. Als-Nielsen)

2. Physisorbed Films on Graphite

2.1 Pressure Induced Commensurate-Incommensurate Transition in Kr-Monolayers on Graphite

(M. Nielsen, J. Als-Nielsen, J. Bohr and J.P. McTague)

2.2 Melting of 2-dimensional Crystals

(M. Nielsen, J. Als-Nielsen, J. Bohr and J.P. McTague)

2.3 Structure of CF₄ Monolayers on Graphite

(K. Kjaer, M. Nielsen and H.J. Lauter)

High Resolution Powder Diffraction with Synchrotron Radiation

(B. Buras and F. Christensen)

EXAFS Untersuchung der Nahordnung in Cu₃Au, CoPt₃ und Ni₄Mo

(A. Schulz und B. Lengeler)

EXAFS Untersuchung an Zr-Al Katalysatoren für die Polymersiation von Ethylen

(H. Hähnsen, W. Kaminski und B. Lengeler)

EXAFS Untersuchung der Struktur von Co-Mo Wasserstoffentschweflungs-Katalysatoren

(B.S. Clausen, H. Topsøe, R. Candia, J. Villadsen, B. Lengeler, J. Als-Nielsen und F. Christensen)

EXAFS-Untersuchungen unter hydrostatischen Drucken an RbCN

(A. Werner, H.D. Hochheimer und B. Lengeler)

EXAFS-Untersuchungen an elektronenbestrahltem Al(Ag) und Al(Zn)

(W. Weber, T. Bolze und H. Peisl)

Aufbau des Meßplatzes EXAFS II und Röntgenabsorptionsuntersuchungen

(R. Haensel, W. Malzfeldt, W. Niemann und P. Rabe)

Meßplatz für Röntgen-Interferenz-Topographie mit Synchrotronstrahlung

(H. Bradaczek, G. Hildebrandt, G. Jähnig und J.D. Stephenson)

An Interpretation of White (Synchrotron X-Radiation Laue (Topograph) Patterns
by Means fo the Gnomonic Projection

(J. D. Stephenson)

Stroboskopische Untersuchung von Schwingquarzen mit Synchrotronstrahlung

(C.-C. Glüer, W. Graeff und H. Möller)

Multistereo Synchrotron X-Ray Topography

(T. Tuomi, V. Kelhä, K. Naukkarinen and M. Blomberg)

Development and Applications of the Synchrotron X-Ray Topography

(T. Tuomi, V. Kelhä, K. Naukkarinen and M. Blomberg)

CO₂-Laser Annealing of Ion-Implanted Silicon

(K. Naukkarinen, T. Tuomi, M. Blomberg, M. Luomajärvi and E. Rauhala)

X-Ray Scattering Factors for Large Scattering Vectors

(L. Gerward and J. Staun-Olsen)

High Pressure Diffraction of YbH₂ up to 28 GPa

(J. Staun-Olsen, B. Buras, L. Gerward, B. Johansson, B. Lebech, A. Skriver and
S. Steenstrup)

Diffraction Studies of US at High Pressure up to 40 GPa

(U. Benedict, L. Gerward, J. Staun Olsen and S. Steenstrup)

Röntgenbeugung unter hohen Drucken und Temperaturen

(E. Hinze, G. Will, W. Nuding und J. Lauterjung)

Energiedispersive Röntgenbeugung unter hohen Drücken
(W.A. Großhans, H. Olijnyk und W.B. Holzapfel)

Untersuchungen mit stehenden Röntgeninterferenzfeldern
(P. Funke, N. Hertel, G. Materlik und J. Zegenhagen)

Zeitaufgelöste Untersuchungen von Laserpuls-induzierten Gitterrelaxationen an
Cer-Terbium-Pentaphosphaten
(D. Pruss, G. Huber- H.G. Danielmeyer und H.D. Bartunik)

Fünfkreis-Diffraktometer mit durchstimmbarer Wellenlänge für Synchrotronstrahlung
(V. Kupcik, A. Pähler, I. Valena, M. Wendschuh und R. Wulf)

Röntgendiffraktionsmessung an NASICON⁺ ($\text{Na}_{1+x}\text{Zr}_2\text{Si}_x\text{P}_{3-x}\text{O}_{12}$) Einkristallen
(H. Kohler und H. Schulz)

Untersuchung der Kristallisation und des Schmelzens von Polymeren
(G. Elsner, W. Prieske, R Gehrke, H.G. Zachmann, J. Bordas und M. Koch)

Eine Guinier-Heizkamera für Synchrotronstrahlung
(K. Kosten und H. Arnold)

NEUE METHODEN und ANGEWANDTE FORSCHUNG

Röntgeninterferometer
(U. Bonse, I. Hartmann-Lotsch, H. Lotsch, K. Olthoff-Münter)

Röntgenfluoreszenzanalyse mit Synchrotronstrahlung
(A. Knöchel, W. Petersen und G. Tolkiehn)

High Resolution Inelastic Scattering of X-Rays
(Bruno Dorner, H. Peisl, T. Bolze und H. Penzkofer)

Zweiachsendiffraktometer
(U. Bonse, L. Dietrich, U. Dretzler, K. Fischer und S. Heinrich)

Ein Pulver-Polarimeter für Synchrotron-Röntgenstrahlung

(G. Materlik und P. Suortti)

Arbeiten am VUV-Reflektometer

(K. Boller, R.-P. Haelbich, H. Hogrefe, W. Jark und C. Kunz)

Untersuchung zur Herstellung von Trenndüsenstrukturen mittels Röntgenlithographie

(H. Betz)

Zeitaufgelöste Fluorimetrie

(G. Striker, T.M. Jovin, I. Pecht und R. Rigler)

Summary of the Research Activity of Chang and Coworkers at HASYLAB, DESY

(Shih-Lin Chang, Fu-Son Han and Arno Pähler)

Erzeugung einer räumlich kohärenten, monochromatischen Röntgenlichtquelle

(S.-L. Chang)

Testmessungen zur Röntgen-Energie-Verlustspektroskopie mit Synchrotronstrahlung

(W. Schülke und Chr. Steinbach)

Mößbauereffekt mit Synchrotronstrahlung als Quelle

(E. Gerdau, S. Hörmann, R. Ruffer, H. Winkler, M. Harsdorff und P. Klews)

Kernresonanzexperimente mit Synchrotronstrahlung

(C. Hermes, F. Parak, R.L. Mößbauer und H. Stuhmann)

A T O M - u n d M O L E K Ü L P H Y S I K

Photoemissionsspektroskopie an Metalldämpfen - Erste Messungen mit dem Toroidgittermonochromator (TGM)

R. Bruhn⁺⁾ , E. Schmidt, H. Schröder, B. Sonntag, K.-G. Wagner, H.-E. Wetzel
II. Inst.Exp.Phys. der Universität Hamburg und ⁺⁾ DESY, Hamburg

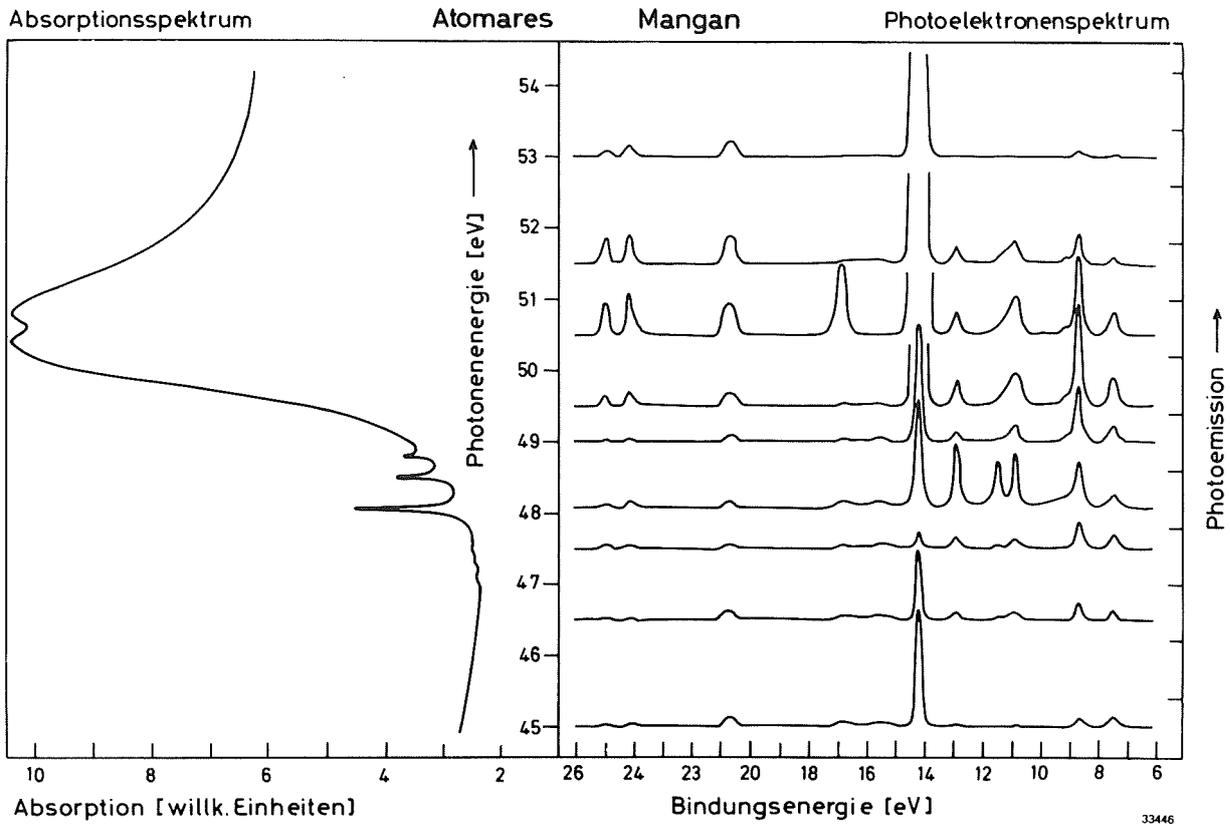
In Zusammenarbeit mit dem Stammpersonal wurde in den beiden ersten Monaten des Berichtjahres die Strahlführung D4 im HASYLAB mechanisch und vakuumtechnisch aufgebaut, so daß an beiden zugehörigen Meßplätzen kurz nach Beginn der Strahlzeit mit Tests begonnen werden konnte. Die langwierige Justierung der drei Vorsepiegel sowie der Gitter und Spalte des TGM konnte zum Ende der ersten Meßzeit im April abgeschlossen werden. Im Laufe des Monats Mai wurde der Strahl über den vierten Spiegel bis in die Analysatorkammer geführt, so daß Primärspektren und Edelgas- bzw. Folienabsorptionsspektren gewonnen werden konnten.

Aus diesen Messungen geht hervor, daß der TGM z.Zt. im Energiebereich von 30 bis 150 eV sinnvoll eingesetzt werden kann, wobei die im Auflösungsintervall ($\Delta E/E \approx 0.003$) erreichbaren Photonenflüsse im Mittel 2×10^{11} phot/sec. betragen (DORIS-Betrieb mit 100 mA). Tests der Auflösung zeigten, daß die unter Berücksichtigung des Einflusses der Spalte und der wellenlängenabhängigen Gitterkorrektur berechneten Werte erreicht wurden. Für die nächsten Monate ist anhand der vorliegenden Daten eine genaue Analyse der Reflexions- und Abbildungseigenschaft des gesamten optischen Systems geplant. Ziel ist eine Erhöhung der Intensität am Probenort. Dies wäre auch die Voraussetzung für den Einsatz des 3000 1/mm-Gitters oberhalb 150 eV, welches sich derzeit zur Nachprüfung seiner niedrigen Effektivität beim Hersteller befindet.

Im Anschluß an die Monochromatortests gelang es in sehr kurzer Zeit, den in der Gruppe konstruierten Zylinderspiegel-Elektronenanalysator zu optimieren. Die theoretische Auflösung $(\Delta E/E)_{CMA}$ von 0,8% findet sich bestätigt. Verschiedene Maßnahmen zur Untergrundreduktion (Zählrate schließlich < 1 ct/s) erlaubten es, im Juli die atomare Photoelektronenspektroskopie mit Messungen an Xe und Kr aufzunehmen. Zu diesem Zeitpunkt war auch der im Rahmen einer Diplomarbeit entwickelte Hochtemperatur-Effusionsofen einsatzbereit, so daß die eigentlichen Photoemissionsmessungen an Metalldämpfen begonnen werden konnten. In zwei insgesamt achtwöchigen Meßzeiträumen konnten Photoemissionsmessungen an Dämpfen der Metalle Cr, Mn, Cu, Ag und Au durchgeführt werden.

Im Vordergrund des Interesses stand die resonante Photoemission der 3d-Übergangsmetalle im Bereich ihrer 3p-Absorption. Hier führt die Kopplung der Rumpf- und

Valenzanregungen zu drastischen Modulationen sowohl in den Absorptions- als auch in den Photoemissionsspektren. Die Abbildung zeigt dieses Verhalten am Beispiel von Mangan.



Die dominierende Linie bei der Bindungsenergie (E_B) von 14,2 eV entspricht der Kontinuumsanregung $3p^6 3d^5 4s^2 \rightarrow 3p^6 3d^4 4s^2 \epsilon l$. Dieselbe Endkonfiguration ist im Bereich der diskreten 3p-Anregungen (um 50 eV) auch gemäß $3p^6 3d^5 4s^2 \rightarrow 3p^5 3d^6 4s^2 \rightarrow 3p^6 3d^4 4s^2 \epsilon l$ über einen Super-Coster-Kronig-Zerfall erreichbar. Infolge der Wechselwirkung zwischen diskreter und Kontinuumsanregung folgt der zugehörige partielle Wirkungsquerschnitt, gegen die Photonenergie aufgetragen, einem ausgeprägten Fano-Profil. Die schwache $3p^6 3d^5 4s^2 \rightarrow 3p^6 3d^5 ({}^6S) 4s \epsilon l$ Emission wird durch den Prozeß $3p^6 3d^5 4s^2 \rightarrow 3p^5 3d^6 4s^2 \rightarrow 3p^6 3d^5 ({}^6S) 4s \epsilon l$ moduliert, was sich in der resonanten Erhöhung der Linien bei $E_B \approx 7,5$ eV (7S_3) und insbesondere $E_B \approx 8,7$ eV (5S_2) zeigt. Die meisten anderen Strukturen lassen sich als $3d^5 ({}^4X) 4s$ -Multipllettlinien deuten.

Diese Spektrenserie wurde bei maximalen Zählraten von 1450 Impulsen/sec. in der größten und 100 Impulsen/sec. in der zweithöchsten Linie unter den oben genannten Monochromatorbedingungen aufgenommen. Für vergleichende atomare Messungen wurde eine 3 kV-Elektronenkanone aufgebaut und in Betrieb genommen. Erste Auger-Spektren von Mn liegen vor.

Photoionisation von Barium-Atomen im Bereich
der 5p-Anregungen

B. Lewandowski, J. Ganz, H. Hotop und M.W. Ruf
Fachbereich Physik, Universität Kaiserslautern

Mit der Methode gekreuzter Strahlen wurden die relativen Wirkungsquerschnitte für einfache und doppelte Photoionisation q^+ , q^{++} von Barium-Atomen im Bereich der 5p-Anregungen (80-50 nm) mit 0.09 nm Auflösung untersucht. Nur in wenigen ausgesuchten Bereichen zwischen 59 und 55 nm konnten in Anbetracht der beschränkten Meßzeit (insgesamt 3 Wochen) Messungen mit 0.015 nm Auflösung durchgeführt werden, um auf diese Weise die komplexen Autoionisationsstrukturen detaillierter zu studieren.

Ein Teil der Ergebnisse ist in den umseitigen Figuren dargestellt: es zeigt sich, daß beide Kanäle q^+ und q^{++} bei Wellenlängen unterhalb 59 nm mehr oder weniger stark an praktisch alle Absorptionslinien des komplexen 5p-Absorptionsspektrums (Connerade et al. 1979) angekoppelt sind. Daraus ergibt sich, daß Zweistufen-Autoionisation ein dominanter Mechanismus für die Bildung doppelt-geladener Ba^{++} -Ionen ist und daß q^{++} nennenswerte Anteile erst oberhalb 21 eV (unterhalb 59 nm) erreicht entsprechend der Energie der niedrigstliegenden angeregten $Ba^+(5p^5 n l n' l')$ -Zustände, für die bisher Autoionisation nach $Ba^{++} + e^-$ mit nennenswerter Wahrscheinlichkeit nachgewiesen wurde (siehe z.B. Rassi und Ross 1980). Oberhalb 59 nm ist das Verhältnis $q^{++}/q^+ \lesssim 3\%$; auch hier ist aber q^{++} an die Absorptionslinien angekoppelt, wenn auch immer schwächer mit zunehmender Wellenlänge. Die direkte $(6s^2)$ -Doppelionisation (Schwelle 81.48 nm) besitzt einen sehr geringen Querschnitt, ein Test des Schwellenverhaltens für Doppel-Photoionisation am Barium erscheint daher wenig erfolgversprechend.

Ein Teil unserer Ergebnisse erscheint demnächst in J. Phys. B (L), eine genauere Beschreibung der Apparatur und eine ausführliche Diskussion aller Daten wird in einer späteren Veröffentlichung erfolgen. Es ist wünschenswert, nach Wiederaufnahme des Meßbetriebs im HASYLAB weitere Teilbereiche des $Ba(5p)$ -Spektrums mit hoher Auflösung zu studieren, um verbleibende Fragen zu klären.

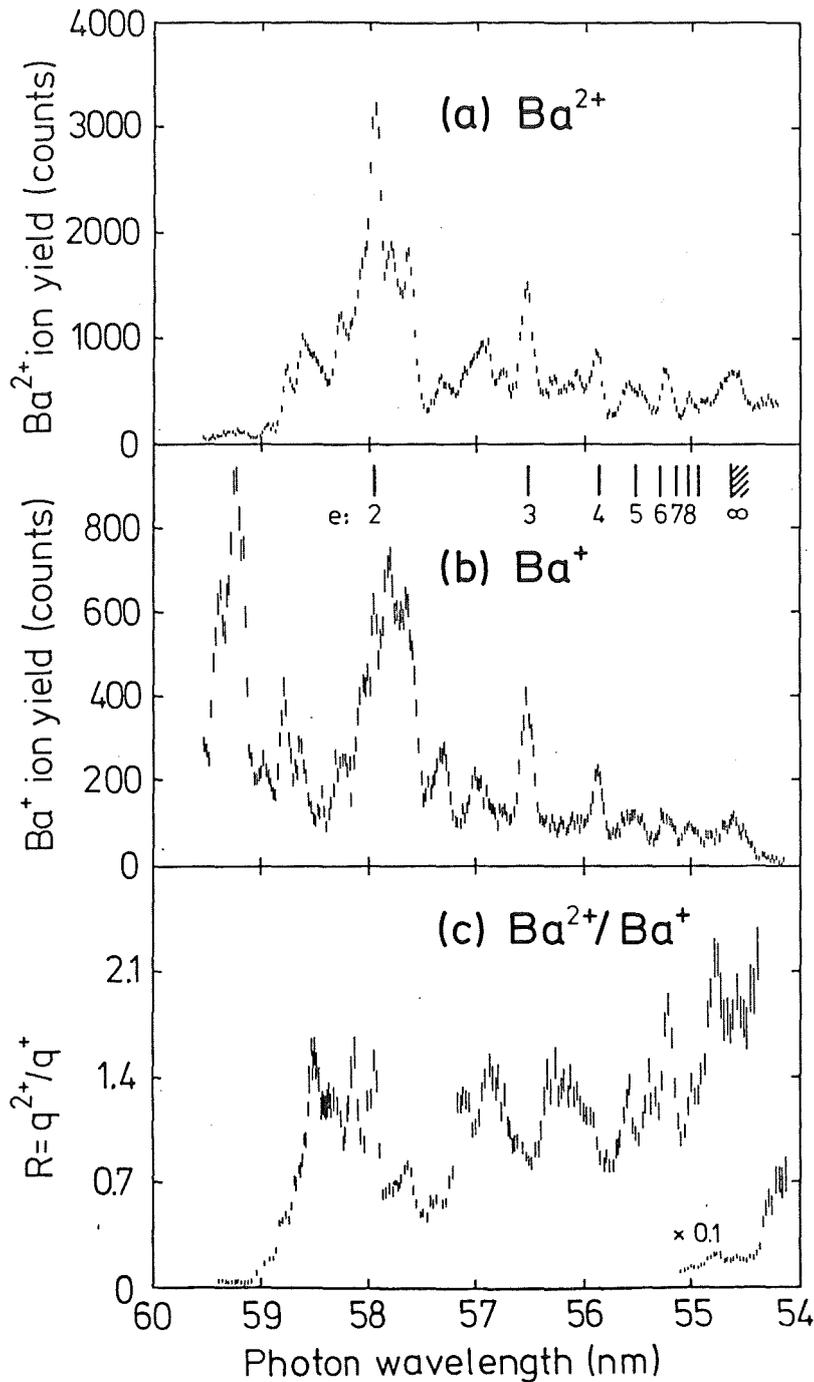


Fig. 1: Ba²⁺- und Ba⁺-Photo-Ionen-ausbeute und Querschnittsverhältnis $R = q^{2+}/q^+$ im Bereich 59.5 - 54.2 nm, Bandbreite 0.09 nm.

Die Ionenausbeutedaten (a) u. (b) sind nicht bzgl. der geringen (20%) Abnahme der Photonenintensität im Wellenlängenbereich von 59.5 bis 54.2 nm korrigiert.

Die Querschnittsverhältnisse (c) wurden unabhängig in verschiedenen Meßruns bestimmt; der absolute R-Maßstab wurde durch Vergleich mit dem Photoabsorptionsspektrum von Connerade und Martin (1980) festgelegt.

Zum Vergleich wurde in (b) die von Connerade et al. (1979) klassifizierte e-Serie markiert.

Referenzen

- Connerade J.P., Mansfield M.W.D., Newsom G.H., Tracy D.H., Baig M.A., Thimm K., Phil. Trans. Roy. Soc. A290, 327 (1979)
 Connerade J.P., and Martin M.A.P., J. Phys. B13, L373 (1980)
 Rassi D., and Ross K.J., J. Phys. B13, 4683 (1980)

Elektronenspektrometrie mit monochromatisierter Synchrotronstrahlung

H. Derenbach, R. Malutzki und V. Schmidt
Fakultät für Physik, Universität Freiburg

Ziel des Vorhabens sind Experimente zur Elektronen-Spektrometrie an freien Atomen und an Molekülen nach Photoionisation im Energiebereich 30 bis 250 eV. Besonderes Gewicht wird auf die Untersuchung von Winkelverteilungen gelegt. Die Ergebnisse dienen einem detaillierten Verständnis der Prozesse bei der Photoionisation.

Für dieses Ziel wurde in Freiburg eine Apparatur gebaut und mit einem Elektronenstrahl bzw. mit He - Resonanzlicht erfolgreich getestet. Höhepunkt aller Vorarbeiten bildete die Strahlzeit bei HASYLAB vom 5. bis 28. September 1981 am Toroid-Gitter-Monochromator der Gruppe B. Sonntag. Die Strahlzeit wurde genutzt, um erste Tests zur winkelabhängigen Elektronen-Spektrometrie mit monochromatisierter Synchrotronstrahlung und erste Messungen des Winkelverteilungs-Parameters β auszuführen. Die Experimente beschränkten sich auf Untersuchungen an Edelgasen.

Die Testmessungen dienten besonders dazu, die Eigenschaften der monochromatisierten Strahlung zu erhalten (Intensität, Anteile höherer Ordnungen, Polarisationsparameter). Speziell die Polarisationsparameter wurden durch Messung der Winkelverteilung nach $1s$ - Photoionisation in He unter der Annahme $\beta = 2$ ermittelt. In Ergänzung zu den bisherigen Testmessungen wurden weitere Eigenschaften des Elektronenspektrometers untersucht (absolute Transmission, Übersichtsspektren, vgl. Figur).

Die Experimente zur Winkelverteilung beschäftigten sich mit folgenden Problemkreisen:

Überprüfung der Annahme $\beta = 2$ für $1s$ -Ionisation in He durch Ermittlung der β - Werte für $2p$ -Ionisation in Ne¹⁾ und $3s$ -Ionisation in Ar für einige ausgewählte Photonenenergien.

Erweiterung des Experiments von Bizau et al.²⁾ zur Intensität des He-Satellites für gleichzeitige Ionisation und Anregung in $n = 2$. Die Messungen erfolgten bei 4 Winkeleinstellungen, um daraus Informationen über β_{2p} und $\sigma_{2p}^{++}/\sigma_{2s}^{++}$ zu erhalten. Photonenenergien nahe der Schwelle wurden gewählt (67.4, 75, 78, 80, 90 eV).

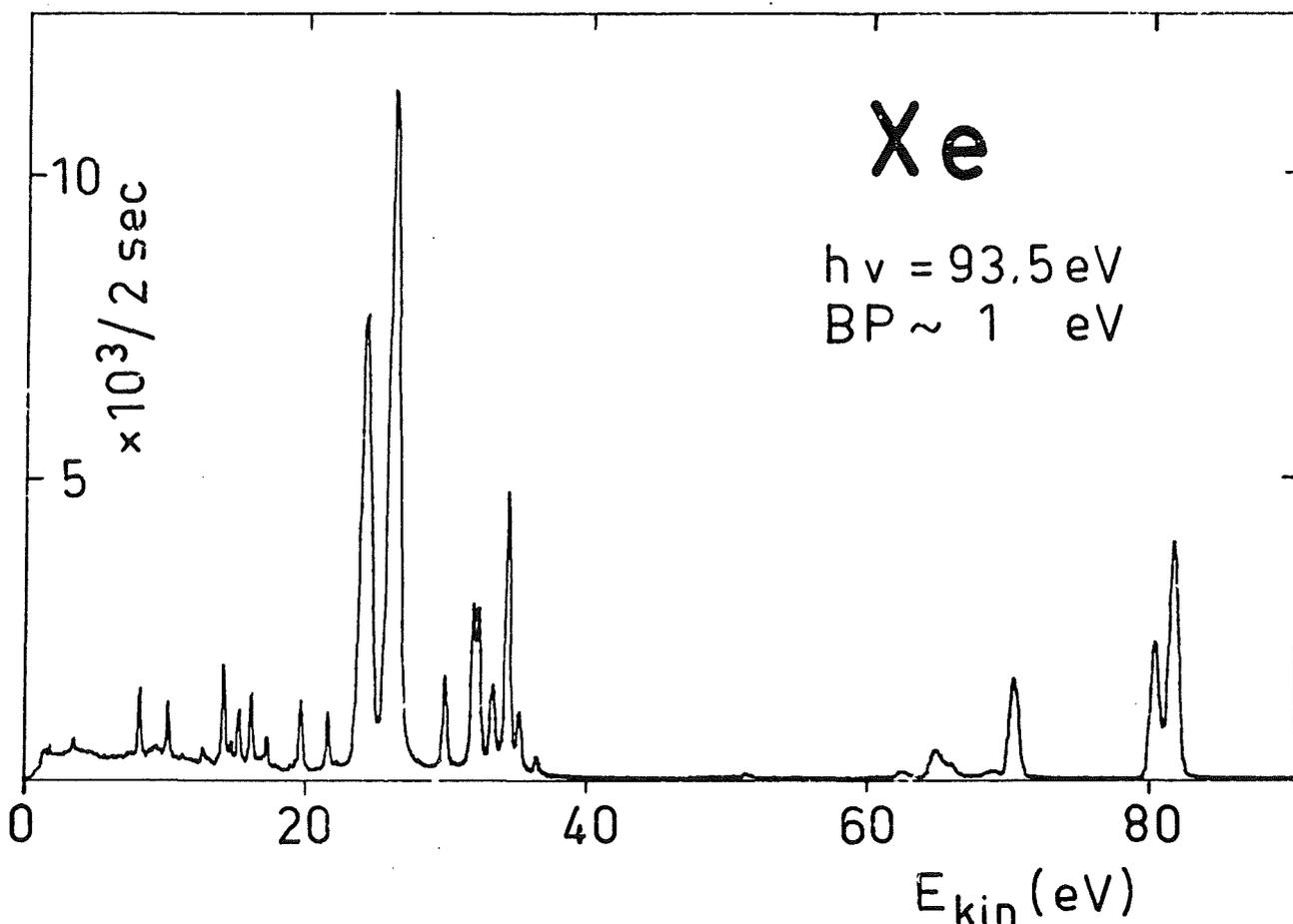
Es wurde versucht, trotz der äußerst störenden Anteile höherer Ordnungen im monochromatisierten Licht die sehr interessante Winkelverteilung der $5s$ -

Photoelektronen in Xe^3) zu messen. Die Datenaufnahme erfolgte für 29.5, 33.2, 34.2, 34.6, 35.3, 36.8, 41.6 und 51.4 eV Photonenenergie.

Für den $N_5 - 0_{23}0_{23}^1S_0$ Auger-peak im Xe Spektrum wurden deutlich Hinweise für eine Winkelverteilung gefunden.

Die Auswertung der aufgeführten Messungen ist noch nicht abgeschlossen. Erste Ergebnisse sollen auf der Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft in Würzburg vorgestellt werden.

- 1) K. Codling, R.G. Houlgate, J.B. West and P.R. Woodruff, J. Phys. B9 (1976) L 83
- 2) J.M. Bizau, F. Wuilleumier, P. Dhez, D.L. Ederer, T.N. Chang, S. Krummacher and V. Schmidt, wird veröffentlicht (1982)
- 3) M.G. White, S.H. Southworth, P. Kobrin, E.D. Poliakoïf, R.A. Rosenberg and D.A. Shirley, Phys. Rev. Lett. 43 (1979) 1661.



Elektronenspektrum von Xe nach Photoionisation (Sektor 2 des Elektronenspektrometers, Xe-Targetdruck $\sim 8 \cdot 10^{-4}$ Torr).

Messung des Alignments von Photoionen

W. Kronast und W. Mehlhorn

Fakultät für Physik, Universität Freiburg

Ziel des Vorhabens ist es, das Alignment von Photoionen nach Photoionisation mit monochromatisierter Synchrotronstrahlung über die lineare Polarisation der Sekundärstrahlung der Photoionen zu messen. Die Ergebnisse sind eine weitere unabhängige Information über den Photoionisationsprozess und dienen daher einem detaillierten Verständnis dieses Prozesses.

Der Aufbau und anschließende Test einer Apparatur, bestehend aus Vakuumkammer mit Metaldampfen, dem Polarisations- und Photonennachweis der Sekundärstrahlung und dem Polarisationsnachweis der Synchrotronstrahlung, erfolgte bis Ende September 1981 in Freiburg. Die Apparatur kam erstmals im HASYLAB in der Zeit vom 26.10. - 2.11.1981 zum Einsatz, es wurde der Seya-Monochromator der Gruppe E.E. Koch im Bereich $h\nu = 16$ bis 35 eV benutzt. Folgende Messungen wurden durchgeführt:

- a) Mit dem Rabinovitch-Analysator wurde der lineare Polarisationsgrad der Synchrotronstrahlung für die benutzten Spaltbreiten (400 μ) zu 90 - 95% gemessen. Außerdem wurde der Anteil der 2. Ordnung im Primärstrahl im Bereich 16.5 eV (5,7%) bis 19 eV (3%) bestimmt.
- b) Es wurden Intensität und die lineare Polarisation P_{lin} der Sekundärstrahlung γ'' beim Übergang $N_2^+(B \ ^2\Sigma_u) \rightarrow N_2^+(X \ ^2\Sigma_g) + \gamma''$ gemessen. Unsere vorläufigen Ergebnisse ergeben einen größeren Polarisationsgrad P_{lin} als von Poliakov et al. ¹⁾ gefunden wurde. Außerdem finden wir Strukturen für P_{lin} in Abhängigkeit von der Energie $h\nu$. Es wurden erste Messungen von P_{lin} für den Übergang $CO^+(A \ ^2\Pi, v' = 2) \rightarrow CO^+(X \ ^2\Sigma, v'' = 2) + \gamma''$ durchgeführt.
- c) Das Hauptgewicht lag auf der Messung von $P_{lin, \gamma''}$ für den Übergang $Cd^+(4d^9 5s^2 \ ^2D_{5/2}) \rightarrow Cd^+(4d^{10} 5p \ ^2P_{3/2}) + \gamma''$ (4416 Å) von der Schwelle bei 17.6 eV bis 35 eV. Die gemessenen Werte $P_{lin, \gamma''}$ (noch unkorrigiert bezüglich der unvollständigen linearen Polarisation der Primärstrahlung) stimmen mit theoretischen Ergebnissen ²⁾ gut überein (Figur 1), zusätzlich wurde eine Resonanzstruktur gefunden. Die Intensität $I_{\gamma''}(h\nu)$ zeigt eine große Zahl von Resonanzstrukturen, eine quantitative Auswertung ist noch nicht abgeschlossen.

- 1) E.D. Poliakoff et al., Phys. Rev. Letters 46, 907 (1981)
- 2) S.L. Carter and H.P. Kelly, J. Phys. B 11, 2467 (1978)

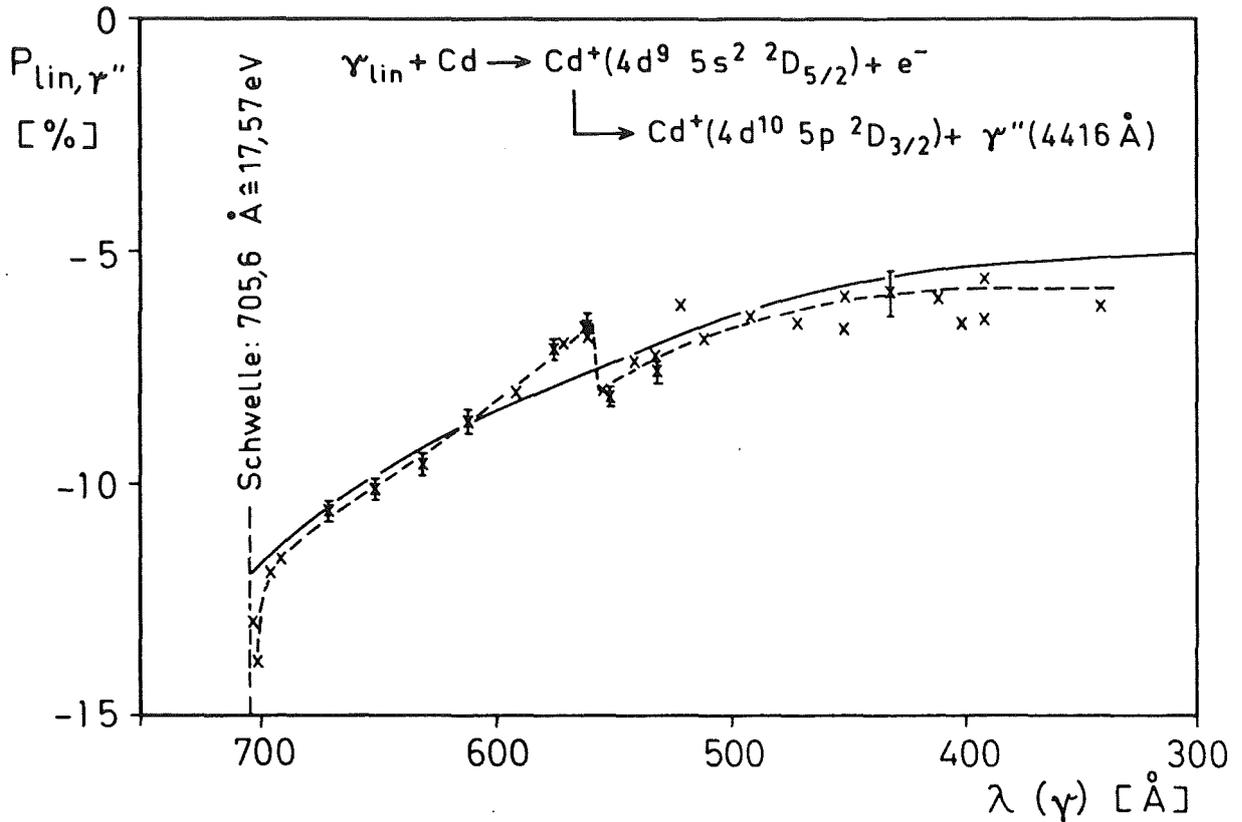


Fig. 1. Polarisationsgrad $P_{lin, \gamma''}$ der Sekundärstrahlung von $Cd^+(4d^9 5s^2 2D_{5/2})$ für linear polarisierte Synchrotronstrahlung. --- verbindet die experimentellen Werte X. — = Theorie unter Verwendung der Radialmatrixelemente von Carter und Kelly²⁾.

Messung von Lebensdauern und Stoßlöschquerschnitten selektiv angeregter Zustände
des molekularen Wasserstoffs

H. Schmoranzer und J. Imschweiler

Fachbereich Physik, Universität Kaiserslautern

Am Primärmonochromator HIGITI wurden Schwingungsniveaus verschiedener elektronischer Zustände des H_2 selektiv besetzt. Die Bandbreite der monochromatisierten Synchrotronstrahlung von 0.1 nm ermöglicht es, ein einzelnes Paar von Rotationsniveaus eines Schwingungsniveaus anzuregen. Die Lebensdauern und $H_2^x-H_2$ -Stoßlöschquerschnitte dieser Niveaus wurden gemessen¹⁾²⁾³⁾.

Die monochromatisierte Synchrotronstrahlung wurde in eine mit LiF-Fenstern abgeschlossene Gaszelle fokussiert. Der Wasserstoffdruck wurde zwischen 10^{-2} mbar und 200 mbar variiert. Die Fluoreszenzphotonen wurden im Wellenlängenbereich von 104 nm bis 170 nm mit einem CsJ-bedampften Doppelchannelplate nachgewiesen. Die Abklingkurven der selektiv angeregten Niveaus wurden nach der Zeit-Amplituden-Konverter-Methode aufgenommen.

Alle gemessenen Abklingkurven zeigten eine starke Abhängigkeit der Abklingkonstanten vom H_2 -Druck (Fig. 1). Im untersuchten Druckbereich ergab sich eine lineare Abhängigkeit der Abklingrate vom H_2 -Druck (Fig. 2). Die durch Extrapolation auf den Druck Null erhaltenen Lebensdauern der Schwingungszustände $v'=0\dots 4$ des H_2 B $2p^1\Sigma_u^+$ -Zustandes sind in Tabelle 1 den Ergebnissen anderer Autoren gegenübergestellt. Die Lebensdauern stimmen innerhalb der experimentellen Fehlergrenzen mit quantenmechanischen Rechnungen von Dalgarno und Stephens⁴⁾ überein. Der frühere Meßwert für eine Gruppe von Schwingungsniveaus des B-Zustandes ist ebenfalls angegeben⁵⁾. Die unter der Voraussetzung thermischer Stoßgeschwindigkeiten ausgewerteten mittleren Wirkungsquerschnitte für die $H_2^x-H_2$ -Stoßlöschung betragen typisch $5 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2$ (Tab. 1) ohne signifikante Abhängigkeit von v' .

Darüberhinaus wurden kürzlich Lebensdauermessungen auch an höheren Singulett-Zuständen des H_2 durchgeführt. Dabei wurde eine primärseitig fensterlose Gaszelle eingesetzt. Die Auswertung dieser Messungen ist noch nicht abgeschlossen.

Referenzen

- 1) H. Schmoranzer and J. Imschweiler, Abstracts XIIth ICPEAC (ed. S. Datz, Gatlinburg, Tenn. 1981), Vol. 2, p. 964
- 2) H. Schmoranzer and J. Imschweiler, Abstracts 5th General Conference of the EPS (Istanbul 1981), p. 105
- 3) H. Schmoranzer and J. Imschweiler, in Vorbereitung
- 4) A. Dalgarno and T.L. Stephens, Astrophys. J. 160, L 107 (1970)
- 5) J.E. Hesser, J. Chem. Phys. 48, 2518 (1968)

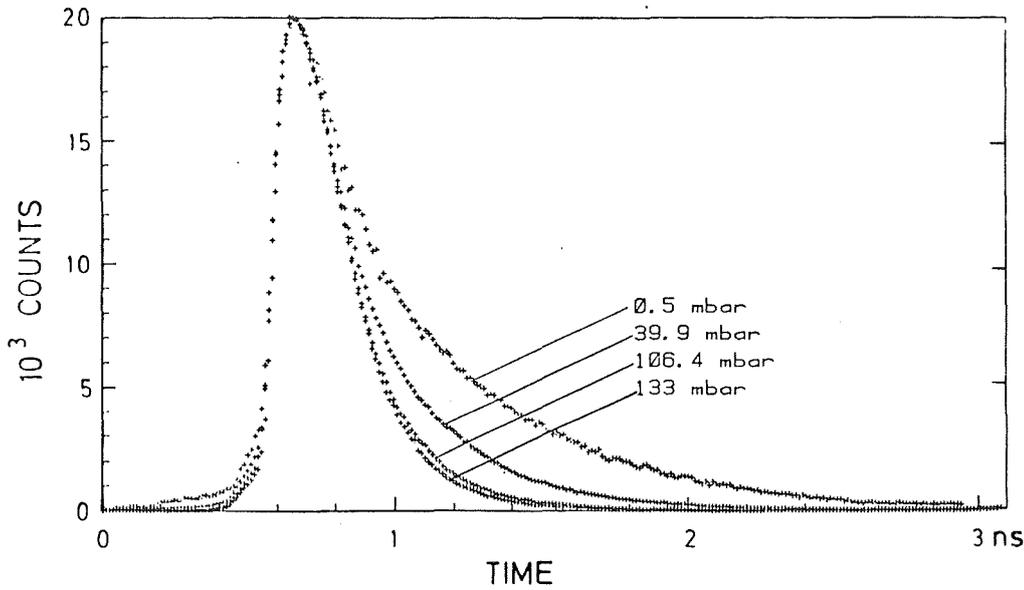


Fig. 1 Abklingkurven des H_2 B $v'=0$ ($J' = 1,2$) Zustandes für verschiedene H_2 -Drucke

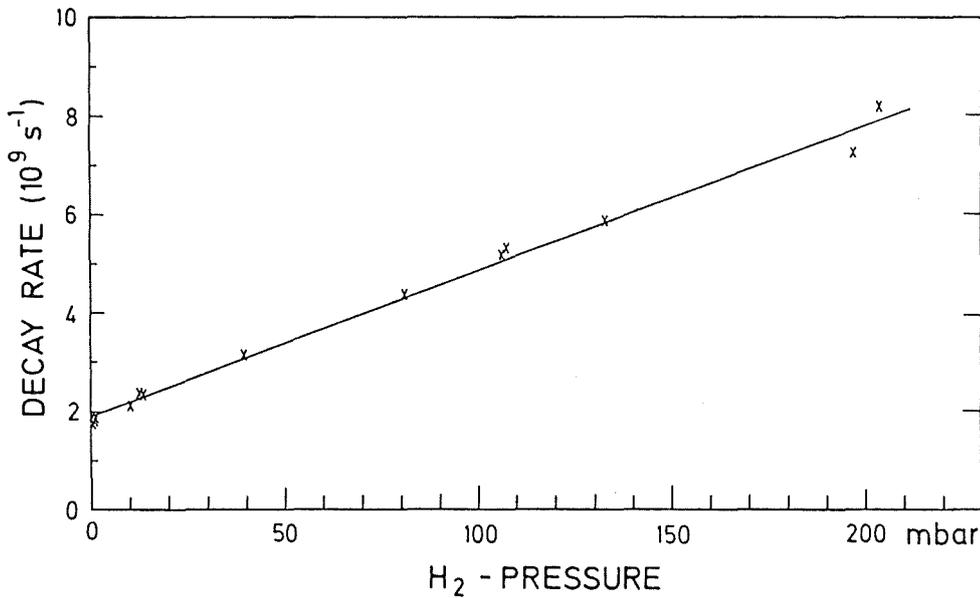


Fig. 2 Stern-Volmer-Plot für H_2 B $v'=0$ ($J' = 1,2$) mit Ausgleichsgerade

Tabelle 1

Lebensdauern τ (ps) und mittlere Wirkungsquerschnitte für die $H_2^x-H_2$ Stoßlöschung σ (10^{-15} cm^2) für Schwingungsniveaus v' des B $2p \ ^1\Sigma_u^+$ -Elektronenzustandes

v'	τ	τ (Ref. 4)	τ (Ref. 5)	σ
0	539 ± 16	535		5.1 ± 0.5
1	591 ± 31	574		5.0 ± 0.4
2	615 ± 35	613		5.1 ± 0.4
3	674 ± 28	651) 800 ± 200	5.2 ± 0.7
4	691 ± 45	690		5.4 ± 0.4

Elektronische Struktur des Cl₂-Moleküls

T. Moeller, P. Gürtler, B. Jordan und G. Zimmerer, II. Inst.f.Exp.Phys. der Universität Hamburg, D. Haaks, FB Physikalische Chemie, GHS Wuppertal, J.LeCalvé, CEA Saclay und M.C. Castex, Université Paris-Nord

Die ersten optisch erlaubten gebundenen Anregungen von Cl₂ liegen im VUV-Spektralbereich ($\lambda \lesssim 1420 \text{ \AA}$). Sie spielen eine wichtige Rolle bei den Elementarprozessen, die zur Bildung der Edelgasmonohalogenide in Excimerlasern führen, sowie im Cl₂-UV-Laser selbst. Die Wechselwirkung zwischen Rydberg- und Valenzzuständen führt in einigen Fällen zu Doppelminima in den adiabatischen Potentialkurven und damit zu drastischen Irregularitäten in den Schwingungs- und Rotationsstrukturen. Wir befassen uns speziell mit dem $1^1\Sigma_u$, dem $2^1\Pi_u$ und dem $2^1\Sigma_u$ Zustand (Nomenklatur nach (1), schematische Potentialkurven im oberen Teil der Abbildung 1) und kombinieren hochaufgelöste Absorptionsmessungen ($\Delta\lambda \lesssim 0.07 \text{ \AA}$) mit selektiv angeregter VUV-Fluoreszenz und Anregungsspektroskopie (SUPERLUMI).

Das in (1) vorhergesagte Doppelminimum von $1^1\Sigma_u$ wurde klar nachgewiesen. Mit der Potentialkurve und der R-Abhängigkeit des Übergangsmomentes aus (1) wurden Eigenwerte und Wellenfunktionen der Schwingungen im $1^1\Sigma_u$ Zustand sowie die FC-Faktoren für die gebunden-gebunden Übergänge $1^1\Sigma_u \leftarrow X^1\Sigma_g$ ausgerechnet. Nach geringfügigen Änderungen an den Potentialen aus (1) wurde gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Theorie erzielt. In Abb. 1 zeigen wir die Wellenfunktionen der Niveaus $v' = 39$ und 40 ; $v' = 39$ ist weitgehend im inneren Minimum konzentriert, $v' = 40$ tunnelt nach der Anregung sofort in das äußere Minimum. Entsprechend zeigt $v' = 39$ starke resonante VUV-Fluoreszenz, $v' = 40$ sehr schwache (Abb. 2). Im längerwelligen Teil der Fluoreszenzspektren dominieren gebunden-frei Übergänge.

Die Anregungsspektren zeigen, daß der in Absorption dominierende $2^1\Pi_u$ Zustand nicht zur Fluoreszenz führt. Er prädissoziiert in repulsive Zustände. Anregung des $2^1\Sigma_u$ Zustandes führt zur Fluoreszenz aus dem $1^1\Sigma_u$ -Zustand, was auf ein diabatisches Durchlaufen des Bereiches der verbotenen Kreuzung zwischen 1 und $2^1\Sigma_u$ hinweist.

Es wurden noch weitere Emissionen untersucht. Zwei gebunden-frei Systeme aus dem $1^1\Sigma_u$ bei 3040 \AA und $2200 - 2600 \text{ \AA}$, ferner die Emission aus dem $3^1\Pi_g$ -Zustand

(Laser-Übergang, $\sim 2580 \text{ \AA}$). Von den wichtigsten Emissionen wurden ferner die strahlenden Lebensdauern und Quench-Ratenkonstanten gemessen.

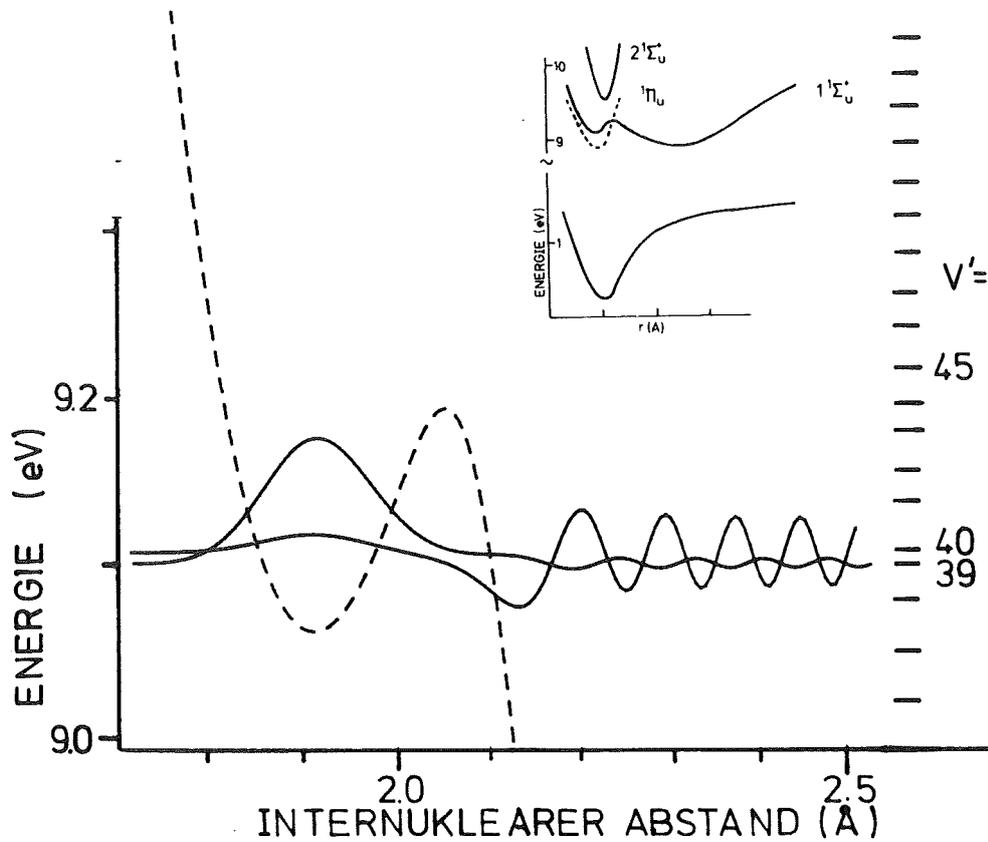


Abb. 1: Ausschnitt aus dem Potential des $1^1\Sigma^+$ Zustandes (gestrichelt), sowie die Wellenfunktionen der Niveaus $v'=39$ und $v'=40$. Rechts oben ein vereinfachtes Potentialkurvenschema von Cl_2 .

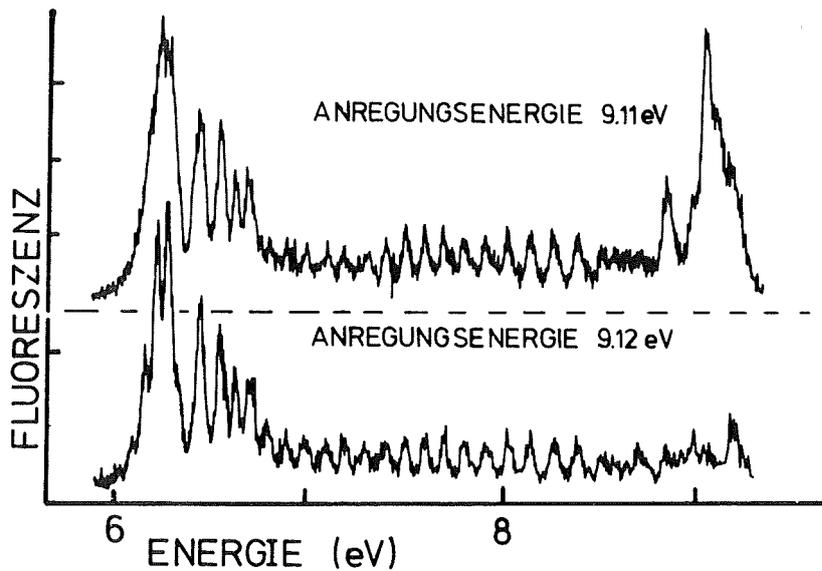


Abb. 2:

Fluoreszenz von Cl_2 , angeregt bei den in der Modellrechnung $v'=39$ (oben) und $v'=40$ (unten) entsprechenden Energie. Bei Anregung mit 9.12 eV ($v=40$) ist die resonante Fluoreszenz wesentlich schwächer.

(1) S.D. Peyerimhoff and R.J. Buenker, Chem. Phys.

Moleküldynamik in Excimer-Systemen

B. Jordan, G. Zimmerer, II. Inst.f.Exp.Phys. d. Universität Hamburg

D. Haaks, FB Physikalische Chemie der GHS Wuppertal,

J. LeCalvé, CEA Saclay und M.C. Castex, Université Paris Nord

Die Monohalogenide der Edelgase zählen zu den wichtigsten UV-Lasermolekülen. Mit Hilfe der zeitaufgelösten Fluoreszenzspektroskopie nach selektiver Anregung wurden Bildung, Relaxation und Zerfall der Monochloride von Ar, Kr und Xe untersucht. Beim Zerfall dominieren in allen drei Fällen der $B \rightarrow X$ Übergang (gebunden frei-Übergang; Maximum der Intensität bei 1750 Å (ArCl), 2220 Å (KrCl), 3080 Å (XeCl)). In Cl_2 -dotiertem Xe können - je nach Anregungswellenlänge und Druckverhältnissen - auch der $D \rightarrow X$ (2350 Å) und der $C \rightarrow A$ Übergang (3400 Å) nachgewiesen werden.

Bildung der Excimere: Die Excimere werden bei Stößen der Art $R^* + Cl_2$ bzw. $R + Cl_2^*$ (R:Edelgas) gebildet. In Abb. 1 wird - Energieskala gilt für das System Ar + Cl_2 - der Eingangskanal und der Monohalogenid-Ausgangskanal der Reaktion schematisch dargestellt. Möglicherweise wird ein Zwischenkomplex $Cl_2^- Ar^+$ gebildet. Die energetischen Verhältnisse führen zu einer Einsatzenergie von 9.7 eV für die Bildung des ArCl-Moleküls. Das Schwellenverhalten zeigt sich in den Anregungsspektren der beiden Hauptemissionen, die in Cl_2 dotiertem Ar auftreten (ArCl* $B \rightarrow X$ bei 1750 Å, $Cl_2^* \ ^3\Pi_g$ Emission bei 2580 Å, siehe

Abb. 1

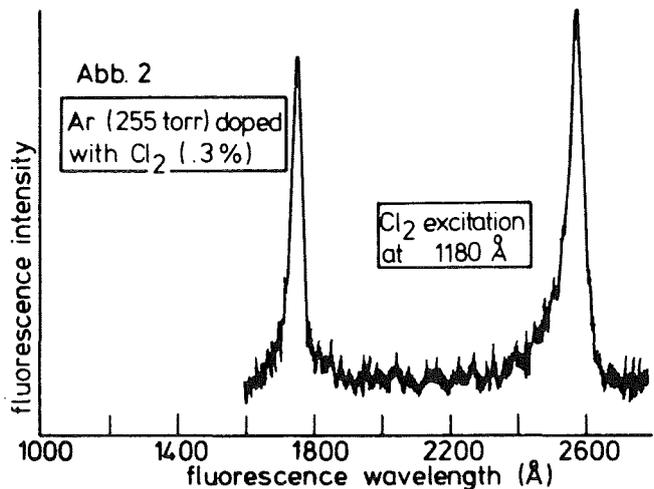
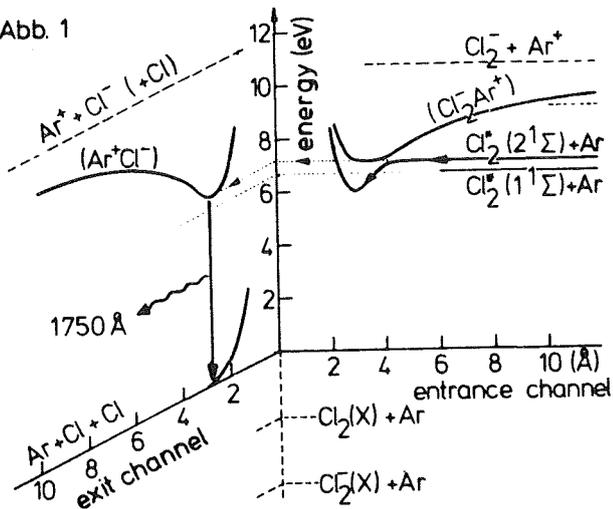


Abbildung 2). Abb. 3 zeigt diese Anregungsspektren und das Verzweigungsverhältnis, das drastisch von der Schwingungsquantenzahl im $2^1\Sigma_u$ Chlor-Zustand abhängt.

Relaxation und Zerfall: Die Schwingungsbesetzung der Monohalogenide nach der Bildung hängt stark von der Eingangsenergie ab. In XeCl kann diese über einen großen Bereich variiert (ca. 8.7 eV bis 11 eV) und das Verhalten schwingungsangeregter und schwingungsrelaxierter Moleküle untersucht werden. Die Lebensdauer des B-Zustandes variiert um ca. einen Faktor 2 ($\tau(v \approx 0) = 17 \text{ ns}$, $\tau(\text{hohes } v) \approx 40 \text{ ns}$). Dieser Trend hatte sich bereits bei KrCl angedeutet¹. Bei ArCl ist der Variationsbereich in der Eingangsenergie zu gering, um einen merklichen Effekt nachzuweisen. Die zeitaufgelösten Messungen werden derzeit ausgewertet.

¹ M.C. Castex, J. LeCalvé, D. Haaks, B. Jordan and G. Zimmerer, Chem.Phys.Lett. 70, 106 (1980)

Danksagung: In einer entscheidenden Phase der wichtigsten Meßzeit fiel der Detektor aus. Die Abteilung Nucleare Festkörperphysik des II. Institutes half uns mit hervorragenden Detektoren aus. Herzlichen Dank!

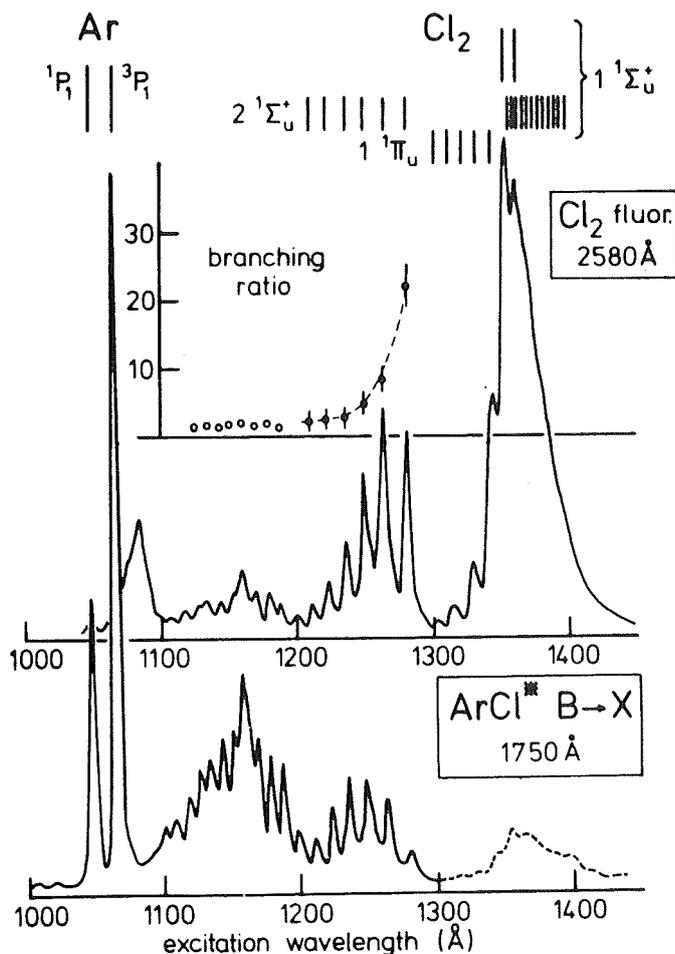


Abb. 3

Anregungsspektren der 1750 Å ArCl* Emission und der 2580 Å Cl₂ Emission in Cl₂-dotiertem Ar und das Verzweigungsverhältnis als Funktion der Anregungswellenlänge. Der gestrichelte Teil der unteren Kurve ist Cl₂-Emission, die energetisch mit der ArCl* Emission entartet ist (über Lebensdauer nachweisbar).

Abb. 3

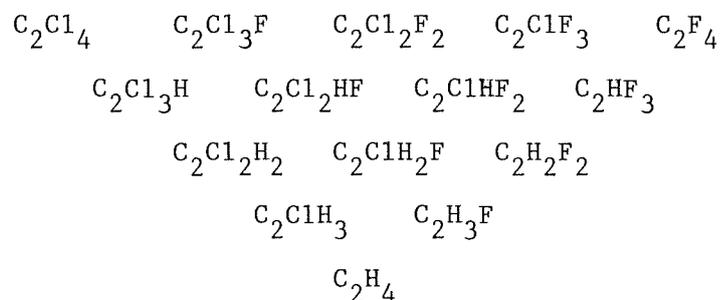
Fragmentation kleiner Moleküle

H. Baumgärtel, M. Kratzat, H. Oertel

Institut für Physikalische Chemie der Freien Universität Berlin

Takustr. 3, 1000 Berlin 33

Es wurden hauptsächlich Photodissoziationsprozesse halogener Äthylene untersucht. Für die im Schema aufgeführten Moleküle - bis auf die cis- und trans-Isomere von C_2Cl_2HF und C_2ClHF_2 und das aus der Literatur gut bekannte C_2H_4 - liegen jetzt aus Messungen am HASYLAB vollständige Sätze von Photodissoziationskurven positiver und negativer Ionen vor.



Das Ziel ist es zusammen mit Photoelektronenspektren (die zum größten Teil schon vorliegen) und Absorptionsspektren (die im nächsten Jahr vermessen werden sollen) eine vollständige Deutung der Zerfallsprozesse dieser Moleküle zu geben.

Durch Vergleich des Zerfallsverhaltens der Moleküle in Reihen und Querspalten des Schemas sollen Aussagen über den Einfluß einzelner Atome oder Atomgruppen auf die Stabilität der Moleküle gewonnen werden.

Die Auswertung wird zu Standardbildungsenthalpien ionischer und neutraler Fragmente und zu Dissoziationsenergien führen.

Neben den oben aufgeführten Molekülen wurden die Zerfallsprozesse des deuterierten Dichloräthylens $C_2D_2Cl_2$ (Isomere: 1,1-, cis- und trans-) untersucht, um Isotopieeffekte des Zerfallsverhaltens zu klären.

Weitere vermessene Moleküle sind D_2O , SO_2 , SF_6 und CH_2SF_4 .

Der Schwerpunkt lag hier bei der Aufklärung von Ionenpaarbildungsprozessen (D_2O , SO_2 und SF_6) und der Bestimmung von Standardbildungsenthalpien (CH_2SF_4) von Radikalen.

Durch Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Herrn Prof.Dr. H.Schmoranzner (Universität Kaiserslautern) (1) konnte mit Fluoreszenz- und Lebensdauermessungen ein Beitrag zum Zerfallsverhalten hochangeregter Stickstoffmoleküle geleistet werden.

- (1) H.Schmoranzner, J.Imschweiler; Abstracts of the XII th ICPEAC, Vol 2, ed. S.Datz, Gatlinburg, Tennessee S.964 und Literaturstellen

Partielle Wirkungsquerschnitte und Zustandsdichte-Effekte bei der Photoemission von polykristallinen Aufdampfschichten kleiner organischer und anorganischer Moleküle

J.-H. Fock^(a), H.-J. Lau^(a), F.Senf^(a) und E.E. Koch^(b)

(a) II. Institut für Experimentalphysik, Universität Hamburg

(b) Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB, DESY

Im Februar 1981 konnten wir die Messungen zur elektronischen Struktur von kleinen organischen und anorganischen Molekülen, Adsorbaten und Molekülkristallen wieder aufnehmen und fortführen. Die Messung von Absorptions- und Reflexionspektren an festen und matrix-isolierten Systemen wurde dabei durch die Aufnahme winkelintegrierter Photoelektronenspektren mit variabler Anregungsenergie wesentlich erweitert. Der dazu nötige veränderte Versuchsaufbau konnte mit den vorhandenen Geräten verwirklicht werden.

Die Photoemissionsmessungen an Substanzen, die durchweg Isolatoren sind, erfordern eine besondere Präparationstechnik, um die Aufladungseffekte gering zu halten¹⁾. Bei sehr dünnen Schichten und geringen Bestrahlungsintensitäten konnten Aufladungseffekte nahezu völlig vermieden werden. Als Ergebnis unserer Messung ist eine gegenüber früheren Experimenten wesentlich verbesserte Bestimmung aller Valenzbandstrukturen einschließlich der Linienform der einzelnen Maxima festzuhalten. Ferner stellt die Bestimmung partieller Wirkungsquerschnitte und Verzweigungsverhältnisse der einzelnen Orbitale und der Vergleich dieser Daten mit den Verhältnissen beim freien Molekül eine wichtige Erweiterung dar, die nur mit durchstimmbarer Lichtquelle möglich ist.

Am weitesten ausgewertet sind z.Zt. die Energieverteilungskurven der Photoelektronen von festem N₂, O₂, CO und CO₂ bei T ≈ 20 K im Photonenenergiebereich 15 eV ≤ hν ≤ 40 eV. Die Spektren zeigen bei der Zahl und Lage der Maxima eine 1:1 Entsprechung zu den Gasspektren, wobei auf Grund der Festkörperrelaxation die Bindungsenergien um etwa 0.8 - 1.5 eV erniedrigt sind. Diskrete Schwingungsbanden konnten in den Spektren von polykristallinen Proben nicht beobachtet werden. Neben allen molekularen Einelektronen-Valenzorbitalen konnten erstmals auch in der festen Phase shake-up Satelliten beobachtet werden (Abb. 1).

Ein Beispiel für den Verlauf der partiellen Wirkungsquerschnitte im festen CO ist in Abb. 2 gezeigt. Bemerkenswert sind die starken Maxima 3.0, 2.5 und 2.8 eV oberhalb des Einsatzes der Photoemission für das 5σ, 1π und 4σ Orbital. Diese Maxima werden in der Gasphase nicht beobachtet. Wegen der verschiedenen Elektro-

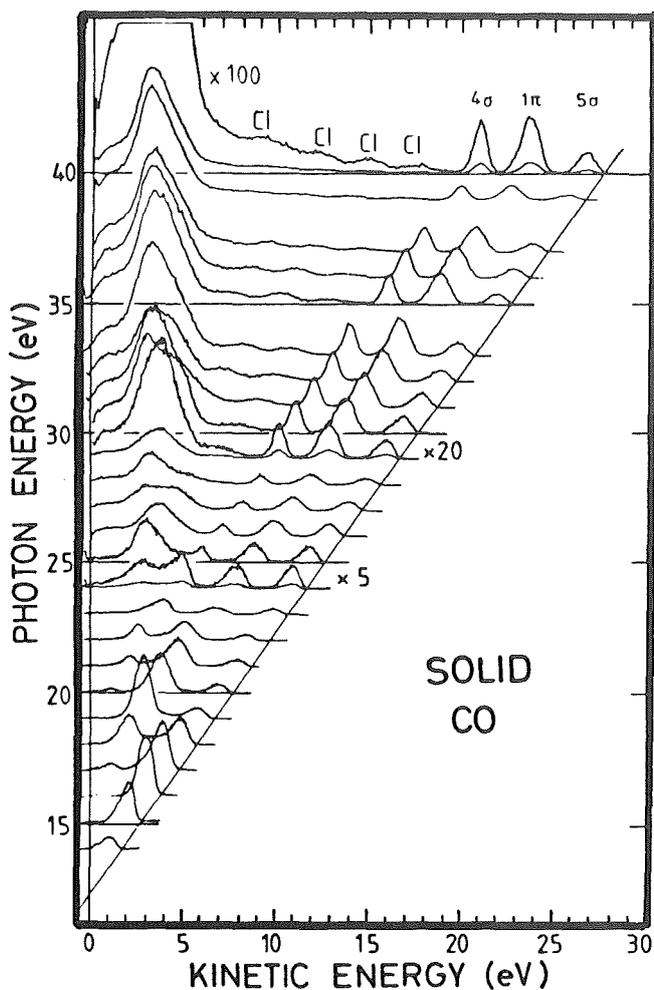


Abb. 1

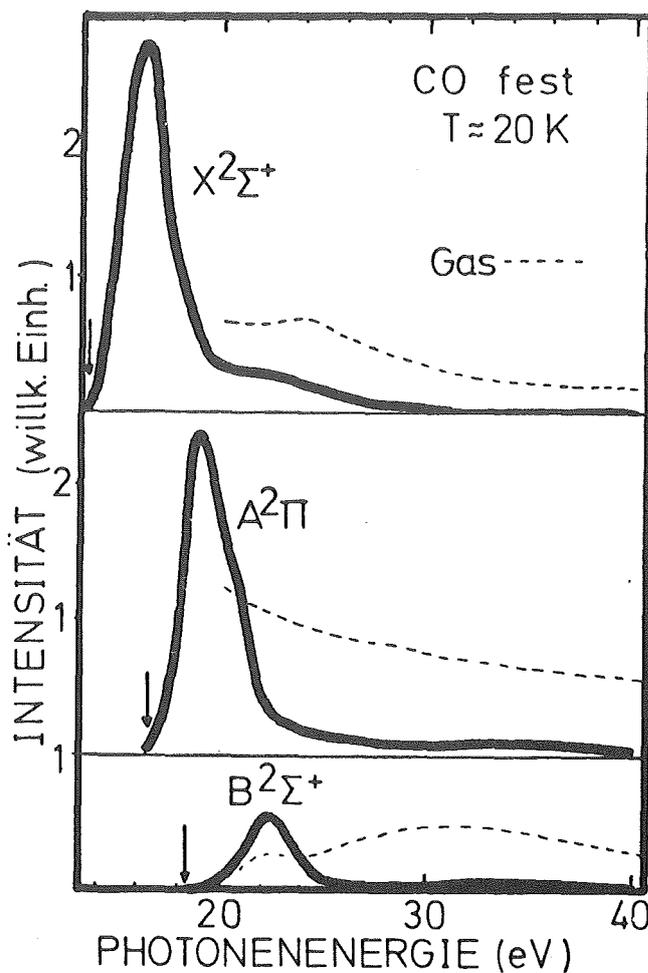


Abb. 2

nen-Streumechanismen und breiter Schwingungsprogressionen der molekularen Ionenzustände erwarten wir auch keine scharfen Einsätze von Streuprozessen, wie sie etwa bei festen Edelgasen beobachtet wurden (1). Wir deuten die Maxima vielmehr als Endzustandseffekt der Leitungsbandzustandsdichte der festen Phase und erhalten damit auch eine befriedigende Interpretation für die bisher nicht gedeuteten Strukturen in den optischen Spektren der kondensierten Gase. Erst oberhalb von $h\nu \approx 25$ eV ergeben sich die aus der Gasphase bekannten Verzweungsverhältnisse.

Gleiche Messungen liegen für verschiedene organische Moleküle (C_2H_2 , C_2H_4 , CH_4 , Benzol, Pyridin, CCl_4 , H_2O) vor, die aber erst teilweise ausgewertet sind. Parallel zu den hier beschriebenen Experimenten wurde im Herbst mit der Konstruktion einer neuen Vakuumkammer begonnen, die für Photoemissionsmessungen von Überschallgasstrahlen genutzt werden soll.

(1) N. Schwentner, F.-J.Himpfel, V.Saile, M.Skibowski, W.Steinmann, E.E.Koch Phys.Rev.Lett. 34 (1975), 528; N.Schwentner, Phys. Rev. B14, 5490 (1976).

Lichtstarke Vakuum-UV-Strahlführung und Matrixisolationsspektroskopie

W. Böhmer, R. Haensel, N. Schwentner und H. Wilcke
Institut für Experimentalphysik, Universität Kiel

Nach Vorbereitungen in den Jahren 1979 und 1980 wurde im März eine neue Strahlführung in Betrieb genommen und bis Mitte Juli getestet. Der spektrale Verlauf hinter dem Austrittsspalt ist in Abb.1 für ein holographisches Al-Gitter dargestellt. Mit einem Photonenfluß im Maximum von 7.5×10^{12} Photonen $\text{nm}^{-1} \text{s}^{-1}$, entsprechend einer Transmission der gesamten Strahlführung von 2%, erreichten wir eine Intensitätserhöhung im Vergleich zu bestehenden Apparaturen von 1 bis 2 Größenordnungen. Dies gelang durch eine Kombination von 2 Vorspiegeln, die nahezu das gesamte nutzbare Licht von Magnet 6, das horizontal in einem Winkel von 50 mrad abgestrahlt wird, in den Eintrittsspalt des Monochromators abbilden. Mit dem Monochromator wurde eine gemessene Auflösung (fwhm) von 0,007 nm erreicht. Der Austrittsspalt wird durch einen rotationselliptischen Spiegel auf die Probe abgebildet und ergibt dort einen Lichtfleck von $0,15 \times 4 \text{ mm}^2$. Parallel dazu wurde von der Hamburger Gruppe von Herrn Zimmerer eine Probenkammer mit 2 Sekundärmonochromatoren für den Bereich von 50-700 nm in Betrieb genommen, die eine Auflösung von 0,7 nm bei einer großen Akzeptanz ermöglicht.

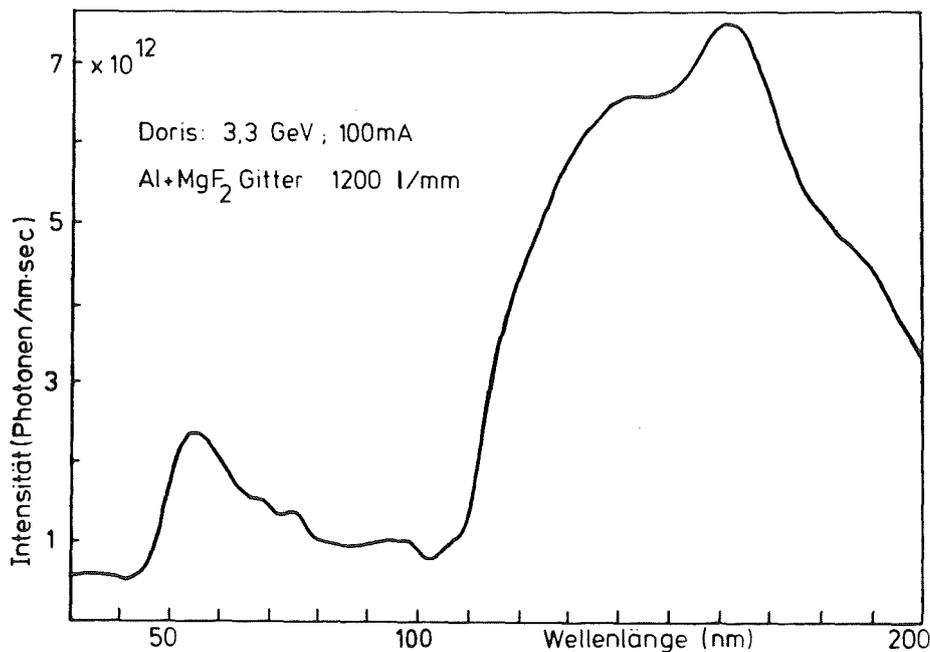


Abb.1 Photonenfluß hinter dem Austrittsspalt

Die Strahlzeit von Juli 1981 bis November 1981 wurde von den beiden am Aufbau beteiligten Gruppen genutzt. Weiter wurde von Herrn Saile ein Kurzexperiment zur 2-Photonenabsorption erfolgreich durchgeführt. Wir untersuchten Absorptionsspektren, Emissionsspektren und die Abhängigkeit der Emissionsspektren von der Anregungsenergie (Anregungsspektren) an N_2 , NO und CO in festen Matrizen aus Xe, Kr, Ar und Ne. Durch die enorme Verbesserung der Intensität und Auflösung in diesen Spektren gelang uns ein wesentlicher Schritt hin auf eine quantitative Beschreibung der Elektron-Phonon-Kopplung von elektronisch angeregten Zuständen dieser kleinen Moleküle in Edelgasmatrizen. Aus der Linienform in Absorptions- und in Anregungsspektren können wir Elektron-Phonon-Kopplungsparameter und den Einfluß unterschiedlicher Einbaulagen entnehmen. Die Emissionsspektren zeigen uns, welche Endzustände bei der strahlungslosen Relaxation auf Grund der Elektron-Phonon-Kopplung bevölkert wurden. Die unterschiedliche Verteilung der Intensität auf die Endzustände für verschiedene Ausgangszustände zeigt bereits, daß diese Relaxation über mehrere Zwischenstufen erfolgt und nur durch eine detaillierte Analyse beschrieben werden kann. Die Anregungsspektren zeigen unmittelbar, welche Ausgangszustände durch strahlungslose Relaxation zu einem vorgegebenen Endzustand beitragen. Bei dem System N_2 in Edelgasmatrizen untersuchten wir die Schwingungsrelaxation zwischen den Schwingungsniveaus des $A^3\Sigma_u$ Zustandes und die zusätzlichen Möglichkeiten der elektronischen Relaxation zwischen den $A^3\Sigma_u$, $w^1\Delta_u$ und $a^1\Pi_g$ Zuständen. Bei NO wurde neben den $a^4\Pi$, $b^4\Sigma^-$, $B^2\Pi$, $B'^2\Delta$ und $G^2\Sigma^-$ Valenzzuständen vor allem die Ausbildung der $A^2\Sigma^+$ Rydbergzustände untersucht, die durch ihre große räumliche Ausdehnung eine lokale Aufweitung des Gitters erzwingen. Für CO wurden neben dem $A^1\Pi$ Zustand erstmals auch die spinverbotenen $a^3\Pi$ und $a'^3\Sigma^+$ Zustände in Absorption beobachtet und sehr unterschiedliche Linienformen festgestellt. Die Fülle des experimentellen Materials wird 1982 aufgearbeitet werden. Nach dem DORIS-Umbau werden wir verstärkt die zeitliche Analyse dieser Relaxationsprozesse durch die Messung von Abklingdauern in Angriff nehmen.

UHV-Rowland-Monochromator für Matrixspektroskopie

M. Lübcke, G. Gründler, B. Sonntag, II. Inst. f. Exp.Phys. der Univ. Hamburg

Zur Untersuchung der Rumpfanregungen matrixisolierter Metallatome im VUV-Bereich durch Zweistrahlabsorptionsmessungen wurde die UHV-Strahlführung und ein Meßplatz mit einem 2m-Rowlandmonochromator aufgebaut. Tabelle 1 faßt die wichtigsten Daten der optischen Komponenten zusammen. Bis Juli dieses Jahres konnten Aufbau und Test des Vakuumsystems beendet werden. Nach der Justierung der beiden Vorspiegel und des Monochromators mit dem sichtbaren Anteil der Synchrotronstrahlung wurden Testmessungen für einen Einfallswinkel des Monochromators (84°) an Folien und Gasen durchgeführt.

Bild 1 zeigt zwei der mit einer Golddiode aufgenommenen Photonenflußspektren. In Tabelle 2 sind die Intensitätsmaxima der 1. Ordnung ($G1 = 130 \text{ eV}$; $G2 = 80 \text{ eV}$) für die drei Eintrittsspalte angegeben.

Mit einem 1200 Str/mm-Gitter und 10 μ -Spaltbreite betrug die experimentell bestimmte Auflösung $\Delta\lambda = 0,12 \text{ \AA}$. Dieser Wert ist für die geplanten Absorptionsmessungen ausreichend, kann jedoch durch verbesserte Justierung noch mindestens halbiert werden.

Tabelle 1:

Vorspiegel R1	planzylindrische Oberfläche, Kanigen-beschichtet, Glanzwinkel $1,5^\circ$, vertikaler Fokus. Akzeptanz: 1,8 mrad horizontal x 0,23 mrad vertikal. Eintrittsarm 22100 mm; Austrittsarm 11070 mm.
Vorspiegel R2	planelliptische Oberfläche, Kanigen-beschichtet, Glanzwinkel 2° , Eintrittsarm 29800 mm, Austrittsarm 600 mm, horizontaler Fokus im Eintrittsspalt des Monochromators
Gitter	sphärische Oberfläche ($R = 2217 \text{ mm}$), Gold beschichtet; geritzte Fläche 63,5 mm \emptyset . G1: 600 Str./mm, Blazewinkel $2^\circ 4'$ G2: 1200 Str./mm, Blazewinkel $5^\circ 10'$
Monochromator	Rowland radius 1108,5 mm, horizontale Dispersionsebene 3 Festspalte 5, 10, 20 μm Einfallswinkel $87,5^\circ - 82^\circ$; verstellbar in $0,5^\circ$ Schritten Vakuum in der Gitterkammer $5 \cdot 10^{-8}$ Torr

Die Präparation fester Edelgase auf dünnen C und Al Folien (500 - 1000 \AA) wurde in der Probenkammer getestet, so daß im nächsten Jahr mit den Absorptionsmessungen an matrixisolierten Atomen begonnen werden kann.

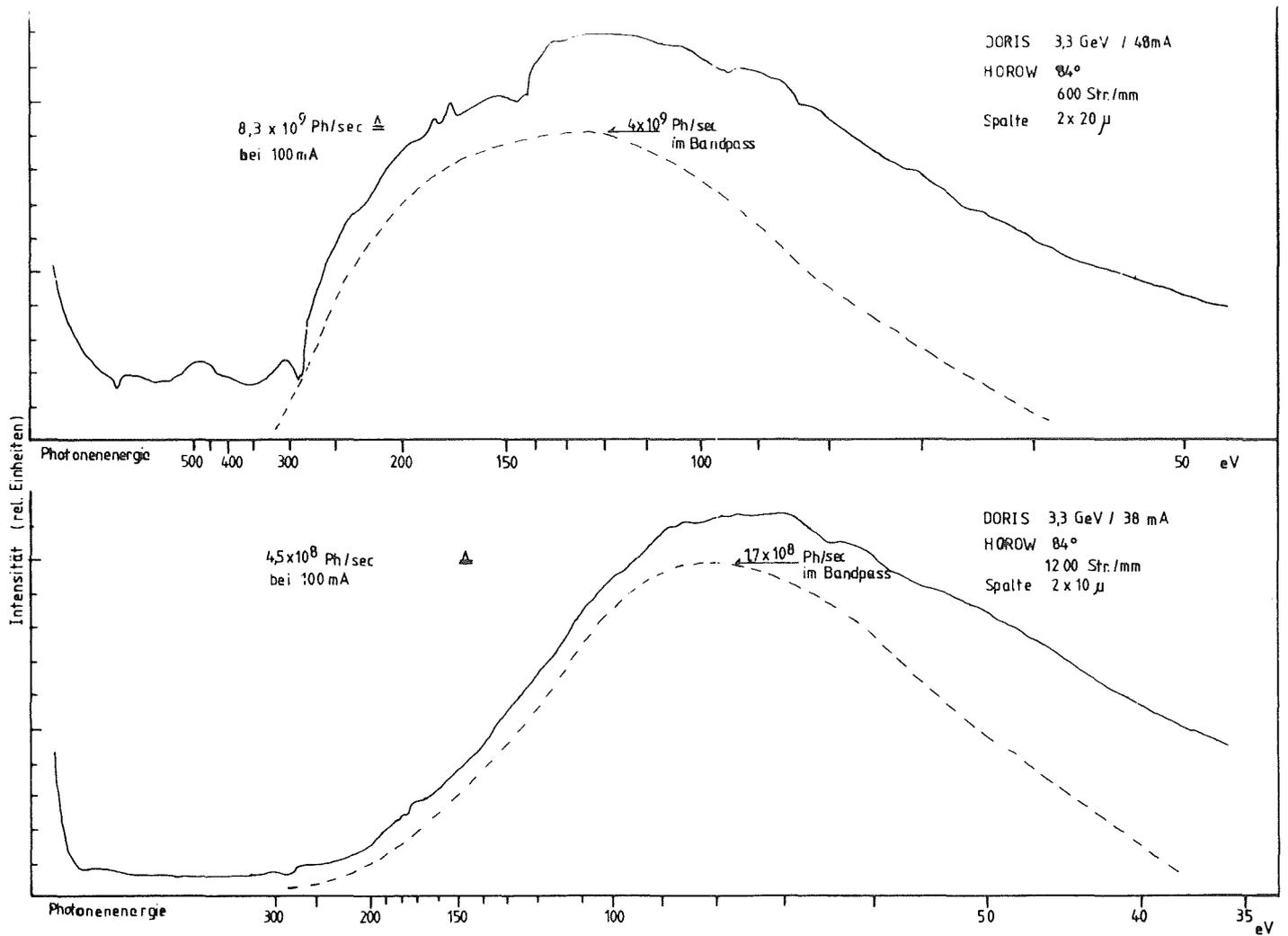


Bild 1: Relativer Intensitätsverlauf am Austrittsspalt des 2m-Rowlandmonochromators, gemessen mit einer Golddiode bei zwei verschiedenen Gittern und Spaltweiten. Die gestrichelte Kurve gibt eine Abschätzung für die 1. Ordnung nach Abzug des Untergrunds und unter Berücksichtigung höherer Ordnungen.

Tabelle 2:

Gitter (str./mm)	600			1200		
Spaltbreite (μm)	20	10	5	20	10	5
Maximale Intensität im Bandpass für 100 mA (ph/sec)	$7,6 \cdot 10^9$	$1,1 \cdot 10^9$	$2,6 \cdot 10^8$	$2,8 \cdot 10^9$	$5,7 \cdot 10^8$	$1,4 \cdot 10^8$

Photoeffects in Fluid Xenon

R. Reininger^{*}, U. Asaf^{*}, P. Laporte^{**}, V. Saile^{***} and
I.T. Steinberger^{*}

^{*} Racah Institute of Physics, Hebrew University, Jerusalem

^{**} Equipe de Spectroscopie - CNRS, ENSMSE, 158 bis, Cours
Fauriel, 42023, Saint Etienne CEDEX, France

^{***} Hasylab, DESY, Notkestr. 85, Hamburg, FRG

This is a first account on photoelectric current excitation spectra of fluid xenon, obtained for a wide variety of thermodynamic conditions. Synchrotron radiation from DORIS was monochromated by the HONORMI system with a resolution of 0.1 nm. The densities were varied between 10^{18} cm^{-3} and $1.3 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

Fig. 1. represent three spectra, taken from an extensive series. The most important feature of the highest-density spectrum ($1.1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$) is the onset of photoconduction at "A". The photon energy at "A" equals the width of the optical band gap, i.e., the energy necessary to raise an electron into the solid-like conduction band¹. It has been shown² that with decreasing density this threshold "A" shifts linearly to higher photon energies, while the initial slope at the threshold gradually decreases. This photoconductance disappears completely at densities around $3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$.

On the graph for $d = 4.5 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ two thresholds can be discerned, "A" - corresponding to photoconductivity proper at 10eV and "B" at 10.3eV. This second threshold also shifts gradually to higher photon energy when the density decreases and finally disappears. It is remarkable that the threshold "B" is nearly equal³ to the vertical energy difference between the repulsive ground state $X^1\Sigma_g^+$ of Xe_2 to the minimum of the $A^2\Sigma_{\frac{1}{2}u}^+$ ground state of Xe_2^+ .

A structure can be seen in the photoelectric current around 11.3eV already at densities of about $5 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$. At lower densities, the structure becomes more pronounced and further structure appears both at lower and at higher photon energies. At still lower densities (Fig.2, $4.6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) the response in this region increases considerably (note the change of the scale of ordinates

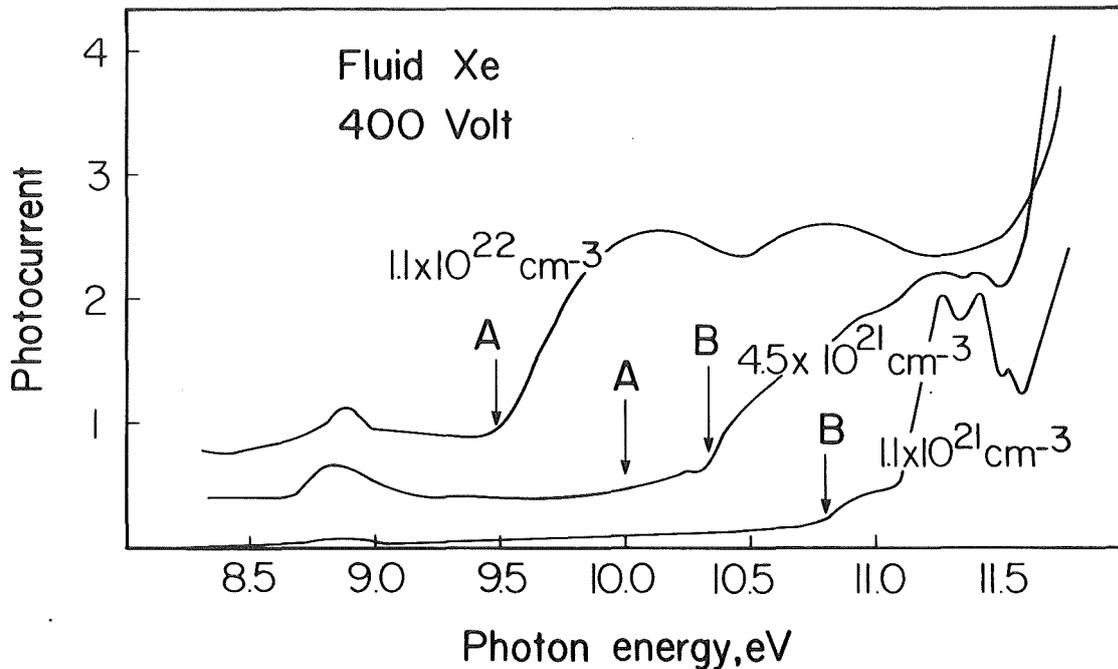


Fig. 1. Photoelectric current excitation spectra, vertically staggered. Higher densities.

in Fig. 2, compared with that in Fig.1) The structure is a gradually increasing background with sharp dips. The dips are at positions of the atomic transitions in this region. At still lower densities there is a further increase of the total intensity and the dips become peaks.

References

1. U. Asaf and I.T. Steinberger, Phys. Rev. B10, 4464 (1974).
2. R. Reininger, U. Asaf, P. Laporte and I.T. Steinberger, in Proc. Seventh Intl. Conf. on Conduction and Breakdown in Dielectric liquids, ed. W.F. Schmidt, Berlin 1981, J. of Electrostatics, in press.
3. P.M. Dehmer and J.L. Dehmer, J. Chem. Phys. 68, 3462 (1978).

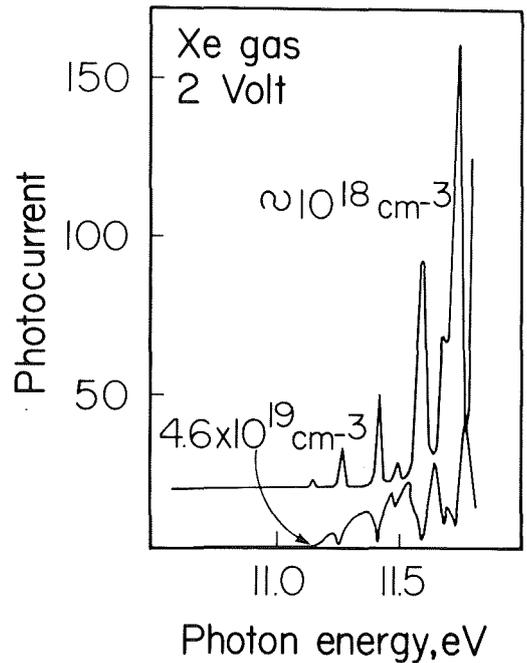


Fig. 2. As figure 1, but for lower densities (gas phase).

Photoleitung unpolarer organischer Flüssigkeiten

H.Böttcher und W.F.Schmidt

Bereich Strahlenchemie, Hahn-Meitner-Institut für Kernforschung
Berlin GmbH, D-1000 Berlin 39

Es wurde die Photoleitung als Funktion der Wellenlänge bei verschiedenen unpolaren organischen Flüssigkeiten untersucht. Die Proben befanden sich in einer Meßzelle, bei der das Licht durch ein goldbedampftes LiF-Fenster eintrat. Die Ionisierungsschwelle I_{th} wurde ermittelt und mit Werten für die Gasphase verglichen. Bei den flüssigen Tetramethiden wurden folgende Werte ermittelt: Neopentan-I = 8,8 eV, Tetramethylgermanium-I = 7,6 eV, Tetramethylzinn-I = 6,9 eV. Der Wert für Tetramethylsilan-I = 8,1 eV war schon früher gemessen worden¹⁾. Verschiebungen von I_{th} sind durch die Elektronenaffinität der Flüssigkeit und die Polarisationsenergie der positiven Ionen bedingt.

1 Z.Naturforsch.33A, 1393 (1978)

FESTKÖRPER - und OBERFLÄCHEN -

PHYSIK

Hochaufgelöste Reflexion und Photoemission im Bereich 5-50 eV

H.U. Aust, G. Sprüssel, K. Völkert und M. Skibowski

Institut für Experimentalphysik, Universität Kiel

Im Rahmen des Projektes wurden (a) unsere Untersuchungen zum Thema "Exzitonen und Oberflächenanregungen in Isolatoren und Halbleitern" weitergeführt, (b) die winkelabhängige Photoemission an Schichtkristallen mit Edelgasresonanzlinien untersucht und (c) die Planung der ersten Baustufe einer neuen Experimentierkammer mit zugehöriger Strahlführung für den 2m-Normal-Inzidenz-Monochromator (Superlumi) abgeschlossen. Hier sollen ab Mitte 1982 die Arbeiten zu (a) und (b) mit höherer Intensität unter Ausnutzung des polarisierten Kontinuums der Synchrotronstrahlung fortgesetzt werden. Außerdem wurden (d) umfangreiche Arbeiten beim Aufbau des Datenverarbeitungssystems bei HASYLAB übernommen.

a) Am 3m-Monochromator (HONORMI) standen für unser Vorhaben im Jahr 1981 nur 2 Wochen Meßzeit einschließlich Vorbereitungszeit für das Experiment zur Verfügung. In Zusammenarbeit mit S. Bernstorff (Universität Hamburg) und V. Saile (DESY) gelang es, an im UHV gespaltenen (110) Einkristallobersflächen von den III-V-Halbleitern GaP, GaAs, GaSb und InSb die Ga-3d und In-4d Anregung in Reflexion und Photoelektronenausbeute im Bereich 15-25 eV mit einer Auflösung von 10 meV bei Temperaturen bis herab zu 20 K zu untersuchen. Die Feinstruktur in der Nähe der Schwelle zeigt für alle Kristalle neben Volumenexzitonen, die man kritischen Punkten L und X im Leitungsband zuordnen kann, auch Oberflächenexzitonen in beiden Experimenten. Die Struktur im Bereich der Oberflächenexzitonen scheint komplexer als bisher angenommen. Es wurde versucht, die Temperaturabhängigkeit der Energien der Rumpfexzitonen im Modell schwacher Elektron-Phonon-Wechselwirkung in den Endzuständen zu beschreiben. Der Beitrag der Leitungsbandzustände bei L und X kann mit Hilfe von Pseudopotentialen berechnet werden. Experimente und Auswertung sind noch nicht abgeschlossen.

b) Zur Vorbereitung von Experimenten am 2m-Monochromator Superlumi wurden in Kiel in Zusammenarbeit mit W. Drube und G. Karschnick unter Nutzung von Edelgasresonanzlinien (10-40 eV) winkelabhängige Photoelektronenspektren an Übergangsmetallchalkogeniden, z.T. auch

an ternären Systemen aufgenommen. Studiert wurden u.a. TiSe_2 , VSe_2 , $\text{Ti}_x\text{V}_{1-x}\text{Se}_2$, HfS_2 , NbS_2 . Die Ergebnisse dienen zum Test von Bandstrukturrechnungen, Vorstellungen zum Leitfähigkeitsmechanismus und beobachteten Phasenübergängen. Besonders interessierte hier das Verhalten der d-Elektronen am Fermi-niveau.- Die untersuchten Einkristalle wurden im Kieler Labor hergestellt, orientiert und die Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit bestimmt.- Außerdem wurde mit Messungen der winkelaufgelösten Photoemission an (110)-Oberflächen von GaAs begonnen.

c) Im Rahmen des Vorhabens wurde eine neue doppeltfokussierende Beamline mit zwei Spiegeln, Toroid L3 ($R_t = 4731 \text{ mm}$, $R_s = 217,5 \text{ mm}$) und Zylinder L4 ($R_t = \infty$, $R_s = 323 \text{ mm}$), hinter dem 2m-Monochromator im Detail geplant und sämtliche Komponenten (Spiegel, Vakuumkammern, Ventile, Justierungen etc.) in Auftrag gegeben bzw. bereits beschafft. Zur Optimierung des optischen Systems waren umfangreiche Rechnungen nötig. Der Spiegel L3 wird so montiert, daß ein sofortiger Wechsel zwischen dem direkt hinter dem Austrittsspalt stehenden Lumineszenzexperiment und dem Experiment an der doppeltfokussierenden Beamline möglich ist.- Hinter dem Spiegelsystem soll eine neue Experimentierkammer mit Goniometer für Reflexions- und Photoemissionsmessungen aufgebaut werden, um die hohe Intensität und Auflösung des 2m-Monochromators optimal für Experimente wie unter (a) und (b) zu nutzen. Der Aufbau der ersten Baustufe ist für Mitte 1982 vorgesehen.

d) Die Soft- und Hardwareentwicklung für das Datenerfassungssystem bei HASYLAB, bestehend aus einer PDP11/34 mit Satellitenrechnern, PDP11/45 und entsprechender Peripherie wurde weitergeführt. Einzelheiten dazu sind an anderer Stelle des Jahresberichts ausführlich beschrieben.

Photoemission aus angeregten Zuständen in festen Edelgasen

S. Bernstorff^{a)}, V. Saile^{b)}, D. Rieger^{c)} und W. Steinmann^{c)}

a) II. Inst.f.Experimentalphysik, Univ. Hamburg

b) Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB, DESY

c) Sektion Physik der Universität München

An dem HONORMI- und SUPERLUMI-Meßplatz wurde systematisch die Zwei-Photonen-Photoemission¹ aus festen Edelgasen (und N₂) untersucht. Dabei wird die Zahl der Photoelektronen pro Laserpuls gemessen, die ein Farbstofflaser aus dem Festkörper emittiert, nachdem dieser mit monochromatischer Synchrotronstrahlung angeregt wurde. Als Beispiel ist in Abb. 1 die Abhängigkeit des Zwei-Photonen-Signals P von der Photonenenergie der Synchrotronstrahlung dargestellt und mit der normalen Photoelektronenausbeute Y bzw. der Reflektivität R verglichen. Man kann mehrere Bereiche unterscheiden:

- a) Ionisation von gebundenen Valenz- bzw. Rumpfelektronen durch den Laser (I, IV)
- b) Anregung von Elektronen durch die Synchrotronstrahlung ins Leitungsband; von dort über das Vakuumniveau durch den Laser (II) und
- c) direkte Übergänge durch die Synchrotronstrahlung in Leitungsbandzustände, aus denen die Elektronen den Festkörper ohne Hilfe des Lasers verlassen können (III, V).

In Abb. 2 wird für Kr die Abhängigkeit der Zwei-Photonen-Ausbeute von der Photonenenergie $\hbar\omega_L$ des Lasers demonstriert. Bei $\hbar\omega_L = 2,1$ eV reicht die Photonenenergie nicht aus, um die Exzitonen zu ionisieren. Allerdings beobachtet man einen steilen Anstieg bei der Bandlücke E_G , der auf Anregung von Elektronen am Leitungsbandboden durch den Laser zurückzuführen ist. Erhöht man die Photonenenergie des Lasers ($\hbar\omega_L = 3.2$ eV), so findet man für $\hbar\omega_L < 11.6$ eV ein stark strukturiertes Spektrum, das durch Laser-ionisierte Exzitonen hervorgerufen wird. Mit solchen Messungen wurden die Relaxationsenergien der angeregten Zustände ermittelt; außerdem wird erstmals eine direkte Bestimmung der Bandlücke möglich. Eine starke Abnahme der Intensität in den Exzitonen mit steigender Temperatur kann durch die sinkende Lebensdauer der Zustände verstanden werden.

Referenzen:

- ¹ V. Saile, D. Rieger, W. Steinmann und T. Wegehaupt, Phys. Lett. A 79, 221 (1980)
- V. Saile, Appl. Optics 19, 4115 (1980)

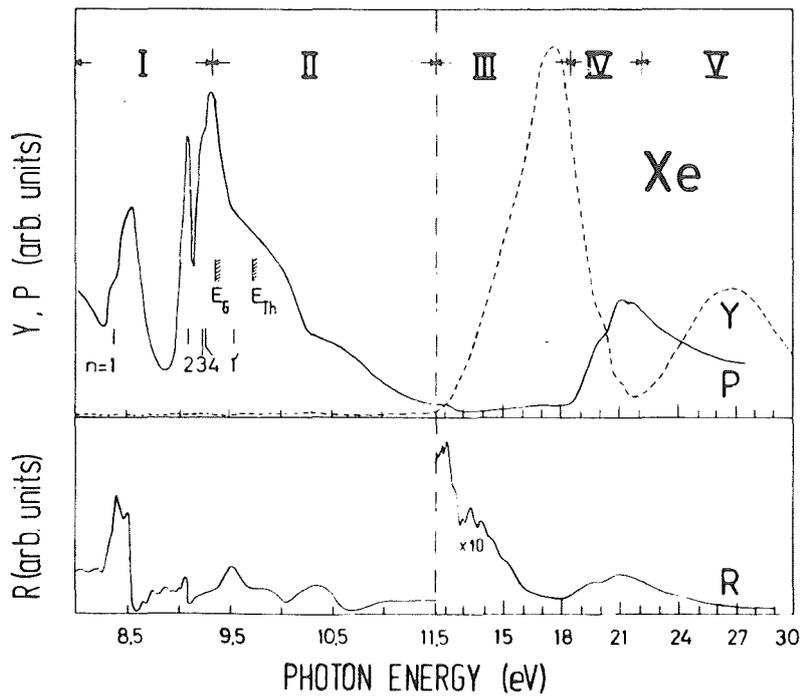
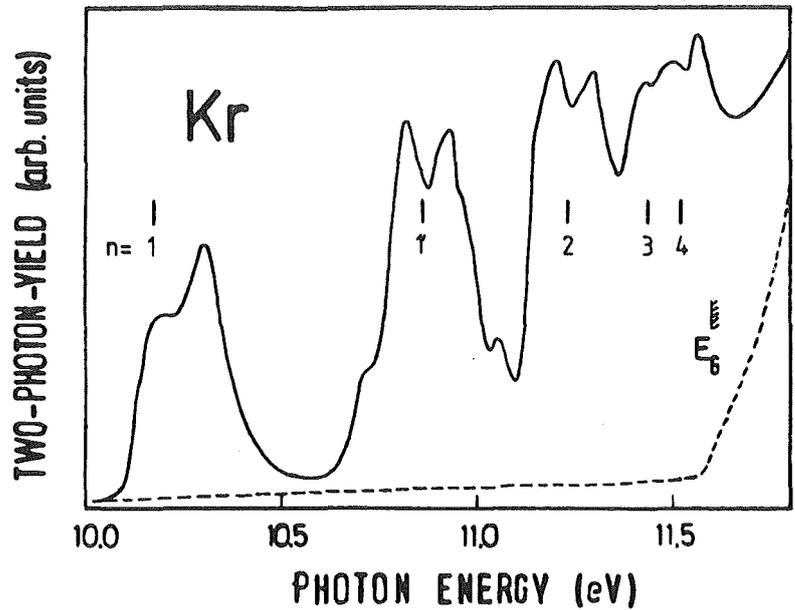


Abb. 1:

Zwei-Photonen-Photoemission P, Photoausbeute Y und Reflexion R einer 3000 Å dicken Xe-Schicht bei 10 K. Photonenenergie des Lasers war 3.0 eV.

Abb. 2:

Zwei-Photonen-Ausbeute für eine 700 Å dicke Kr-Schicht bei 8 K und $\hbar\omega_{\text{Laser}} = 3.2 \text{ eV}$ (—) bzw. 2.1 eV (---).



Erste Ergebnisse an der Lumineszenz-Apparatur Superlumi.

Lumineszenz freier Exzitonen in festen Edelgasen und Alkalihalogeniden

P. Gürtler, E. Roick, W. Rose und G. Zimmerer

II. Institut für Experimentalphysik der Universität Hamburg

Im Frühjahr dieses Jahres wurde der lichtstarke Lumineszenz Monochromator für den VUV-Bereich sowie ein Bausch & Lomb Monochromator für den sichtbaren Spektralbereich mit einer Hg - Lampe getestet und optimiert. Zu Beginn der Meßzeit konnten diese Tests mit Synchrotronstrahlung an der High-Intensity-Beamline am Strahl I fortgesetzt werden. Parallel dazu wurde die Elektronik soweit aufgebaut, daß die Messungen rechnergesteuert durchgeführt werden konnten und die Ergebnisse auf Flexy Disks abgespeichert wurden.

Es zeigt sich, daß der VUV-Monochromator mit seinem extremen Öffnungsverhältnis von 1:3 sehr gut die Spezifikationen erfüllt, die bei der Berechnung des Toroid-Gitters angegeben wurden¹. Insbesondere die aberrationsbegrenzte Auflösung liegt im Minimum (2500 Å und 60 µ Eintrittsspalt) bei 2,4 Å. Bei Messungen mit Synchrotronstrahlung steigt dieser Wert durch den größeren Eintrittsspalt von 150µ (Leuchtfleck auf der Probe) auf 5 Å. Zu kürzeren und längeren Wellenlängen verschlechtert sich die Auflösung aufgrund der zunehmenden Abbildungsfehler (siehe Abbildung 1 Kurve A). Durch Abblenden des Gitters kann die Auflösung verbessert werden (Kurve B). Die Linienform ist, wie erwartet, leicht asymmetrisch bei nicht abgeblendetem Gitter.

Als Physikalisches Programm wurden feste Edelgasschichten und Alkalihalogenid-Einkristalle selektiv angeregt und die Fluoreszenz im Wellenlängenbereich von 500 - 7000 Å gemessen. Vor allem in den Edelgasen kann die Fluoreszenz aus dem unrelaxierten $n=1$ - Exziton (freies Exziton, FE) nachgewiesen werden als schwacher, scharfer Peak, der energetisch knapp unterhalb des Absorptionswertes liegt (siehe Abbildung 2 für Xe). Das Anregungsspektrum ist identisch mit dem der Emission aus dem relaxierten Zustand (STE). Daraus kann man schließen, daß die höheren Exzitonen zuerst elektronisch in das $n=1$ Exziton relaxieren und dann erst das Gitter relaxiert. Der scharfe Abfall der Intensität der FE-Lumineszenz bei ca. 60 K läßt sich durch thermisch aktivierte Überwindung der Potentialbarriere, die den FE- vom STE-Zustand trennt, erklären².

Als Ergänzung dazu wurden feste Edelgase mit einer Elektronenkanone angeregt und die Fluoreszenz der freien Exzitonen spektral zerlegt gemessen.

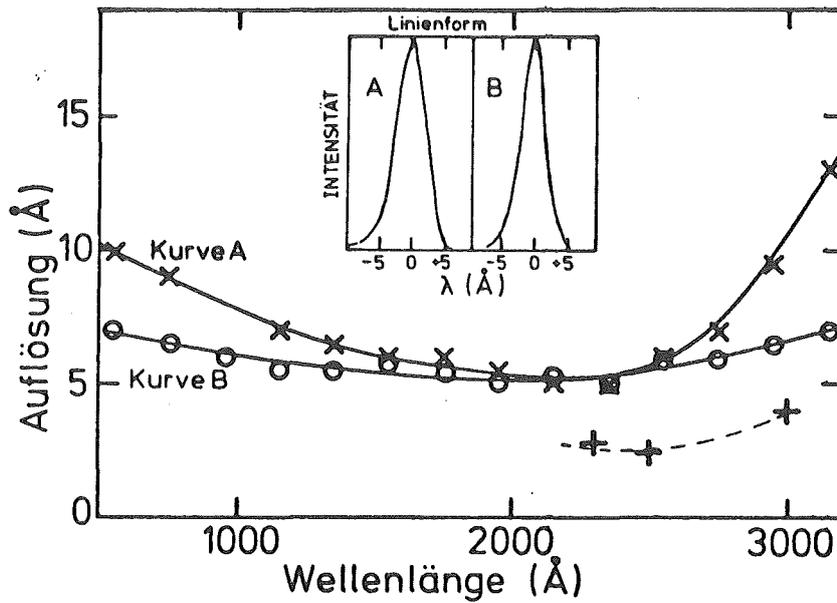


Abb. 1: Auflösung des VUV-Monochromators als Funktion der Wellenlänge (gestrichelte Kurve: minimale Auflösung)

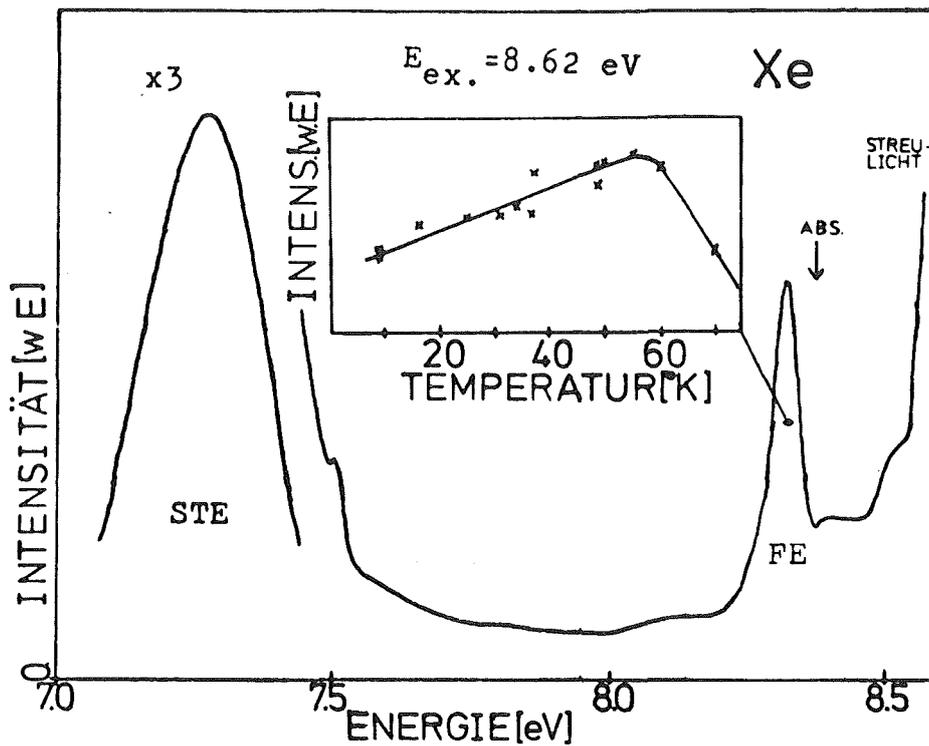


Abb. 2: Emissionsspektrum von festem Xenon, sowie die Temperaturabhängigkeit der Emission des freien Exzitons (FE).

- 1) Die Berechnungen wurden von M. Pouey, Lab. de Physique des Plasmas, Orsay, durchgeführt. M. Pouey war auch bei den Testmessungen beteiligt.
- 2) E.I. Rashba, Proceedings of the Internat. Conference on Defects in Insulating Crystals, Riga, 1981 (im Druck)

Ein optimierter Meßplatz für winkelaufgelöste Photoemission im Bereich

$5 \text{ eV} \leq h\nu \leq 50 \text{ eV}$

C.-A. Feldmann^(a), R. Engelhardt^(a), T. Permien^(a), M. Iwan^(b), V. Saile^(c) und E.E. Koch^(c)

(a) II. Inst.f.Exp.Phys., Universität Hamburg

(b) Fritz-Haber-Institut, Berlin

(c) Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB, DESY

Die Strahlführung zum 1m-Seya-Namioka Monochromator und zum Meßplatz für winkelaufgelöste Photoemission wurde im Jahr 1981 fertiggestellt und ausgetestet. Erste Experimente mit Synchrotronstrahlung wurden durchgeführt. Der Gesamtaufbau ist in Abb. 1 wiedergegeben. Die verschiedenen, unabhängig voneinander justierbaren optischen Komponenten sind in Tabelle 1 beschrieben. Das Vorspiegelsystem, bestehend aus Spiegel S1 (horiz. Fokus, Abstand 7 m) und Spiegel S2 (vert. Fokus, Abstand 1,3 m) bildet die Synchrotronstrahlung (6 mrad horiz. und 3 mrad vert.) vom Quellpunkt auf den Eintrittsspalt des Monochromators ab.

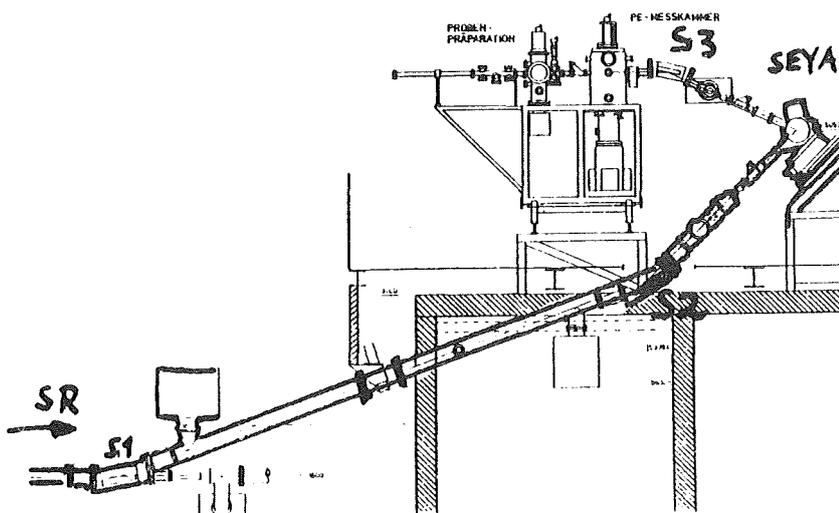


Abb. 1 Strahlführung

Dort wird ein Fokus von 230 μm (FWHM) und 2 mm horizontaler Breite erzeugt. Die Begrenzung des Astigmatismus des Monochromators entspricht dem vorausberechneten Wert von $\sim 8 \text{ mm}$ am Austrittsspalt. Der Toroidspiegel S3 fokussiert den monochromatisierten Strahl auf einen Brennfleck von $< 1 \text{ mm}$ vertikal und $\sim 4 \text{ mm}$ horizontal in der Mitte der Probenkammer.

Vertikal Horizontal	Spiegel S1	Spiegel S2	Spiegel S3	Konkavgitter G1	Konkavgitter G2
Oberflächenmaterial	Kanigen (Ni)	Kanigen (Ni)	Kanigen (Ni)	Osmium 1200 l/mm	Al/MgF ₂ 600 l/mm
Ablenkwinkel	20°	25°	25°	109,75°	109,75°
Krümmungsradius (mm)	— 1691,2	Ellipse (vert.) a = 11500,0 b = 1157,0 c = 11418,7	2772 616	998,8 998,8	998,8 998,8
Oberfläche (mm)	340 x 96	350 x 90	240 x 70	50 x 30	45 x 40
Ausleuchtung (mm)	277 x 96	304 x 18	139 x 4	49 x 11	49 x 11
Astigmatismus (mm)				8	8
Optimale Wellenlänge (Å)			600	550	1100

Tabelle 1

Charakteristische Größen der optischen Elemente.

Der Photonenfluß am Ort der Probe wurde mit einer Golddiode absolut gemessen. Abb. 2 zeigt den spektralen Verlauf für das 600 l-Gitter (Al-bedampft) mit Blazemaximum bei 1100 Å und das 1200 l-Gitter (Os-bedampft) mit $\lambda_{\text{Blaze}}=550 \text{ Å}$. Beide Gitter lassen sich im UHV wechseln, so daß im Bereich von 10 bis 40 eV ein hoher Photonenfluß bei 1 Å Auflösung gewährleistet ist. Der lineare Polarisationsgrad im Bereich 300 - 700 Å liegt zwischen 90 und 95% etwas ansteigend zu kürzeren Wellenlängen hin¹. Die Probenpräparationskammer und Meßkammer ist an anderer Stelle ausführlich beschrieben².

Erste Testmessungen mit Synchrotronstrahlung wurden an Cu- und Ni-Einkristallen durchgeführt. Messungen an teilweise geordneten Blei-Phthalocyanin-Filmen werden z.Zt. ausgewertet³. Daneben stand der Monochromator auch für Alignment-Messungen an Gasstrahlen nach Photoionisation zur Verfügung⁴.

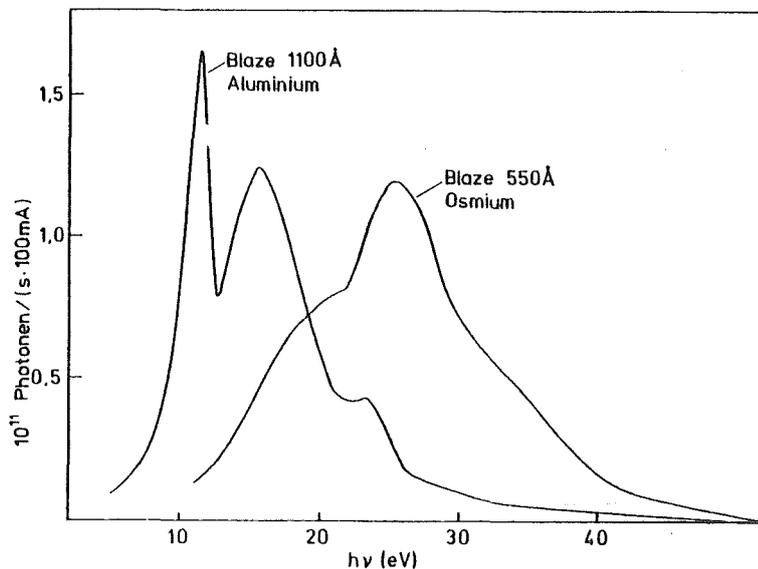


Abb. 2:

Photonenfluß am Ort der Probe bei 1 Å Auflösung.

REFERENZEN

- ¹ Die Spaltbreite betrug je 400 μ . Wir danken den Herren Kronast und Mehlhorn für diese Messungen.
- ² R. Engelhardt. Diplomarbeit Universität Hamburg 1981 und Int. Bericht HASYLAB 81/13.
- ³ Vgl. Beitrag T. Permien et al. in diesem Jahresbericht.
- ⁴ Vgl. Beitrag W. Kronast und W. Mehlhorn in diesem Jahresbericht.

Winkelaufgelöste Valenzband-Photoemission von Pb-Phthalocyanin-Filmen auf Cu(100)-Flächen

T. Permien^(a), R. Engelhardt^(a), C.A. Feldmann^(a), M. Iwan^(b) und E.E. Koch^(c)

(a) II. Institut für Experimentalphysik, Universität Hamburg

(b) Fritz-Haber-Institut, Berlin

(c) Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB, DESY

An polykristallinen Phthalocyaninen (PC's) sind bisher eine Reihe von Photoemissionsuntersuchungen durchgeführt worden. Neben prinzipiellen Fragestellungen zur Orbitalstruktur der PC's waren diese Untersuchungen auch motiviert durch Fragen im Zusammenhang mit den katalytischen Eigenschaften der PC's und ihren Anwendungsmöglichkeiten als Halbleiter. Wesentliche Resultate unserer Arbeitsgruppe sind bisher die Aufklärung der Valenzbandstruktur der 3d-Metall PC's und von Pt-PC (1, 2), die Beobachtung und Deutung resonanter Valenzbandsatelliten (3) und die Untersuchung von Rumpfniveausatelliten und Abschirmeffekten in XPS-Experimenten (4).

Winkelaufgelöste Photoemissionsexperimente an geordneten Schichten oder Einkristallen bieten den Vorteil, weitere Aussagen über die Art, Symmetrie und Dispersion der Orbitale bzw. Bänder zu erhalten. Arbeiten anderer Autoren (5) zeigen, daß PC's auch als dünne geordnete Mono- oder Mehrfachschichten auf

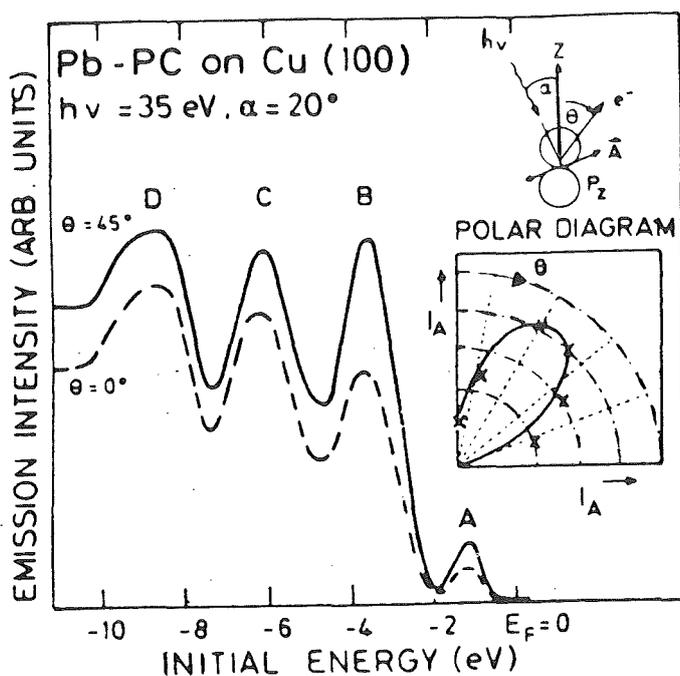


Abb. 1

Winkelaufgelöste Photoelektronenspektren von Pb-PC Mehrfachschichten für zwei verschiedene Emissionsrichtungen. Im Polar diagramm wird die erwartete Winkelverteilung für P_z -Orbitale (durchgezogene Kurve) mit den Meßwerten (Kreuze) für das Maximum A verglichen.

Einkristallen hergestellt werden können, wobei die ebenen Moleküle flach auf der Unterlage liegen - im Gegensatz zu den Verhältnissen in der kristallinen monoklinen Struktur der PC's. Durch in situ-Sublimation und Variation der Aufdampfparameter ist es uns nun gelungen, solche aus mehreren Monolagen bestehenden Schichten von Pb-PC auf einem Cu(100)-Einkristall herzustellen. Die Schichtdicken (bestimmt mit Hilfe von Reflexionsspektren im weichen Röntgengebiet, 80 - 240 Å) (6) lagen bei etwa 25 Monolagen. Bei diesen Schichtdicken ist das ursprüngliche Cu(100) LEED-Bild des Substrats nicht mehr zu erkennen. Das Fehlen eines eindeutigen LEED-Bildes vom Pb-PC führen wir auf das Nichtvorhandensein einer azimutalen Orientierung zurück.

Die Annahme, daß die Moleküle flach auf der Oberfläche liegen (6) wird durch die winkelaufgelöste Photoemission bestätigt, bei der der Einfallswinkel α und der Abnahmewinkel θ unabhängig variiert werden (Abb. 1). Die Polarwinkelabhängigkeit der Maxima A und B zeigt deutlich deren überwiegenden p_z -Charakter, während die tiefer liegenden Valenzorbitale und die Pb 4d-Orbitale eine nahezu isotrope Emission zeigen. Eine Abhängigkeit vom Azimutwinkel wurde nicht beobachtet. Ferner konnte an diesen Filmen 1,2 eV oberhalb des Maximums A erstmals deutlich eine schwache Fermikante beobachtet werden, wobei die θ - Abhängigkeit der Emissionsintensität ebenfalls auf einen p_z -Charakter schließen läßt. Diese Beobachtung ist im Zusammenhang mit der an Pb-PC-Schichten beobachteten eindimensionalen Leitfähigkeit längs der p_z -Richtung (7) von Bedeutung. Weitere Untersuchungen werden zeigen, ob wir eine Dispersion dieser Leitungsbandzustände beobachten können.

- (1) E. Tegeler, M. Iwan und E.E. Koch, J.Elektrochem. Technol. 22, 297 (1981)
- (2) E.E. Koch, M. Iwan, K. Hermann und P.S. Bagus, Chem.Phys. 59, 249 (1981)
- (3) M. Iwan und E.E. Koch, Solid State Commun. 31, 261 (1979); M. Iwan et al., Solid State Commun. 34, 57 (1980) und Phys.Lett. 76A, 177 (1980)
- (4) R. Engelhardt, Diplomarbeit Univ. Hamburg, Int. Bericht HASYLAB 81/13
- (5) J.C. Buchholz und G.A. Somorjai, J.Chem.Phys. 66, 573 (1977); J. Saijo et al., J. Cryst Growth 40, 118 (1977)
- (6) Wir danken Herrn K. Boller für diese Messungen.
- (7) K. Ukai et al., Phys. Letters 45A, 345 (1973); K. Ukai, J.Phys.Soc.Jap. 40, 140 (1976)

Gitterrelaxationsprozesse nach Anregung von Rumpfexzitonen in Lithium- und Natriumhalogeniden

J. Bahrtdt, J. Barth, F. Gerken, C. Kunz (II. Inst. Exp. Phys., Uni Hamburg)

An mehreren Lithium- und Natriumhalogeniden wurden zur Untersuchung von Rumpfexzitonen Photoemissionsmessungen durchgeführt. Exzitonen können sowohl durch Lumineszenz als auch über Augerprozesse zerfallen. Die direkte Rekombination ist ein spezieller Augerprozeß, bei dem das exzitonische Elektron in den Ausgangszustand zurückgekehrt, und ein weiteres, schwach gebundenes Elektron durch die freiwerdende Energie über die Anregungsschwelle gehoben wird. Die Messungen zeigten, daß Li^+ 1s2p-Exzitonen ebenso wie Na^+ 2p3s-Exzitonen unter Einbeziehung von Valenzbandelektronen direkt rekombinieren können. Die aus diesem Zerfallskanal stammenden Valenzband-Elektronen besitzen gegenüber den direkt emittierten geringere kinetische Energien. Die Energieverschiebungen sind auf Gitterrelaxationen während der Lebensdauer der Exzitonen zurückzuführen. Für LiCl beträgt die Relaxationsenergie bei Anregung des Li 1s2p-Exzitons beispielsweise 0,69 eV (siehe Abb. 1). Es stellt sich also heraus, daß Photoemissionsmessungen quantitative Aussagen über Relaxationsprozesse ermöglichen. Prinzipiell können Relaxationsenergien zwar auch den energetischen Verschiebungen von Lumineszenzstrukturen gegenüber zugehörigen Absorptionsstrukturen entnommen werden. Die Literatur liefert jedoch keine eindeutigen Lumineszenzdaten im Anregungsbereich der genannten Exzitonen ^{1,2,3}).

Um differenzierte Informationen für eine mikroskopische Deutung von Relaxationsvorgängen zu gewinnen, wurden Rechnungen durchgeführt, denen im wesentlichen ein von Williams⁴⁾ entwickeltes Modell zugrunde liegt. Für den Fall der Li^+ 1s 2p-Anregung in LiCl wurde eine Relaxationsenergie von 0,62 eV berechnet, die in guter Übereinstimmung mit dem experimentellen Ergebnis steht. Außerdem wurden die Gleichgewichtslagen der sechs nächsten Nachbarn (Cl^- Ionen) des Anregungszentrums (Li^+ 1s2p) im relaxierten Zustand des Gitters ermittelt. Bezüglich der Lage im Grundzustand haben sich die beiden auf der Rotationsachse des Li^+ 2p-Orbitals liegenden Cl^- Ionen um 0,18 Å, die restlichen vier nächsten Nachbarn um 0,11 Å vom angeregten Li-Ion entfernt.

Ein anderer Schwerpunkt lag in der Untersuchung von Rumpfanregungen an Halogenidionen. Abb. 2 zeigt Energieverteilungsspektren im Anregungsbereich des Cl 2p-Exzitons von NaCl. Das starke Anwachsen des Wirkungsquerschnittes des Cl 3s-Niveaus beim Durchgang durch die Anregungsenergie dieses Exzitons deutet auf eine Betei-

ligung der Cl 3s-Elektronen an einer direkten Rekombination hin. Auch nach Anregung des Cl 2p-Exzitons ist eine Gitterrelaxation zu beobachten. Ein Vergleich der Kurven a) und c) in Abb. 2) läßt auf eine Relaxationsenergie von 2.1 eV schließen.

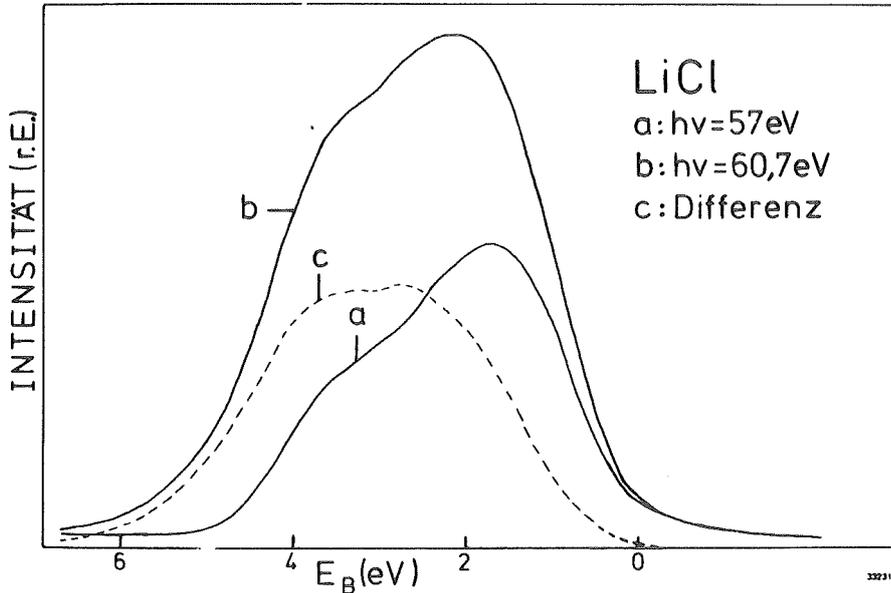


Abb. 1

Valenzbandspektren im Anregungsbereich des Li⁺ 1s2p-Exzitons von LiCl. Die Spektren wurden auf gleiche Bindungsenergien normiert.

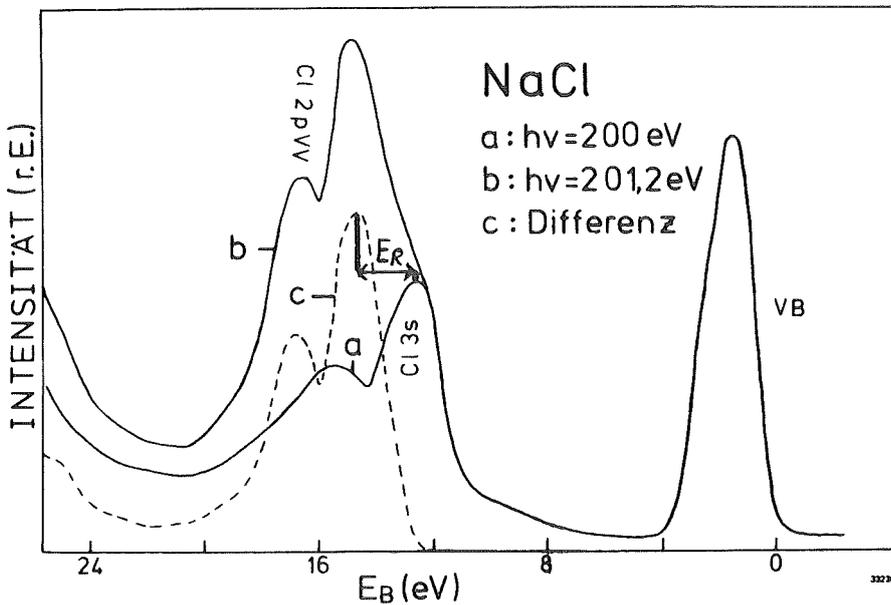


Abb. 2

Energieverteilungsspektren im Anregungsbereich des Cl 2p-Exzitons. Die Spektren wurden auf gleiche Bindungsenergien normiert. E_R ist die Relaxationsenergie.

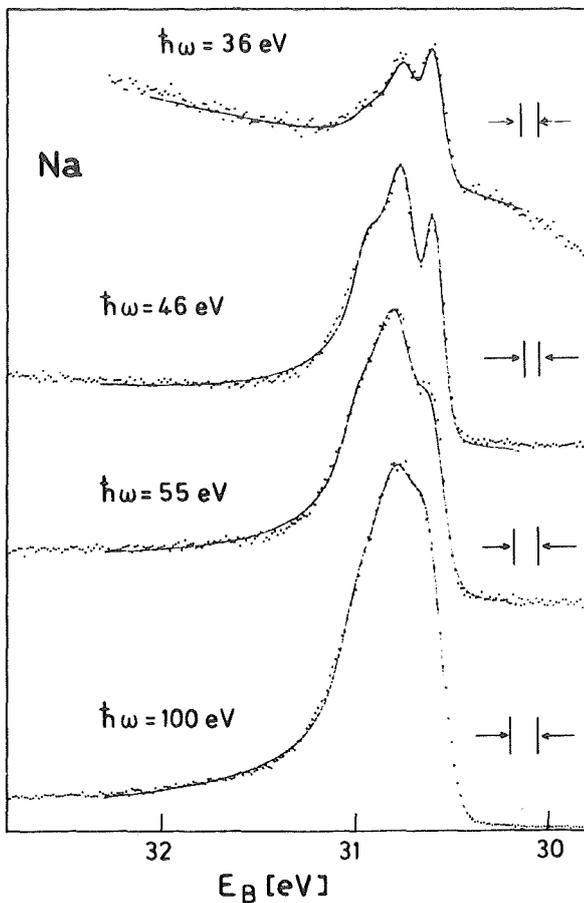
REFERENZEN:

1. A.A. Maiste et al., ZhETF, Pis.Red.18 Nr. 3, 167 (1963)
2. E.T.Arakawa, M.W.Williams, Phys.Rev.Lett., Vol. 36, Nr. 6, 333 (1976)
3. O.Aita et al., Phys. Rev. B, Vol. 23 Nr. 11, 5676 (1981)
4. F.E. Williams, J.Chem.Phys., Vol. 19, Nr. 4, 457 (1951)

Elektronische Struktur von Metalloberflächen

J. Barth, F. Gerken, A. Flodström, L. Johansson, R. Kammerer, C. Kunz

Da die mittlere Austrittstiefe von Photoelektronen ein Minimum von nur 5\AA bei etwa 30 bis 50 eV kinetischer Energie durchläuft, ist es bei geeigneter Wahl der Photonenenergie möglich, die Struktur der obersten Atomlage eines Festkörpers zu untersuchen. Durch hohe Auflösung konnten geringe (einige 0.1 eV) Verschiebungen der Bindungsenergien von Rumpfniveaus für die erste Atomlage gemessen werden an einfachen Metallen (Na, Mg, Al), an seltenen Erden und einigen 5d-Übergangsmetallen (Ir, Pt, Au). Ebenfalls wurde die lokale d-Band-Zustandsdichte der obersten Atomlage von polykristallinem Ag untersucht, die von großem Interesse für das kontrovers diskutierte "surface enhanced Raman scattering" an



Ag-Elektroden ist. Während einige Untersuchungen Fortsetzung früherer Projekte sind (1), soll die neu begonnene Untersuchung der einfachen Metalle stellvertretend dargestellt werden.

Die Messungen wurden an in situ präparierten Aufdampfschichten bei 100 K durchgeführt, außerdem standen zwei Al-Einkristalle (100) und (111) zur Verfügung. Bei sehr geringer kinetischer Energie haben die aus dem 2p-Niveau angeregten Elektronen eine große Austrittstiefe, die Spektren (Abb. 1, $h\nu = 36\text{ eV}$) werden mit XPS-Messungen (2) vergleichbar. Erhöht man die Anregungsenergie so weit, daß die kinetische Energie der Photoelektronen ca. 20 eV erreicht, ist deutlich das Auftreten zusätzlicher Strukturen im Spektrum zu erkennen (Abb. 1, $h\nu = 46\text{ und }55\text{ eV}$).

Abb. 1: Das Photoelektronenspektrum des Na 2p-Niveaus zeigt das Auftreten zusätzlicher Struktur in Abhängigkeit von der Anregungsenergie.

Diese zusätzlichen Strukturen ordnen wir Oberflächenzuständen zu, deren Bindungsenergie gegenüber dem Volumen verändert ist.

Durch rechnergestützte Synthese von Doniach-Sunjic-Kurven (3) gelingt es, den Anteil der Oberflächenstruktur und die Bindungsenergieverschiebung zu bestimmen (Abb. 2 und 3).

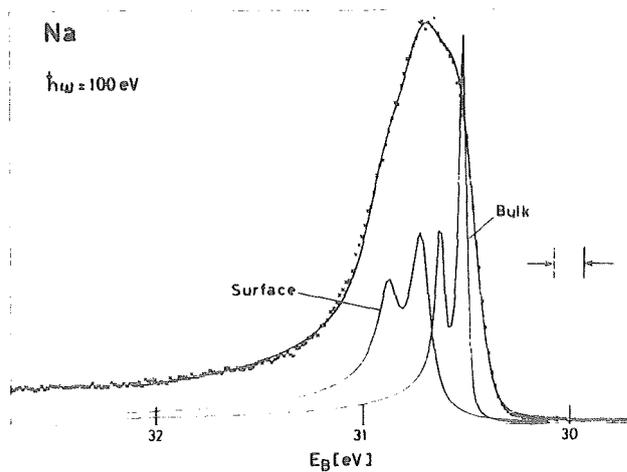
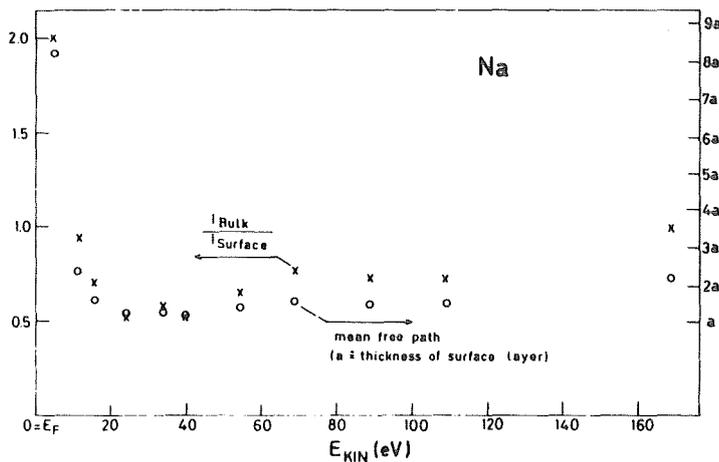


Abb.2: Durch Überlagerung des 2p-Spin-Bahn-Dubletts, dessen Parameter oberflächen-unempfindlichen XPS-Messungen (2) entnommen sind, mit einem energiewersetzten Dublett für die Oberfläche gelingt es, das Meßspektrum zu reproduzieren.

Die Messungen an der Al(100)-Oberfläche bestätigen einen von Eberhardt (5) gefundenen oberflächen-abhängigen Effekt; es ist jedoch nicht zweifelsfrei zu klären, ob es sich um eine Verbreiterung, eine von Eastman (6) gemessene Bindungsenergieverschiebung oder um beides zugleich handelt, was nach einer Berechnung erwartet wird (7). Unser experimenteller Befund des Fehlens jeglicher Oberflächeneffekte an der (111)-Oberfläche bedarf noch der theoretischen Erklärung.



Die Ergebnisse für Na ($\Delta E_B=210$ meV) und Mg ($\Delta E_B=138$ meV) können mit Hilfe der Oberflächenenergien nach einem Modell von B. Johansson erklärt (8) werden. Es eröffnet sich damit ein Weg, diese Materialgröße auch am Festkörper unmittelbar zu messen, während bisher nur Daten über die Flüssigkeiten vorlagen.

Abb.3: Die Abhängigkeit des Oberflächenanteils von der kinetischen Energie steht in guter Übereinstimmung mit dem Verlauf, den man aus der freien Weglänge der Elektronen erwartet(4).

- (1) F. Gerken, J.Barth, R. Kammerer, L.I.Johansson u. A.Flodstrøm, Contributed Paper, ECOSS IV, to be published in Surface Science.
- (2) P.H. Citrin, G.K.Wertheim und Y. Baer, Phys. Rev. B16, 4256 (1977)
- (3) S. Doniach und M. Sunjic, J. Phys. C 3, 285 (1970)
- (4) R. Kammerer, J.Barth, F. Gerken, A. Flodstrøm u. L.I.Johansson, wird veröffentlicht in Solid State Communications
- (5) W. Eberhardt, G.Kalkoffen und C.Kunz, Solid State Comm. 32, 901 (1979)
- (6) T.-C. Chiang u. D.E. Eastman, Phys. Rev. B23, 6836 (1981)
- (7) E. Wimmer, M.Weinert, A.J.Freeman u. H.Krakauer, Phys.Rev.B 24, 2292 (1981)
- (8) A. Rosengren und B. Johansson, Phys.Rev. B22, 3706 (1980)

Interschalen-Wechselwirkung in Photoemission an Festkörpern

J. BARTH, F. GERKEN, C. KUNZ, J. SCHMIDT-MAY und F. SLOTTKE

Die Untersuchung der Kopplung der Photoionisation verschiedener Schalen (Inter-shell Interactions) bildet bereits seit Jahren einen Schwerpunkt der Arbeiten am FLIPPER und wurde ausgedehnt auf die gesamte Reihe der Seltenen Erd-Metalle (Ce bis Lu) und die leichten 3d-Übergangsmetalle (Ca und Sc bis Cr). Stellvertretend für die Vielzahl der gewonnenen Resultate sollen hier unsere Ergebnisse am Seltenen Erd-Metall Tm (Grundzustand: $Xe\ 4f^{12}(5d\ 6s)^3$) eingehender dargestellt werden. Die Energieverteilung der Photoelektronen aus dem Valenz-Bereich (Abb. 1) zeigt reiche Strukturen, die auf die Multiplett-Aufspaltung der nur teilweise gefüllten, atomar lokalisierten $4f^{11}$ -Schale nach der Photoionisation zurückzuführen ist. Bei 170 eV Anregungsenergie setzen die Übergänge aus dem 4d-Rumpfniveau in die leeren 4f-Zustände ein ($4d^{10}\ 4f^{12} \rightarrow 4d^9\ 4f^{13}$). Diese Anregungen führen zu Resonanz-Strukturen im Absorptionsspektrum (Abb. 2, obere Kurve), die von der Multiplett-Aufspaltung der $4d^9\ 4f^{13}$ -Konfiguration stammen. Die angeregten $4d^9\ 4f^{13}$ -Zustände können durch Autoionisation zerfallen und dadurch den Photoionisationswirkungsquerschnitt der äußeren Schalen an die 4f-Anregungen koppeln (z.B. $4d^9\ 4f^{13} \rightarrow 4d^{10}\ 4f^{11} + \text{Photoelektron}$). Diese Kopplung zeigen die Kurven a - c in Abb. 2 deutlich. Gemessen wurde jeweils die Photoemissions-Intensität verschiedener Strukturen im Valenzbereich (s. Abb. 1) als Funktion der Photonenenergie (CIS-Spektren). Unsere CIS-Spektren der verschiedenen $4f^{11}$ -Endzustände und des (5d 6s)-Valenzbandes demonstrieren, daß der FLIPPER-Monochromator auch sechs Jahre nach erster Inbetriebnahme entsprechenden anderen Instrumenten überlegen ist. Durch die hohe Auflösung der Meßapparatur gelang es uns, eine unterschiedliche Kopplung der drei Absorptionsstrukturen an die verschiedenen Valenzbandendzustände zu etablieren. Erst kürzlich veröffentlichte Daten anderer Autoren¹ zeigen dagegen lediglich den seit mehreren Jahren bekannten Effekt der Resonanzkopplung, ohne das unterschiedliche Verhalten jedes einzelnen $4f^{11}$ -Endzustandes aufzulösen, dessen genaue Kenntnis jedoch erst Rückschlüsse auf die Details der Interschalen-Wechselwirkung ermöglicht.²

Eine besondere Bedeutung kommt der Messung der Resonanzkopplung bei der Untersuchung gemischtvalenter Systeme zu. Solche Systeme, in denen ein Seltenes Erd-Atom in verschiedenen Valenzen (verschiedenen 4f-Besetzungen) vorliegt, sind von großer Bedeutung wegen ihrer interessanten Eigenschaften. Indem wir auch für diese Materialien die Photoemissionsintensität der Valenz-Strukturen durch die 4d-Resonanz verfolgen, können wir eine Zuordnung der Strukturen zu den entspre-

chenden 4f-Grundzuständen treffen, da jede Resonanz spezifisch für diesen Grundzustand ist³ ("fingerprint technique"). Als Beispiel für solche Untersuchungen zeigt Abb. 3 die Absorption (links oben) und zwei 4f-Resonanzkurven von oxidiertem Eu-Metall; die Zuordnung zu den Valenz-Strukturen ist ebenfalls gegeben. Wir konnten durch diese Messungen zeigen, daß oxidiertes Eu-Metall sowohl 2- als auch 3-wertige Eu-Atome enthält. Die Analogie zum gemischtvalenten System Eu_3O_4 ⁴ wird gegenwärtig untersucht.

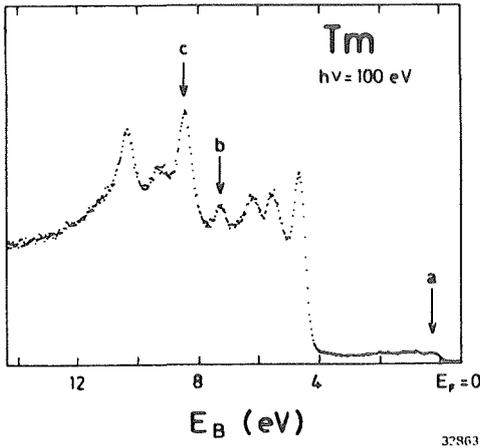


Abb.1: Valenzbereich von Thulium (Tm). Für das $(5d\ 6s)^3$ Valenzband (a) und zwei $4f^{11}$ -Endzustände (b und c) ist der Intensitätsverlauf in der $4d \rightarrow 4f$ -Resonanz in Abb. 2 dargestellt.

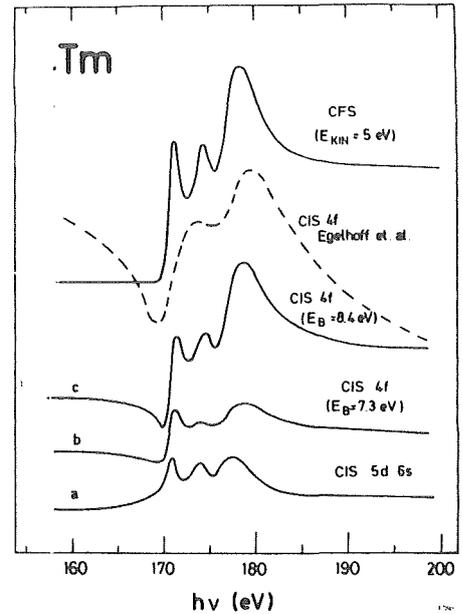


Abb.2: Constant Final State (CFS)-Spektrum und Constant Initial State (CIS)-Spektren der Strukturen a, b und c aus Abb.1 vom Tm im Bereich der $4d \rightarrow 4f$ Anregung im Vergleich zu einem CIS-Spektrum von Egelhoff et al.¹ (gestrichelte Kurve).

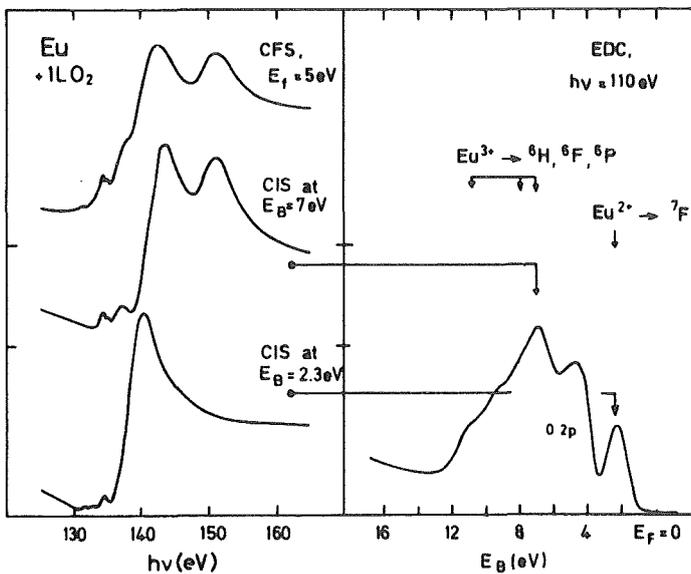


Abb.3: CFS-Spektrum von leicht oxidiertem Eu im Vergleich zu CIS-Spektren der verschiedenen Valenzstrukturen im Bereich der $4d \rightarrow 4f$ -Anregung. Die unterschiedliche Linienform der CIS-Spektren ermöglicht eine eindeutige Zuordnung der Valenzstrukturen zu den Endzuständen $4f^5(\text{Eu}^{3+})$ und $4f^6(\text{Eu}^{2+})$.

REFERENZENZEN:

- 1) W.F. Egelhoff, E.E. Tibbetts, M.H.Hecht and I. Lindau, Phys. Rev. Lett. 46, 1071 (1981)
- 2) F.Gerken, J.Barth and C.Kunz, Phys. Rev. Lett. 47, 993 (1981)
- 3) J.W.Allen, L.I.Johansson, I.Lindau and S.B.Hagstrom, Phys.Rev.B, 21, 1335 (1980)
- 4) B.Batlogg, E.Kaldis, A.Schlegel and P.Wachter, Phys.Rev.B 12, 3940 (1975)

Kantennahe Struktur von α - und γ -Cer

B. Lengeler*, G. Materlik**, J. Müller*

Die kantennahe Struktur der Röntgenabsorption wurde an den L_1 , L_2 und L_3 Kanten von phasenreinem α - und γ -Cer und an einer Reihe von Cer Verbindungen gemessen. Die L_2 und L_3 Kanten zeigen eine weisse Linie wie alle Seltenen Erden. Der wesentliche Unterschied zwischen α - und γ -Cer ist ein weiterer Peak ca. 10 eV oberhalb der weissen Linie, der in α -Cer und in allen Cer Verbindungen auftritt, in denen Cer in komprimierter Form vorliegt (ScCe, CePd₃, CeRu₂). Er tritt auch in verdünnten Ce-haltigen Legierungen auf, wo Ce keine Ce Nachbarn hat, wenn nur das Ce komprimiert wird. Berechnungen der kantennahen Struktur in α - und γ -Cer sind im Gange.

* IFF, KFA Jülich

** HASYLAB, DESY Hamburg

Röntgenabsorptionsspektroskopie am Valenzübergang von SmS

K.H. Frank, J. Feldhaus, G.Wortmann und G.Kaindl

Institut für Atom und Festkörperphysik, Freie Universität Berlin

G. Materlik, Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB, DESY

Der bekannte diskontinuierliche Valenzübergang in SmS bei ca. 6.5 kbar wurde mit Röntgenabsorptionsspektroskopie untersucht. Dazu wurden eine hydrostatische Hochdruckzelle entwickelt und vorbereitende Experimente mit unserem (Labor-)EXAFS-Spektrometer durchgeführt /1/. Am EXAFS-II Meßplatz von HASYLAB wurde die Kanten- und EXAFS-Struktur von SmS bis zu Drucken von 7.5 kbar eingehend untersucht. In Fig. 1 sind Absorptionsspektren der Sm L_{III} -Kante bei verschiedenen Drucken dargestellt. Die Analyse der Meßpunkte erfolgte durch Anpaßung von zwei mit Fano-Resonanzkurven modifizierten Absorptionskanten, die für Sm^{2+} bzw. Sm^{3+} typisch sind. Die Kantenspektren zeigen im gemischt-valenten Bereich eine deutliche, druckinduzierte Zunahme des 3-wertigen Anteils. Aus den EXAFS-Spektren ist im gemischt-valenten Bereich eine deutliche Dämpfung der EXAFS-Struktur abzulesen. Ob dies auf eine Abnahme des Debye-Waller-Faktors oder aber auf eine aus dem gemischt-valenten Zustand resultierende Phononenanomalie zurückzuführen ist, wird gegenwärtig noch untersucht.

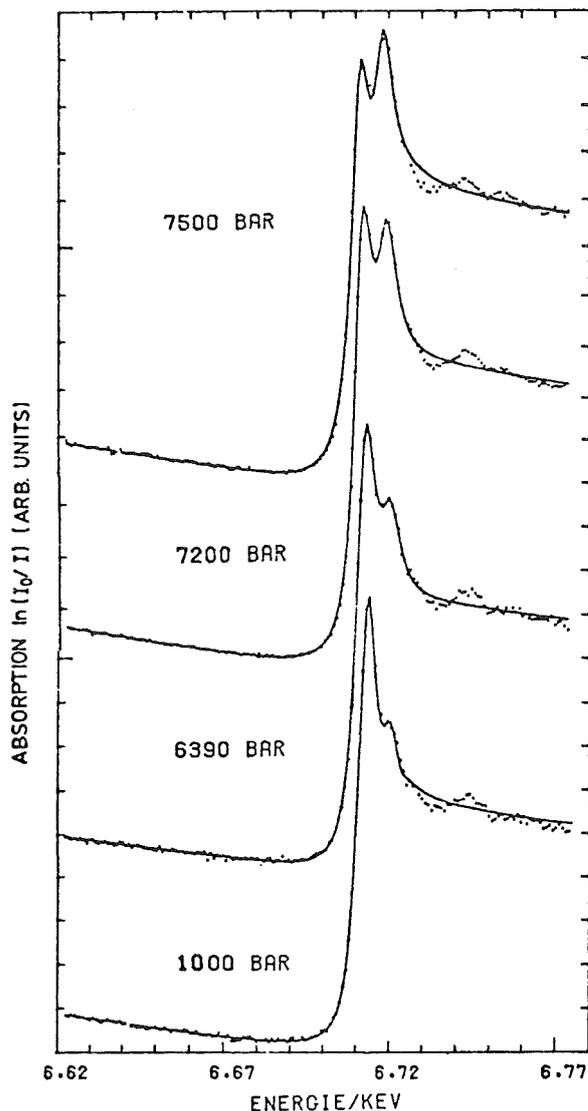


Fig. 1: Sm L_{III} -Absorptionskanten von SmS bei verschiedenen Drucken (vorläufige Auswertung)

/1/ K.H. Frank, J. Felhaus, G. Kaindl, G. Wortmann, contribution to: Physics of Solids Under High Pressure (Bad Honnef, 1981).

Photoemissionsuntersuchungen zur elektronischen Struktur von adsorbiertem und festem Pyridin auf Silber

J.-H. Fock^(a), F. Gerken^(a), J. Schmidt-May^(a) und E.E. Koch^(b)

(a) II. Institut für Experimentalphysik, Universität Hamburg

(b) Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB, DESY

Pyridin (C_5H_5N), adsorbiert auf Silber, hat in jüngster Zeit wegen der Beobachtung der oberflächenverstärkten Ramanstreuung (SERS - surface enhanced Raman scattering) (1) starke Aufmerksamkeit gefunden, wobei die detaillierte Erklärung dieses Effekts noch aussteht. Um zur Klärung der beteiligten elektronischen Niveaus beizutragen, haben wir Photoemissionsmessungen an polykristallinen Aufdampfschichten von reinem Silber durchgeführt (2). Dabei konnten wir lokale Oberflächen-d-Bandzustände etwa 4.5 eV unterhalb E_{Fermi} an der Oberkante des 4d-Bandes nachweisen. Das Signal von diesen lokalen Zuständen war besonders groß, wenn das Silber auf eine gekühlte Unterlage aufgedampft wurde.

In einem weiteren Schritt wurden jetzt im Bereich $20 \leq h\nu \leq 170$ eV Photoelektronenspektren von kondensiertem und adsorbiertem (6 Langmuir) Pyridin auf polykristallinem Silber am Flipper-Monochromator gemessen. Die dicken kondensierten Schichten zeigen in der Photoemission die gewohnte Entsprechung zum Gasspektrum mit einer konstanten adiabatischen Relaxationsverschiebung von $\Delta E_R = 1.1$ eV. Die dünnen adsorbierten Schichten zeigen 1.6 eV oberhalb der obersten besetzten Pyridinorbitale ($2b_1\pi$, $11a_1n$, $1a_2\pi$) und 3.8 eV unterhalb E_F in den Differenzspektren eine zusätzliche scharfe Emissionsbande (Pfeil in Abb. 1). Über eine ähnliche Beobachtung für Äthylen (C_2H_4) Benzol (C_6H_6) (3) und Pyridin (4) auf einer kristallinen Ag(110) Oberfläche wurde schon von anderen Autoren berichtet. Als Erklärung bietet sich die Wechselwirkung der besetzten und unbesetzten Pyridinorbitale mit dem Silber-Valenzband an. Dabei ist von Bedeutung, daß die neue Pyridin-induzierte Photoemission energetisch mit den lokalen 4d-Oberflächenzuständen des Silbers (2) nahezu entartet ist. Obwohl eine genaue Erklärung noch durch Clusterrechnungen gestützt werden müßte, scheint diese Bande in der Photoemission von Pyridin auf Silber, die eine vergleichbare Intensität wie die besetzten Pyridinorbitale zeigt, durch Wechselwirkung mit den Ag-Oberflächenzuständen zustande zu kommen.

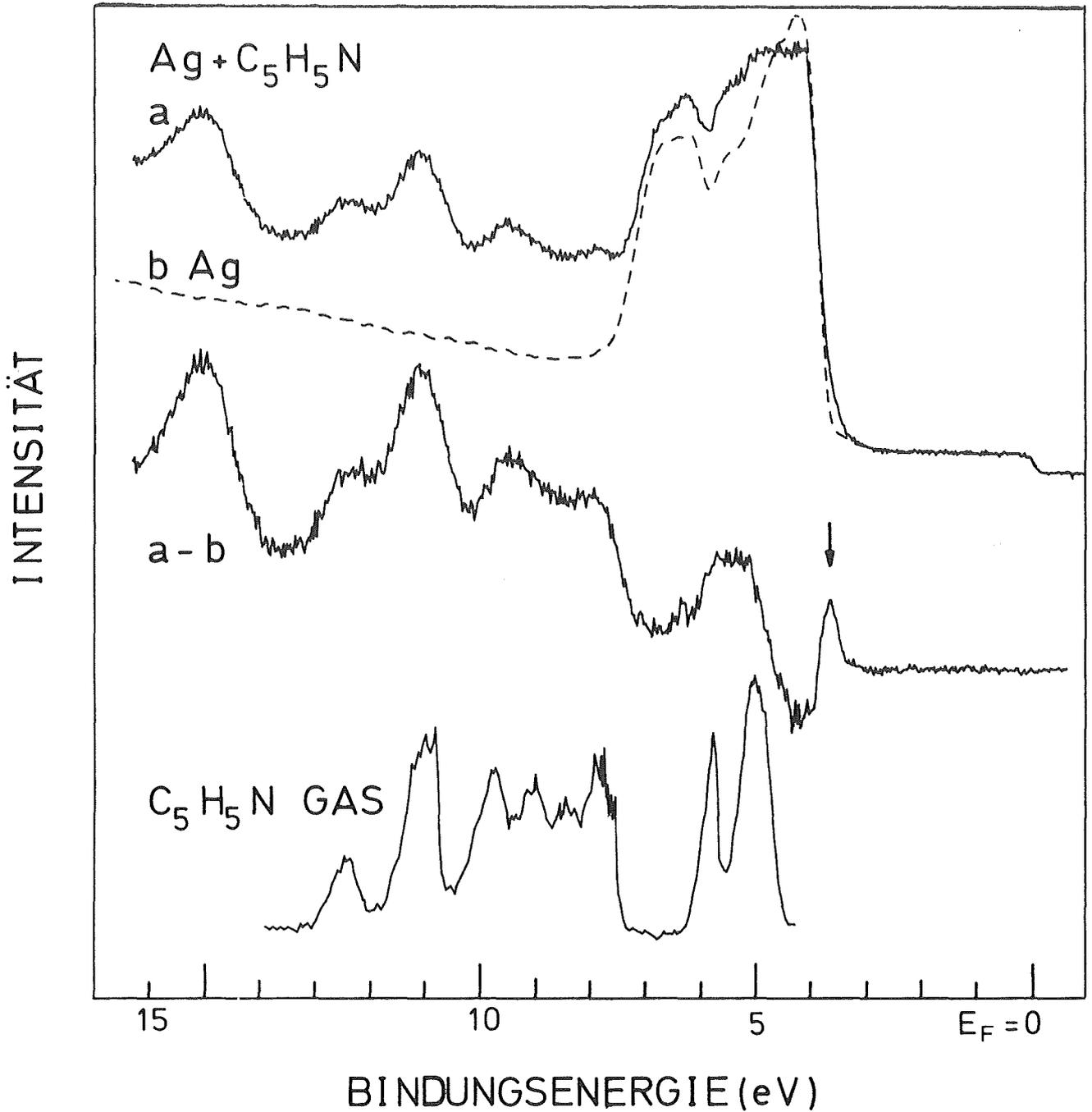


Abb.1: EDC's bei $h\nu=40\text{eV}$ für Ag, Ag+Pyridin und Differenzspektrum. Zum Vergleich ist das Pyridin Gasspektrum (Turner) bei $h\nu=21.2\text{eV}$ gezeigt.

- (1) R.K. Chang and T.E. Furtak, eds., "Surface Enhanced Raman Scattering", Pergamon Press, London 1981.
- (2) E.E. Koch, J. Barth, J.-H. Fock, A. Goldmann and A. Otto, Solid State Commun., submitted.
- (3) S.R. Kelemen and T.E. Fischer, Surface Science 102, 45 (1981).
- (4) S.R. Kelemen and A. Kaldor, Chem. Phys. Letters 73, 205 (1980).

Beobachtung des Überganges vom adiabatischen zum "sudden"-Bereich
im Photoelektronenspektrum des Nickel 3p - Rumpfniveaus

M. Iwan, K. Horn, C. Mariani und H.U. Middelmann
(Fritz-Haber-Institut der MPG, Berlin)

Relaxationseffekte bei der Anregung von Rumpfelektronen sind von großer Bedeutung für das Verständnis des Photoemissionsprozesses. Entsprechend der Endzustandsenergie E_f des emittierten Elektrons kann ein adiabatischer bzw. ein "sudden"-Bereich definiert werden¹. Es gibt eine Reihe von Phänomenen, die in der "sudden approximation" verstanden werden können. Dazu gehören z.B. die asymmetrische Verbreiterung von Rumpfniveaulinien bzw. das Auftreten von "shake-up" Strukturen in XPS-Spektren². In der adiabatischen Näherung, d.h. das angeregte Elektron bewegt sich mit einer kinetischen Energie nahe Null vom angeregten Atom, wird das Lochpotential adiabatisch eingeschaltet. Das zurückbleibende Elektronensystem erniedrigt dabei seine Energie in der Umgebung der zusätzlichen positiven Ladung. Das System des angeregten Atoms bleibt dabei im Grundzustand. Die entstehende "Relaxationsenergie" wird auf das emittierte Elektron übertragen, und im Spektrum erwartet man z.B. eine einzige Rumpfniveau-Linie (die sog. Hauptlinie) mit einer Energie, die um die Relaxationsenergie größer ist als in einem Eielektronenbild. Die "sudden approximation" stellt das andere Extrem dar, in dem das Photoelektron das angeregte Atom mit großer kinetischer Energie (>100 eV) verläßt und das Lochpotential sehr plötzlich "eingeschaltet" wird. In dieser Näherung sind die Eigenzustände des angeregten Atoms Eigenzustände eines neuen Hamilton-Operators, und die Wellenfunktionen der zurückbleibenden Elektronen haben einen ähnlichen Überlapp mit den Anregungszuständen des Ions¹. Daraus resultiert eine gewisse Wahrscheinlichkeit, das zurückbleibende Ion im angeregten Zustand vorzufinden. Im Photoelektronenspektrum stellt sich dieser Effekt dann durch die sog. "shake-up"-Linien bei höheren Bindungsenergien dar. Diese Untersuchungen sind wichtig für die Frage, inwieweit das Eielektronenbild Gültigkeit hat oder ob nicht die Elektron-Elektron-Wechselwirkung bei der Photoionisation eine wichtige Rolle spielt. Unklar war bisher, bei welchen Energien der Übergang zwischen den beiden Bereichen stattfindet. Wir sind der Fragestellung am Beispiel des Nickel 3p-Rumpfniveaus nachgegangen. Aus XPS-Untersuchungen ist bekannt, daß neben den Rumpfniveaulinien stets auch Satelliten-Strukturen mit einer um 6 bzw. 12 eV höheren Bindungsenergie liegen. In einem einfachen Relaxations-

modell unter Annahme der "sudden approximation" können diese Strukturen durch $nl^{m-1}3d^9$ und $nl^{m-1}3d^{10}$ Endzustände erklärt werden ($nl=2p, 2s, 3p, 3s$). Unsere mit Synchrotronstrahlung beim HASYLAB aufgenommenen Spektren zeigen, daß für kinetische Energien der emittierten Elektronen $\ll 70$ eV der $3p^5 3d^9$ Endzustand nicht beobachtet wird (Abb. 1 und 2). Damit wird zum ersten Mal der Übergang zum adiabatischen Bereich nachgewiesen, bei dem nur noch der $3p^5 3d^{10}$ -Endzustand auftritt (Abb. 2).

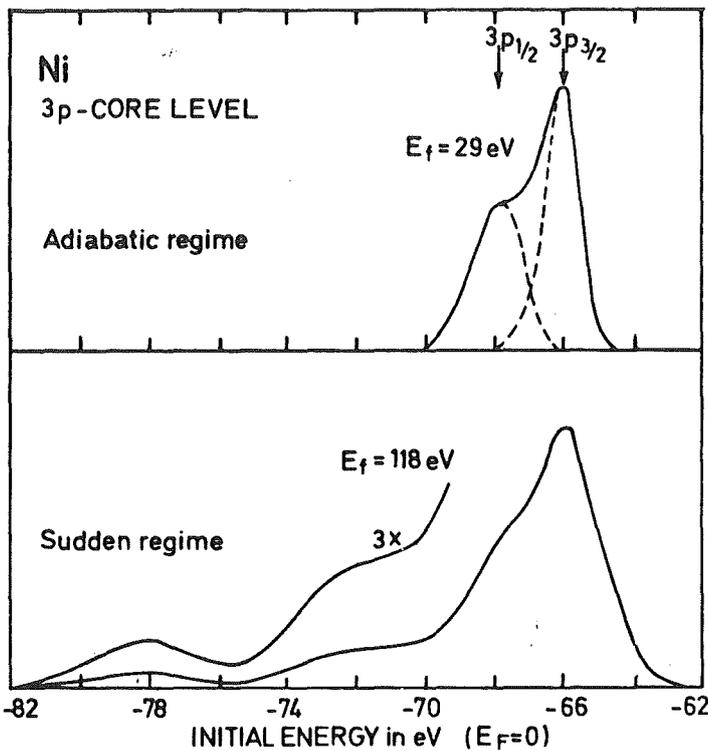


Abb. 1: Im oberen Teil erkennt man im Photoelektronenspektrum nur das Spin-Bahn aufgespaltene 3p-Niveau ($3p^5 3d^{10}$ -Endzustand). Im unteren Teil erkennt man die shake-up Struktur mit der typischen Multiplettaufspaltung für einen $3p^5 3d^9$ -Endzustand. E_f ist die kinetische Energie bzgl. E_F .

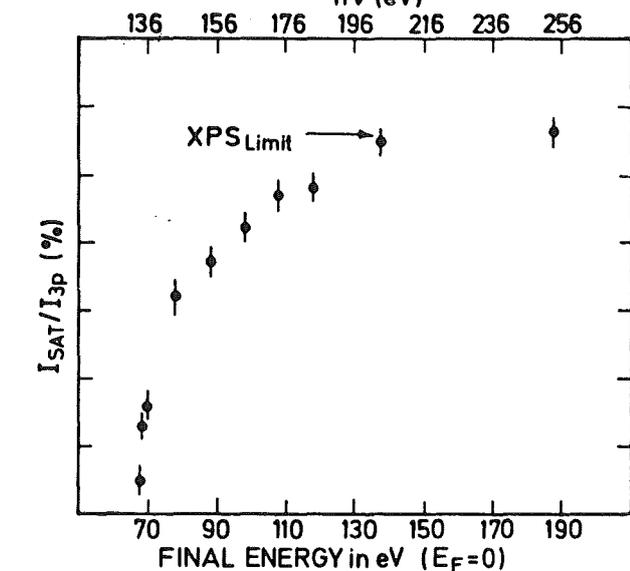


Abb. 2: Die Intensität der shake-up Struktur (I_{SAT}) relativ zur Hauptlinie (I_{3p}) ist in Abhängigkeit der kinetischen Energie dargestellt. Unterhalb der Energie $E_f = 69$ eV ist die shake-up Struktur experimentell nicht nachzuweisen.

1. e.g. J.W. Gadzuk und M. Sunjic, Phys. Rev. B12, 524 (1975)
2. e.g. J.C. Fuggle, R. Lässer, O. Gunnarsson and K. Schönhammer, Phys.Rev.Letts. 44, 1090 (1980)

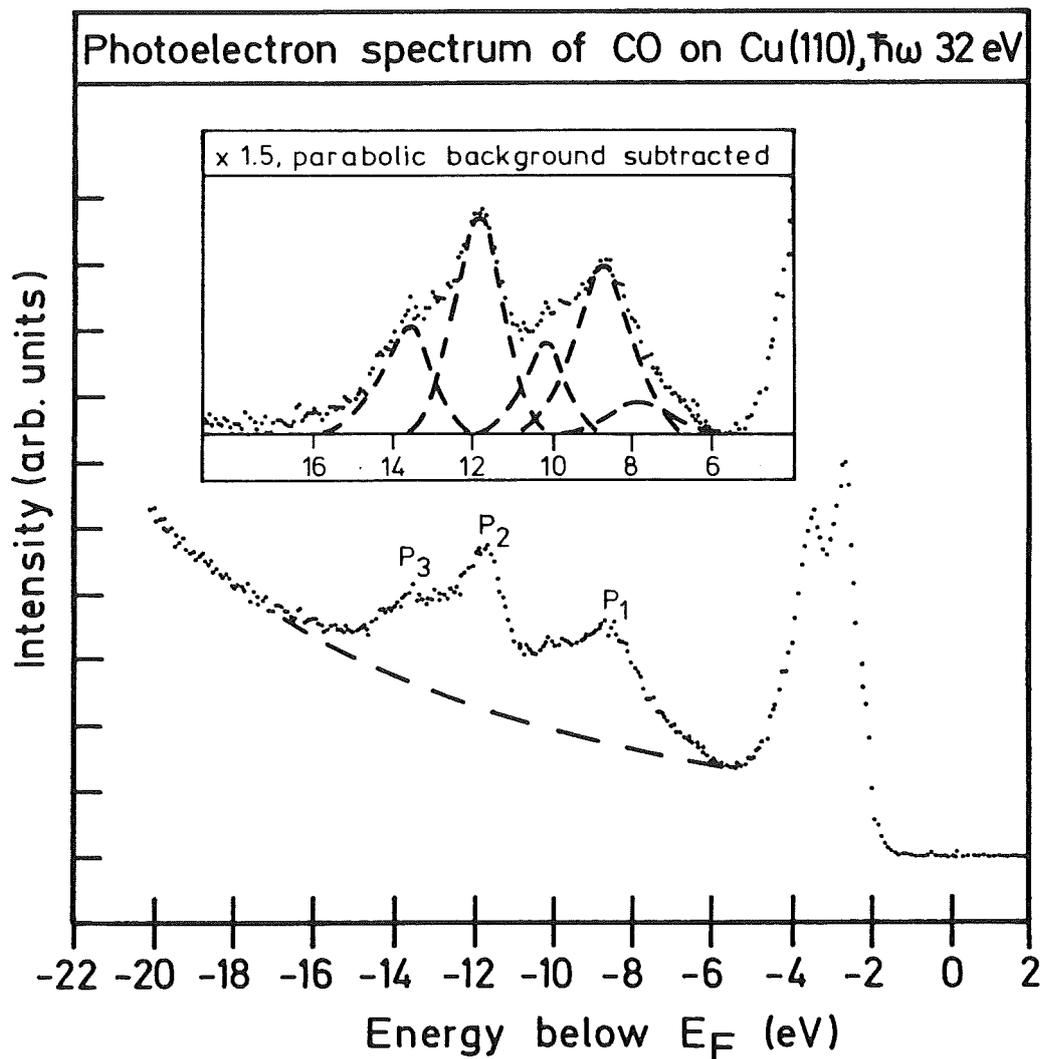
Untersuchungen von Satellitenstrukturen im Valenz-Photoelektronenspektrum von CO auf Cu(110)

H. U. Middelmann, C. Mariani, M. Iwan und K. Horn

Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft

1000 Berlin 33, Faradayweg 4-6

Der Ursprung von Satellitenpeaks im Photoemissions-(PE)-Spektrum von Atomen ist von großem Interesse, weil man dadurch Informationen über den Photoemissionsprozeß erhält, und weil eine vollständige Interpretation des Spektrums für die Benutzung der Photoemission als analytische Methode von Bedeutung ist. Wir haben das Intensitätsverhalten eines solchen Satelliten im Valenz-Photoelektronen-Spektrum von CO auf Cu(110) als Funktion der Photonenenergie gemessen. Ein Spektrum dieses Adsorbatsystems ist in Abb. 1 dargestellt. Der mit P_1 bezeichnete Peak ist auf



Emission aus dem 5σ und 1π -Orbital des CO zurückzuführen, der Peak P_2 stammt vom 4σ Molekül-Orbital. (Die Zuordnung wurde aus einer Arbeit von Allyn et al. [1] übernommen). Der mit P_3 bezeichnete Peak ist der oben erwähnte Satellit. Im PE-Spektrum von CO in der Gasphase gibt es an dieser Position keine Emission. Das Auftreten von P_3 hängt also mit den Veränderungen in der elektronischen Struktur zusammen, die durch den Adsorptionsvorgang zustande kommt.

Aus dem Verlauf der Intensität von P_3 als Funktion der Photonenenergie kann man erkennen, daß P_3 ein ähnliches Verhalten zeigt wie P_2 (4σ m.o.). Dies läßt eine Verbindung des Satelliten mit der 4σ -Emission vermuten. Eine genauere Betrachtung des Spektrums, das (nach Abzug des Beitrages der gestreuten Elektronen) im oberen Teil der Abbildung 1 dargestellt ist, zeigt einen ähnlichen Satelliten auch am $5\sigma/1\pi$ -Niveau; dies wird durch eine Gauss-Kurven-Analyse des Spektrums besonders deutlich. Wegen des geringen Abstandes (~ 2 eV) der Satelliten von der Hauptlinie kann ausgeschlossen werden, daß die Satelliten durch Anregung eines 1π in ein $2\pi^*$ -Orbital zustande kommen; dieser Mechanismus wurde zur Erklärung von Satelliten im Spektrum von Gasphasen-CO vorgeschlagen [2]. Die Form der Spektren legt vielmehr nahe, das Auftreten der Satelliten durch einen charge-transfer-Abschirm-Prozeß zu erklären, bei dem das erste unbesetzte Orbital durch den Ionisationsprozeß in seiner Energie abgesenkt wird. Es findet dann ein Ladungsübertrag vom Metall in das unbesetzte Orbital statt, wodurch das vom Photon erzeugte Loch abgeschirmt wird. Dieser Prozeß, der von Schönhammer und Gunnarsson zur Erklärung der 3-Peak Struktur der C1s-Emission von CO auf Cu(100) herangezogen wurde [3], ist hier zum ersten Mal im Valenzspektrum von Adsorbaten beobachtet worden.

1. C.L. Allyn, T. Gustafsson, E.W. Plummer, Sol. State Comm. 24 (1977) 531.
2. G. Loubriel, Phys. Rev. B. 20 (1979) 5339.
3. K. Schönhammer, O. Gunnarsson, Phys. Rev. Letters. 41 (1978) 1608.

Oberflächen- und volumenempfindliche Photoemission an Cu: "shake-up"-Strukturen im Valenzband- und Rumpfniveaubereich

M. Iwan (Fritz-Haber-Institut der MPG, Berlin) und R. Engelhardt (II. Inst. Exp. Phys., Univ. Hamburg)

Mit Hilfe der resonanten Photoemission mit Synchrotronstrahlung konnte kürzlich in den Photoelektronen(PE)-Spektren eine "shake-up" Struktur im Valenzbandbereich beobachtet werden, die eine Überhöhung bei der Einsatzenergie für das 3p-Niveau zeigte¹. Dieser "shake-up" konnte als quasiaatomarer $3d^8$ -Endzustand (Leitungselektronen vernachlässigt) erklärt werden. Unsere neuen Messungen an Cu-Aufdampfschichten zeigen, daß die Struktur auch in XPS beobachtet wird. Durch winkelaufgelöste Photoemission kann gezeigt werden, daß das Auftreten des "shake-up"-Multipletts ein Volumeneffekt ist. Bei streifendem Abnahmewinkel für die Photoelektronen, d.h. bei extrem oberflächenempfindlicher Meßeinstellung ist die $3d^8$ -Struktur äußerst schwach, während sie bei senkrechtem Abnahmewinkel, d.h. bei volumenempfindlicher Meßeinstellung, ähnlich intensiv ist wie in früheren UPS-Messungen¹ (Abb. 1). Das ist ein deutlicher Hinweis darauf, daß es an der Oberfläche eine Verringerung der 3d-Delokalisierung und s-d Hybridisierung gibt, die zu einer reinen $3d^{10}$ -Konfiguration führt (Leitungselektronen vernachlässigt)². Die stärkere 3d-Delokalisierung im Volumen führt dazu, mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit durch Photoionisation aus einem $3d^9$ -Zustand in einen $3d^8$ -Endzustand anzuregen (shake-up), während das Hauptvalenzband einen $3d^9$ -Endzustand darstellt.

Analog zum Ni³ sollten auch in den Cu-Rumpfniveauspektren "shake-up" Strukturen auftreten. Abb. 2 zeigt ein Spektrum im Bereich der Cu-3p- und 3s-Anregung bei volumenempfindlicher Meßanordnung. Neben den Hauptlinien ($3p_{3/2}$, $3p_{1/2}$, 3s), die z.B. einem $3p^5 3d^{10}$ -Endzustand entsprechen, erkennt man Satelliten-Strukturen bei ca. < 20 eV tieferer Bindungsenergie, die einem $3p^5 3d^9$ bzw. $3s^1 3d^9$ -Endzustand (Leitungselektronen vernachlässigt) entsprechen. Diese Interpretation wird unterstützt durch die energetische Lage und die Multiplettaufspaltung wie sie aus Auger-Messungen bekannt sind⁴. Dabei werden nämlich durch $L_{23} M_{23} M_{45}$ - bzw. $L_{23} M_1 M_{45}$ -Übergänge dieselben Endzustände angeregt, die auch die "shake-up"-Endzustände darstellen. Es konnte also gezeigt werden, daß durch schwache Hybridisierung das Auftreten von "shake-up"-Strukturen begünstigt wird. Das zeigen auch PE-Spektren an Cu-Atomen, in denen die shake-up Struktur weit von irgendwelchen Resonanzen praktisch nicht existiert.⁵

REFERENZEN

- 1) M. Iwan et al., Phys. Rev. Lett. 43, 1829 (1979)
- 2) e.g. P.H. Citrin, G.K. Wertheim und Y. Baer, Phys. Rev. Lett. 41, 1425 (1978) und Referenzen darin.
- 3) S. Hüfner und G.K. Wertheim, Phys. Lett. 51A, 299 (1975)
- 4) E. Antonides, E.C. Janse und G.A. Sawatzky, Phys. Rev. B15, 1669 (1977)
- 5) H. Schröder, private Mitteilung.

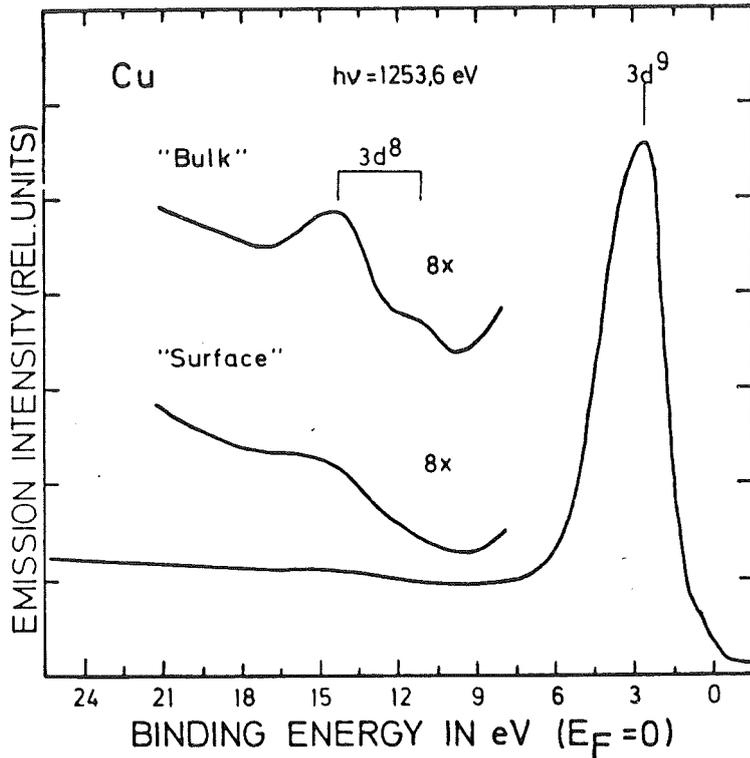


Abb. 1

Cu-Valenzbandspektren bei fast senkrechter Emission (bulk) und bei streifendem Abnahmewinkel für die Photoelektronen (surface).

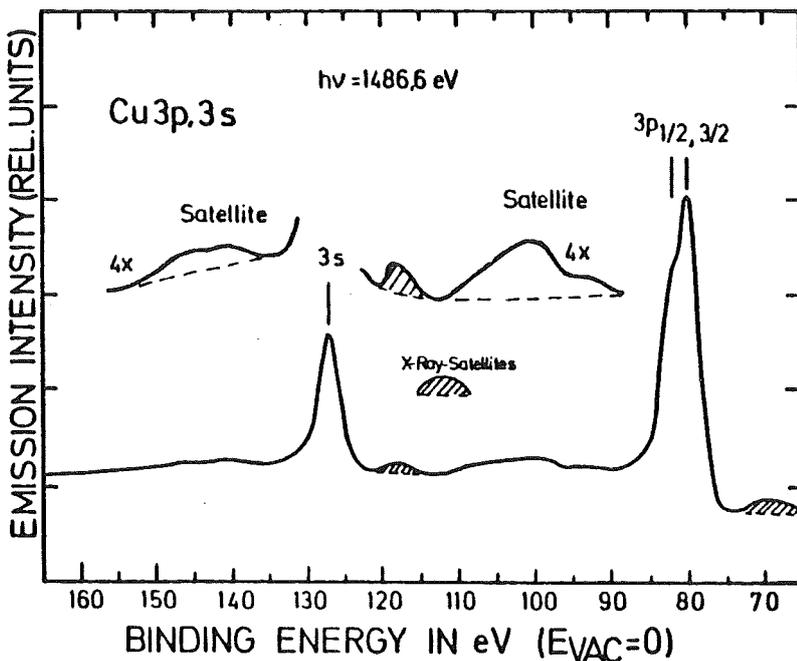


Abb. 2

3p und 3s Spektrum des Cu-Metall. Die Energielagen der Hauptpeaks sind gekennzeichnet. Es werden die erwarteten Satelliten beobachtet.

PHOTOEMISSIONS-UNTERSUCHUNGEN MIT SYNCHROTRONSTRAHLUNG

R.D. BRINGANS, H. HÖCHST, R.L. JOHNSON, L. LEY, J. REICHARDT

Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Heisenbergstrasse 1,
7000 Stuttgart 80

Die Photoemissionsanlage FLIPPER I wurde uns 1981 während zwei Meßperioden zur Verfügung gestellt. Die Anlage wurde mit einer kleinen Probenpräparationskammer und einem Probentransfersystem ergänzt. Die Präparationskammer ermöglicht in situ Herstellung von amorphen Halbleitern sowie Probenbehandlung mit einer Diamantfeile. Durch das Transfersystem konnte man Proben einschleusen, ohne das Vakuum in der Analysatorkammer zu beeinträchtigen.

Es sind Messungen an a-Ge, a-Ge:H, a-Si, a-Si:H, c-Si(111), Se, PbSe, TlSe, Na_xWO₃, Rb_xWO₃, TiN und ZrN durchgeführt worden. Die Auswertung der Ergebnisse findet zur Zeit statt. Von besonderem Interesse ist der Nachweis von Ladungsfluktuationen in amorphen Halbleitern, die nur mit der guten Auflösung (L200 meV) des Flipper-Monochromators nachzuweisen war. Die durchstimmbare Anregungsquelle erlaubte eine genaue Untersuchung von Resonanzen im Wirkungsquerschnitt für Titan und Zircon Nitrid und auch für die Wolfram-Bronzen. Erste Berichte über diese Meßergebnisse werden bei der DPG-Frühjahrstagung in Münster gegeben.

AUFBAU EINES PHOTOEMISSIONSMESSPLATZES MIT DEM
PLANSPIEGELMONOCHROMATOR FLIPPER II

R.L. JOHNSON, H. KÖLLN, L. LEY, J. REICHARDT

Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Heisenbergstr. 1,
7000 Stuttgart 80, BRD

Die unbestreitbaren Vorteile der Synchrotronstrahlung als Anregungsquelle für Photoemissionsmessungen haben uns veranlaßt, einen Meßplatz am HASYLAB aufzubauen, bestehend aus einem hochauflösenden Planspiegelmonochromator vom Typ "Flipper" und dem eigentlichen Photoelektronenspektrometer. Im Berichtszeitraum wurde das Gesamtsystem einschließlich Strahlführung zusammengebaut und die ersten Messungen mit der Synchrotronstrahlung erfolgreich durchgeführt.

Der Monochromator wurde mit Hilfe einer Golddiode als Detektor hinter dem Austrittsspalt justiert. Die Justierung des Parabolspiegels wurde iterativ durchgeführt - nach jeder Änderung wurde die nullte Ordnung registriert. Das Mikroprozessor-System mit D/A-Wandler ermöglicht die Aufzeichnung der Intensität als Funktion der Gitterdrehung mit sehr hoher Genauigkeit (Auflösung des Haidenhain-Längenmeßsystems $0.5\mu\text{m}$). Auf diese Art und Weise ist es auch möglich, die vertikale Ausdehnung der Quelle - einem sehr wichtigen Parameter für einen eintrittspaltlosen Monochromator - zu bestimmen. Bei 50mA 3.3GeV in DORIS haben wir eine Quellhöhe (FWHM) von 3mm gemessen.

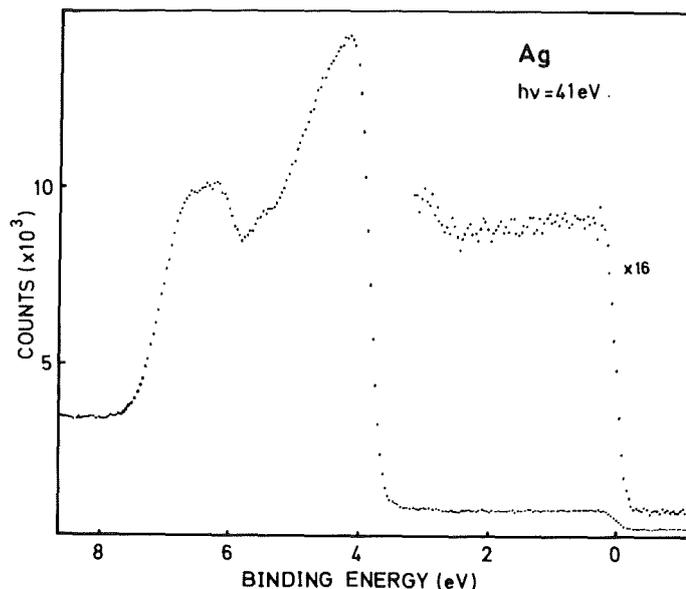
Aufgrund des bevorstehenden Umbaus von DORIS wurde auf eine genaue Eichung des Monochromators verzichtet. Stattdessen wurden Messungen der $\text{Al}_{\text{LII,III}}$ -Absorptionskante eines 1000\AA Al-Filters, montiert auf einem Filterrad vor dem Monochromator, durchgeführt. Solche Messungen ermöglichten eine Kalibrierung des Elektronen-

energieanalysators, mit dem die Fermikante einer Goldprobe bei verschiedenen Photonenenergien registriert wurde. Auf diese Weise wurde eine erste Eichung durchgeführt. Die Stabilität und Reproduzierbarkeit des Systems wurden kontrolliert. Wir stellten fest, daß die Verankerung des Monochromators verbessert werden muß, und daß die Temperaturschwankungen in der Halle unannehmbare Änderungen der Analysatorspannungen verursachen. Eine temperaturunempfindliche Elektronik für den Analysator wurde bereits in Stuttgart entwickelt, doch eine ausreichende Klimatisierung der Experimentierhalle würde allen Experimenten zugute kommen.

In der kurzen, zur Verfügung stehenden Meßzeit wurden winkelaufgelöste Messungen mit einer Rotationsblende im Zylinderspiegelanalysator bei verschiedenen Photonenenergien an polykristallinem Gold und Silber durchgeführt. Wir konnten uns von der Funktionsfähigkeit des gesamten Photoemissionsmeßplatzes aufgrund dieser Testmessungen überzeugen. Abbildung 1 zeigt ein typisches Silber-Spektrum, aufgenommen bei 41eV - zu bemerken sind die gute Intensität und Auflösung.

Abbildung 1.

Polykristallines Silber-Photoemissionsspektrum (EDC), $h\nu = 41\text{eV}$, $E_p = 10\text{eV}$. DORIS 3.3GeV. 44mA.



Testexperimente mit einem zweidimensionalen Analysator für winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie an Festkörperoberflächen

D. Rieger¹⁾, V. Saile²⁾, R. Schnell¹⁾ und W. Steinmann¹⁾

1) Sektion Physik der Universität München

2) HASYLAB, DESY, Hamburg

Wir haben den Analysator, über dessen Aufbau wir im vorigen Jahr berichtet haben¹⁾, im Berichtszeitraum getestet. Hierzu haben wir zunächst winkelintegrierte Energieverteilungen von Photoelektronen aus einer Si-(111) Oberfläche mit einer He-Lampe im Labor gemessen. Im August haben wir mit der unten dargestellten Anordnung [Abb. 1] erste winkelaufgelöste Messungen an pyrolytischem Graphit bei HASYLAB durchgeführt. Die Spektren, die wir bei einem bestimmten Polarwinkel gemessen haben [Abb. 2d], stimmen gut mit den von M. Ramm mit einem nulldimensionalen Analysator gemessenen²⁾ überein. Mit Hilfe der SIT-Kamera, des Bildspeichers und des Computers PDP11/23 war es möglich, die Polarwinkelverteilung bei einer festen Elektronenenergie zu erfassen. Nach Abzug des Untergrunds und Normierung erhielten wir Verteilungen [Abb. 2a,b,c], die mit den nulldimensionalen Spektren [Abb. 2d] übereinstimmen.

Nähere Angaben über diese Testexperimente finden sich in einem internen Bericht³⁾. Zur Zeit bauen wir eine verbesserte Version des Analysators mit einer magnetischen Abschirmung, einer großen Mikrokanalplatte und einer Probenpräparationskammer auf.

1) HASYLAB, Jahresbericht 1980, S. 77

2) M. Ramm, Interner Bericht, DESY F 41, HASYLAB 81/04, April 1981

3) D. Rieger, V. Saile, R. Schnell und W. Steinmann, Interner Bericht, DESY F 41, HASYLAB 1981, im Druck.

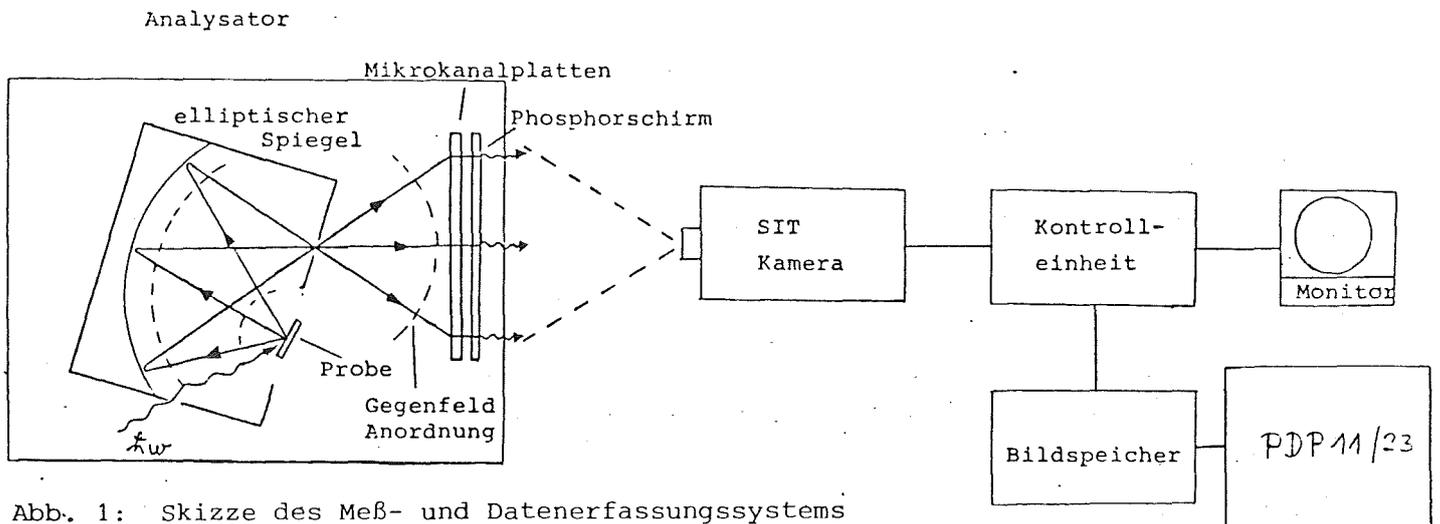


Abb. 1: Skizze des Meß- und Datenerfassungssystems

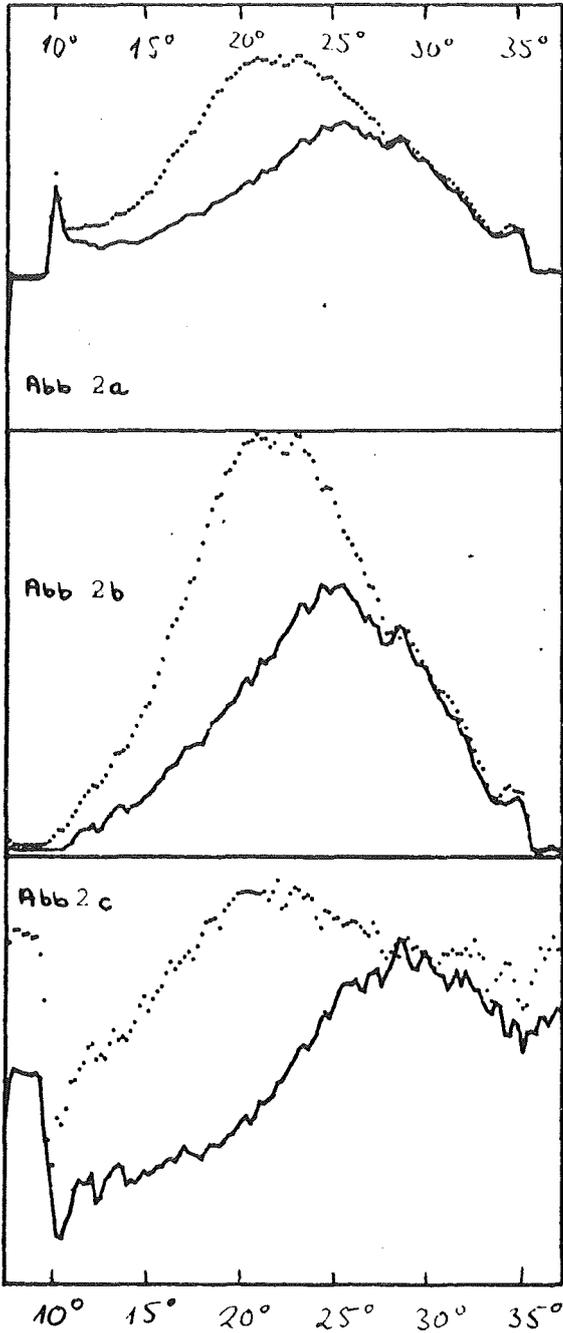


Abb. 2 a, b, c:

Mit dem Datenerfassungsgerät aufgenommene Winkelverteilungen für $\hbar\omega = 22.6$ eV und $E_B = 3.7$ eV (—) bzw. $E_B = 5.7$ eV (.....)

- 2a: Rohdaten
- 2b: nach Abzug des Untergrundes
- 2c: Normierte Daten

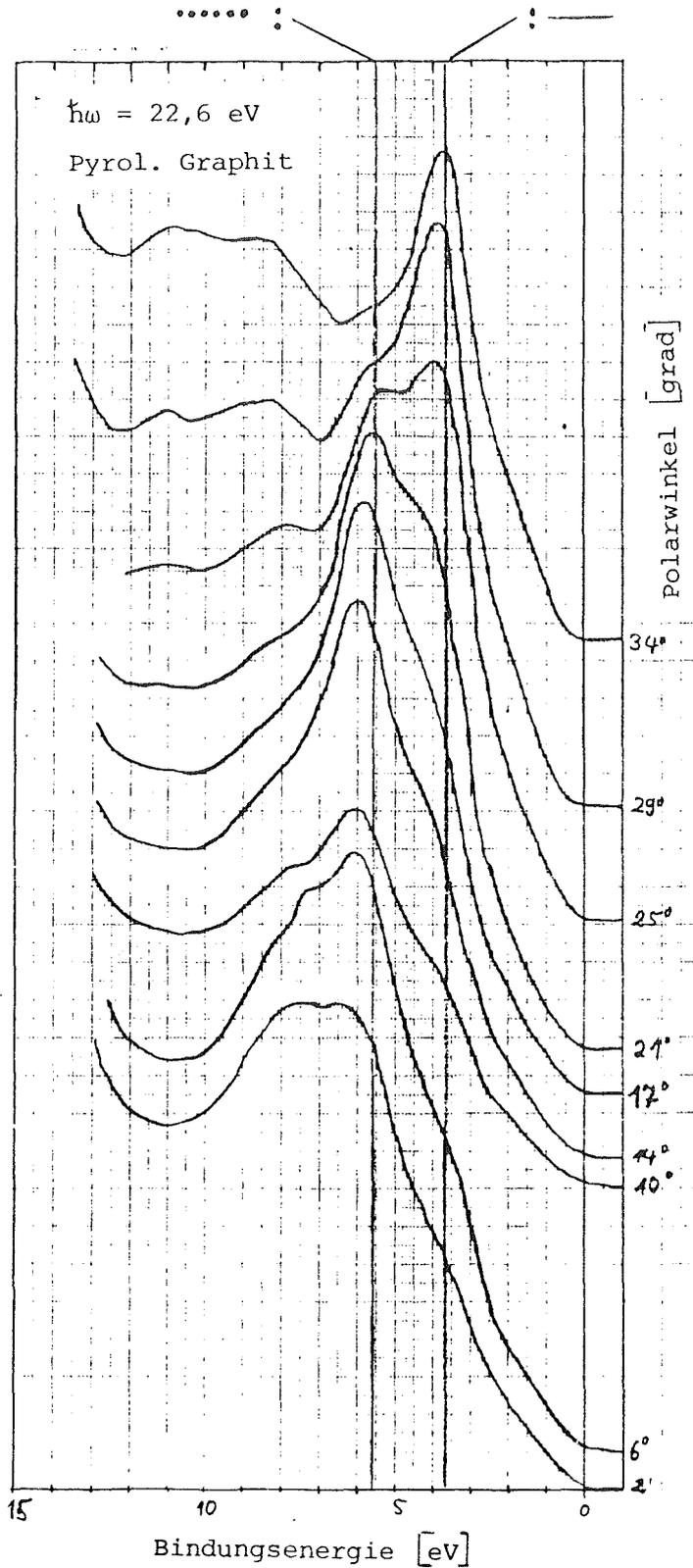


Abb. 2 d:

Energieverteilungskurven bei verschiedenen Polarwinkeln. Die Bindungsenergien, die den Kurven in Abb. 2 a-c entsprechen, sind markiert.

Emissionsspektroskopie im Bereich der ultraweichen Röntgenstrahlen

R. Eisberg und G. Wiech

Sektion Physik der Ludwig-Maximilians Universität München

Für die Neuaufstellung des Experiments FLEUR am Strahl G2 sind Umbauten am Vakuumsystem des Spektrometers sowie eine Neukonstruktion der Probenkammer erforderlich. Mit der Detailplanung wurde begonnen.

Als neue Komponente soll das Experiment einen fokussierenden Vorschpiegel erhalten. Im 4. Quartal haben wir mit der Detailplanung begonnen. Der Spiegel soll etwa 4 mrad der Synchrotronstrahlung erfassen und auf die Probe fokussieren, wobei die Strahlung unter einem Winkel $1,7^\circ < \varphi < 2,0^\circ$ auf den Spiegel trifft. Nach Festlegung des Standorts wurden die genauen Daten für einen 2m langen elliptisch gekrümmten Spiegel berechnet. Zur Zeit werden drei verschiedene Varianten zur Erzeugung der gekrümmten Fläche durchgerechnet und auf ihre technische Realisierbarkeit hin untersucht.

Abstandsabhängige Abschirmeffekte bei Elektronenemission aus physisorbierten Kr-Schichten auf Cu(110)

T. Mandel, G. Kaindl (Freie Universität Berlin)

M. Iwan, K. Horn, C. Mariani, H.-U. Middelmann (Fritz-Haber-Institut Berlin)

Es wurden Photoemissionsmessungen an physisorbierten Kr-Schichten auf Cu(110) durchgeführt. Dabei konnte bei Kr-Rumpfniveau- und Augerlinien eine lagenabhängige Energieverschiebung beobachtet werden. Abb. 1 zeigt Kr-3d-Rumpfniveau- und MNN-Augerspektren von ein- und mehrlagigen Kr-Schichten. Insbesondere bei den Kr-Doppelschichten sind deutlich zwei gegeneinander verschobene, von Elektronenemission aus den einzelnen Gasschichten herrührende Beiträge zu erkennen. Die Augerlinien sind etwa um einem Faktor 3 stärker verschoben. Die aus den Spektren durch einen Angleich nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate bestimmten Werte der Verschiebungen stehen in guter Übereinstimmung mit einer Arbeit an Xe auf Pd(001) von Kaindl, Chiang et al. (1), in welcher der beschriebene Effekt erstmals ausführlich untersucht wurde.

Die beobachteten Verschiebungen wurden als Endzustandseffekt interpretiert: Das Photoloch im Adsorbatatom erfährt eine Abschirmung durch die Metallelektronen. Die theoretische Beschreibung mit einem erweiterten Bildladungsmodell liefert gute Übereinstimmung mit den Meßergebnissen. Die Bildebene liegt dabei nach der local-density-functional-Theorie in einem Abstand x_0 über der Metalloberfläche (2,3,4). Für ein als Punktladung q beschriebenes Photoloch im Abstand d von der Metalloberfläche beträgt dann die Energieverschiebung ΔE

$$\Delta E = - \frac{q^2}{4(d-x_0)}$$

Die bei den Augerlinien um einen Faktor 3 größere Energieverschiebung bestätigt dieses Modell sehr gut.

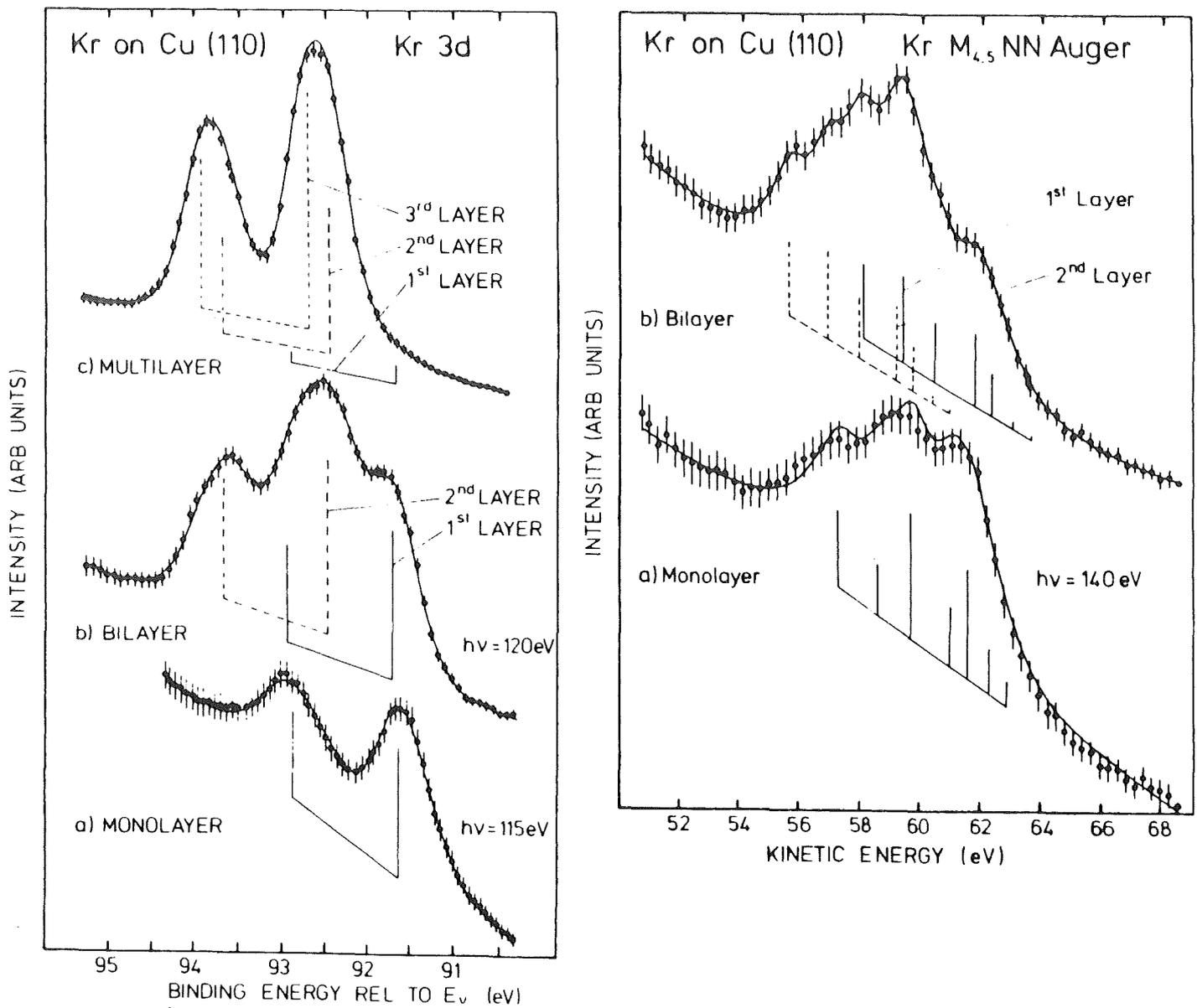


Abb. 1 Kr-4d-Rumpfniveau- und MNN-Auger-Spektren von ein-, zwei- und mehrlagigen Kr-Schichten auf Cu(110)

1. G. Kaindl, T.-C. Chiang, D.E. Eastman, F.J. Himpsel, Phys. Rev. Lett. 45, 1809 (1980)
2. N.D. Lang und W. Kohn, Phys. Rev. B 7, 3541 (1973)
3. N.D. Lang und A.R. Williams, Phys. Rev. B 16, 2408 (1977);
N.D. Lang und A.R. Williams, Phys. Rev. B 20, 1369 (1979).

S T R U K T U R U N T E R S U C H U N G E N

(Reports of the Groups from Risø, Denmark)

1. Liquid Crystals.

Our investigation of liquid crystals mesophases in 1981 have utilized new and more ideal growing conditions for the phases enabling us to obtain much more detailed information about the phases.

Let us here recall the salient feature of some of the mesophases. Liquid crystal molecules are typically 5 times longer than they are wide and in discussing the molecular arrangements they should be considered as rods rather than points. It is this extra degree of freedom, the orientation or the director field, which makes the study of l.c. phases interesting from a general phase transition point of view. In the high temperature isotropic phase the density $\rho(\vec{r})$ is homogeneous and the director field $\vec{n}(\vec{r})$ is isotropic. In the nematic phase $\vec{n}(\vec{r})$ attains a preferred direction (about which the molecules are thermally fluctuating giving rise to strong scattering of visible light), whereas $\rho(\vec{r})$ is still homogeneous. In the smectic-A phase a one-dimensional mass-density wave is created with the wavevector along the director field but essentially no density correlation in the perpendicular direction. Traditionally the smectic-B phase as examined by conventional X-ray photography was thought to differ from the smectic-A phase by short range order within the smectic-A planes, but recent high resolution experiments on well-aligned samples have shown that at least for some compounds the "smectic-B" phase is a genuine crystalline phase with long range order within the smectic-A planes.

1.1 Smectic-A Surface of the Nematic and Isotropic Bulk Phase.

J. Als-Nielsen, F. Christensen, Risø and P.S. Pershan, Harvard University, USA.

The combination of a free surface and a parallel planar rigid surface with homeotropic alignment of the molecules will naturally expel mobile defects and may thus provide a dislocation free smectic-A phase (ref. 1). The fluid samples must be kept horizontal and the corresponding scattering geometry is shown in Fig. 1. The monochromatic beam of wavevector k is bent the angle θ_s downwards by tilting the monochromator (a 3 bounce channel cut Si 111 crystal) by an angle $t = (k/\tau_{111})\theta_s$.

Horizontal smectic layers with layer spacing d will reflect this beam when $Q_0 = (2\pi/d) = 2k\sin\theta_s \approx 2k\theta_s = 2\tau_{111}t$. Note that this Bragg condition is independent of wavelength for small angles. An analyzer symmetric with the monochromator gives a horizontal beam being detected in the position sensitive detector PSD. A finite lateral correlation of the layers can be observed by rotating the analyser around a vertical axis, the limit of transverse correlation (15000 Å) being determined by the Darwin width of the monochromator and analyzer crystals.

We found that the boundary condition at the air surface interface is so strong that a few smectic layers, of a lateral extent larger than 15000 Å, are formed at the surface even in the isotropic phase. The penetration depth ξ_z (see inset of Fig. 1) grows as the temperature is decreased throughout the nematic phase and ξ_z diverges at the nematic to smectic-A transition temperature T_{AN} .

The temperature dependence of ξ_z may be understood from phenomenological Landau theory. In terms of the smectic order parameter the free energy density is of the form (ref.2):

$$F = A|\psi|^2 + \delta[(\partial/\partial z - iQ_0)\psi]^2 + \dots \quad (1)$$

In the Landau theory A varies linearly with $(T - T_{AN})$ yielding a spontaneous smectic-A phase below T_{AN} and critical fluctuations above T_{AN} with a longitudinal correlation range $\xi_{||} = (\delta/A)^{1/2}$. The divergence of $\xi_{||}$ has been determined previously for bulk 80CB (ref. 3) Assuming that the free surface is equivalent to a boundary condition of $\psi = \psi_0$ at $z = 0$, the z -dependence of ψ is found by minimization of F :

$$\psi = \psi_0 \exp[-z(iQ_0 + \xi_z^{-1})], \quad \xi_z = (\delta/A)^{1/2} \quad (2)$$

i.e. ξ_z is expected to be identical with $\xi_{||}$. Fig. 2 shows that this is indeed the case.

In the smectic-A phase we find that the layers are perfectly aligned, the Bragg reflection is specular, and dynamical rather than kinematical diffraction theory must be applied. Our present finding leads naturally to a number of future investigations:

- (i) Measurement of the order parameter on an absolute scale by comparison with total reflection intensities smaller angles.
- (ii) Detailed line shape studies of melting from the A to N phase.
- (iii) Do smectic-A boundary layers occur in materials, which do not have a spontaneous smectic-A phase?
- (iv) Correlations within the smectic-A planes as the transition to the smectic-B phase is approached.

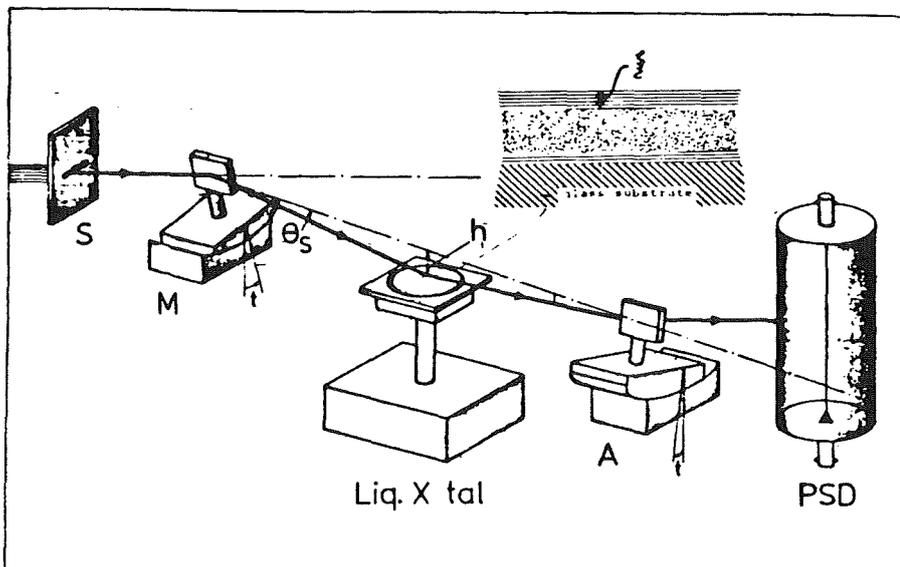


Fig. 1. Experimental set up for study of the surface of a fluid, in this case the liquid crystal 80CB. The inset indicates a smectic-A surface layer of thickness .

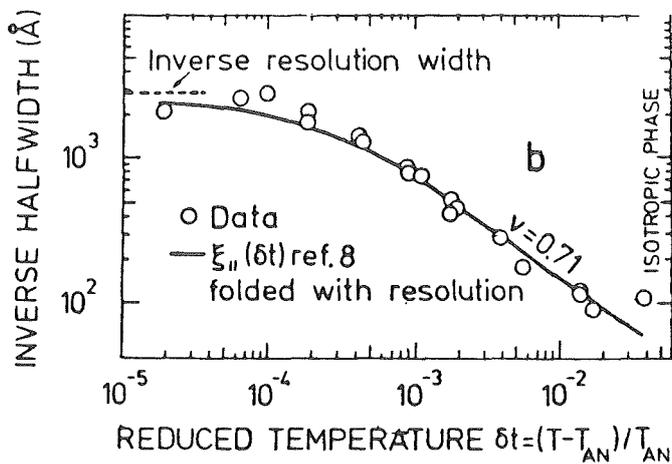


Fig. 2. The penetration depth ξ_{\parallel} compared to the bulk longitudinal correlation range ξ_{\parallel} , ref. 3.

1.2 Hexagonal Layer Stacking in Smectic-B phase of 70.7.

J. Collett and P.S. Pershan, Harvard University, USA,

J.D. Litster, M.I.T., USA

J. Als-Nielsen, Risø National Laboratory, Denmark.

It has been known for some time now that good alignment of smectic layers can be obtained by freely suspended films (ref. 4). Synchrotron X-ray studies on such films in a geometry showed in the upper left part of Fig. 3 was first carried out by Moncton and Pindak (ref. 5) at SSRL. Among other things their results showed very clearly that the smectic-B phase of 40.8 was a crystalline phase with ABAB ... stacking of layers. We have investigated stacking structures of the related compound 70.7 with the chemical formula: $C_7H_{15}O-\phi-CH=N-\phi-C_7H_{15}$, where ϕ denotes a benzene ring. The film is drawn like a soap-bubble across a .7 mm diam. hole in a glass plate situated in a vacuum-oven. The film thickness is determined optically. The film can be rotated in its plane so one of the hexagonal axis is brought into the horizontal scattering plane. The incident wavevector k_{in} was obtained by Bragg reflecting the synchrotron beam from a Ge(111) crystal. The direction of the scattered beam with wavevector k_{out} was similarly determined by Bragg reflection from a Ge(111) analyzer crystal. The upper, middle part of Fig. 3 shows that ABAB ... hexagonal stacking, which can be thought of as two simple hexagonal sublattices displaced by: $\vec{O}_A \vec{O}_B = (\vec{a}_1 + \vec{a}_2)/3$.

The geometrical formfactor given in the figure follows immediately, and the diffraction pattern in a (10 1) scan at the upper right is indeed consistent with this structure when it is born in mind that the intensities also involve the molecular formfactor and the Debye Waller factor. The cross hatched part of the spectrum is the thermal diffuse scattering. Note the logarithmic intensity scale spanning over 5 decades. (The value of h in the figure is not exactly one because the line-up was carried out at a different temperature where the size of a_1 was slightly larger).

The lower part of Fig. 3 shows a different structure occurring at a lower temperature. the $h = 1$ ridge with Bragg peaks at all integer values of l splits into a $h > 1$ ridge with only even $-l$ Bragg peaks and a $h < 1$ ridge with only odd $-l$ Bragg peaks. Note that the ridge-splitting is only $0.0013a^* \approx 0.002 \text{ \AA}^{-1}$ and requires the resolution provided by 2 perfect Ge-crystals in the triple axis spectrometer to be seen. We interpret this pattern as a sliding of the B sublattice, so the origo O_B goes to the mid-position M between adjacent A lattice points. The hexagonal symmetry is thereby broken as seen in the lower left part of Fig. 3 with $|\vec{a}_2| > |\vec{a}_1|$. The geometrical structure factor, or the selection rules, are indeed consistent with the two diffraction patterns shown at the bottom right. The transition between the two structures was found to be of first order. Other structures were also found but space does not allow us to report on these findings here.

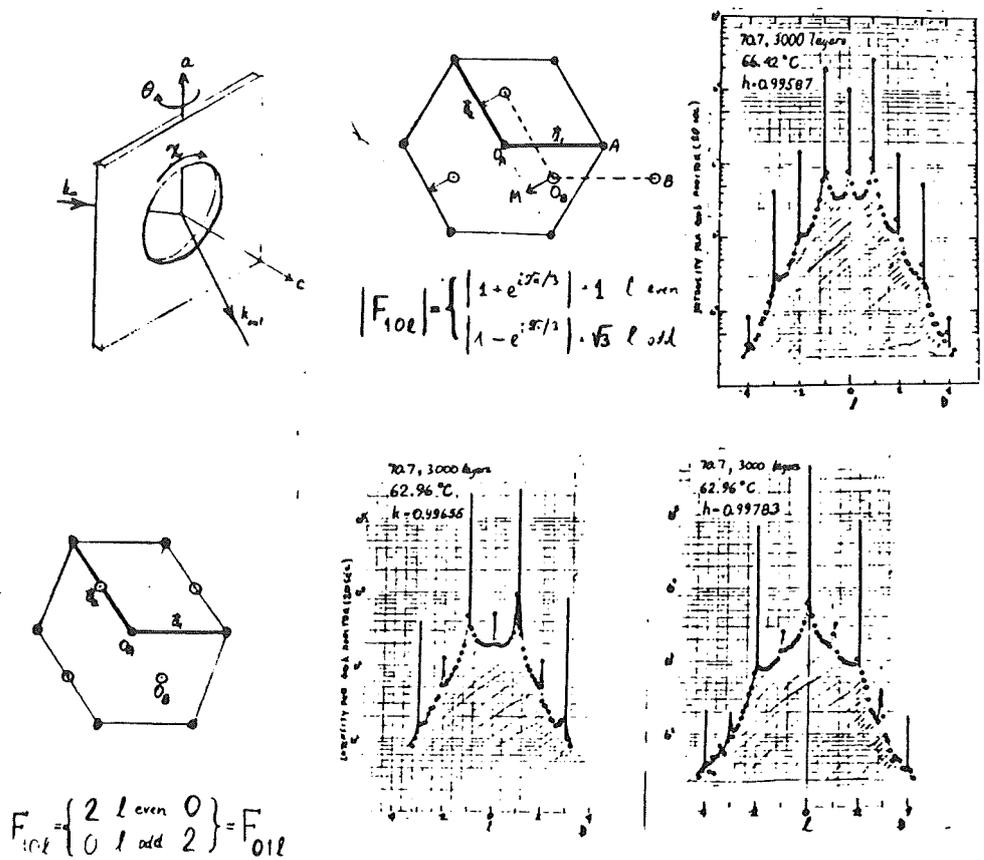


Fig. 3

References

- (1) P.S. Pershan, J. Appl. Phys. 45, 1590 (1974).
- (2) P.G. de GENNES, Sol. St. Comm. 10, 783 (1972).
- (3) J.D. Litster, J. Als-Nielsen, R.J. Birgeneau, S.S. Dana, D. Davidov, F. Garcia Golding, M. Kaplan, C.R. Safinya, and R. Schaezting, J. de Phys. (Paris) Colloq. 40, C3-337 (1979)
- (4) C.Y. Young, R. Pindak, N.A. Clark, and R.B. Meyer, Phys.Rev.Lett. 40, 773 (1978)
- (5) D.E. Moncton and R. Pindak in "Ordering in Two Dimensions", ed. Sinha, North Holland 1980, page 83.

2. Physisorbed Films on Graphite.

In recent years thin films of physisorbed rare gases on graphite substrates have been studied extensively . They are model systems in studies of phase transitions in two dimensions. The solid phase may be commensurate (C) with the underlying graphite honeycomb lattice as shown in the top part of Fig. 1 where the rare gas atom occupies every third carbon hexagon (the $\sqrt{3} - \sqrt{3}$ structure) or incommensurate (I) as shown in the bottom part. In the case of Kr a C to I transition takes place versus coverage or applied two-dimensional pressure, section 2.1. In section 2.2 we describe a study of two-dimensional melting of rare gases physisorbed on graphite, primarily of Ar. In both cases we used a set-up as shown in Fig. 2. A double crystal monochromator of 2 Ge(111) crystals is used in order to eliminate higher order contamination by misaligning the two crystals slightly. The graphite substrate, UCAR ZYX, has ideally flat surface areas of a linear extent of about 2000 Å. The angular spectrum of scattered radiation is recorded by a position sensitive detector.

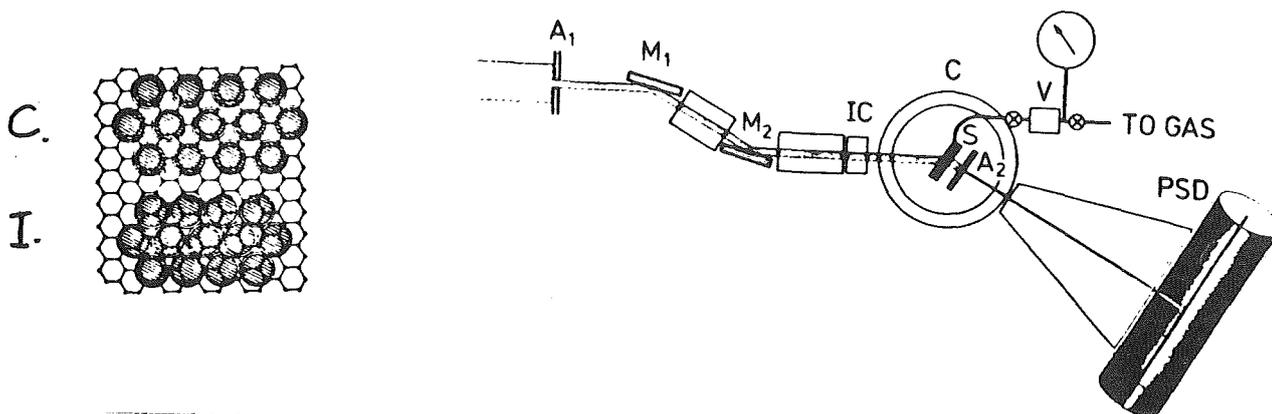


Fig. 1. Commensurate and Incommensurate solid phases on graphite.

Fig. 2. Experimental set-up. The spectrometer operates in the horizontal plane.

2.1 Pressure Induced Commensurate-Incommensurate Transition in Kr-Monolayers on Graphite.

M. Nielsen, J. Als-Nielsen, J. Bohr, Risø, Denmark

J.P. McTague, UCLA, USA.

Published in Phys. Rev. Lett. 47, 582 (1981).

Sub-monolayers of Kr physisorbed on graphite have the commensurate ($\sqrt{3} - \sqrt{3}$ structure as shown in the top part of Fig. 1.

When more Kr is adsorbed the film undergoes a commensurate-incommensurate (C-I) trans-

ition to a structure with smaller lattice parameters. This phase transition has been subject of much experimental ⁽¹⁾ and theoretical ⁽²⁾ interest. LEED and X-ray diffraction measurements indicate that the transition is continuous at $T > 52\text{K}$, although recent high resolution synchrotron diffraction data show additional features ⁽³⁾.

In order to extend the study to lower temperatures we have used a new technique to induce the transition and by synchrotron diffraction followed the structural change. By adding D_2 gas, which is insoluble in the Kr film we can apply a two dimensional (2-D) spreading pressure, which can be controlled by adjusting the D_2 bulk vapour pressure. It thus acts as a 2-D piston pushing on the Kr film.

Fig. 3 shows some results, three diffraction groups measured around the (10) Bragg position. A major result of our measurements is that the C-I transition is proved to be of first order at low temperatures and the figure shows in the upper two panels profiles, which we interpret to be the sum of the scattering from the two components in the transition region where the phases coexist. The commensurate phase gives a single peak centered at the wavevector position $Q = 1.703 \text{ \AA}^{-1}$. The incommensurate phase gives a dominant peak at $Q = 1.733 \text{ \AA}^{-1}$. In addition it has a smaller "satellite" at a smaller value of Q , which originates from a modulation in the layer density imposed on the adsorbed film from the substrate atoms.

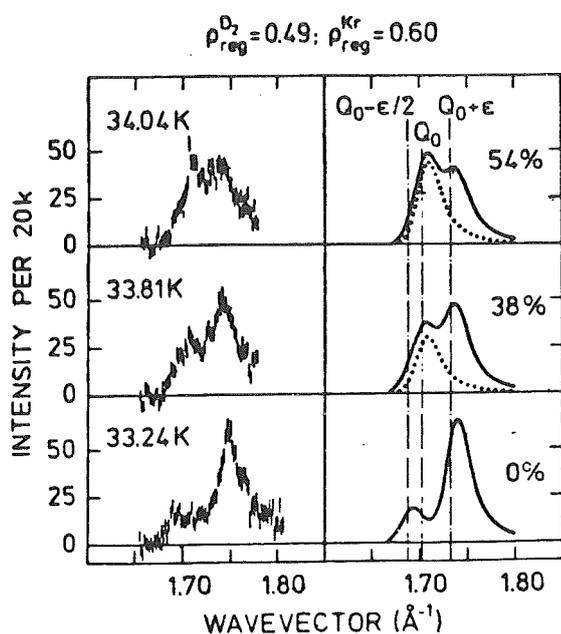


Fig. 3. Diffraction groups near the (10) reflection of Kr-monolayers adsorbed on graphite measured in the coexistence region of the C-I transition. The coverages, ρ , of Kr and D_2 are given in units of a monolayer of the commensurate structure. The curves at the right are calculated. The relative intensity of the commensurate peak, shown by dots, is given in %.

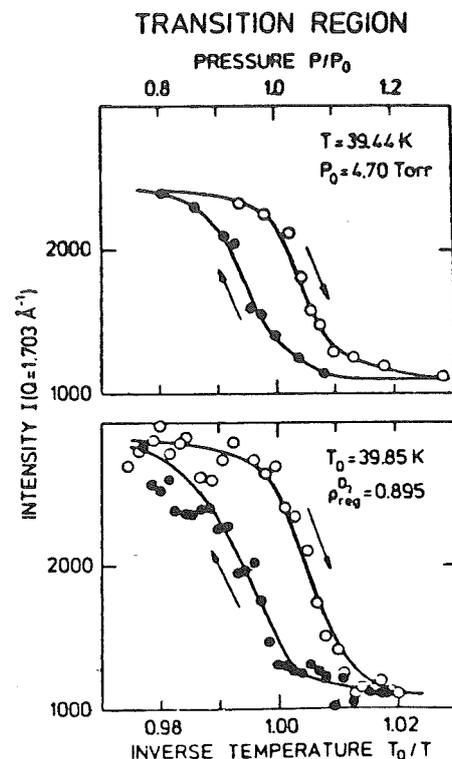


Fig. 4. Hysteresis loop of the C-I transition. The intensity of the commensurate phase peak at $Q = 1.703 \text{ \AA}^{-1}$ is followed as function of increasing and decreasing spreading pressure at constant temperature.

The lowest part of Fig. 3 shows the response when the transition is completed, and we have a pure incommensurate phase. The curves in the right part of the figure show calculated profiles assuming that the transition occurs through coexisting phases. The spreading pressure of the D_2 gas on the Kr-film is varied in the case shown by changing the temperature keeping the gas fillings constant. With increasing T the spreading pressure decreases as some of the adsorbed D_2 molecules desorb.

As another typical first order characteristic the C-I transition showed distinct hysteresis. This is illustrated in Fig. 4 where the intensity of the (10) Bragg peak of the commensurate component only is plotted for increasing and decreasing spreading pressure going through the transition region.

D_2 gas was chosen in these measurements as the pushing gas, rather than H_2 , because this allows us to do complementary measurements with neutron scattering looking at the state of the adsorbed D_2 molecules. Such studies are in progress at Risø National Laboratory.

References:

- 1) M.C. Chinn and S.C. Fair Jr., Phys. Rev. Lett. 39, 146, (1977)
P.W. Stephens, P. Heiney, R.J. Birgeneau and P.M. Horn, Phys. Rev. Lett. 43, 47, 1979).
- 2) J. Villain, in Ordering in Two Dimensions, S.K. Sinha, ed. North Holland (1980) p. 123.
- 3) P. F. Moncton, P.W. Stephens, R.J. Birgeneau, P. M. Horn and G.S. Brown (to be published).

2.2 Melting of 2-dimensional Crystals.

M. Nielsen, J. Als-Nielsen, J. Bohr, Risø, Denmark
J.P. McTague, UCLA, USA

In short we expect the following behaviour of an ideal two dimensional system: At low temperatures the atoms will crystallize in an ordered structure observable through diffraction peaks at the 2-d reciprocal lattice positions. These peaks are not δ -functions of character as for 3-D crystals but have broad wings. The transitions from this solid to an isotropic 2-D fluid may either occur through a single first order melting process, as for 3-D systems, or through a second order transition to a new phase called hexatic followed at a higher temperature by a first order hexatic to isotropic fluid transition. This is described in the Kosterlitz Thouless Halperin Nelson theory⁽²⁾. The hexatic phase is a 2-D fluid with an orientational ordering of

the bond directions between the atoms and its diffraction signature is fluid like scattering functions but centered around reciprocal lattice positions.

All rare gases have at low temperature in the adsorbed phase on graphite the simple triangular (or hexagonal) structure. For Kr-monolayers the two lattices are in registry as shown in Fig. 1. Ar-monolayers are about 8 per cent too concentrated and Xe-monolayers about 8 per cent too dilute to fit this registry. Physically the two kind of monolayers are very different, the (commensurate) Kr-layers are laterally locked to the substrate whereas the (incommensurate) Ar- and Xe-layers are free floating, and to a first approximation we expect they melt like ideal 2-d systems.

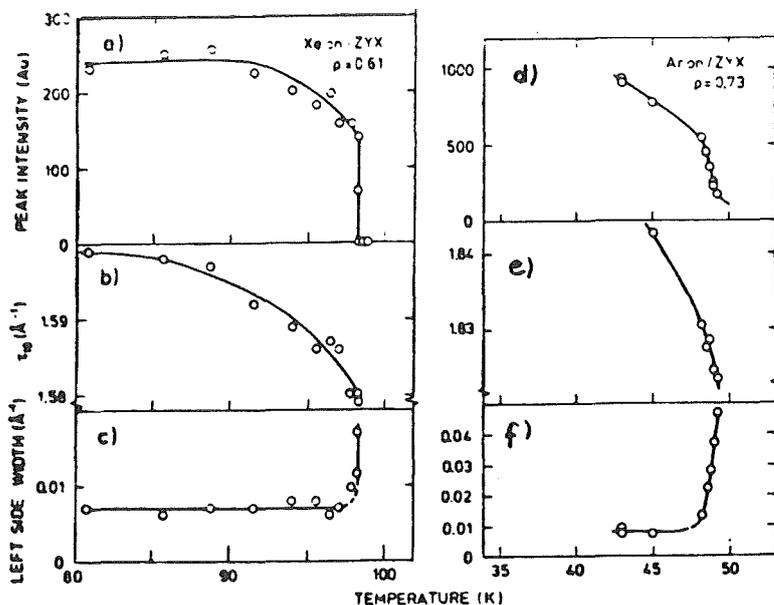


Fig. 5. The figures show the (10) Bragg peak disappears with increasing temperature for adsorbed submonolayers of Xe and Ar on graphite. a and b, and d and e show intensities and positions of the Bragg peak, c and f the width of their left hand side.

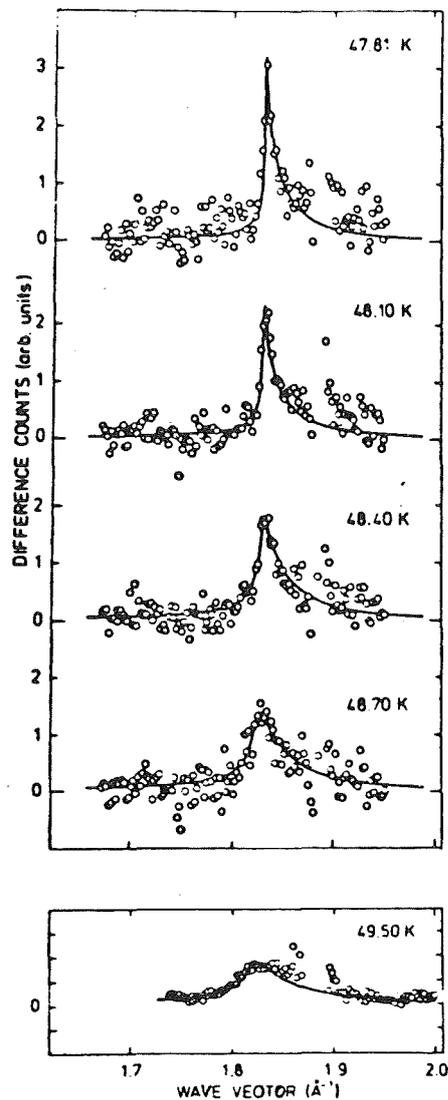


Fig. 6. Measured Bragg profiles at the (10) reflection from Ar monolayers on graphite. The upper 4 panels show the results obtained with synchrotron X-rays and with the average Ar-layer density = 0.83. The lower panel data were measured with a rotating X-ray source and with $\rho = 0.93$. The curves are calculated line shapes.

Figures 5 and 6 show some of our results. We follow the diffraction group at the (10) position of the films as function of temperature. Our main conclusion is that for Ar monolayers, (the coverages are less than one complete monolayer) the groups continuously loose peak intensity and get broader around 48K whereas for Xe films (of the same coverage) the diffraction groups discontinuously disappear at $T = 98K$. The interpretation

of this is that the observed Ar-transition is continuous melting presumably to a hexatic phase and the Xe-transition is first order melting to an isotropic fluid. We are not able, however, to give the finite prove of this, because it must include a detailed analysis of the measured line shape as described in the KTHN theory in order to check the temperature dependence of the parameters involved. We need still higher intensity to do so.

The fundamental question is: Why do the submonolayers of Ar and Xe, both having a typical incommensurate structure melt in a qualitatively different way. We think that further diffraction measurement can answer this when more intense X-ray beams become available.

References

- 1) J.G. Dash, Films on Solid Surfaces, Academic Press (New York) (1978) and Ordering in Two Dimensions, Proc. Intl. Cong. at Lake Geneva, Wisconsin, S.K. Sinke, ed., North Holland (New York), Amsterdam (1980).
- 2) B.I. Halperin and D.R. Nelson, Phys. Rev. B 19, 2457 (1979).

2.3 Structure of CF_4 Monolayers on Graphite.

K. Kjaer, M. Nielsen, Risø, Denmark
H.J. Lauter, Ill, Grenoble, France.

With the same technique as described above we have studied the structures of different phases of CF_4 monolayers on graphite. At low coverages they have a (2x2) registered structure below the melting temperature and two new phases at lower temperatures. The (2x2) structure has one CF_4 molecule per 4 carbon hexagons of the graphite surface. Further the adsorption sites are above the vertex points of the honeycomb structure, whose symmetry is different from that of the center of hexagons. Both factors influence the nature of the C-I and the melting transition.

We have so far mapped out the solid part of the phase diagram of the monolayers and identified 4 different ordered structures. Of particular interest is the C-I transition from the 2x2 structure, which seems to be continuous and involves an uniaxial distortion.

High resolution powder diffraction with synchrotron radiation.

B. Buras*† and F. Christensen†

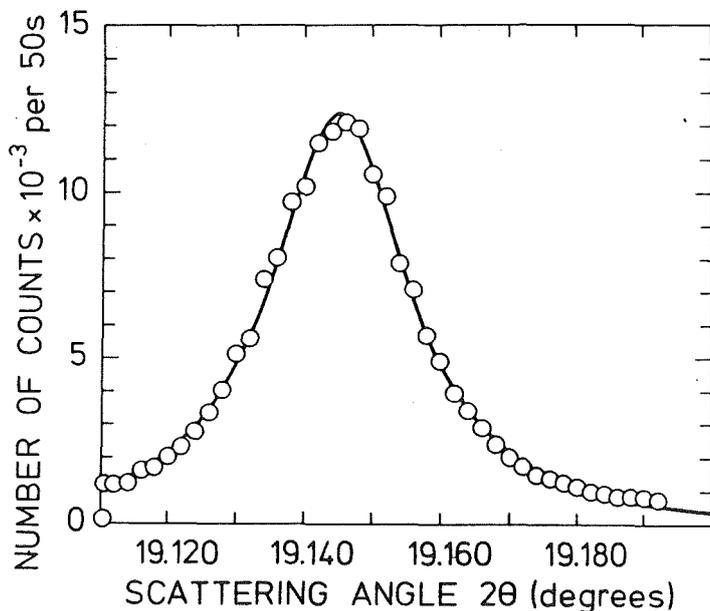
*Physics Laboratory II, University of Copenhagen, Universitetsparken 5, DK-2100 Copenhagen Ø.

† Risø National Laboratory, DK-4000 Roskilde.

A preliminary test of high resolution powder diffraction was made using the triple axis X-ray spectrometer⁽¹⁾ installed at the D4 beam line at DORIS working at 3.185 GeV and about 80 mA. A monochromatic X-ray beam of a wavelength of 1.54 Å produced by the 111 reflection from a silicon perfect crystal was used. This beam diffracted by a flat thick powdered naphthalene sample in symmetric position was again reflected by a similar silicon perfect crystal acting as a collimator. The slit defining the beam was 2.5 mm wide and about 3 mm high. The figure shows, as an example, the $\bar{1}\bar{1}1$ reflection in case of a nondispersive setting. A good fit was obtained with a modified Lorentzian $C \left\{ 1 + [k(\theta - \theta_0)]^2 + k^1 [k(\theta - \theta_0)]^4 \right\}^{-1}$ resulting in a FWHM of 24 millidegree = 86 seconds of arc corresponding to a resolution $\Delta d/d = 2.5 \cdot 10^{-3}$ at a scattering angle $2\theta \approx 19^\circ$. This resolution is much better than one could obtain with a conventional X-ray source.

This preliminary test indicates that synchrotron radiation could be very much useful for high resolution powder diffraction. The methodological study will be continued.

1) J. Als-Nielsen, J. Linderholm, S. Jørgensen, P. Skaarup, E. Dahl Petersen, and B. Buras
(in) Risø National Laboratory Report R-441 (1980), p. 62-67.



The $\bar{1}\bar{1}1$ reflection from a powdered naphthalene sample obtained with a triple axis spectrometer. The FWHM is 86" corresponding to $\Delta d/d = 2.5 \cdot 10^{-3}$.

EXAFS Untersuchung der Nahordnung in Cu_3Au , CoPt_3 und Ni_4Mo

A. Schulz, B. Lengeler

IFF, KFA Jülich

Cu_3Au , CoPt_3 und Ni_4Mo Legierungen wurden durch thermische Behandlung ferngeordnet ($S=1$). So dann wurden verschiedene Proben unterschiedlich lange Zeiten (1 sec bis 100 sec) oberhalb der Ordnungstemperatur ausgelagert. Dadurch werden die Fernordnung und die Nahordnung reduziert. Die Änderung der Ordnung wurde einerseits über den elektrischen Restwiderstand verfolgt. Andererseits wurde die Nahordnung mit Hilfe der EXAFS an den Au, Co bzw. Mo Kanten gemessen. Ziel der Messung ist die Bestimmung der Änderung der Nahordnung mit der Zeit und der Temperatur (Kinetik der Ordnungseinstellung). Ein weiteres Ziel ist die Bestimmung des Zusammenhangs zwischen Nahordnung und elektrischem Restwiderstand. Die Auswertung der Meßdaten ist im Gange.

EXAFS Untersuchung an Zr-Al Katalysatoren für die Polymerisation von Ethylen.

H. Hähnsen*, W. Kaminski*, B. Lengeler**

Die Röntgenfeinstruktur wurde oberhalb der K-Absorptionskante von Zr in Zr-Al Katalysatoren gemessen, die für die Polymerisation von Ethylen verwendet werden. Katalysatoren mit Zirkonzentralisationen von 0.1 und 0.5 mol pro Liter wurden verwendet. Diese Konzentrationen erwiesen sich als hoch genug um die Messung durchführen zu können. Zweck der Messung war die Bestimmung der lokalen Umgebung des Zirkons bei Abwesenheit und Anwesenheit des zu polymerisierenden Ethylens. Die Meßergebnisse zeigen einen Einfluß des Ethylens auf die EXAFS Spektren des Zr. Die Auswertung der Messungen ist im Gange.

* Institut für Angewandte Chemie, Universität Hamburg

** IFF, KFA Jülich.

EXAFS Untersuchung der Struktur von Co-Mo Wasserstoffent-
schweflungs-Katalysatoren.

B.S. Clausen*, H. Topsoe*, R. Candia*, J. Villadsen*, B. Lengeler**,
J. Als-Nielsen***, F. Christensen***.

Die Feinstruktur oberhalb der K-Absorptionskante von Co und Mo wurde in kalzinierten und sulfidierten Mo/Al₂O₃ und Co-Mo/Al₂O₃ Katalysatoren gemessen. In den kalzinierten Katalysatoren befinden sich das Co und das Mo in einer stark gestörten Umgebung. Beim Sulfidieren bildet das Molybdän eine MoS₂ ähnliche Struktur. Co umgibt sich auch im sulfidierten Zustand mit Schwefelatomen. Allerdings ist diese Struktur unterschiedlich von allen bekannten Co-S und Co-Mo-S Verbindungen. Ein Vergleich mit Mössbauer Messungen legt den Schluß nahe, daß in sulfidierten Co-Mo/Al₂O₃ das Co an der Oberfläche des Katalysators sitzt. Die bisherigen Messungen machen die Notwendigkeit klar in situ Messungen an den Katalysatoren durchzuführen.

* Haldor Topsoe Research Laboratories, DK-2800 Lyngby, DENMARK

** IFF, KFA Jülich

*** Riso National Laboratory, DK-4000 Roskilde, DENMARK.

EXAFS-Untersuchungen unter hydrostatischen Drucken an RbCN.

A. Werner und H. D. Hochheimer

MPI für FKF, Stuttgart

B. Lengeler

Institut für Festkörperforschung, KfA Jülich

Wir haben eine Hochdruckzelle gebaut, die auf die Meßbedingungen am EXAFS-Meßplatz im HASY-Lab. abgestimmt ist (Fig. 1). Es handelt sich um eine Flüssigdruckzelle, die bis 8kbar betrieben werden kann. In einer ersten Meßschicht im Juli 1981 haben wir die aus Röntgenbeugungsuntersuchungen bekannte Phasentransformation des RbCN von der NaCl-Struktur zur CsCl-Struktur untersucht.

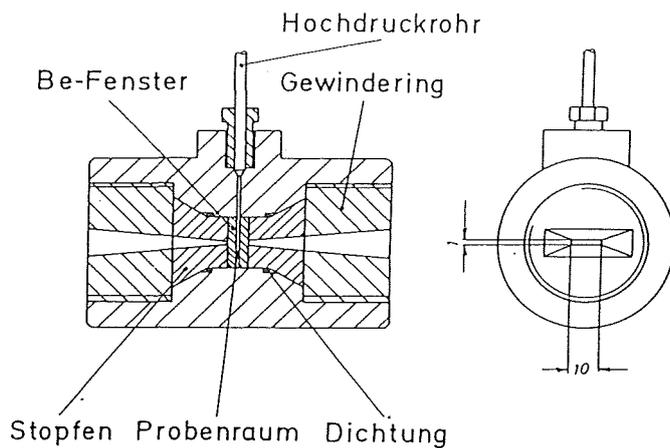


Fig. 1:

Hochdruckzelle für EXAFS-Messungen. Das Hochdruckrohr verbindet die Zelle mit der Druckerzeugungsanlage.

In Fig. 2 sind die Spektren der Messungen oberhalb der Rb-K-Kante für $p=4\text{kbar}$ (NaCl-Struktur) und $p=6.5\text{kbar}$ (CsCl-Struktur) aufgetragen. Deutlich erkennt man Unterschiede sowohl im EXAFS-Bereich als auch in der kantennahen Struktur, die auf die unterschiedliche Nahordnung in den beiden Phasen zurückzuführen sind. Die Analyse der EXAFS-Daten ergibt, daß die CN-Hanteln in der NaCl-Struktur vorwiegend in den [100]-Richtungen liegen, während sie in der CsCl-Struktur die [111]-Richtungen bevorzugen.

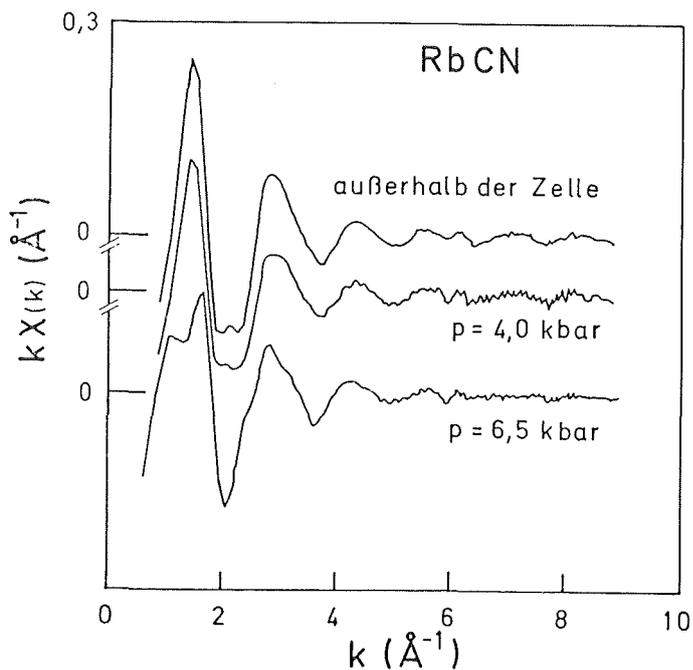


Fig. 2:
Normalisierte Spektren
des RbCN oberhalb der
Rb-K-Absorptionskante,
aufgetragen über dem
Wellenvektor k .

Dieses Beispiel zeigt, daß EXAFS-Messungen eine geeignete Methode darstellen, um die Änderung der strukturellen Nahordnung im Falle druckinduzierter Phasentransformationen zu untersuchen (siehe z. B. auch /1/).

Um die Güte der EXAFS-Spektren zu zeigen, die unter Verwendung der Hochdruckzelle aufgenommen wurden, ist in Fig. 2 der EXAFS-Beitrag aufgetragen, den man aus einer Messung an einer freistehenden RbCN-Probe unter sonst gleichen experimentellen Bedingungen erhält.

/1/ R. Ingalls et al., J. Appl. Phys. 51, 3158 (1980)

EXAFS-Untersuchungen an elektronenbestrahltem Al(Ag) und Al(Zn)

W. Weber, T. Bolze und H. Peisl

Sektion Physik der Ludwig-Maximilians Universität München

Es wurden EXAFS Messungen an der Ag K und Zn K_{α} -Kante bei Defektkonzentrationen von 400 ppm Ag in Al(Ag) und 1200 ppm Zn in Al(Zn) durchgeführt. Die zu untersuchenden Proben wurden mit Elektronen von 2.8 MeV bei einer Temperatur von 80 K bestrahlt. Dabei entstehen Al Zwischengitteratome, die bei dieser Temperatur im Gitter wandern, bis sie von den Fremdatomen eingefangen werden. Durch Tempern werden verschiedene Ausheilstufen erreicht.

Die Messungen fanden bei 77 K statt, wobei bei den Al(Zn) Proben die Absorption, bei den Al(Ag) Proben die Intensität der K_{α} -Fluoreszenzlinie bestimmt wurde. Die bereits im letzten Jahr durchgeführten Messungen an Al(Ag) Proben wurden mit besserer Phononenstatistik wiederholt. Neben der bereits beobachteten Defektstruktur bei 2.35 Å, die als gesuchte Zwischengitterhantel identifiziert wurde, erkennt man bei 3.6 Å ein weiteres Maximum (Abb. 1). Die Maxima bei 2.85 und 4.03 Å entsprechen regulären Gitterplätzen.

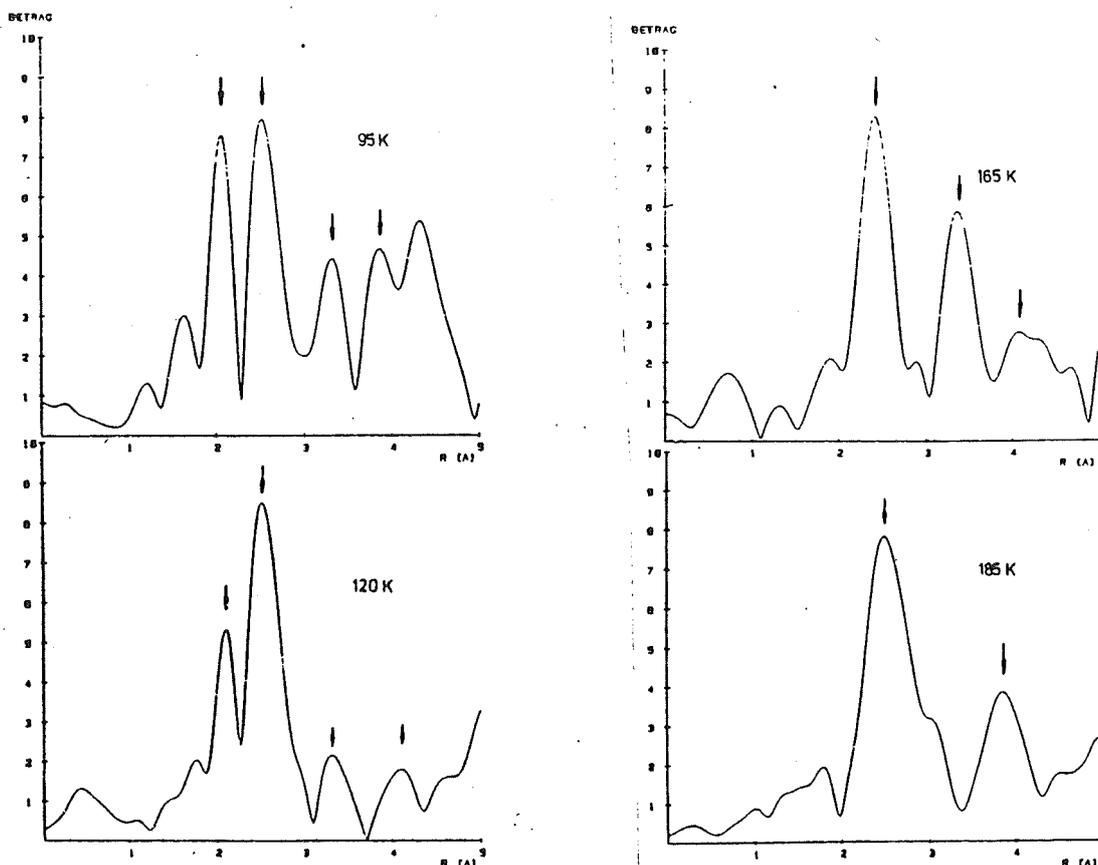


Abb. 1

Während die Hantel bei etwa 130 K ausheilt, wächst ein Maximum bei 3.6 \AA , das bei 185 K wieder verschwunden ist. Zur genauen Bestimmung der Symmetrie dieser Defektarten werden zur Zeit Messungen der diffusen Streuung an elektronenbestrahltem Al(Ag) durchgeführt.

Abb. 2 zeigt das Absorptionsspektrum einer unbestrahlten Al(Zn) Probe und in Abb. 3 sieht man die daraus berechnete radiale Verteilungsfunktion. Der nächste Nachbar ist $2.85 \pm 0.02 \text{ \AA}$ vom Zn Atom entfernt,

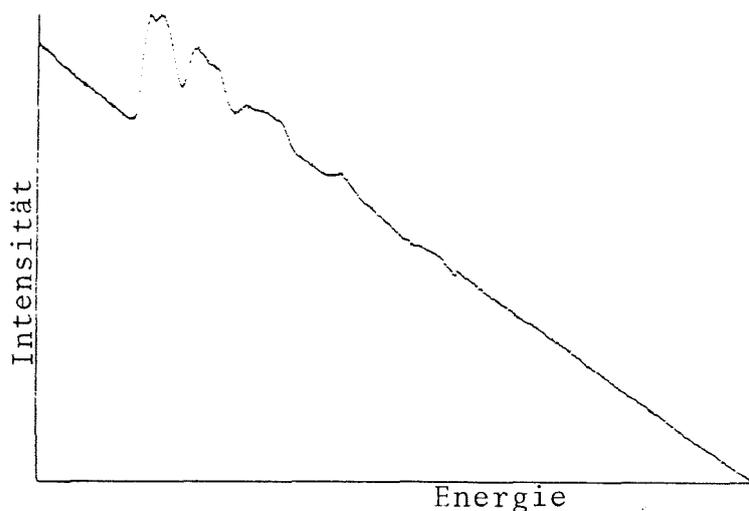


Abb. 2

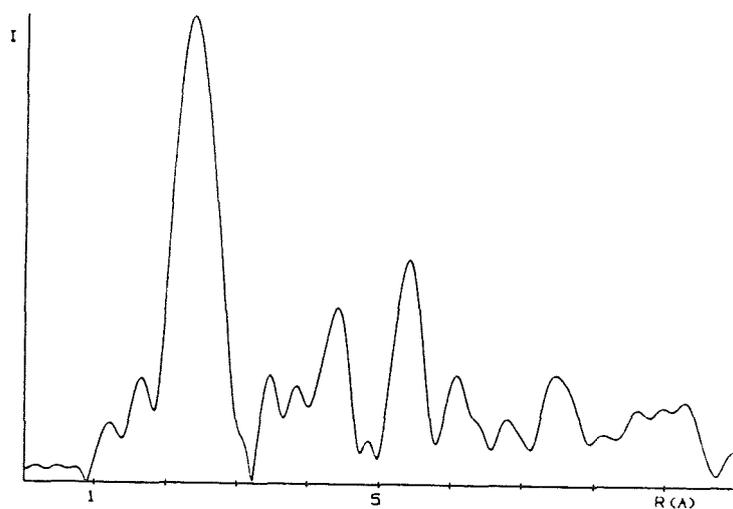


Abb. 3

was gut mit Messungen bei weit höherer Konzentration übereinstimmt. Mimault¹ et al. erhalten bei einer Zn Konzentration von 1% einen Abstand von 2.84 \AA . Weiter entfernte Nachbarn sind noch gut zu erkennen, ihr Abstand ist aber nur auf ca. 0.2 \AA genau zu bestimmen.

Es wurden auch bereits Absorptionsspektren einer bestrahlten Al(Zn) Probe durchgeführt, um sichere Aussagen machen zu können, müssen jedoch weitere Experimente durchgeführt werden.

Referenzen

- 1 J. Mimault, A. Fontaine, P. Lagarde, D. Raoux, A. Sadoc, D. Spanjaard; J. Phys. F, 11, 1311 (1981)

Aufbau des Meßplatzes EXAFS II und Röntgenabsorptionsuntersuchungen

R. Haensel, W. Malzfeldt, W. Niemann und P. Rabe, Institut für Experimentalphysik der Universität Kiel

1. Aufbau der EXAFS-Apparatur

In der ersten Hälfte des Berichtsjahres wurde der evakuierbare, mit zwei unabhängig aufgehängten Kristallen arbeitende Röntgenmonochromator aufgebaut. Er wurde mit Si(220) Kristallen ausgerüstet, so daß ein Energiebereich von 6 keV bis 17 keV zur Verfügung stand. In einer Probenkammer konnten Proben auf einen mit flüssigem Stickstoff gekühlten Halter untergebracht werden. Zeitweise konnte eine geliehene Kältemaschine für Probentemperaturen bis $T = 20$ K eingesetzt werden. Zum Nachweis der Photonen wurden Ionisationskammern verwendet. In der Meßperiode im Herbst wurde der Monochromator zunächst noch mit He geflutet und ohne fokussierenden Vorspiegel im Röntgenteststand von HASYLAB in Betrieb genommen. Anhand von bekannten Absorptionsspektren einer Reihe von Übergangsmetallen konnte gezeigt werden, daß das Gerät zufriedenstellende Absorptionsspektren liefert. Darüberhinaus wurde begonnen, EXAFS-Spektren von matrixisolierten Kr-Atomen aufzunehmen. Die Auswertung der im folgenden zusammengestellten Ergebnisse ist noch nicht abgeschlossen.

2. Auswertung von Röntgenabsorptionsspektren

2.1 Kantennahe Struktur an L-Kanten von Ta, W, Pt und Au

Absorptionsspektren von metallischem Ta, W, Pt und Au wurden im Bereich der L_I -, L_{II} - und L_{III} -Kanten aufgenommen. Unmittelbar an der Kante wird bei Ta und W an der L_{II} - und an der L_{III} -Kante bei Pt nur an der L_{III} -Kante eine weiße Linie beobachtet. Dieser Bereich hoher Absorption wird auf Übergänge aus den 2p-Niveaus in unbesetzte d-symmetrische Endzustände an der Fermigrenze zurückgeführt. Bei Au sind die d-Bänder gefüllt, daher treten keine weißen Linien auf. Bandstrukturechnungen (1) für Pt sagen für die Oberkante des d-Bandes Zustände mit Gesamtdrehimpuls $j = 5/2$ voraus. Dipolerlaubte Übergänge in diese Zustände werden daher vorwiegend an der L_{III} -Kante ($2p_{3/2} \rightarrow d_{5/2}$) beobachtet.

2.2 Einfluß von Vielfachstreuung auf EXAFS

Für größere interatomare Abstände tritt ein besonders deutlicher Fall von Mehrfachstreuung der Photoelektronen dann ein, wenn das zentrale Atom und mehrere Nachbaratome eine lineare Kette bilden. Diese Erscheinung wurde an Cu, Ni und Ag untersucht, in deren kfz-Gittern die vier nächsten von den nächsten Nachbarn des absorbierenden Atoms abgeschirmt sind. Durch die großen Amplituden $f(o,k)$ und $f(\pi,k)$ für Vorwärts- bzw. Rückwärtsstreuung führt diese Anordnung zu einer Überhöhung der Beiträge der vierten Nachbarn und zu einer zusätzlichen Phasenverschiebung. Beide Effekte erweisen sich als nur schwach abhängig von der Wellenzahl k der Photoelektronen. Durch Vergleich des Beitrages der vierten Schale mit dem der nächsten Nachbarn zur EXAFS oberhalb der Cu K-Kante wurde die komplexe Vorwärtsstreuamplitude im Bereich $3 \text{ \AA}^{-1} \leq k \leq 15 \text{ \AA}^{-1}$ bestimmt. Der Wert $f(o,k) = 3,2 \pm 0,4 \text{ \AA}$ ist in guter Übereinstimmung mit berechneten Werten (2), die Phase $\arg f(o,k) = 2,1 \pm 0,2 \text{ rad}$ einen Faktor 4 größer als das theoretische Ergebnis.

2.3 Absorption von atomarem Krypton

Absorptionsspektren von gasförmigem Kr wurden im Bereich der K-Kante mit einem Signal-Rausch-Verhältnis $\gg 10^3$ untersucht. Oberhalb der Kante wird eine schwache Feinstruktur beobachtet, die sich über mehrere hundert eV erstreckt. Zur Deutung dieser Struktur können folgende Prozesse herangezogen werden: a) Zusätzlich zum 1s-Elektron wird ein weiteres Elektron einer äußeren Schale angeregt. b) Das durch die Anregung eines 1s-Elektrons erzeugte Photoelektron wird im Potential des absorbierenden Atoms gestreut und bewirkt eine Oszillation im Matrixelement der Übergangswahrscheinlichkeit.

2.4 EXAFS von matrixisolierten Kr-Atomen

Die EXAFS von Kr-Atomen in festen Matrizen aus CH_4 , N_2 und Ar wurden im Bereich der Krypton K-Kante (14,2 bis 15,0 keV) bei $T = 25 \text{ K}$ untersucht. Ausgehend von reinem festem Kr wurde die Kr-Konzentration auf 10, 3, 1, 0,3 und 0,1% reduziert. Die Spektren zeigen in CH_4 und N_2 nur Beiträge durch die Streuung der Photoelektronen an nächsten Nachbarn. In Ar und reinem Kr lassen sich weitere Koordinationssphären identifizieren.

Referenzen

- 1.) Friedel et al, J.Phys.Chem.Solids 25, 781 (1964)
- 2.) Fink and Ingram, Atomic Data 4, 129 (1972)

Meßplatz für Röntgen-Interferenz-Topographie mit Synchrotronstrahlung

H. Bradaczek, G. Hildebrandt, G. Jähnig und J.D. Stephenson

Freie Universität Berlin und Fritz-Haber-Institut/MPG, Berlin-Dahlem

Der Aufbau eines Meßplatzes für Röntgen-Topographie am HASYLAB wurde im wesentlichen abgeschlossen, so daß z.Zt. die Voraussetzungen für Topographie mit weißer Strahlung und Röntgenfilm gegeben sind. In naher Zukunft soll eine weitere Komplettierung erfolgen, die die Durchführung verwandter Experimente und die Anwendung anderer Topographie-Methoden (z.B. mit Monochromator) ermöglichen soll. Für 1983/84 schließlich ist die Installation einer Röntgen-Video-Kamera einschließlich Speicher- und Auswerte-Elektronik für Realzeit-Topographie vorgesehen.

Der Meßplatz besteht im wesentlichen aus einer optischen Bank (einschl. Justier-Laser), einem hochbelastbaren Diffraktometer und einem Support für Film-Wechsler bzw. Video-Kamera, der in beliebige Richtungen eines großen Raumwinkels justierbar ist. Die mechanischen Teile sind so flexibel ausgelegt, daß auch in Reflexions-Topographie gearbeitet werden kann. Der Strahl-Kollimator ist mit einem programmierbaren Strahl-Verschluß kombiniert, so daß nun präzise Kurzzeit-Belichtungen möglich sind (bisher wurde mit dem beam shutter des Strahlrohres gearbeitet). Die infolge von Luft-Ionisation auftretenden höheren Konzentrationen von Ozon und Salpetersäure werden durch ständige Ventilation beseitigt; Strahlführung in Helium wird dieses Problem beseitigen und zugleich Streuung und Absorption der Strahlung reduzieren. Bleiglasfenster und eine kommerzielle TV-Einrichtung ermöglichen eine ständige Überwachung des Experiments.

Die Fernsteuerung des Goniometers, der Positions-Motore der Film/Kamera-Bühne und weiterer Motore erfolgt über einen programmierbaren Mikroprozessor und wird an einem Terminal angezeigt; es lassen sich auch Experiment-Abläufe programmieren, Meßdaten speichern usw. Für Notfälle steht eine unabhängige, einfachere Steuereinrichtung bereit. An Zusatzgeräten sind vorhanden: Vierfachsreiber, hochkonstante Strom/Spannungsquelle, Dehnungsmeßbrücke, vergrößerndes Filmbetrachtungsgerät; Komplettierung im Rahmen der finanziellen Möglichkeiten ist vorgesehen.

Im Berichtsjahr wurden (von unserer Gruppe) Topographie-Experimente mit weißer Synchrotron-Röntgen-Strahlung an ferromagnetischen Einkristallen (Fe-3%Si und Co-8%Fe) durchgeführt (Stephenson) sowie vorbereitende Versuche zu Röntgen-Streustrahlungs-Topographie (bzw. Tomographie) z.B. biologischer Objekte (Chikaura) und zu Messungen in Dreistrahlfällen (Umeno).

An Interpretation of White (Synchrotron) X-Radiation Laue (Topograph) Patterns by Means of the Gnomonic Projection

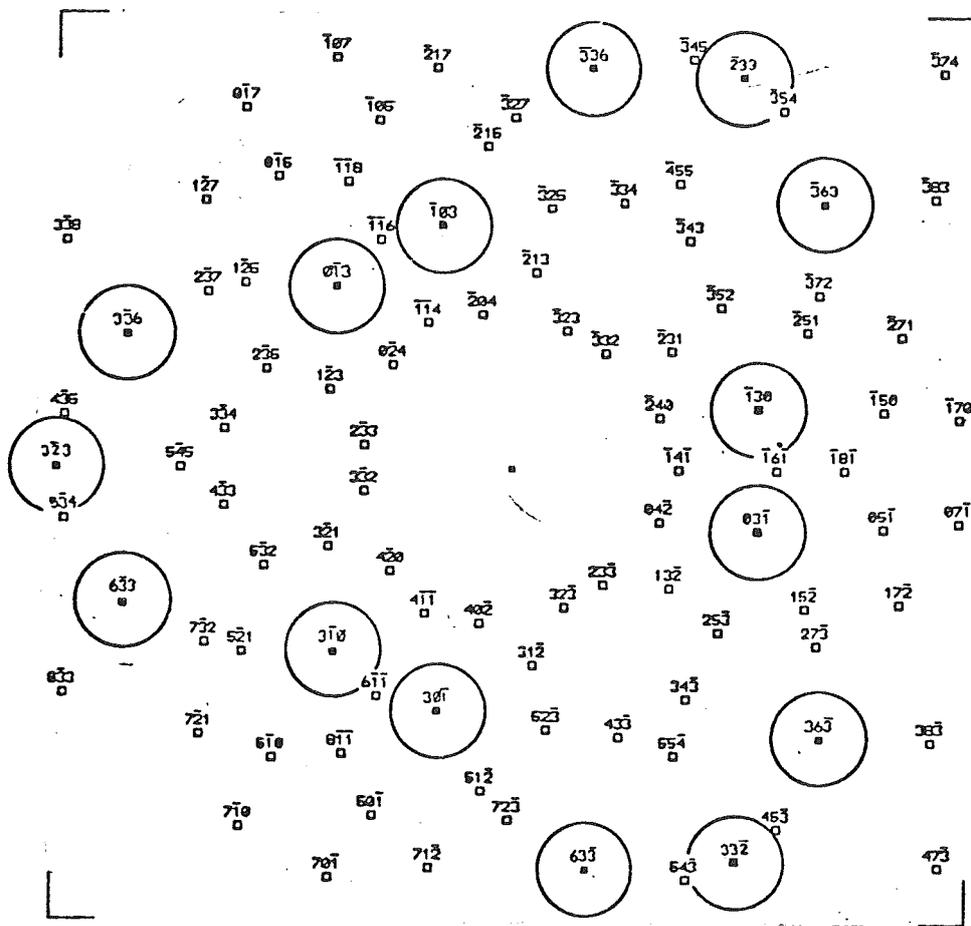
J. D. Stephenson
Frei Universität Berlin and Fritz-Haber-Institut der MPG, Berlin-Dahlem

The advantages offered by the reciprocal lattice in the interpretation of X-ray diffraction data were first applied experimentally to decipher X-ray Laue patterns by Schiebold and Sachs and rotation photographs by Bernal.

Whereas the stereographic projection has been used mainly for crystal orientation, the gnomonic projection exactly simulates the Laue pattern recorded on an X-ray film. Differences between observed and calculated spot positions are therefore additionally useful for determining small lattice misorientations present in the crystal.

A method (1), using the gnomonic projection, outlines a computer simulation of Laue (transmission or reflection) patterns produced from any crystal system by white (synchrotron) X-radiation. The spatial (or angular) positions and fundamental wavelengths of each Laue spot (topograph) are also given.

1. J.D. Stephenson, phys. stat. sol. (a) 65,601 (1981)



111 - Laue transmission pattern obtained from an initial 100 (Fe-3wt%Si) pattern after successive rotations, $r_1 = 0^\circ$, $r_2 = 45^\circ$, $r_3 = -35.264^\circ$.

Stroboskopische Untersuchung von Schwingquarzen mit Synchrotronstrahlung

C.C. Glüer^{a)}, W. Graeff^{b)}, H. Möller^{b)}

a) II. Inst.f.Exp. Phys., Universität Hamburg

b) HASYLAB, DESY Hamburg

Am Röntgentopographie-Meßplatz wurden Experimente durchgeführt, die die Zeitstruktur des Speicherringes DORIS zur Sichtbarmachung von periodischen Schwingungen von Kristallen und von Versetzungsbewegungen nutzen. Die zu untersuchenden Proben, in diesem Fall AT-Quarze^{*}, wurden in den direkten weißen Strahl in einer Entfernung von 34 m vom Quellpunkt gebracht. Aus einer Vielzahl von auftretenden Reflexen wurden einige mit besonders gutem Kontrast in Transmission ausgewählt und im folgenden näher untersucht.

Während der meisten Aufnahmen lief der Speicherring im single-bunch mode mit einer Elektronenenergie von 3.3 GeV bei einem typischen Strahlstrom von 5 mA. Die verwendeten Proben waren in ihrer Dicke (1.6 mm) auf eine Resonanzfrequenz von 1.04 MHz abgestimmt und konnten somit mit der Speicherringfrequenz synchronisiert werden. Diese Synchronisation geschah mit Hilfe eines schnellen Photomultipliers, der den optischen Anteil der Synchrotronstrahlung registrierte und ein trigger-Signal für die Ansteuerung eines Sinusgenerators lieferte. Eine Verschiebung der Phasenlage von Speicherring und Generator wurde durch eine variable delay line erreicht. Am Ausgang des Generators betrug die Spannungsamplitude bis zu 10 V_{pp}. Die Grundmode der Quarzplatte bei AT-Schnitten besteht in einer sinusförmigen Auslenkung der Kristallebenen senkrecht zur Oberfläche (Thickness shear mode)¹⁾. Gekoppelt können höhere, kompliziertere Moden auftreten. Diese Schwingungen äußern sich im Röntgenreflex durch eine erhöhte Reflektivität des Kristalls an den Stellen, an denen eine inhomogene Verzerrung des Gitters durch die Schwingung hervorgerufen wird, d.h. wo die 2. Ableitung des Skalarprodukts aus Beugungsvektor g und Verschiebungsvektor u von null verschieden ist.

In einer Folge von Topogrammen mit einem zeitlichen Abstand von 40 nsec wurde das An- und Abswellen der akustischen Schwingung über nahezu eine Periode aufgenommen. Gleichzeitig sichtbar wurden eine Vielzahl von Versetzungen, von denen sich etliche bei näherer Betrachtung im Spannungsfeld der akustischen Schwingung bewegen. Dieses "Mitschwingen" von Versetzungen wird für einen Teil der Dämpfung von akustischen Wellen verantwortlich gemacht²⁾. Die Experimente liefern zum ersten Mal den direkten Beweis für dieses Modell.

* hergestellt von KV Neckarbischofsheim GmbH

Um Informationen darüber zu bekommen, in welcher Tiefe im Kristall sich diese Vorgänge abspielen, wurden mit einem 50 - 60 μm breiten Spalt an verschiedenen Stellen des Kristalls section patterns registriert. Die Versetzungslinien äußern sich hauptsächlich durch ihre kinematischen Kontraste als Punkte, deren Abstand vom Rand des section patterns ein direktes Maß für ihre Tiefe im Kristall ist. In einer Serie von section patterns wurde die Bewegung dieser Kontraste in Abhängigkeit von der Schwingungsphase untersucht. Eine erste Auswertung ergibt u.a. folgendes:

- 1) Die thickness shear mode äußert sich durch erhöhte Reflektivität in den Bäuchen der Schwingung, bei der Grundmode also nur in der Nähe der Oberfläche, was zu einer Verbreiterung der "hot margins" führt. Die Differenzierung der Kontraste in ihrer Tiefe im Kristall durch das section pattern zeigt sich besonders eindrucksvoll in der Abbildung von höheren Moden, deren komplizierte Schwingungsstruktur sich bei vollem Strahlquerschnitt nicht auflösbar überlagert.
- 2) Die Kontraste der Versetzungen werden in der Regel bei anliegender Schwingung verwaschen im Vergleich zum ruhenden Quarz.
- 3) Es gibt Versetzungen, die sich durchaus innerhalb einer Schwingungsperiode von der Vorder- zur Rückseite der Quarzplatte bewegen.
- 4) In der Nähe des Nulldurchgangs erscheinen manche Versetzungen stark verwaschen, was durch eine aperiodische Bewegung (evt. pinning) hervorgerufen sein könnte.

Referenzen:

- 1) R.D. Mindlin, W.J. Spencer, J. Acoust. Soc. Am. 42, 1268-1277 (1967)
- 2) A.V. Granato & K. Lücke, in Physical Acoustics, ed. Mason, Academic Press, 1966, S. 226.

Multistereo synchrotron x-ray topography

T. Tuomi, V. Kelhä*, K. Naukkarinen, and M. Blomberg

Laboratory of Physics, Helsinki University of
Technology, SF-02150 Espoo 15, Finland

*Instrument Laboratory, Technical Research
Centre of Finland, SF-02150 Espoo 15, Finland

Several transmission or back-reflection x-ray topographs are obtained on the same film or plate with polychromatic synchrotron radiation. Any two such topographs form a stereo pair /1/. As an example six enlarged back-reflection topographs of a (100) Fe(Si) crystal are shown in Fig. 1. The topographs have been moved towards the center of the pattern so that the angular positions of the spots have remained the same as in the original x-ray film. There are all together 15 stereo pairs in Fig.1. Each pair may be looked at with a stereo viewer when they are turned into the proper viewing position by turning the whole figure about the normal of the paper. Stereoscopic image is also obtained without any device rather easily after some practice by viewing with crossed eye axes, i.e. by looking at the left image with the right eye and the right image with the left eye. In so doing, however, the top surface is changed to the bottom.

The direction cosines of straight line defects such as dislocations are easily obtained from two symmetric stereo topographs. Similarly the depth of a spot-like defect image measured from the front surface of the sample can be determined with an accuracy comparable to the geometric resolution of the imaging technique.

/1/ T. Tuomi, V. Kelhä, K. Naukkarinen, and M. Blomberg, accepted for publication in Acta Polytechnica Scandinavica, Applied Physics Series, Ph

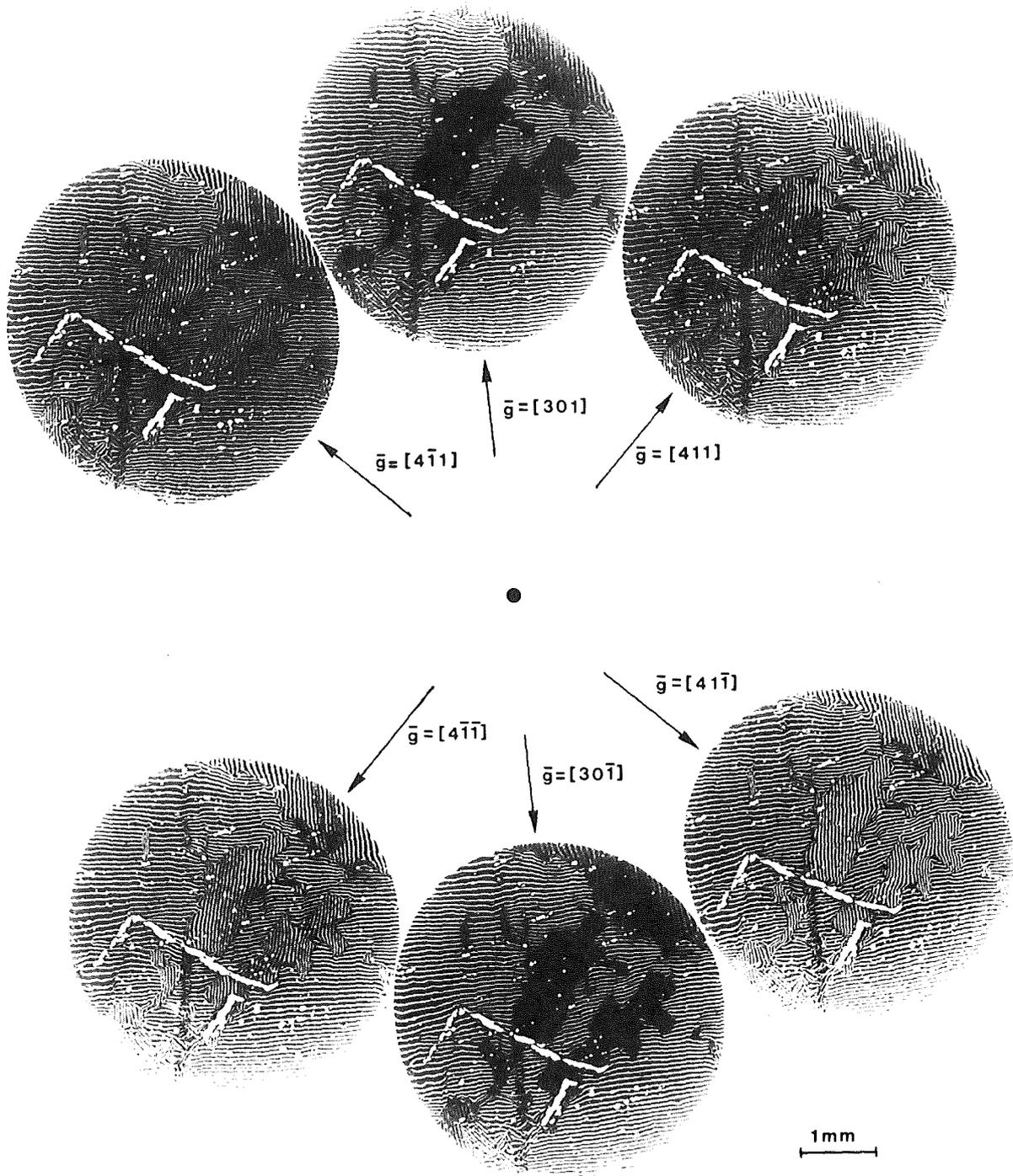


Fig. 1.

Development and applications of the synchrotron x-ray topography

T. Tuomi, V. Kelhä*, K. Naukkarinen, and M. Blomberg

Laboratory of Physics, Helsinki University of Technology,

SF-02150 Espoo 15, Finland

*Instrument Laboratory, Technical Research Center of
Finland, SF-02150 Espoo 15, Finland

Real-time topography. X-ray diffraction topographs are converted into visible (green) images on a fluorescent screen. These topographs are recorded on videotape using a low light level television camera equipped with a magnifying optics. The geometric resolution is estimated to be about 20 μm . No video signal processing was necessary in an experiment in which moving multiple diffraction lines were observed in a dynamically bent perfect silicon wafer. The appearance and intensities of the lines could be explained by means of the kinematical theory of simultaneous diffraction by more than one lattice plane /1/.

Quasi-real-time topography. The evolution of the magnetic domain pattern in a (100) Fe(Si) crystal was studied by taking a series of back-reflection topographs when the sample was compressed nearly along an easy direction of magnetization. In the measured relative strain range from 0 to 10^{-5} the initial chevron pattern gradually changed to the zig-zag stripes parallel to the direction of compression.

Section topographs. Using an incident 10 μm -wide polychromatic beam x-ray interference was observed in each transmission section topograph of a Laue pattern taken with a perfect silicon wedge. The shape of the section topographs depended on the Bragg reflection and on the imaging geometry.

/1/ T. Tuomi and K. Naukkarinen, Phys. Rev. B (Nov. 15, 1981)

CO₂-laser annealing of ion-implanted silicon

K. Naukkarinen, T. Tuomi, M. Blomberg

Laboratory of Physics, Helsinki University of Technology,

SF-02150 Espoo, Finland

and

M. Luomajärvi and E. Rauhala

Department of Physics, University of Helsinki,

SF-00170 Helsinki 17, Finland

Transmission topographs were taken from heavily doped silicon crystals implanted with ¹⁵N-ions. The samples were annealed with 100 ns CO₂-laser pulses, whose intensity was of the order of 40 MWcm⁻². Fig. 1 shows a $\bar{1}\bar{1}\bar{3}$ transmission topograph taken with polychromatic synchrotron radiation. Almost perfect recrystallization of the amorphized ion-implanted region is seen in the middle part of the laser irradiated rectangular area. At the edges of the laser spot, however, large strain field is observed. The topographic study was supplemented by He-ion channeling, (p,γ)-reaction, and optical reflection and transmission measurements as well as by calculations related to the melting model of annealing.

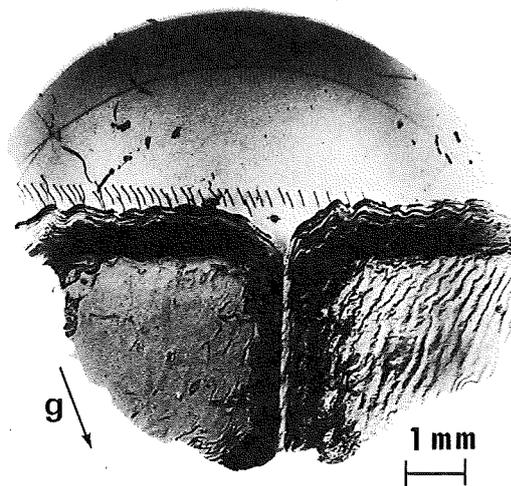


Fig. 1.

X-ray scattering factors for large scattering vectors

L. Gerward^a and J. Staun Olsen^b

^a Laboratory of Applied Physics III, Technical University of Denmark, Lyngby

^b Physics Laboratory II, University of Copenhagen

The coherent scattering of x-rays from an atom is described in terms of the atomic scattering factor or form factor. Computational developments in recent years have significantly improved the description of photon interactions with atoms¹ and the form factor is well known in the range of scattering vectors normally used for x-ray crystallography. However, new experimental techniques, particularly in connection with synchrotron radiation, have called for form factors at larger scattering vectors. Important examples are x-ray energy-dispersive diffraction and white-beam x-ray topography. In the first case improved Fourier transforms of the electron density in solids and liquids can be obtained. In the second case structure factors for high-index reflections are needed for the contrast calculation and for estimating the contribution of harmonics.

A preliminary study² showed that x-ray energy-dispersive powder diffraction with synchrotron radiation can be used for structure factor determination giving R-factors of about 3% for simple structures. These first studies used cylindrical samples in glass capillars and the value of the absorption factor had to be fitted to the experimental data. Experiments performed in 1981 have used flat samples, where the absorption factor is calculable and this should improve the results. Data for iron, cobalt and nickel are now being evaluated.

1 International Tables of x-ray Crystallography, Vol. IV (1974).

2 B. Buras, L. Gerward, A.M. Glazer, M. Hidaka and J. Staun Olsen, J. Appl. Cryst. 12, 531 (1979); DESY SR - 79/09.

High pressure diffraction of YbH_2 up to 28 GPa

J. Staun Olsen^a, B. Buras^{a,b}, L. Gerward^c, B. Johansson^d, B. Lebech^b,
A. Skriver^{e,b} and S. Steenstrup^a

^a Physics Laboratory II, University of Copenhagen

^b Risø National Laboratory, Roskilde

^c Laboratory of Applied Physics III, Technical University of Denmark, Lyngby

^d Physics Department, University of Aarhus

^e Nordita, Copenhagen

In several rare-earth compounds and intermetallics the valence state of the rare-earth ion may be changed between the $4f^n (5d 6s)^2$ and $4f^{n-1} (5d 6s)^3$ configuration by chemical manipulation or by application of high pressure¹. In view of that the structure of YbH_2 was studied at pressures up to 28 GPa by means of x-ray energy-dispersive diffraction and synchrotron radiation².

A diamond anvil high pressure cell was used. YbH_2 powder sample 200 μm in diameter and 80 μm thick was enclosed in an Inconel gasket. A 4:1 methanol-ethanol mixture and a ruby were added to the powder to allow for hydrostatic pressure conditions and a proper pressure calibration, respectively.

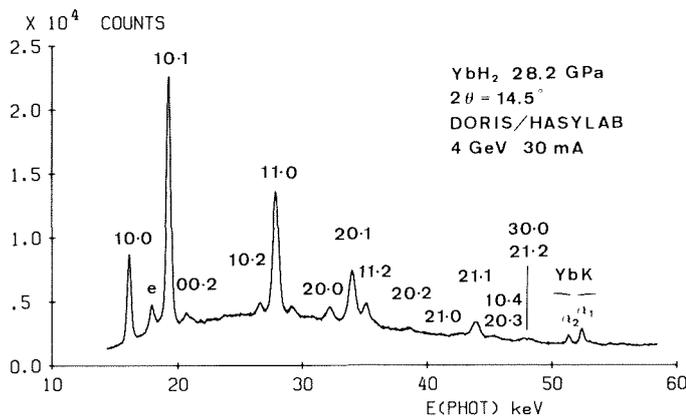
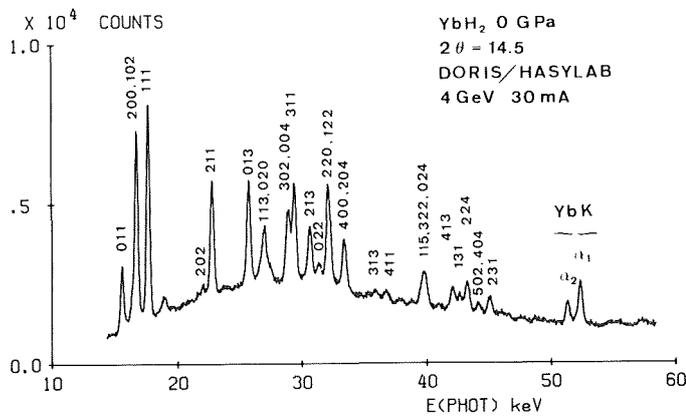
The electron energy was 4 GeV and the time averaged electron current produced by 20 bunches between 20 and 40 mA. The white-beam energy-dispersive diffractometer³ and the triple-axis spectrometer⁴ working in the energy-dispersive mode were used. The exposure time was usually 500 s for each diffraction spectrum.

The x-ray patterns obtained at atmospheric and 28.2 GPa pressures are shown in the Figure. The absence of Inconel lines should be noticed. This is due to the extremely good collimation of the incident beam and to the precise remotely controlled movements of the diffractometer components.

The structure of YbH_2 at atmospheric pressure is known to be orthorhombic. The unit cell dimensions from a preliminary analysis of the measured spectra, $a = 5.898 \text{ \AA}$, $b = 3.576 \text{ \AA}$, $c = 6.765 \text{ \AA}$, are in good agreement with the literature data. As can be seen from the figure YbH_2 has a different structure at 28.2 GPa. The reflections can be indexed using a hexagonal close packed unit cell with $a = 3.516 \text{ \AA}$ and $c = 4.610 \text{ \AA}$. Measurements at intermediate pressures show that the structural phase transformation occurs at about 14 GPa accompanied with a sudden decrease of the unit cell volume with about 5.4%. This is most probably due to the change of the valence state from $4f^{14} (5d 6s)^2$ to $4f^{13} (5d 6s)^3$. This latter conclusion can be verified or rejected by absorption measurements which are now planned.

Besides the physical results the study has clearly demonstrated the great advantages of x-ray energy dispersive diffraction with synchrotron radiation for high pressure studies using a diamond cell.

- 1 See for instance A. Jayaraman: "Valence changes in Compounds" in "Handbook of the Physics and Chemistry of Rare Earth", Vol. 2, ed. by A. Gschneider Jr. and L.R. Eyring (North Holland, Amsterdam 1979)
- 2 J. Staun Olsen, B. Buras, L. Gerward, B. Johansson, B. Lebech, H. Skriver and S. Steenstrup, DESY SR 81/13
- 3 J. Staun Olsen, B. Buras, L. Gerward and S. Steenstrup, J. Phys. E 14 1154-1158 (1981); DESY SR - 81/10
- 4 J. Als-Nielsen, J. Linderholm, S. Jørgensen, E. Skaarup, D. Petersen and B. Buras, Risø National Laboratory Report R-441 (1980).



X-ray energy-dispersive diffraction patterns of YbH₂ at (a) atmospheric pressure and (b) 28.2 GPa

Diffraction studies of US at high pressure up to 40 GPa

U. Benedict^a, L. Gerward^b, J. Staun Olsen^c and S. Steenstrup^c

^a Forschungsanstalt Karlsruhe, Europäisches Institut für Transurane

^b Laboratory of Applied Physics III, Technical University of Denmark, Lyngby

^c Physics Laboratory II, University of Copenhagen

In the recent years much attention has been directed against the effect of pressure on crystal structure and lattice parameters of the lanthanide because of the delocalization of the 4f state.

It is supposed that similar effects concerning the 5f electrons can be observed in the actinides but much less is known in this case. On the other hand there are differences between the actinide series of elements and the lanthanides because the 5f shell although it is fairly localised it forms a more extensive part of the actinide atoms than does the 4f in the lanthanide.

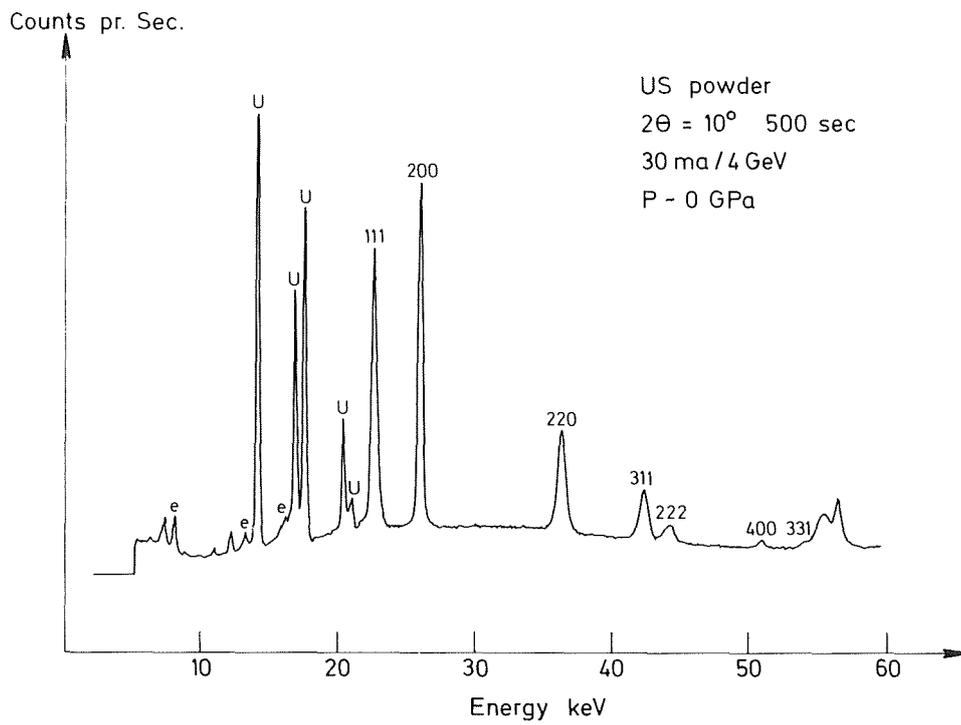
We have studied US under pressure up to 40 GPa in a diamond cell using the energy dispersive diffraction method. The US used has at room temperature and atmospheric pressure NaCl structure with a lattice parameter $a = 5.48744 \text{ \AA}$.

The scattering angle was $2\theta = 10^\circ$ and the time averaged electron current produced by 20 bunches was between 20 and 40 mA. The exposure time was usually 500 sec.

In Fig. 1 is shown an x-ray pattern obtained at atmospheric pressure. The diffraction lines are indexed according to the known structure of US.

At increasing pressure we see a changing of the line position and about 16 GPa a splitting of the 220 line take place. From very preliminary calculations we have fitted the new structure to a tetragonal one.

The data for increasing and decreasing pressure shows only very little hysteresis. Further work is under way.



Diffraction spectrum of US at zero pressure

Röntgenbeugung unter hohen Drucken und Temperaturen

E.Hinze, G.Will, W.Nuding, J.Lauterjung

Mineralogisches Institut der Universität Bonn, Lehrstuhl für Kristallographie, Poppelsdorfer Schloss, 5300 Bonn

Daten zur Strukturbestimmung von nicht abschreckbaren Hochdruck-Hochtemperatur-Phasen können nur aus Beugungsexperimenten unter wählenden Temperatur- und Druckbedingungen gewonnen werden. Ein vielversprechendes Verfahren, das den Erfordernissen der Hochdruck-Hochtemperatur-Forschung besonders angepasst ist, ist die Methode der energiedispersiven Röntgenbeugung¹. Sie erlaubt es, das Volumen der Elementarzelle als Funktion von Druck und Temperatur routinemäßig zu bestimmen².

Als Beispiel zeigen wir die Kompressibilität von $MnSO_4$, wie sie im Mai 1981 am Röntgenmeßplatz 3 bestimmt wurde (Abb.1).

Schwierigkeiten bereitet immer noch die genaue Bestimmung der Linienintensitäten und damit die Verfeinerung von Kristallstrukturen.

Aus diesem Grunde wurden im April 1981 am Meßplatz für energiedispersive Röntgenbeugung³ Untersuchungen am orthorhombischen Mangansulfat $MnSO_4$ bei Normalbedingungen, sowie im Druckbereich bis 40 kbar und im Temperaturbereich bis 600°C durchgeführt. Als Druckapparat stand eine von uns entwickelte heizbare Zylinderpressform zur Verfügung⁴. Ausgehend von der Formel für die integrale Intensität eines Debye-Scherrer-Ringes und unter Berücksichtigung

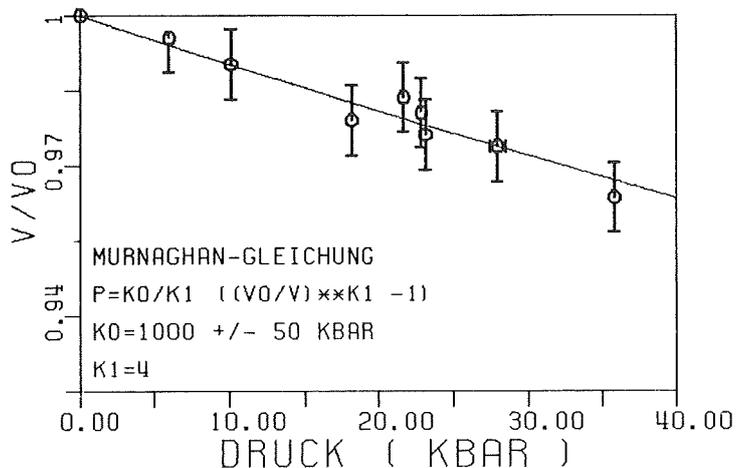


Abb.1 Kompressionskurve von Mangansulfat

der energieabhängigen Absorption und Primärstrahlintensität, der Temperatureinflüsse durch den Debye-Waller-Faktor, sowie der energieabhängigen Akzeptanz des Diffraktometers erhält man Intensitäten, die für kristallographische Least Squares Rechnungen verwendet werden.

Als Beispiel einer solchen Strukturanalyse mit Synchrotronstrahlung wird die Struktur der nicht abschreckbaren Hochtemperaturphase β -MnSO₄ gezeigt. Das Beugungsdiagramm ist in Abb.2 dargestellt. Das geringe Auflösungsvermögen des Halbleiterzählers läßt sich durch den Einsatz von Profilanalyse soweit verbessern, daß brauchbare Daten abgeleitet werden können. Die Struktur des β -MnSO₄ wurde ausgehend von einem Strukturvorschlag⁵ mit dem Programm POWLS⁶ verfeinert. Die Ergebnisse sind in Tab.1 zusammengefasst.

Tab.1 Gitterkonstanten und Atomparameter von β -MnSO₄

Atom	Position	x	y	z
Mn	4(a)(0,0,0)	0	0	0
S	4(c)(x,y,1/4)	0.516(72)	0.184(10)	1/4
O(1)	4(c)(x,y,1/4)	0.889(12)	0.128(06)	1/4
O(2)	4(c)(x,y,1/4)	0.399(31)	0.377(12)	1/4
O(3)	8(d)(x,y,z)	0.434(15)	0.205(07)	0.189(09)

R - Faktor : R = 5.7 %

Gitterkonstanten: a = 4.808(6), b = 8.772(12), c = 7.079(10)

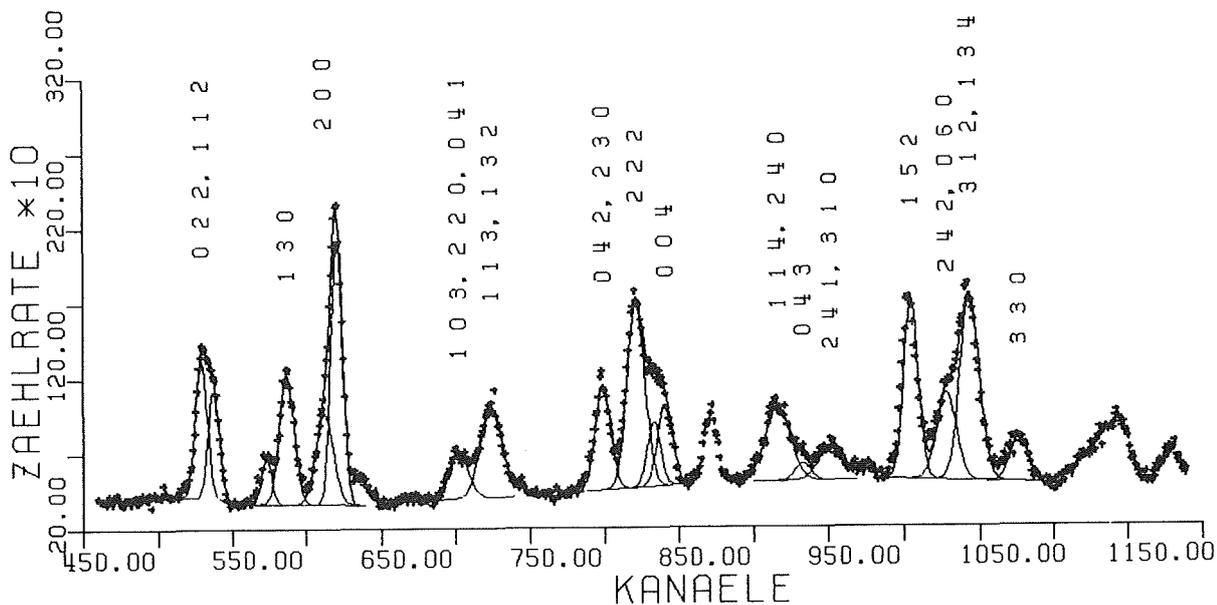


Abb.2 Beugungsdiagramm von β -MnSO₄, Ergebnisse der Profilanalyse sind eingezeichnet. (T = 460°C, Meßzeit t = 500 sec)

- 1) G.Will, Fortschr.Min 59 (1981), 31-94
- 2) G.Will, E.Hinze, W.Nuding, Phys.Chem.Minerals 6 (1980), 157-167
- 3) J.S.Olsen, B.Buras, S.Steenstrup, L.Gerward, HASYLAB Jahresbericht 1980
- 4) W.Nuding, E.Hinze, G.Will, J.Appl.Cryst. 13 (1980), 46-49
- 5) A.Kirfel, G.Will, High Temp.-High Press. 6 (1974), 525-527
- 6) G.Will, J.Appl.Cryst. 12 (1979), 483-485

Energiedispersive Röntgenbeugung unter hohen Drücken

W.A. Großhans, H. Olijnyk, W.B. Holzapfel
Universität - Gesamthochschule - Paderborn
Experimentalphysik, 4790 Paderborn

A) Hochdruckmessungen an Gd

Für die regulären dreiwertigen Lanthaniden von La bis Lu wurde mit fallender Ordnungszahl und steigendem Druck die Strukturfolge hcp \rightarrow Sm-Typ \rightarrow dhcp \rightarrow fcc vorgeschlagen^{1,2)}. Duthie und Pettifor³⁾ interpretierten die relative Stabilität der verschiedenen Phasen mit Hilfe der Zahl der d-Elektronen pro Atom im Leitungsband (N_d). Die Strukturfolge der Lanthaniden kann durch ein Anwachsen von $N_d \approx 1,5$ für hcp auf $N_d \approx 2,7$ für fcc erklärt werden. Diese Theorie konnte durch Messungen am 4d-Metall Yttrium bekräftigt werden⁴⁾.

Gadolinium ist das leichteste Lanthanid, das bei Raumtemperatur und Atmosphärendruck in der hcp-Phase kristallisiert. Damit sollten alle Phasenübergänge von hcp bis fcc im zugänglichen Druckbereich durchlaufen werden. Abb.1 zeigt Beugungsspektren von Gd in den verschiedenen Phasen⁵⁾ bei 4,7 GPa, 7,4 GPa, 18,2 GPa und 34,4 GPa. Damit ist Gd das erste Lanthanid, bei dem die ganze Strukturfolge hcp \rightarrow Sm-Typ \rightarrow dhcp \rightarrow fcc experimentell nachgewiesen ist. Geplante Untersuchungen an den anderen Seltenen Erden bei Drücken bis 50 GPa dienen zu weiteren experimentellen Überprüfungen der vorgeschlagenen Hochdruck-Homologien.

B) Experimenteller Aufbau

Zur Druckbestimmung wird die Rubin-Lumineszenz bei 694,4 nm benutzt. Die Anregung des Rubin-Splitters in der Diamantzelle erfolgt i.a. durch einen Laser. Es konnte nachgewiesen werden, daß die Rubin-Lumineszenz auch durch den Synchrotronstrahl angeregt werden kann. Aus diesem Grund wurde ein ferngesteuertes Spektrometer entwickelt⁶⁾ und an den energiedispersiven Meßplatz angepaßt. Damit können Beugungs- und Druckspektrum gleichzeitig aufgenommen werden, was zu einer Reduzierung der Meßzeit führt.

Weiterhin zeigte es sich, daß Speicherring-Energien unter 4,5 GeV für energiedispersive Hochdruck-Messungen kaum brauchbar sind, da in diesem Fall die Photonenintensität oberhalb 30 keV zu niedrig ist.

Referenzen:

1. B. Johansson and A. Rosengren, Phys. Rev. B11, 2836 (1975)
2. A. Nakaue, J. Less. Comm. Met. 60, 47 (1978)
3. J.C. Duthie and D.G. Pettifor, Phys. Rev. Let. 38, 564 (1977)
4. Y.K. Vohra, H. Olijnyk, W. Großhans, W.B. Holzapfel, Phys. Rev. Let. 47, 1065 (1981)
5. W.A. Großhans, Y.K. Vohra, W.B. Holzapfel, in Vorbereitung
6. W. Großhans, W.B. Holzapfel, H. Olijnyk, Proceedings of the 8th AIRAPT & 19th EHPRG Conference, Uppsala, August 1981

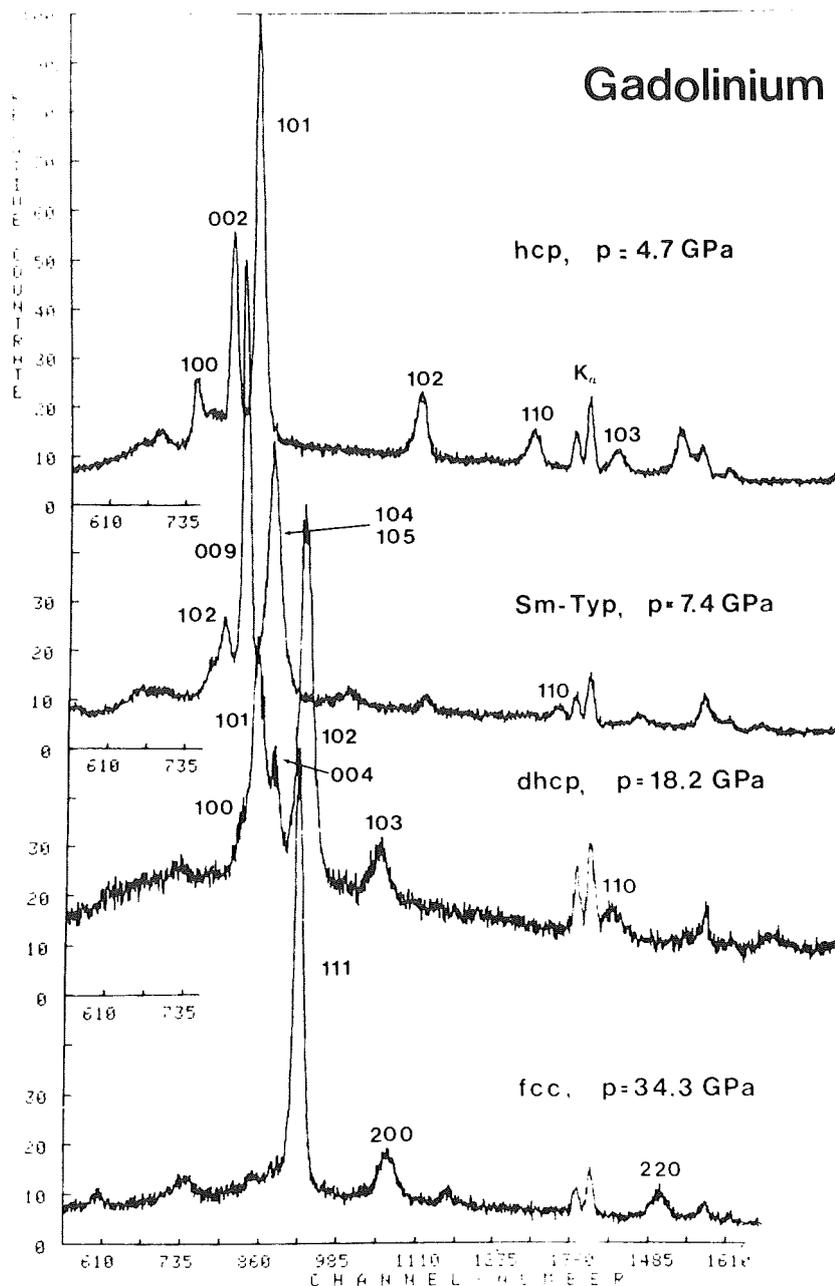


Abb.1 : Beugungsspektren von Gadolinium bei verschiedenen Drücken

Untersuchungen mit stehenden Röntgeninterferenzfeldern

P. Funke^{a)}, N. Hertel^{b)}, G. Materlik^{c)} und J. Zegenhagen^{c)}

a) II. Institut für Experimentalphysik der Universität Hamburg

b) Institute of Physics, University of Aarhus

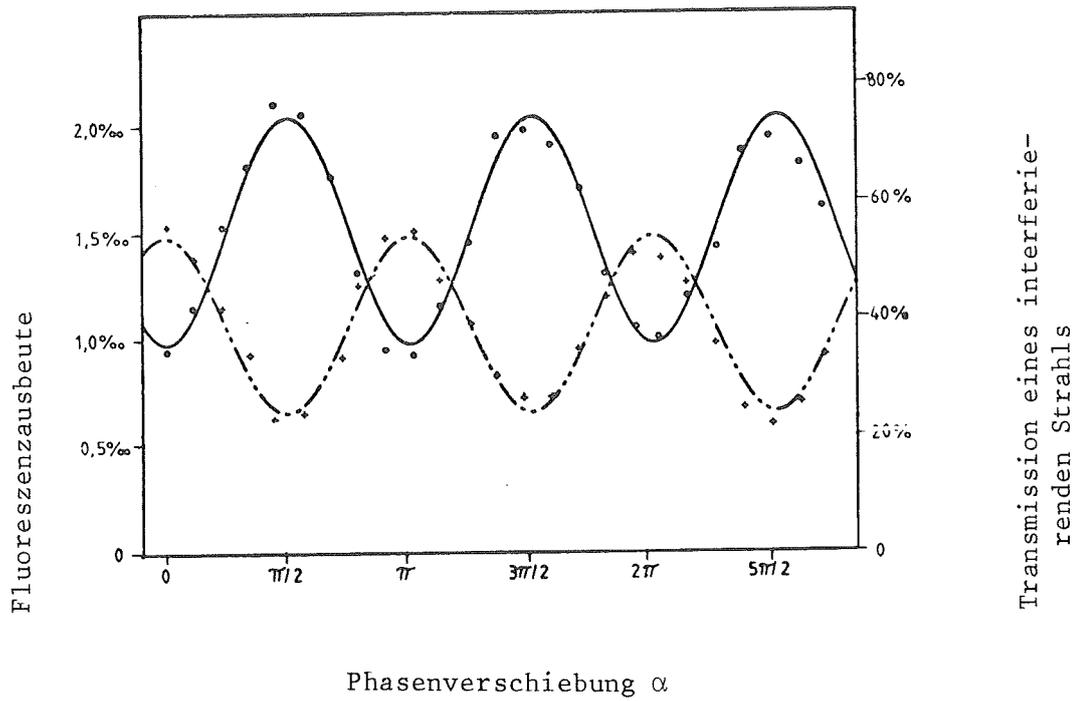
c) Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB, DESY

Der Aufbau der Apparatur für Messungen mit stehenden Röntgeninterferenzfeldern wurde im Grundkonzept weitgehend abgeschlossen. Sie besteht aus einem Doppelkristall-Monochromator, dessen getrennte Kristalle über einen piezokristall-gesteuerten, analogen Rückkopplungskreis relativ zueinander stabilisiert werden. Zur Probenaufnahme dient eine Eulerwiege, in deren Zentrum eine Mikropositioniereinheit, die Feinverstellungen über einen Winkelbereich $\ll 30''$ kontrolliert, montiert ist. Diese Winkeleinstellung wird über einen Plattenkondensator gemessen und linear über ein Piezokristall-Stellglied gemäß einer Dreieckrampenfunktion verändert. Die Rockingkurve wird relativ zur Rampe zentriert und nach jedem Durchlauf neu über einen Spannungs-Offset für den Piezokristall eingestellt. Das gestreute Spektrum wird mit einem Si(Li)Festkörperdetektor im Multi-Spektrum-Scaling Mode registriert.

Im Bragg-Fall wurden mit Bi implantierte Siliziumproben untersucht, und zwar in zwei verschiedenen Reflexen, nämlich (220) und (440). Dieses Verfahren gestattet die Bestimmung einer Verteilung, in welcher die Bi-Atome im Si-Gitter zwei unterschiedliche Positionen einnehmen.

Ferner wurden eingehend Kupfer-Einkristalle auf ihre Perfektion untersucht, um sie als Substrate für adsorbierte Oberflächenschichten einzusetzen.

Im Laue-Fall gelang die Registrierung der Lage der Wellenfelder in der Nähe der Oberfläche des Analysators eines LLL-Röntgeninterferometers aus Germanium. Figur 1 zeigt die Phasenverschiebung von $\pi/2$ der Fluoreszenzausbeute gegenüber der durch den Analysator transmittierten Intensität. Das Maximum (Minimum) der Transmission entspricht der Lage der Bäuche des Wellenfeldes zwischen (auf) den Netzebenen, wobei die Fluoreszenz von den Ge-Atomen dann minimal (maximal) wird. Die Änderung der Phase α wurde durch Drehung eines Phasenschiebers im Interferometer vorgenommen.



Figur 1: Änderung der Germanium-Fluoreszenzausbeute vom Analysatorkristall eines LLL-Interferometers. Die Normierung der Ausbeuten wurde auf einen nicht-interferierenden Strahl vorgenommen. Photonenergie: 17,0 KeV. Divergenz vom Monochromator in der Reflektionsebene: 0,4".

Zeitaufgelöste Untersuchungen von Laserpuls-induzierten Gitterrelaxationen an Cer-Terbium-Pentaphosphaten

D. Pruss, G. Huber, H. G. Danielmeyer Inst. für Angewandte Physik, Universität Hamburg und H. D. Bartunik E.M.B.L. Outstation Hamburg

Es wurden erste zeitaufgelöste Messung von Röntgenreflexintensitäten bei Laserpulsanregung am $Ce_{0.2}Tb_{0.8}P_5O_{14}$ durchgeführt, wobei die doppelfokussierende Röntgenkamera X 11 des E.M.B.L. zur Verfügung stand. Verschiedene Reflexe wurden mit einem ortsempfindlichen linearen Gas-Detektor aufgenommen. Eine rechnergesteuerte Auswertelektronik triggerte einen XeCl Excimer Laser ($\lambda_p = 307 \text{ nm}$) bei einer Wiederholrate von 5 Hz, wobei eine Pulsenergie von 30 mJ auf die Probe fokussiert wurde. Bei einer Mittelung über 1000 Repetitionen betrug die Zeitauflösung 500 μsec .

Nach Laserpulsanregung zeigten sich starke Variationen der integrierten Intensitäten des 022-Reflexes von $Ce_{0.2}Tb_{0.8}P_5O_{14}$ (siehe Abb. 1). Abhängig von der initialen Stellung des ω -Winkels (siehe Abb. 2) wurde entweder ein Ansteigen oder ein Abfallen der Intensität unmittelbar nach Laseranregung beobachtet. Nach Anregung relaxiert die Reflexintensität nichtexponentiell auf einer ms - Zeitskala auf den ursprünglicher Wert. Der Intensitätswechsel ist mit einer kleinen Änderung des Braggwinkels korreliert, die damit eine Veränderung im Netzebenenabstand von $\Delta c/d \sim 10^{-3}$ anzeigt.

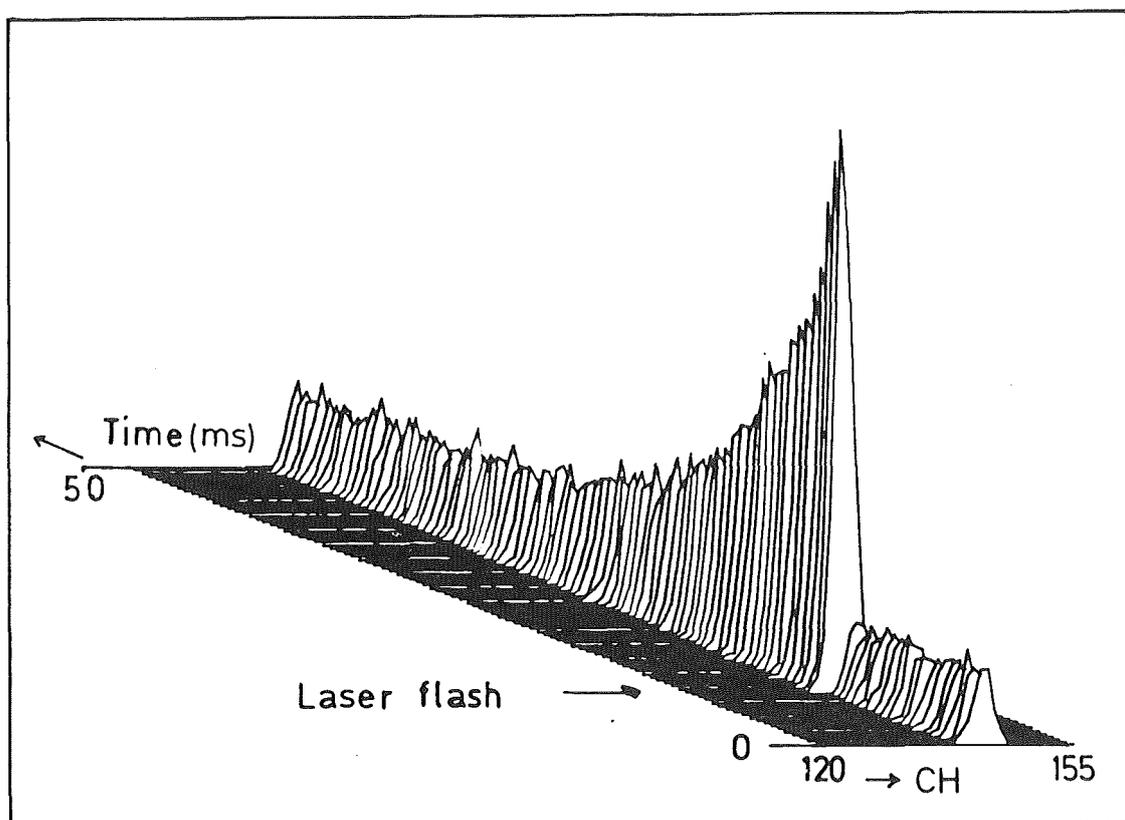


Abb. 1 : (022) - Reflex $Ce_{0.2}Tb_{0.8}P_5O_{14}$

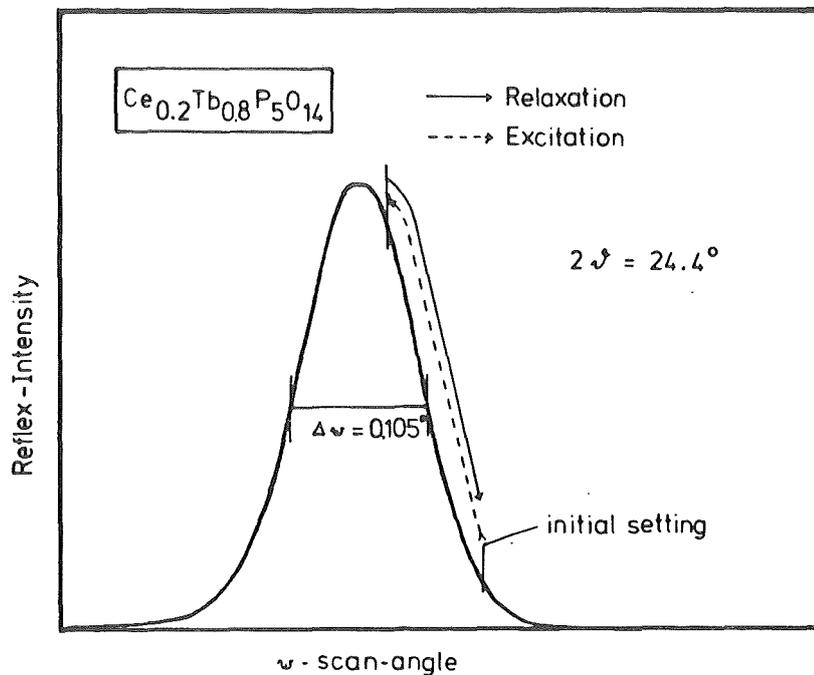


Abb. 2 : Laserpuls - induzierter ω - scan

Die experimentellen Resultate werden folgendermaßen interpretiert :

- Der Laser verursacht in einer Oberflächenschicht von 150 μm (Ce³⁺ - Absorptionslänge bei 307 nm) eine plötzliche Temperaturerhöhung von ca. 90K. Dabei wird ein Phasenübergang induziert, der den monoklinen Winkel von 90.4 auf nahe 90 Grad verschiebt. In Konsequenz ändert sich die Position und Intensität des 022 - Reflexes beim Phasenübergang von der monoklinen zu der orthorhombischen Raumgruppe (P₂₁/c → Pnma).
- Die explizite nichtexponentielle zeitliche Abhängigkeit der Reflexintensität kann quantitativ erklärt werden, indem man die schon früher ¹ gemessene Temperaturabhängigkeit des monoklinen Winkels und die Temperaturabhängigkeit unmittelbar nach Laseranregung bei der Lösung der Wärmeleitungsgleichung berücksichtigt.
- Der dynamische Phasenübergang liefert den wesentlichen Beitrag zum beobachteten Effekt. Der rein elektronische Effekt (Ionen- radiusänderung durch den 4f → 4f Übergang im Tb³⁺) konnte bisher nicht separiert werden. Zur Klärung dieser Frage sind weiterführende Messungen erforderlich.

Stokesshiftmessungen am CeP₅O₁₄ zeigen, daß nach Anregung elektronischer 5d-Zustände wesentlich stärkere Gitterrelaxationen eintreten, für die der Konfigurationswechsel 4f → 5d verantwortlich ist. Zur Untersuchung dieser Relaxation (erlaubter Übergang) ist eine wesentlich höhere Zeitauflösung im sub-μsec Bereich notwendig. Hierfür ist eine Ausnutzung der single-bunch Zeitstruktur von DORIS geplant.

¹ H.P.Weber et. al., Phys. Rev. B11,1152 (1975)

Fünfkreis-Diffraktometer mit durchstimmbarer Wellenlänge für Synchrotronstrahlung

V. Kupcik, A. Pähler, I. Valena, M. Wendschuh, R. Wulf
Mineralogisch-Kristallographisches Institut, Universität
Göttingen

I. Diffraktometer

Hierbei handelt es sich um ein konventionelles Vierkreisgerät, das auf einem zusätzlichen Viertelkreis montiert ist. Mit diesem Kreis kann das Diffraktometer um den Primärstrahl gedreht werden und ermöglicht damit polarisationsabhängige Messungen. Auch bei der Extremstellung von 90° arbeitete das Gerät problemlos. Nach dem mechanischen Aufbau erfolgte die Optimierung des Heliumsystems und die Ankopplung an das Strahlführungssystem im Hasylab. Daran schlossen sich Monochromatortests und erste Messungen an.

II. Monochromator

In dem von uns bisher benutzten Wellenlängenbereich von 0.56 bis $2,14 \text{ \AA}$ ließ sich die gewünschte Wellenlänge manuell innerhalb weniger Stunden problemlos einstellen. Die Wellenlängen wurden mit Hilfe eines Berylliumacetat-Testkristalls (kubisch, $a=15.744 \pm 0.002 \text{ \AA}$) bestimmt. Innerhalb dieser Fehlergrenze blieb die Wellenlänge konstant (d.h. $\Delta\lambda/\lambda \approx 10^{-4}$). Bei $\lambda=0.56 \text{ \AA}$ wurde die Kurzzeitstabilität der Wellenlänge mit einem Festkörperdetektor untersucht. Innerhalb der Meßgenauigkeit des Gerätes war die Wellenlänge konstant. Die Reproduzierbarkeit der Wellenlängeneinstellung ist bisher um ca. eine Größenordnung schlechter. Durch Computersteuerung, die aufgrund von technischen und Lieferschwierigkeiten noch nicht realisiert werden konnte, soll die Reproduzierbarkeit und Benutzerfreundlichkeit gesteigert werden.

III. Messungen

Erste Messungen zur Ausnutzung der anomalen Dispersion bei der Strukturbestimmung wurden an drei Kristallen durchgeführt (1). Für jeden Kristall wurde je ein Datensatz oberhalb und unterhalb der L-Absorptionskante des jeweiligen anomalen Streuers gesammelt. Ein weiterer Datensatz wurde bei Cu-K α -Strahlung gesammelt, unter anderem, um Vergleiche mit konventioneller Strahlung anstellen zu können (2).

Zur Überprüfung des Monochromators wurde die spektrale Zusammensetzung des Primärstrahls mit einem Festkörperdetektor analysiert (3).

Für eine Phasenbestimmung unter Ausnutzung des Renninger-Effekts nach der Methode von Chang und Queisser wurden ψ -Scans durchgeführt (4).

IV. Erfahrungen

Obwohl kein fokussierendes System eingebaut war, waren die gemessenen Intensitäten etwa zehnmal höher als mit konventioneller Strahlung.

Der Aufbau von Diffraktometer und Monochromator auf einer gemeinsamen Plattform erwies sich als schlecht handhabbar. Für die nächste Strahlungsperiode soll der Monochromator auf einem separaten, schwingungsentkoppelten, inzwischen fertiggestellten Tisch aufgebaut werden.

Testmessungen zeigten, daß die Strahlführung und Abschirmung weiter verbessert werden muß, um die auftretende Streustrahlung zu reduzieren.

Probleme ergaben sich bei kleinen, perfekten Einkristallen wegen der geringen Divergenz des Primärstrahls, da durch sie die Reflexprofile für das Auflösungsvermögen der Apparatur zu schmal werden. Dieses Problem läßt sich durch Verwendung anderer Monochromatoren lösen.

Das Gerät ist somit für konventionelle Messungen funktionsfähig, für spezielle Aufgaben hängt die Verwendbarkeit jedoch von der Problemstellung ab, zum Beispiel sind absolute Intensitätsmessungen noch nicht möglich.

Den Mitarbeitern des Hasylab danken wir für ihre Unterstützung beim Aufbau des Meßplatzes und zahlreiche fruchtbare Diskussionen.

(1) V. Kupcik, M. Wendschuh Universität Göttingen

(2) H. Kohler, H. Schulz MPI f. Festkörperforschg. Stuttgart

(3) N. Hansen, J. Schneider HMI Berlin

(4) Chang, Han MPI f. Festkörperforschg. Stuttgart

Röntgendiffraktionsmessung an NASICON⁺ ($\text{Na}_{1+x}\text{Zr}_2\text{Si}_x\text{P}_{3-x}\text{O}_{12}$) Einkristallen

H. Kohler und H. Schulz

Max-Planck-Institut für Festkörperforschung
Heisenbergstr. 1, 7000 Stuttgart 80

Am neu installierten Fünfkreisdiffraktometer wollten wir einen aus NASICON-Pulver präparierten $36^2 \times 45 \mu\text{m}^3$ großen Einkristall untersuchen. Dies gelang nicht, weil die Röntgenreflexe von NASICON-Kristallen dieser Größe zu schmal sind, um von einem Diffraktometer dieser Bauart aufgelöst werden zu können. Die Ursache ist dadurch gegeben, daß der Primärstrahl nahezu keine Divergenz aufweist und die untersuchten Einkristalle ziemlich perfekt sind.

Um trotzdem die günstigen Eigenschaften der Synchrotronstrahlung zur Diffraktometrie sehr kleiner Einkristalle nutzen zu können, ist eine Vergrößerung der Winkel- und Wellenlängen-Divergenz nötig, was zusätzlich eine Zunahme der Intensität zur Folge hätte. Dies könnte relativ einfach durch Ersatz der momentan installierten Ge-Monochromatorkristalle durch Kristalle mit ausgeprägter Mosaikstruktur (z.B. Graphit) erreicht werden.

Durch Vermessen eines etwa $200 \times 170 \times 150 \mu\text{m}^3$ großen Kristalls sowohl mit Synchrotronstrahlung als auch mit einer gewöhnlichen Röntgenröhre als Strahlungsquelle konnte gezeigt werden, daß sich die Halbwertsbreiten etwa um den Faktor 15 unterscheiden.

⁺NASICON: Na SUPERIONIC CONDUCTOR

Untersuchung der Kristallisation und des Schmelzens von Polymeren

G. Elsner, W. Prieske, R. Gehrke, H. G. Zachmann (Abteilung für Angewandte Chemie, Universität Hamburg)

J. Bordas, M. Koch (EMBL DESY, Hamburg)

1. Überhitzungserscheinungen bei Polymeren

Theoretische Untersuchungen haben ergeben ¹⁾, daß Polymere mit orientierten Ketten aufgrund von besonderen Entropieeffekten als Folge von kinetischen Hemmungen beim Schmelzen über den thermodynamischen Schmelzpunkt hinweg überhitzt werden können. Es wurde versucht, diese Überhitzungserscheinungen experimentell zu untersuchen, indem die Proben möglichst rasch auf eine Temperatur knapp oberhalb des Schmelzpunktes gebracht wurden und anschließend die Änderung der Röntgenweitwinkelstreuung als Funktion der Zeit während des isothermen Schmelzens gemessen wurde. Abb. 1 zeigt die Änderung der Weitwinkelstreuung einer orientierten Probe während des Schmelzens bei 272 °C. Man erkennt deutlich, daß die Kristalle nach etwa 150 Sek. aufgeschmolzen sind. Wenn man den gleichen Versuch mit einem Material macht, bei dem die Ketten nicht orientiert sind, dann findet ein Aufschmelzen mit annähernd gleicher Geschwindigkeit bereits bei tieferen Temperaturen statt. Abb. 2 zeigt den Kristallisationsgrad x_w in willkürlichen Einheiten als Funktion der Aufschmelzzeit für eine orientierte und eine nichtorientierte Probe. Ähnliche Ergebnisse wurden auch an einer Reihe von weiteren Proben erhalten.

Als nächstes stellt sich nun insbesondere die Frage, ob beim orientierten Material zunächst ein Aufschmelzen der Kristalle und erst nachträglich eine Relaxation der Orientierung erfolgt oder ob diese Prozesse in umgekehrter Reihenfolge auftreten. Um dies zu klären, sind entsprechende Untersuchungen mit einem zweidimensionalen Detektor geplant.

2. Gleichzeitige Messung der Röntgenkleinwinkel- und der Röntgenweitwinkelstreuung

Mit Hilfe der im vergangenen Jahr gebauten Apparatur konnten erste Messungen während der isothermen Kristallisation von Polyethylenterephthalat bei 116 °C durchgeführt werden. Eine besondere Schwierigkeit ergab die Tatsache, daß

man nicht gleichzeitig auf den Kleinwinkel- und den Weitwinkелеmpfänger fokussieren kann. Unsere Rechnungen ergaben, daß es am besten ist, die Fokussierung auf den Kleinwinkелеmpfänger vorzunehmen und dann den Strahl soweit einzuengen, daß die Verschmierung am Weitwinkелеmpfänger noch tragbar ist. Die Weitwinkelstreuung wurde mittels eines Films registriert, die Kleinwinkelstreuung mit Hilfe eines Zählrohrs. Um das Zählrohr nicht zu überlasten, konnte lediglich einer der acht Reflexionspiegel eingesetzt werden; der Spalt wurde auf $1 \text{ cm} \cdot 2 \text{ cm}$ eingeengt. Unter diesen Umständen wurde für die Registrierung der Weitwinkelstreuung jeweils 1 Minute verwendet. Im Verlauf der Kristallisation wurden eine Serie von Kleinwinkel-aufnahmen (Abb. 2a) sowie vier Weitwinkel-aufnahmen (Abb. 2b) durchgeführt. Es konnte festgestellt werden, daß die Zunahme der Intensität der Kleinwinkelstreuung und der Weitwinkelstreuung weitgehend konform geht. Eine quantitative Auswertung der Weitwinkelstreuung war aber wegen noch nicht ganz vollkommener Versuchsbedingungen und einen dadurch bestimmten Untergrund am Film noch nicht möglich. Nachdem jetzt Anhaltspunkte über die erforderlichen Belichtungszeiten für den Film vorliegen, soll bei einer weiteren Meßserie die Intensität der Weitwinkelstreuung noch erhöht werden.

3. Entwicklung eines Vidiconsystems

Die Firma Westinghouse hat das Vidiconsystem wunschgemäß so abgeändert, daß anstelle der optischen Linse eine Faseroptikplatte zur Übertragung der Lichtstrahlen angeschlossen werden kann. Außerdem wurde eine Vorrichtung eingebaut, um die Röhre zu kühlen und so den Dunkelstrom zu erniedrigen. Die abgewandelte Röhre ist im Juli 1981 bei uns eingetroffen. Danach wurde ein Konverterschirm hergestellt, um die Röntgenstrahlen in sichtbares Licht umzuwandeln, und das ganze System montiert, aufgebaut und ausprobiert. In der nächsten Strahlzeitperiode soll es eingesetzt werden.

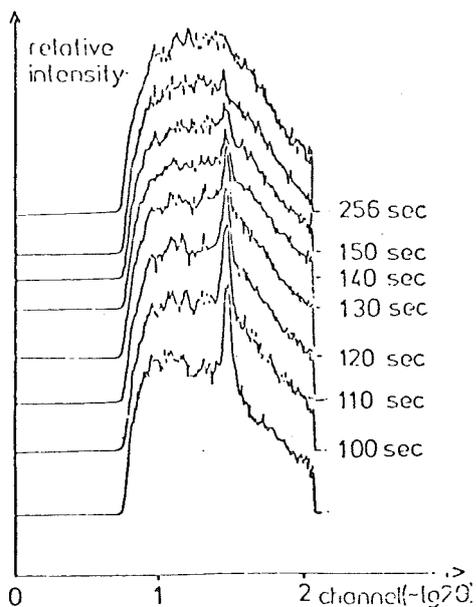


Abb. 1: Isothermes Schmelzen bei 272°C von orientiertem Polyethylterephthalat, das bei 255°C sowie bei verschieden tieferen Temperaturen getempert worden war.

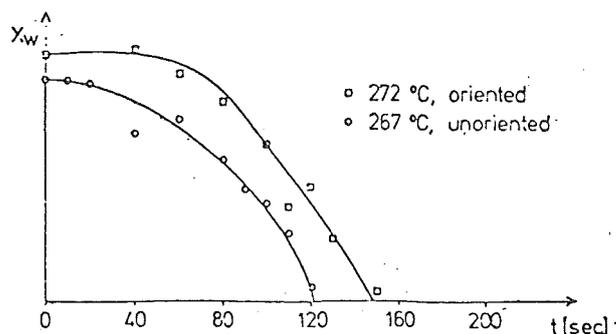


Abb. 2: Kristallisationsgrad X_w in willkürlichen Einheiten als Funktion der Zeit während des Schmelzens von Polyethylterephthalat, das bei 255°C sowie bei darunterliegenden Temperaturen getempert worden war.

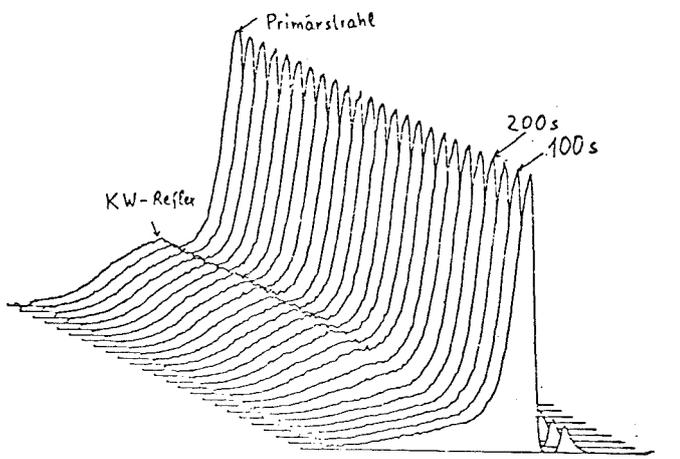


Abb. 3: Röntgenkleinwinkelstreuung von nichtorientiertem Polyethylterephthalat während einer Kristallisation bei 118°C .

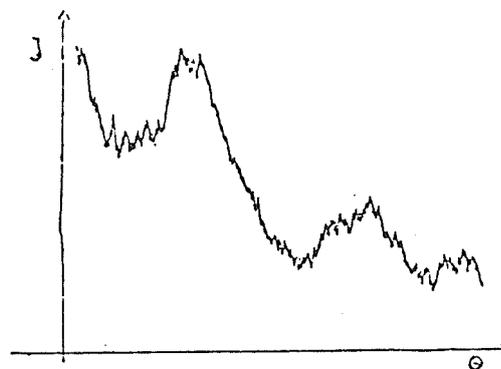


Abb. 4: Intensität der Röntgenweitwinkelstreuung I als Funktion des Streuwinkels θ nach einer Kristallisation von 12 Minuten bei 118°C .

Eine Guinier-Heizkamera für Synchrotronstrahlung

K.Kosten und H.Arnold

Institut für Kristallographie der T.H.Aachen

Die Planung der Kamera war ende 1980 abgeschlossen und mit dem Beginn des neuen Jahres wurde mit ihrem Bau begonnen. Jetzt, nach einjähriger Bauzeit, ist die Kamera nahezu fertig gestellt. Den mechanischen Teil der Kamera fertigte die Firma Huber/Rimsting. Im Sommer 1981 wurde ausgeliefert: Grundplatte Kameragehäuse, Ein- und Austrittsblenden, Filmkassetten, Antriebe für Filmkassette und Probenbewegung. Proben-träger und Ofengehäuse wurden in drei Exemplaren - zum auswechseln - im Institut gefertigt. Nachdem die Entwicklung der Ofenheizung ab-geschlossen ist - der Prototyp zeigte einen Temperaturgradienten von weniger als 0,5 K/mm am Probenort im Temperaturbereich von 500 bis 1400 K - werden die Öfen z.Zt. gewickelt und fertig gestellt.

Personelle Engpässe in der Werkstatt sowie Mängel der gelieferten elektronischen Bauteile verzögerten den Bau der elektronischen Steuerung. Mehrere Baugruppen wurden nach zeitraubenden Testmessungen und langwierigem Schriftwechsel von den Lieferanten umgetauscht. Interface und Leistungssteller sind in der Fertigung. Die Program-mierung des Mikroprozessors läuft hierzu parallel. Insgesamt ergibt sich eine Verzögerung gegenüber dem Plan von ca. zwei bis drei Monaten.

Für die Entwicklung des Monochromatorsystems liegt ein Computer-programm vor, das die Intensitätsverteilung der Synchrotronstrahlung am Probenort zu berechnen gestattet. Die Rechnungen beginnen Januar 1982. Mit Herrn Dr.Bartunik, EMBL, wurde eine Zusammenarbeit bei der Entwicklung und den Testmessungen des Monochromatorsystems vereinbart.

NEUE METHODEN und

ANGEWANDTE FORSCHUNG

Röntgeninterferometer

U. Bonse, I. Hartmann-Lotsch, H. Lotsch, K. Olthoff-Münter,
Institut für Physik, Universität Dortmund

Die Strahlführung für das Röntgeninterferometer in der Experimentierhalle wurde im Juli 81 fertiggestellt.

Seitdem konnten die Messungen der Absorption f'' und der anomalen Dispersion f' an der K-Kante von Selen¹ abgeschlossen werden.

In einer entsprechenden experimentellen Anordnung wurden anschließend f'' und f' an der K-Kante von Kupfer mit hoher Energieauflösung gemessen. Die Meßergebnisse sind in Abbildung 1 und Abbildung 2 dargestellt. Die Absorptionskurve in Abbildung 1 zeigt eine ausgeprägte XANES ("X-Ray Absorption Near Edge Structure")-Struktur. Die Auflösung eines ca. 2 eV breiten Peaks innerhalb der K-Kante wird erreicht.

Abbildung 2 stellt den Verlauf der anomalen Dispersion f' im gleichen Energiebereich dar. Da die Computer-Auswertung der Meßdaten für f' noch nicht abgeschlossen ist, handelt es sich hier um vorläufige Werte. Die Kurve weist zwei ausgeprägte Minima auf, die bei 8980 eV und bei 8990 eV liegen. An diesen Stellen hat die Absorptionskurve Wendepunkte. Die Anomalien sind wahrscheinlich auf Mehrfachstreuprozesse zurückzuführen. Eine genaue Analyse steht noch aus.

Dem Bundesminister für Forschung und Technologie danken wir für Förderung mit Personal- und Sachmitteln.

¹) U. Bonse, P. Spieker, J. T. Hein, G. Materlik
Nucl. Inst. Meth. 172, 223 (1980)

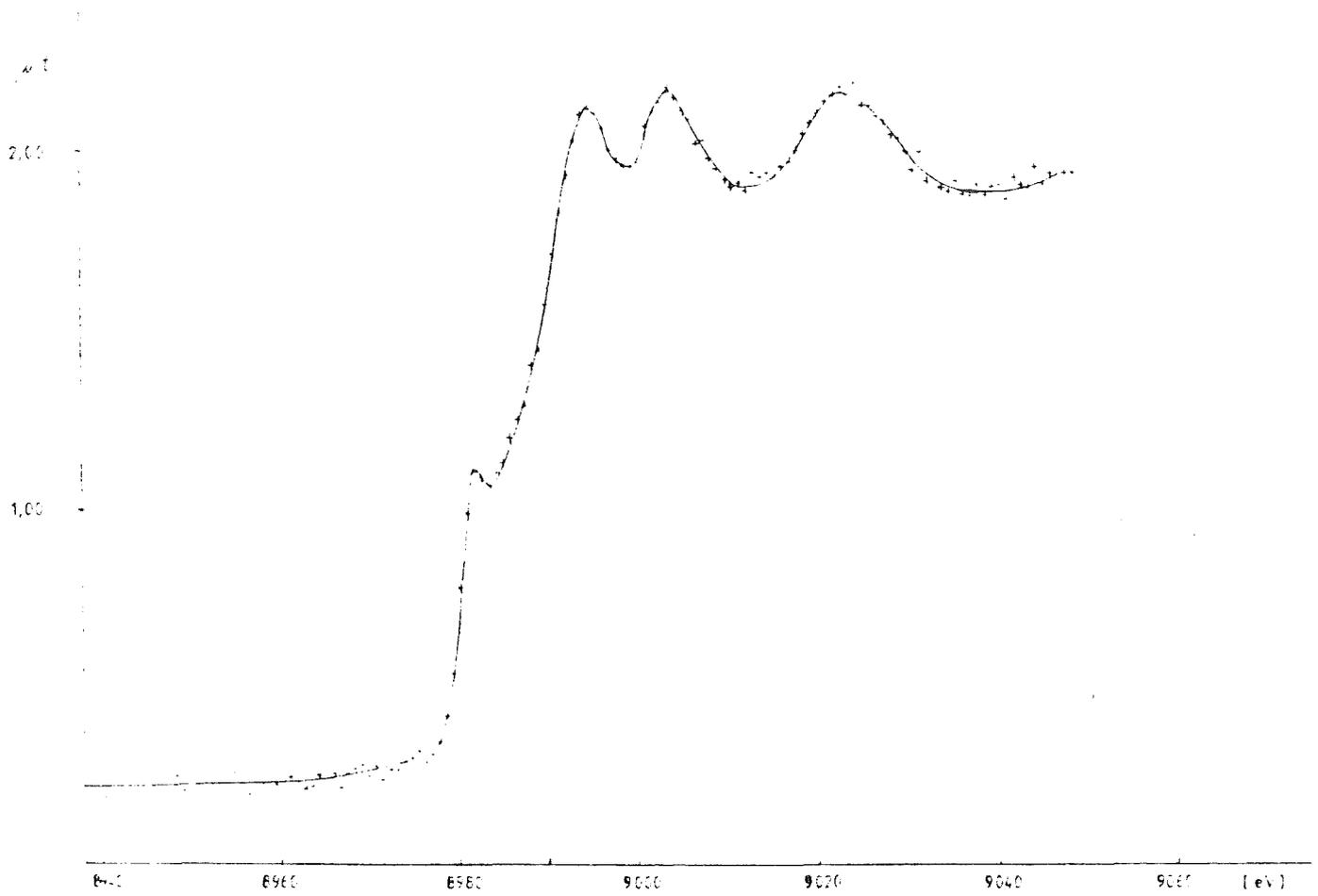


ABB. 1

Feinstruktur an der K-Kante des Kupfers: Absorptionsstruktur μt

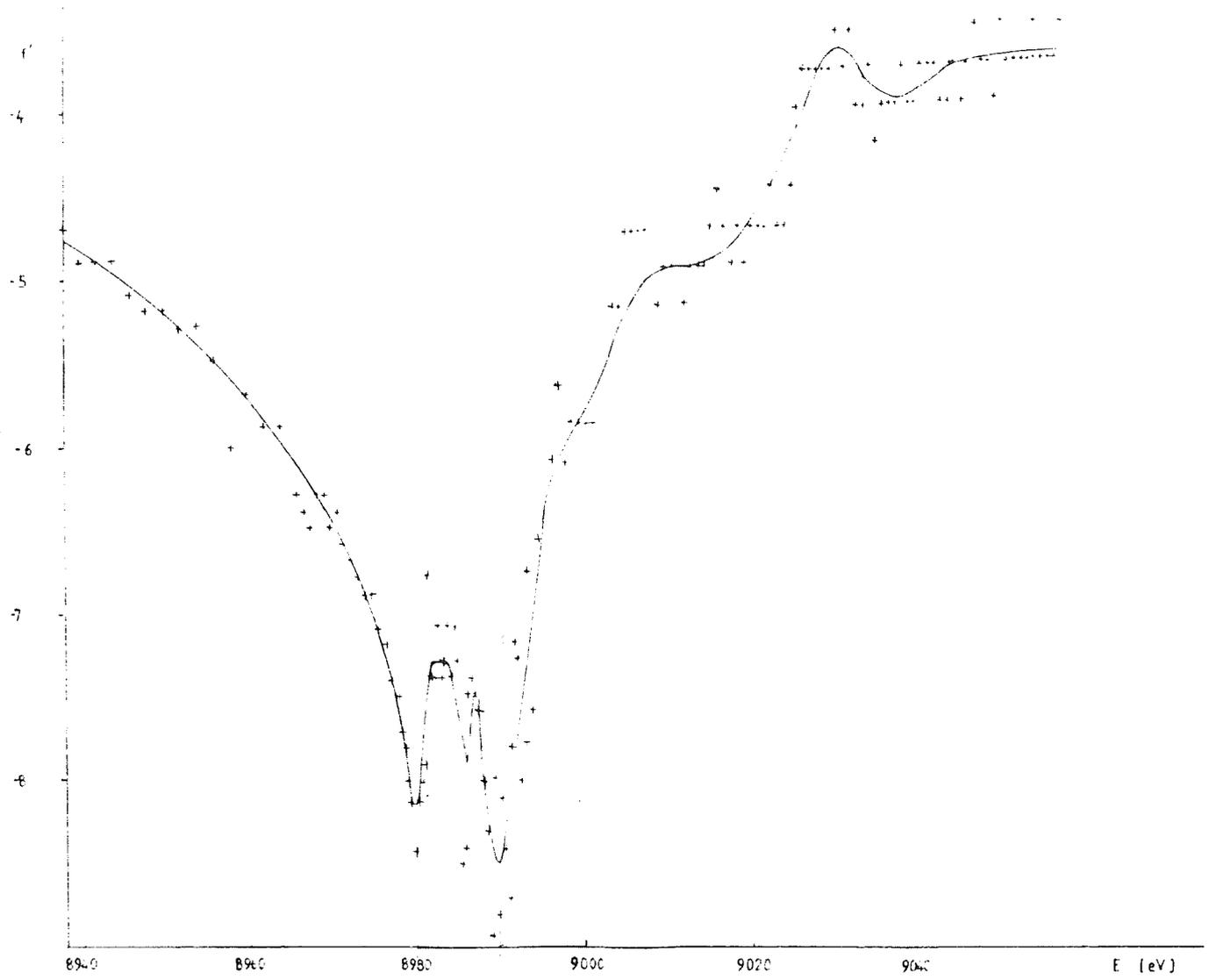


ABB. 2

Feinstruktur an der K-Kante des Kupfers: Dispersionsstruktur f'

Röntgenfluoreszenzanalyse mit Synchrotronstrahlung

A. Knöchel, W. Petersen, G. Tolkieln

Institut für Anorganische und Angewandte Chemie der Universität Hamburg
2000 Hamburg 13, Martin-Luther-King-Platz 6

Das Hauptgewicht der Arbeiten lag bei der Bestimmung der physikalischen Nachweisgrenzen für Einzelelemente und der Weiterentwicklung der Probenpräparationen, der Entwicklung von Rechnerprogrammen für die quantitative Auswertung der erhaltenen Spektren sowie der Überprüfung der erhaltenen Meßdaten. Die verwendete Meßapparatur wurde gegenüber 1980 weiterentwickelt und in weiten Teilen neugebaut. Die geometrische Anordnung im Bereich des Detektors wurde verbessert. Zusätzlich wurde über der Probenkammer als Provisorium ein Handschuhkasten eingebaut, um eine größere Anzahl von Proben ohne Störung der Heliumatmosphäre und ohne Kontaminationsgefahr durch die stark staubhaltige Laborluft wechseln zu können. Um für jede Probe optimale Anregungsbedingungen zu erreichen, wurde ein ferngesteuerter Blenden- und Absorberwechsler eingebaut. Zur besseren Ausnutzung der vorhandenen Meßzeit und um ein unnötig häufiges Betätigen der Beamshutter zu vermeiden, wurde ein ferngesteuerter Probenwechsler konzipiert, der spurenanalytischen Bedingungen genügen und eine Reduktion der Blindwerte ermöglichen soll.

Im einzelnen ist folgendes zu berichten:

Programmierarbeiten:

Für die Auswertung der erhaltenen Spektren wurde ein universell einsetzbares Programm entwickelt, das durch die Eingabe von Streuuntergrund und Linienintensitätsverhältnissen auf spezielle Anregungsbedingungen angepaßt werden kann. Dabei konnte auf einem dankenswerterweise von der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. J. Scheer (Universität Bremen) zur Verfügung gestelltes Programm aufgebaut werden. Das Programm erlaubt eine halbautomatische quantitative Auswertung der Spektren. Aufgrund der gegenüber der Röhre anders gearteten Anregungsbedingungen mußten für die Elemente $Z > 40$ die Intensitätsverhältnisse für die Linienserien K, L(I), L(II), L(III) experimentell bestimmt werden. Diese Daten sind vom anregenden Spektrum und damit von den eingesetzten Absorbern abhängig.

Zur rechnerischen Überprüfung der experimentellen Ergebnisse für Nachweisgrenzen und Polarisationsgrad (s.u.) wurden Programme entwickelt, die Durchmesser und Divergenz des Elektronenstrahls berücksichtigen.

Meßprobenpräparation:

Die Herstellung von dünnen Folienproben mit darin gelöster Probensubstanz wurde weiterverfolgt. Bei der bisher verwendeten Methylcellulose bestanden erhebliche Blindwertprobleme. Aus gereinigtem Polyvinylalkohol hergestellte Proben weisen wesentlich geringere Blindwerte auf. Allerdings treten hier insbesondere im Bereich der Alkali- und Erdalkalimetalle Inhomogenitäten durch Wanderungseffekte der Elemente beim Auftrocknen der Probenfilme auf. Diese wurden eingehend durch Abrastern von unterschiedlich hergestellten Proben untersucht. Die Auswertung ist noch nicht abgeschlossen.

In Folien aus verschiedenen Materialien wurden die Blindwerte in Hinblick auf eine mögliche Verwendung als Probenträger untersucht. Außerdem wurden verschiedene Prozeduren zur Reinigung dieser Folien getestet. Es zeigte sich in Übereinstimmung mit anderen Autoren, daß die häufig in der RFA verwendeten Mylarfolien sehr hohe Blindwerte aufweisen. Folien aus Polycarbonat (Makrofol) sowie selbst hergestellte Folien aus Polystyrol zeigten die geringsten Blindwert.

Physikalische Nachweisgrenzen:

Für ca. 40 Einzelelemente wurden die physikalischen Nachweisgrenzen unter Verwendung von durchleuchteten Probenträgern und Einsatz von verschiedenen starken Absorbern im anregenden Strahl bestimmt. Durch die Verwendung der Absorber lassen sich die Bereiche maximaler Nachweisstärke beeinflussen. Ein vorläufiger Vergleich der experimentell und rechnerisch gewonnenen Nachweisgrenzen bei Anregung der K-Kanten ist in Abb. 1 dargestellt.

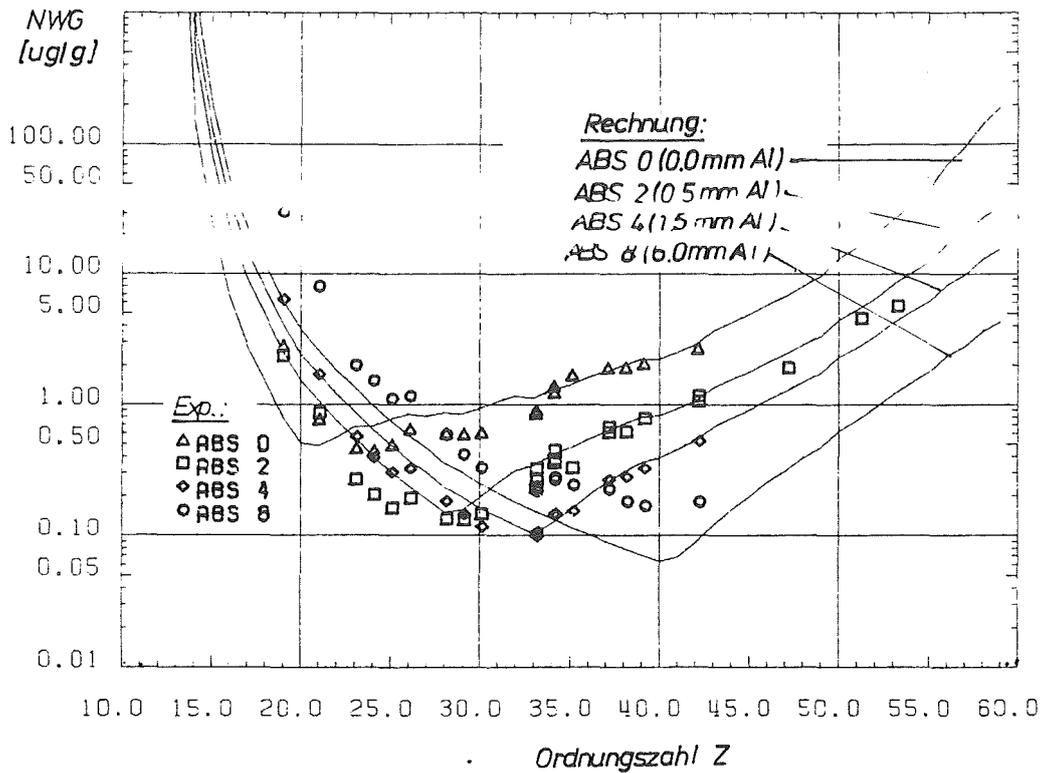


Abb. 1: Berechnete und bestimmte physikalische Nachweisgrenzen von Einzelelementen (Anregung der K-Kanten bei 3,3 GeV am Speicherring DORIS)

Es besteht eine zufriedenstellende Übereinstimmung. Allerdings steht die Überprüfung der in den Proben vorliegenden Elementgehalte mit anderen Methoden aus.

Die Anregungsbedingungen konnten auch erstmals bei verschiedenen Speicherringenergien untersucht werden. Unterhalb von 3 GeV verschlechtern sich die Nachweisgrenzen erheblich und werden sehr stark von der Ordnungszahl abhängig.

Sonstiges:

Der Polarisationsgrad der anregenden Strahlung wurde von 5 - 30 keV experimentell bestimmt. Er steigt in diesem Bereich von 85 auf 92 % an und ist damit niedriger als ursprünglich erwartet.

Zur Erprobung der ortsaufgelösten RFA wurde mit Hilfe eines 10 μm Pinholes ein Kupfernetz mit 35 μm Maschenweite abgescannt. Die 7 μm breiten Stege konnten gut aufgelöst werden. Als Anwendungsbeispiel wurde ein einzelnes Haar in Millimeterabständen analysiert.

High Resolution Inelastic Scattering of X-Rays

Bruno Dorner

Institut Laue-Langevin, 38042 Grenoble CEDEX
Frankreich

H. Peisl, T. Bolze und H. Penzkofer

Sektion Physik der Ludwig-Maximilians Universität
8000 München 22, West Germany

The high intensity of a synchrotron X-ray source is a challenge to try measuring excitations in the 0.1 eV regime with a resolution of about 10 meV. The necessary resolution is obtained by almost back scattering from perfect crystals, as Si, in high orders, say (777). Calculations of admissible beam divergencies and corresponding beam and sample sizes led to the conclusion, that focussing in real space is compulsory for intensity reasons. The considerations benefitted from experience in inelastic neutron scattering. For instance the analyser in X-ray scattering is irrelevant to intensity considerations as long as its energywindow is larger than the width of the measured excitation and the solid angle of acceptance is comparable to that in inelastic neutron scattering. The development of focussing, doubly curved (2m radius of curvature) analyser crystals is on the way in the home institute at the university of Munich.

In a test measurement at the test position of Hasylab, Hamburg we determined the intensity which is reflected by the reflections of different order of a perfect (111) Si crystal. The almost back-reflected beam was analysed by means of a pyrolytic graphite crystal mounted on a $\theta - 2\theta$ goniometer. By introducing several thin Ti foils, one after the other, into the beam we determined the attenuation of one foil and could finally extrapolate the intensities from the several orders. We observed the following in a beam of 1.1 mm diameter:

Order	wavelength [\AA]	intensity [photons/sec]
555	1.252	1.5×10^5
777	0.894	4×10^5
888	0.782	4×10^5
999	0.695	1×10^5
11 11 11	0.569	3×10^4
12 12 12	0.521	1.5×10^4

Intensity of (333) was absorbed in air, of (444) was present but could not be analysed quantitatively because it was covered by (888) in second order from the graphite crystal. These intensities are those at high resolution $\Delta\lambda/\lambda < 10^{-6}$ for (777). The quality of the crystal and the resolution has been verified by Graef and Materlik. We showed experimentally that the intensity from a perfect crystal at Bragg angles θ near to 90° gets independent of θ following the formula

$$I_{\text{perfect crystal}} \sim k^2 \frac{1}{\sin\theta} \cdot \Delta\theta \cdot \Delta\tau \cdot \beta$$

Here is $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, $\Delta\theta$ and β horizontal and vertical divergence of the beam and $\Delta\tau$ the extension of the reciprocal lattice point in direction $\vec{\tau}$.

Remark that the intensity from a mosaic crystal with mosaic width η

$$I_{\text{mosaic width}} \sim k^3 \cot\theta \cdot \Delta\theta \cdot \beta \cdot \eta$$

For θ towards 90° vanishes.

From comparison with inelastic neutron scattering we know that we need 10^7 photons/sec on the sample of 1 mm^3 dimensions. The above listed intensities for a non-focussed beam are one to two orders of magnitude too small. But it should be possible to increase the intensity sufficiently by focussing in space on the monochromator side.

Zweiachsendiffraktometer

U. Bonse, L. Dietrich, U. Dretzler,
Experimentelle Physik I, Universität Dortmund

K. Fischer, S. Heinrich,
Kristallographie, Universität Saarbrücken

Mechanik und Elektronik wurden bis Januar 1981 nach Hamburg transportiert. Die Mechanik ist bis auf kleine Ergänzungssteile vollständig einschließlich eines ersten Monochromators. Elektronik und Software sind teilweise betriebsbereit; für die Komplettierung sind noch mehrere Monate anzusetzen. Die Strahlrohrführung wurde - unter Mitwirkung der Dortmunder (ca. 2-Mann-Monate) und der Saarbrückener Arbeitsgruppe (ca. 4 bis 5-Mann-Monate) im Sommer 1981 fertiggestellt.

Herbst 1981 konnten in ersten Testmessungen Doppelkristall-Rockingkurven von Idealkristallen bei variabler Polarisation gemessen werden. Darüberhinaus wurden schwach dispersive Monochromatoranordnungen untersucht, welche sich für die Unterdrückung von Laue-spots und echten Oberwellen gleichermaßen eignen. Versuche zur Messung unelastischer Röntgenstreuung werden im Bericht von Prof. Schülke dargestellt.

Die "Lambda-Methode" zur partiellen Umgehung des Phasenproblems bei der Kristallstrukturanalyse wurde auf zentrosymmetrische Anordnungen erweitert (K. Fischer).

Dem Bundesminister für Forschung und Technologie danken wir für Förderung durch Personal- und Sachmittel.

Ein Pulver-Polarimeter für Synchrotron-Röntgenstrahlung

G. Materlik^{a)} und P. Suortti^{b)}

a) Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB, DESY

b) Department of Physics, University of Helsinki, Finland

Zur Bestimmung des Polarisationsgrades der Synchrotronstrahlung wurde die Reflexion von einer Molybden-Pulverprobe unter einem Winkel $\Theta_B = 45^\circ$ in einer horizontalen und vertikalen Reflektionsebene ausgenutzt. Vermessen wurden die Reflexe (211), (220) und (321) bei den dazu korrespondierenden Wellenlängen. Der Polarisationsgrad in der Orbitebene, vermessen am Meßplatz RÖMO (E2), ergab sich bei 3.3 GeV Elektronenenergie zu ca. 90%.

Diese Messungen ergeben in diesem Punkt Übereinstimmung mit vorherigen Messungen, die eine Einkristallreflexion ausnutzten¹⁾. Im Gegensatz zu der damaligen Messung am Strahl C konnte bei den jetzigen Meßbedingungen die bekannte Form für die senkrecht zur Orbitebene polarisierte Strahlungskomponente bestätigt werden. Der Kontrast zwischen den beiden Maxima und dem dazwischen liegenden Minimum betrug ca. 8%.

Die benutzte apparative Anordnung gestattet den einfachen Einsatz als Standard-Polarimeter an einem Meßplatz, an dem der Polarisationsgrad als experimenteller Parameter, z.B. für Strukturuntersuchungen, jederzeit bestimmbar sein muß.

¹⁾ G. Materlik und K.-B. Rohloff, HASYLAB-Jahresbericht, 134 (1980)

Arbeiten am VUV-Reflektometer

K. Boller, R.-P. Haelbich, H. Hogrefe, W. Jark und C. Kunz

II. Institut für Experimentalphysik, Universität Hamburg

Zusammen mit dem Strahlführungssystem am Fächer G konnte auch der Meßplatz "VUV-Reflektometer" bis Mai 1981 in einer 1. Version aufgebaut werden. Da das neue Reflektometer (siehe Jahresbericht 1980, S. 85) noch nicht fertiggestellt ist, wurde hinter dem Monochromator GLEISPIMO das alte vorher am Synchrotron DESY benutzte Reflektometer aufgebaut. Steuerung und Datennahme sind zu einem großen Teil schon mit dem Kleinrechner PDP 11/23 möglich. Am 19.6.1981 konnte am Fächer G1 zum ersten Mal Synchrotronstrahlung gesehen werden. Nach sorgfältiger Eichung des Monochromators wurde der Rest des Meßruns bis zum 10.8., sowie der Run im Herbst 81 zu ersten Messungen benutzt.

Im wesentlichen wurden folgende Messungen durchgeführt:

- 1) Reflektivitätsmessungen zur Kohlenstoffkontamination von Goldspiegeln
- 2) Polarisation der Synchrotronstrahlung
- 3) Gitterausbeuten
- 4) Reflektivitäten gesputterter Multilayers
- 5) Reflektivität in situ aufgedampfter Au-Schichten
- 6) Streuung von SR an Latex-Kugeln.

Da sämtliche Projekte sich noch im Anfangsstadium befinden, seien hier nur die Punkte 1) und 2) aufgegriffen. Im Rahmen einer Diplomarbeit wurde das bekannte Phänomen der Kontamination von optischen Komponenten durch die Synchrotronstrahlung im Hochvakuum und UHV untersucht. Dazu wurden zunächst Goldspiegel bei verschiedenen Restgaszusammensetzungen und Drücken gezielt der SR ausgesetzt, also kontaminiert. Für diese Versuche stand uns freundlicherweise auch das Labor der Fraunhofergesellschaft am Speicherring DORIS zur Verfügung. An den so präparierten Spiegeln wurden dann Reflektivitätsmessungen vorgenommen. Aus den Interferenzmaxima und -minima der Reflektivität konnte die Schichtdicke der Kontaminationsschicht ermittelt werden (s. Abb. 1). Eine erste Auswertung läßt den Schluß zu, daß die Ablagerung von Fremdatomen auf der Goldschicht durch die Photoelektronen des Substrats bewirkt wird. Die Polarisationsmessungen wurden hinter dem Monochromator GLEISPIMO nach der Methode von Rabinovitch et al. (Appl.Opt. 4 (1965) 1005) durchgeführt. Dazu mißt man die Reflektivität eines opaken Goldspiegels bei 45° Einfallswinkel. Der Spiegel läßt sich unter Beibehaltung des Einfallswinkels um die SR-Achse drehen.

Die Reflektivitätsmessung wird dann bei möglichst vielen Winkeln dieser Drehung durchgeführt. Als Ergebnis erhält man die in Abb. 2 dargestellte Reflektivitätskeule. Aus Maximal- und Minimalwert dieser Keule ergibt sich der Polarisationsgrad, sofern die Abelès-Beziehung ($r_p = r_s^2$ bei $\theta = 45^\circ$) auch in VUV gilt. Die Kenntnis des Polarisationsgrades ist für die Bestimmung optischer Konstanten mit dem Reflektometer unerlässlich.

Parallel zu diesen Arbeiten wurde die Planung und Konstruktion des neuen Reflektometers und Monochromators weitergeführt. Wesentliches Element beider Geräte ist eine präzise UHV-Drehschiebedurchführung, die im Laufe dieses Jahres von uns entwickelt und getestet wurde. Mit der Fertigstellung des Reflektometers ist im Mai 1981 zu rechnen.

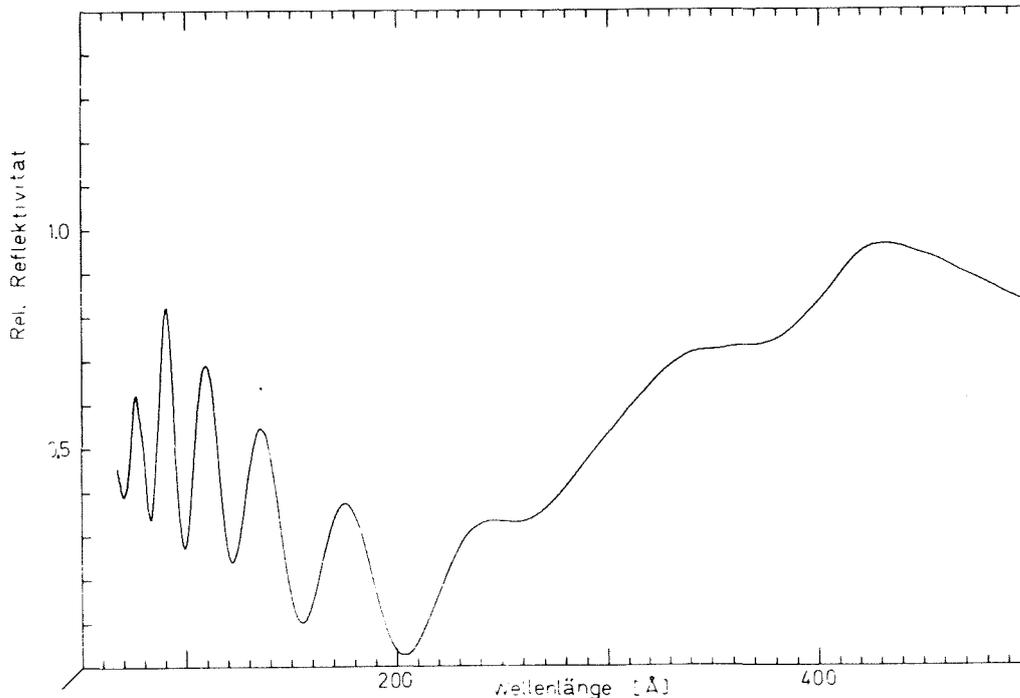


Abb. 1: Reflektivität eines Goldspiegels mit Kontaminationsschicht. Das Minimum 1. Ordnung liegt bei 260 \AA , die Minima höherer Ordnung folgen zu kürzeren Wellenlängen. Daraus ergibt sich eine Schichtdicke von ca. 360 \AA Kohlenstoff.

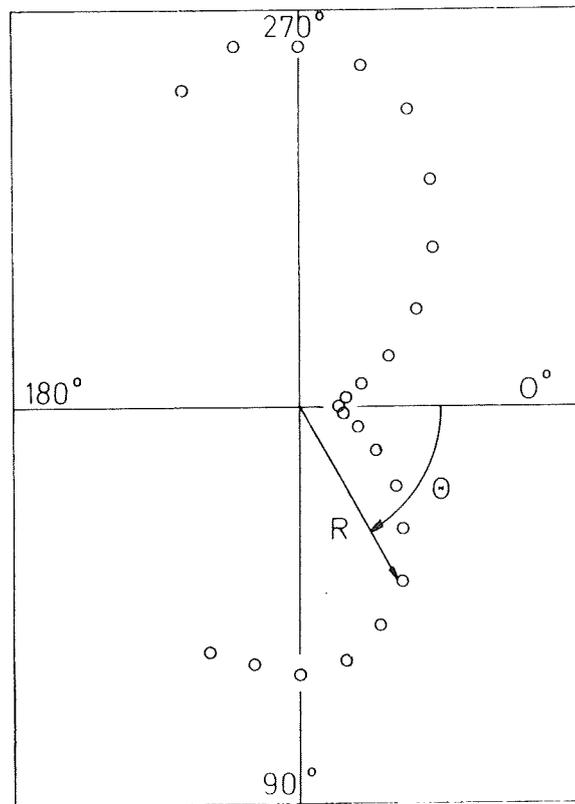


Abb. 2: Polardiagramm der Reflektivität R einer Goldschicht bei verschiedenen Winkeln θ zwischen Elektronenbahnebene und Einfallsebene. Aus $R(\theta = 90^\circ)$ und $R(\theta = 0^\circ)$ ergibt sich ein Polarisationsgrad der Synchrotronstrahlung hinter dem Monochromator von 95% bei einer Wellenlänge von 416 Å.

Untersuchung zur Herstellung von Trenndüsenstrukturen mittels Röntgenlithographie

Bericht der Fraunhofergesellschaft (Fhg, Institut für Festkörpertechnologie, München) über ein im Labor der FgH an DORIS durchgeführtes Projekt zur Belichtung dicker Lackschichten (mitgeteilt von H. Betz)

Die Untersuchungen zur Herstellung von Trenndüsenelementen mittels Röntgenlithographie und Galvanoplastik werden im Auftrag der KfK Karlsruhe in Zusammenarbeit mit der ZFA Siemens durchgeführt. Die bei diesem Verfahren geforderten Randbedingungen (3 μm breite Strukturen mit ca. 500 μm Höhe, dies entspricht einem Aspektverhältnis von etwa 1:200) lassen sich nach dem derzeitigen Kenntnisstand nur mit der Lithographie mit Synchrotronstrahlung erfüllen. Hierzu erscheinen 2 Verfahren aussichtsreich:

- Belichtung von etwa 100 μm dicken Resistfolien in einem Schritt mit nachfolgender galvanoplastischer Abformung und Stapelung der so erhaltenen Nickelfolien bis zur geforderten Höhe von 500 μm
- Sukzessives Belichten und Entwickeln einer Resistfolie mit der endgültigen Höhe von 500 μm und integrierten Absorberstrukturen; nachfolgende Galvanik der gesamten Struktur in einem Schritt

Der grundsätzliche Unterschied des "LIGA-Verfahrens" (Lithographie + Galvanik) zur normalen Lithographie für integrierte Schaltungen ist die wesentlich größere Dicke der zu belichtenden Lackschichten; dies führt zu einer erheblichen Modifizierung der Maskentechnik. Die zur Belichtung dieser dicken Lackschichten notwendigen kurzen Wellenlängen erfordern einen deutlich dickeren Goldabsorber ($> 2 \mu\text{m}$), so daß die bisher ausschließlich angewandte Strukturierungstechnik des Ionenätzens durch die Galvanik erweitert werden muß.

Die Belichtung von Lackschichten in einer Stärke, wie sie von den Trennelementen gefordert werden ($> 500 \mu\text{m}$), ist in einem Schritt praktisch nicht möglich, da eine entsprechend große Eindringtiefe im Resist nur mit sehr kurzen Wellenlängen zu erreichen ist, die aufgrund der großen Reichweite der ausgelösten Photoelektronen Maßverzeichnungen hervorrufen. In der Abbildung sind die Einflußgrößen, die die Auflösung bestimmen - Reichweite

von Photoelektronen und beugungsbedingte Strukturverzeichnung - zusammen mit der Eindringtiefe im Lack wiedergegeben. Bei den angestrebten kleinsten Strukturdimensionen von ca. 3 μm spielt die Fresnelbeugung bis hinauf zu Proximityabständen von 1000 μm keine begrenzende Rolle für ein λ_{max} unterhalb 3 \AA . Die Wellenlänge λ_{max} entspricht dem Strahlungsmaximum der Spektralverteilung der Synchrotronstrahlung.

Probleme resultieren einmal aus dem erzielbaren Kontrast bei kurzen Wellenlängen und zum andern aus der genannten Elektronenreichweite. Allerdings existieren gerade bei letzterem Effekt relativ große Unsicherheiten in der Literatur, die durch den schraffierten Bereich in der Abbildung verdeutlicht sind. Hinzukommt, daß bei der tatsächlich in Erscheinung tretenden

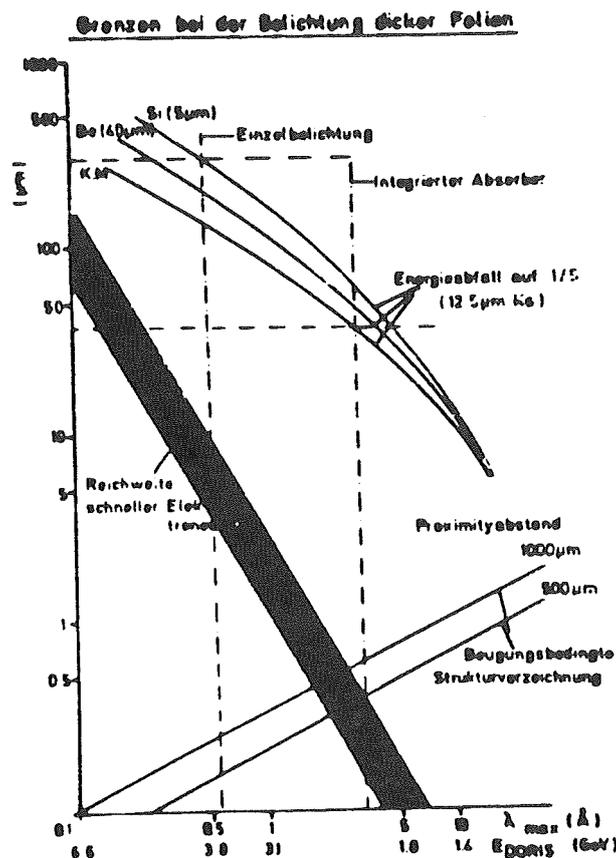


Abbildung: Physikalische Auflösungsgrenzen (Fresnelbeugung, schnelle Photoelektronen) sowie Eindringtiefe der Synchrotronstrahlung für Maskenkonzepte

Strukturverzeichnung die Eigenschaft des Lackes (z.B. Gradation) eine entscheidende Rolle spielt. Unabhängig von den Arbeiten innerhalb dieses Projektes wird der Problemkreis der schnellen Elektronen im Rahmen der übrigen Arbeiten zum Thema Röntgenstrahlolithographie im IFT intensiv untersucht. Die derzeit vorliegenden Experimente deuten allerdings daraufhin, daß bei den verwendeten Lacken (PMMA-Siemens, Du Pont 2010) die Strukturverzeichnung an der unteren Grenze des schraffierten Bereiches liegt.

Zusammen mit diesen die Auflösung begrenzenden Mechanismen sind in der Abbildung die korrespondierenden Eindringtiefen für den Fall einer Siliziummaske ($5\ \mu\text{m}$) einer Berylliummaske ($40\ \mu\text{m}$) und ohne Maske (integrierter Absorber) dargestellt. In allen Fällen wurde eine $12,5\ \mu\text{m}$ Kaptonfolie als Vakuumfenster zugrundegelegt und die Reichweite jeweils dort definiert, wo die im Lack absorbierte Leistung auf ein Fünftel der Oberflächenleistung abgesunken ist. Im Falle der Einzelbelichtung läßt sich damit eine maximal belichtbare Lackdicke von etwa $200\ \mu\text{m}$ abschätzen, wenn man eine Strukturverzeichnung durch schnelle Photoelektronen von $1\ \mu\text{m}$ zuläßt. Größere Foliendicken lassen sich nur dann belichten, wenn die Maskenabsorber direkt in die PMMA-Folie integriert werden, da dann die Gesamthöhe der Trenndüsenstruktur mit einer Lackschicht durch sukzessives Entwickeln und Belichten erfolgen kann.

Zeitaufgelöste Fluorimetrie (in Vorbereitung)

G. Striker, T.M. Jovin, I. Pecht* und R. Rigler†

Abt. Mol. Biologie, MPI f. biophys. Chemie, Göttingen
*Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel
†Karolinska Institute, Stockholm, Schweden
Mit Kooperation der F41/HASYLAB, Hamburg
und der EMBL, Heidelberg

Dem Projekt wurde für die Meßzeit im Sommer 1981 eine temporäre Beamlinie bei Doris (E4) zugewiesen. Eine durch ein Kreuzstück improvisierte Spiegelkammer mit Quarzfenster brachte den Strahl in die Luft in der Bleihütte, von wo er durch einen 3-meter Schornstein hinauf zu der Plattform gespiegelt wurde. Der Primärspiegel aus Kupfer wurde mit Platin bedampft, in der Hoffnung, optimale Ausbeute in dem nahen UV zu erhalten. Es stellte sich heraus, daß die Bedampfung von Platin auf Kupfer nicht den durch den Strahl verursachten hohen Temperaturen standhält, so daß die allmähliche Umkristallisierung der Platinschicht das in dem Experiment einfallende Licht reduzierte, bis weitere Experimente unmöglich wurden. Der Einbau eines zweiten unbedampften Spiegels war wegen der Notwendigkeit der Erhaltung des Vakuums für andere Experimente nicht möglich.

Probleme entstanden bei der Messung zeitaufgelöster Fluoreszenz im 60-Bunch Betrieb. Zwar reicht das 16-Nanosekunden Intervall, das dabei entsteht aus, um Proben mit einer Lebensdauer von einigen Nanosekunden zu messen, jedoch treten hierbei instrumentale Schwierigkeiten auf, da die TAC's (Time to Amplitude Converters) entweder Totzeiten von dieser Größenordnung haben oder gleich durch die hohe Stop-Frequenz ausgeschaltet werden. Dieses Problem konnte durch das Zwischenschalten einer Koinzidenzeinheit gelöst werden, welche dem TAC nur Zyklen mit Fluoreszenzereignis präsentiert. Die starken nichtlinearen Störungen, die ihrerseits von der Koinzidenzeinheit erzeugt wurden, konnten durch mathematische Korrekturen an den Meßkurven eliminiert werden, indem durch die Koinzidenz aufgenommene Rauschkurven als neue Zeitbasis dienten.

Der Farbstoff Eosin (Tetrabromofluorescein MW=691.8) bot sich wegen seiner kurzen Lebensdauer, guter Quantenausbeute und der Verbindungen die er mit Proteinen eingeht, als Probe an. Verschiedene Arbeiten, die die Phosphoreszenz von Eosin benützen für Aussagen über die Beweglichkeit von Proteinen, könnten mit Fluoreszenzmessungen bis zum Picosekundenbereich verfolgt werden. Dabei interessiert man sich weniger für die Lebensdauer der Fluoreszenz als für die durch sie gewonnene Anisotropie, die als Quotient

$$r(t) = d(t)/s(t)$$

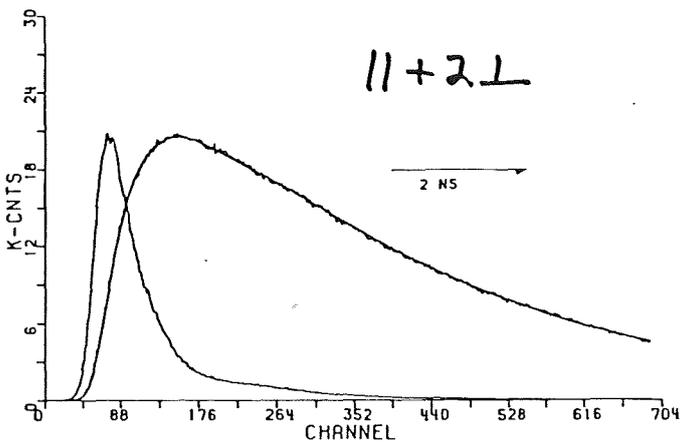
definiert ist. $d(t)$ ist die Differenz der durch einen senkrecht bzw. waagrecht stehenden Polarisator gemessenen Luminiszenz, durch einen senkrecht polarisierten Strahl angeregt. Es wird senkrecht zum Strahl gemessen. Der Nenner $s(t)$ ist der Verlauf der Gesamtfluoreszenz, wobei in der Summe der Komponenten die Waagrechte zweimal genommen wird, aus Gründen der Geometrie. Die beiden Komponenten werden abwechselnd, zusammen mit dem

Streusignal gemessen (siehe Jahresbericht 1979 für Apparatur). Die Funktion $r(t)$ beschreibt die Bewegung des Farbstoffs, z.B. wird ein kugelförmiges Molekül die Anisotropie

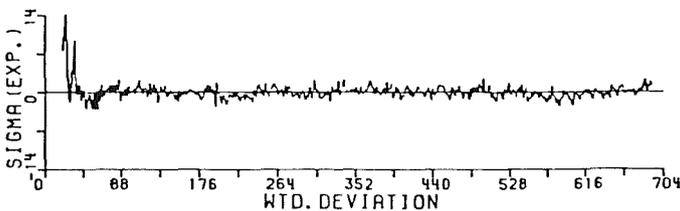
$$r(t) = r_0 \exp(-t/p)$$

zeigen, wo $p = Vn/kT$ (V =Volumen, n =Viskosität) gegeben ist. Die Analyse der Meßkurven für Nenner und Zähler muß separat erfolgen, da die in der Messung inhärente Faltung mit der Anregungsfunktion lineare Operationen erlaubt, aber nicht Division.

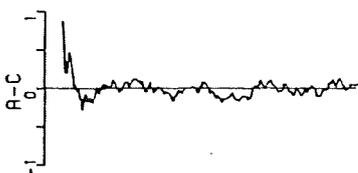
Die Abbildungen zeigen das Experiment und die Ergebnisse für Eosin in Methanol bei 10° C. Die Anregungskurve ist etwa doppelt so breit wie die im Jahresbericht 1980 gezeigte, welches mit den oben erwähnten Meßschwierigkeiten zusammenhängt. Die Fluoreszenz ist im Wesentlichen exponential mit einer Lebensdauer von 3.8 Nanosekunden. (Die kleine 40 Pikosekunden-Komponente könnte Streulicht sein.) Die Differenzfunktion hat eine Lebensdauer von 320 Picosekunden. Man erhält somit eine einfach abklingende Anisotropie mit $p=350$ Pikosekunden, welches einer Kugel mit Volumen von 1.95 (E-21) ml entspricht. Die Messung in Wasser bei 10° C liefert eine Fluoreszenzlebensdauer von 1.5 Nanosekunden und $p=600$ Picosekunden, entsprechend einem Volumen von 1.8 (E-21) ml bei der Viskosität von Wasser.



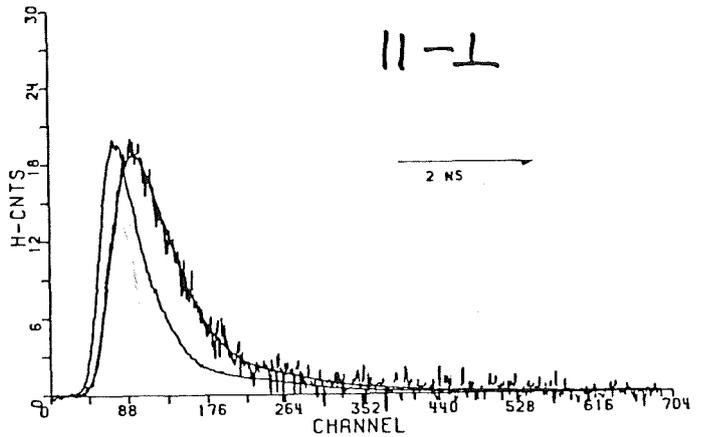
NANSEC	3.5159-02	3.768
TAU (C)	2.705	289.8
AMPL	4.7157-02	7.9989-02
INTENS	5.4710-03	.9945



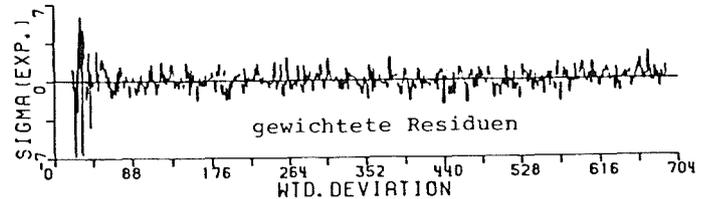
2.026+000 1.113+04 4.09



27JUL81 17:36 EOSIN IN METHANOL 530/560 INTERF. FIL
TOTAL FLUOR.



NANSEC	.3196	Zeitkonstanten
TAU (C)	24.58	" in Kanälen
AMPL	2.0144-02	
INTENS	1.000	



gewichtete Residuen

9.585-001 277. 1.66



Autokorrelation
der Residuen

27JUL81 17:36 EOSIN IN METHANOL 530/560 INTERF. FILTERS
N/ANISOTROPY

Summary of the Research Activity of Chang and Coworkers at HASYLAB, DESY

Shih-Lin CHANG, Fu-Son HAN, Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Heisenbergstr. 1, 7000 Stuttgart 80 and Arno PÄHLER, Min.-Krist. Institut, Uni Göttingen, Goldschmiedstr. 1, 34 Göttingen.

- (I) An x-ray interference pattern is observed for the first time by division of the wavefront at one piece of a single crystal. The (220) reflection from a V-shaped silicon crystal and a synchrotron radiation source are used. The crystal, acting simultaneously as a beam splitter, mirror and analyzer, represents a novel single-leaf x-ray interferometer.
- (II) Previously unreported intensity enhancement of the transmitted beam in a multiple Borrmann diffraction is observed by using a synchrotron radiation source. The coherent dynamical interaction of a six-beam (000) ($0\bar{4}4$) ($\bar{2}02$) ($\bar{2}20$) ($2\bar{2}4$) ($2\bar{4}2$) diffraction provides a monochromatic, extremely parallel and spatially coherent source for x-ray diffraction and imaging studies.
- (III) First multiple reflection patterns using synchrotron radiation are obtained. The experiment is performed on the 5-circle diffractometer (DESY) for Germanium ($22\bar{2}$) reflection. The line profiles of multiple diffraction peaks provide correct information about x-ray reflection phases.

Erzeugung einer räumlich kohärenten, monochromatischen Röntgenlichtquelle

S.-L. Chang[†]

Max-Planck-Institut für Festkörperforschung

+Heimatadresse: Instituto de Fisica, Universidade Estadual de Campinas,
Sao Paulo, 13100, Brasilien

Die kohärente, dynamische Wechselwirkung¹ in einem 6-Strahl-Borrmann Beugungsexperiment, $(000)(2\bar{2}0)(\bar{2}02)(2\bar{4}2)(\bar{2}\bar{2}4)(0\bar{4}4)$, wurde mit der Synchrotronstrahlungsquelle am Hasylab von DESY untersucht. Die Wechselwirkung führt zu einer ungewöhnlichen Transmissionserhöhung von Röntgenlicht in Kristallen. Für die exakte 6-Strahl-Beugungsposition wurde im direkten Strahl ein scharfer Punkt erhöhter Intensität mit 2 Bogensekunden Strahldivergenz beobachtet. Dieses Experiment eröffnet die Möglichkeit, Quellen für extrem paralleles, monochromatisches, räumlich kohärentes und intensives Röntgenlicht für beugungs- und Abbildungsexperimente zu erzeugen.

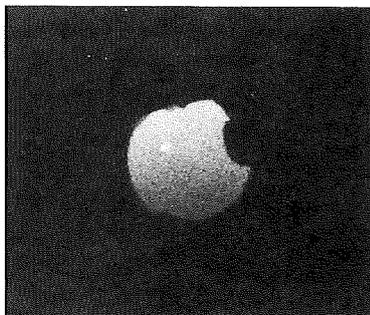


Bild des direkten (000) Strahls bei exakter 6-Strahl-Beugungsanordnung für $\lambda = 0.154$ nm; die Fläche des Quadrates entspricht einer Strahldivergenz von einer Bogenminute.

1 T. Joko et al., J. Phys. Soc. Jpn., 22, 597 (1967)

Testmessungen zur Röntgen-Energie-Verlustspektroskopie
mit Synchrotronstrahlung

W. Schülke und Chr. Steinbach
 Institut für Physik, Universität Dortmund

Unter Verwendung der Grundfunktionen des HASYLAB-Zweiachs-spektrometers wurden Testmessungen der Energieverteilung der an Be- und Li-Einkristallen gestreuten Synchrotron-Röntgenstrahlung (Röntgen-Energie-Verlustspektroskopie) mit einem zylindrisch fokussierenden Röntgenspektrometer unter Verwendung eines positionsempfindlichen Zählrohrs¹ durchgeführt. Als Monochromator diente ein stark asymmetrischer (400)-"channel-cut"- Ge-Kristall mit einer errechneten vertikalen Akzeptanz von $1.8 \cdot 10^{-4}$ für die benutzte Primärwellenlänge von $\lambda = 1.6 \text{ \AA}$. Der Analysator war ein zylindrisch gekrümmter (Krümmungsradius 1 m) symmetrischer Si (530)-Kristall. Das positionsempfindliche Zählrohr (10 bar Ar 90 /Methan 10) hatte ein Zählvolumen von 4 (Tiefe) x 10 (Höhe) x 40 (Breite) mm^3 . Die Streuprobe (typisch 3 mm dick) befand sich 30 cm vor dem Analysator; Streuwinkel $\sim 20^\circ$. Zwischen den einzelnen Komponenten waren He-gefüllte Strahlrohre angebracht. Mit dieser Meßanordnung konnte mit Be (3 mm dick) als Streuer bei 3.2 GeV und 50 mA Spektren mit folgenden Integraldaten aufgenommen werden (zum Vergleich sind entsprechende Daten mit der nichtmonochromatisierten charakteristischen Cu K_α -Strahlung (1.5 kW) einer konventionellen Anordnung in der 2. Spalte angeführt)

	Synchrotronstrahlung	konventionelle Quelle
energetische Auflösung $\frac{\Delta E}{E}$	$3 \cdot 10^{-4}$	$6.1 \cdot 10^{-4}$
ΔE	2.3 eV	5 eV
Photonen s^{-1} im gesamten registrierten Streuspektrum	2.2	0.1
Signal/Untergrund-Verhältnis bezogen auf das Gesamtspektrum	5:1	3:1

Diese Daten können bei zukünftigen Messungen noch erheblich verbessert werden durch

- sphärisch gekrümmten Analysator
- Fokussierung des monochromatischen Strahls
- sequentielle statt integraler Registrierung der Spektren unter Ausnutzung der vollen Rowlandgeometrie

- 1 W. Schülke, Chr. Steinbach, Inner-Shell and X-Ray Physics of Atoms and Solids, ed. D.J. Fabian et al. (Plenum Press, New York, 1981) p. 909-912

Mößbauereffekt mit Synchrotronstrahlung als Quelle

E. Gerdau, S. Hörmann, R. Ruffer, H. Winkler

II. Institut für Experimentalphysik, Universität Hamburg

M. Harsdorff, P. Klews

Institut für Angewandte Physik, Universität Hamburg

Zum Nachweis der resonanzfähigen γ -Quanten wurde ein Resonanzdetektor gebaut und getestet. Er basiert darauf, daß die Konversionselektronen, die bei der Resonanzabsorption von γ -Quanten in einer Folie aus angereichertem ^{57}Fe entstehen, durch zwei Channelplates in Tandemanordnung vervielfacht und als Anodenladung nachgewiesen werden. Mit einer ^{57}Co -Quelle wurde festgestellt, daß die Ansprechwahrscheinlichkeit des Detektors für resonanzfähige γ -Quanten etwa 10^{-2} verglichen mit einem Integral-line-Photomultiplier beträgt. Durch Vergleichsmessungen am Synchrotronstrahl wurde festgestellt, daß die allgemeine Ansprechwahrscheinlichkeit für nichtresonante 14 keV-Photonen bei etwa 10^{-4} liegt.

Der Detektor zeigt eine erfreulich gute Zeitauflösung. Die gemessene Halbwertsbreite eines Bunches betrug etwa 700 ps. Dies ist zwar ein Vielfaches der wahren Bunchlänge, reicht aber bei weitem aus, um die verzögert emittierten Konversionselektronen zeitlich von den prompten Photoelektronen zu diskriminieren. Dabei wurde ein Faktor von 10^4 bei einer 20 Bunch-Füllung erreicht (Abb. 1).

Geht man davon aus, daß nach der üblichen Vormonochromatisierung mit Ge-Einkristallen der Anteil an resonanzfähigen γ -Quanten ca. 10^{-9} beträgt, so läßt sich dieser allein durch Diskriminierung im Resonanzdetektor auf etwa 10^{-3} anheben. Versuche, auf diese Weise den Mößbauereffekt mit Synchrotronstrahlung nachzuweisen, scheiterten an unzureichender Statistik. Die Begrenzung kam dabei nicht so sehr von der zur

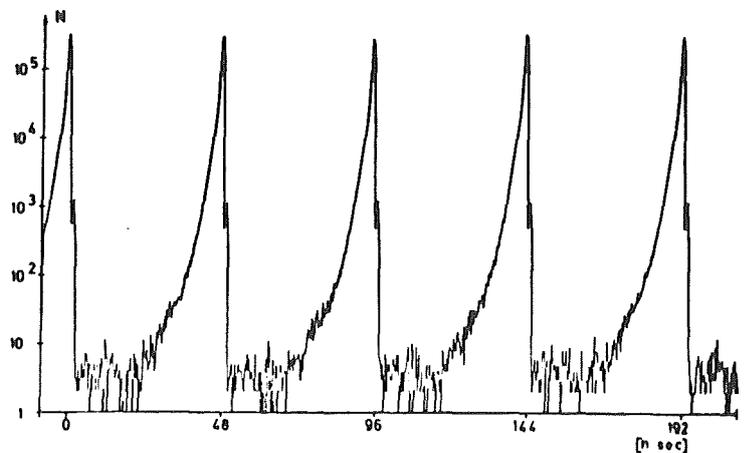


Abb. 1 Zeitspektrum bei Füllung von DORIS mit 20 Bunchen.

Verfügung stehenden Strahlzeit als vielmehr von der endlichen Lebensdauer der Channelplates, die nur etwa 30 Stunden dem vollen Synchrotronstrahl standhalten. Hinzu kam, daß der Detektor bei dieser Betriebsart weit in der Sättigung gefahren wurde, was möglicherweise zu selektiven Auslaßprozessen und unnötiger Untergrundzählrate geführt hat. Die Methode muß also dahingehend verbessert werden, die Eingangszählrate zu vermindern und dabei gleichzeitig eine zusätzliche Diskriminierung einzuführen.

Diese zusätzliche Diskriminierung kann mit vergüteten ^{57}Fe -Spiegeln bei streifendem Einfall erreicht werden. Aufgrund der Ergebnisse der vorjährigen Untersuchungen solcher Spiegel wurde die Aufdampfapparatur verbessert. Insbesondere wurde eine Dickenvariation der Schichten von weniger als $\pm 2\%$ erreicht und die Möglichkeit geschaffen, auch große Spiegel zu bedampfen. Eine Vielzahl von Spiegeln (Ge auf Fe und Fe auf Ag) wurde untersucht. Die Abb. 2 zeigt die Reflektivität eines mit $\sim 179 \text{ \AA}$ Germanium vergüteten $\sim 760 \text{ \AA}$ dicken Eisenspiegels. Die erreichbare Unterdrückung nichtresonanter zu resonanter Strahlung sollte im zweiten Minimum einen Faktor $1/50$ ergeben.

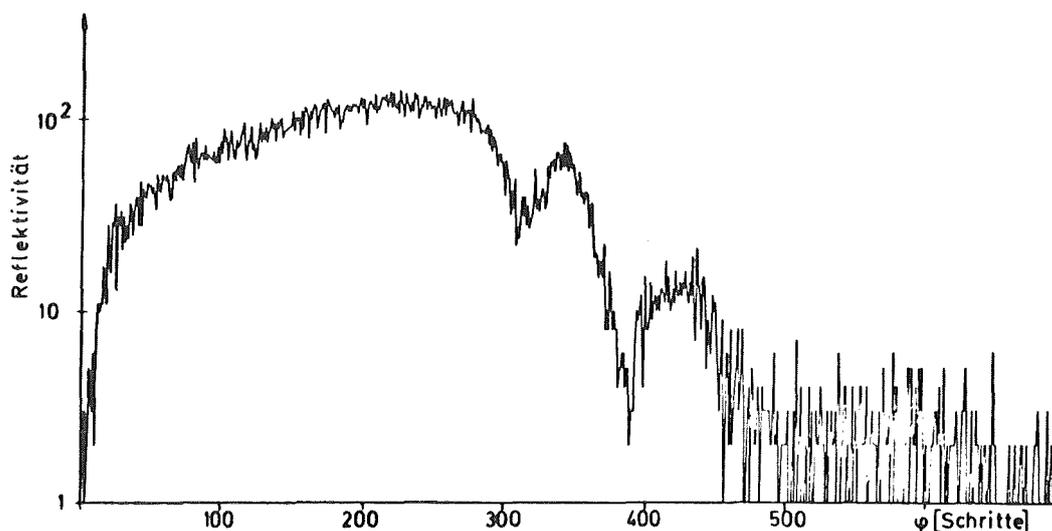


Abb. 2 Reflektionskurve eines mit 179 \AA Germanium vergüteten Eisenspiegels (1 Schritt $\hat{=}$ 2")

Kernresonanzexperimente mit Synchrotronstrahlung.

C.Hermes, F.Parak, R.L.Mößbauer und H.Stuhrmann *

Physik Department der Technischen Universität München

*EMBL Außenstelle Hamburg c/o DESY

Endziel des Projektes ist es, Synchrotronstrahlung für Kernresonanz-Experimente am 14.4 KeV Niveau des ^{57}Fe Kernes zu verwenden.

Die Monochromatisierung der Synchrotron Strahlung, die bei derartigen Experimenten grundsätzlich als erster Schritt erforderlich ist, konnte mit einem Doppelmonochromatorsystem zufriedenstellend gelöst werden. Es zeigte sich, daß mit diesem Doppelspektrometer auch die für spätere Mößbauer Experimente erforderliche Langzeitstabilität erreicht wird. Eine absolute Energieeichung des Spektrometers erfolgt mit Hilfe der Krypton Absorptionskante.

Die Ultramonochromatisierung soll bei dem geplanten Experiment durch Zeitfilterung erfolgen. Dabei wird die zeitliche Verzögerung von 10^{-7} sec der Kernresonanzstreuung gegenüber der nicht resonanten Rayleigh Streuung ausgenützt. Letztere übertrifft intensitätsmäßig allerdings die Kernresonanzstreuung um 9 bis 10 Größenordnungen. Für das Zeitfilterungsexperiment wurde ein spezieller Detektor entwickelt. Er besteht aus einem schnell abklingenden zinndotierten Plastikszintillator (Abklingzeit etwa 3 ns) und dem schnellen Photomultiplier XP 2020. Zur Erhöhung der Energie Auflösung wurde das System auf 3.8°C gekühlt. (vgl. Abb.1). Zur Unterdrückung der prompt gestreuten Intensität wurde kapazitiv an die 1. und 3. Dynode des Multipliers ein Hochspannungsimpuls kurzzeitig angelegt, der während des prompt gestreuten Röntgenblitzes die 1. und 2. sowie die 3. und 4. Dynode auf gleiches Potential brachte und damit das Detektorsystem praktisch abschaltete.

Im Single Bunch Betrieb von DORIS wurde mit diesem Detektorsystem die von einer dünnen ^{57}Fe Folie in den Detektor gestreute Intensität als Funktion der Zeit aufgenommen. Abb.2 zeigt ein typisches derartiges Spektrum. Der Zeitnullpunkt entspricht dabei dem Eintreffen des prompten Röntgenblitzes. Sein Nachweis wird durch die erwähnte Dynoden Schaltung praktisch vollständig unterdrückt. Das Intensitätsmaximum bei etwa 280 ns läßt sich durch die Rückkopplung von Wasserstoff Ionen erklären, die im Restgas des Multipliers erzeugt

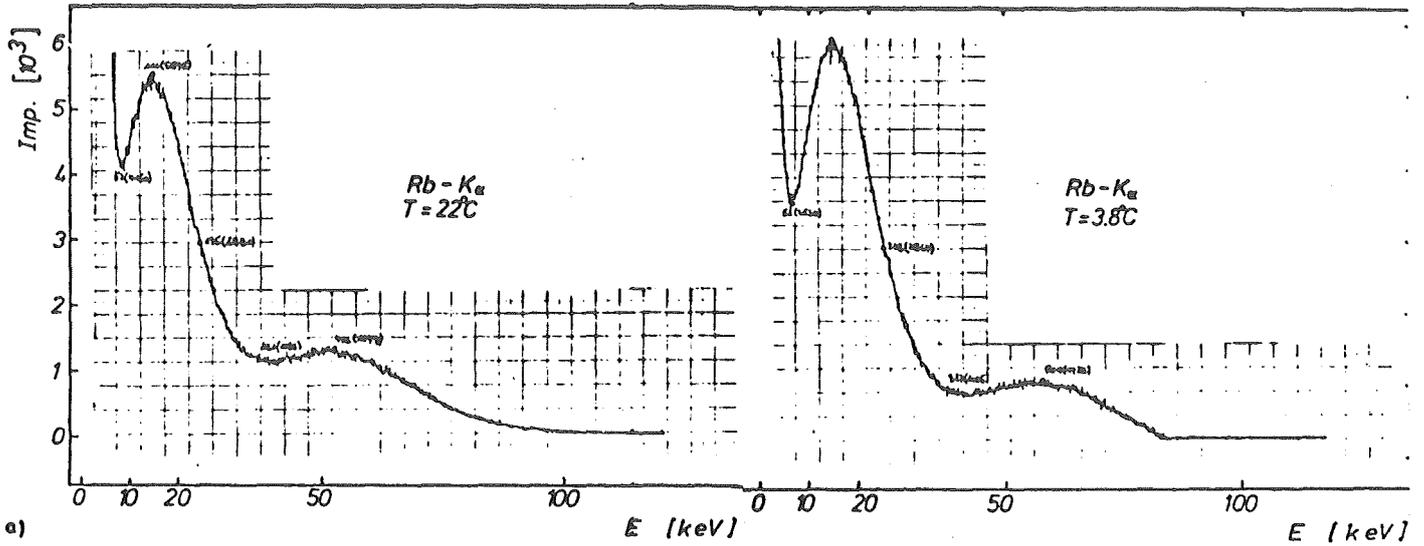


Abb.1 Verbesserung der Energieauflösung eines XP2020 Photomultipliers mit zinndotiertem Plastiksintillator durch Kühlung auf 3.8°C. Die Empfindlichkeit der Photokathode wird nicht erniedrigt.

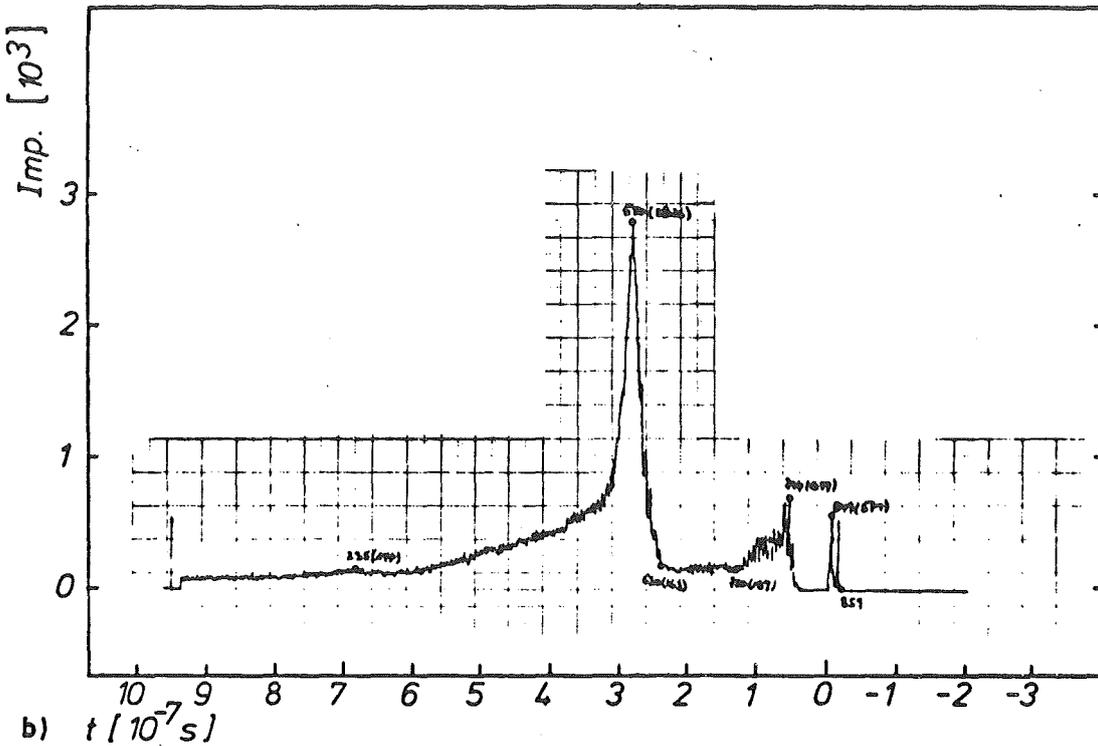


Abb.2 Streuintensität einer Fe Folie als Funktion der Zeit nach dem direkten Röntgenblitz.

werden. Entscheidend für das Mössbauer Experiment ist das Zeitfenster 40 bis 250 ns nach der prompt gestreuten Strahlung. Eingehende Untersuchungen des Einflusses der Multiplier Spannung, der Multiplier Temperatur, der Diskriminatorschwelle sowie der Dynodenkurzschlußspannung zeigten, daß bei optimalen Bedingungen die Zahl der gestreuten γ -Quanten zum Untergrund 1:10⁴ ist. Dies kann jedoch verbessert werden.

VERÖFFENTLICHUNGEN

A. Beiträge in Büchern, Zeitschriften und Konferenzproceedings

- E.E. Koch, M.Iwan, K. Hermann and P.S. Bagus
3d - Valence Orbital Structure of Zn-Phthalocyanine; Results
from Photoemission Experiments and Cluster Calculations
Chem. Phys. 59, 249 (1981) (DESY SR-81/01)
- B.S. Clausen, H. Topsøe, R. Candia, J. Villadsen, B. Lengeler,
J. Als-Nielsen and F. Christensen
An EXAFS Study of the Structure of Co-Mo Hydrodesulfurization
Catalysts
J. Phys. Chem. in press (DESY SR-81/02)
- I.T. Steinberger, U. Asaf, W. Graeff and Z.H. Kalman
Laue Photography of Fine Crystalline Particles
J. Appl. Cryst., in press (DESY SR-81/03)
- H. Oertel, M.Kratzat, J. Imschweiler and T.Noll
Fluorescence from $^1\Pi_u$ and $^1\Sigma_u^+$ States of Molecular Nitrogen
Excited with Synchrotron Radiation between 12.4 eV and 18.8 eV
Chem. Phys. Lett 82, 552 (1981) (DESY SR-81/04)
- B.F. Sonntag
Atomic Spectroscopy with Synchrotron Radiation
Proc. of 9th Intern. Conf. on Atomic Spectroscopy, Tokyo (Japan)
4-8 Sept. 1981
published by Pergamon Press (DESY SR-81/05)
- U. Hahn, R. Haensel and N. Schwentner
Kr and Xe Guest Atoms in Ar Matrix: Emission Spectra, Excitation
Spectra and Lifetimes
phys. stat. sol.(b) 109, (1982) (DESY SR-81/06)
- L.C. Davis
Theory of Resonant Photoemission Spectra of 3d Transition Metal
Oxides and Halides
(DESY SR-81/07)

R. Kammerer, J. Barth, F. Gerken, A. Flodström and L.I. Johansson
4f-Surface Binding Energy Shift for Eu and Gd Metals
Solid State Comm. in press (DESY SR-81/08)

F. Gerken, J. Barth and C. Kunz
Excited Multiplet Lines in Resonant Photoemission Spectra of Gd
Phys. Rev. Letts. 47, 993 (1981) (DESY SR-81/09)

J. Staun Olsen, B. Buras, L. Gerward and S. Steenstrup
A Spectrometer for X-Ray Energy-Dispersive Diffraction Using
Synchrotron Radiation
J. Phys. E: Scient. Instrum. 14, 1154 (1981) (DESY SR-81/10)

F. Gerken, J. Barth, R. Kammerer, L.I. Johansson and A. Flodström
Surface Shifts on Rare Earth Metals
Contributed Paper IV Europ. Conf. on Surface Science, Münster 1981,
Surface Science (DESY SR-81/11)

U. Bonse and K. Fischer
The New Multi-Purpose Two-Axis Diffractometer for Synchrotron
X-Rays at DORIS
Nucl. Instr. Meth., in press (DESY SR-81/12)

J. Staun Olsen, B. Buras, L. Gerward, B. Johansson, B. Lebech,
H. Skriver and S. Steenstrup
High Pressure Diffraction Studies of YbH₂ up to 28 GPa
Proc. of Intern. Symp. on Physics of Solids under High Pressure, 1981
in press (DESY SR-81/13)

E.E. Koch, J. Barth, J.-H. Fock, A. Goldmann and A. Otto
Surface Photoemission in the 4d Band from Polycrystalline
Silver Surfaces
Sol. State Comm., in press (DESY SR-81/14)

W. Graeff and G. Materlik
Milli-eV Energy Resolution in Bragg Backscattering
in Proc. of National Conf. on Synchrotron Radiation Instr.,
Ithaca, New York, 1981 (DESY SR-81/15)

J.H. Weaver, C. Krafka, D.W. Lynch and E.E. Koch

Optical Properties of Metals, Part I: The Transition Metals

$0.1 < h\nu < 500$ eV, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zr, Nb, Mo, Ru,
Rh, Pd, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt.

Fachinformationszentrum Energie Physik Mathematik GmbH, Karlsruhe

Physik Daten/Physics Data No. 18-1 (1981) (Int.Rep. HASYLAB 81/01)

J.H. Weaver, C. Krafka, D.W. Lynch and E.E. Koch

Optical Properties of Metals, Part II: Noble Metals, Aluminium,

the Lanthanides and the Actinides, $0.1 < h\nu < 500$ eV,

Cu, Ag, Au; Al; Sc; Y; La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er,
Tm, Yb, Lu; Th, U, Am

Fachinformationszentrum Energie Physik Mathematik GmbH, Karlsruhe

Physik Daten/Physics Data No. 18-2 (1981) (Int.Rep. HASYLAB 81/05)

G. Zimmerer

Investigation of Ionic Crystals with Synchrotron Radiation

Proc. of the Intern. Conf. "Defects in Insulating Crystals" Riga,

May 18-23, 1981, ed. by K.K. Shvarts (Int.Rep. HASYLAB 81/06)

E.E. Koch, D.E. Eastman and Y. Farge

Synchrotron Radiation - Characteristics, Instrumentation and Principles
of Research Applications - an Introduction

publ. in "Handbook on Synchrotron Radiation", Vol. I, ed. by E.E. Koch

(North Holland Publishing Company) (Int.Rep. HASYLAB 81/08)

B. Buras, R. Fourme and M.H.J. Koch

X-Ray Diffraction, Principles and Applications

publ. in "Handbook on Synchrotron Radiation", Vol. I, ed. by E.E. Koch

(North Holland Publishing Company) (Int.Rep. HASYLAB 81/11)

G. Materlik

Properties of Synchrotron Radiation

to be published in: "Uses of Synchrotron Radiation in Biology"

Ed. H.B. Stuhrmann, Academic Press: London (Int.Ber. HASYLAB 81/15)

H. Arnold und K.Kosten

Eine Guinier-Heizkamera zur Untersuchung von Phasenumwandlungen
mit Synchrotronstrahlung

Z. Kristallogr. 156, 7 (1981)

O. Beimgraben, W. Graeff, U. Hahn, J. Knabe, E.E. Koch, C. Kunz
G. Materlik, V. Saile, W. Schmidt, B.F. Sonntag, G. Sprüssel,
E.W. Weiner und R. Zietz

HASYLAB, Das neue Hamburger Synchrotronstrahlungslabor am DESY,
ein Zentrum für VUV-, Röntgen-Spektroskopie und Strukturforchung
Phys. Blätter 37, 2, 1981

K.L.I. Kobayashi, F. Gerken, J. Barth and C. Kunz

A Study of Al/Si (111) - Cleaved Interface by Photoemission,
Auger Electron Yield, and Auger Electron Spectroscopies

Solid State Comm. 39, 851 (1981) (DESY SR-80/08)

E. Tegeler, M. Iwan and E.E. Koch

Electronic Structure of the Valence Bands of H_2^- , Mg^- and
Pt-Phthalocyanine Derived from Soft X-Ray Emission and
Photoelectron Emission Spectra

J. Electr. Spectr. 22, 297 (1981) (DESY SR-80/10)

E. Tegeler, G. Wiech and A. Faessler

Carbon K-Emission Spectra and Electronic Structure of Solid
Naphthalene and Anthracene

J. Phys. B: At.Mol.Phys. 14, 1273 (1981) (DESY SR-80/15)

G. Wiech

X-Ray Emission Spectroscopy

in: Emission and Scattering Techniques, ed. Peter Day,

Nato Advanced Study Institutes Series, Series C:

Mathematical and Physical Sciences, D. Reidel Publishing Company

Vol. 73, 103 (1981)

N. Schwentner, G. Martens and H.W. Rudolf
Free Exciton Energy Transfer in Kr-Au Sandwiches
phys. stat. sol. B 106, 183 (1981) (DESY SR-80/16)

G. Tolkiehn, P. Rabe and A. Werner
Experimental Investigation of the Systematic k- and Z Dependence
of EXAFS-Backscattering Amplitudes and Comparison with Theory
publ. in Inner-Shell and X-Ray Physics of Atoms and Solids,
Eds. D.J. Fabian, H. Kleinpoppen and L.M. Watson
(Plenum Press, New York) p. 675 (1981)

P. Rabe
Selected Topics in EXAFS: Systematics and Applications
publ. in EXAFS for Inorganic Systems, Eds. C.D. Garner and
S.S. Hasnain, p. 76 (1981)
(DARESBURY Report DL/SCI/R17)

G. Elsner, H.G. Zachmann and J.R. Milch
Study of the Crystallization Process of Oriented Polyethylene
Terephthalate by Means of Synchrotron Radiation
Makromol. Chem. 182, 657 (1981) (DESY SR-79/18)

G. Elsner, M.H.J. Koch, J. Bordas and H.G. Zachmann
Time Resolved Small Angle Scattering During Isothermal Crystallisation
of Unoriented Polyethyleneterephthalate Using Synchrotron Radiation
Makromol. Chem. 182, 1263 (1981)

W. Gudat, M. Campagna, R. Rosei, J.H. Weaver, W. Eberhardt,
F. Hulliger and E. Kaldis
Surface Binding Energy Shifts, Mixed Valence and Localization
of 4f Electrons: Ce vs Sm
J. Appl. Phys. 52 (3), 2123 (1981)

G. Tolkiehn, P. Rabe and A. Werner
Structure Investigation on the Hexacyanoferrate-(II) and -(III)
Complexes
publ. in EXAFS for Inorganic Systems, Eds. C.D. Garner and S.S. Hasnain,
p. 130, 1981
Daresbury Report DL/SCI/R17, Daresbury, 1981)

F.J. Himpsel, E.E. Koch and D.E. Eastman
Free Electron-Like Bulk and Surface States for Zn (0001)
Phys. Rev. B 24, 1687 (1981)

M. Iwan, E.E. Koch and F.J. Himpsel
Resonant 5f-Valence Band Satellite at the 5d-Threshold in
Uranium Metal
Phys. Rev. B 24, 613 (1981)

E.E. Koch
Synchrotron Radiation and Alternative VUV-Light Sources,
Brief Notes on a Discussion
Ber. Bunsenges. Phys. Chemie 85, 172 (1981)

J.H. Weaver, C.Krafka, D.W. Lynch and E.E. Koch
Optical Properties of Metals
Applied Optics 20, 1124 (1981)

W.F. Schmidt, H. Böttcher, W. Döldissen, U. Hahn and E.E. Koch
Photo-Conductivity of Liquid Tetramethylgermanium Studied by
Means of Synchrotron Radiation
Proceedings of 7th Int. Conf. on Conduction and Breakdown in
Dielectric Liquids, Berlin, 27-31 July 1981, p. 94

W.F. Schmidt, H. Böttcher and W. Döldissen
Photoconductivity of Liquid Tetramethylgermanium Studied by
Means of Synchrotron Radiation
submitted to J. Electrostatics

K.L.I. Kobayashi, Y. Shiraki, F. Gerken and J. Barth
Use of $L_1L_{2,3}$ Auger Transition for an Electron-Structure Study
of the Al-Si (111)-(2x1) Interface
Phys. Rev. B24, 3575 (1981)

J. Staun Olsen, B. Buras, L. Gerward and S. Steenstrup
An X-Ray Energy-Dispersive Diffractometer for Synchrotron Radiation
Acta Cryst. A37, C-309 (1981)

J. Staun Olsen, B. Buras, S. Steenstrup and L. Gerward
Spectrometer for X-Ray Energy Dispersive Diffraction
Synchrotron Radiation News
Nucl. Instr. and Meth. 185, 565 (1981)

J.D. Stephenson
Synchrotron Radiation Topography of (100) Co-8wt%Fe Binary Alloy
phys. stat. sol. (a) 63, 557 (1981) and Acta Cryst. A37, C252 (1981)

J.D. Stephenson
An Interpretation of White (Synchrotron) X-Radiation Laue (Topograph)
Patterns by Means of the Gnomonic Projection
phys. stat. sol. (a) 65, 601 (1981)

T. Tuomi and K. Naukkarinen
Multiple Diffraction Lines in the Synchrotron X-Ray Topographs of
Elastically Bent Silicon Single Crystals
Helsinki University of Technology, Lab. of Physics, Report P6/1981
Phys. Rev. B 24, (1981)

T. Tuomi, V. Kelhä, K. Naukkarinen and M. Blomberg
Synchrotron X-Ray Topography: a Multistereoscopic Imaging Technique,
Helsinki University of Technology, Lab. of Physics, Report P17/81
Acta Polytechnica Scandinavica, Applied Physics Series, Ph, in press

K. Naukkarinen and T. Tuomi
Explanation of Contrast Effects in Synchrotron X-Ray Topographs
of Bent Crystals by Means of Multiple Diffraction
Helsinki University of Technology, Lab. of Physics, Report P13/1981
phys. stat. sol. in press

G. Will
Energiedispersion und Synchrotronstrahlung. Eine neue Methode und
eine neue Strahlungsquelle für die Röntgenbeugung
Fortschr. Min. 59, 31 (1981)

W. Großhans

Excitation of the Ruby Luminescence in Diamond Cells by
Synchrotron Radiation

in: High Pressure in Research and Industry

Proc. of 8th AIRAPT & 19th EHPRG Conference, Uppsala, 1981

L.I. Johansson, A. Flodström, S.-E. Hörnström, B. Johansson,
J. Barth and F. Gerken

Chemically Shifted Surface Core-Levels and Surface Segregation
in Eu-Au and Yb-Au Alloys

Solid State Comm. in press

J. Barth

Comment on Amplitude Modulations in the UPS Valence Band Spectra
of Au and Ag

Phys. Rev. B23, 4276 (1981)

J. LeCalvé, M.C. Castex, D. Haaks, B. Jordan and G. Zimmerer
Time-Resolved Study of the UV Fluorescence of Chlorine under
Synchrotron Radiation Excitation of Cl₂/Rare Gas Mixtures

Il Nuovo Cimento 63B, 265 (1981)

E. Feldbach, I. Kuusmann and G. Zimmerer

Excitons and Edge Luminescence in MgO

Proc. Intern. Conf. on Luminescence, Berlin, 1981

J. Luminescence in press

R.L. Johnson

Grazing-Incidence Gratings and Mirrors-Case Studies

SPIE Proceedings, Reflecting Optics for Synchrotron Radiation,

Vol. 315 (1981)

B. Lewandowski, J. Ganz, H. Hotop and M.-W. Ruf

On the Photoionisation of Ba Atoms between 54 and 60 nm

J. Phys. B. ... (Atomic and Molecular Physics), L ... in press

U. Bonse and R. Teworte

A Rotation Stage for Precise Alignment at the 10^{-3} sec.
of Arc Level

J. Phys. E.: Sci Instr. Vol. 1982 in press

U. Bonse, K. Fischer, S. Heinrich und U. Dretzler

Das neue Zweiachsendiffraktometer im Hamburger Synchrotron-
strahlungslaboratorium (Hasylab)

21. Diskussionstagung der Arbeitsgemeinschaft Kristallographie,
Karlsruhe, 1981

Z. Krist. 156, 20 (1981)

K. Fischer

Partial or Complete Circumvention of the Phase Problem in Crystal
Structure Determination Using Synchrotron Radiation

XII. Internat. Congress of Crystallography, Ottawa/Canada, 1981

Acta Cryst. A37, Suppl. S. C 308 (1981)

K. Fischer

Mapping Parts of the Electron Density Distribution from X-Ray
Bragg Scattering Intensities (Lambda Technique)

Zeitschrift für Naturforschung a (1981) in press

K. Fischer, A. Ribbens, J. Spilker und G. Schäfer

Kristallstrukturanalyse mit durchstimmbarer Wellenlänge:
eine partielle Umgehung des Phasenproblems

21. Diskussionstagung der Arbeitsgemeinschaft Kristallographie,
Karlsruhe, 1981

Z. Krist. 156, 3 (1981)

B. Diplomarbeiten, Dissertationen, Habilitationsschriften und
Staatsexamensarbeiten (teilweise als Interne HASYLAB-Berichte)

P. Rabe

Die Röntgenabsorptionsfeinstruktur und ihre Anwendung auf
Strukturuntersuchungen

Habilitationsschrift Univ. Kiel, 1980

Int.Ber. HASYLAB 81/02

G. Sprüssel

Feinstruktur und Temperaturabhängigkeit äußerer Rumpfezitonon
in Kaliumhalogeniden und III-V Halbleitern

Dissertation Univ. Kiel, 1980

Int.Ber. HASYLAB 81/03

M. Ramm

Winkelabhängige Photoemission und elektronische Struktur von
Graphit und Graphiteinlagerungsverbindungen mit 3d-Metallchloriden

Diplomarbeit Univ. Hamburg, 1980

Int.Ber. HASYLAB 81/04

H. Oertel

Photoinduzierte Bildung von negativen Ionen aus O_2 , NO, CO und N_2

Dissertation Freie Univ. Berlin, 1981

Int.Ber. HASYLAB 81/07

G. Gründler

Untersuchung der Photoleitfähigkeit von Natrium-dotierten Xenon-
Matrizen

Diplomarbeit Univ. Hamburg, 1981

Int.Ber. HASYLAB 81/09

G. Elsner

Der Einfluß uniaxialer und biaxialer Orientierung auf die Kristallisation
und die morphologische Struktur von Polyethylenterephthalat

Dissertation Univ. Hamburg, 1981

Int.Ber. HASYLAB 81/10

H. Diebold

Untersuchung der Eigenschaften eines Elektronenenergieanalysators
für Photoemissionsmessungen mit einem N_2 -Laser

Staatsexamensarbeit Univ. Hamburg, 1981

Int.Ber. HASYLAB 81/12

R. Engelhardt

Röntgenphotoemissionsmessungen an Fe-, Ni-, Cu- und Zn-Phthalocyaninen
unter besonderer Berücksichtigung der bei den Rumpfniveaus auftretenden
Satelliten-Strukturen

Diplomarbeit Univ. Hamburg, 1981

Int.Ber. HASYLAB 81/13

P. Funke

Der Einfluß stehender Wellenfelder in einem Germanium-Röntgen-
interferometer auf die K-Fluoreszenzstrahlung der Germanium Atome
Diplomarbeit Univ. Hamburg, 1981

R.R. Grigat

Untersuchung der elektronenangeregten Lumineszenz des festen
Stickstoff vom sichtbaren bis zum vakuum-ultravioletten Spektralbereich
Diplomarbeit Univ. Hamburg, 1981

C. Hermes

Aufbau der ersten Stufe einer Anlage zur Verwendung von Synchrotron-
strahlung für Mößbauerexperimente
Dissertation T.U. München, 1981

J. Lauterjung

Röntgenbeugungsuntersuchungen am MnSO_4 im Druckbereich bis 40 kbar
und Temperaturbereich bis 600°C mit Hilfe der Methode der energie-
dispersiven Röntgenbeugung unter Benutzung von Synchrotronstrahlung
Diplomarbeit Univ. Bonn, 1981

G. Martens

Die Röntgenabsorptionsfeinstruktur in der Elektronenausbeute und
in der Totalreflexion
Dissertation Univ. Kiel, 1981

W. Weber

EXAFS-Messungen an Elektronenbestrahlten verdünnten AgAl-Legierungen
Dissertation Univ. München, 1981

C. Interne Berichte und Technische Notizen

D. Rieger, V. Saile, R. Schnell und W. Steinmann

Testexperimente zur Erprobung eines Display,Type Analysators

für winkelaufgelöste Photoelektronenspektroskopie mit Synchrotronstrahlung

Int.Ber. HASYLAB 81/14

R.-P. Haelbich

Eine Einführung in die Programmierung von PDP 11-Rechnern mit

FORTRAN für Anfänger

Techn.Notiz HASYLAB 81/01

Vorträge

Frühjahrstagung der DPG Festkörperphysik in Münster (9.-14.3.1981)

S. Bernstorff, V. Saile, D. Rieger und W. Steinmann

Untersuchung der Exzitonen in festen Edelgasen mit einer
Kombination von Synchrotronstrahlung und N_2 -Laser

Verhandl. DPG (VI) 16, 150 (1981)

J. Barth, F. Gerken, A. Flodström und L.I. Johansson

Valenzänderungen von oxydiertem Eu

Verhandl. DPG (VI) 16, post deadline paper

R. Kammerer, J. Barth, F. Gerken und C. Kunz

Untersuchung von Oberflächenzuständen am Natrium mit hochauflösender
Photoelektronenspektroskopie

Verhandl. DPG (VI) 16, post deadline paper

J. Bahrtdt, J. Barth, F. Gerken und C. Kunz

Augerzerfall von Rumpfanregungen in Ionen- und Molekülkristallen

Verhandl. DPG (VI) 16, 237 (1981)

J. Bahrtdt, J. Barth, F. Gerken und C. Kunz

Anregung und Zerfall von Rumpfexzitonen in Natriumhalogeniden

Verhandl. DPG (VI) 16, 238 (1981)

E.E. Koch, M. Iwan, K. Hermann und P.S. Bagus

3d-Valenz Orbital Struktur von Zn-Phthalocyanin:

Ergebnisse von Photoemissionsexperimenten und Cluster-Rechnungen

Verhandl. DPG (VI) 16, 222 (1981)

R. Engelhardt, M. Iwan und E.E. Koch

Shake-up Satelliten in XPS von 2p- und 3p-Rumpfniveaus in
Cu- und Ni-Phthalocyanin

Verhandl. DPG (VI) 16, 222 (1981)

I. Kuusmann, G. Zimmerer und W. Böhmer

Reflexions- und Lumineszenzmessungen an MgO-Einkristallen

Verhandl. DPG (VI) 16, 232 (1981)

C. Kunz

Das neue Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB

Verhandl. DPG (VI) 16, 557 (1981)

G. Martens, W. Niemann und P. Rabe

Der Einfluß von Mehrfachstreuung der Photoelektronen auf die
Röntgenelektronen auf die Röntgenabsorptionsfeinstruktur

Verhandl. DPG (VI) 16, 237 (1981)

W. Weber und H. Peisl

EXAFS-Untersuchungen an elektronenbestrahlten verdünnten AlAg-
Legierungen

Verhandl. DPG (VI) 16, 329 (1981)

European Conference on Atomic Physics EPS, Heidelberg, 6.-10. April 1981

W. Böhmer, E. Boursey, M. Chergui, R. Haensel, N. Schwentner
1s-2p Absorption and Emission Bands of H Atoms in Solid Ne
EPS Conference Abstracts 5A, Part I, p. 434 (1981)

J. Barth, F. Gerken and C. Kunz
Excited Multiplet Lines in Resonance Photoemission Spectra of Gd
EPS Conference Abstracts 5A, Part II, p. 1052 (1981)

B. Jordan, P. Gürtler, D. Haaks, Th. Möller and G. Zimmerer
Formation and Radiative Decay of Rare Gas Monohalides in Halogen
Doped Rare Gases
EPS Conference Abstracts 5A, Part I, p. 331 (1981)

Th. Möller, P. Gürtler, D. Haaks, B. Jordan and G. Zimmerer
VUV Absorption and Resonance Fluorescence of the Chlorine Molecule
EPS Conference Abstracts 5A, Part I, p. 335 (1981)

E.E. Koch and M. Iwan
On the Electronic Structure of Phthalocyanines,
New Results from Photoemission Experiments
EPS Conference Abstracts 5A, Part I, p. 302 (1981)

IV European Conference on Surface Science, Münster, 14.-16. Sept. 1981

F. Gerken, J. Barth, R. Kammerer, L.I. Johansson and A. Flodström
Surface Shifts on Rare Earth Metals
publ. in Surface Science

L.I. Johansson, A. Flodström, S.-E. Hornström, B. Johansson, J. Barth
and F. Gerken
Surface Shifted Core Levels Used as a Tool to Identify Surface Segregation
in Eu-Au and Yb-Au Alloys
publ. in Surface Science

XV Annual Conference of the Finnish Physical Society, 6.-7. Februar, 1981,
Turku, Finland

T. Tuomi und K. Naukkarinen

Multiple Diffraction Lines in the Synchrotron X-Ray Topographs of
Elastically Bent Crystals,
paper 6:1

M. Luomajärvi, K. Naukkarinen und T. Tuomi

Channeling Study of CO₂ Laser-Annealed Ion-Implanted Silicon
paper 6:8

2nd International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation
Cornell University, Ithaca/USA, Juli 1981

C. Kunz

Instrumentation at HASYLAB
Invited Paper

G. Materlik

The Proposal for a European Synchrotron Radiation Source

U. Bonse and K. Fischer

An Inconventional Multi-Purpose Diffractometer for Synchrotron
X-Ray at DORIS

Weitere Vorträge (Seminare, Kolloquien, Konferenzen etc.)

E.E. Koch

Core Spectroscopy of Organic Molecules and Crystals

Invited Talk, Trieste International Symposium on Core Level

Excitations in Atoms, Molecules and Solids, 22-26 June, 1981,

Extended Abstracts Int. Centre for Theoretical Physics, Trieste

J.-H. Fock, H.-J. Lau and E.E. Koch

Valence Band Photoemission from Pure and Matrix Isolated Cyodeposited
Small Molecules

Extended Abstract, Int. Matrix Isolation Spectroscopy Conference,

Nottingham, 20-24 July, and to be published

E.E. Koch

Synchrotron Radiation Studies of Higher Excited States of Molecules
and Molecular Crystals: Overview and Recent Results

Invited Talk, 182 nd National Meeting American Chemical Society,

New York, August 26th, 1981

E.E. Koch

Untersuchung hochangeregter Zustände von Molekülen und Molekül-
kristallen mit Synchrotronstrahlung; Übersicht und einige neuere
Ergebnisse

Physikalisch-Chemisches Kolloquium Univ. Marburg 12.2.1981

E.E. Koch

Spektroskopie und Strukturuntersuchungen mit Synchrotronstrahlung

Physikalisches Kolloquium TU Clausthal 6.5.1981

E.E. Koch

Zur elektronischen Struktur von Phthalocyaninen - Ergebnisse der
Photoelektronenspektroskopie

Oberseminar Sektion Physik Univ. München 19.5.1981

E.E. Koch

Anwendung der Synchrotronstrahlung in der Spektroskopie und bei
Strukturuntersuchungen

Stuttgarter Physikalisches Kolloquium 16.6.1981

E.E. Koch

Electronic Structure of Organo-Metallic Compounds

IBM Thomas J. Watson Research Center, Yorktown Heights, 31.8.1981

E.E. Koch

Ergebnisse der Photoelektronenspektroskopie zur elektronischen
Struktur von Phthalocyaninen

Univ. Hamburg, Seminar Oberflächenphysik 11.11.1981

E.E. Koch

Neue Ergebnisse bei der Spektroskopie mit Synchrotronstrahlung an
Molekülen und Molekülkristallen

Univ. Göttingen, Physikalisch-Chemisches Kolloquium 26.11.1981

E.E. Koch

Application of Synchrotron Radiation in Spectroscopy and for Structural
Research

ILL-Inst. Laue Langevin, Grenoble 17.12.1981

C. Kunz

Synchrotronstrahlung

eingeladener Vortrag: Leopoldina Symposium:

Fortschritte - Methoden - Neue Anwendungen

Halle (Saale) 29.11.1981

C. Kunz

Experimente mit Synchrotronstrahlung

Seminarvortrag Univ. Tübingen, 22.6.1981

C. Kunz

Resonant Photoemission Spectroscopy on Rare Earths

Seminarvortrag Brookhaven National Laboratory, Upton, N.Y. USA, 13.7.1981

C. Kunz

Spektroskopie mit Synchrotronstrahlung

Eingeladener Vortrag Fachausschuß Festkörperphysik der Österreichischen

Physikalischen Gesellschaft, Wien, 21.9.1981

B. Sonntag

Synchrotron Radiation for X-Ray Chemical Analysis

Plenarvortrag 18th Annual Conference on X-Ray Chemical Analysis

Sept. 12-15, 1981 Kyoto, Japan

H. Bradaczek und G. Hildebrandt

Bericht über erste Erfahrungen mit dem Topographie-Meßplatz am HASYLAB

(DESY, Hamburg); Gründung einer Interessengemeinschaft "Realzeit-

Topographie" , Arbeitskreis Röntgentopographie, Burghausen, 1981

M.C. Castex, J. LeCalvé, D. Haaks, B. Jordan and G. Zimmerer

Etude spectrale et cinétique des mélanges de Cl_2 et gaz rare excité

par le rayonnement synchrotron

Nationale Tagung der Société Française de Physique, 29. Juni - 4. Juli, 1981

Clermont-Ferrand

M. Chergui, E. Boursey, W. Böhmer, R. Haensel and N. Schwentner

Effet de densité sur les mécanismes de relaxation dans les états

excités de la molécule NO

Congrès de la Société Française de Physique, Clérmont-Ferrand, 1981

K. Fischer

Phasenproblem bei der Kristallstrukturanalyse

Vortrag Einweihungsfeier HASYLAB, Januar 1981

K. Fischer

Experimentelle Phasenbestimmung mit Synchrotronstrahlung

Eingeladener Vortrag Tagung des Arbeitskreises "Kristallstruktur-

analyse von Molekülverbindungen" (KSAM), Martinsried, März 1981

R. Haensel

On the Different Possibilities of EXAFS Spectroscopy

International Centre for Theoretical Physics Trieste, 3.7.1981

R. Haensel

EXAFS an Metallclustern

Mikrocluster-Symposium Universität Konstanz, Sept. 1981

R. Haensel

EXAFS: Eine Methode zur Untersuchung der lokalen Ordnung in Festkörpern

Phys. Kolloquium Univ. Kaiserslautern, 26.1.81

Phys. Kolloquium Univ.-Gesamthochschule Paderborn, 12.2.81

Phys. Kolloquium Univ. Würzburg, 19.2.81

Kolloquium des Institutes für Angewandte Kernphysik, Kernforschungszentrum
Karlsruhe, 20.5.81

Phys. Kolloquium, Technische Univ. Hannover, 24.11.81

R. Haensel

Nutzung der Synchrotronstrahlung für die chemische und physikalische
Forschung

Kolloquium TU Dresden, 16.6.81

Chem. Kolloquium Karl-Marx-Universität Leipzig, 18.6.81

R. Haensel

Ultraviolett- und Röntgenspektroskopie mit Synchrotronstrahlung

Kolloquium Univ. Konstanz, 30.6.1981

G. Hildebrandt

Röntgen-Interferenz-Topographie, konventionell und mit Synchrotronstrahlung

Proc. 2nd europ. conf. non-destructive-testing, Wien, 1981, p. 91

R.L. Johnson

Recent Development in Synchrotron Radiation Instrumentation at HASYLAB

IOP Meeting, "Advances in VUV Instrumentation and Applications, 13.5.1981

R.L. Johnson

Grazing-incidence gratings and mirrors-case studies,

Brookhaven Conferences on Synchrotron Radiation, 16.-20.11.1981

V. Kupcik

Strukturuntersuchung mit Synchrotronstrahlung

Festkolloquium zum 100-jährigen Bestehen der TU Hannover

V. Kupcik, I. Valena, A. Pähler

5-Kreisdiffraktometer mit durchstimmbarer Wellenlänge für Synchrotronstrahlung

Martinsrieder Symposium vom 9.-13.3.1981

I. Kuusmann, W. Böhmer and G. Zimmerer

Optical Properties of Crystalline MgO in the Far Ultraviolet

Int. Conf. "Defects in Insulating Crystals", Riga, 18.-23.5., 1981

Abstracts of Contributed Papers ed. by K.K. Shvarts and Ya. A. Ekmanis,

Zinatne Publishing House, Riga, 1981, p. 427

G. Materlik

Bestimmung der Lage von Fremdatomen im Gitter und an der Oberfläche durch
stehende Röntgeninterferenzfelder

Seminar LMU München, 1.12.1981

P. Rabe

Die Feinstruktur der optischen Konstanten im Röntgengebiet

Kolloquium am Fachbereich Physik, Freie Univ. Berlin, Januar 1981

M.-W. Ruf

Verzweigungsverhältnisse bei der Photoionisation an Atomen

Seminarvortrag Univ. Freiburg, 24.6.1981

V. Saile

Ionisation von Exzitonen in festen Edelgasen mit einem N₂-Laser

Festkörperkolloquium der Univ. Kiel, 22.1.1981

V. Schmidt

Elektronenspektrometrie mit monochromatisierter Synchrotronstrahlung

Seminarvortrag Frei Univ. Berlin, 16.2.1981

W. Steinmann

Two-Photon-Photoemission

Seminarvortrag Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati
Trieste, 25.5.1981

J.D. Stephenson

An Interpretation of White Synchrotron X-Radiation Laue (Topograph)
Patterns by Means of the Gnomonic Projection
Arbeitskreis Röntgentopographie, Burghausen, 1981

G. Tolkiehn, P. Rabe and A. Werner

Structure Investigation on the Hexacyanoferrate-(II) and -(III) Complexes
Poster Session "EXAFS for Inorganic Systems, 28.-29.3.1981, Daresbury, England

T. Tuomi

X-Ray Imaging with Synchrotron Radiation

Invited Paper Nordic Solid State Physics Conference 1981,
H.C. Ørsted Institute, Copenhagen, 10.-12.8.1981, p. 95

K. Naukkarinen, M. Luomajärvi and T. Tuomi

CO₂ laser induced recrystallisation and damage of silicon
5th General Conf. of the European Physical Society in collaboration
with the Turkish Physical Society, Istanbul, 7.-11.9.1981, p. 277

M. Blomberg, V. Kelhä, K. Naukkarinen and T. Tuomi

Development and Applications of the Synchrotron X-Ray Topography,
8th Annual Stanford Synchrotron Radiation Laboratory Users Group Meeting,
22.-23.10.1981, SSRL Report No. 81-03, p. 72

T. Tuomi

Teilchenbeschleuniger zum nutzbaren Gebrauch

Radiovortrag im Finnischen Rundfunk Yleisradio, Mai 1981,
Wiedersendung im Oktober 1981 (in Finnisch)

V. Schmidt

Photoelectron and Auger Electron Spectroscopy of Core States in Atoms
Int. Symposium on Core Level Excitations in Atoms, Molecules and Solids,
Trieste, 22.-26.6.1981

V. Schmidt

Elektronenspektroskopie mit monochromatisierter Synchrotronstrahlung
Seminarvortrag DESY, Hamburg, 5.6.1981

H. Schmoranzer

VUV-Emissionsspektroskopie von Kr₂ und H₂
Phys. Kolloquium, TU Berlin, 26.11.1981

H. Schmoranzer and J. Imschweiler

Absolute Electronic Quenching Cross Sections of H₂ (B 2p ¹Σ_u⁺, v')-
Molecules in H₂

Abstracts XIIth ICPEAC (ed. S. Datz, Gatlinburg, Tenn. 1981), Vol.2, p.964

H. Schmoranzer and J. Imschweiler

Measurement of Radiative VUV-Lifetimes and Quenching Cross Sections
of Molecular Hydrogen

Abstracts 5th General Conf. of the EPS (Istanbul 1981), p. 105

N. Schwentner

Relaxationsprozesse und stimulierte Emission in Edelgaskristallen

Kolloquium Univ. Bayreuth, 21.1.1981

Kolloquium FU Berlin, 5.2.1981

J. Staun Olsen, B. Buras, L. Gerward, B. Johansson, H. Skriver and
S. Steenstrup

High Pressure Diffraction Studies of YbH₂ up to 28 GPa

Nordic Solid State Conf., Copenhagen, Denmark, 10.-12.8.1981

Intern. Symposium on the Physics of Solids Under High Pressure,

Bad Honnef, 10.-14.8.1981

T. Tuomi und K. Naukkarinen

Multiple Diffraction Lines Observed in Synchrotron X-Ray Topographs
Statusseminar Experimente mit Synchrotronstrahlung HASYLAB, 29.01.1981,
Poster 44

W. Weber und H. Peisl

Extended X-Ray Absorption Fine Structure of Electron-Irradiated
Dilute Aluminium Alloys
Yamada Conf. V on Point Defects and Defect Interactions in Metals
November 1981

G. Wiech

Angular Dependencies in X-Ray Emission Spectroscopy
International Seminar on X-Ray and Photoelectron Spectroscopy,
veranstaltet von der Polnischen Akademie der Wissenschaften
(Prof. Auleytner) in Jabonna bei Warschau (19.-21.5.1981);
invited paper

G. Wiech

Synchrotron Radiation: its application to angular dependent x-ray
emission spectroscopy
Vortrag gehalten am Physikalischen Institut der Tschechoslowakischen
Akademie der Wissenschaften in Prag, 2.12.1981

G. Will

Compressibility Measurements in a Diamond Anvil Squeezer and a
Miniatur Piston Cylinder Press at the DESY Hamburg
Seminarvorträge: Osaka, Kijoto, Sendai, Saporro, Tokyo / Japan 1981

G. Will

Application of Energiedispersive X-Ray Diffraction for High Pressure
Research in Mineralogy
Invited contribution, 12th Intern. Congress of Crystallographie,
16.-25.8.1981, Ottawa/Canada

W. Nuding, G. Will, E. Hinze und J. Lauterjung

Röntgenbeugungsexperimente mit Hilfe der Energiedispersionsmethode
am Deutschen Elektronen-Synchrotron DESY

21. Diskussionstagung der Arbeitsgemeinschaft Kristallographie, Karlsruhe,
17.-20.3.1981

W. Nuding, G. Will und E. Hinze

Compressibility Measurements in a Miniature Piston Cylinder Press
and a Diamond Anvil Squeezer at the DESY Hamburg

12th Inter. Congress of Crystallographie, 16.-25.8.1981, Ottawa/Canada

H.G. Zachmann

Synchrotron Radiation as a Technique for Study of Polymers

European Science Foundation, Strasbourg, France, 2.3.1981

H.G. Zachmann

Anwendung der Synchrotronstrahlung auf die Physik der Polymeren

Tagung des Fachausschusses "Physik der Hochpolymeren" in Marburg, 19.3.1981

H.G. Zachmann

Thermal Stability of the Crystalline Phase in Oriented Polymers

Europhysics Symposium on Macromolecular Physics, Leeds, England, 10.4.1981

H.G. Zachmann

Orientierung und mechanische Eigenschaften von Polyethylenterephthalat

Vortrag Univ. Erlangen, 1.12.1981

C.C. Glüer, W. Graeff und H. Möller

Stroboskopische Untersuchungen an Schwingquarzen mit Synchrotronstrahlung

Arbeitskreis Röntgentopographie, Burghausen, Oktober 1981

