

Abbildung 47: Röntgen-Mikrotomographie eines Mikrokallus in der Beckenkammbiopsie eines an renaler Osteopathie erkrankten Patienten.

Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB

Leiter: J.R. Schneider, DESY

Im Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB wird die von Positronen bzw. Elektronen in den Speicherringen DORIS III und PETRA II emittierte Synchrotronstrahlung in vielfältiger Weise in Grundlagen- und anwendungsbezogener Forschung auf den Gebieten der Physik, Biologie, Chemie und Kristallographie, in den Material- und Geowissenschaften sowie der Medizin (Abb. 47) eingesetzt. Dabei wird das Spektrum der elektromagnetischen Strahlung vom sichtbaren Licht bis zum harten Röntgengebiet genutzt und ein Energiebereich von etwa 1 eV bis hin zu 300 keV überstrichen.

Eine Außenstelle des Europäischen Labors für Molekularbiologie EMBL sowie drei Arbeitsgruppen für Strukturelle Molekularbiologie der Max-Planck-Gesellschaft führen an neun Messplätzen Untersuchungen zur Bestimmung biologischer Strukturen durch. Über die enge Zusammenarbeit mit dem II. Institut für Experimentalphysik der Universität Hamburg beteiligt sich HASYLAB an der Ausbildung von Studenten der Physik.

DORIS III wird mit Positronen bei einer Energie von 4.5 GeV und einem Anfangsstrom von 150 mA im 5-Bunch-Modus betrieben. Die Gesamtverfügbarkeit lag 1999 bei 93% (Abb. 48). Typische Strahllebensdauern waren etwa 12 Stunden am Beginn und 22 Stunden am Ende einer zehnstündigen Betriebsperiode. DORIS war vom 25. Januar bis 20. Dezember 1999 in Betrieb. Die 5900 Stunden, die für die Nutzer eingeplant waren, gliederten sich in sieben Blöcke von vier bis fünf Wochen, getrennt durch jeweils eine Woche für Wartung. Um DORIS auch während der Nutzungszeit optimieren zu können, wurde in jedem Block am zweiten, dritten und vierten Donnerstag eine achtstündige Maschinenschicht eingeschoben.

Für spezielle zeitaufgelöste Experimente gab es Schichten mit reduzierter Bunchzahl für etwa 20% der Be-

triebszeit. Am Speicherring PETRA konnten 1999 etwa 1800 Stunden parasitäre Strahlzeit genutzt werden.

Neue Netzgeräte für die Korrekturmagnete wurden 1999 in DORIS installiert und die Strahllageregelung wurde in das neue PC-Kontrollsystem integriert. Dadurch konnte die Stabilität der geregelten Strahlen deutlich verbessert werden. Weitere Verbesserungen wurden durch eine kombinierte Berücksichtigung von Strahllage-Monitoren in verschiedenen Strahlrohren erreicht. Um die horizontalen Strahllage-Schwankungen durch die Bewegung der Quadrupole zu reduzieren, sollen die betreffenden Vakuumkammern in den DORIS-Bögen durch neue Kammern ersetzt werden, die von den Quadrupolen entkoppelt sind. Dies wird im Herbst-Shutdown 2000 erfolgen.

Die wachsende Zahl von Synchrotronstrahlungsnutzern ist darauf angewiesen, Synchrotronstrahlung von DORIS und PETRA langfristig nutzen zu können. Deshalb wird DESY diese Ringe auch während des Baus und der Inbetriebnahme von TESLA – dem geplanten Linearbeschleuniger für die Teilchenphysik mit integrierten Freie-Elektronen-Lasern (FEL) für den Röntgenbereich – betreiben. Eine Arbeitsgruppe wurde ins Leben gerufen mit der Aufgabe, die Emittanz von DORIS mindestens um eine Größenordnung zu verbessern und dabei aber die Position der zehn Wiggler-Strahlführungen unverändert zu lassen. Die Ergebnisse dieser Arbeitsgruppe werden mit der Nutzerschaft diskutiert werden. Wichtige Aspekte in diesem Zusammenhang sind die Frage der Kosten, die Anzahl der benötigten Strahlführungen und die Länge des Shutdowns, in dem dieser Umbau stattfinden soll.

Nach Abschluss des jetzigen Messprogramms an HERA könnte der Speicherring PETRA zu einer dedizierten Synchrotronstrahlungsquelle werden. Deshalb wurde eine zweite Arbeitsgruppe bei DESY eingesetzt, die das Potential von PETRA als Synchrotronstrahlungsquelle bei 6 GeV untersuchen soll. Mit ei-

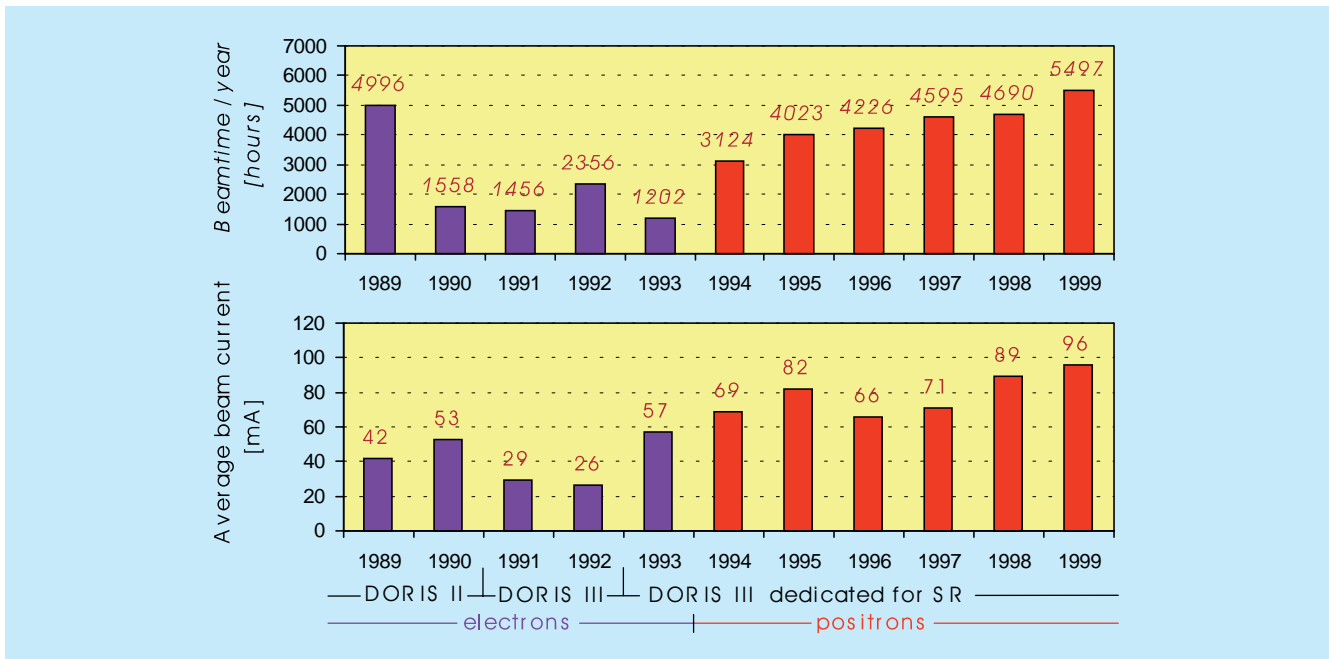


Abbildung 48: Strahlzeit in Stunden und mittlerer Strahlstrom in DORIS über die Jahre 1989 bis 1999.

ner optimierten Magnetanordnung des 2.3 km langen Ringes könnte man Strahleigenschaften erreichen, die denen der jetzigen Maschinen der dritten Generation überlegen wären.

1999 wurde mit dem Einfahren des neuen Linearbeschleunigers mit supraleitenden Kavitäten und des Freie-Elektronen-Lasers für den VUV- und weichen Röntgenbereich begonnen. Alle Komponenten einschließlich der Undulatoren mit den Vakuumkammern und der Strahldiagnose wurden installiert. Im August konnte das erste spontane Spektrum beobachtet werden. Eines der Ziele wurde bereits erreicht. Eines der LINAC-Kryomodulen mit insgesamt acht 9-zelligen supraleitenden Niob-Kavitäten konnte im normalen Betrieb einen Gradienten von 22.6 MeV pro Meter erreichen. Für das TESLA Linearbeschleuniger-Projekt wird ein Gradient von 22 MeV pro Meter benötigt. Im Augenblick konzentrieren sich die Arbeiten darauf, die Stabilität der LINAC-Komponenten zu verbessern und das Anwachsen der Emittanz des Elektronen-Bunches während des Transports durch den LINAC zu minimieren. Das Ziel ist, in einem „proof of principle“ Experiment Verstärkung des SASE-FELs bei einer Wellenlänge von etwa 100 nm zu erreichen.

Der Tunnel für die zweite Ausbauphase des VUV-FELs wurde im Rohbau fertiggestellt und der Aufbau der Experimentierhalle geht zügig voran. In beiden Bauten soll die EXPO 2000 Ausstellung vom 1. Juni bis zum 31. Oktober stattfinden.

Wichtige Fortschritte wurden bei der Ausarbeitung des Technischen Design Reports für TESLA gemacht, der die technische Planung und den wissenschaftlichen Hintergrund sowohl der Teilchenphysik als auch der Forschung mit Synchrotronstrahlung beinhaltet sowie den Zeitplan und Kostenabschätzungen.

Um die Aktivitäten der an einer neuen Generation von Synchrotronstrahlungsquellen interessierten Institutionen zu koordinieren, wurde ein internationales Netzwerk gegründet, das alle Laboratorien verbindet, die an der Entwicklung und der Nutzung eines Röntgen Freie-Elektronen-Lasers im 1 Ångström-Bereich mitarbeiten wollen. Im politischen Bereich wurde vom Ministerium für Bildung und Forschung (BMBF) die Entscheidung getroffen, den deutschen Wissenschaftsrat zu bitten, das TESLA-Projekt zu evaluieren. Dies soll in den Jahren 2001 und 2002 geschehen.

Folgende internationale Tagungen und Workshops fanden 1999 bei DESY-HASYLAB statt:

- EU Workshop: „Research with Synchrotron Radiation at HASYLAB“, 28. Januar 1999
- EU Workshop: „Scientific Applications and Experimental Developments for the VUV FEL at DESY“, 11.–12. März 1999
- EMBO Workshop: „Potential Future Applications in Structural Biology of an X-Ray Free Electron Laser at DESY“, 4.–8. Juli 1999
- „21st International Free Electron Laser Conference“ und „6th FEL Applications Workshop“, 23.–28. August 1999.

Ein IHP-RTD Antrag zur Entwicklung eines Pump-Probe Experiments mit subpicosekunden Zeitaufösung als Kombination aus einem Hochleistungslaser und dem VUV-FEL am DESY wird innerhalb des fünften Rahmenprogramms der Europäischen Kommission gefördert.

Aus dem Strategiefond der Hermann Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren konnten Gelder für den Bau einer „Seeding-Option“ für den FEL eingeworben werden.

Wie in den vergangenen Jahren hat die Bereitstellung von Reisegeldern im Rahmen der BMBF-Verbundforschung für Messaufenthalte bei HASYLAB für Wissenschaftler, denen keine anderen Mittel zur Finanzierung der Messreisen zur Verfügung standen, sehr zu einer effektiven Nutzung der verfügbaren Messzeit beigetragen. Das Förderprogramm der Europäischen Union zur Erleichterung des Zugangs zu Forschungseinrichtungen konnte für weitere drei Jahre verlängert werden und ermöglicht eine weitere Öffnung von HASYLAB für die internationale Nutzerschaft.

Der HASYLAB Jahresbericht 1999 wurde wieder als CD-ROM und im Internet veröffentlicht. Nur eine begrenzte Anzahl von gedruckten Exemplaren ist hergestellt worden. Er enthält 690 Beiträge von Experimenten am HASYLAB, inklusive der Strukturbiologie. Etwa 1600 Wissenschaftler von 262 Instituten waren an der Vorbereitung und Durchführung von Experimenten am HASYLAB 1999 beteiligt. Im Bereich der Strukturbiologie nutzten 500 Wissenschaftler von 100 Instituten,

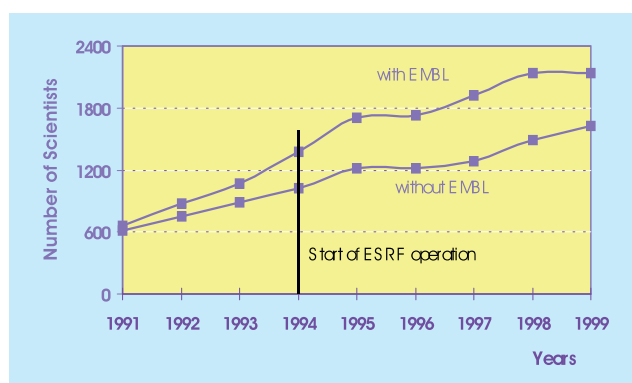


Abbildung 49: Anzahl der Wissenschaftler, die Experimente am HASYLAB durchgeführt haben, über die letzten neun Jahre (Nutzer, die pro Jahr mehr als ein Experiment nutzen, sind nur einmal gezählt).

im Wesentlichen aus Europa, die Einrichtungen und Messplätze von EMBL am DESY (Abb. 49).

Linearer Dichroismus in den 2p-Photoelektronen-Spektren orientierter Cr Atome

In den letzten Jahren ist es einer Kollaboration von HASYLAB, der Universität Hamburg und der Arbeitsgruppe von P. Zimmermann von der Technischen Universität Berlin gelungen, die Untersuchungen des Dichroismus in den Photoelektronen-Spektren freier Atome auf fest gebundene innere Schalen auszuweiten. Derartige Untersuchungen des Dichroismus spielen bei der Charakterisierung der magnetischen Eigenschaften von dünnen Filmen und von Vielschichtsystemen eine herausragende Rolle, da sie element- und ortsspezifische Aussagen ermöglichen. Chrom ist von besonderem Interesse, da es vom antiferromagnetischen Zustand des Festkörpers in den ferromagnetischen Zustand dünner Schichten übergeht. Der Vergleich der Spektren der freien Atome mit den entsprechenden Spektren dünner Filme erlaubt es, das Wechselspiel intraatomarer und interatomarer Wechselwirkungen sehr genau zu studieren. Abbildung 50 zeigt die experimentelle Anordnung. Die in einem Atomstrahllofen präparierten Atome werden durch Pumpen des $\text{Cr } 3d^5 4s^7 S_3 \rightarrow 3d^5 4p^7 P_2$ Übergangs mit der zirkular polarisierten

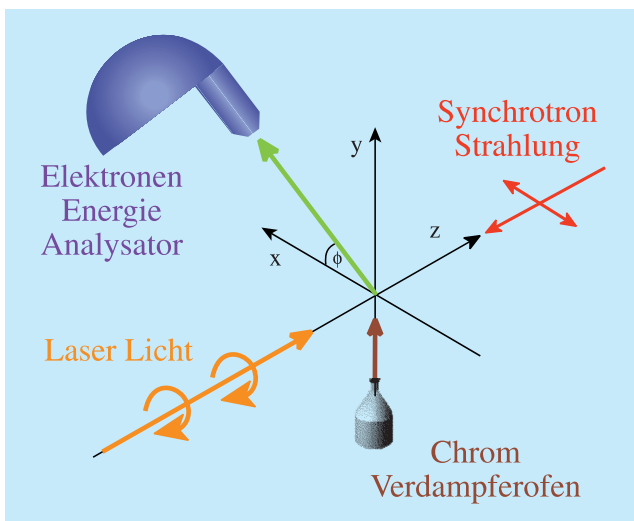


Abbildung 50: Experimentelle Anordnung zur Bestimmung des LMDAD in den Photoelektronen-Spektren laserorientierter Chrom Atome.

Strahlung eines Farbstofflasers orientiert. Linear polarisierte Undulatorstrahlung des HASYLAB-Messplatzes BW3 ionisiert die 2p-Elektronen, deren kinetische Energie mit einem Scienta SES-200 Elektronenenergie-Analysator bestimmt wird. Zur Bestimmung des Linearen Magnetischen Dichroismus (LMDAD) wurden die Photoelektronen-Spektren zueinander entgegengesetzt orientierter Atome gemessen und voneinander abgezogen. Das so erhaltene Spektrum ist durch die Punkte in Abbildung 51 wiedergegeben. Die um 12 eV getrennten, einige eV breiten Hauptstrukturen können in erster Näherung den $2p_{1/2,3/2}^5 3d^5 4s^7 S$ Zuständen des Cr^+ Ions zugeordnet werden. In diesen ionischen Endzuständen bleibt die im Grundzustand vorliegende parallele Orientierung der Spins der 3d und 4s Valenzelektronen im ionischen Endzustand erhalten. Übergänge in Zustände des Cr^+ Ions, bei denen die Spins der Valenzübergänge umgekoppelt werden, prägen das Spektrum für Bindungsenergien oberhalb von 580 eV entscheidend mit.

Die Arbeitsgruppe von U. Hillebrecht der Universität Düsseldorf konnte in entsprechenden Untersuchungen am gleichen HASYLAB-Messplatz die 2p-Photoelektronen-Spektren einer dünnen Chrom-Oberflächenschicht auf einen Eisen-Einkristall bestimmen. In diesem Fall wurden die Chrom Atome durch das Anlegen eines Magnetfeldes orientiert. Die durch-

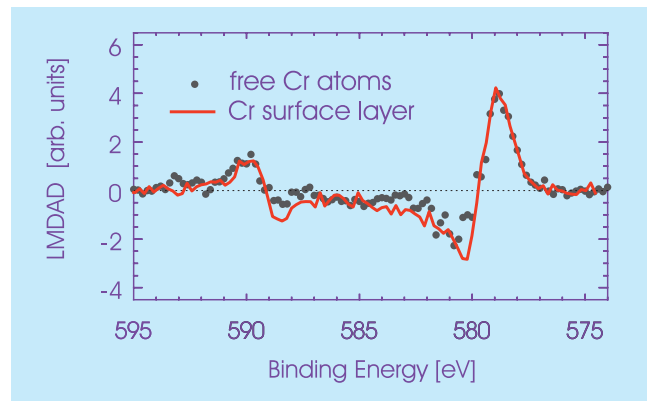


Abbildung 51: LMDAD (Linearer magnetischer Dichroismus), also die Differenz der Photoelektronen-Spektren für entgegengesetzt orientierte Atome für die Chrom $2p^5 3d^5 4s$ -Zustände, gemessen an freien Atomen und an einer Chrom-Oberflächenschicht ($h\nu = 705$ eV).

gezogene Kurve in Abbildung 51 zeigt den LMDAD der Chrom-Oberflächenschicht, das heißt die Differenz zweier Photoelektronen-Spektren für entgegengesetzte Magnetisierung des Eisenkristalls. Die sehr gute Übereinstimmung des atomaren LMDAD mit dem entsprechenden Spektrum einer monoatomaren Chrom-Schicht belegt den entscheidenden Einfluss der atomaren Wechselwirkung.

Röntgen-Mikrotomographie

Synchrotronstrahlung (SR) zeichnet sich unter anderem durch hohe Leuchtdichte und Kollimation aus. Ihr Einsatz im Rahmen der Tomographie ermöglicht eine räumliche Auflösung im Bereich von einem Mikrometer (Mikrotomographie) und um hundert- bis tausendfach geringere Belichtungszeiten als mit Strahlung aus der klassischen Röntgenröhre.

Ausgestattet mit leistungsfähigen digitalen Flächendetektoren auf der Basis von CCD-Chips hat sich die Mikrotomographie interessante Anwendungsgebiete in den Materialwissenschaften, in der Kristallographie, Geologie, Biologie und der Medizin erschlossen. Neben dem Bildkontrast durch Röntgenabsorption kann durch Kombination mit einem Röntgen-Interferometer auch die phasenschiebende Wirkung der Substanzen als

Röntgenphasenkontrast genutzt werden. Dies ist nützlich zur Untersuchung speziell solcher medizinischer und biologischer Proben, die wegen ihrer Zusammensetzung aus überwiegend leichten Elementen im Absorptionsbild allenfalls schwachen, im Phasenbild aber noch sehr deutlichen Strukturkontrast zeigen.

Das Grundprinzip der auf Radon (1917) zurückgehenden und erstmals von Hounsfield 1973 verwirklichten Methode der Tomographie soll kurz erläutert werden: Wird ein ausgedehnter Körper mit einer inneren Struktur von einer ausgedehnten Röntgenquelle sehr guter Parallelität durchleuchtet, so erhält man eine Parallelprojektion und somit ein Bild der Dichteverteilung des Körpers quer zum Strahl. Dabei wird über die Dichteveränderung parallel zum Röntgenstrahl gemittelt, so dass diese Information verloren geht. Wird nun aber der Körper schrittweise gedreht und jeweils eine solche Dichteverteilung aufgenommen, erhält man aus der Gesamtheit der Dichteverteilungen im Prinzip die Strukturinformation des Objektes und zwar um so vollständiger, je feiner die Rasterung des Detektors und je größer die Zahl der unterschiedlichen Projektionswinkel ist.

Die Rückgewinnung der Struktur aus den Dichteverteilungen geschieht durch einen Rekonstruktion genannten Algorithmus, der auf modernen Rechnern in kurzer Zeit durchgeführt werden kann.

Ein dreidimensionales Objekt lässt sich untersuchen, indem der Körper schrittweise durch den Röntgenstrahl gefahren, jeweils eine dünne Schicht durchleuchtet wird und diese Schichten im Rechner übereinander gelegt werden. Das Ergebnis der tomographischen Untersuchung ist dann ein dreidimensionaler Datensatz, welcher für jedes Volumenelement („voxel“) der Probe die lokale Absorption pro voxel angibt, wobei die Kantenlänge des voxel durch die erzielte räumliche Auflösung bestimmt ist. Mit geeigneten Verfahren der Bildverarbeitung können durch die Daten Schnitte in beliebigen Richtungen gelegt werden. Die Probe kann dadurch zerstörungsfrei an jeder Stelle untersucht und gegebenenfalls auch später einer erneuten Analyse ohne abermaliges Messen unterworfen werden.

Die Apparatur zur Mikrotomographie am HASYLAB ist von der Arbeitsgruppe U. Bonse der Universität Dortmund in Zusammenarbeit mit HASYLAB aufgebaut worden, ein Prinzipbild ist in Abbildung 52 gezeigt. Der monochromatisierte Röntgenstrahl durchdringt die Probe, die sich auf einem Manipulator befindet, und wird auf einem Fluoreszenzschirm in sichtbares Licht umgewandelt. Dieses sichtbare Bild wird mit einer Linsensystem auf eine CCD-Kamera abgebildet, die die Information digitalisiert und in einem Rechner abspeichert. Durch Variation der Röntgenwellenlänge kann das Verfahren an die Probe angepasst werden. Für bio-

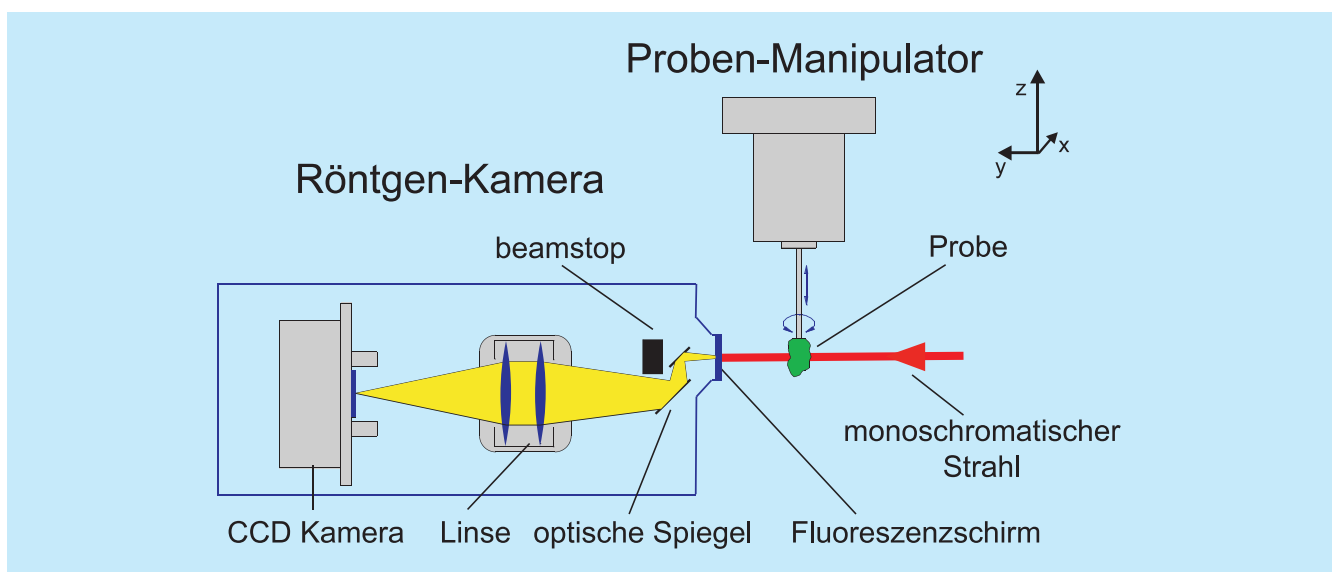


Abbildung 52: *Prinzipskizze des experimentellen Aufbaus zur Röntgen-Mikrotomographie.*

logische Proben wird weiche Strahlung mit größerer Wellenlänge gewählt, die auch in leichter Materie noch einen hinreichend hohen Kontrast erzeugt, für die Materialforschung nimmt man harte Strahlung mit kurzer Wellenlänge, da sie auch noch dicke Proben von schwerem Material durchdringt.

Abbildung 47 zeigt ein Beispiel aus dem medizinischen Bereich. Abgebildet ist ein Mikrokallus in der Beckenkambibiopsie eines an renaler Osteopathie erkrankten Patienten bei einer Wellenlänge von etwa 70 pm. Vermutlich entsteht die netzartige Struktur bei der neuerlichen Stabilisierung einer biomechanisch insuffizienten Knochenstruktur durch Brückenbildung zwischen unterbrochenen Trabekeln.

Das Potential dieser Methode in der Materialforschung zeigt Abbildung 53 am Beispiel einer röntgenmikrotomographischen Aufnahme eines Transistors. Links ist eine normale optische Photographie zu sehen und rechts die tomographische Aufnahme. Der Kontrast wurde hier so eingestellt, dass nur die schweren Metalle zu sehen sind, die leichteren Teile wie das Plastikgehäuse aber nicht. Man kann jetzt sehr schön sehen, wie die Anschlüsse innerhalb des Plastikgehäuses geführt sind. Allerdings ist das Herzstück des Transistors, der Siliziumchip, nicht zu sehen, da Silizium ebenfalls ein leichtes Element ist. Die Anschlussdrähte enden im Leeren.

Abbildung 54 entstand in einer Zusammenarbeit mit T. Lippmann und J. Heerens von der Abteilung für

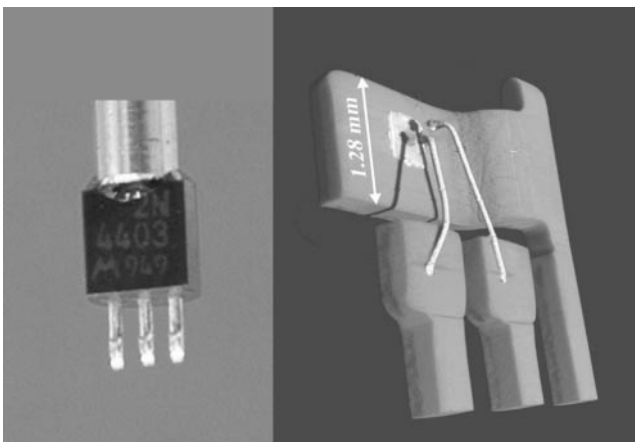


Abbildung 53: Photographie und röntgen-mikrotomographische Aufnahme eines Transistors.

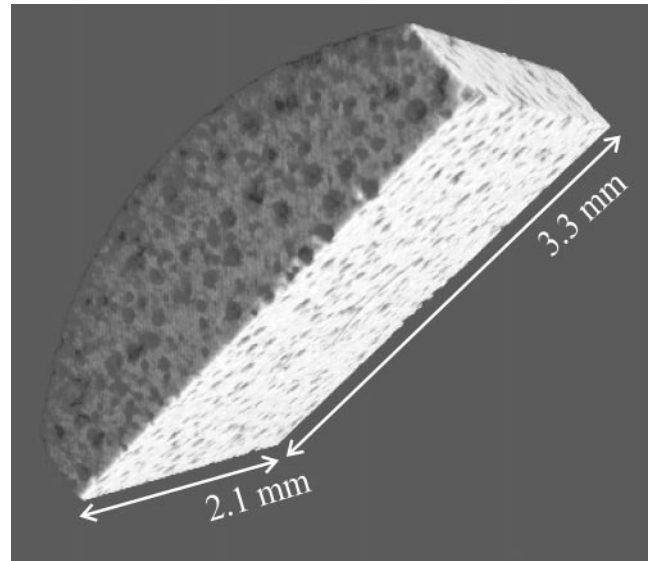


Abbildung 54: Verteilung von Kohlenstoff-Einschlüssen in einem Gusseisen-Stück, dargestellt durch eine mikrotomographische Aufnahme mit harter Röntgenstrahlung.

Werkstoffmechanik der GKSS. Hier konnte die Verteilung von Kohlenstoff-Einschlüssen in Gusseisen-Proben mit Hilfe der Röntgen-Mikrotomographie untersucht werden. Gezeigt ist ein Stück Gusseisen, in dem man die Größe und Verteilung von Kohlenstoff-Einschlüssen als dunkle Flecken sehen kann. Durch zyklisches Verformen mit nachfolgender mikrotomographischer Untersuchung kann das Zusammenfließen der Einschlüsse zu immer größeren Strukturen verfolgt werden, das zu einer Schwächung des Materials führt.

Dreidimensionale elektronische Impulsdichte von Festkörpern

Die Untersuchung der Bandstruktur von kristallinen Festkörpern wird seit vielen Jahren mit Hilfe von Photoelektronen-Spektroskopie, unelastischer Röntgenstreuung, Elektronenenergieverlust-Spektroskopie und einer Vielzahl weiterer Methoden betrieben. Dabei werden in der Regel nur die Energie-Eigenwerte der Bandstruktur bestimmt. Die direkt von den dazu gehörenden Wellenfunktionen abgeleiteten Größen, wie zum Beispiel die Elektronendichten im Orts- oder Impulsraum, werden dagegen seltener untersucht.

Eine Methode zur Bestimmung der Elektronen-Impulsdichte ist die Compton-Streuung: auf Grund der Geschwindigkeitsverteilung der Valenz-Elektronen erfährt bei tiefunelastischer Röntgenstreuung die Streustrahlung eine Art Dopplerverbreiterung, die dem sogenannten Compton-Profil proportional ist. Dieses Profil entspricht der Impulsdichte, integriert über zwei der drei kartesischen Komponenten des Elektronen-Impulses. Die Integration resultiert aus der Unkenntnis der Impulsverteilung der Rückstoß-Elektronen.

Aus einer koinzidenten Messung des Impulses des gestreuten Röntgenquants und des dazugehörigen Rückstoß-Elektrons kann man unter Kenntnis des primären Photonen-Impulses eindeutig den Impuls des Valenz-Elektrons vor der Streuung rekonstruieren. In diesem Fall findet die im klassischen Compton-Experiment unvermeidbare Integration nicht statt, die Energieverteilung der Streustrahlung ist der Impulsverteilung der Elektronen direkt proportional und der Informationsgehalt der Messung ist signifikant höher. Diese koinzidente Compton-Spektroskopie, kurz $(\gamma, e\gamma)$ -Reaktion genannt, ist seit vielen Jahren bekannt. Es wurde aber auch früh registriert, dass insbesondere elastische Vielfachstreuung der Rückstoß-Elektronen in der Probe die Information über ihren Impuls verfälschen kann. Es sind daher Proben erforderlich, die erheblich dünner als die mittlere freie Weglänge für elastische Streuung der Rückstoß-Elektronen sind. Diese ist für Rückstoßenergien von etwa 70 keV in Probenmaterial niedriger Kernladungszahl von der Größenordnung 100 nm. Solch hohe Rückstoßenergien erreicht man bei Verwendung von Photonen im Energiebereich um 180 keV, die allerdings nur sehr schwach inelastisch gestreut werden, das heißt nur etwa ein Photon aus einer Million.

Zur Rekonstruktion des Elektronen-Impulses müssen die Impulsrichtungen auf einige Milliradian genau festgelegt werden und es kommen Detektoren mit kleinem Akzeptanzwinkel zum Einsatz. Auch bei Verwendung zweidimensionaler, ortsempfindlicher Detektoren führt diese Bedingung zu einer starken Verminderung der koinzidenten Zählraten. Bei einem monochromatisierten Photonenfluss von etwa 10^{12} Photonen/s an der Probe kann man nur mit Koinzidenzraten von wenigen Hz rechnen. Dies zeigt, dass $(\gamma, e\gamma)$ -Experimente nur mit sehr intensiver Synchrotronstrahlung hoher Ener-

gie durchgeführt werden können, wie sie zum Beispiel der PETRA Speicherring liefert.

Abbildung 55 zeigt den experimentellen Aufbau am PETRA-Undulatorstrahl. Ortsempfindliche Detektoren werden sowohl im Elektronen- wie im Photonenweig eingesetzt. Die hier beschriebenen Messungen wurden in einer Zusammenarbeit mit F. Bell von der Universität München durchgeführt. Als Probe dienten 20 nm dünne, freitragende Graphitfilme, die entweder durch Verdampfen (V-Probe) oder durch Laser-Ablation (A-Probe) hergestellt wurden. Elektronenmikroskopische Beugungsaufnahmen zeigten eine isotrope Verteilung der Graphitkristalle für die A-Probe, während sich die V-Probe durch eine starke Textur auszeichnete: in der Filmebene ist die Orientierung der Basalebenen des Graphits statistisch verteilt, ihre c-Achse steht jedoch weitgehend senkrecht zur Filmebene. Da die Impulsdichte von Graphit stark anisotrop ist, erwartet man Unterschiede in den Impulsdichten beider Proben für Impulsrichtungen senkrecht (P_{\perp}) bzw. parallel (P_{\parallel}) zur Filmebene.

Im Folgenden werden die experimentellen Ergebnisse mit denen unterschiedlicher Bandstrukturrechnungen für Graphit verglichen. Dabei handelt es sich um eine „Linear Muffin-Tin Orbital“-Rechnung (LMTO), eine Pseudopotential-Rechnung (PP) und eine „Augmented Plane-Wave“-Rechnung (APW). Alle drei Rechnungen basieren auf der Dichte-Funktional-Theorie. Abbildung 56 zeigt die absoluten Impulsdichten als Funktionen von P_{\parallel} ($P_{\perp} = 0$) bzw. P_{\perp} ($P_{\parallel} = 0$) für die V-Probe ((a) und (c)) und die A-Probe ((b) und (d)), jeweils verglichen mit den entsprechenden theoretischen Kurven. Während die APW- und LMTO-Rechnungen die Daten gut beschreiben, weicht die PP-Rechnung

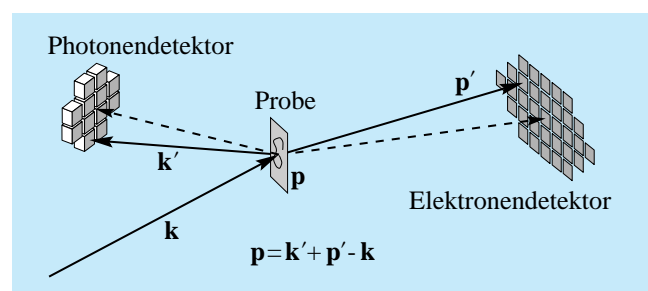


Abbildung 55: Schema des experimentellen Aufbaus.

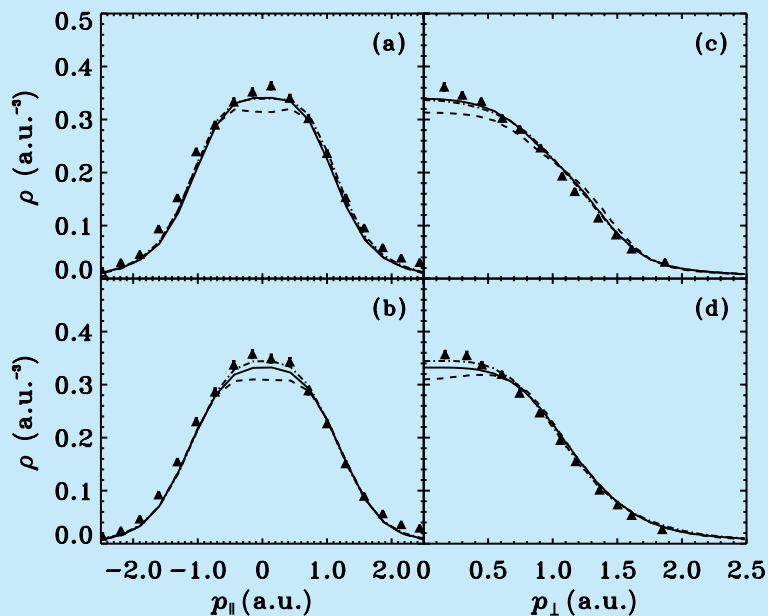


Abbildung 56: Vergleich experimenteller Impulsdichten für zwei verschiedene Graphitfolien mit Ergebnissen aus Bandstruktur-Rechnungen. V-Probe – (a) und (c), A-Probe – (b) und (d). LMTO (durchgezogen), PP (gestrichelt), APW (punkt-gestrichelt).

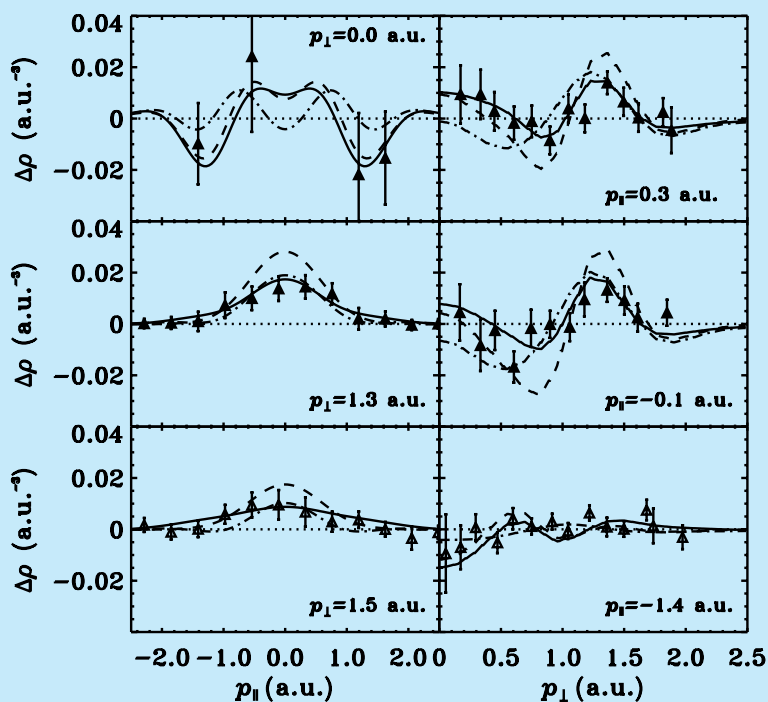


Abbildung 57: Differenzen der Impulsdichten der beiden Graphit-Folien und Vergleich mit Rechnungen.

signifikant vom Experiment ab. Dies zeigt sich noch deutlicher in den Differenzen der Impulsdichte für beide Proben.

Abbildung 57 zeigt die Differenz der Impulsdichten von V- und A-Probe für verschiedene Kombinationen von P_{\perp} und P_{\parallel} . Auch hier gibt die PP-Rechnung das Experiment nur schlecht wieder, die LMTO-Rechnung ist

im Vorteil gegenüber APW. Der quantitative Vergleich zwischen Experiment und Theorie zeigt, dass die an einem Speicherring wie PETRA möglichen Ereignisraten in Kombination mit der gegenüber konventioneller Compton-Streuung wesentlich verbesserten, dreidimensionalen Impulsauflösung ausreichen, um zwischen verschiedenen, modernen Bandstrukturechnungen entscheiden zu können.