Experimenteller Nachweis von Spintemperaturgleichgewicht in einer lasergepumpten Spinaustauschquelle für Wasserstoff- und Deuteriumatomstrahlen

Den Naturwissenschaftlichen Fakultäten der
Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg
zur
Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt von

Carsten Großhauser

aus

Nürnberg

Als Dissertation genehmigt von den Naturwissenschaftlichen Fakultäten der Universität Erlangen – Nürnberg

Tag der mündlichen Prüfung	:	31. März 1998
Vorsitzender der Promotionskommision	:	Prof. Dr. D. Kölzow
Erstberichterstatter	:	Prof. Dr. K. Rith
Zweitberichterstatter	:	Prof. Dr. W. Kretschmer

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

Seit dem Ende der 80er Jahre gibt es ein zunehmendes Interesse an Quellen für polarisierte Wasserstoff- oder Deuteriumatomstrahlen, um mit diesen Atomstrahlen, bei gleichzeitiger Verwendung der Speicherzellentechnik [Bar 81, Sch 81, Brü 85, Hae 85], interne spinpolarisierte Speicherringgastargets hoher Dichte zu erzeugen.
Begründet wird dieses Interesse vor allem durch die Tatsache, daß es seit einigen Jahren möglich ist, hohe Ströme an polarisierten Teilchen über eine lange Zeitspanne in Speicherringen zirkulieren zu lassen [Gro 94, Bar 95, Arn 94] und daß somit eine Reihe von Experimenten mit polarisierten Strahlen und polarisierten Targets realisiert werden können. Stellvertretend für solche Streuexperimente sei lediglich das HERMES-Experiment zur Untersuchung der inneren Spinstruktur des Nukleons [Her 90, Dür 95, Ack 97] erwähnt.
Der Vorteil dieser Experimente gegenüber jenen, welche herkömmliche Techniken mit externen polarisierten Strahlen und polarisierten Festkörpertargets wie NH_3 oder C_4H_9OH verwenden, liegt u.a. in dem Vorhandensein des Streutargets in überwiegend reiner atomarer Form und der Polarisierbarkeit aller Targetnukleonen, wodurch systematische Fehler deutlich reduziert werden können.
Um aber in den zur Verfügung stehenden Meßzeiten auch Daten mit einer hohen statistischen Präzision erhalten zu können, muß neben geeigneten Strahlparametern eine hohe Güte des Targets angestrebt werden, welche gegeben ist durch

$$\text{Güte} = (\,\text{Targetpolarisation}\,)^2 \times (\,\text{Targetflächendichte}\,).$$

Die Targetflächendichte bei einem Speicherzellentarget ist hierbei proportional dem Fluß polarisierter Atome aus der Quelle.

Die derzeit besten und zuverlässigsten Quellen für polarisierte Wasserstoff- und Deuteriumgastargets sind Atomstrahlquellen (*engl.*: **A**tomic **B**eam **S**ource, ABS), welche nach dem Prinzip der Elektronenspinselektion in einem System von Stern–Gerlach–Magneten und der Umbesetzung einzelner Hyperfeinstrukturzustände mittels Hochfrequenzübergängen arbeiten. Mit einer solchen ABS lassen sich für Wasserstoff bei Polarisationsgraden von bis zu 98 % Teilchenflüsse von $6,4 \cdot 10^{16}\,\mathrm{s}^{-1}$ realisieren, wodurch sich beim HERMES-Experiment eine Targetflächendichte von $7,0 \cdot 10^{13}\,\mathrm{cm}^{-2}$ ergibt [Gol 96]. Auch wenn durch den Einsatz eines neuartigen Dissoziatortypes eine Steigerung des atomaren Flußes um einen Faktor 1,7 bis 1,9 zu erwarten ist [Koc 97], so sind mit dieser Quellentechnologie sicherlich nicht Targetflächendichten von $3,0 \cdot 10^{15}\,\mathrm{cm}^{-2}$ zu erreichen, was als oberer zulässiger Grenzwert für interne Speicherringtargets genannt wird [Rit 91].

Aus diesem Grunde wurde vor ca. fünfzehn Jahren von einer Gruppe des Argonne National Laboratory / USA damit begonnen, eine alternative Technologie zur Erzeugung polarisierter Wasserstoff- und Deuteriumatomstrahlen aufzugreifen [Poe 94, Poe 95]. Mit

der Entwicklung dieser Methode zur Schaffung polarisierter Atomstrahlen beschäftigt sich seither, neben dieser Gruppe und dem Physikalischen Institut II der Universität Erlangen–Nürnberg, noch eine Gruppe an der University of Illinois / USA.
Bei diesem Quellentyp, der sogenannten lasergepumpten Spinaustauschquelle (*engl.*: **L**aser **D**riven **S**ource, LDS), erfolgt die Polarisierung der Kernspins der Wasserstoff- (H) oder Deuterium- (D) Atome in einem mehrstufigen Prozeß, an dessen Anfang die Elektronenspinpolarisierung von Alkalimetallatomen durch optisches Pumpen mit einem leistungsstarken Laser steht. Durch Spinaustauschstöße dieser Alkaliatome mit H-/D-Atomen erfolgt ein Übertrag der Elektronenspinpolarisation vom Alkaligas auf die Targetatome und durch Spinaustauschstöße der polarisierten H-/D-Atome untereinander wird eine Polarisierung der Kernspins bewirkt. Mit dieser Technik können atomare Flüsse erreicht werden, die mehr als eine Größenordnung über denen herkömmlicher Atomstrahlquellen liegen [Ste 95a].

Um die Güte eines auf diese Weise erzeugten Targets berechnen und mit den Werten einer ABS vergleichen zu können, müssen aber neben verschiedenen Randbedingungen, wie Betriebstemperatur oder Strahlverunreinigung, insbesondere der Dissoziationsgrad und die Polarisationen des in die Speicherzelle injizierten Atomstrahls sehr genau bekannt sein. Entscheidend ist in diesem Zusammenhang auch der Nachweis des sogenannten Spintemperaturgleichgewichtes, da nur beim Vorhandensein dieses Gleichgewichtszustandes der maximale Kernspinpolarisationsgrad erreicht wird. Es ist daher wichtig, schon in der Entwicklungsphase der Quelle über ein leistungsfähiges Polarimeter zu verfügen, um diese Parameter in einem kurzen Zeitraum und mit hoher Genauigkeit messen zu können und um die unterschiedlichen Effekte innerhalb der Quelle und vor allem deren Einflüsse auf den Atomstrahl qualitativ und quantitativ bestimmen zu können.

Damit die genannten Größen in vollem Umfang ermittelt werden können, wozu den beiden US-amerikanischen Gruppen die apparative Aussstattung fehlt, wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Breit–Rabi–Polarimeter geplant und aufgebaut, mit welchem für Wasserstoff- und Deuteriumatomstrahlen sowohl der Dissoziationsgrad und die Elektronspinpolarisation, als auch die Kernspin- und im Falle von Deuterium zusätzlich die Tensorpolarisation gemessen werden können.

Struktur der Arbeit

Die Arbeit ist so gegliedert, daß zunächst in den ersten beiden Kapiteln grundlegende Begriffe zur Hyperfeinstrukturaufspaltung von Wasserstoff- und Deuteriumatomen in einem Magnetfeld und zum Funktionsprinzip einer lasergepumpten Spinaustauschquelle erläutert werden.

Im dritten Kapitel werden die verschiedenen Messungen, die mit Hilfe des Breit–Rabi–Polarimeter durchgeführt werden können, kurz vorgestellt, der experimentelle Aufbau desselben wird in dem sich anschließenden Kapitel beschrieben. Die Kapitel 5 bis 8 befassen sich ausführlicher mit den für die Polarisationsanalyse entscheidenden Komponenten des Breit–Rabi–Polarimeters (Hochfrequenzübergänge, Sechspolmagnete und Quadrupol-Massenspektrometer) und mit deren Wirkungsgraden. Der Einfluß dieser Effizienzen auf die Gesamtanalysierstärke des Breit–Rabi–Polarimeters, sowie weitere systematische und statistische Fehler werden in Kapitel 9 diskutiert, bevor im Kapitel 10 die Messungen zum Nachweis des Spintemperaturgleichgewichtes gezeigt werden. Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung und einem kurzen Ausblick in Kapitel 11.
Die Anhänge enthalten technische Daten der verwendeten Pumpen, eine maßstabsgetreue Skizze des Experimentaufbaus und einige Ergebnisse der Monte-Carlo Simulationen.

1 Hyperfeinstrukturaufspaltung in einem Magnetfeld

Unter Hyperfeinstruktur versteht man die Aufspaltungen von Energiezuständen, welche auf die Wechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten des Atomkerns und der Elektronenhülle zurückzuführen sind. Diese Wechselwirkung wird im Folgenden in Grundzügen wiedergegeben, soweit sie für das Verständnis der Arbeit notwendig ist. Eine detailliertere Beschreibung findet sich in [Bra 95, Met 95].

Für Wasserstoff- oder Deuteriumatome im $1^2s_{1/2}$-Grundzustand entfällt aufgrund des fehlenden Drehimpulses des Elektrons die Spin-Bahn-Kopplung und es findet somit eine direkte Kopplung der magnetischen Momente von Kernspin $\vec{I}$ und Elektronenspin $\vec{S}$ statt. Diese Kopplung bewirkt eine Energieaufspaltung (Hyperfeinstrukturaufspaltung) für Zustände mit einem unterschiedlichen Gesamtdrehimpuls $\vec{F} = \vec{I} + \vec{S}$.
Ohne ein äußeres Magnetfeld sind diese Zustände bezüglich ihrer magnetischen Quantenzahl m_F jeweils (2F+1)fach entartet, der relative energetische Abstand der Zustandsniveaus ist gegeben durch [May 85]

$$E_{HFS} = \Delta E_{F+1} - \Delta E_F = A(F+1) \tag{1.1}$$

und wird als Hyperfeinaufspaltungsenergie bezeichnet. ΔE_{F+1}, ΔE_F sind die magnetischen Zusatzenergien infolge der Hyperfeinwechselwirkung, die Proportionalitätskonstante A ist ein isotopenspezifischer Intervallfaktor [May 92].

Durch das Anlegen eines äußeren Magnetfeldes B wird die Entartung der Hyperfeinstrukturkomponenten aufgrund der Wechselwirkungen der einzelnen magnetischen Momente mit dem äußeren Feld aufgehoben. Hierbei muß zwischen der Aufspaltung in einem schwachen Magnetfeld (Zeeman-Bereich) und der in einem starken Feld (Paschen-Back-Bereich) unterschieden werden. Das Magnetfeld, welches dabei zur Differenzierung der beiden Bereiche zu Grunde gelegt wird, wird als kritisches Magnetfeld B_c bezeichnet und ist definiert als

$$B_c = \frac{E_{HFS}}{(g_S - g_I)\mu_B} \quad . \tag{1.2}$$

Dabei bezeichnen g_S den Elektron-g-Faktor, g_I den Kern-g-Faktor und μ_B das Bohrsche Magneton.
Im schwachen äußeren Magnetfeld ($B \ll B_c$) bleiben Kern- und Elektronenspin gekoppelt und der Effekt des äußeren Feldes kann als kleine Störung beschrieben werden. Man erhält somit den linearen Effekt der Zeeman-Aufspaltung der Hyperfeinstruktur.
Im starken Feld ($B \gg B_c$) sind die Wechselwirkungsenergien des angelegten Magnetfeldes mit dem Elektron und dem Kern des Atoms wesentlich größer als die Hyperfeinstrukturwechselwirkung, welche nun als Störung behandelt wird. Dies hat die Entkopplung von

Hüllen- und Kernspin und die unabhängige Präzession der beiden Spins um das angelegte Magnetfeld zur Folge .
Alle Größen, welche in diesem Zusammenhang charakteristisch sind für Wasserstoff und Deuterium, sind in der Tabelle 1.1 aufgeführt.

			Wasserstoff	Deuterium
Kernspin	I		$\frac{1}{2}$	1
Elektronenspin	S		$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
Gesamtdrehimpuls	F		0 , 1	$\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$
Anzahl der HFS-Zustände	$\sum_F(2F+1)$		4	6
Kern-g-Faktor	g_I		- 0,00304	- 0,00047
Elektron-g-Faktor	g_S		2,00232	2,00232
Intervallfaktor	A	[eV]	$5,878 \cdot 10^{-6}$	$9.027 \cdot 10^{-7}$
Übergangsfrequenz	$\nu_{HFS} = \frac{E_{HFS}}{h}$	[MHz]	1420,41	327,45
Kritisches Magnetfeld	B_c	[mT]	50,7	11,7

Tab. 1.1: *Charakteristische Größen für das Wasserstoff- und Deuteriumatom.*

Für den allgemeinen Fall läßt sich die Magnetfeldabhängigkeit der Aufspaltungen sowohl im Zeeman-, als auch im Paschen-Back-Bereich explizit berechnen, allerdings muß der Übergangsbereich meist mit Hilfe komplizierter Näherungen beschrieben werden. Lediglich für den Spezialfall $F = I \pm \frac{1}{2}$ kann die Feldabhängigkeit der einzelnen Terme in geschlossener Form angeben werden. Die Aufspaltungsenergie läßt sich dann mit Hilfe der Breit-Rabi-Formel berechnen [Bre 31, May 85]:

$$E(F = I \pm \frac{1}{2}, m_F) = -\frac{A}{4} + m_F g_I \mu_K B \pm \frac{A(I+\frac{1}{2})}{2}\sqrt{1 + \frac{4m_F}{2I+1}\frac{B}{B_c} + \frac{B^2}{B_c^2}} \quad . \qquad (1.3)$$

Der mittlere Term in der Formel (1.3) berücksichtigt die Wechselwirkung des Kernspins mit dem äußeren Magnetfeld und kann aufgrund des kleinen Kernmagnetons μ_K für äußere Magnetfelder bis zu etwa 30 T vernachlässigt werden. Unter Berücksichtigung dieser Näherung erhält man aus (1.3) für Wasserstoff und Deuterium folgende Beziehungen für die Aufspaltungsenergien:

$$E^H(F = I \pm \frac{1}{2}, m_F) = E^H_{HFS} \cdot \left(-\frac{1}{4} \pm \frac{1}{2}\sqrt{1 + 2m_F\frac{B}{B_c} + \frac{B^2}{B_c^2}}\right) \quad ,$$

$$E^D(F = I \pm \frac{1}{2}, m_F) = E^D_{HFS} \cdot \left(-\frac{1}{6} \pm \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{4m_F}{3}\frac{B}{B_c} + \frac{B^2}{B_c^2}}\right) \quad . \qquad (1.4)$$

1.1 Hyperfeinstruktur bei Wasserstoffatomen

Für die vier möglichen Komponenten des Grundzustandes des Wasserstoffatoms, welche in der Reihenfolge ihrer Energie von oben nach unten durchnummeriert werden, erhält man unter Verwendung der Formel (1.4) und der Defintion $x = \frac{B}{B_c^H}$ folgende Energieeigenwerte.

$$\begin{aligned} E_1^H &= E_{HFS}^H \cdot \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{2} x \right) \quad , \\ E_2^H &= E_{HFS}^H \cdot \left(-\frac{1}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{1+x^2} \right) \quad , \\ E_3^H &= E_{HFS}^H \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{2} x \right) \quad , \\ E_4^H &= E_{HFS}^H \cdot \left(-\frac{1}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{1+x^2} \right) \quad . \end{aligned} \tag{1.5}$$

Der Verlauf dieser Energieeigenwerte in Abhängigkeit von einem äußeren Magnetfeld ist im Breit-Rabi-Diagramm in Abbildung 1.1 dargestellt. Als Energieeinheit wurde die Hyperfeinaufspaltungsenergie im Wasserstoffatom E_{HFS}^H gewählt und das Magnetfeld ist in Einheiten des kritischen Magnetfeldes B_c^H angegeben.

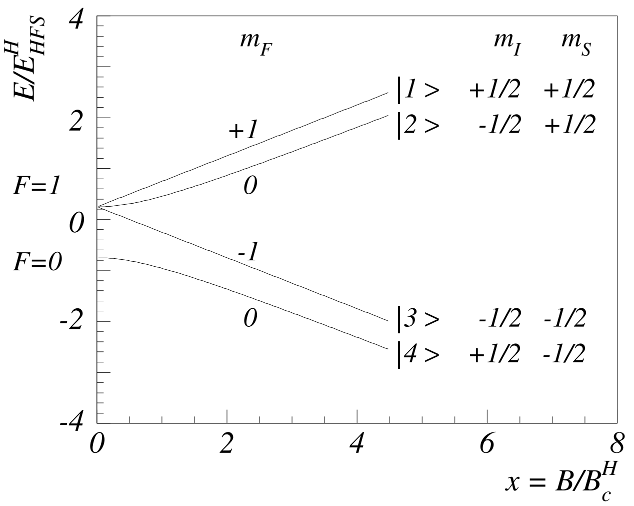

Abb. 1.1:
Energieeigenwerte zur Hyperfeinstrukturaufspaltung eines Wasserstoffatoms in einem äußeren Magnetfeld (Breit-Rabi-Diagramm nach [Hae 67]). E_{HFS}^H ist die Hyperfeinaufspaltungsenergie ohne äußeres Feld, B_c^H ist das kritische Magnetfeld für Wasserstoff, m_I (m_S) und m_F sind die magnetischen Quantenzahlen des Kern- (Elektronen-) Spins und des Gesamtdrehimpulses.

Für die Berechnung der Kern- und Elektronenspinpolarisation eines Ensembles von Wasserstoffatomen ist es notwendig, die Erwartungswerte von Kern- und Elektronenspinpolarisation der vier Hyperfeinstrukturzustände zu kennen. Hierfür werden die Zustände $|F, m_F\rangle$ nach Produkten der Spinwellenfunktionen von Proton $|m_I\rangle = |\pm\frac{1}{2}\rangle$ und Elektron $|m_S\rangle = |\pm\frac{1}{2}\rangle$ entwickelt, da diese eine vom äußeren Magnetfeld unabhängige Basis zur Beschreibung darstellen.
Man erhält folgende Form der vier Eigenzustände, welche in allen Magnetfeldern gültig

ist, für welche auch die Näherungen (1.4) zulässig sind:

$$
\begin{aligned}
|i\rangle &= |\ F\ ,\ m_F\ \rangle = & & |\ m_S\ ,\ m_I\ \rangle \quad , \\
|1\rangle &= |F=1, m_F=+1\rangle = & & |+\tfrac{1}{2}\ ,\ +\tfrac{1}{2}\rangle \quad , \\
|2\rangle &= |F=1, m_F=\ \ 0\rangle = & & \cos\theta\cdot|+\tfrac{1}{2}\ ,\ -\tfrac{1}{2}\rangle + \sin\theta\cdot|-\tfrac{1}{2}\ ,\ +\tfrac{1}{2}\rangle \quad , \\
|3\rangle &= |F=1, m_F=-1\rangle = & & |-\tfrac{1}{2}\ ,\ -\tfrac{1}{2}\rangle \quad , \\
|4\rangle &= |F=0, m_F=\ \ 0\rangle = & & \cos\theta\cdot|-\tfrac{1}{2}\ ,\ +\tfrac{1}{2}\rangle - \sin\theta\cdot|+\tfrac{1}{2}\ ,\ -\tfrac{1}{2}\rangle \quad .
\end{aligned}
\tag{1.6}
$$

Der Mischungswinkel θ ist magnetfeldabhängig und kann durch folgende Gleichung parametrisiert werden:

$$
\theta = \frac{1}{2}\arctan\frac{B_c}{B} \quad \overset{B\to\infty}{\Longrightarrow} 0 \quad , \quad \overset{B\to 0}{\Longrightarrow} \frac{\pi}{4} \quad , \tag{1.7}
$$

wobei der Hauptwert des arctan zu verwenden ist. Für die einzelnen Hyperfeinstrukturzustände ergeben sich unter Verwendung der Darstellung (1.6) folgende Erwartungswerte für die Polarisationen von Elektronenspin P_e und Kernspin P_z:

$$
\begin{aligned}
\langle 1|P_e|1\rangle &= +1 & \langle 1|P_z|1\rangle &= +1 \quad , \\
\langle 2|P_e|2\rangle &= +\cos 2\theta & \langle 2|P_z|2\rangle &= -\cos 2\theta \quad , \\
\langle 3|P_e|3\rangle &= -1 & \langle 3|P_z|3\rangle &= -1 \quad , \\
\langle 4|P_e|4\rangle &= -\cos 2\theta & \langle 4|P_z|4\rangle &= +\cos 2\theta \quad .
\end{aligned}
\tag{1.8}
$$

Diese Polarisationserwartungswerte eines Wasserstoffatoms im Grundzustand sind in Abbildung 1.2 als Funktion eines äußeren Magnetfeldes aufgetragen.

Mit der Kenntnis der in (1.8) angegebenen Werte erhält man für die Protonen- und Elektronenspinpolarisation einer Probe von Wasserstoffatomen

$$
P_{e,z} = \sum_{i=1}^{4} n_i \cdot \langle i|P_{e,z}|i\rangle \quad . \tag{1.9}
$$

Die Koeffizienten n_i geben die Wahrscheinlichkeit an, mit welcher der Zustand $|i\rangle$ in dem Ensemble vorzufinden ist. Sie werden als relative Besetzungszahlen bezeichnet und sind die Meßgrößen des Breit–Rabi–Polarimeter. Für sie gilt die Normierungsbedingung

$$
\sum_{i=1}^{4} n_i = 1 \quad . \tag{1.10}
$$

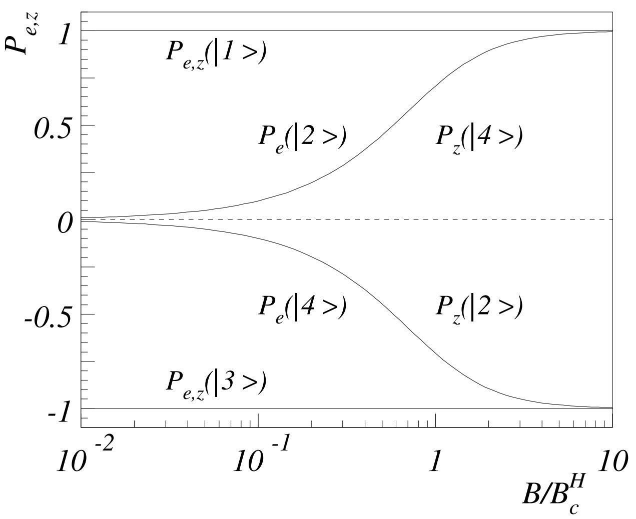

Abb. 1.2:
Erwartungswerte für die Polarisationen von Kernspin P_z und Elektronenspin P_e der vier Hyperfeinstrukturzustände eines Wasserstoffatoms im Grundzustand als Funktion des äußeren Magnetfeldes B.

Als Funktion der relativen Besetzungszahlen ergibt sich für die Elektronen- und Kernspinpolarisation in Abhängigkeit von einem äußeren Magnetfeld:

$$\begin{aligned}
P_e &= n_1 - n_3 + (n_2 - n_4) \cdot \cos 2\theta \quad , \\
&\stackrel{B\to\infty}{\Longrightarrow} n_1 + n_2 - n_3 - n_4 \quad , \\
&\stackrel{B\to 0}{\Longrightarrow} n_1 - n_3 \quad , \\
P_z &= n_1 - n_3 + (n_4 - n_2) \cdot \cos 2\theta \quad , \\
&\stackrel{B\to\infty}{\Longrightarrow} n_1 + n_4 - n_3 - n_2 \quad , \\
&\stackrel{B\to 0}{\Longrightarrow} n_1 - n_3 \quad .
\end{aligned} \tag{1.11}$$

1.2 Hyperfeinstruktur bei Deuteriumatomen

Der Unterschied in der Hyperfeinstrukturaufspaltung eines Deuteriumatoms im Grundzustand zu der des Wasserstoffatoms wird im wesentlichen durch den abweichenden Kernspin des Deuterons $I = 1$ hervorgerufen. Aufgrund der Kopplung mit dem Hüllenelektron zu einem Gesamtdrehimpuls $F = 3/2$ oder $F = 1/2$ ergeben sich sechs mögliche Hyperfeinstrukturzustände für das Deuteriumatom. Ohne ein äußeres Magnetfeld ist der Zustand zu $F = 3/2$ vierfach und der zum Gesamtdrehimpuls $F = 1/2$ zweifach entartet. Für diese sechs Zustände, welche analog zum Wasserstoffatom ihrer Energie entsprechend von oben nach unten durchnummeriert werden, ergeben sich nach (1.4) folgende Energieeigenwerte:

$$\begin{aligned}
E_1^D &= E_{HFS}^D \cdot \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{2} x \right) \quad , \\
E_2^D &= E_{HFS}^D \cdot \left(-\frac{1}{6} + \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{2}{3} x + x^2} \right) \quad ,
\end{aligned}$$

$$E_3^D = E_{HFS}^D \cdot \left(-\frac{1}{6} + \frac{1}{2}\sqrt{1 - \frac{2}{3}x + x^2}\right) \quad ,$$
$$E_4^D = E_{HFS}^D \cdot \left(\ \frac{1}{3} - \frac{1}{2}x\right) \quad ,$$
$$E_5^D = E_{HFS}^D \cdot \left(-\frac{1}{6} - \frac{1}{2}\sqrt{1 - \frac{2}{3}x + x^2}\right) \quad ,$$
$$E_6^D = E_{HFS}^D \cdot \left(-\frac{1}{6} - \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{2}{3}x + x^2}\right) \quad . \tag{1.12}$$

In Abbildung 1.3 ist der Verlauf dieser Energieeigenwerte in Abhängigkeit von einem äußeren Magentfeld dargestellt. Die sechs Eigenzustände des Deuteriumatoms können in

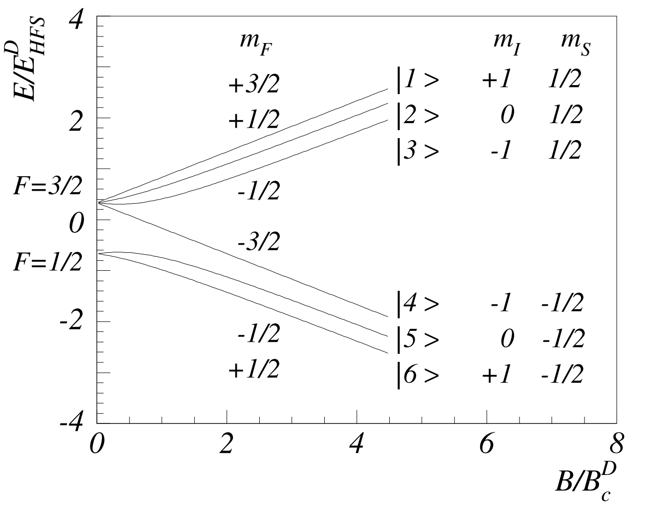

Abb. 1.3:
Energieeigenwerte zur Hyperfeinstrukturaufspaltung eines Deuteriumatoms in einem äußeren Magnetfeld (Breit-Rabi-Diagramm nach [Hae 67]). E_{HFS}^D *ist die Hyperfeinaufspaltungsenergie ohne äußeres Feld,* B_c^D *ist das kritische Magnetfeld für Deuterium,* m_I (m_S) *und* m_F *sind die magnetischen Quantenzahlen des Kern- (Elektronen-) Spins und des Gesamtdrehimpulses.*

einer vom angelegten Magnetfeld unabhängigen Form folgendermaßen angegeben werden:

$$|i\rangle = |\ F\ ,\ m_F\ \rangle = \quad |\, m_S\ ,\ m_I \rangle \quad ,$$
$$|1\rangle = |F = \frac{3}{2}, m_F = +\frac{3}{2}\rangle = \quad |+\frac{1}{2}\ ,\ +1\rangle \quad ,$$
$$|2\rangle = |F = \frac{3}{2}, m_F = +\frac{1}{2}\rangle = \cos\theta_+ \cdot |+\frac{1}{2}\ ,\ \ 0\rangle + \sin\theta_+ \cdot |-\frac{1}{2}\ ,\ +1\rangle \quad ,$$
$$|3\rangle = |F = \frac{3}{2}, m_F = -\frac{1}{2}\rangle = \cos\theta_- \cdot |+\frac{1}{2}\ ,\ -1\rangle + \sin\theta_- \cdot |-\frac{1}{2}\ ,\ \ 0\rangle \quad ,$$
$$|4\rangle = |F = \frac{3}{2}, m_F = -\frac{3}{2}\rangle = \quad |-\frac{1}{2}\ ,\ -1\rangle \quad ,$$
$$|5\rangle = |F = \frac{1}{2}, m_F = -\frac{1}{2}\rangle = \cos\theta_- \cdot |-\frac{1}{2}\ ,\ \ 0\rangle - \sin\theta_- \cdot |+\frac{1}{2}\ ,\ -1\rangle \quad ,$$
$$|6\rangle = |F = \frac{1}{2}, m_F = +\frac{1}{2}\rangle = \cos\theta_+ \cdot |-\frac{1}{2}\ ,\ +1\rangle - \sin\theta_+ \cdot |+\frac{1}{2}\ ,\ \ 0\rangle \quad . \tag{1.13}$$

Die magnetfeldabhängigen Mischungswinkel $\theta_{\pm}$, von welchen wiederum nur der Hauptwert des arctan berücksichtigt wird, werden definiert durch:

$$
\begin{aligned}
\theta_{+} &= \frac{1}{2}\arctan\frac{\sqrt{8}}{3\frac{B_c}{B}+1} && \overset{B\to\infty}{\Longrightarrow} 0 \quad , \\
\theta_{-,B<\frac{B_c}{3}} &= \frac{1}{2}\arctan\frac{\sqrt{8}}{3\frac{B_c}{B}-1}+\frac{\pi}{2} \quad , \\
\theta_{-,B=\frac{B_c}{3}} &= \frac{\pi}{4} \quad , \\
\theta_{-,B>\frac{B_c}{3}} &= \frac{1}{2}\arctan\frac{\sqrt{8}}{3\frac{B_c}{B}-1} && \overset{B\to\infty}{\Longrightarrow} 0 \quad .
\end{aligned}
\tag{1.14}
$$

Mit Hilfe dieser sechs Zustände lassen sich wie im Falle des Wasserstoffatoms die Erwartungswerte für die Polarisationen von Elektronen- und Kernspin einer Probe von Deuteriumatomen berechnen. Diese sind in (1.15) angeben, ihre Abhängigkeit von einem angelegten Magnetfeld ist in Abbildung 1.4 aufgezeigt.

$$
\begin{aligned}
\langle 1|P_e|1\rangle &= +1 & \langle 1|P_z|1\rangle &= +1 \quad , \\
\langle 2|P_e|2\rangle &= +\cos 2\theta_{+} & \langle 2|P_z|2\rangle &= +\tfrac{1}{2}\left(1-\cos 2\theta_{+}\right) \quad , \\
\langle 3|P_e|3\rangle &= +\cos 2\theta_{-} & \langle 3|P_z|3\rangle &= -\tfrac{1}{2}\left(1+\cos 2\theta_{-}\right) \quad , \\
\langle 4|P_e|4\rangle &= -1 & \langle 4|P_z|4\rangle &= -1 \quad , \\
\langle 5|P_e|5\rangle &= -\cos 2\theta_{-} & \langle 5|P_z|5\rangle &= -\tfrac{1}{2}\left(1-\cos 2\theta_{-}\right) \quad , \\
\langle 6|P_e|6\rangle &= -\cos 2\theta_{+} & \langle 6|P_z|6\rangle &= +\tfrac{1}{2}\left(1+\cos 2\theta_{+}\right) \quad .
\end{aligned}
\tag{1.15}
$$

Da der Deuteriumkern aufgrund seines Spins $I = 1$ in einem Magnetfeld drei Einstellmöglichkeiten besitzt, ist die Angabe von nur einer Polarisation nicht ausreichend für eine eindeutige Festlegung der Besetzungswahrscheinlichkeiten der drei Quantenzustände. Aus diesem Grund wird für eine vollständige Beschreibung einer Teilchenprobe mit Spin 1-Teilchen eine zusätzliche Polarisation, die sogenannte Tensorpolarisation P_{zz}, benötigt. Diese beschreibt den Grad der Ausrichtung der Spins entlang der Quantisierungsachse. Die Berechnung der Erwartungswerte für die Tensorpolarisation erfolgt vergleichbar zu der für die Vektorpolarisation P_z aus den Basiszuständen (1.13):

$$
\begin{aligned}
\langle 1|P_{zz}|1\rangle &= +1 \quad , & \langle 4|P_{zz}|4\rangle &= +1 \quad , \\
\langle 2|P_{zz}|2\rangle &= -\tfrac{1}{2}\left(1+3\cos 2\theta_{+}\right) & \langle 5|P_{zz}|5\rangle &= -\tfrac{1}{2}\left(1+3\cos 2\theta_{-}\right) \quad , \\
\langle 3|P_{zz}|3\rangle &= -\tfrac{1}{2}\left(1-3\cos 2\theta_{-}\right) & \langle 6|P_{zz}|6\rangle &= -\tfrac{1}{2}\left(1-3\cos 2\theta_{+}\right) \quad .
\end{aligned}
\tag{1.16}
$$

Die graphische Darstellung von (1.16) in Abhängigkeit von einem angelegten Magnetfeld erfolgt in Abbildung 1.5.

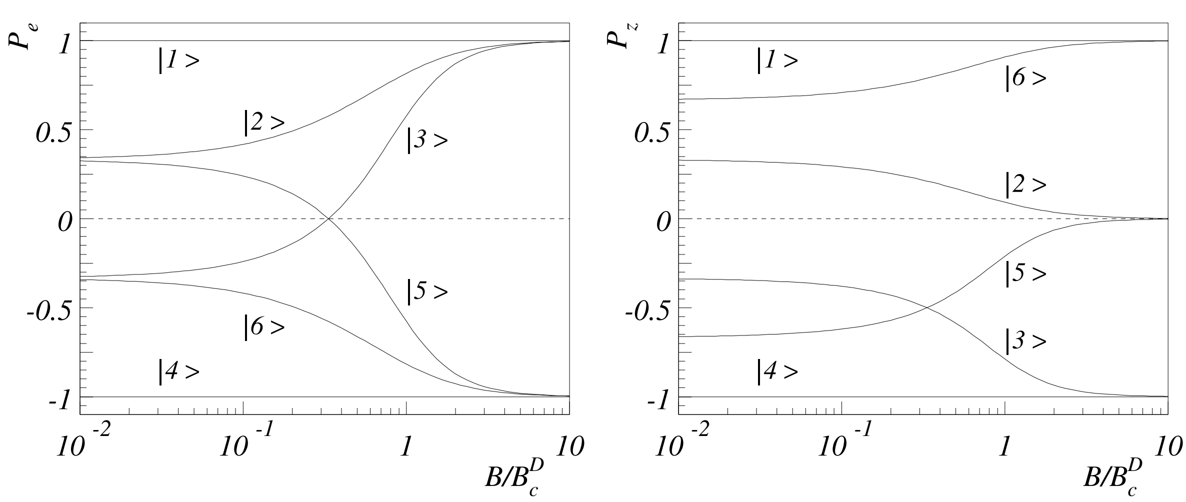

Abb. 1.4: *Erwartungswerte für die Polarisationen von Elektronenspin P_e und Kernspin P_z der sechs Hyperfeinstrukturzustände eines Deuteriumatoms im Grundzustand als Funktion des äußeren Magnetfeldes B.*

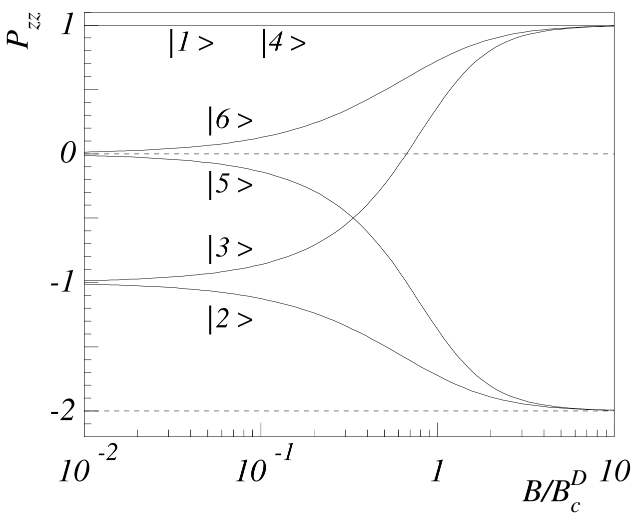

Abb. 1.5: *Erwartungswerte der Tensorpolarisation für die Hyperfeinstrukturzustände von Deuterium in Abhängigkeit von einem äußeren Magnetfeld B.*

Man erhält nach (1.9), (1.15) und (1.16) die Elektronenspin-, Kernspin- und Tensorpolarisation in Abhängigkeit von einem äußeren Magnetfeld:

$$
\begin{aligned}
P_e &= n_1 - n_4 + (n_2 - n_6)\cos 2\theta_+ + (n_3 - n_5)\cos 2\theta_- \quad , \\
&\overset{B\to\infty}{\Longrightarrow} n_1 + n_2 + n_3 - n_4 - n_5 - n_6 \quad , \\
&\overset{B\to 0}{\Longrightarrow} n_1 - n_4 + \tfrac{1}{3}(n_2 - n_6) - \tfrac{1}{3}(n_3 - n_5) \quad ,
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
P_z &= n_1 - n_4 + n_2 \sin^2\theta_+ - n_3 \cos^2\theta_- - n_5 \sin^2\theta_- + n_6 \cos^2\theta_+ \quad , \\
&\overset{B\to\infty}{\Longrightarrow} n_1 + n_6 - n_3 - n_4 \quad , \\
&\overset{B\to 0}{\Longrightarrow} n_1 - n_4 + \tfrac{1}{3}(n_2 - n_3) - \tfrac{2}{3}(n_- n_6) \quad , \\
P_{zz} &= n_1 + n_4 + n_2(\sin^2\theta_+ - 2\cos^2\theta_+) + n_3(\cos^2\theta_- - 2\sin^2\theta_-) + \\
&\qquad\qquad n_5(\sin^2\theta_- - 2\cos^2\theta_-) + n_6(\cos^2\theta_+ - 2\sin^2\theta_+) \quad , \\
&\overset{B\to\infty}{\Longrightarrow} n_1 + n_3 + n_4 + n_6 - 2n_2 - 2n_5 \quad , \\
&\overset{B\to 0}{\Longrightarrow} n_1 + n_4 - n_2 - n_3 \quad .
\end{aligned}
\tag{1.17}
$$

2 Die lasergepumpte Spinaustauschquelle

Das Prinzip einer lasergepumpten Spinaustauschquelle (*engl.* **L**aser **D**riven **S**ource, LDS) basiert auf dem Polarisationsübertrag von optisch gepumpten d.h. elektronenspinpolarisierten Alkalimetallatomen auf Wasserstoff- oder Deuteriumatome durch sogenannte Spinaustauschstöße.
Die Vorgänge in einer Spinaustauschquelle werden am Beispiel von Wasserstoff beschrieben, da der überwiegende Teil der Messungen hiermit durchgeführt wurde. Die Darstellung im Falle von Deuterium würde analog erfolgen. Als Alkalimetall wurde bei der in Erlangen aufgebauten Quelle Kalium (K) eingesetzt. Die Verwendung von Rubidium als Pumpgas ist theoretisch zwar möglich, die Einsetzbarkeit wird derzeit aber noch untersucht [Nag 98b, Nas 98].

2.1 Theoretische Beschreibung der Polarisationserzeugung

In Abbildung 2.1 sind die in einer LDS ablaufenden Prozesse schematisch dargestellt.
Am Anfang der Polarisationserzeugung steht die Dissoziation von molekularem zu atomaren Wasserstoff in einem Dissoziator (1.). Der dissoziierte Wasserstoff gelangt anschließend in einen Bereich der Quelle, in die sogenannten Pumpzelle, in welcher sich das Kaliumgas befindet und mit Hilfe eines Hochleistungslasers optisch gepumpt und somit elektronenspinpolarisiert wird (2.). Die Elektronenspinpolarisation wird hierbei durch vertikale Pfeile auf den Kreissymbolen kenntlich gemacht. Der Austausch der Hüllenelektronen bei Spinaustauschstößen von Wasserstoffatomen mit spinpolarisierten Kaliumatomen (3.) resultiert in einer Übertragung der Elektronenspinpolarisation von Kalium auf Wasserstoff. Durch Spinaustauschstöße hauptsächlich zwischen hüllenspinpolarisierten Wasserstoffatomen (4.) findet durch Hyperfeinwechselwirkungen eine Polarisierung der Kernspins statt, welche durch horizontale Pfeile in den Kreise angedeutet ist. Neben diesen Vorgängen gibt es noch eine Reihe von Effekten in der Quelle, welche eine depolarisierende Wirkung haben. Hiervon ist in der Abbildung 2.1 lediglich die Wandstoßdepolarisation (5.) gezeigt, zusätzlich müssen aber noch die Depolarisation durch Stöße mit unpolarisierten Atomen oder Molekülen, der Strahlungseinfang beim optischen Pumpen des Kaliums [Tup 86, Tup 87, And 92] und, da es sich um ein nicht abgeschlossenes Volumen handelt, die Depolarisation durch den Fluß genannt werden. Letzteres wird durch das erwünschte Ausströmen der polarisierten Wasserstoffatome in Richtung Polarimeter oder Target (durch $\downarrow\downarrow$ symbolisiert) hervorgerufen. Innerhalb der Pumpzelle werden diese Atome jedoch durch unpolarisierte Gasatome ersetzt.

Sämtliche der oben genannten (Stoß-) Prozesse führen zu einer zeitlichen Änderung der

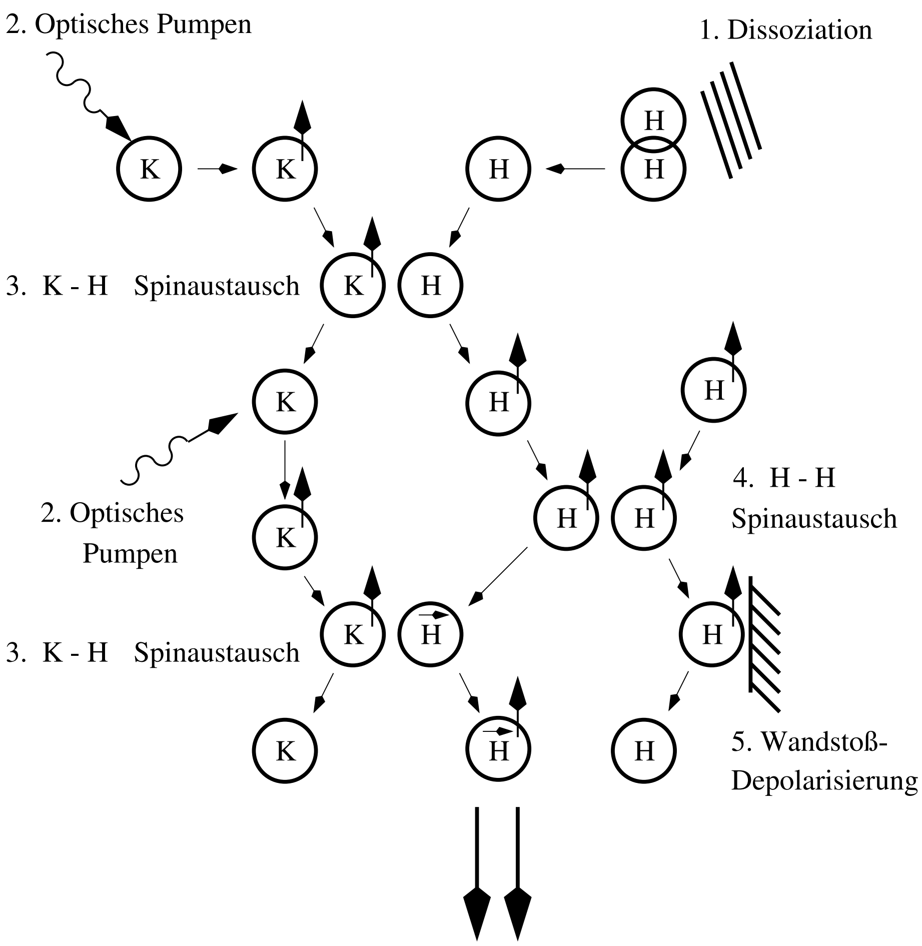

Abb. 2.1: *Schematische Darstellung der Polarisationserzeugung in einer lasergepumpten Spinaustauschquelle. Vertikale Pfeile auf den Kreissymbolen (↑) deuten eine Elektronenspinpolarisation an, horizontale (→) stehen für eine Polarisation des Kernspins und (↓↓) kennzeichnet das Ausströmen der polarisierten Atome in Richtung des Polarimeters.*

Besetzungszahlen aller Hyperfeinstrukturzustände. Mit Hilfe von Bilanzgleichungen kann diese zeitliche Änderung beschrieben werden [And 93, Ste 95b, Kla 96], und die Abläufe in einer LDS lassen sich auf diese Weise simulieren und auch optimieren. Bei diesen Berechnungen werden folgende Vorgänge innerhalb der Pumpzelle berücksichtigt [Ste 95a]:

- Spinaustauschstöße von Kalium mit Wasserstoff.
- Spinaustauschstöße von Wasserstoff mit Wasserstoff.
- Depolarisierung von Kalium oder Wasserstoff aufgrund des Flusses.
- Depolarisierung von Kalium oder Wasserstoff aufgrund von Wandstößen.

- Optisches Pumpen von Kalium.

Die Anwesenheit von molekularem Wasserstoff aufgrund von Rekombination oder nicht vollständiger Dissoziation und daraus resultierende Effekte werden aber ebenso nicht in die Simulationen mit einbezogen, wie der Einfluß des Kaliumkernspins.

2.2 Experimenteller Aufbau der Spinaustauschquelle

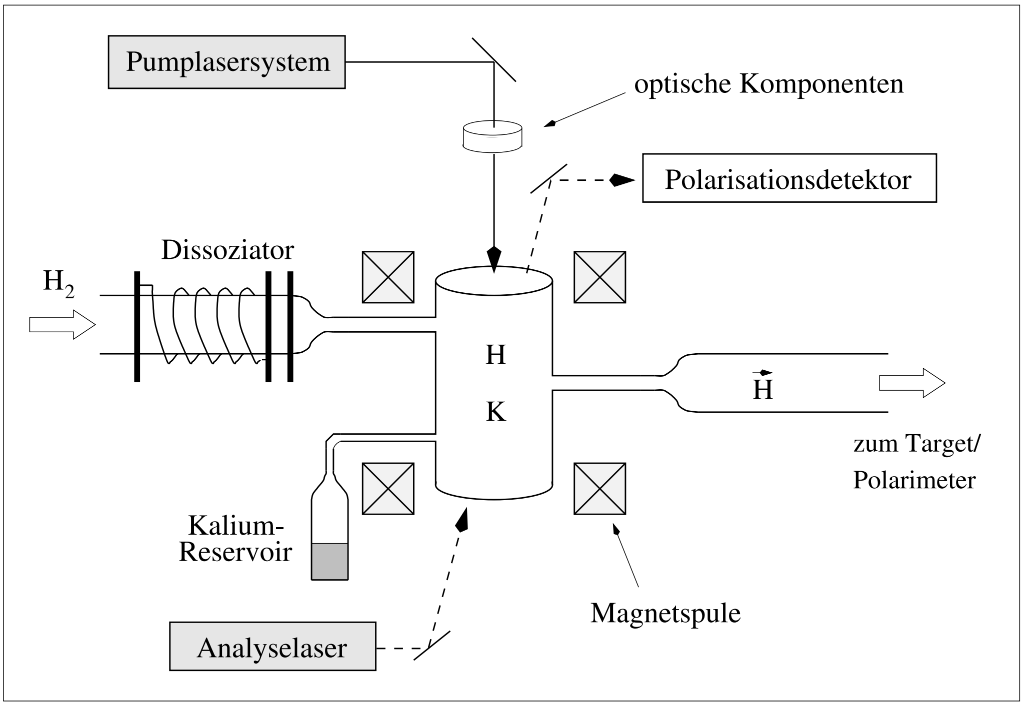

Abb. 2.2: *Schematische Darstellung der optisch gepumpten Spinaustauschquelle.*

Die Abbildung 2.2 zeigt schematisch die wichtigsten Komponenten der in Erlangen aufgebauten lasergepumpten Spinaustauschquelle, welche sich untergliedern lassen in:

- Das Leistungslasersystem, bestehend aus einem Titansaphir-Ringlaser, welcher von einem Argonionenlaser gepumpt wird, zum optischen Pumpen des Kaliumgases. Bei einer durchschnittlichen Leistung des Argonionenlaser von 20 W können Ausgangsleistungen des Titansaphirlasers von ~ 3 W erreicht werden. Durch eine aktive Regelung wurden die Wellenlängenschwankungen auch im Dauerbetrieb auf Werte von $\Delta\lambda < 0,001\,nm$ reduziert [Kil 97]. Die verschiedenen optischen Komponenten bewirken eine Polarisation des Laserlichtes, eine Strahlaufweitung auf die Abmessungen der Pumpzelle und eine Anpassungung der Laserlinie an das Absorptionsspektrum von Kalium.

- Die Glasapparatur mit Gaseinlaß, Dissoziator, Kalium-Reservoir, Pumpzelle und Austrittsrohr.
  Durch Massenflußregler wird der Zustrom an Wasserstoffmolekülen kontrolliert und gesteuert [Sch], wodurch nahezu konstante Drücke im Bereich des Dissoziatorrohres erreicht werden. Die Dissoziation erfolgt durch eine Hochfrequenz-Entladung bei 13,56 MHz und einer Leistung von etwa 40 W [Koc 95]. Über Kapillaren definierten Leitwertes gelangen die Wasserstoffatome, wie auch die Kaliumatome des Alkalimetallreservoirs, in die Pumpzelle, in welcher die in Kapitel 2.1 beschriebene Polarisation des Wasserstoffs stattfindet. Nach einer Aufenthaltsdauer von einigen $10\,\mu s$ gelangen die Gasatome durch eine weitere Kapillare in das Austrittsrohr und nachfolgend in das Target oder das Breit–Rabi–Polarimeter.

- Das Faradaypolarimeter [Bec 95, Ste 97a] zur Dichte-, Polarisations- und Relaxationszeitmessung an Kalium.
  Dieses besteht aus einem Halbleiterlaser, welcher in einem externen Resonator betrieben wird [Nag 95] und aus einem Detektor, dessen wichtigste Komponenten ein Glan-Thomson-Prisma und zwei Photodioden sind. Die genannten Parameter lassen sich unter Verwendung der Lock-In Technik in Echtzeit bestimmen. Das optische Pumpen des Kaliumgases wird durch diese Messungen nicht beeinflusst.

Für die maximal erreichbare Güte einer LDS ist es mit ausschlaggebend, inwieweit die verschiedenen Vorgänge, welche eine Depolarisierung oder Rekombination der Wasserstoffatome bewirken (siehe Kapitel 2.1), reduziert werden können.
Aus diesem Grund wird mittels eines Dipolmagneten über der Pumpzelle ein Magnetfeld von 100 – 150 mT erzeugt, wodurch der Effekt des Strahlungseinfangs minimiert werden kann. Durch die Beschichtung der Pumpzelle und des Austrittsrohres mit einer Kombination aus Dimethyldichlorosilan und Trimethylchlorosilan („Drifilm“, [Tho 87]) läßt sich die Wandstoßrelaxation deutlich vermindern [Swe 88, Fed 97] und durch das Erwärmen der beiden letztgenannten Abschnitte der Glasapparatur auf etwa 240 °C wird eine Kondensation der Kaliumatome und damit eine Verschlechterung der Oberfläche verhindert.
Zur Untersuchung weiterer möglicher depolarisierender Effekte, wie sie zum Beispiel durch die Beimischung von Stickstoff (aufgrund von Undichtigkeiten im Vakuumsystem) oder durch die geregelte Zugabe von Sauerstoff (zur Erhöhung und Stabilisierung des Dissoziationsgrades) zum Atomstrahlgas entstehen können, existiert ein separater Aufbau mit optischer Pumpzelle [Nag 98a, Nas 98, Nag 98b].
Um auch den Einfluß unterschiedlicher Parameter (z.B. Sauerstoffgehalt im Dissoziator, Kühlung des Dissoziatorrohres) auf den Dissoziationsgrad bestimmen zu können und um die Rekombinationsrate in der Pumpzelle von der im Dissoziatorrohr zu unterscheiden, wird derzeit ein Monitor aufgebaut, welcher eine Lichtanalyse des Plasmas und damit

eine Dissoziationsgradbestimmung unabhängig vom Breit–Rabi–Polarimeter ermöglicht [Nag 98b, Sch, Koc 95].

2.3 Das Spintemperaturgleichgewicht

Neben der Optimierung der Relaxationszeiten, wie in Kapitel 2.2 beschrieben, ist die Anzahl der Spinaustauschstöße zwischen den elektronenspinpolarisierten Wasserstoff- (bzw. Deuterium-) Atomen entscheidend für die maximal erreichbare Kernspinpolarisation.
Dieser maximale Polarisationsgrad liegt dann vor, wenn sich das System nach einer genügenden Anzahl von Austauschstößen in einem Gleichgewichtszustand befindet. Man bezeichnet diesen Zustand als Spintemperaturgleichgewicht [And 60, Wal 93] und er kann durch den Spintemperaturparameter β charakterisiert werden. Im Spintemperaturgleichgewicht entspricht die Besetzung der Hyperfeinstrukturunterzustände eines Ensembles von Wasserstoff- oder Deuteriumatomen der wahrscheinlichsten Verteilung für einen gegebenen Erwartungswert der magnetischen Quantenzahl des Gesamtdrehimpulses $\langle m_F \rangle$.
Für den Fall von Spintemperaturgleichgewicht genügen die relativen Besetzungszahlen folgender Bedingung:

$$n(m_F) = N \cdot e^{\beta m_F} \quad , \quad \text{mit} \quad \begin{cases} \frac{1}{N} = \sum_{i=1}^{4} n_i & \text{für Wasserstoff} \\ \frac{1}{N} = \sum_{i=1}^{6} n_i & \text{für Deuterium.} \end{cases} \tag{2.1}$$

Kann für ein System Spintemperaturgleichgewicht angenommen werden, so folgt aus (2.1) für Wasserstoff $n_2 = n_4$ und im Falle von Deuterium $n_2 = n_6$ und $n_3 = n_5$.
Unter Verwendung der Gleichungen (1.11) läßt sich für Wasserstoff die Abhängigkeit von Elektronen- und Kernspinpolarisation vom Spintemperaturparameter β berechnen. Aufgrund der Gleichbesetzung der Zustände n_2 und n_4 ergibt sich hieraus

$$P_e = P_z \quad . \tag{2.2}$$

In der Abbildung 2.3 sind sowohl die relativen Besetzungszahlen, als auch die Polarisationswerte in Abhängigkeit von β aufgetragen. Ein positives (negatives) β entspricht hierbei dem optischen Pumpen mit rechts- (links-) zirkular polarisiertem Licht.

Für Deuterium läßt sich mit (1.17) ebenfalls die Abhängigkeit sämtlicher Polarisationen vom Spintemperaturparameter β ermitteln. Diese ist im linken Teil der Abbildung 2.4 gezeigt. Man erkennt, daß im Falle von Deuterium der Betrag der Kernspinpolarisation immer größer ist als der der Elektronenspinpolarisation und daß die Tensorpolarisation ausschließlich positiv ist. Zwischen Kern-, Tensorpolarisation und der Elektronenspinpolarisation existiert ein funktioneller Zusammenhang, welcher in den Gleichungen (2.3)

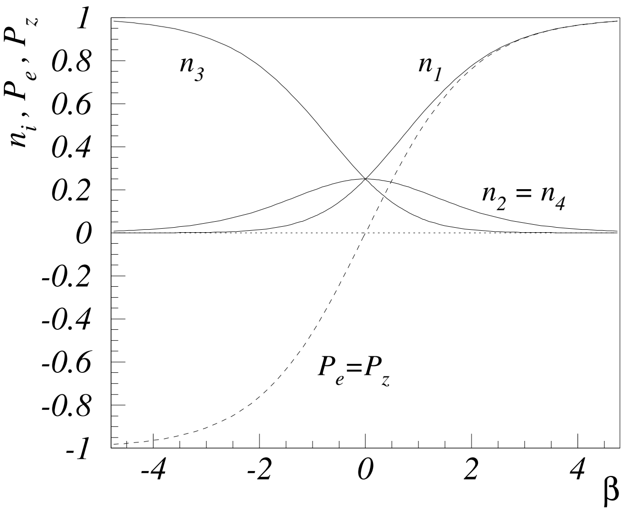

Abb. 2.3:
Abhängigkeit der relativen Besetzungszahlen n_i, der Elektronen- (P_e) und der Kernspinpolarisation (P_z) vom Spintemperaturparameter β für Wasserstoff.

wiedergegeben und im rechten Teil der Abbildung 2.4 dargestellt ist.

$$P_z = \frac{4 \cdot P_e}{3 + P_e^2}$$

$$P_{zz} = \frac{4 \cdot P_e^2}{3 + P_e^2} \quad = \quad P_e \cdot P_z \quad . \tag{2.3}$$

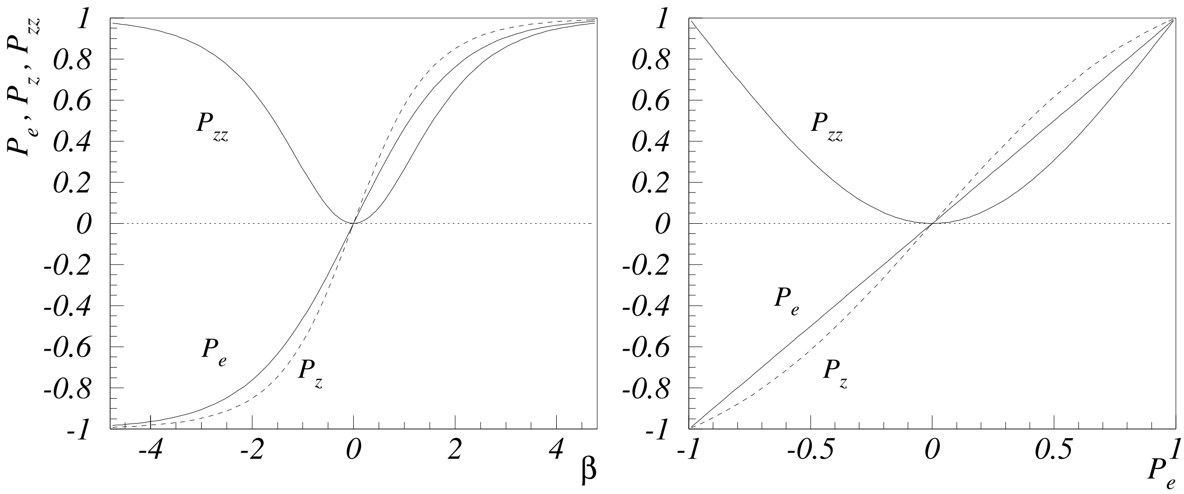

Abb. 2.4: *Elektronenspin- (P_e), Kernspin- (P_z) und Tensorpolarisation (P_{zz}) für einen Deuteriumatomstrahl bei Spintemperaturgleichgewicht: Links Abhängigkeit vom Spintemperaturparameter β, rechts Abhängigkeit von der Elektronenspinpolarisation P_e.*

Kann für ein System Spintemperaturgleichgewicht angenommen werden, so ist aufgrund der Gleichungen (2.2) und (2.3) mit der Bestimmung der Elektronenspinpolarisation P_e

auch die Kernspinpolarisation P_z und im Falle von Deuterium zusätzlich die Tensorpolarisation P_{zz} bekannt.
Aus der Gleichung (2.1) läßt sich weiterhin erkennen, daß die relativen Besetzungszahlen und damit die Polarisationen bei Spintemperaturgleichgewicht unabhängig vom angelegten Magnetfeld sind. Allerdings ist die Zeitspanne T_{ST}, welche das Ensemble zum Erreichen des Spintemperaturgleichgewicht benötigt, von der Magnetfeldstärke abhängig [Wal 93]:

$$T_{ST} = \left(1 + \left(\frac{B}{B_c^{H,D}} \right)^2 \right) \cdot T_{HH,DD} \tag{2.4}$$

$T_{HH,DD}$ entspricht der Zeitdauer zwischen zwei Spinaustauschstößen pro H- (bzw. D-) Atom.
Da über der Quelle zur Reduzierung des Strahlungseinfanges des Alkalimetallgases ein Magnetfeld von etwa 100 - 150 mT angelegt werden muß (siehe Kapitel 2.2), bedeutet dies für das Design der Glasapparatur, daß eine ausreichende Verweildauer der Atome in der Pumpzelle gewährleistet sein muß, damit das System den Gleichgewichtszustand erreichen kann. Die diesbezügliche Optimierung der Abmessungen von Pumpzelle und Kapillare erfolgte mit Hilfe des Bilanzgleichungssystems [Ste 95a].
Im Rahmen dieser Arbeit konnte erstmals der experimentelle Nachweis erbracht werden, daß in einer lasergepumpten Spinaustauschquelle auch bei Anliegen eines externen Magnetfeldes von ~ 100 mT sowohl für Wasserstoff, als auch für Deuterium das Spintemperaturgleichgewicht erreicht werden kann [Gro 97, Ste 97b].

2.4 Das Strahlprofil des Atomstrahls

Bei der in Erlangen aufgebauten lasergepumpten Spinaustauschquelle strömen die Atome durch eine Kapillare von der Pumpzelle in das Austrittsrohr und gelangen anschließend in das Breit–Rabi–Polarimeter. Das Strömungsverhalten der Atome im Austrittsrohr kann durch die Knudsenzahl

$$K_n = \frac{\lambda}{d} \tag{2.5}$$

charakterisiert werden [Ard 64, Wut 88], wobei λ die mittlere freie Weglänge und d den Austrittsrohrdurchmesser bezeichnen. Mit Hilfe der Knudsenzahl kann abgeschätzt werden, ob sich bei der gegebenen Geometrie und den Druckverhältnissen eine laminare Strömung ($K_n \leq 0{,}01$, Poiseuille-Bereich, Wechselwirkung der Atome untereinander dominiert), eine Molekularströmung ($K_n \geq \frac{1}{3}$, Knudsen-Bereich, Wechselwirkung der Atome mit den Gefäßwänden überwiegt) oder eine Gleitströmung ($0{,}01 < K_n < \frac{1}{3}$, Übergangsbereich) einstellen wird.
Beim Betrieb der Quelle herrschen im Austrittsrohr Drücke von 10^{-5} - 10^{-4} mbar, wodurch

sich mittlere freie Weglängen von einigen Metern ergeben. Diese Weglängen sind groß im Vergleich zu den Abmessungen des Austrittsrohres und es findet daher eine Strahlformung im molekularen Strömungsbereich statt. Dies bedingt zum einen, daß aufgrund der fehlenden Wechselwirkung der Atome untereinander kein Transfer von thermischer Energie auf gerichtete kinetische Energie stattfindet und man daher einen effusiven Strahl vorliegen hat. Zum anderen kann die Geschwindigkeitsverteilung des Strahl vollständig durch eine Maxwell-Verteilung [Tip 95] beschrieben werden, da das Gas bei seiner Diffusion durch das Austrittsrohr die Temperatur desselben angenommen hat.
In der Gleichung (2.6) ist die Maxwell–Boltzmann–Geschwindigkeits–Verteilung für ein Gas von Atomen der Masse m und der Temperatur T angegeben. v bezeichnet die Geschwindigkeit, bei k_B handelt es sich um die Boltzmann-Konstante.

$$N(v) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\,k_B\,T}\right)^{3/2} \cdot\ v^2 \cdot\ e^{-\,m\,v^2\,/\,(2\,k_B\,T)} \quad . \tag{2.6}$$

Die Abbildung 2.5 zeigt Geschwindigkeitsverteilungen für Wasserstoff- und Deuteriumatome bei Gastemperaturen von 100 K bzw. 500 K. Diese beiden Temperaturen entsprechen in etwa den Arbeitspunkten für eine Atomstrahlquelle bzw. für eine lasergepumpte Spinaustauschquelle.

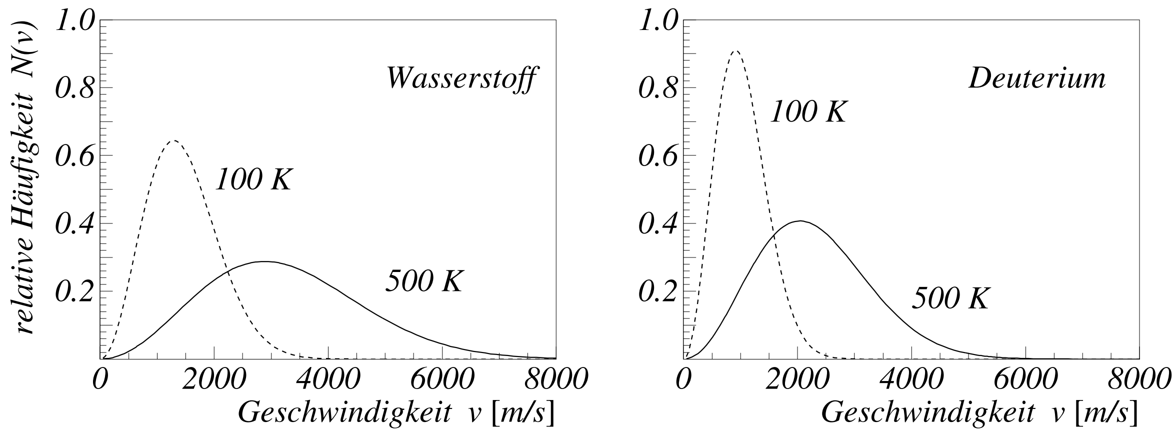

Abb. 2.5: *Maxwell–Boltzmann–Geschwindigkeits–Verteilungen für Wasserstoff- und Deuteriumatome bei Gastemperaturen von 100 K und 500 K.*

3 Die Atomstrahlanalyse im Breit–Rabi–Polarimeter

Die Analyse eines Wasserstoff- oder Deuteriumatomstrahls unter Zuhilfenahme eines Breit–Rabi–Polarimeters [Gau 92] basiert auf dem Austausch und der Selektion einzelner Hyperfeinstrukturunterzustände in dem zu untersuchenden Atomstrahl. Zu diesem Zweck werden teilweise verschiedene polarisationsanalysierende Komponenten verwendet, welche in der Abbildung 3.1 schematisch dargestellt sind. Anhand dieser Abbildung werden im Folgenden die Prinzipien der verschiedenen Meßmethoden erläutert, die technische Ausführung der Komponenten wird in Kapitel 4 beschrieben, eine theoretische Betrachtung ihrer Wirkungsweisen enthalten die Kapitel 5 und 6.

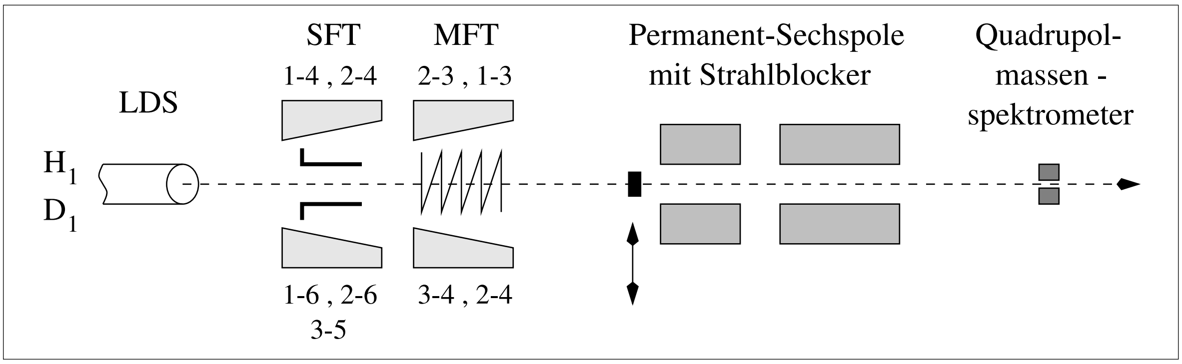

Abb. 3.1: *Schematische Darstellung der polarisationsanalysierenden Komponenten des Breit–Rabi–Polarimeters. Der aus der Spinaustauschquelle austretende Atomstrahl ist durch die gestrichelte Linie angedeutet. Die bei einem Wasserstoffstrahl verwendeten Stark- und Mittelfeldübergänge (SFT bzw. MFT) sind oberhalb der Skizze angegeben, jene für Deuterium unterhalb. Die sich vor den Sechspolen befindliche axiale Strahlblende kann vollständig aus dem Strahl bewegt werden.*

Der aus dem Austrittsrohr der lasergepumpten Spinaustauschquelle kommende Atomstrahl gelangt zuerst in einen Bereich mit verschiedenen, einzeln ansteuerbaren, adiabatischen Hochfrequenzübergängen, mit deren Hilfe die Besetzungen zweier Hyperfeinstrukturzustände nahezu vollständig ausgetauscht werden können. Das sich daran anschließende Paar von Sechspolmagneten bewirkt eine Defokussierung von Zuständen mit negativer Elektronenspinpolarisation (Zustände $|3\rangle$, $|4\rangle$ für Wasserstoff und $|4\rangle$, $|5\rangle$ und $|6\rangle$ für Deuterium) und eine Fokussierung der anderen Zustände in Richtung der Strahlachse. Die sich vor den Magneten befindliche axiale Strahlblende verbessert die Separationseffizienz des Magnetsystems, kann aber bei Bedarf (z.B. Dissoziationsgradmessungen) aus dem Strahl bewegt werden. Mit einem Quadrupol-Massenspektrometer (QMS) kann die Anzahl jener Atome gemessen werden, welche nach den Sechspolmagneten noch im Strahl

verblieben sind.
Infolge der Sensitivität der Sextupolmagnete auf den Elektronenspin der Atome kann eine Intensitätsänderung des Strahls induziert werden, wenn bei verschiedenen Messungen bestimmte Hochfrequenzübergänge ein- bzw. ausgeschaltet werden. Der Besetzungsaustausch muß dabei notwendigerweise zwischen Hyperfeinstrukturkomponenten stattfinden, welche eine unterschiedliche magnetische Komponente fuer den Elektronenspin (m_s) besitzen. Im Falle von Wasserstoff gibt es insofern vier sinnvolle Übergänge, die auch technisch realisiert werden können (Starkfeldübergänge: SFT 1-4 , SFT 2-4 ; Mittelfeldübergänge: MFT 2-3 , MFT 1-3). Zur Analyse eines Deuteriumatomstrahls wären theoretisch sieben Hochfrequenzübergänge geeignet (MFT 3-4 , MFT 2-4 , MFT 1-4 , SFT 1-6 , SFT 2-6 , SFT 3-5 , SFT 2-5/3-6), die Übergänge MFT 1-4 und SFT 2-5/3-6 sind jedoch nur bedingt einsetzbar (siehe Kapitel 5.2).
Aufgrund dieser Intensitätsänderungen können die relativen Besetzungszahlen n_i bestimmt werden, mit welchen wiederum eine eindeutige Angabe der Kern- und Elektronenspinpolarisation möglich ist, wie dies in den Kapiteln 1.1 und 1.2 gezeigt wurde.

Die Wirkungsweise der Komponenten des Breit–Rabi–Polarimeters läßt sich mittels Besetzungszahltupeln veranschaulichen, welche als Komponenten die relativen Besetzungszahlen n_i enthalten. Die Darstellung für Wasserstoff und Deuterium erfolgt dabei analog, im Falle von Deuterium werden lediglich sechskomponentige Tupel benötigt, für Wasserstoff sind vierkomponentige ausreichend. Die Effekte werden aus diesem Grund nur am Beispiel von Wasserstoff geschildert.

Ein ideal separierender Sechspolmagnet kann durch folgenden Formalismus beschrieben werden.

$$\begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ n_4 \end{pmatrix} \overset{Sechspol}{\longrightarrow} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{3.1}$$

Bei der Kombination von Sechspolmagnet und vorgeschaltetem Hochfrequenzübergang muß (3.1) um einen zusätzlichen Term erweitert werden. Im Idealfall setzt sich die mit dem Massenspektrometer gemessene Strahlintensität beispielsweise bei der Verwendung eines SFT 1-4 wie folgt aus den vier Hyperfeinstrukturzuständen zusammen.

$$\begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ n_4 \end{pmatrix} \overset{SFT1-4}{\longrightarrow} \begin{pmatrix} n_4 \\ n_2 \\ n_3 \\ n_1 \end{pmatrix} \overset{Sechspol}{\longrightarrow} \begin{pmatrix} n_4 \\ n_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{3.2}$$

3.1 Bestimmung der relativen Besetzungszahlen

Zur Bestimmung der relativen Besetzungszahlen und damit zur Messung aller Polarisationen werden die Verhältnisse R_{ij} der Strahlintensitäten von jeweils ein- und ausgeschaltetem Hochfrequenzübergang gebildet.
Das Verhältnis R_{14} der beiden Strahlintensitäten aus (3.1) und (3.2) ergibt den nachfolgenden Ausdruck, welcher unabhängig ist von der Strahlintensität der lasergepumpten Spinaustauschquelle.

$$R_{14} = \frac{I^{HFT,an}}{I^{HFT,aus}} = \frac{n_4 + n_2}{n_1 + n_2} = 1 - \frac{n_1 - n_4}{n_1 + n_2} \quad . \tag{3.3}$$

Allgemein erhält man für einen Wasserstoffübergang $i \leftrightarrow j$ das Intensitätsverhältnis

$$R_{ij} = 1 - \frac{n_i - n_j}{n_1 + n_2} \quad . \tag{3.4}$$

Zusammen mit der Normierungsbedingung (1.10) sind drei dieser Signalverhältnisse ausreichend, um ein lineares Gleichungssystem für die vier gesuchten Besetzungszahlen aufzustellen. Dieses lautet beispielsweise bei der Verwendung der Hochfrequenzübergänge SFT 1-4 , SFT 2-4 und MFT 2-3

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -R_{14} & 1 - R_{14} & 0 & 1 \\ 1 - R_{24} & -R_{24} & 0 & 1 \\ 1 - R_{23} & -R_{23} & 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ n_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{3.5}$$

Die erste Zeile des zu (3.5) gehörigen Gleichungssystems entspricht der Normierungsbedingung, die weiteren ergeben sich durch das Auflösen von Gleichungen des Typs (3.4).
Die relativen Besetzungszahlen lassen sich anschließend durch

$$n_i = \frac{(-1)^{i+1} \cdot det\ \mathbf{B}}{det\ \mathbf{A}} = \frac{(-1)^{i+1} \cdot det\ \mathbf{B}}{\sum_{i=1}^{4} (-1)^{i+1} \cdot det\ \mathbf{B}} \quad . \tag{3.6}$$

berechnen [Wil 89]. **A** ist die 4×4 - Matrix des Gleichungssystems (3.5), bei **B** handelt es sich um 3×3 - Matrizen, welche aus **A** durch Streichung der ersten Zeile und der i-ten Spalte hervorgehen.

Zur Berechnung der Besetzungszahlen für einen Deuteriumatomstrahl werden neben der Normierungsbedingung noch weitere fünf Intensitätsverhältnisse benötigt. Die n_i erhält man dann aus der 6×6 - Matrix des dazugehörigen linearen Gleichungssystems unter Verwendung von (3.6).

3.2 Elektronenspinpolarisation und Spintemperaturgleichgewicht

Ist für eine lasergepumpte Spinaustauschquelle nachgewiesen worden, daß sich das System bei Vorliegen bestimmter Randbedinungen (z.B. Gastyp, Geometrie der Glasapparatur, Atomfluß, Temperatur der Quelle) im Spintemperaturgleichgewicht befindet, so ist mit der Bestimmung der Elektronenspinpolarisation P_e aufgrund von (2.2) und (2.3) auch die Kernspinpolarisation und im Falle von Deuterium zusätzlich die Tensorpolarisation bekannt. Für die Analyse eines Atomstrahls direkt nach dem Austrittsrohr der LDS ist es in einem solchen Fall ausreichend, die Elektronenspinpolarisation zu messen.

Unter Verwendung der beiden Sechspolmagnete im Breit–Rabi–Polarimeter kann bei einer LDS die Messung der Elektronenspinpolarisation mit einem erheblich schnellerem Verfahren durchgeführt werden, als mit jenem, welches im vorherigen Unterkapitel beschrieben wurde. Hierfür werden die Strahlintensitäten bei ein- und ausgeschaltetem Pumplaser gemessen ($I_{L,an}$ bzw. $I_{L,aus}$) und miteinander verglichen. Die Hochfrequenzübergänge bleiben währenddessen ausgeschaltet. Aus (1.11) ergibt sich damit für einen Wasserstoffatomstrahl folgender Zusammenhang mit der Elektronenpolarisation:

$$\begin{aligned} P_e &\overset{B\gg 0}{=} \frac{n_1+n_2-n_3-n_4}{n_1+n_2+n_3+n_4} = \frac{2\,(n_1+n_2)-n_1-n_2-n_3-n_4}{n_1+n_2+n_3+n_4} \\ &= \frac{2\,I_{L,an}-2\,I_{L,aus}}{2\,I_{L,aus}} = \frac{I_{L,an}}{I_{L,aus}}-1 \quad . \end{aligned} \tag{3.7}$$

Für den unpolarisierten Fall ($I_{L,aus}$) wurde verwendet, daß die Hyperfeinstrukturzustände Boltzmann-verteilt sind, d.h. wegen $E_{HFS} \ll kT$ gilt in guter Näherung $n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = \frac{1}{4} = \frac{1}{2}\,I_{L,aus}$.
Für Deuterium ist Gleichung (3.7) ebenfalls gültig, die Herleitung hierzu erfolgt analog.

3.3 Die Messung des Dissoziationsgrades

Der Dissoziationsgrad α des aus der Spinaustauschquelle kommenden Atomstrahls kann mit dem Breit–Rabi–Polarimeter auf zwei Arten bestimmt werden. Einmal werden bei brennender Entladung des Dissoziators mit dem Massenspektrometer die Strahlintensitäten von atomarem und molekularem Wasserstoff aufgezeichnet. Das andere Mal werden die Signale der Gasmoleküle bei ein- und ausgeschaltetem Dissoziator untersucht. Da die fokussierenden, bzw. defokussierenden Kräfte, welche Sextupolmagnete auf Moleküle ausüben, aufgrund der geringen magnetischen Momente der Moleküle zu vernachlässigen

sind, ist es für beide Meßmethoden notwendig, die axiale Strahlblende aus dem Strahlengang zu entfernen.
Die so mit dem QMS gemessenen Signalhöhen $I\,(H_{1,2})^{an,aus}$ entsprechen den jeweiligen Partialdrücken $p\,(H_{1,2})^{an,aus}$, gewichtet mit den dazugehörigen Detektionswahrscheinlichkeiten im Quadrupol-Massenspektrometer $\omega\,(H_{1,2})$. Der auf die Dichte bezogene Dissoziationsgrad berechnet sich dann wie folgt, wobei die unterschiedlichen Teilchengeschwindigkeiten von H_1 und H_2 nicht berücksichtigt werden:

$$\alpha = \frac{p\,(H_1)^{an}}{p\,(H_1)^{an} \ + \ 2 \cdot p\,(H_2)^{an}} = \frac{I\,(H_1)^{an}}{I\,(H_1)^{an} \ + \ 2 \cdot \frac{\omega\,(H_1)}{\omega\,(H_2)}\, I\,(H_2)^{an}} \quad . \tag{3.8}$$

Der Dissoziationsgradbestimmung nach (3.8) liegt die erstgenannte Meßmethode zugrunde. Diese Werte von α beinhalten aber einen großen systematischen Fehler, welcher nicht nur durch die verschiedenen Nachweiswahrscheinlichkeiten von H_1 und H_2 hervorgerufen wird. Weitere Fehlerquellen sind u.a. die nur teilweise Separation in den Sechspolmagneten, die dissoziative Ionisation von molekularem Wasserstoff und von Wasser im QMS oder die unterschiedlichen Leitwerte für Moleküle und Atome in der Quelle.

Bis auf einen Anteil, welcher durch die dissoziative Ionisation bedingt ist, lassen sich die genannten systematischen Fehler bei Anwendung des zweiten Meßverfahrens von Anfang an ausschließen. Diese alternative Technik ergibt sich aus dem Zusammenhang

$$p\,(H_1)^{an} = 2 \cdot \left(\ p\,(H_2)^{aus} \ - \ p\,(H_2)^{an} \ \right) \quad . \tag{3.9}$$

Für den Dissoziationsgrad α erhält man infolgedessen:

$$\alpha = \frac{p\,(H_1)^{an}}{p\,(H_1)^{an} \ + \ 2 \cdot p\,(H_2)^{an}} = 1 \ - \ \frac{p\,(H_2)^{an}}{p\,(H_2)^{aus}} = 1 \ - \ \frac{I\,(H_2)^{an}}{I\,(H_2)^{aus}} \quad . \tag{3.10}$$

Sämtliche Messungen zur Bestimmung des Absolutwertes des Dissoziationsgrades wurden aufgrund der geringeren systematischen Fehler nach dieser Methode durchgeführt. Das erstgenannte Meßprinzip wurde überwiegend zu solchen Messungen angewandt, bei welchen der Dissoziator nicht ausgeschaltet werden konnte und nur das generelle Verhalten des Dissoziationsgrades untersucht werden sollte.

4 Der experimentelle Aufbau

4.1 Das Vakuumsystem

Wie bereits in der Einleitung erwähnt wurde, können mit einer lasergepumpten Spinaustauschquelle atomare Flüsse im Bereich von $10^{18}\,\mathrm{s}^{-1}$ erreicht werden. Da es sich hierbei jedoch um einen effusiven Strahl handelt (siehe Kapitel 2.4), erreichen nur etwa $(2,0 - 26,0) \cdot 10^{11}\,\mathrm{s}^{-1}$ den sensitiven Bereich des Quadrupol-Massenspektrometer. Die diesen Teilchenflüssen äquivalenten Partialdrücke von $(3,4 - 43,0) \cdot 10^{-9}\,\mathrm{mbar}$ werden durch die Verwendung von axialen Strahlblenden nochmals um mehr als eine Größenordnung reduziert.
Aufgrund dieser geringen Intensitäten ist für die Atomstrahlanalyse ein sehr gutes Vakuumsystem notwendig, da möglichst niedrige Totaldrücke und insbesondere minimale Partialdrücke von Wasserstoff enthaltenden Molekülen, wie H_2 und Wasser, erreicht werden müssen. Die in Abbildung 4.1 gezeigte Vakuumapparatur des Breit–Rabi–Polarimeters wurde daher als differentielles Pumpsystem, bestehend aus vier Pumpstufen, ausgelegt. Die Saugleistungen der dort beschriebenen Pumpen sind ebenso wie die Druckverteilungen in den einzelnen Kammern im Anhang A aufgelistet. Die Abmessungen des Polarimeters werden im Anhang B wiedergegeben.

Die ersten beiden dieser vier Stufen, die Kalibrier- und die HFT-Kammer, sind durch einen 250 mm langen Wellbalg mit einem Durchmesser von 63 mm miteinander verbunden und werden durch Refrigerator-Kryopumpen (Leybold, RPK 1500 U3) bepumpt. Diese beiden Pumpen können zum Regenerieren durch Schieberventile (VAT, Reihe 10) von den Kammern abgeschlossen werden und während des Regeneriervorgangs über eine separate Turbomolekularpumpe (Balzers-Pfeiffer, TPH 140) bepumpt werden. An der HFT-Kammer befindet sich außerdem noch eine magnetgelagerte Turbomolekularpumpe (Leybold, Turbovac 340 M), welche aber für Drücke $p < 5 \cdot 10^{-8}\,\mathrm{mbar}$ durch ein VAT-Schieberventil von der Vakuumkammer getrennt wird. Die dritte Pumpstufe, die Sextupolkammer, ist mit der HFT-Kammer in einem gemeinsamen Vakuumbauteil untergebracht. Diese beiden Abschnitte sind durch eine 3 mm starke ferromagnetische Edelstahlplatte voneinander getrennt, welche eine zentrale Bohrung mit einem Durchmesser von 28 mm besitzt. Als Leitwertbegrenzer dient der erste der beiden Sechspolmagnete. An dieser Kammer sind eine magnetgelagerte Wide-Range Turbomolekularpumpe (Balzers-Pfeiffer, TPH 180 H) und eine mit flüssigem Stickstoff gekühlte Titan-Sublimationspumpe (Balzers, USP 035 + UPK 150 A) angeflanscht. Durch ihr gutes Kompressionsvermögen für Wasserstoff kann die Wide-Range Turbomolekularpumpe am Breit–Rabi–Polarimeter auch noch in Druckbereichen von $10^{-9}\,\mathrm{mbar}$ effektiv pumpen und muß daher im Meßbetrieb nicht durch ein Ventil von der Apparatur getrennt werden. Der zweite Sechspolmagnet dient neben dem

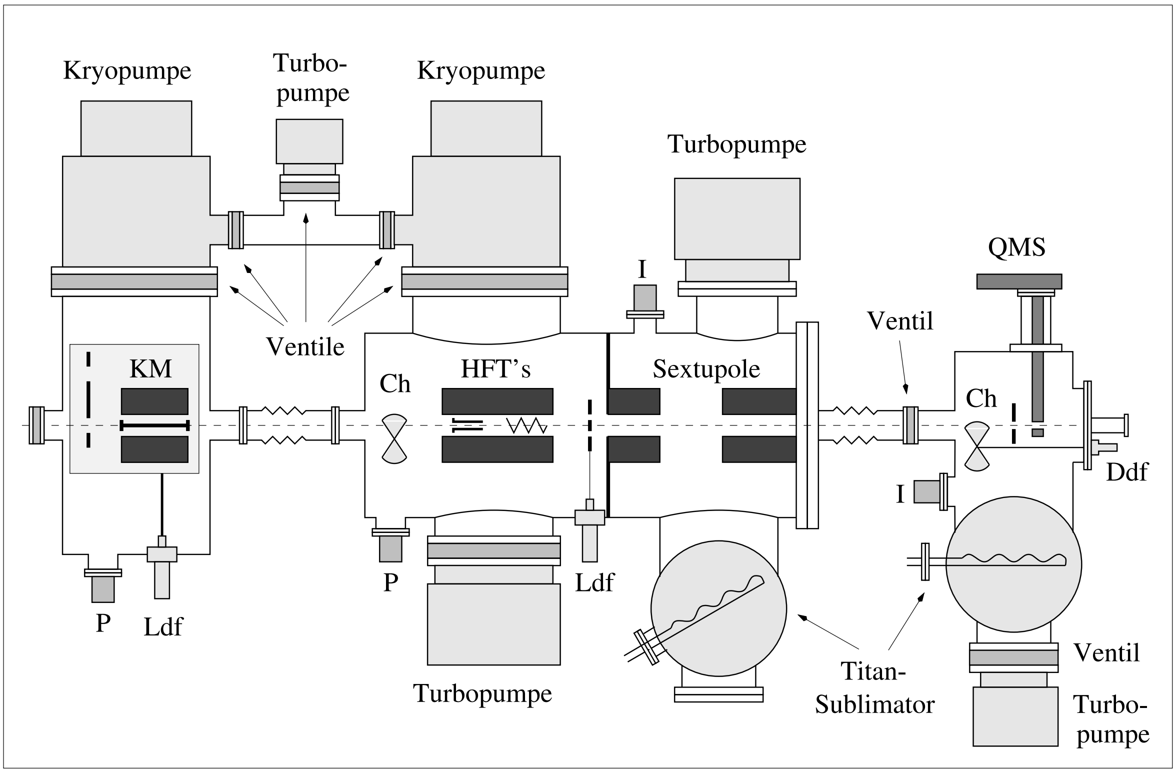

Abb. 4.1: *Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus des Breit–Rabi–Polarimeters. Die Atomstrahlachse ist durch die gestrichelte Linie angedeutet. Die erste Kammer des Vakuumsystems (links) enthält auf einer Verschiebeeinheit den Kalibriermagneten (KM) mit axialer Strahlblende und davor befindlicher Lochblende. In den beiden folgenden Kammern sind die Hochfrequenzübergänge (HFT's), die bewegliche axiale Strahlblende und die Sechspolmagnete angeordnet. In der Detektorkammer (rechts) folgt nach einer Lochblende das Quadrupol-Massenspektrometer. Zusätzlich eingezeichnet sind die beiden Strahlunterbrecher (Ch $\hat{=}$ Chopper) zur Separation von Strahl- und Untergrundsignal, zwei Leineardurchführungen (Ldf), eine Drehdurchführung (Ddf) und die Vakuumdruckmessgeräte (P $\hat{=}$ Penningmeßröhre, I $\hat{=}$ Ionisationsmeßröhre).*

sich anschließendem 237 mm langen Rohr (Durchmesser 35 mm) als Leitwertbegrenzer zwischen dritter und vierter Kammer. Diese letzte Pumpstufe des Vakuumsystems, die Detektorkammer, ist ebenfalls mit einer Titan-Sublimationspumpe und einer Wide-Range Turbomolekuarpumpe (Balzers, TPU 180 H) ausgestattet. Die Detektorkammer kann zur Reduzierung des Wasserstoffpartialdruckes ausgeheizt werden (Ausheizdauer: Drei bis vier Tage bei 120^o C) und kann durch ein VAT-Schieberventil von der restlichen Vakuumapparatur ultrahochvakuumdicht abgetrennt werden. Zur Überwachung der Druckverhältnisse sind an jeder Pumpstufe Vakuumdruckmeßgeräte angebracht, welche auch während der

Messungen ausgelesen werden können.
Ohne Gasballast werden in der Detektorkammer Totaldrücke von bis zu $2 \cdot 10^{-10}$ mbar erreicht, bei einem Wasserstoffeinlaß von ca. $5 \cdot 10^{17}\,\mathrm{s}^{-1}$ in die Kalibrationskammer steigt der Druck in der vierten Pumpstufe auf Werte von ca. $7 \cdot 10^{-8}$ mbar an. Alle drei magnetgelagerten Turbomolekularpumpen sind vorvakuumseitig über Handeckventile an eine Scroll-Pumpe (Edward, ESDP 30 Scroll) angeschlossen, wodurch ein vollkommen ölfreies Ultrahochvakuumsystem gewährleistet wird. Lediglich das Vakuumsystem zur Regeneration der Kryopumpen ist nicht kohlenwasserstofffrei aufgrund der verwendete Turbomolekularpumpe und der ihr vorgeschalteten zweistufigen Drehschieberpumpe (Alcatel, 350 C).

Aufgrund der genannten Teilchenflüsse aus der Spinaustauschquelle und dem damit verbundenen hohen Gasballast am Anfang des Polarimeters, wird das Vakuumsystem im Januar 1998 optimiert werden. Hierfür wird die Turbomolekularpumpe der Sextupolkammer durch die Kryopumpe der Kalibrierkammer ersetzt werden und an deren Position wird eine zweiflutige Turbomolekularpumpe (Pfeiffer, TPH 2200) eingesetzt werden. Durch die damit deutlich verbesserten Saugleistungen in der ersten und dritten Pumpstufe soll zum einen erreicht werden, daß die Regenierung der Kryopumpen in zeitlich größeren Abständen erfolgen kann, zum anderen sollen die systematischen Signalfluktuationen des Massenspektrometers reduziert werden. In Abbildung 4.2 ist ein Beispiel für diese Schwankungen dargestellt, welche nachweislich auf die Frequenz des Kryopumpen-Kompressors und die damit verbundenen Pumpleistungsschwankungen zurückgeführt werden können. Die Messung wurde bei einem Wasserstofffluß von $\sim 4,5 \cdot 10^{17}\,\mathrm{s}^{-1}$ durchgeführt.

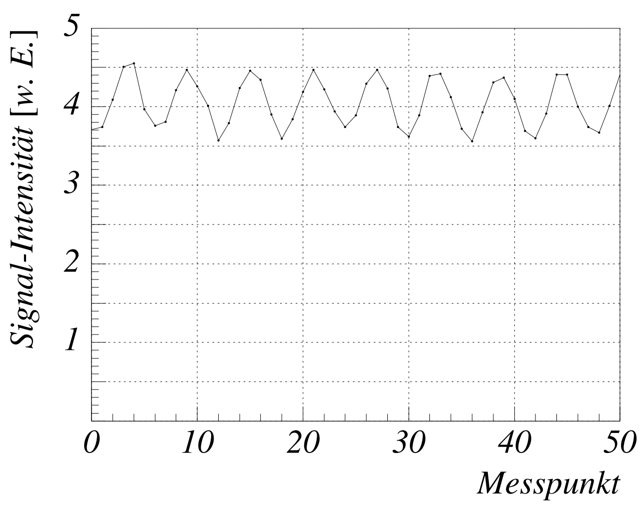

Abb. 4.2:
Signalfluktuationen im Massenspektrometer aufgrund der Frequenz des Kryopumpen-Kompressors von 2 Hz und den damit verbundenen Saugleistungsschwankungen.

4.2 Die Hochfrequenzübergänge

Für die Bestimmung aller relativen Besetzungszahlen werden bei einem Wasserstoffatomstrahl mindestens drei verschiedene Hochfrequenzübergänge verwendet, im Falle von Deuterium werden mindestens fünf unterschiedliche Übergänge eingesetzt (siehe Kapitel 3.1). Bei diesen Übergängen handelt es sich im Breit–Rabi–Polarimeter um sogenannte Starkfeld- (SFT) und Mittelfeldübergänge (MFT) [1].
Die Hochfrequenzübergänge bestehen aus einer Kombination von hochfrequentem und statischem Magnetfeld. Das statische Feld wird durch einen C-Magneten erzeugt, welchem ein in Atomstrahlrichtung abfallendes Gradientenfeld überlagert wird. In der Abbildung 3.1 ist dies durch die Polschuhe des Magneten angedeutet. Durch den Feldgradienten wird nach der Methode der adiabatischen Hochfrequenzübergänge (Kapitel 5.1) ein nahezu vollständiger Austausch der beteiligten Hyperfeinstrukturniveaus ermöglicht.

4.2.1 Die Mittelfeldübergänge

Das Hochfrequenzfeld für die Mittelfeldübergänge wird durch eine Spule erzeugt, welche von einem Hochfrequenzsender (Rohde & Schwarz, Signalgenerator SMY 01) und einem Leistungs-Verstärker (R.F.T.S., 1 500 - 10) gespeist wird. Dieser Aufbau ist in Abbildung 4.3 schematisch dargestellt.

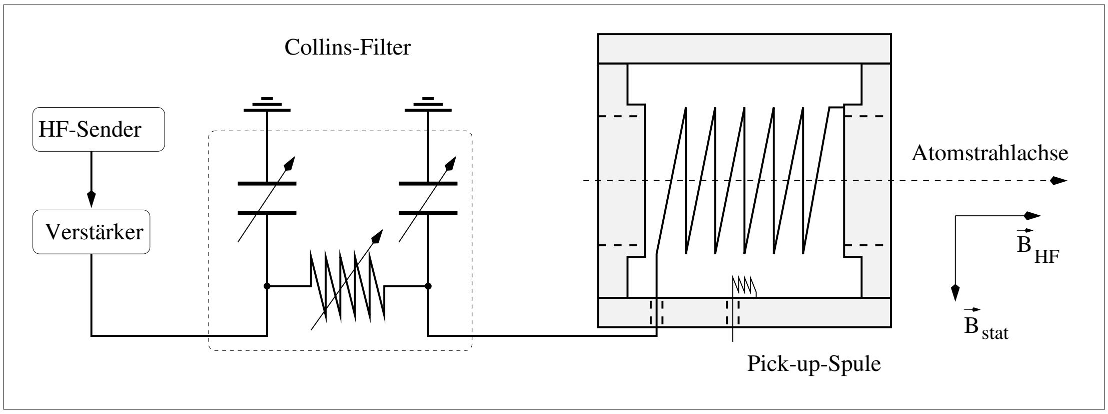

Abb. 4.3: *Aufbau eines Mittelfeldübergangs. Das hochfrequente Magnetfeld $\vec{B}_{HF}$, welches von einer Spule erzeugt wird, schwingt senkrecht zum statischen Feld $\vec{B}_{stat}$. Zur Impedanzanpassung des Gesamtsystems auf 50 Ω dient der Collins-Filter, die Überwachung der Amplitude des Hochfrequenzfeldes erfolgt mit Hilfe der Pick-up-Spule.*

[1] Die Bezeichnungen SFT und MFT sind rein historisch bedingt. Die Übergänge können alle im schwachen statischen Magnetfeld betrieben werden, sie unterscheiden sich allerdings in ihren Auswahlregeln (siehe Kapitel 5.2).

Die Spule, welche sowohl für Wasserstoff, als auch für Deuterium eingesetzt wird, besteht aus fünf Wicklungen und ist aus einem 1,5 mm starkem versilbertem Kupferdraht hergestellt. Sie hat einen Innendurchmesser von 24 mm, eine Länge von ca. 32 mm und ist in ein abgeschirmtes Kupfergehäuse eingebaut. Das von der Spule erzeugte hochfrequente Magnetfeld schwingt parallel zur Atomstrahlachse und senkrecht zum statischen Magnetfeld. Mit Hilfe einer Pick-up-Spule kann die Amplitude des Hochfrequenzfeldes kontinuierlich überwacht werden, der Impedanzabgleich des Gesamtsystems auf 50 Ω erfolgt unter Verwendung eines Collins-Filters, welcher aus zwei Drehkondensatoren und einer Drehspule aufgebaut ist. Da der Schwingkreis bei jeder Frequenzänderung neu abgeglichen werden muß, wird im Messbetrieb für Wasserstoff und Deuterium jeweils eine feste Frequenz ausgewählt, die verschiedenen Übergänge (z.B. MFT 2 - 3 , MFT 1 - 3) werden anschließend über die Variation des statischen Magnetfeldes erzeugt. Die Auswahl der entsprechenden Frequenzen erfolgte aufgrund der in Abbildung 4.4 gezeigten Messungen. Sie enthalten die mit der Pick-up-Spule gemessenen Amplituden für verschiedene Frequenzen des Hochfrequenzgenerators. Für alle gezeigten Frequenzen wurde jeweils vorher eine Impedanzanpassung mit dem Collins-Filter vorgenommen.

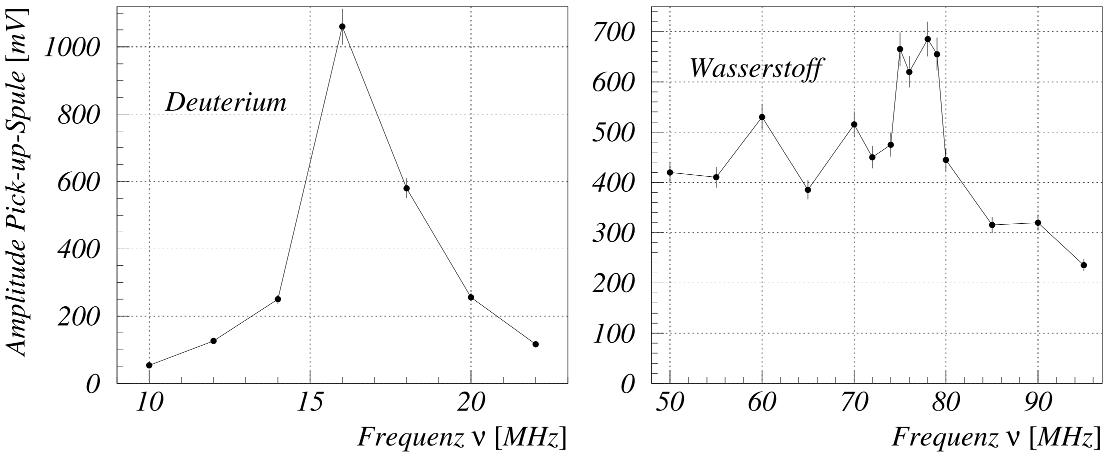

Abb. 4.4: *Frequenzabhängigkeit der mit der Pick-up-Spule gemessenen Amplitude des Hochfrequenzfeldes für die möglichen Arbeitsbereiche des MFT bei einem Wasserstoff- oder Deuteriumatomstrahl.*

4.2.2 Die Starkfeldübergänge

Für einen Starkfeldübergang wird das Hochfrequenzfeld ($f > 300$ MHz) mit einem Bandleitungsresonator (Kavität) erzeugt (rechter Teil der Abbildung 4.5) [Ste 77, Kas 77]. Bei einem Bandleitungsresonator werden zwei parallele Leiter, welche sich in einem abgeschirmten Kupfergehäuse befinden, zu hochfrequenten Schwingungen angeregt, wobei die

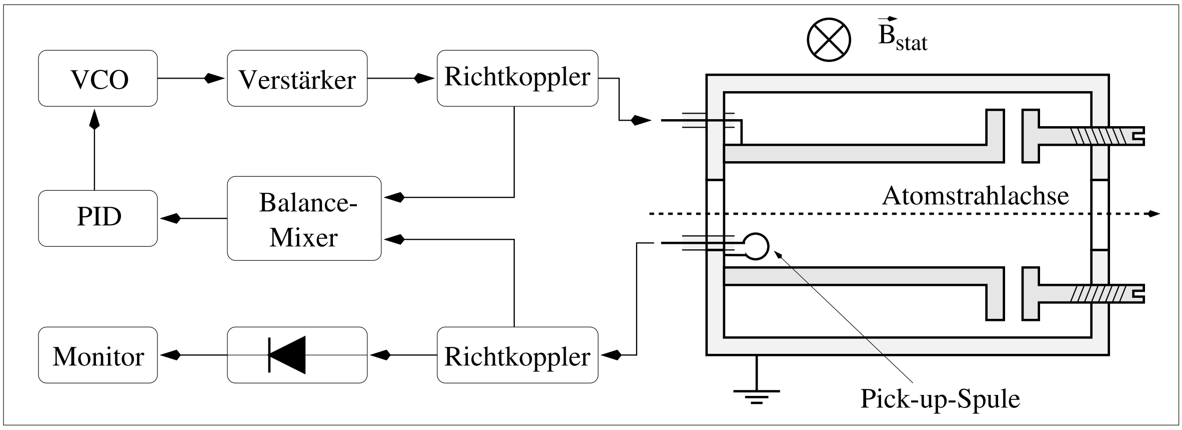

Abb. 4.5: *Aufbau eines Bandleitungsresonators mit Resonanzregelkreis. Aufgrund des Gewindes am Ende der beiden rechten Kondensatorplatten kann der Abstand und somit die Kapazität variiert werden. Der Phasenunterschied zwischen dem mit der Pick-up-Spule gemessenen und dem eingespeisten Signal wird mit einem Balancemixer untersucht und als Spannungswert an die PID- (Proportional-, Integral-, Differential-) Regelung geleitet, welche den VCO (Voltage Controlled Oszillator) ansteuert. Das Schema ist [Bra 95] entnommen.*

Hochfrequenz an einen der beiden Stäbe galvanisch angekoppelt wird. Der zweite Stab, welcher durch das Hochfrequenzfeld induktiv angeregt wird, kann sowohl gleichphasig, als auch gegenphasig zum ersten Stab anschwingen, allerdings ergibt sich nur beim Gegentaktmode die gewünschte konstruktive Überlagerung der Magnetfelder im Bereich der Strahlachse. Da sich die beiden Schwingungsmoden in ihrer Resonanzfrequenz um einige 10 - 100 MHz unterscheiden (hervorgerufen durch die unterschiedliche Kopplung der beiden Leiter und dem daraus resultierenden abweichendem Wellenwiderstand [Bau 79]), ist eine selektive Anregung der Gegentaktschwingung möglich. Die Bandleitungsresonatoren sind als $\frac{\lambda}{4}$ - Resonatoren ausgelegt [Bau 79], weswegen die Länge der Stäbe ursprünglich ein Viertel einer stehenden Welle betragen sollte (5,25 cm für Wasserstoff und 22,8 cm für Deuterium). Jedoch wird aufgrund der kapazitiven Belastung am rechten Ende der Stäbe die Wellenlänge der stehenden Welle auf dem Leiter vergrößert [Mei 92], wodurch eine deutliche Reduzierung der Stablänge erreicht werden kann. Darüberhinaus können Streukapazitäten zu Leitern in der Umgebung vermieden werden, und durch die Änderung des Plattenkondensatorabstandes ist eine geringe Variation der Resonanzfrequenz und damit eine Abstimmung des Bandleitungsresonators möglich. Allerdings ist der abstimmbare Frequenzbereich nicht ausreichend, um mit einer einzigen Kavität die Resonanzfrequenzen für einen Wasserstoff- und einen Deuteriumatomstrahl erzeugen zu können.
Beim Betrieb der Resonatoren kommt es infolge von ohmschen Verlusten der eingekoppel-

ten Hochfrequenzleistung zu einer Erwärmung und damit zu einer Längenänderung der Resonatorstäbe. Diese Längenänderung bewirkt eine Verkleinerung des Plattenkondensatorabstandes und daher auch eine Verschiebung der Resonanzfrequenz. Aus diesem Grunde werden die Resonatoren nicht durch einen frequenzstabilen Signalgenerator gespeist, wie beim Betrieb des MFT, sondern durch jeweils einen spezifischen Resonanzregelkreis versorgt. Die beiden Regelungen sind Nachbauten der am MPI für Kernphysik entwickelten und beim HERMES-Experiment eingesetzten Steuerungen [Hor 95]. Der prinzipielle Aufbau eines solchen Regelkreises ist im linken Teil der Abbilung 4.5 skizziert. Die Regelung reagiert auf Phasendifferenzen zwischen dem eingespeisten Signal und dem erzeugten Hochfrequenzfeld, welches von einer Pick-up-Spule detektiert wird. Hierzu werden jeweils Referenzsignale mit Hilfe von Richtkopplern ausgekoppelt und zu einem Balance-Mixer geleitet. Im Resonanzfall beträgt die Phasendifferenz an beiden Eingängen des Balance-Mixers $\frac{\pi}{2}$, bei Abweichungen von diesem Idealwert wird vom Balance-Mixer ein der Abweichung proportionales Spannungssignal erzeugt, welches über eine PID-Regelung zur Einstellung der Frequenz an einem spannungsgesteuerten Oszillator (VCO) verwendet wird. Zur Vergrößerung der Signalamplitude ist dem VCO ein Leistungs-Verstärker nachgeschaltet (Wasserstoff: R.F.T.S., 1400 - 10 GV; Deuterium: R.F.T.S., 850 - 15), mit welchem Ausgangsleistungen von mindenstens 10 W, bzw. 15 W, erreicht werden können.

Um sowohl π- als auch σ-Übergänge[2] mit einer einzigen Kavität betreiben zu können, werden im Breit–Rabi–Polarimeter sogenannte Winkelresonatoren [Sim 94] eingesetzt, bei welchen das von den Resonatorstäben erzeugte hochfrequente Magnetfeld $\vec{B}_{HF}$ unter einem Winkel $0^o < \alpha < 90^o$ zur Richtung des statischen Feldes schwingt. Für Wasserstoff und Deuterium werden dabei unterschiedliche Typen von Winkelresonatoren verwendet: Bei der Kavität für Wasserstoffatomstrahlen wird der Winkel zwischen statischem ($\vec{B}_{stat}$) und hochfrequentem Magnetfeld ($\vec{B}_{HF}$) durch eine Verkippung der beiden Resonatorstäbe relativ zur Atomstrahlachse erreicht, wie dies in Abbildung 4.6 dargestellt ist.

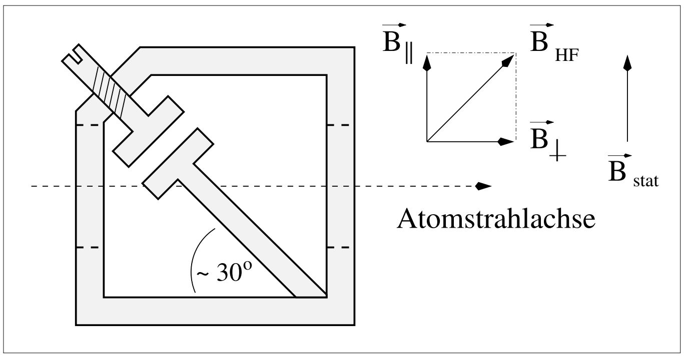

Abb. 4.6: *Skizzierte Schnittbilddarstellung des Starkfeldübergangs für Wasserstoff. Durch die Verkippung der Resonatorstäbe relativ zur Atomstrahlachse werden Komponenten des Hochfrequenzfeldes parallel und senkrecht zum statischen Feld erzeugt.*

[2] π-Übergang: $\vec{B}_{HF} \perp \vec{B}_{stat}$, σ-Übergang: $\vec{B}_{HF} \parallel \vec{B}_{stat}$ (siehe Kapitel 5.2).

Da bei einem Resonator für Deuteriumatomstrahlen vergleichsweise große Kapazitäten erforderlich sind, welche nur durch gewinkelte Kondensatorplatten realisiert werden können, wurde in diesem Fall eine veränderte geometrische Anordnung gewählt. Die beiden Stäbe werden hierbei zwar parallel zur Atomstrahlachse, jedoch an diagonal versetzten z-Positionen eingebaut. Somit läßt sich ebenfalls ein hochfrequentes Magnetfeld ($\vec{B}_{HF}$) erzeugen, dessen eine Komponente senkrecht und dessen andere Komponente parallel zum statischen Magnetfeld ($\vec{B}_{stat}$) schwingt (siehe Abbildung 4.7). Eine detailierte technische Beschreibung dieser Kavität wird in [Han 98] gegeben.

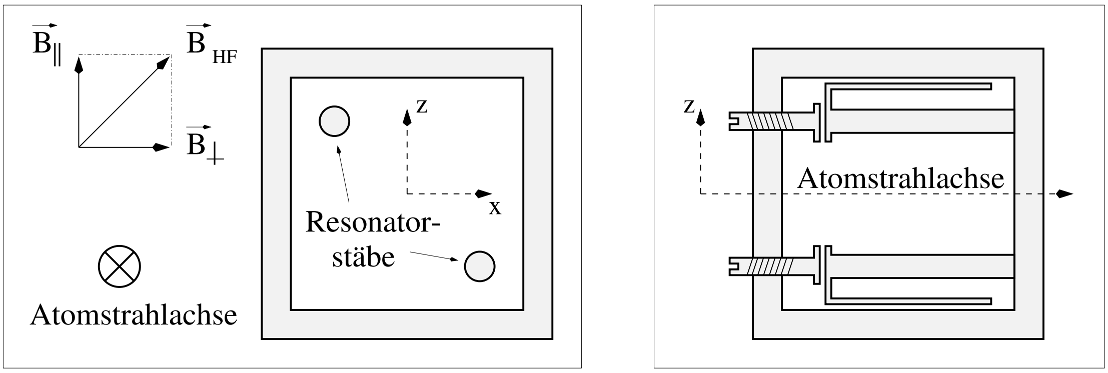

Abb. 4.7: *Schnittbildskizzen des Winkelresonators für Deuterium-Starkfeldübergänge senkrecht zur Atomstrahlachse (linker Teil) und senkrecht zur x-Achse (rechts). Die Orientierung des statischen Magnetfeldes $\vec{B}_{stat}$ ist parallel zur z-Achse.*

4.2.3 Die statischen Magnetfelder

Wie in Kapitel 4.2 einführend erwähnt, wird für die Erzeugung eines Hochfrequenzübergangs neben den beschriebenen hochfrequenten Magnetfeldern ein statisches Magnetfeld benötigt, welches sich aus einem Magnetfeld, das durch einen C-Magneten erzeugt wird, und einem Gradientenfeld zusammensetzt.

Die dabei für das statische Magnetfeld erforderlichen mittleren Magnetfeldstärken sind von den Frequenzen der Hochfrequenzfelder abhängig, da sowohl die Spule des Mittelfeldüberganges, als auch die Kavitäten der Starkfeldübergänge bei festen Frequenzen betrieben werden und die Resonanzbedingung für die einzelnen Übergänge durch eine Variation des statischen Feldes erreicht werden muß. Der Zusammenhang zwischen statischem Magnetfeld und Resonanzfrequenz kann mit Hilfe der Gleichungen (1.5) bzw. (1.12) berechnet werden und ist in der Abbildung 4.8 für die verwendeten Übergänge dargestellt. Die Betriebsfrequenzen der Hochfrequenzübergänge des Polarimeters, welche in der Tabelle 4.1 zusammen mit den jeweils benötigten statischen Magnetfeldstärken aufgelistet

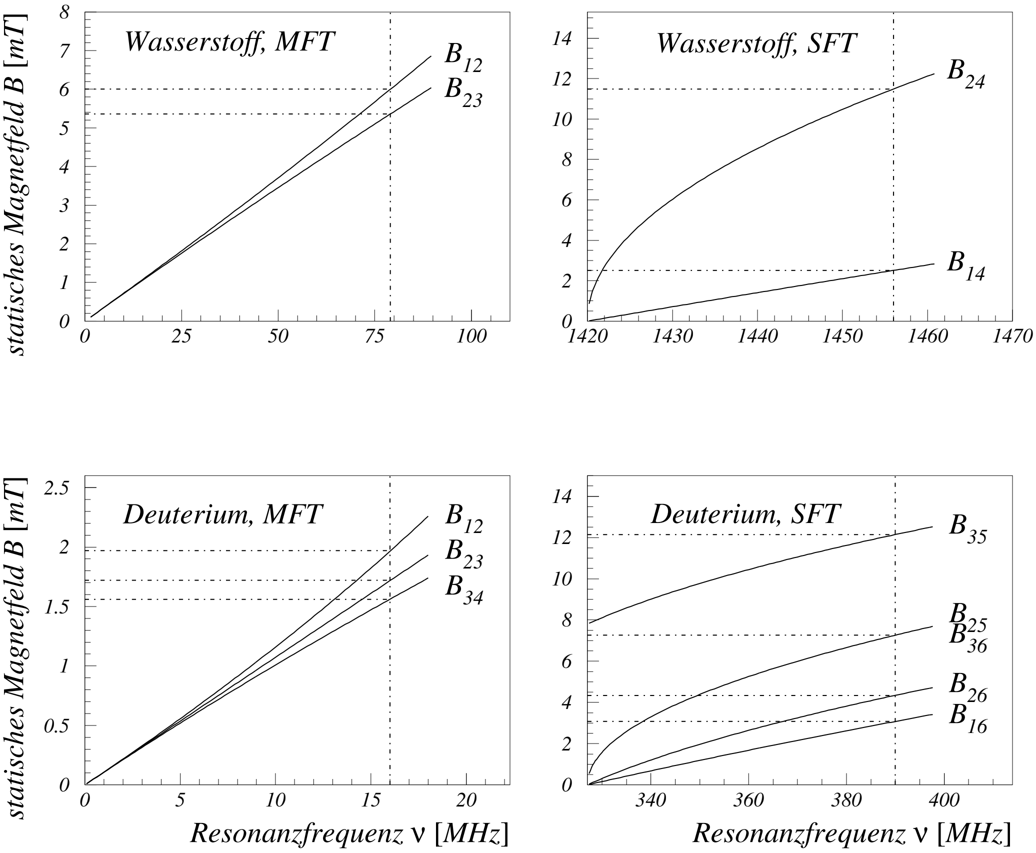

Abb. 4.8: *Benötigte mittlere Magnetfeldstärken des statischen Feldes in Abhängigkeit von der Resonanzfrequenz für die verwendeten Mittel- (MFT) und Starkfeldübergänge (SFT). Die vertikalen strichpunktierten Linien markieren die Betriebsfrequenzen der Hochfrequenzfelder des Breit–Rabi–Polarimeters.*

sind, sind in dieser Abbildung durch vertikale strichpunktierte Linien gekennzeichnet. Der Abbildung 4.8 kann darüberhinaus entnommen werden, daß durch eine geschickte Wahl des Feldgradienten die Resonanzbedingung für mehrere Mittelfeldübergänge gleichzeitig erfüllt werden kann. Die Resonanzbereiche befinden sich dann zwar an räumlich voneinander getrennten Punkten, jedoch innerhalb eines Resonators.

Da beim Breit–Rabi–Polarimeter die Möglichkeit bestehen sollte, die Mittel- und Starkfeldübergänge unabhängig voneinander betreiben zu können (siehe Kapitel 8.2), mußten zwei der genannten Magnetfeldkombinationen aufgebaut werden, wie dies schon in der Abbildung 3.1 angedeutet ist. Das Magnetfeld der beiden C-Magnete wird dabei jeweils durch eine Spule erzeugt (ca. 800 Wicklungen Kupferlackdraht bei einem Drahtdurchmesser von 1,0 mm) und mit Hilfe eines Eisenjochs und zweier Polschuhe in den Bereich der Resonatoren transportiert. Diese Komponenten sind zusammen mit den anderen Teilen

	Hochfrequenz-übergang	Frequenz [MHz]	erforderliches Magnetfeld [mT]
Wasserstoff	MFT 1 - 2	79	6,00
	MFT 2 - 3	79	5,36
	SFT 1 - 4	1456	2,51
	SFT 2 - 4	1456	11,49
Deuterium	MFT 1 - 2	16	1,97
	MFT 2 - 3	16	1,72
	MFT 3 - 4	16	1,56
	SFT 1 - 6	390	3,08
	SFT 2 - 6	390	4,34
	SFT 2 - 5	390	7,26
	SFT 3 - 6	390	7,26
	SFT 3 - 5	390	12,14

Tab. 4.1: *Betriebsfrequenzen der verwendeten Hochfrequenzübergänge und die hierfür benötigten mittleren Magnetfeldstärken des statischen Magnetfeldes.*

des Magnetsystem und den Hochfrequenzresonatoren auf einen DN 200 CF - Flansch montiert, befinden sich allerdings als einzige des Aufbaus außerhalb des Vakuums, wie dies in den Abbildungen 4.9, 4.10 und 4.11 zu sehen ist.

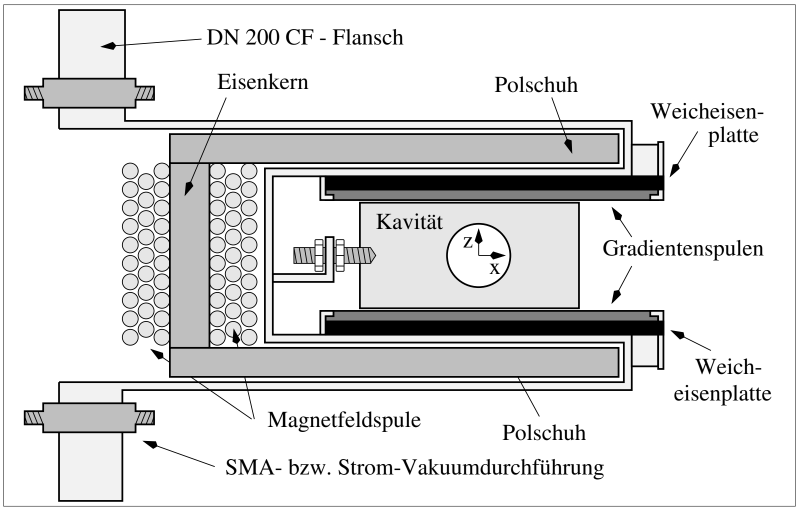

Abb. 4.9: *Schnittbildskizze des Flansches mit Hochfrequenzübergängen und Magnetsystem senkrecht zur Atomstrahlachse. Außer der Magnetfeldspule, dem Eisenkern und den Polschuhen befinden sich alle Komponenten innerhalb der Vakuumapparatur.*

Um eine möglichst weite Ausdehnung der homogenen Magnetfelder entlang der Atomstrahlachse zu erreichen, wird innerhalb des Vakuums pro Resonator ein Paar magneti-

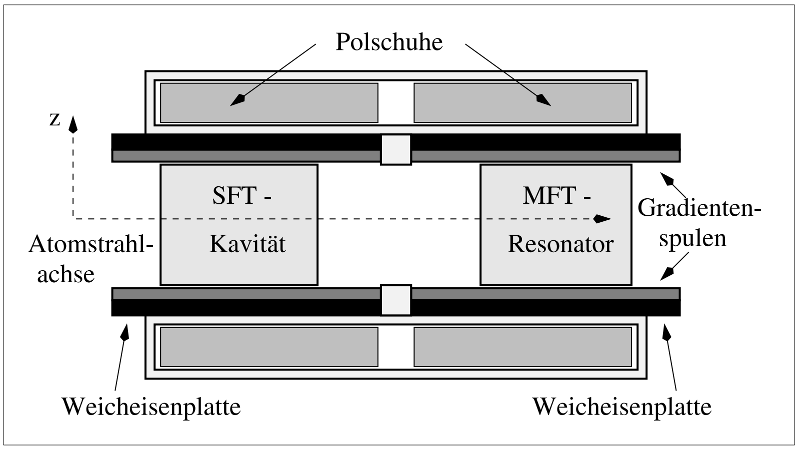

Abb. 4.10: *Schnittbildskizze des Flanschaufbaus entlang der Atomstrahlachse. Die vier magnetischen Weicheisenplatten ragen deutlich über den Rand der Polschuhe hinaus.*

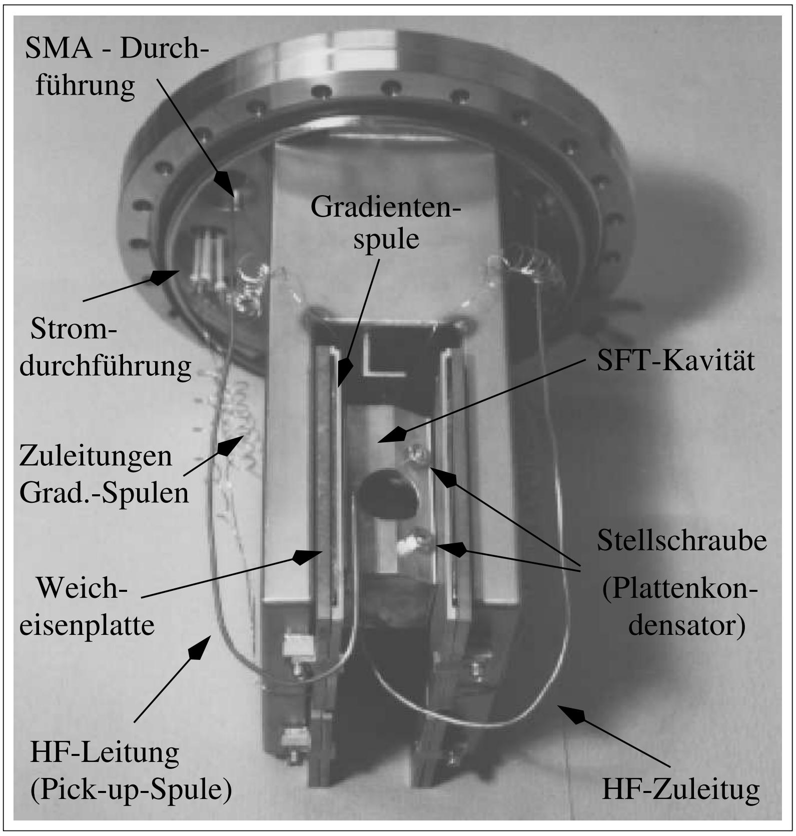

Abb. 4.11: *Photographie des Flansches mit Magnetsystem und SFT- Kavität für Wasserstoff. Sämtliche Komponenten auf dieser Abbildung befinden sich innerhalb des Vakuums.*

scher Weicheisenplatten (DEW, Minimum Extra®) angebracht, welche deutlich über die Polschuhe hinausragen. Mit dieser Anordnung erhält man homogene Magnetfeldbereiche auf einer Länge von mindestens 50 mm. Dies ist in der Abbildung 4.12 zu erkennen, welche Messungen des Magnetfeldes entlang der Atomstrahlachse für verschiedene Magnetströme zeigt.

Die für die Erzeugung des linear steigenden oder fallenden Gradientenfeldes benötigten

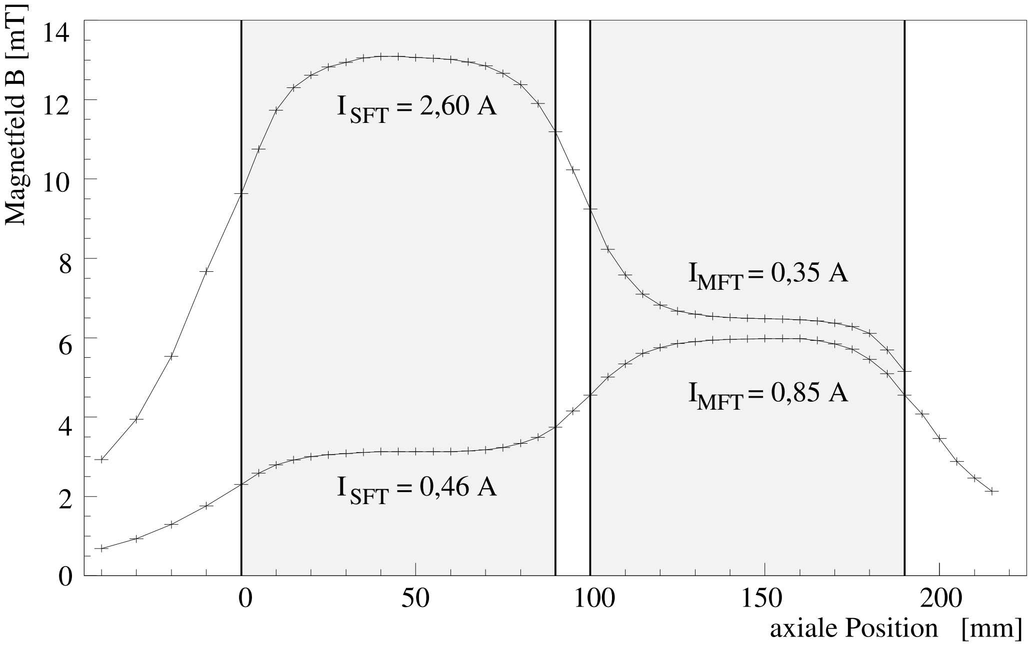

Abb. 4.12: *Messungen des durch die C-Magnete erzeugten Magnetfeldes entlang der Atomstrahlachse. Dargestellt ist jeweils die Magnetfeldkomponente in z-Richtung. Durch I_{SFT} und I_{MFT} werden die Magnetströme der Spulen angegeben, welche das Feld im Bereich des SFT bzw. MFT für die entsprechende Meßkurve erzeugen. Die schraffierten Flächen markieren die Weicheisenplatten.*

Gradientenspulen befinden sich ebenfalls im Vakuum und bestehen aus einem 0,5 mm starken Capton-isolierten Kupferdraht, welcher auf Aluminiumplatten gewickelt ist, in welche Rillen in einem Abstand von ca. 2,0 mm mit einer Tiefe und Breite von jeweils ca. 2,0 mm gefräst wurden. Die Wicklungszahl innerhalb einer Platte ist dabei in Atomstrahlrichtung ab- bzw. zunehmend. Das durch zwei gegenüberliegende Platten gebildete Gradientenfeld besitzt einen Feldgradienten von ca. 0,16 mT/cm bei einem Strom vom 2,0 A in den den Gradientenspulen [Ran 97]. Dieser Magnetstromwert wurde auch bei den Messungen gewählt, welche die Abbildung 4.13 enthält, und bei welchen das aus C-Magnet und Gradientenspulen resultierende statische Magnetfeld für zwei unterschiedliche Einstellungen wiedergegeben ist.

Durch den beschriebenen kompakten Aufbau der Hochfrequenzeinheit kann die vollständige Positionierung und Justage der Hochfrequenzübergänge außerhalb der Vakuumapparatur vorgenommen werden. Zur Umstellung des Meßbetriebes von Wasserstoff auf Deuterium müssen lediglich die Bandleitungsresonatoren ausgetauscht werden (Zeitdauer ca. zwei Stunden incl. Belüften und Bepumpen der Vakuumapparatur).

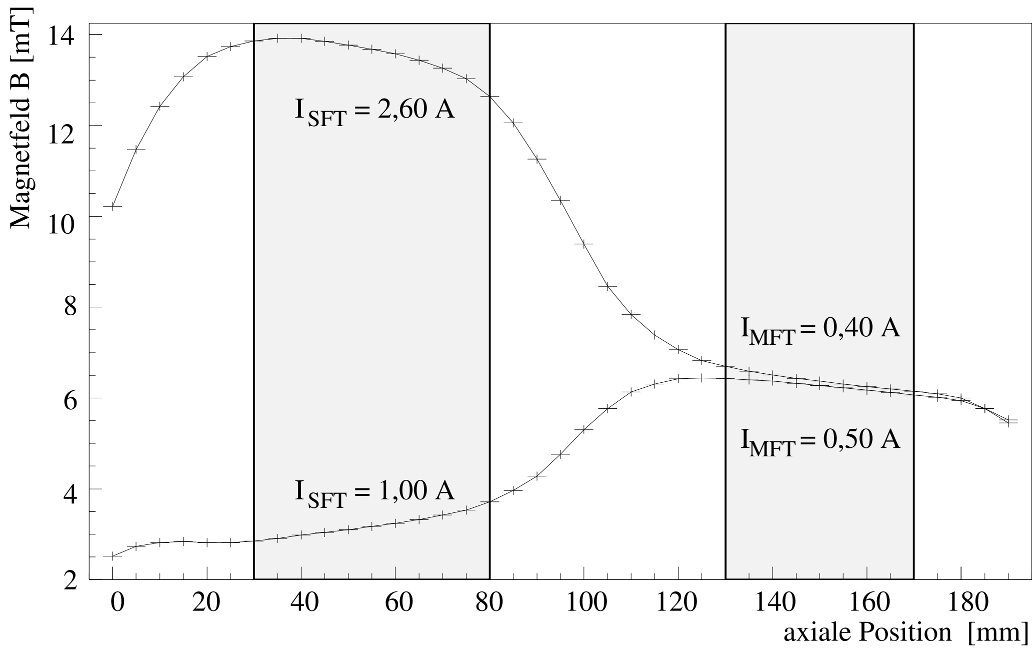

Abb. 4.13: *Messungen des statischen Magnetfeldes entlang der Atomstrahlachse, welches durch C-Magnete und Gradientenspulen erzeugt wird. Dargestellt ist wiederum jeweils die z-Komponente des Feldes. Durch die schraffierten Flächen werden die Positionen des SFT (linker Bereich) und des MFT (rechts) markiert. Als Nullpunkt der z-Achse wurde wie in Abbildung 4.12 die linke Kante der linken Weicheisenplatte definiert.*

4.3 Die Sechspolmagnetsysteme

Die zur Strahlanalyse notwendige Trennung der Strahlatome nach ihren magnetischen Momenten kann nach [Ger 21, Ger 22] durch die Verwendung von inhomogenen Magnetfeldern erreicht werden.
Im Breit–Rabi–Polarimeter werden aus diesem Grund mehrere Sechspolmagnete in zwei Magnetsystemen eingesetzt, welche nach ihrem Verwendungszweck als Kalibrationssystem bzw. Analysiersystem bezeichnet werden.
Letzteres besteht aus zwei Magneten, welche eine Länge von 70 mm bzw. 97 mm besitzen und in der Sextupolkammer angeordnet sind. Um die Positionen der beiden Magnete innerhalb der Kammer verändern zu können (z.B. zur Optimierung der Signalintensität), wurde ein Befestigungssytem aufgebaut, mit dessen Hilfe eine Verschiebung der Magnete in alle drei Raumrichtungen ermöglicht wird. Da die zwei Sextupolmagnete momentan zusätzlich als Leitwertbegrenzer fungieren müssen (siehe Kapitel 4.1 und Abbildung 4.1), wurden sie am Anfang bzw. am Ende der Kammer positioniert. Zur Verbesserung ihrer Separationseffizienzen kann mit Hilfe einer Vakuumlineardurchführung eine axiale Strahlblende

(Abbildung 4.14) vor den ersten der beiden Sextupolmagnete bewegt werden.

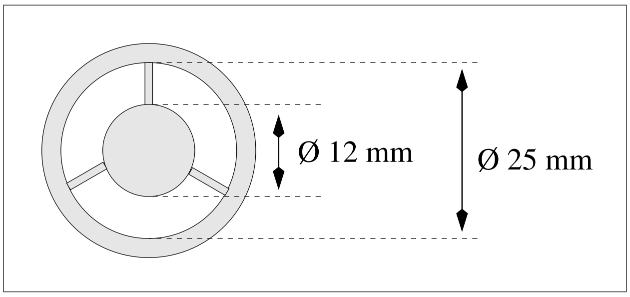

Abb. 4.14:
Skizze der axialen Strahlblende. Sie besteht aus einem einizigen Stück und wurde aus einem 0,5 mm dicken VA-Stahl-Blech erodiert. Die Breite der drei Stege beträgt 1,0 ± 0,5 mm.

Das andere Magnetsystem kommt zum Einsatz, wenn für Kalibrationsmessungen der Hochfrequenzübergänge ein elektronenspinpolarisierter Atomstrahl erforderlich ist. Im Vergleich zum ersten System wird bei diesem zusätzlich in der Kalibrationskammer ein weiterer Sechspol in den Atomstrahl bewegt. Dieser sogenannte Kalibrationsmagnet (Länge 88 mm) befindet sich zusammen mit einer Lochblende und zwei axialen Strahlblenden, von welchen die eine vor, die andere hinter dem Magneten befestigt ist, auf einer Alumiumplatte. Diese Platte ist auf zwei Schienen gelagert und kann mittels einer weiteren Vakuumlineardurchführung verschoben werden. Darüberhinaus ist die Platte mit einem Gewindelochraster versehen, wodurch die Position des Sextupols entlang der Atomstrahlachse variiert werden kann.
Die Radien der Lochblende und der axialen Strahlblenden, sowie die Positionen der einzelnen Magnete entlang der Atomstrahlachse können dem Anhang B entnommen werden.

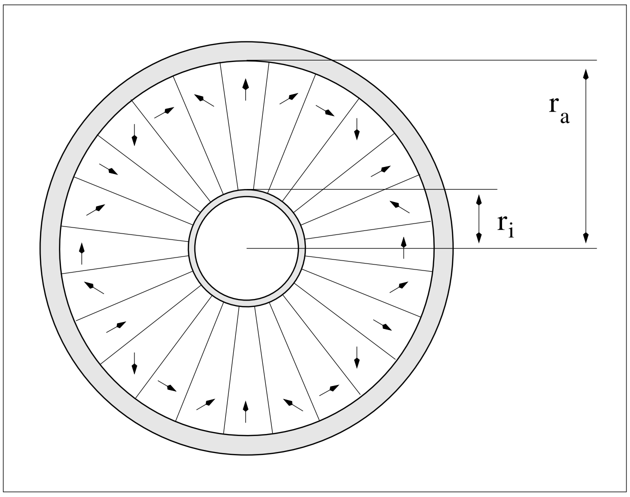

Abb. 4.15:
Querschnitt durch einen Permanentsechspolmagneten. Die Pfeile symbolisieren jeweils die Magnetisierungsrichtung in jedem der 24 Segmente. Mit r_a und r_i werden der Außen- bzw. Innenradius des Magneten ohne Kapselung bezeichnet. Letzterer entspricht bei diesen Magneten gleichzeitig dem Polspitzenradius r_{pt}. Durch die schraffierten Bereiche wird die Edelstahlkapselung angedeutet.

Bei allen dreien der genannten Sextupolmagnete handelt es sich um zylindrische Permanent-Sechspolmagnete (Vacuumschmelze) mit einem Innendurchmesser von 25 mm und

einem Außendurchmesser von 80 mm. Sie sind aus 24 Segmenten aufgebaut, wobei die Magnetisierung jedes Segmentes gegenüber den Nachbarsegmenten um jeweils 45° - bezogen auf die Radialrichtung - gedreht ist (Abbildung 4.15).
Als Material wird für diese Magnete eine NdFeB-Legierung (Vacuumschmelze, Vacodym®) verwendet, wodurch eine Magnetfeldstärke am Polspitzenradius r_{pt}, das sogenannte Polspitzenfeld B_{pt}, von 1,47 T erreicht werden kann (siehe Abbildung 6.1). Da diese Legierung nicht resistent ist gegenüber Wasserstoff, werden die Magnete mit einer ultrahochvakuumdichten Edelstahlhülle gekapselt, welche eine Dicke von 1 mm an der Innenseite und den Stirnseiten besitzt und an der Außenseite 5 mm stark ist.
Der Verlauf der radialen Magnetfeldkomponente als Funktion des Azimuthalwinkels ist am Beispiel des Kalibriermagneten in der Abbildung 4.16 dargestellt. Die hierin gezeigte Messung wurde mit Hilfe eines Teslameters (Projekt Elektronik, FM 2002 mit 8,0 mm Transversalsonde) durchgeführt. Eine im Rahmen dieser Meßreihe vorgenommene Untersuchung des Zusammenhangs von Radius und radialem Magnetfeld zeigt Abbildung 6.1.

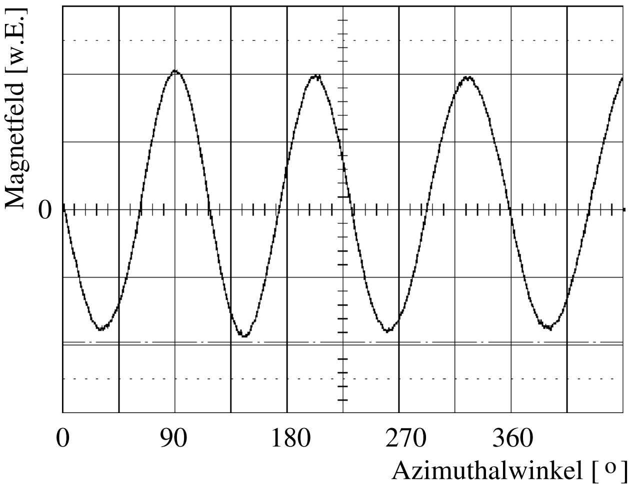

Abb. 4.16:
Messung der radialen Magnetfeldkomponente des 88 mm langen Sechspolmagneten als Funktion des Azimuthalwinkels. Die radiale Position der Hall-Sonde betrug $r = 10$ mm. Die Abnahme der Magnetfeldstärke bei größeren Winkel wird durch eine leichte Verkippung des Magneten relativ zur Meßsonde verursacht.

4.4 Der Atomstrahldetektor

Die beiden Analysekomponenten der Detektorkammer (Strahlunterbrecher und Quadrupolmassenspektrometer) und das Datenaufnahmesystem bilden die drei Hauptbestandteile des Atomstrahldetektors (siehe Abbildungen 4.1 und 4.17).
Der Chopper dient der periodischen Unterbrechung des aus der Sechspolkammer kommenden Atomstrahls und damit der Unterscheidung von Strahlatomen und Restgasatomen aus der Detektorkammer. Er ist aus zwei symmetrisch angeordneten Flügeln aufgebaut, von welchen jeweils eine Sektorfläche mit einem Winkel von 90° abgedeckt wird. Er rotiert mit einer Frequenz von maximal 8,7 Hz, als Motor dient ein laufruhiger Gleichstrommo-

tor (Portescap, escap® 28L28-219 BS 64 X), der Übergang in das Innere der Vakuumapparatur erfolgt mit Hilfe einer Vakuumdrehdurchführung (AP&T, Ferrofluidic® MB-250-BN-101). Nach dem Chopper befindet sich eine Lochblende (Durchmesser 2,0 mm), durch welche die Strahlatome in den Formationsraum des Massenspektrometers (QMS) gelangen (Leda–Mass, Multi-Quad 300 D mit Crossed-Beam Ionenquelle, Triple-Filter und Channeltron®[3]). Im Formationsraum werden die Atome durch Stöße mit thermisch emittierten Elektronen bei 70 eV ionisiert und in das erste der drei Massenfilter injiziert. Die nach ihrem Masse/Ladungs-Verhältnis getrennten Ionen gelangen nach dem dritten Massefilter wahlweise in einen Faraday-Auffänger oder in ein Channeltron, bei welchem die anliegende Spannung zwischen 0,7 kV und 2,8 kV variiert werden kann. Die im Faraday-Auffänger oder im Channeltron entstandenen Strompulse können entweder mit dem Steuergerät des QMS ausgelesen und analysiert werden oder sie können direkt nach der Ionennachweiseinheit ausgekoppelt und mit externer Elektronik ausgewertet werden. Für diese Weiterverarbeitung, zu welcher üblicherweise die Ladungspulse des Channeltrons herangezogen werden, stehen zwei unterschiedliche Datenaufnahmesysteme zur Verfügung, welche in der Abbildung 4.17 skizziert sind.

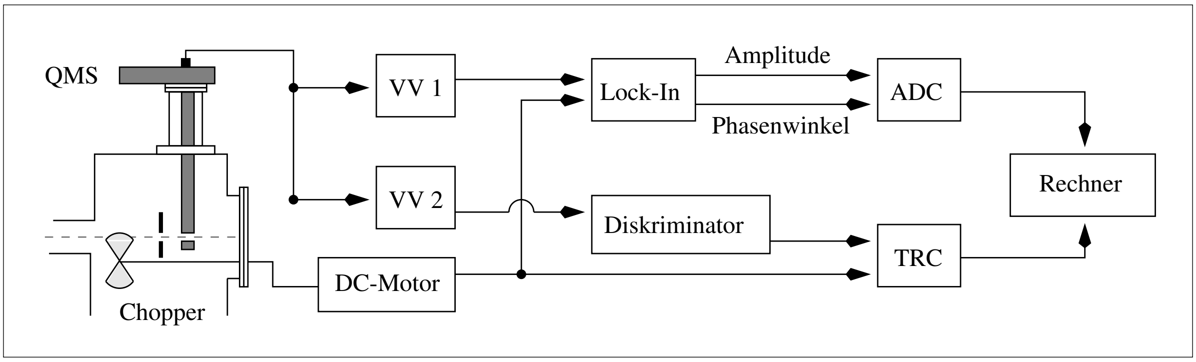

Abb. 4.17: *Schematische Darstellung des Atomstrahldetektors. Im oberen Datenaufnahmesystem gelangen die vom Massenspektrometer (QMS) kommenden Strompulse über einen integrierenden Vorverstärker (VV 1) zu einem Lock-In Verstärker. Als Referenzsignal dient das Signal des Winkelschrittgebers des Gleichstrommotors (DC-Motor). Die Lock-In Ausgangsspannungen werden mit einem Analog-Digital-Converter (ADC) eingelesen und können im Rechner ausgewertet werden. Für die Einzelpuls-Zählung werden die Pulse mit einem schnellen Vorverstärker (VV 2) verstärkt und zu einer zeitauflösenden Zählelektronik (TRC) geleitet. Diese wird mit dem Choppersignal synchroniert und über einen Rechner angesteuert und ausgelesen.*

[3]Die Funktionsweise eines Quadrupolmassenspektrometers wird in Grundzügen in [Bal] beschrieben. Der Aufbau und die Wirkungsweise eines ein- oder mehrstufigen Massenfilters ist detailliert in [Hid] erläutert, Hinweise zum Betrieb eines Channeltrons sind in [Gab 95, Gal] zu finden.

Die Wahl des Aufnahmesystems richtet sich dabei nach der zu erwartenden Zählrate: Bei geringen Strahlintensitäten kann mit der Einzelpuls-Zählung eine höhere Sensitivität und Genauigkeit erreicht werden. Hierzu wird am Channeltron eine Spannung von 1,93 kV angelegt, damit sämtliche Ausgangspulse gesättigt sind und eine Amplitude besitzen, welche oberhalb der Schwelle des nachfolgenden Vorverstärkers liegt. Mit diesem schnellen Vorverstärker (EG&G ORTEC, VT 120 A) werden die Pulse zunächst verstärkt und erreichen anschließend über einen Diskriminator (EG&G ORTEC, pico-Timing^{TM} Discriminator 9307) eine zeitauflösende Zählelektronik[4] (TRC). Diese wird mit dem Signal des Winkelschrittgebers[5] synchronisiert und ermöglicht die Bestimmung der Zählrate als Funktion der Zeit (Abbildung 4.18). Die in der Abbildung zu erkennenden Signalfluktuationen innerhalb der einzelnen Plateaus werden durch die in Kapitel 4.1 genannten Saugleistungschwankungen hervorgerufen. Bei Messungen mit einem schlechteren Signal-zu-Untergrund Verhältnis wird der hierdurch verursachte Meßfehler so groß, daß die Methode der Einzelpuls-Zählung noch nicht in größerem Umfang eingesetzt werden konnte. Die Messungen erfolgten aus diesem Grund überwiegend nach der im Folgenden beschriebenen Methode der Proportional-Strommessung. Es wird jedoch erwartet, daß das Meßsystem nach der Optimierung der Vakuumapparatur (Januar 1998) besser genutzt werden

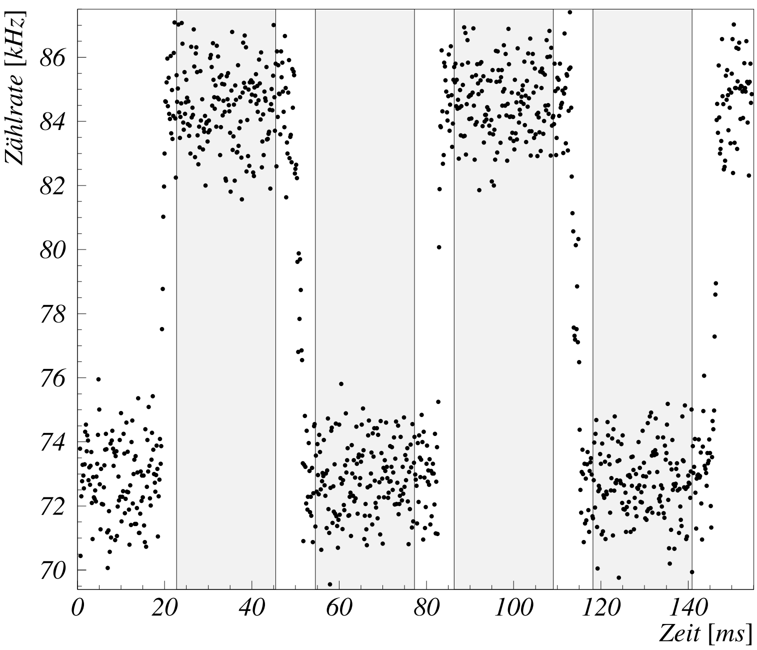

Abb. 4.18: *Mit der Methode der Einzelpuls-Zählung gemessene Zählrate als Funktion der Zeit. Es wurden 125 × 2 Chopperperioden von 77,6 ms aufgenommen. Die gemessene Zeit entspricht 1024 Kanälen der Zählelektronik, wodurch sich eine Zeitauflösung von 152 µs ergibt. Die effektive Meßzeit betrug etwa 30 s. Die schraffierten Flächen deuten die Auswertefenster für offenen, bzw. geschlossenen Chopper an.*

[4] Das TRC-Modul wurde am MPI für Kernphysik in Heidelberg entwickelt und enthält u.a. einen 110 MHz - Pulszähler. Da das Modul schon mehrfach eingesetzt wurde, finden sich ausführliche Beschreibung darüber zum Beispiel in [Ste 92, Lin 93, Sim 94]. Für die Auslese konnte teilweise auf bestehende Software [Bra 97] zurückgegriffen werden.

[5] Der Winkelschrittgeber ist zusammen mit einem Untersetzungsgetriebe in den Motor integriert.

kann.
Bei der erwähnten zweiten Nachweismöglichkeit wird das Channeltron bei einer Spannung von 1,31 kV und somit weit unterhalb der Sättigungsgrenze betrieben. Die Strompulse werden mit einen Elektrometervorverstärker (Balzers, EP 112) verstärkt, aufintegriert und in ein der Stromstärke proportionales Spannungssignal umgewandelt. In einem Lock-In Verstärker (HMS, Dynatrac 503, 511 und 521) wird das durch den Strahlunterbrecher modulierte Strahlsignal anschließend mit dem Referenzsignal des Winkelschrittgebers phasengerecht korreliert[6], so daß am Lock-In Verstärker eine Ausgangsspannung gemessen werden kann, welche der untergrundkorrigierten Strahlintensität entspricht. Dieser Spannungswert und eine dem Phasenunterschied zwischen Meßsignal und Referenzsignal proportionale Spannung wird über einen CAMAC-Analog Digital Converter (Hytec, ADC 123-2) eingelesen und im Computer ausgewertet. Da die Phasenbeziehung zwischen Referenz- und Meßsignal am Lock-In Verstärker nicht auf einen festen Wert eingestellt werden kann, sondern kontinuierlich nachgeregelt wird, ergeben sich durch die Saugleistungsschwankungen auch in diesem Fall Signalfluktuationen. Diese treten vor allen Dingen bei niedrigen Strahlintensitäten auf und können nur teilweise durch längere Integrationszeiten ausgeglichen werden.

Eine weitere Komponente des Atomstrahldetektors ist ein Strahlunterbrecher, welcher sich in der HFT-Kammer befindet und manuell über eine Vakuumdrehdurchführung (Leybold, FPR 16/16 N) bewegt werden kann. Dieser ermöglicht die Trennung des Atomstrahlsignals von jenem Signal, welches durch Restgasfluß von den ersten drei Kammer in die Detektorkammer verursacht wird.
Mehrere Lochblenden an verschiedenen Positionen des Polarimeters reduzieren den Anteil an rekombinierten Molekülen im Formationsraum des Massenspektrometers. Ihre Positionierung in der x-z-Ebene (senkrecht zur Atomstrahlachse) wurde wie bei allen polarisationsanalysierenden Komponenten unter Verwendung eines He-Ne-Lasers und eines Theodolithen vorgenommen.

[6]Eine Beschreibung der Lock-In Technik enthält zum Beispiel [Bec 95].

5 Die Hochfrequenzübergänge

Die Bestimmung der Polarisationen eines Wasserstoff- oder Deuteriumatomstrahls erfolgt auf der Basis der relativen Besetzungszahlen. Im Kapitel 3.1 wurde erläutert, wie diese Größen aus Messungen von Strahlintensitäten gewonnen werden können, wenn sich die analysierten Strahlströme in der relativen Besetzung jener Zustände unterscheiden, welche verschiedene magnetischen Komponenten des Elektronenspins (m_s) besitzen. Die dazu notwendigen Vertauschungen zweier Hyperfeinstrukturbesetzungen werden beim Polarimeter durch adiabatische Hochfrequenzübergänge nach A. Abragam und J.M. Winter [Abr 58] induziert. Deren allgemeines Funktionsprinzip, welchem die Wechselwirkung eines statischen und eines hochfrequenten Magnetfeldes mit dem magnetischen Moment des Atoms zugrunde liegt, wird nachfolgend erläutert, die beim Polarimeter verwendeten Hochfrequenzübergänge werden im einzelnen in Kapitel 5.2 beschrieben.

5.1 Adiabatische Hochfrequenzübergänge

Klassische Behandlung

Zur Veranschaulichung der Vorgänge innerhalb eines Hochfrequenzübergangs dient die klassische Beschreibung der Bewegung eines magnetischen Momentes in einem äußeren Magnetfeld.
Auf ein magnetisches Moment $\vec{M}$ wirkt in einem homogenen Magnetfeld $\vec{B}_z$ ein Drehmoment, weswegen das magnetische Moment mit der sogenannten Larmorfrequenz ω_0 um die durch die magnetische Feldrichtung gegebene Quantisierungsachse präzediert (Abbildung 5.1 a.). Betrachtet man diese Bewegung in einem Koordinatensystem S', das mit der Larmorfrequenz um die z-Achse rotiert [Hae 67], so verschwindet in diesem System S' das vom magnetischen Moment gesehene äußere Magnetfeld $\vec{B}_z$ und die zeitliche Änderung des magnetischen Momentes ist daher Null. Es ist somit in S' räumlich konstant, wie auch das Hochfrequenzfeld $\vec{B}_{HF}$, welches im Laborsystem mit der Frequenz $\omega_{HF} = \omega_0$ senkrecht zum statischen Magnetfeld $\vec{B}_z$ schwingt. Unter dem Einfluß dieses konstanten Magnetfeldes $\vec{B}_{HF}$ beginnt das im Koordinatensystem S' ruhende magnetische Moment $\vec{M}_0$ nun um $\vec{B}_{HF}$ zu präzedieren (Abbildung 5.1 b.), der Präzessionswinkel und damit die Orientierung von $\vec{M}(t)$ ist von der Aufenthaltsdauer t des magnetischen Moments - bzw. des Strahlatoms - im Hochfrequenzfeld abhängig. Da die räumliche Ausdehnung des HF-Feldes durch die geometrischen Abmessungen des Resonators gegeben ist, wird die Wechselwirkungszeit t durch die Geschwindigkeit des Strahlatoms bestimmt. Für einen Atomstrahl mit einer Maxwellschen Geschwindigkeits-Verteilung (siehe Kapitel 2.4) hat dies zur Folge, daß das magnetische Moment nur jener Strahlatome um 180° gedreht wird,

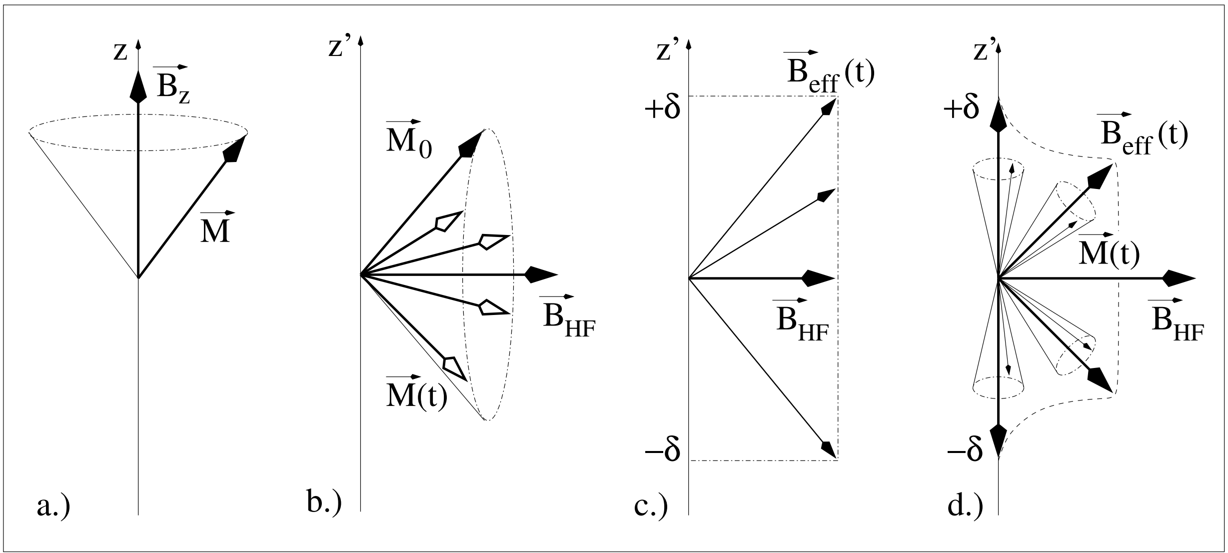

Abb. 5.1: *Schematische Darstellung der Wirkungsweise eines Abragam-Winter-Übergangs: Spinpräzession eines magnetischen Momentes $\vec{M}$ a.) in einem äußeren Magnetfeld $\vec{B}_z$, b.) um die magnetische Komponente eines zusätzlichen Hochfrequenzfeldes $\vec{B}_{HF}$ in einem mit der Larmorfrequenz rotierenden System und d.) in einem adiabatischen Übergang mit einem Gradientenfeld $\vec{\delta}(t)$ in $z = z'$-Richtung. Die Zeichung c.) skizziert die zeitliche Änderung des effektiven Magnetfeldes $\vec{B}_{eff}(t)$ bzgl. des rotierenden Systems für den Fall, daß das Wechselfeld plötzlich ein- und ausgeschaltet wird.*

welche eine zur entsprechenden Aufenthaltsdauer passende Geschwindigkeit besitzen. Alle anderen Strahlatome verlassen den Bereich des Hochfrequenzübergangs mit einem von 180° abweichenden Präzessionswinkel und werden dementsprechend nur mit einer vom Winkel abhängigen Wahrscheinlichkeit in den anderen Spinzustand übergeführt. Diese unvollständige Vertauschung ist die Ursache für die niedrige Austauscheffizienz von 0,76 [Kus 59], welche ein Hochfrequenzübergang theoretisch bei dieser Methode der „exakten Resonanz“ maximal erreichen kann.

Bei der Methode des adiabatischen Übergangs [Blo 46], wie sie für Hochfrequenzresonatoren erstmals von A. Abragam und J.M. Winter [Abr 58] eingesetzt wurde, wird der Aufbau dahingehend verändert, daß dem homogenen statischen Magnetfeld ein statisches Gradientenfeld überlagert wird, welches parallel zur z-Achse orientiert ist. Entlang der Atomstrahlachse verändert sich im Laborsystem auf diese Weise der Betrag des Magnetfeldes von $B_z+\delta$ nach $B_z-\delta$ (oder umgekehrt). Im rotierenden Koordinatensystem bewirkt das Gradientenfeld ein zusätzliches, sich zeitlich änderndes Magnetfeld $\vec{\delta}(t)$. Infolgedessen verspürt ein magnetisches Moment beim Durchflug des Atoms durch den Hochfrequenzbereich ein effektives Magnetfeld $\vec{B}_{eff}(t)$, welches sich aus $\vec{\delta}(t)$ und der Stärke des

Hochfrequenzfeldes $\vec{B}_{HF}$ zusammensetzt und welches im Falle eines negativen Feldgradienten entlang der strichpunktierten Linie von schräg oben nach schräg unten gedreht wird (Abbildung 5.1 c.). Ist

$$\delta(t=0) \gg B_{HF} \qquad (Polarisationsbedingung) \tag{5.1}$$

und verläuft die zeitliche Änderung des effektiven Magnetfeldes adiabatisch, d.h. genügend langsam, im Vergleich zur Larmorpräzession, so folgt das magnetische Moment diesem Magnetfeld auf einem engen Präzessionskegel und wird um nahezu 180° gedreht (Abbildung 5.1 d.). Im Vergleich zur Zeichnung 5.1 c.) wird in 5.1 d.) der Situation Rechnung getragen, daß beim Durchflug des magnetischen Momentes die vom ihm gesehene Amplitude des Wechselfeldes langsam bis zu ihrem Maximalwert ansteigt und später wieder auf Null abklingt.
Berücksichtigt man, daß die Variation des statischen Feldes in beiden Systemen identisch ist, so ergibt sich aus der genannten Forderung einer langsamen Magnetfeldänderung die Gleichung (5.2), welche als *Adiabatenbedingung* bezeichnet wird.

$$\frac{1}{B_{HF}} \cdot \left(\frac{dB_z}{dt}\right) \ll \frac{\mu_B}{g_s \hbar} B_{HF} \quad . \tag{5.2}$$

Da der Spin in einem solchen Hochfrequenzübergang um eine effektive Quantisierungsachse gedreht wird, ist die Drehung unabhängig von der Geschwindigkeit der Strahlatome. Für das Erreichen einer hohen Vertauschungseffizienz ist es vor allen Dingen die Erfüllung der Adiabatenbedingung (5.2) ausschlaggebend, da selbst für $B_{HF} = 0,2\,\delta_0$ Effizienzen von 0,96 erreicht werden können [Hae 67].

Quantenmechanische Behandlung

Die Zustandsänderung eines Systems aufgrund einer Variation des äußeren Magnetfeldes wird in [Mes 90] vollständig quantenmechanisch beschrieben. Neben der Betrachtung einer plötzlichen Richtungsänderung des Magnetfeldes wird hierin auch der Prozeß einer adiabatischen Änderung dargestellt und eine Herleitung für die Adiabatengleichung gegeben. Für den Spezialfall einer adiabatischen Magnetfeldänderung im Zusammenhang mit Hochfrequenzübergängen wird in [Phi 87] die Adiabatenbedingung abgeleitet.

Als Ausgangspunkt dient ein Zwei-Niveau-System, für das exakte analytische Lösungen berechnet werden können und das äquivalent ist zu einem Spin - $\frac{1}{2}$ - System für den Fall, daß sich das Spin - $\frac{1}{2}$ - System in einem Magnetfeld befindet und zwei Ausrichtungsmöglichkeiten bezüglich dieses Feldes besitzt. Die beiden möglichen Zustände des Systems werden mit $|1\rangle$ und $|2\rangle$ bezeichnet, die dazugehörigen Energieeigenwerte dementsprechend mit E_1

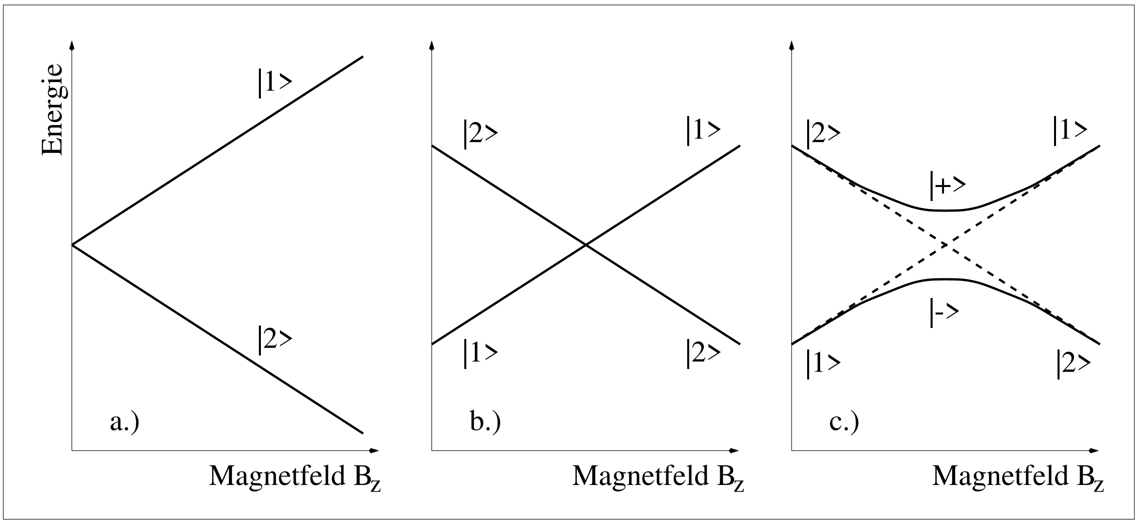

Abb. 5.2: *Schematische Darstellung der Energieeigenwerte eines Zwei-Niveau-Systems in Abhängigkeit von einem äußeren Magnetfeld B_z a.) für ein raumfestes Koordinatensystem b.) für ein mit der Frequenz ω um die z-Achse rotierendes System und c.) für das rotierende Koordiantensystem unter der gleichzeitigen Wechselwirkung mit einem Hochfrequenzfeld.*

und E_2. Deren Aufspaltung in Abhängigkeit von einem äußeren Magnetfeld zeigt die Abbildung 5.2 a. (vgl. Breit–Rabi–Diagramme der Abbildung 1.1 und 1.3).
Zur Vereinfachung der späteren Berechnungen wird dieses ungestörte System zunächst in ein Koordinatensystem transformiert, welches sich mit einer Frequenz ω um die z-Achse dreht. Der Hamiltonoperator bleibt trotz der Transformation diagonal [Phi 87], so daß die Zustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$ weiterhin Eigenzustände des Zwei-Niveau-Systems sind. Durch den Transformationsterm werden allerdings die Eigenwerte E_1 und E_2 um einen konstanten Wert erniedrigt, bzw. erhöht, wie dies in der Abbildung 5.2 b. zu erkennen ist, welche das Energieeigenwert–Diagramm für das rotierende System zeigt.
Auf das Spin - $\frac{1}{2}$ - Teichen wirkt nun ein hochfrequentes Magnetfeld B_{HF}, welches eine konstante Amplitude besitzt und mit der Frequenz ω in der x-y-Ebene rotiert.
Der Einfluß dieses Magnetfeldes auf das ungestörte System kann mit Hilfe der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung beschrieben werden, wobei der Hamiltonian des mitrotierenden Systems aus einem ungestörten Anteil H_0 und aus dem Störoperator W gebildet wird, durch welchen die Wechselwirkung des Systems mit dem Hochfrequenzfeld charakterisiert wird:

$$H = H_0 + W \quad . \tag{5.3}$$

Infolge der von Null verschiedenen Nichtdiagonalelemente der Störmatrix W ist der Hamiltonian H nicht länger diagonal und die Zustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$ sind nicht mehr Eigenzustände des Systems. Es ist aber möglich, die Eigenzustände des gestörten Systems durch eine Linearkombination der ungestörten Zustände darzustellen,

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \cos\phi\,|1\rangle + \sin\phi\,|2\rangle \quad , \\ |-\rangle &= \sin\phi\,|1\rangle - \cos\phi\,|2\rangle \quad , \end{aligned} \tag{5.4}$$

wobei der Mischungswinkel ϕ eine Funktion des statischen Magnetfeldes $B_{0,z}(t)$ und des Hochfrequenzfeldes B_{HF} ist. Bei ihrer Magnetfeldabhängigkeit zeigen die Energieeigenwerte E_+ und E_-, welche in der Abbildung 5.2 c. mittels durchgezogenen Linien kenntlich gemacht sind, im Vergleich zum ungestörten System ein verändertes Verhalten, da sie sich nunmehr aufspalten und nicht mehr überschneiden. Hierdurch entsteht ein Energieband, deren Breite von der Störung W abhängig ist. Befindet sich ein Spin - $\frac{1}{2}$ - Teilchen in dem zum Eigenvektor $|+>$ gehörenden Energiezustand und bewegt es sich nun entlang des oberen Energieniveaus von rechts nach links, so entspricht dies der zeitlichen Änderung des Magnetfeld $B_z(t)$, bzw. dem Flug eines Atoms durch einen Hochfrequenzübergang mit einem negativen Gradienten. Während dieser Bewegung erfährt das Teilchen einen Übergang vom Zustand $|1\rangle$, in welchem es sich anfangs befunden hat, in den Zustand $|2\rangle$. Darüberhinaus besteht aber auch die Möglichkeit, daß das Teilchen im Verlauf der Magnetfeldänderung die Energiebarriere überwinden kann und im selben Zustand den Hochfrequenzübergang verlässt, in welchem es eingetreten ist. Da die Annäherung der beiden Energieniveaus für das Resonanzfeld am größten ist, ist auch für diesen Wert die Wahrscheinlichkeit p maximal. Diese kann analytisch berechnet werden und ergibt sich zu [Phi 87]

$$p = e^{-2\pi\kappa} \quad \text{mit} \quad \kappa = \left| \frac{\mu_s\, B_{HF}^2}{2\, \dot{B}_{0,z}\, \hbar} \right| \quad . \tag{5.5}$$

Ein Übergang wird dann als adiabatisch bezeichnet, wenn das Teilchen bei einer Änderung des äußeren Magnetfeldes im Eigenzustand des gekoppelten Systems bleibt ($|+\rangle$ bzw. $|-\rangle$) und die Wahrscheinlichkeit für einen Wechsel in den anderen Eigenzustand vernachlässigbar wird. Dies bedeutet, daß in Gleichung (5.5) der Wert für κ sehr viel größer als eins sein sollte, wodurch sich die Bedingung (5.6) ergibt,

$$\mu_s\, B_{HF}^2 \gg 2\, \dot{B}_{0,z}\, \hbar \quad , \tag{5.6}$$

welche identisch ist mit der in (5.2) beschriebenen Adiabatengleichung.

Die Gleichung (5.5) gibt meist auch bei Systemen mit mehr als zwei Zuständen, auf welche die hier beschriebene Herleitung übertragen werden kann, eine gute Abschätzung für die nicht-adiabatische Übergangswahrscheinlichkeit. Diese Wahrscheinlichkeit läßt sich in den meisten Fällen nicht geschlossen, sondern nur mit Hilfe von Näherungsverfahren ermitteln.

5.2 Verwendete Hochfrequenzübergänge

Starkfeldübergänge

Entgegen ihrer Bezeichnung unterscheiden sich Starkfeldübergänge (SFT) nicht unbedingt von Mittel- oder Schwachfeldübergängen durch das für deren Betrieb benötigte statische Magnetfeld, sondern dadurch, daß bei Starkfeldübergängen Besetzungsvertauschungen zwischen verschiedenen Zeeman–Multipletts induziert werden, wohingegen die beiden anderen Typen von Hochfrequenzübergängen Umbesetzungen innerhalb eines Multipletts bewirken. Wie der Tabelle 4.1 entnommen werden kann, liegen die beim Polarimeter für einen Starkfeldübergang verwendeten Magnetfelder im Fall der Wasserstoff-SFT's weit unterhalb des kritischen Magnetfeldes B_c^H, bei den SFT's für Deuterium ist nur für einen Übergang ein Magnetfeld im Bereich des kritischen Feldes B_c^D erforderlich.

Die Gruppe der Starkfeldübergänge wird unterteilt in die sogenannten π - Übergänge, bei welchen sich die beteiligten Zustände im Gesamtdrehimpuls F und auch in dessen magnetischer Komponente m_F unterscheiden (Auswahlregeln: $\Delta F = \pm 1$, $\Delta m_F = \pm 1$) und in die σ - Übergänge, bei welchen die magnetische Quantenzahl gleich bleibt (Auswahlregeln: $\Delta F = \pm 1$, $\Delta m_F = 0$). Experimentell weichen π - und σ -Übergänge in der Weise voneinander ab, daß die Orientierung des Hochfrequenzfeldes im Fall des σ -Übergangs parallel zu der des statischen Feldes ist, beim π -Übergang dagegen ist sie senkrecht zum statischen Magnetfeld.

Da bei einem Hochfrequenzübergang die Besetzungsvertauschungen immer zwischen Hyperfeinstrukturzuständen mit verschiedener Elektronenspinpolarisation stattfinden sollten (siehe Kapitel 3), werden beim Breit–Rabi–Polarimeter im Fall eines Wasserstoffatomstrahls die Starkfeldübergänge SFT 1 - 4 und SFT 2 - 4 eingesetzt.

Bei Deuteriumatomstrahlen wären theoretisch fünf Starkfeldübergänge für die genannten Umbesetzungen geeignet. Da die Übergänge SFT 2 - 5 und SFT 3 - 6 allerdings die gleiche Resonanzbedingung (siehe Tabelle 4.1) und voneinander abweichende Übergangswahrscheinlichkeiten [Beu 65, Fer 95] besitzen, kann dieser Doppelübergang nicht verwendet werden. Es verbleiben die Starkfeldübergänge SFT 1 - 6 , SFT 2 - 6 und SFT 3 - 5.

Mittelfeldübergänge

Da für Mittelfeldübergänge die Auswahlregeln $\Delta F = \pm 1$, $\Delta m_F = \pm 1$ existieren, handelt es sich ausschließlich um π -Übergänge, bei welchen das Hochfrequenzfeld senkrecht zum statischen Magnetfeld schwingt. Die Feldstärken der statischen Magnetfelder liegen dabei jeweils im Bereich von etwa 0,1 - 0,2 B_c.

Es ergeben sich für Wasserstoffatome zwei mögliche Resonanzen, welche zu den Umbesetzungen 1 - 2 und 2 - 3 führen. Diese beiden Übergänge können infolge der verwendeten Magnetfelder gut voneinander getrennt werden. Jedoch ist der alleinige Betrieb des Übergangs 1 - 2 für die Atomstrahlanalyse nicht sinnvoll, da durch ihn keine Signaländerung im Massenspektrometer erzeugt wird. Durch eine geeignete Wahl der Magnetfelder ist es aber möglich, innerhalb eines Resonators beide Resonanzbedingungen erfüllen zu können (siehe Abbildung 4.8) und so neben dem MFT 2 - 3 noch einen zweiten geeigneten Hochfrequenzübergang zu besitzen. Bei einer solchen Einstellung werden die beiden Resonanzen vom Atomstrahl sowohl zeitlich, als auch räumlich voneinander getrennt durchlaufen. Neben der absoluten Feldstärke des statischen Magnetfeldes ist aber auch das Vorzeichen des Feldgradienten für den Betrieb eines MFT 1 - 3 ausschlaggebend, wie in (5.7) mit Hilfe der in Kapitel 3 eingeführten Besetzungstupel verdeutlicht wird.

$$
\begin{aligned}
pos.: \quad & \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ n_4 \end{pmatrix} \xrightarrow{2-3} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_3 \\ n_2 \\ n_4 \end{pmatrix} \xrightarrow{1-2} \begin{pmatrix} n_3 \\ n_1 \\ n_2 \\ n_4 \end{pmatrix} \xrightarrow{Sechspol} \begin{pmatrix} n_3 \\ n_1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} , \\
neg.: \quad & \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ n_4 \end{pmatrix} \xrightarrow{1-2} \begin{pmatrix} n_2 \\ n_1 \\ n_3 \\ n_4 \end{pmatrix} \xrightarrow{2-3} \begin{pmatrix} n_2 \\ n_3 \\ n_1 \\ n_4 \end{pmatrix} \xrightarrow{Sechspol} \begin{pmatrix} n_2 \\ n_3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} .
\end{aligned}
\tag{5.7}
$$

Bei einem positiven Gradienten wird zuerst die Resonanz zur Umbesetzung der Zustände 2 und 3 durchlaufen und anschließend jene für die Vertauschung 1 - 2. Die Zusammensetzung des mit dem Massenspektrometer analysierten Atomstrahl ist demnach analog jener, welche sich bei der Verwendung eines MFT 2 - 3 ergibt. Für einen MFT 1 - 3 muß der Magnetfeldgradient daher negativ sein.

Bei Deuteriumatomstrahlen lassen sich mit Hilfe der Mittelfeldübergänge drei Umbesetzungen induzieren, weswegen auch drei verschiedene Übergänge betrieben werden können (MFT 3 - 4 , MFT 2 - 4 , MFT 1 - 4). Die Steigung des Magnetfeldgradienten muß dabei analog zu jener bei den Wasserstoffübergängen negativ sein. Da im Fall des MFT 1 - 4 drei Resonanzenbedingungen innerhalb kurzer räumlicher Distanzen erfüllt werden müssen, war es bisher nur möglich, vergleichsweise niedrige Vertauschungseffizienzen zu erzielen Eine weitergehende Optimierung des Mittelfeldübergangs hinsichtlich dieser Problematik wird in [Han 98] durchgeführt werden.

Eine zusammenfassende Übersicht der beim Polarimeter eingesetzten Hochfrequenzübergänge gibt die Tabelle 5.1, die Werte bzgl. der eingekoppelten Hochfrequenzen und der anliegenden Magnetfeldstärken können der Tabelle 4.1 entnommen werden.

	Art des Übergangs	Orientierung B_{HF} zu B_z	Auswahlregeln $(\Delta F\,,\Delta m_F)$	Wasserstoff	Deuterium
MFT	π	$\perp$	$0 \quad , \quad \pm 1$	$1 \leftrightarrow 2\,, 2 \leftrightarrow 3$	$1 \leftrightarrow 2\,, 2 \leftrightarrow 3\,, 3 \leftrightarrow 4$
SFT	π	$\perp$	$\pm 1 \quad , \quad \pm 1$	$1 \leftrightarrow 4$	$1 \leftrightarrow 6$
SFT	σ	$\parallel$	$\pm 1 \quad , \quad 0$	$2 \leftrightarrow 4$	$2 \leftrightarrow 6\,, 3 \leftrightarrow 5$

Tab. 5.1: *Übersicht der beim Polarimeter eingesetzten Hochfrequenzübergänge.*

6 Die Sechspolmagnetsysteme

Da die technischen Details der eingesetzten Sechspolmagnete und der azimuthale Verlauf der radialen Magnetfeldkomponente (Abbildung 4.16) schon im Kapitel 4.3 erläutert wurden, soll in diesem Abschnitt nur der Zusammenhang zwischen Radius und Magnetfeldverlauf und die dadurch auf ein Strahlatom wirkende Kraft genauer betrachtet werden. Außerdem wird das verwendete Programm zur Simulierung der Sechspolmagnetsysteme [Bra 95] kurz beschrieben und es werden die mit diesem Programm gewonnenen Ergebnisse vorgestellt.

6.1 Wasserstoff- / Deuteriumatome im inhomogenen Magnetfeld

Die Feldverteilung im Inneren eines Permanent-Multipolmagneten kann nach [Hal 80] analytisch berechnet werden. Der Betrag des Magnetfeldes ist für einen aus 24 Segmenten bestehenden Sechspolmagneten demnach durch [Sch 91]

$$B(r) := |\vec{B}(r)| = \frac{3}{2}\,J\left(\frac{r}{r_{ps}}\right)^2\left[1-\left(\frac{r_{ps}}{r_a}\right)^2\right]\frac{\sin(4\pi\epsilon/M)}{4\pi/M} = B_{ps}\cdot\left(\frac{r}{r_{ps}}\right)^2 \tag{6.1}$$

gegeben. Dabei bezeichnen J die Magnetisierung, r_{ps} und r_a den Polspitzenradius bzw. den Außenradius des Magneten (siehe auch Abbildung 4.15), ϵ einen fertigungsbedingten Füllfaktor ($\epsilon \approx 0,98$), M die Anzahl der Segmente und $B_{ps} = B(r_{ps})$ das sogenannte Polspitzenfeld.

Man erkennt anhand der Gleichung (6.1), daß ein Sechspolmagnet bezüglich des Betrages seines Magnetfeldes rotationssymmetrisch ist und daß diese Magnetfeldstärke proportional zum Quadrat des Radius ist. Aufgrund der verwendeten Materialien und deren geometrischer Anordnung wird für die eingesetzten Sechspolmagnete am Polspitzenradius $r_{ps} = 12,5\,\mathrm{mm}$ eine Magnetfeldstärke von $B_{ps} = 1,497\,\mathrm{T}$ errechnet [Sch 91].

Eine Messung der radialen Magnetfeldstärke $B(r)$ als Funktion des Radius r zeigt die Abbildung 6.1. Wie die in Abbildung 4.16 gezeigte Meßkurve, wurde diese Messung am Kalibriermagneten (Länge 88 mm) durchgeführt, die axiale Position der Hallsonde war hierbei ca. 10 mm im Inneren des Magneten. An die Meßpunkte wurde danach unter Verwendung eines Analyse-Programms [CER 94] der eingezeichnete Feldverlauf gemäß der Gleichung 6.1 angepaßt, wobei B_{ps} und r_{ps} als freie Parameter behandelt wurden. Die dabei ermittelten Werte von $B_{ps} = 1474,3 \pm 6,6\,\mathrm{mT}$ für das Polspitzenfeld und $r_{ps} = 12,89 \pm 0,29\,\mathrm{mm}$ für den Polspitzenradius stimmen trotz der verwendeten Transversalmeßsonde (Breite 8 mm) und den damit verbundenen systematischen Meßfehlern sehr gut mit den in [Sch 91] angegebenen Werten überein.

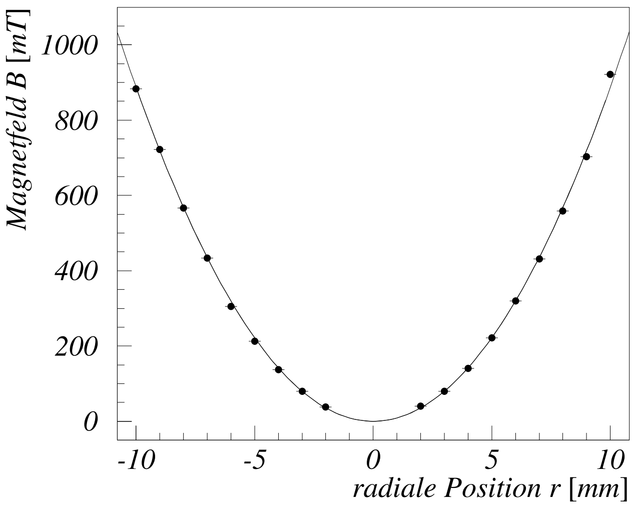

Abb. 6.1:
Messung der radialen Magnetfeldkomponente $B(r)$ des 88 mm langen Sechspolmagneten als Funktion der radialen Position bei festem Azimuthalwinkel. Der an die Meßpunkte gefittete Magnetfeldverlauf ergab ein Polspitzenfeld von $B_{ps} = 1474,3\,mT$ und einen Polspitzenradius von $r_{ps} = 12,9\,mm$.

Für die Kraft, die im Inneren eines Sechspolmagneten auf ein durchfliegendes Atom wirkt, welches sich im Zustand $|i\rangle$ befindet, gilt aufgrund von (6.1)

$$\vec{F}_i = -\frac{\partial V_i}{\partial r}\,\vec{e}_r = -\frac{\partial V_i}{\partial B}\cdot\frac{\partial B}{\partial r}\,\vec{e}_r = -\,\mu_{eff,|i\rangle}(B)\,\frac{\partial B}{\partial r}\,\vec{e}_r \quad . \tag{6.2}$$

V ist hierbei das Potential, in welchem sich das Atom infolge seines magnetischen Moments und unter der Einwirkung des äußeren Magnetfeldes befindet, $\vec{e}_r$ ist der Einheitsvektor in radialer Richtung. Je nach Vorzeichen des effektiven magnetischen Moments μ_{eff}, welches durch die Steigung im Breit–Rabi–Diagramm (Abbildungen 1.1 und 1.3) gegeben ist, werden die Atome in Richtung der Atomstrahlachse fokussiert oder in die entgegengesetzte Richtung defokussiert. Bei einem Wasserstoffatomstrahl ergibt sich daher eine fokussierende Kraft für die Zustände 1 und 2, im Falle von Deuterium werden die Zustände 1, 2 und 3 in Richtung der Strahlachse fokussiert.
Da für die Atomstrahlanalyse ein Teilchenstrahl erforderlich ist, welcher nur noch Atome mit einer positiven Elektronenspinkomponente m_s enthält, ist die Separationseffizienz der Sextupole, bzw. die Transmissionswahrscheinlichkeit der Atome ein wichtiger Parameter. Die Transmissionwahrscheinlichkeit gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein aus der Quelle austretendes Atom in Abhängigkeit von seinem Hyperfeinstrukturzustand ein vorgegebenes Ziel (in den meisten Fällen den Formationsraum des Massenspektrometers) trifft. Ein Sextupol wird dann als ideal bezeichnet, wenn nur Atome mit $m_s = +\frac{1}{2}$ das Ziel erreichen, die Separationseffizienz daher 100 % beträgt.
Aufgrund der hohen Teilchengeschwindigkeiten und der damit vergleichweise kurzen Aufenthaltsdauer der Atome innerhalb der Sechspole werden Atome mit der „falschen" magnetischen Quantenzahl in der Realität aber oftmals nur unzureichend aus dem Strahl entfernt. Dies trifft vor allen Dingen für solche Teilchen zu, welche den Magneten na-

he der Atomstrahlachse durchqueren, wo die auf das Atom wirkenden Kräfte nur sehr schwach sind. Durch den Einsatz einer axialen Strahlblende (siehe Abbildung 4.14) ist es beispielsweise möglich, eine diesbezügliche Verbesserung der Separationseffizienz zu erreichen. Da ein zunehmender Durchmesser des Strahlblockers allerdings eine drastische Abnahme der Signalintensität im Massenspektrometer zur Folge hat, müssen die Abmessungen des Strahlblockers optimiert werden. Im Rahmen einer aufwendigen Meßreihe könnte beim Breit–Rabi–Polarimeter für die nach den Hochfrequenzübergängen befestigte Strahlblende zwar eine optimale Größe gefunden werden, allerdings müßte die Vakuumapparatur hierzu mehrfach belüftet und deren Geometrie modifiziert werden, wodurch sich systematische Fehler ergeben würden, die nur schwer zu quantifizieren wären. Da zudem die Separationseffizienz des Kalibriermagneten nicht auf experimentellem Wege bestimmt werden kann, müssen die Transmissionswahrscheinlichkeiten mit Hilfe von Monte–Carlo Simulationen ermittelt werden.

6.2 Die Beschreibung der Monte–Carlo Simulationen

Das verwendete Programm [Bra 95] zur Bestimmung der Transmissionswahrscheinlichkeiten wurde zur Simulierung der beim HERMES-Target eingesetzten Sechspolmagnete entwickelt, es konnte aber sehr gut hinsichtlich der Geometrie des Erlanger Breit–Rabi–Polarimeters abgeändert werden [Bra 97, Kol 97].
Das Simulationsprogramm basiert auf der Berechnung von Teilchentrajektorien, weswegen die Bewegungsgleichungen der Wasserstoff- oder Deuteriumatome in Abhängigkeit von deren Hyperfeinstrukturzuständen gelöst werden. Im Fall der reinen Zustände ist dabei eine analytische Integration der Bewegungsgleichungen möglich. Da für die gemischten Zustände keine analytische Lösung existiert, werden diese unter Verwendung eines Runge–Kutta–Verfahrens numerisch integriert.
Zur Erzeugung von zufälligen Anfangsbedingungen stehen im Programm je nach Strömungsverhalten der Atome verschiedene Monte–Carlo–Generatoren zur Verfügung. Da bei der lasergepumpten Spinaustauschquelle eine Strahlformung im molekularen Strömungsbereich stattfindet (siehe Kapitel 2.4), wurde für die Simulationen ein diesbezüglich geeigneter Generator ausgewählt. In diesem Generator wird zur Festlegung der Anfangsflugrichtung eines Atoms in zwei senkrecht zur Strahlachse stehenden Ebenen jeweils ein Punkt zufällig erzeugt und die Verbindungsgerade zwischen diesen beiden Punkten als Beginn der Trajektorie definiert. Als axiale Position der beiden Ebenen wurde der Anfang, bzw. das Ende des Austrittsrohres der Quelle vorgegeben (siehe hierzu Abbildung B.1). Für jedes Teilchen wird außerdem mit Hilfe eines Zufallsgenerators aus der Maxwellschen Geschwindigkeits-Verteilung (Kapitel 2.4) eine Geschwindigkeit ausgewählt und dem Atom als Anfangsgeschwindigkeit zugeordnet.

Die Zeitdauer für die Berechnung der Transmissionswahrscheinlichkeiten ist vom jeweiligen Hyperfeinstrukturzustand der Atome und der Anzahl der Sechspolmagnete abhängig. Bei einer Simulation von 10^8 Teilchentrajektorien durch das Kalibrationssystem beträgt die Rechenzeit auf den zur Verfügung stehenden Computern für Atome in reinen Zuständen mindestens 2,5 Stunden, bei Atomen in gemischten Zuständen mindestens 90 Stunden.

6.3 Optimierung der axialen Strahlblende und experimentelle Überprüfung der Monte–Carlo Simulationen

Wie in Kapitel 6.1 beschrieben, können Atome mit einer negativen Elektronenspinkomponente m_s bei einer nicht vorhandenen oder schlecht dimensionierten axialen Strahlblende den Formationsraum des Massenspektrometer erreichen. Da die Wahrscheinlichkeit für diese Transmission aufgrund der Teilchengeschwindigkeiten (siehe Kapitel 2.4) und der kritischen Magnetfelder für Wasserstoffatome größer ist als für Deuteriumatome, wurden die Simulationen zur Optimierung des Strahlblendendurchmessers ausschließlich für einen Wasserstoffatomstrahl durchgeführt.
In diesen Simulationen wurde die Transmission durch die beiden Sechspolmagnete der Sextupolkammer in Abhängigkeit vom Teilchenzustand $|i\rangle$ berechnet, wobei der Durchmesser jener Strahlblende, welche vor diesen Sextupolen befestigt ist, schrittweise variiert wurde [Ran 97]. Für jede Größe wurde anschließend der relative Anteil A_{rel} an Atomen mit $m_s = -\frac{1}{2}$ folgendermaßen berechnet.

$$A_{rel} = \frac{\sigma'_3 + \sigma'_4}{\sigma'_1 + \sigma'_2} \quad , \qquad \sum_{i=1}^{4} \sigma'_i = 1 \quad . \tag{6.3}$$

σ'_i ist die relative Transmission eines Teilchens im Zustand $|i\rangle$ durch die Sextupole des Analysiersystems.
Mit Hilfe der Monte–Carlo Studien konnte gezeigt werden, daß bei einem Durchmesser von mindestens 10 mm die Transmission von Teilchen in den Zuständen $|3\rangle$ und $|4\rangle$ vollständig verhindert wird. Dagegen beträgt der relative Anteil A_{rel} bei einem Magnetsystem ohne Strahlblende 13,3 % (siehe auch Tabelle 6.1).
Anhand dieser Berechnungen wurde für alle axialen Strahlblenden ein Durchmesser von 12 mm gewählt, um auch bei einer nicht exakt zentrierten Strahlblende eine Transmission der Atome mit negativer magnetischer Quantenzahl ausschließen zu können.

Mittels Messungen der Elektronenspinpolarisation nach der in Kapitel 3.2 beschriebenen Methode konnte das Ergebnis der Simulationen auf experimentellem Wege überprüft werden [Ran 97]. Hierzu wurde die Polarisation bei unterschiedlichen Gasflüssen abwechselnd mit und ohne Strahlblende gemäß der Gleichung (3.7) bestimmt und die gemessenen Werte wurden jeweils miteinander verglichen. Hieraus ergab sich eine mittlere Abweichung der

	σ'_1	σ'_2	σ'_3	σ'_4	A_{rel}
keine Strahlblende	0,449	0,434	0,053	0,064	0,133
10 mm Strahlblende	0,509	0,491	0,0	0,0	0,0

Tab. 6.1: *Die berechneten relativen Transmissionen σ'_i der Atome bei verschiedenen Hyperfeinstrukturzuständen für das Polarisationssystem ohne bzw. mit axialer Strahlblende.*

Elektronenspinpolarisation von $1,31 \pm 0,17$.
Dieser Wert ist identisch dem Korrekturfaktor K, mit welchem die Gleichung (3.7) multipliziert werden muß, um bei Messungen ohne Strahlblende den tatsächlichen Polarisationswert zu erhalten:

$$P_e = K \cdot \left(\frac{I_{L,an}}{I_{L,aus}} - 1 \right) = \frac{1 + A_{rel}}{1 - A_{rel}} \cdot \left(\frac{I_{L,an}}{I_{L,aus}} - 1 \right) \quad . \tag{6.4}$$

Da der Korrekturfaktor K nur aus den Ergebnissen der Monte–Carlo Studien errechnet wird, zeigt sich eine gute Reproduzierbarkeit der Vorgänge innerhalb der Sechspolmagnete des Breit–Rabi–Polarimeters mit Hilfe der Simulationen.
Wie in [Ran 97] beschrieben, ist der verhältnismäßig große statistische Fehler von 0,17 auf die anfangs verwendeten Strahlblenden mit einem Innendurchmesser von 23 mm zurückzuführen, da der Atomstrahl hierdurch schon bei einer minimal dezentrisch positionierten Strahlblende in einem Randbereich des Sechspolmagneten abgeschnitten wurde. Zur Vermeidung dieses Fehlers wurde der Innendurchmesser der Blenden im Anschluß an diese Messungen auf 25 mm vergrößert (siehe Abbildung 4.14). Für die Messungen mit Strahlblende wurden in [Ran 97] systematisch zu große Polarisationswerte errechnet, da angenommen wurde $\sigma'_1 = \sigma'_2$. Die diesbezüglich maximalen Fehler können auf $\Delta P = 0,015$ für $P = 0,6$ und auf $\Delta P = 0,005$ für $P = 0,2$ abgeschätzt werden. Der maximale systematische Fehler für das Verhältnis der Polarisationen beträgt daher 0,04.

6.4 Transmissionen und Geschwindigkeitsprofile

Neben den Studien zur Optimierung der axialen Strahlblende wurden die Monte–Carlo Simulationen zur Berechnung verschiedener Transmissionswahrscheinlichkeiten eingesetzt, welche sich experimentell nicht bestimmen lassen, für unterschiedliche Messungen des Breit–Rabi–Polarimeters aber benötigt werden.
So müssen zur Korrektur der gemessenen Signalintensitäten, und damit zur Reduzierung des systematischen Fehlers, die relativen Wahrscheinlichkeiten bekannt sein, mit welchen ein Atom in Abhängigkeit von seinem Hyperfeinstrukturzustand den Formationsraum

des Massenspektrometers erreicht. Hierbei muß zusätzlich zwischen den beiden Magnetsystemen unterschieden werden, da im Falle des Kalibrationssystems eine Vorfokussierung durch den Kalibriermagneten stattfindet und somit die Transmission durch das nachfolgende Analysiersystem beeinflußt wird.
Darüberhinaus konnte mit Hilfe der Monte–Carlo Simulationen das Geschwindigkeitsprofil der transmittierten Teilchen in Abhängigkeit von verschiedenen Randbedingungen wie Strahltemperatur, Magnetsystem oder Anordnung der Magnete (siehe auch Kapitel 6.5) untersucht werden.
Die nachfolgend beschriebenen Simulationen wurden sowohl für Wasserstoff, als auch für Deuterium durchgeführt, sie werden meist aber nur anhand eines Wasserstoffatomstrahls erläutert. Die Darstellung für das Deuteriumgas würde in diesen Fällen analog erfolgen.
Der im Folgenden teilweise verwendete Begriff „Zustand $|i\rangle$“ steht als Synonym für „Atom im Zustand $|i\rangle$“.

6.4.1 Transmissionen und Geschwindigkeitsprofile im Analysiersystem

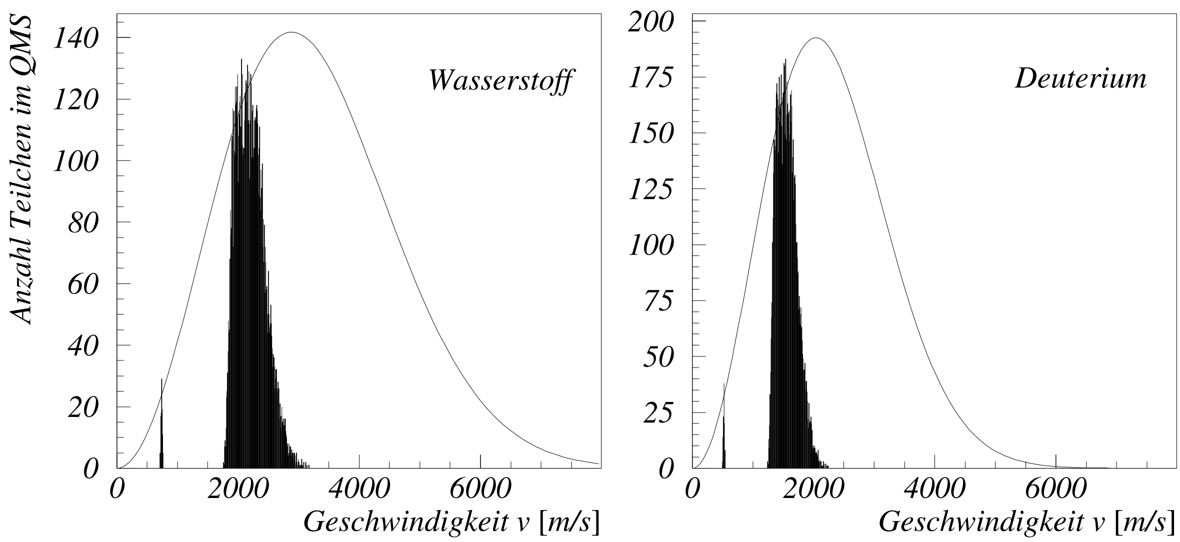

Abb. 6.2: *Geschwindigkeitsprofile von transmittierten Wasserstoff- und Deuteriumatomen im Zustand $|1\rangle$ bei einer Strahltemperatur von 500 K. Die Anfangsgeschwindigkeiten der 10^8 simulierten Teilchen waren maxwellverteilt, die entsprechenden Maxwellschen Geschwindigkeitsverteilungen werden jeweils mittels der durchgezogenen Linien angedeutet.*

In der Abbildung 6.2 sind die Geschwindigkeitsprofile von transmittierten Wasserstoff- und Deuteriumatomen bei einer Strahltemperatur von 500 K dargestellt. In beiden Fällen

wurden jeweils 10^8 Trajektorien für den Zustand $|1\rangle$ berechnet. Die Anfangsgeschwindigkeiten der Teilchen waren maxwellverteilt, der Trajektorienbeginn lag im Bereich des Austrittsrohres der Spinaustauschquelle (siehe hierzu Kapitel 6.2).
Anhand dieser Abbildung kann die Wirkung eines Sextupols als Geschwindigkeitsfilter sehr gut veranschaulicht werden: Von dem anfangs maxwellverteilten Geschwindigkeitsprofil erreichen nur jene Atome das Massenspektrometer, deren Geschwindigkeiten in einem bestimmten Bereich Δv liegen. Wie in den beiden Bildern zu erkennen ist, existieren hierbei zwei Geschwindigkeitsbereiche Δv, welche je nach Verlauf der entsprechenden Trajektorien zur Grundschwingung oder zur ersten Oberschwingung des Systems gehören. Diese unterschiedlichen Verläufe können der Abbildung 6.3 entnommen werden, in welcher Trajektorien von Wasserstoffatomen gezeigt werden, deren Geschwindigkeiten entweder im Bereich des Hauptpeaks oder im Bereich des Nebenpeaks liegen.

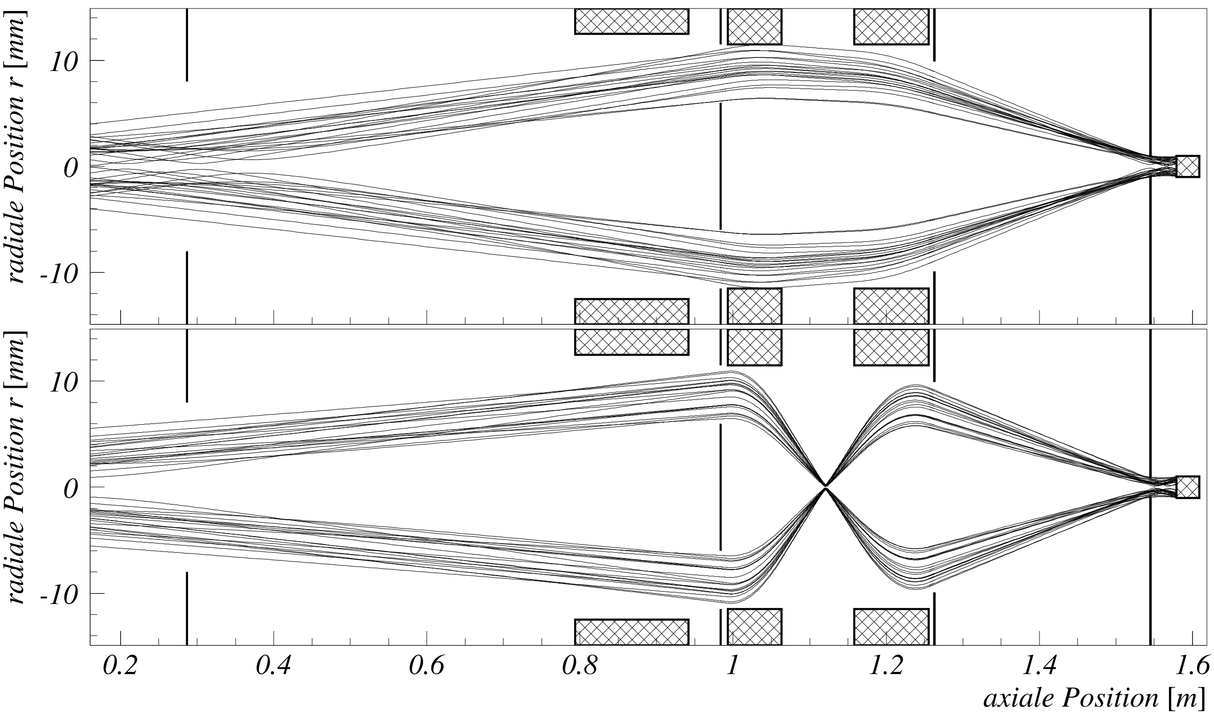

Abb. 6.3: *Radialprojektionen der Trajektorien von Wasserstoffatomen im Zustand $|1\rangle$. Die Trajektorien wurden jeweils ab dem Ende des Austrittsrohres der Spinaustauschquelle gezeichnet und zur besseren Darstellung an der x-Achse gespiegelt. Die schraffierten Rechtecke symbolisieren von links nach rechts die Hochfrequenzübergänge, die beiden Sextupole des Analysiersystems und das Massenspektrometer (siehe hierzu auch Abbildung B.1). Der obere Teil der Abbildung enthält 2×20 Trajektorien mit Teilchengeschwindigkeiten von $(2000 \pm 100)\,m/s$, der untere Teil 2×20 Trajektorien mit Geschwindigkeiten von $(740 \pm 5)\,m/s$.*

Einige charakteristische Daten der Geschwindigkeitsprofile sind in der Tabelle 6.2 aufgeführt. Bei den hier nicht gezeigten Geschwindigkeitsprofilen der anderen Zustände mit $m_s = +\frac{1}{2}$ waren die Werte bezüglich mittlerer Geschwindigkeit und Standardabweichung nachzu identisch. Aufgrund der unterschiedlichen Fokussierung der einzelnen Zustände ergaben sich allerdings bei der Anzahl an transmittierten Atomen abweichende Ergebnisse.

		Hauptpeak			Nebenpeak		
		Einträge	$\bar{v}$ [m/s]	σ [m/s]	Einträge	$\bar{v}$ [m/s]	σ [m/s]
Wasserstoff	$\|1\rangle$	9600	2214,2	236,2	104	739,2	12,1
	$\|2\rangle$	9314	2212,3	235,0	83	734,7	11,0
Deuterium	$\|1\rangle$	9600	1565,8	167,1	104	522,6	9,2
	$\|2\rangle$	9311	1568,7	168,3	103	519,0	7,9
	$\|3\rangle$	9314	1568,6	168,3	102	522,6	9,2

Tab. 6.2: *Charakteristische Daten der Geschwindigkeitsprofile aller Zustände mit $m_s = +\frac{1}{2}$. Für beide Geschwindigkeitsbereich werden jeweils die Anzahl an transmittierten Atomen, deren mittlere Geschwindigkeit $\bar{v}$ und Standardabweichung σ angegeben.*

Auf der Basis dieser Teilchenzahlen wurden die relativen Transmissionswahrscheinlichkeiten ermittelt, welche in der Tabelle 6.3 aufgelistet sind. Diese Wahrscheinlichkeiten ergaben für die gegebene Anordnung der Sechspolmagnete und der Strahlblende eine bessere Fokussierung der reinen Zustände und die erwünschte vollständige Entfernung von Zuständen mit negativer magnetischer Quantenzahl aus dem Atomstrahl.
Bei den Berechnungen konnte der Anteil an Atomen, deren Geschwindigkeiten im Bereich des Nebenpeaks liegen, vernachlässigt werden, da die Geschwindigkeitsprofile beim Breit–Rabi–Polarimeter jeweils durch den zur Grundschwingung des Systems gehörenden Hauptpeak dominiert werden (siehe auch Tabelle 6.2).

	σ'_1	σ'_2	σ'_3	σ'_4	σ'_5	σ'_6	σ'_1/σ'_2	σ'_1/σ'_3
Wasserstoff	0,508	0,492	0,0	0,0	-	-	1,033	-
Deuterium	0,340	0,330	0,330	0,0	0,0	0,0	1,031	1,030

Tab. 6.3: *Relative Transmissionswahrscheinlichkeiten für Wasserstoff- und Deuteriumatome durch die Sechspolmagnete des Analysiersystems.*

6.4.2 Transmissionen und Geschwindigkeitsprofile im Kalibrationssystem

Wie im Kapitel 6.4 erwähnt wurde, findet durch den Einsatz des Kalibriermagneten eine Vorfokussierung bzw. Vordefokussierung der Atome statt, wodurch die Transmission der verschiedenen Zustände durch das Gesamtsystem und auch die Geschwindigkeitsprofile beeinflußt werden können. Diese Veränderungen müssen bei der Bestimmung der Effizienzen der Hochfrequenzübergänge berücksichtigt werden:

Ist das Geschwindigkeitsprofil bei den Messungen mit Kalibriermagnet deutlich zu niedrigeren Geschwindigkeiten verschoben, so können die hiermit ermittelten Vertauschungseffizienzen der Hochfrequenzübergänge nicht unbedingt für Messungen ohne Kalibriermagnet zu Grunde gelegt werden. Dies ist dadurch begründet, daß sich bei zunehmender Teilchengeschwindigkeit die von den Atomen verspürte zeitliche Änderung des statischen Magnetfeldes $\dot{B}_{0,z}$ im Bereich der Hochfrequenzübergänge erhöht und somit bei konstanter Amplitude des Hochfrequenzfeldes die Adiabatenbedingung (5.6) eventuell nicht mehr in ausreichendem Maße erfüllt wird. Die Folge wäre eine mögliche Abnahme der Vertauschungseffizienzen. Ist das Profil bei Messungen mit Kalibriermagnet dagegen identisch oder zu größeren Geschwindigkeiten verschoben, so werden für die Hochfrequenzübergänge untere Grenzen der Effizienzen ermittelt, welche problemlos auf Messungen ohne Kalibriermagnet übertragen werden können.

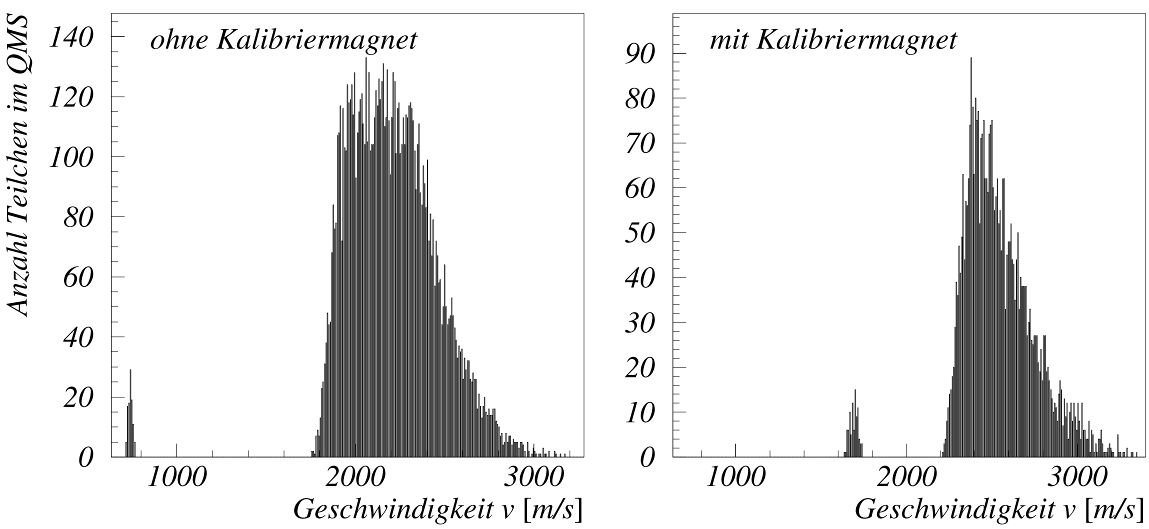

Abb. 6.4: *Geschwindigkeitsprofile von Wasserstoffatomen im Zustand $|1\rangle$ bei einer Strahltemperatur von 500 K. Der Kalibriermagnet befand sich bei den Berechnungen für das rechte Bild innerhalb, bei jenen für die linken Abbildung außerhalb des Strahlengangs.*

In der Abbildung 6.4 werden die Geschwindigkeitsprofile von Wasserstoffatomen im Zustand $|1\rangle$ bei Simulationsrechnungen mit und ohne Kalibriermagnet gezeigt. Bei dem Profil

„mit Kalibriermagnet“ sind wiederum die zur Grundschwingung und zur ersten Oberschwingung des Systems gehörenden Geschwindigkeitsbereiche zu erkennen, allerdings ist der Anteil an Atomen mit geringeren Geschwindigkeiten im Vergleich zum System ohne Kalibriermagnet um etwa einen Faktor zwei größer (siehe Tabelle 6.4). Neben einer Abnahme in der Gesamtintensität auf zirka 40 % der Intensität ohne Kalibriermagnet, ist eine Verschiebung der mittleren Geschwindigkeiten um + 350 m/s für den Hauptpeak und um + 950 m/s für den Nebenpeak zu erkennen, so daß die mit dem Kalibrationssytem gemessenen Effizienzen der Hochfrequenzübergänge auf andere Messungen übertragen werden können.
Für die Anordnung mit Kalibriermagnet sind in der Abbildung 6.5 je 2×20 Trajektorien dargestellt, bei welchen die Atome das Massenspektrometer erreichen und Teilchengeschwindigkeiten besitzen, die innerhalb der entsprechenden Geschwindigkeitsbereiche liegen.

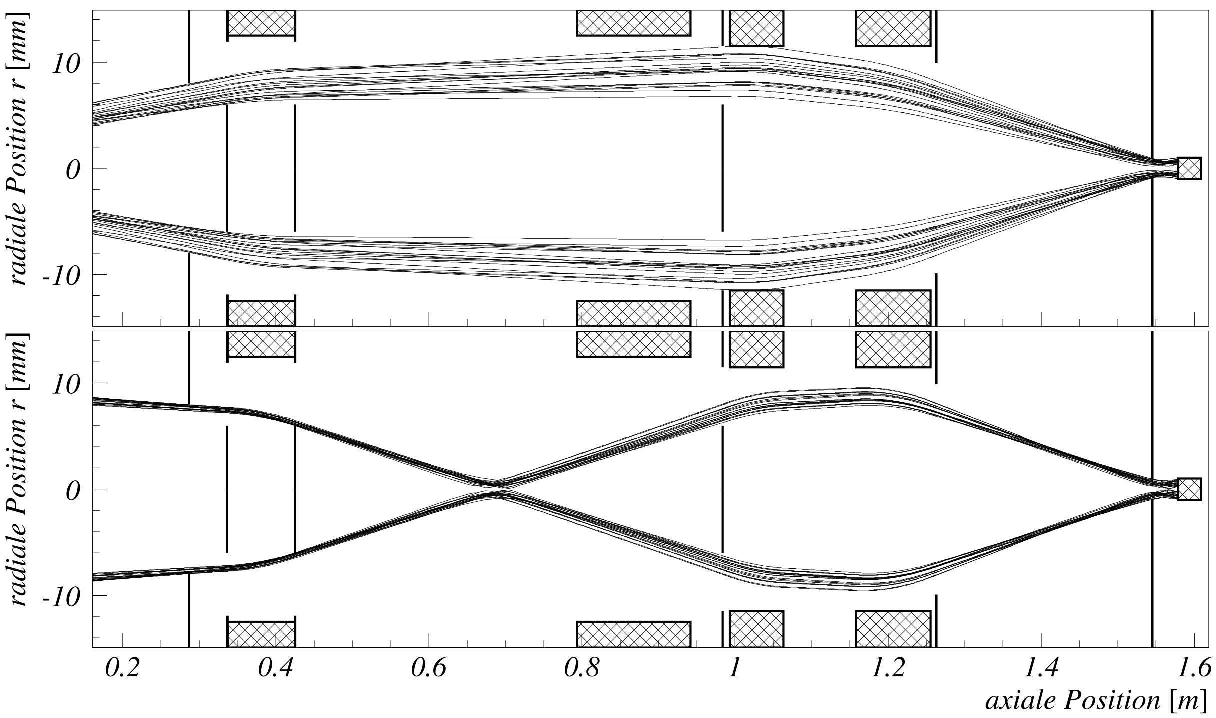

Abb. 6.5: *Radialprojektionen von je 20 Trajektorien von Wasserstoffatomen im Zustand* $|1\rangle$. *Die schraffierten Rechtecke symbolisieren von links nach rechts den Kalibriermagneten, die Hochfrequenzübergänge, die beiden Sextupole des Analysiersystems und das Massenspektrometer. Die Teilchengeschwindigkeiten liegen im oberen Teil der Abbildung bei* (2420 ± 50) *m/s, im unteren Teil bei* (1700 ± 20) *m/s.*

Im Bezug auf die Transmissionswahrscheinlichkeiten muß beim Kalibrationssystem neben

	Hauptpeak			Nebenpeak		
	Einträge	$\bar{v}$ [m/s]	σ [m/s]	Einträge	$\bar{v}$ [m/s]	σ [m/s]
ohne Kalibriermagnet	9600	2214,2	236,2	104	739,2	12,1
mit Kalibriermagnet	9600	1565,8	167,1	104	522,6	9,2

Tab. 6.4: *Vergleich der Geschwindigkeitsprofile von Wasserstoffatomen im Zustand $|1\rangle$ bei Simulationen ohne und mit Kalibriermagnet. Es werden jeweils die Anzahl an transmittierten Atomen, deren mittlere Geschwindigkeit $\bar{v}$ und Standardabweichung σ betrachtet.*

der Transmission durch die Sextupole des Analysiersystems σ'_i noch jene durch den Kalibriermagneten σ_j betrachtet werden. Bei der Transmissionswahrscheinlichkeit durch das Kalibrationssystem σ_{ji} handelt es sich daher ein Produkt zweier Transmissionen,

$$\sigma_{ji} \;:=\; \sigma_j \cdot \sigma'_i \quad , \tag{6.5}$$

die Gesamtheit aller Einzeltransmissionen σ_{ji} kann in der sogenannten Transmissionsmatrix $\sigma^{H,D}$ zusammengefaßt werden.

$$\sigma^H = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} & \sigma_{14} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} & \sigma_{24} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} & \sigma_{34} \\ \sigma_{41} & \sigma_{42} & \sigma_{43} & \sigma_{44} \end{pmatrix} \quad . \tag{6.6}$$

Bei der Berechnung der Einzeltransmissionen dieser 4×4 - bzw. 6×6 -Matrix konnte festgestellt werden, daß im Analysiersystem durch die davor befindliche axiale Strahlblende auch weiterhin die Zustände mit $m_s = -\frac{1}{2}$ vollständig aus dem Atomstrahl entfernt werden ($\sigma_{j3} = \sigma_{j4} = 0$ für Wasserstoff, $\sigma_{j4} = \sigma_{j5} = \sigma_{j6} = 0$ für Deuterium), daß jedoch im Kalibrationsmagneten keine 100 % - ige Separation stattfindet.
Die Ursache dieser ungenügenden Trennung, trotz Verwendung einer Lochblende und zweier axialer Strahlblenden, ist vor allen Dingen die hohe Teilchengeschwindigkeit. Hierdurch werden Atome mit einer negativen magnetischen Quantenzahl m_s im Kalibriermagneten nur leicht defokussiert und können den Innenbereich des nächsten Magneten erreichen. Erfolgt im Bereich zwischen diesen beiden Magneten eine Zustandsänderung mittels eines Hochfrequenzübergangs, so werden diese Atome in den nachfolgenden Magneten nicht mehr defokussiert, sondern in Richtung der Atomstrahlachse abgelenkt. In der Abbildung 6.6 wird dieser Vorgang anhand von 20 Trajektorien illustriert: Die Wasserstoffatome verlassen im Zustand $|3\rangle$ das Austrittsrohr der Spinaustauschquelle und werden im Kalibriermagnet leicht defokussiert. In den Hochfrequenzübergängen erfolgt der Zustandswechsel

$|3\rangle \rightarrow |1\rangle$, wodurch diese Atome im anschließenden Analysiersystem fokussiert werden und in den Formationsraum des Massenspektrometers gelangen.

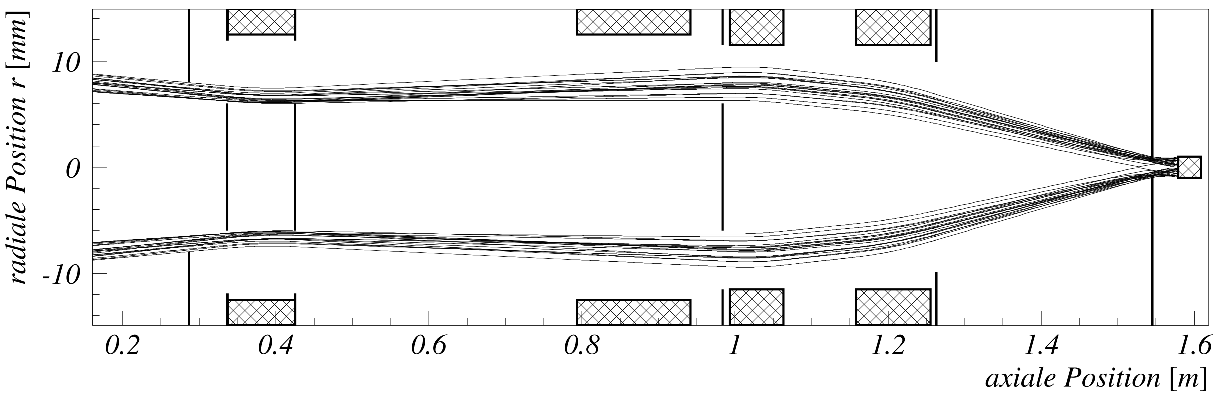

Abb. 6.6: *Radialprojektionen von 2 × 20 Trajektorien von Wasserstoffatomen. Die Atome befinden sich beim Austritt aus der Spinaustauschquelle im Zustand $|3\rangle$ und werden im Bereich der Hochfrequenzübergänge in den Zustand $|1\rangle$ umbesetzt. Die Teilchengeschwindigkeiten betragen (2420 ± 50) m/s.*

Variation der Strahltemperatur

Aufgrund verschiedener Umbauten zur Optimierung der lasergepumpten Spinaustauschquelle mußten fast alle Kalibrationsmessungen der Hochfrequenzübergänge bei einer nicht geheizten Glasapparatur und somit bei einer Atomstrahltemperatur von 300 K durchgeführt werden.
Da die Positionen der Sechspolmagnete nicht verändert wurden, ist der Verlauf der Geschwindigkeitsprofile der einzelnen Zustände identisch, was auch durch die Monte–Carlo Simulationen bestätigt wurde. Jedoch variieren aufgrund der abweichenden Geschwindigkeitsverteilung der Atome beim Austritt aus der Quelle die Intensitäten der transmittierten Zustände. Die Transmissionmatrix σ muß daher für beide Strahltemperaturen separat erstellt werden.

6.5 Optimierung der Sechspolmagnetsysteme

Mit Hilfe der Monte–Carlo Simulationen sollte untersucht werden, inwieweit eine veränderte Positionierung der beiden Sechspolmagnete des Analysiersystems zu einer Erhöhung der Signalintensität und zu einer Verbesserung der relativen Transmission σ_1'/σ_2' der Zustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$ beiträgt.

Da die beiden Magnete innerhalb der Sextupolkammer jeweils in beliebige Richtungen bewegt werden können (siehe Kapitel 4.3), wurde bei den Simulationen der Abstand der beiden Magnete zueinander schrittweise verändert. Hierzu wurde die Position des ersten Magneten beibehalten und der hintere der beiden Magnete wurde in Richtung der Spinaustauschquelle bewegt. In der Abbildung 6.7 sind die für jede Position ermittelten relativen Transmissionen σ_1'/σ_2' und die relativen Signalintensitäten dargestellt, wobei jeweils auf die Intensität der jetzigen Anordnung (Abstand 95 mm) normiert wurde.

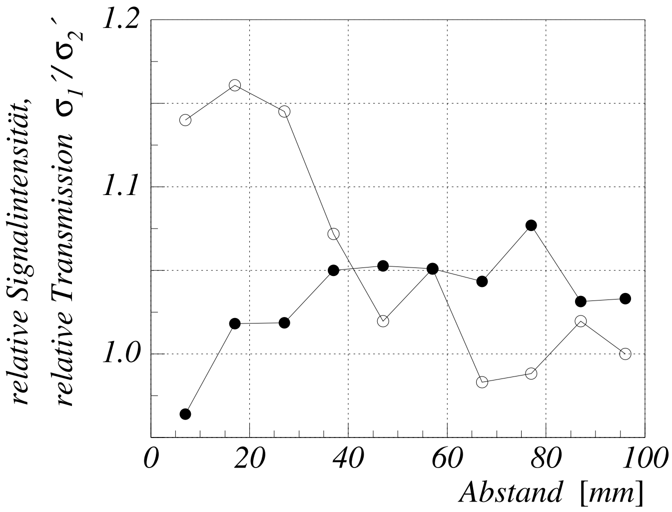

Abb. 6.7: *Relative Transmissionen (•) und relative Signalintensitäten (∘) in Abhängigkeit vom Abstand der beiden Sechspolmagnete des Analysiersystems. Die Intensitäten wurden jeweils auf die des momentanen Abstandes (95 mm) normiert.*

Anhand dieser Berechnung zeigt sich, daß bei einem Abstand der beiden Magnete von zirka 20 mm sowohl die größte Signalintensität, als auch die beste relative Transmission σ_1'/σ_2' erreicht werden kann.

Da bei diesem Abstand auch weiterhin eine vollständige Defokussierung der Zustände mit $m_s = -\frac{1}{2}$ erfolgt, wird nach der Optimierung des Vakuumsystems überprüft werden, inwieweit der hintere Magnet noch zur Begrenzung des Leitwertes erforderlich ist (siehe Kapitel 4.1) oder eventuell in eine andere Position gebracht werden kann.

7 Kalibration des Quadrupol-Massenspektrometers

Neben der Ionisation von Atomen und Molekülen aufgrund von Stößen mit thermisch emittierten Elektronen kommt es im Formationsraum des Massenspektrometers wegen der vorhandenen Elektronenenergien von 70 eV zusätzlich zu einer teilweisen Dissoziation der Moleküle. Durch diesen Prozeß der dissoziativen Ionisation entstehen Bruchstückionen, welche mit der entsprechenden Nachweiswahrscheinlichkeit im Massenspektrometer detektiert werden und somit zu einer Verfälschung der Signalintensitäten führen.

7.1 Dissoziative Ionisation von Wasserstoff und Wasser

Beim Breit–Rabi–Polarimeter wird infolge der dissoziativen Ionisation von molekularem Wasserstoff zu atomarem Wasserstoff

$$H_2 + e^- \rightarrow H + H^+ + 2e^- \tag{7.1}$$

und von Wassermolekülen zu atomarem Wasserstoff

$$H_2O + e^- \rightarrow OH + H^+ + 2e^- \quad . \tag{7.2}$$

eine erhöhte Zählrate der Masse 1 amu erzeugt. Dieser Effekt muß bei der Bestimmung der Polarisations- und Dissoziationsgrade berücksichtigt werden und die gemessenen Signalintensitäten müssen dementsprechend korrigiert werden.

Unter Vernachlässigung der Teilchengeschwindigkeiten der Atome und Moleküle ergeben sich die Signalintensitäten wie folgt aus den unterschiedlichen Teilchendichten im Ionisationsvolumen des Massenspektrometers:

$$I_1 = \epsilon_1 \left(\sigma_1^{ion} \cdot p_1 + \sigma_2^{dis} \cdot p_2 + \sigma_{18}^{dis} \cdot p_{18} \right) \quad , \tag{7.3}$$

$$I_2 = \epsilon_2 \cdot \sigma_2^{ion} \cdot p_2 \quad , \tag{7.4}$$

$$I_{18} = \epsilon_{18} \cdot \sigma_{18}^{ion} \cdot p_{18} \quad , \tag{7.5}$$

mit :

- I_i Im Massenspektrometer gemessene Intensität für die Masse i.
- p_i Teilchendichte der Masse i im Formationsraum des Massenspektrometers.
- ϵ_i Nachweiswahrscheinlichkeit eines Ions der Masse i im Massenspektrometer (Produkt aus Transmissionswahrscheinlichkeit τ_i durch das Massenfilter und Nachweiseffizienz η_i des Channeltrons bzw. Faraday-Auffängers).
- σ_i^{ion} Ionisationswirkungsquerschnitt für ein Atom bzw. Molekül der Masse i.
- σ_2^{dis} Wirkungsquerschnitt für dissoziative Ionisation von molekularem Wasserstoff zu atomarem Wasserstoff.
- σ_{18}^{dis} Wirkungsquerschnitt für dissoziative Ionisation von Wasser zu atomarem Wasserstoff.

Durch Einsetzen der Gleichungen (7.4) und (7.5) in Gleichung (7.3) erhält man folgende Beziehung zwischen der Intensität von atomarem Wasserstoff I_1 und den Signalen von molekularem Wasserstoff I_2 und von Wassermolekülen I_{18}:

$$\begin{aligned} I_1 &= \epsilon_1 \cdot \sigma_1^{ion} \cdot p_1 + \frac{\epsilon_1 \cdot \sigma_2^{dis}}{\epsilon_2 \cdot \sigma_2^{ion}} \cdot I_2 + \frac{\epsilon_1 \cdot \sigma_{18}^{dis}}{\epsilon_{18} \cdot \sigma_{18}^{ion}} \cdot I_{18} \\ &= \epsilon_1 \cdot \sigma_1^{ion} \cdot p_1 + \quad k_1 \quad \cdot I_2 + \quad k_2 \quad \cdot I_{18} \quad . \end{aligned} \tag{7.6}$$

Werden im Meßbetrieb gleichzeitig oder in kurzer Folge die Signale I_1, I_2 und I_{18} ausgelesen und sind die Korrekturfaktoren k_1 und k_2 bekannt, so kann aufgrund des Zusammenhangs (7.6) eine Korrektur des gemessenen Signals der Masse 1 amu erfolgen.

Bestimmung der Korrekturfaktoren

Die Korrekturfaktoren k_1 und k_2 müssen für jedes Massenspektrometer eigens ermittelt werden, da die Nachweiswahrscheinlichkeiten ϵ_i von gerätespezifischen Parametern abhängig sind (zum Beispiel: Aufbau des Massenfilters, Modell und Bauart der Ionennachweiseinheit). Darüberhinaus können sich die Eigenschaften einiger dieser Komponenten mit fortschreitender Betriebdauer verändern[7], weswegen die Korrekturfaktoren auch in entsprechenden zeitlichen Abständen überprüft werden sollten.

Eine Möglichkeit zur Bestimmung dieser Korrekturfaktoren ist dann gegeben, wenn kein atomarer Wasserstoff in der Vakuumapparatur vorhanden ist ($p_1 = 0$). In diesem Fall ist die Gleichung (7.6) lediglich eine Funktion der Meßgrößen I_2 und I_{18} und die Korrekturfaktoren ergeben sich aus einer Messung des dissoziierten Anteils an atomarem Wasserstoff bei einer Variation des Flusses an Wassermolekülen oder molekularem Wasserstoff. Wie nachfolgend beschrieben wird, wurde für die Kalibration des am Breit–Rabi–Polarimeter eingesetzten Massenspektrometers dieser variable Fluß an Molekülen auf zwei verschiedene Arten erzeugt.

Da die Messungen bei der als zweites beschriebenen Methode außerdem abwechselnd mit einem Channeltron und mit einem Faraday-Auffänger durchgeführt wurden, konnten aus dem Verhältnis der Korrekturfaktoren die relativen Nachweiseffizienzen des Channeltrons $\frac{\eta_1}{\eta_2}$ und $\frac{\eta_1}{\eta_{18}}$ ermittelt werden.

Variation des Flusses mit Hilfe des Gaseinlaßsystems

Für diese Messungen wurde mit Hilfe des Gaseinlaßsystems der Spinaustauschquelle ein kontinuierlich abnehmender Fluß an Wasserstoffmolekülen erzeugt. Die Auslese der In-

[7]So kann sich zum Beispiel die Nachweiseffizienz eines Channeltrons je nach angelegter Spannung im Laufe der Zeit deutlich verschlechtern.

tensitäten I_1, I_2 und I_{18} erfolgte mit dem Steuergerät des Massenspektrometers, als Ionennachweiseinheit wurde aufgrund der geringen Signalamplituden ausschließlich das Channeltron (angelegte Spannung: 1,3 kV) verwendet.

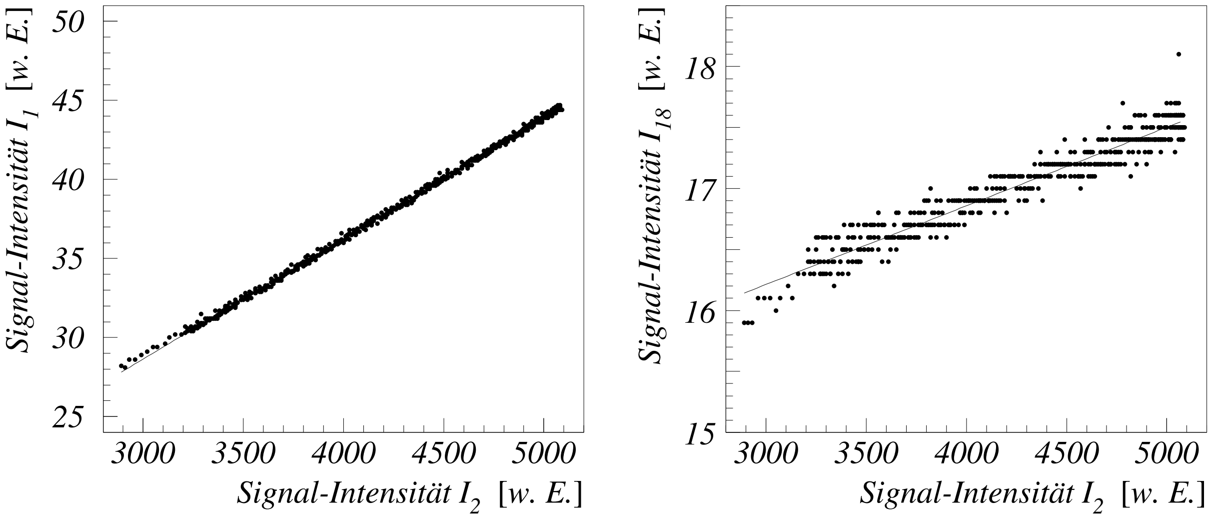

Abb. 7.1: *Messung der Intensitäten von atomarem Wasserstoff I_1 und von Wassermolekülen I_{18} in Abhängigkeit von der Intensität an molekularem Wasserstoff I_2 bei kontinuierlicher Variation des Flusses an Wasserstoffmolekülen.*

Bei der Auftragung der gemessenen Intensitäten I_1 und I_{18} gegen die Signalamplitude I_2 (siehe Abbildung 7.1) zeigte sich neben der erwarteten Abhängigkeit des I_1 - Signals auch eine deutliche Korrelation der Intensitäten von Wassermolekülen und molekularem Wasserstoff:

$$I_{18} = I_{18}^G + I_{18}^K = k_3 \cdot I_2 + I_{18}^K \quad , \tag{7.7}$$

mit : I_{18}^G Gemessene Intensität an Wassermolekülen aufgrund von Verunreinigungen im Gaseinlaßsystem.

I_{18}^K Gemessene Intensität für die Masse 18 aufgrund von Wassermolekülen in der Vakuumapparatur.

$k_3 \;= I_{18}^G / I_2$.

Aufgrund des Zusammenhangs (7.7), welcher auf Verunreinigungen im Gaseinlaßsystem zurückgeführt werden kann, ergibt sich für die Gleichung (7.6) unter der Annahme $p_1 = 0$:

$$\begin{aligned} I_1 &= k_1 \cdot I_2 + k_2 \cdot I_{18} = k_1 \cdot I_2 + k_2 \,(k_3 \cdot I_2 + I_{18}^K) \\ &= (k_1 + k_2 \cdot k_3)\, I_2 + k_2 \cdot I_{18} \quad . \end{aligned} \tag{7.8}$$

An die Meßdaten wurden unter Verwendung eines Analyse-Programms [CER 94] lineare Funktionen angepaßt (siehe Abbildung 7.1) und aus den Steigungen und Achsenabschnitten der beiden Geraden die gesuchten Größen ermittelt.

Hieraus ergab sich für den Anteil an Wasserstoffatomen aufgrund dissoziativer Ionisation von molekularem Wasserstoff ein Wert von $k_1 = (0,50 \pm 0,03) \cdot 10^{-2}$ und aufgrund von dissoziativer Ionisation von Wassermolekülen ein Wert von $k_2 = (40,20 \pm 2,28) \cdot 10^{-2}$. Das Verhältnis von Wassermolekülen zu molekularem Wasserstoff aufgrund der Verunreinigungen im Gaseinlaßsystem beträgt $k_3 = (0,64 \pm 0,07) \cdot 10^{-2}$.

Variation des Flusses aufgrund der Regenerierung einer Kryopumpe

Bei dieser zweiten Methode wurden die Signale während des Regeniervorgangs der an der Hochfrequenzkammer befestigten Refrigerator-Kryopumpe gemessen. Die verwendete Pumpe besteht aus zwei Kaltflächen, von welchen die zur ersten Kühlstufe gehörende eine Temperatur $< 35\,\mathrm{K}$ erreicht, die Kaltfläche der zweite Stufe besitzt eine Temperatur $< 10\,\mathrm{K}$. Durch die langsame Erwärmung der Kaltflächen während der Regenerierung desorbieren die Moleküle entsprechend ihrer Siedepunkte zu unterschiedlichen Zeitpunkten und es ist somit möglich, den jeweiligen Anteil an dissoziierten Wasserstoffatomen zu ermitteln.
Zu Beginn des Regeneriervorgangs wurden die Signale I_1, I_2 und I_{18} ausschließlich mit dem Faraday-Auffänger gemessen, da infolge des großen Flusses an Wasserstoffmolekülen, hervorgerufen durch deren hohen Dampfdruck schon bei niedrigen Temperaturen[8], Raumladungseffekte im Channeltron auftraten. In der Abbildung 7.2 sind die zu diesem Zeitpunkt gemessenen Signalintensitäten von atomarem und molekularem Wasserstoff und deren Verhältnis I_1/I_2 aufgetragen. Da mit dem Faraday-Auffänger während dieser Meß-

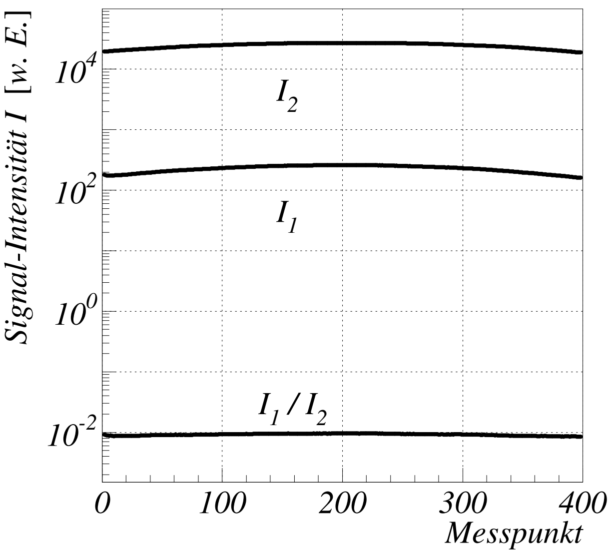

Abb. 7.2: *Während des Regeniervorgangs mit dem Faraday-Auffänger des Massenspektrometers gemessene Intensitäten von atomarem (I_1) und molekularem (I_2) Wasserstoff, sowie das Verhältnis der beiden Signalamplituden (I_1/I_2).*

dauer noch keine Wassermoleküle I_{18} nachgewiesen werden konnten, kann nach Gleichung

[8]Siehe hierfür zum Beispiel „Dampfdruckkurven tiefsiedender Gase“ in [Wut 88], Seite 330.

(7.6) der errechnete Wert für das Verhältnis $I_1/I_2 = (0,92 \pm 0,003) \cdot 10^{-2}$ dem Korrekturfaktor k_1^F ($\hat{=} k_1$ für Faraday-Auffänger) gleichgesetzt werden.

Im weiteren Verlauf des Regeneriervorgangs wurden die Intensitäten der Massen 1, 2 und 18 abwechwselnd mit dem Faraday-Auffänger und dem Channeltron gemessen. Jene Signalintensitäten, welche während der anschließenden Meßdauer von ungefährt zwölf Stunden mit dem Channeltron detektiert wurden, sind in der Abbildung 7.3 dargestellt,

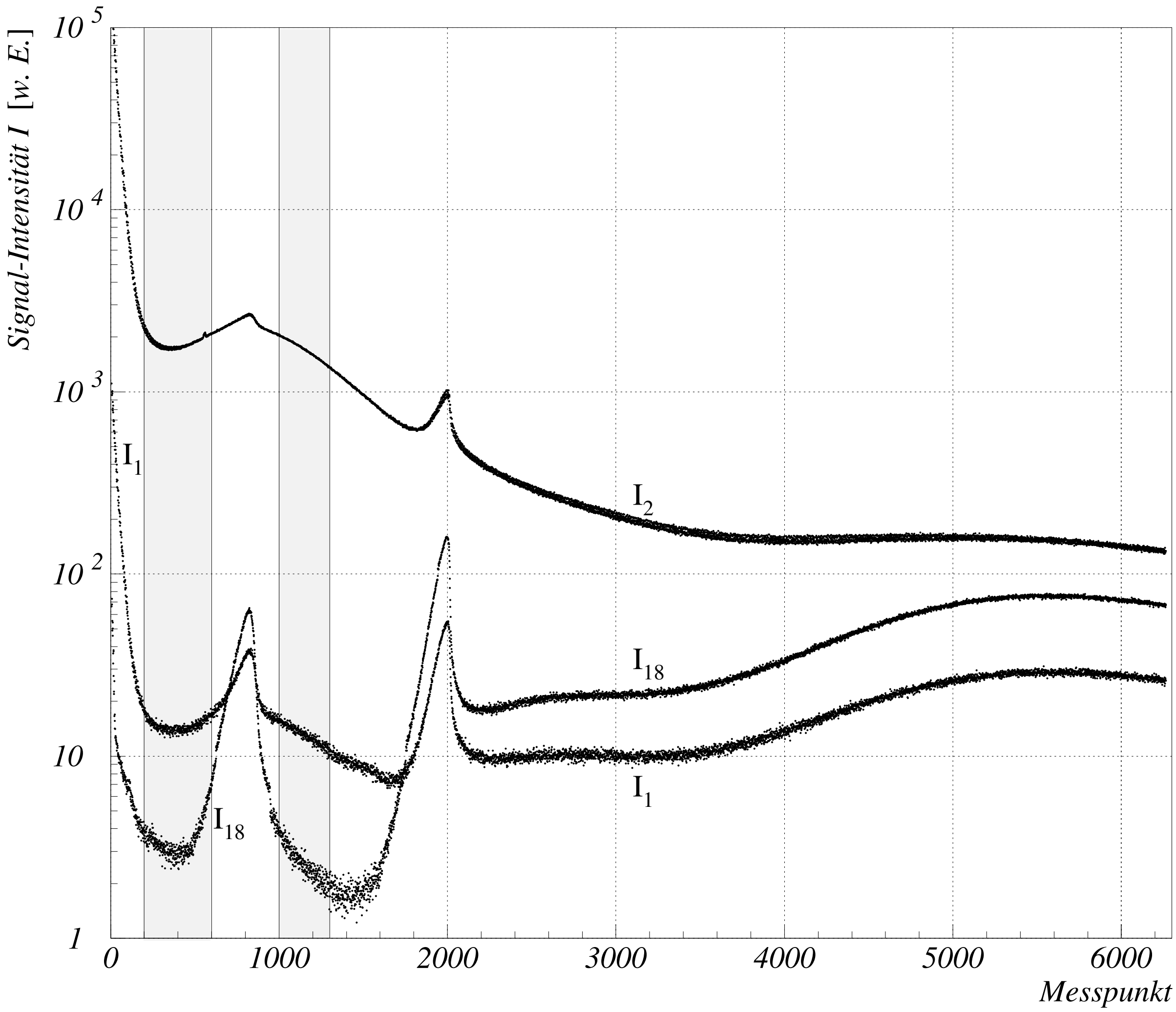

Abb. 7.3: *Während des Regeniervorgangs mit dem Channeltron gemessene Intensitäten von atomarem (I_1) und molekularem (I_2) Wasserstoff und von Wassermolekülen (I_{18}). Die schraffierten Flächen markieren die Bereiche der Meßdaten, welche für die Bestimmung des Intensitätsverhältnisses I_1/I_2 verwendet wurden (siehe auch Abbildung 7.4). Die gesamte Meßdauer betrug ungefähr zwölf Stunden.*

die mit dem Faraday-Auffänger gemessenen Signale zeigten ein analoges zeitliches Verhalten.

Neben dem kontinuierlich abnehmenden Fluß an Wasserstoffmolekülen erkennt man in dieser Abbildung vor allen Dingen das stark fluktuierende „Wasser - Signal" (I_{18}), welches durch die zu unterschiedlichen Zeitpunkten erfolgte Desorption der Wassermoleküle von den beiden Kaltflächen verursacht wird. So bewirkt die Erwärmung der Kaltfläche der ersten Kühlstufe (T< 35 K) die Erhöhung der Signalintensität nach ungefähr zwei Stunden, wohingegen der zweite Anstieg und der anschließende Signalverlauf überwiegend durch Wassermoleküle hervorgerufen wird, welche an der Kaltfläche der zweiten Stufe gebunden waren.

Zur Bestimmung des Korrekturfaktors k_1 wurden die Meßdaten der beiden schraffierten Bereiche zu Grunde gelegt, in welchen die Intensität I_{18} um etwa eine Größenordnung unterhalb der des Signals I_1 liegt und der Anteil an atomarem Wasserstoff aufgrund dissoziativer Ionisation von Wasser demnach am geringsten ist. Das aus den beiden Signalen gebildete Verhältnis I_1/I_2 ist in der Abbildung 7.4 dargestellt, der Fit einer konstanten Funktion an diese Daten ergab einen Wert von $k_1 \approx \frac{I_1}{I_2} = (0,78 \pm 0,003) \cdot 10^{-2}$. Dieses Ergebnis kann als oberer Grenzwert betrachtet werden, da bei der Berechnung wegen der Annahme $I_{18} = 0$ der durch Wassermoleküle bedingte Anteil an Wasserstoffatomen vernachlässigt wurde und sich somit eine zu große Amplitude für I_1 ergab.

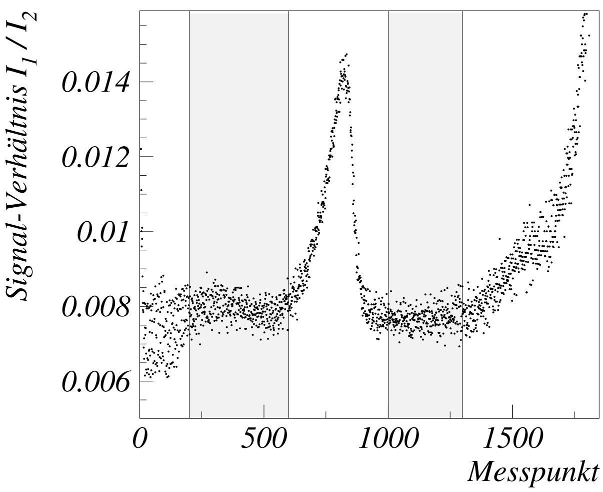

Abb. 7.4:
Signalverhältnis I_1/I_2 der mit dem Channeltron gemessenen Intensitäten, welche in der Abbildung 7.3 im Bereich der Meßpunkte 0 - 1850 dargestellt sind.

Für die Bestimmung des Korrekturfaktors k_2 wurden die Daten ab dem Meßpunkt 2000 verwendet, wobei zunächst der Anteil an Intensität aufgrund dissoziativer Ionisation von molekularem Wasserstoff gemäß $I_1' = I_1 - k_1 \cdot I_2$ von der Signalamplitude I_1 subtrahiert wurde. Diese korrigierte Intensität I_1', das Signal I_{18} und das Verhältnis der beiden Amplituden I_1'/I_{18} (jeweils für die Daten der Abbildung 7.3) sind in der Abbildung 7.5 aufgetragen.

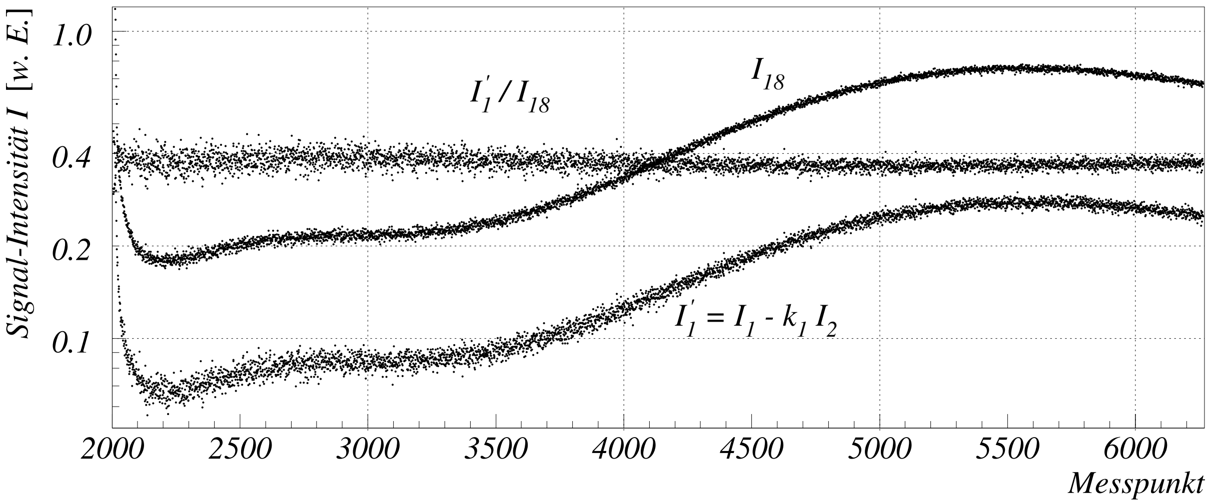

Abb. 7.5: *Mit dem Channeltron gemessene Signalamplituden von Wasser (I_{18}) und atomarem Wasserstoff (I_1'), wobei von letzterer der Anteil an Intensität aufgrund dissoziativer Ionisation von Wasserstoffmolekülen subtrahiert wurde, sowie das Verhältnis I_1'/I_{18}.*

Unter Verwendung der Gleichung (7.6) ergibt sich für die Intenstität I_1'

$$I_1' = I_1 - k_1 \cdot I_2 = k_1 \cdot I_2 + k_2 \cdot I_{18} - k_1 \cdot I_2 = k_2 \cdot I_{18} \quad , \tag{7.9}$$

weswegen die Korrekturfaktoren k_2 und k_2^F (für die mit dem Faraday-Auffänger gemessenen Signale) den entsprechenden Verhältnissen I_1'/I_{18} gleichgesetzt werden können. Die errechneten Werte dieser Korrekturfaktoren sind in der Tabelle 7.2 aufgeführt.

Die eingangs erwähnte Berechnung der relativen Nachweiseffizienzen des Channeltrons erfolgte aus einem Vergleich der mit beiden Ionennachweiseinheiten ermittelten Werte für die Korrekturfaktoren k_1 bzw. k_2:

$$\begin{aligned} \frac{k_1}{k_1^F} &= \frac{(\sigma_2^{dis} \cdot \epsilon_1)\,/\,(\sigma_2^{ion} \cdot \epsilon_2)}{(\sigma_2^{dis} \cdot \epsilon_1^F)\,/\,(\sigma_2^{ion} \cdot \epsilon_2^F)} = \frac{\epsilon_1 \cdot \epsilon_2^F}{\epsilon_2 \cdot \epsilon_1^F} = \frac{\tau_1\eta_1 \cdot \tau_2\eta_2^F}{\tau_2\eta_2 \cdot \tau_1\eta_1^F} = \frac{\eta_1}{\eta_2} \quad , \\ \frac{k_2}{k_2^F} &= \frac{(\sigma_{18}^{dis} \cdot \epsilon_1)\,/\,(\sigma_{18}^{ion} \cdot \epsilon_{18})}{(\sigma_{18}^{dis} \cdot \epsilon_1^F)\,/\,(\sigma_{18}^{ion} \cdot \epsilon_{18}^F)} = \frac{\epsilon_1 \cdot \epsilon_{18}^F}{\epsilon_{18} \cdot \epsilon_1^F} = \frac{\tau_1\eta_1 \cdot \tau_{18}\eta_{18}^F}{\tau_{18}\eta_{18} \cdot \tau_1\eta_1^F} = \frac{\eta_1}{\eta_{18}} \quad . \end{aligned} \tag{7.10}$$

Hierbei wurde zugrunde gelegt, daß für einen Faraday-Auffänger $\eta_1^F = \eta_2^F = \eta_{18}^F$ gilt und daß die Transmissionswahrscheinlichkeiten für beide Nachweiseinheiten identisch sind ($\tau_i = \tau_i^F$). Der dabei ermittelte Wert für η_1/η_2 stimmt mit den Angaben in [Bur 67] nahezu überein (siehe Tabelle 7.2), die geringe Abweichung ist wahrscheinlich durch die unterschiedlichen Modelle der beiden Channeltrons begründet.
Eine sehr gute Übereinstimmung zeigt sich auch bei dem Vergleich der mit dem Channeltron gemessenen Werte für k_2 und dem Literaturwert $\sigma_{18}^{dis}/\sigma_{18}^{ion}$ [Ori 87], welcher unter

Verwendung eines Sekundär-Elektronen-Vervielfachers (Galileo, Spiraltron®) bei einer angelegten Spannung von 4,0 kV bestimmt wurde.
Die starke Diskrepanz zwischen $k_1 \approx \sigma_2^{dis}/\sigma_2^{ion}$ (da $\tau_1 \approx \tau_2$) und dem Literaturwert von $\sigma_2^{dis}/\sigma_2^{ion}$ ist darauf zurückzuführen, daß die Messungen in [Rap 65b] nur für Protonen mit einer Energie größer als 2,5 eV durchgeführt wurden und die Ergebnisse daher nicht direkt übertragen werden können.

Der gemessene Faktor k_3 für die relative Beimischung von Wassermolekülen aufgrund von Verunreinigungen im Gaseinlaßsystem muß bei der Korrektur des Intensitätssignals der Masse 1 nicht berücksichtigt werden, er ist jedoch zur Bestimmung von Randbedingungen für einen stabilen Betrieb der Spinaustauschquelle von Interesse.

Fluß-Variation	Detektor	k_1 $[10^{-2}]$	k_2 $[10^{-2}]$	k_3 $[10^{-2}]$	η_1/η_2	η_1/η_{18}
Gaseinlaß.	Channeltron	$0,50 \pm 0,03$	$40,20 \pm 2,28$	$0,64 \pm 0,07$		
Kryo-Pumpe	Channeltron	$0,78 \pm 0,01$	$37,32 \pm 0,01$		$0,85 \pm 0,01$	$0,51 \pm 0,01$
	Faraday	$0,92 \pm 0,01$	$73,91 \pm 0,01$			

Tab. 7.1: *Ermittelte Korrekturwerte für dissoziative Ionisation von molekularem Wasserstoff (k_1) und von Wasser (k_2) zur Berichtigung der Signalintensität der Masse 1 amu. Der Parameter k_3 beschreibt den Anteil an Wassermolekülen im Verhältnis zu Wasserstoffmolekülen im Gaseinlaßsystem aufgrund von Verunreinigungen desselben, durch η_1/η_2 bzw. η_1/η_{18} werden die relativen Nachweiseffizienzen des Channeltrons für die entsprechenden Massen angegeben.*

σ_2^{ion} $[10^{-17}\,\mathrm{cm}^2]$	σ_2^{dis} $[10^{-17}\,\mathrm{cm}^2]$	$\sigma_2^{dis}/\sigma_2^{ion}$ $[10^{-2}]$	σ_{18}^{ion} $[10^{-17}\,\mathrm{cm}^2]$	σ_{18}^{dis} $[10^{-17}\,\mathrm{cm}^2]$	$\sigma_{18}^{dis}/\sigma_{18}^{ion}$ $[10^{-2}]$	η_1/η_2
$9,71 \pm 0.44$	0,49	$5,01$	$16,2 \pm 2,43$	$6,6 \pm 0,99$	$40,74 \pm 7,26$	0,811

Tab. 7.2: *Der Literatur entnommene Wirkungsquerschnitte für Ionisation [Rap 65] und dissoziative Ionisation [Tak 78, Rap 65b] von molekularem Wasserstoff und von Wasser [Bau 96, Ori 87]. Die Werte für die relative Nachweiseffizienz eines Channeltron [Bur 67] und für σ_2^{dis} wurden Diagrammen entnommen, weswegen keine Fehlerangaben gemacht wurden.*

7.2 Dissoziative Ionisation von Deuterium

Im Gegensatz zu Wasserstoff muß bei der Korrektur der Signalamplitude für Deuteriumatome (I_2) nur ein Intensitätsanteil aufgrund dissoziativer Ionisation von molekularem Deuterium (I_4) berücksichtigt werden.

$$D_2 + e^- \rightarrow D + D^+ + 2e^- \quad . \tag{7.11}$$

Die mit dem Massenspektrometer gemessenen Signalintensitäten setzen sich daher wie folgt aus den Teilchendichten im Formationsraum zusammen

$$I_2 = \epsilon_2 \left(\sigma_2^{ion} \cdot p_2 + \sigma_4^{dis} \cdot p_4 \right) \quad , \tag{7.12}$$

$$I_4 = \epsilon_4 \cdot \sigma_4^{ion} \cdot p_4 \quad , \tag{7.13}$$

weswegen sich nachfolgende Beziehung zwischen den gemessenen Intensitäten von atomarem und molekularem Deuterium ergibt:

$$I_2 = \epsilon_2 \cdot \sigma_2^{ion} \cdot p_2 + \frac{\epsilon_2 \cdot \sigma_4^{dis}}{\epsilon_4 \cdot \sigma_4^{ion}} \cdot I_4 = \epsilon_2 \cdot \sigma_2^{ion} \cdot p_2 + k_4 \cdot I_4 \quad . \tag{7.14}$$

Die Bestimmung des Korrekturfaktors k_4 wurde analog zu den in Kapitel 7.1 beschriebenen Methoden durchgeführt, wobei die Erzeugung eines variablen Flusses an molekularem Deuterium ausschließlich unter Verwendung des Gaseinlaßsytems herbeigeführt wurde. Als Detektor wurde wiederum nur das Channeltron eingesetzt.
Der aus den Meßdaten ermittelte Wert für den Korrekturfaktor beträgt $k_4 = (0,62 \pm 0,09) \cdot 10^{-2}$. Der Achsenabschnitt von $0,03 \pm 0,01$ ergibt sich durch Wasserstoffmoleküle, welche aufgrund einer vorherigen Messung noch in der Vakuumkammer vorhanden waren.

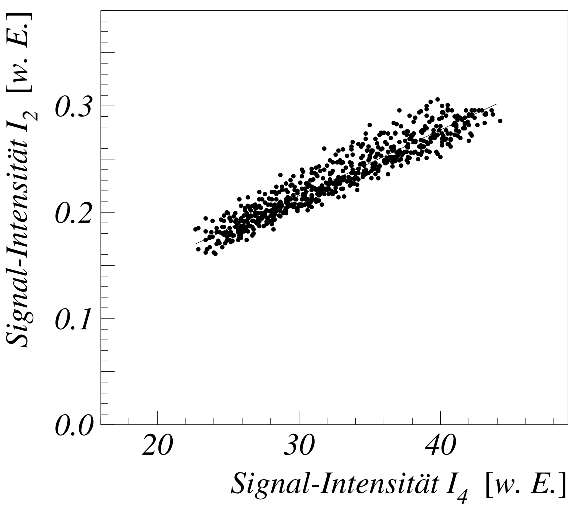

Abb. 7.6:
Messung der Signalamplitude von atomarem (I_2) und molekularem Deuterium bei kontinuierlicher Variation des Flusses an Deuteriummolekülen. Die Steigung der gefitteten linearen Funktion beträgt $(0,62 \pm 0,07) \cdot 10^{-2}$*, der Achsenabschnitt von* $0,03 \pm 0,01$ *wird durch Wasserstoffmoleküle verursacht, welche aufgrund vorheriger Messungen noch in der Vakuumapparatur vorhanden waren.*

8 Die Effizienzen der Hochfrequenzübergänge

Die Effizienzen der Hochfrequenzübergänge sind neben den Transmissionswahrscheinlichkeiten und den Effekten im Massenspektrometer die dritte entscheidende Größe, welche für den systematischen Fehler bei der Polarisationsmessung ausschlaggebend ist. Die Bestimmung dieser Effizienzen erfolgte mit Hilfe zweier, voneinander unabhängiger Techniken, so daß die Ergebnisse unkorreliert sind und miteinander verglichen werden können.

Bei der ersten Methode wurde die Effizienzbestimmung unter Verwendung eines polarisierten Wasserstoff- bzw. Deuteriumstrahls aus der lasergepumpten Spinaustauschquelle bei einer Strahltemperatur von 500 K durchgeführt. Grundlage für die Ermittlung der relativen Besetzungen der Hyperfeinstrukturzustände beim Austritt der Atome aus der Spinaustauschquelle waren die in Kapitel 2.1 beschriebenen Bilanzgleichungen [Ste 95b], nach welchen sich das System bei den anliegenden Magnetfeldern von 100 mT im Spintemperaturgleichgewicht befindet (was durch die in Kapitel 10 beschriebenen Messungen auch bestätigt wurde). Unter der Voraussetzung dieses Gleichgewichtszustandes und bei bekannter Elektronenspinpolarisation können dann die relativen Besetzungszahlen nach (2.1) berechnet werden. Der hierfür erforderliche Elektronenspinpolarisationsgrad wurde nach Gleichung (3.7) aus den Strahlintensitäten bei ein- und ausgeschaltetem Pumplaser der Spinaustauschquelle ermittelt. Für die Transmissionswahrscheinlichkeiten in den Sechspolmagneten des Analysiersystems wurde bei der Berechnung der Elektronenspinpolarisation eine vollständige Defokussierung der Zustände mit $m_s = -\frac{1}{2}$ und eine identische Transmission der Zustände mit $m_s = +\frac{1}{2}$ angenommen ($\sigma_1' = \sigma_2'$, bzw. $\sigma_1' = \sigma_2' = \sigma_3'$ im Falle von Deuterium). Aufgrund dieser Annahme bezüglich der Transmission liegen die errechneten Polarisationsgrade etwas über den tatsächlichen Werten, weswegen für die Hochfrequenzübergänge zu niedrige Vertauschungseffizienzen ermittelt werden. Wie in Kapitel 6.3 angegeben wurde, ist die Abweichung zwischen gemessenem und effektivem Polarisationswert maximal 2,5 % (relativ), wodurch ein systematischer Fehler bei der Effizienzbestimmung von maximal 0,01 (absolut) abgeschätzt wird.

Im zweiten Verfahren wird mit Hilfe des Kalibriermagneten ein elektronenspinpolarisierter Atomstrahl erzeugt, welcher zur Bestimmung der Vertauschungseffizienzen der Hochfrequenzübergänge verwendet wird. Den Berechnungen der Effizienzen liegen in diesem Fall die in Kapitel 6.4.2 und im Anhang C aufgeführten Ergebnisse der Monte-Carlo Simulationen für das Kalibriersystem zugrunde, die Strahltemperatur betrug bei den hier gezeigten Messungen jeweils 300 K.

Bei sämtlichen Messungen zur Bestimmung der Vertauschungseffizienzen waren die Intensitätssignale der molekularen Anteile (I_2 für Wasserstoff und I_4 für Deuterium) jeweils geringer als die der Atome, weshalb die Korrektur der gemessenen Signalamplituden bezüglich der dissoziativen Ionisation von Wasserstoff-, bzw. Deuteriummolekülen vernachlässigt werden konnte (siehe Kapitel 7). Dies ist auch für den möglichen Fehler bei der Intensitätsmessung aufgrund der dissoziativen Ionisation von Wasser gültig, da bei den Messungen, welche alle mit dem Lock-In Verstärker durchgeführt wurden, kein Wasserpartialdruck (I_{18}) nachgewiesen werden konnte.

Die vollständige Beschreibung einer Vertauschung zweier Zustände in einem Hochfrequenzübergang muß im allgemeinen durch vier Effizienzen erfolgen (ϵ_{ij}^{+}, ϵ_{ij}^{-}, ϵ_{ji}^{+}, ϵ_{ji}^{-}), welche im rechten Teil der Abbildung 5.2 entsprechend ihrer Indizes „+“ bzw. „−“ dem oberen oder unteren Energieniveau zuzuordnen sind und den Übergang i$\rightarrow$ j oder j$\rightarrow$ i in Abhängigkeit von der Steigung des angelegten Gradientenfeldes charakterisieren. Da im Breit–Rabi–Polarimeter die Hochfrequenzübergänge ausschließlich bei einem in Atomstrahlrichtung abfallendem Gradientenfeld betrieben werden, ist es ausreichend, die Umbesetzungen jeweils durch zwei Effizienzen zu beschreiben (ϵ_{ij}^{+}, ϵ_{ji}^{-}).
In einem Zwei-Niveau-System sind diese Effizienzen identisch ($\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}$), da die Energieniveaus der Eigenzustände $|+\rangle$ und $|-\rangle$ zueinander symmetrisch sind, wie dies in der Abbildung 5.2 zu erkennen ist. Im Gegensatz dazu sind die Übergänge in einem Vier- bzw. Sechs-Niveau-System, wie es bei der Hyperfeinstruktur des Wasserstoff- bzw. des Deuteriumatoms gegeben ist, aufgrund von Störungen nicht beteiligter Zustände nicht symmetrisch [Phi 87] und es gilt $\epsilon_{ij} \neq \epsilon_{ji}$.
Die Messung dieser Asymmetrie und damit die Bestimmung der Einzeleffizienzen ist mit dem Breit–Rabi–Polarimeter nicht möglich, da hierzu eine vollständige Defokussierung der Zustände mit $m_s = -\frac{1}{2}$ im Kalibriermagneten erforderlich wäre, welche, wie in Kapitel 6.4.2 beschrieben wird, vor allen Dingen wegen der hohen Teilchengeschwindigkeiten nicht erreicht wird. Aus diesem Grund werden innerhalb dieser Arbeit die Asymmetrien in den Effizienzen der Hochfrequenzübergänge vernachlässigt und es wird angenommen $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}$, weswegen die Vertauschungseffizienzen im folgenden durch eine Übergangseffizienz ϵ_{ij} beschrieben werden. Da diese Annahme bei Vier- oder Sechs-Niveau-Systemen nur dann zutreffend ist, wenn die Adiabatenbedingung (siehe Gleichung (5.2) oder (5.6)) in beide Richtungen ausreichend gut erfüllt ist und wenn somit die Effizienzen eines Hochfrequenzübergangs in beiden Richtungen ihren Sättigungswert von 100 % annährend erreichen, werden zur Reduzierung des durch diese Annahme verursachten systematischen Fehlers die Hochfrequenzübergänge bei möglichst geringen Feldgradienten und hohen Amplituden des hochfrequenten Magnetfeldes betrieben.

Der in Kapitel 3 unter Verwendung von Besetzungstupeln eingeführte Formalismus zur Beschreibung der Wirkungsweise der Komponenten des Polarimeters wird im weiteren Verlauf dieses Kapitels wieder aufgegriffen. Allerdings werden die Beziehungen (3.1) und (3.2), durch welche die idealisierten Wirkungen der Komponenten im Fall eines Wasserstoffatomstrahls angeben werden, durch nachfolgende Operationen ersetzt.

$$\begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ n_4 \end{pmatrix} \xrightarrow{Sechspol} \begin{pmatrix} \sigma_1 n_1 \\ \sigma_2 n_2 \\ \sigma_3 n_3 \\ \sigma_4 n_4 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ n_4 \end{pmatrix} \xrightarrow{SFT\ 1-4} \begin{pmatrix} \epsilon_{14}\, n_4 + (1-\epsilon_{14})\, n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ \epsilon_{14}\, n_1 + (1-\epsilon_{14})\, n_4 \end{pmatrix}. \tag{8.1}$$

8.1 Die Effizienzen der Starkfeldübergänge

Zur Bestimmung der Effizienzen der Starkfeldübergänge sind bei den beiden oben beschriebenen Methoden je eine Intenstitätmessung bei ein- und bei ausgeschaltetem Hochfrequenzübergang notwendig. Die Zusammensetzung der jeweils gemessenen Strahlintensität ergibt sich durch sukzessive Anwendungen der Beziehungen (8.1) und der anschließenden Summation über alle Komponenten des letzten Besetzungstupels der Gleichung (8.2).

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \underset{KM}{\xrightarrow{LDS}} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \end{pmatrix} \underset{1-4}{\xrightarrow{SFT}} \begin{pmatrix} \epsilon_{14}\,\sigma_4 + (1-\epsilon_{14})\,\sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \epsilon_{14}\,\sigma_1 + (1-\epsilon_{14})\,\sigma_4 \end{pmatrix} \xrightarrow{SP} \begin{pmatrix} \epsilon_{14}\,\sigma_4\sigma_1' + (1-\epsilon_{14})\,\sigma_1\sigma_1' \\ \sigma_2\sigma_2' \\ \sigma_3\sigma_3' \\ \epsilon_{14}\,\sigma_1\sigma_4' + (1-\epsilon_{14})\,\sigma_4\sigma_4' \end{pmatrix} \tag{8.2}$$

In der Gleichung (8.2) wurde wegen $E_{HFS} \ll kT$ angenommen, daß die Hyperfeinstrukturzustände des vom Dissoziator kommenden Atomstrahls anfangs gleichbesetzt sind. Diese Gleichverteilung wird dann entweder innerhalb der Spinaustauschquelle (LDS) oder aufgrund des Kalibriermagneten (KM) aufgehoben und die Atome gelangen anschließend in den Bereich des Hochfrequenzübergangs (hier dargestellt am Beispiel des Wasserstoff-Starkfeldübergangs 1 - 4) und nach der Transmission durch die Sechspolmagnete (SP) des Polarisationssytems und in das Quadrupol-Massenspektrometer.
Im Fall der Effizienzmessungen mit dem polarisierten Strahl aus der Spinaustauschquelle müssen für $\sigma_1, \ldots, \sigma_4$ die errechneten relativen Besetzungszahlen für den entsprechenden Polarisationsgrad und für $\sigma_1', \ldots, \sigma_4'$ die durch Messungen bestätigten Transmissionswahrscheinlichkeiten aus Kapitel 6.4.1 eingesetzt werden. Bei Messungen mit dem Kalibriermagneten sind für die Koeffizienten $\sigma_i\sigma_j' = \sigma_{ij}$ die Elemente der Transmissionsmatrix $\sigma^{H,D}$ (siehe Kapitel 6.4.2 und Anhang C) zu verwenden. Bei ausgeschaltetem Hochfrequenzübergang ergibt sich das Intensitätssignal aus der Summation über die Koeffizienten $\sigma_i\sigma_i'$.

Wird das Verhältnis der Signalintensitäten von ein- und ausgeschaltetem Hochfrequenzübergang ($R_{ij} = I^{HFT,an}/I^{HFT,aus}$) nach ϵ_{ij} aufgelöst, so erhält man folgende Form für die Vertauschungseffizienz, welche allgemeingültig ist für alle Wasserstoff- und Deuteriumhochfrequenzübergänge, bei welchen nur eine Umbesetzung stattfindet.

$$\epsilon_{ij} \;=\; \kappa_{ij} \cdot \left(1 - \frac{I^{HFT,an}}{I^{HFT,aus}}\right) \quad . \tag{8.3}$$

Der Korrekturfaktor κ_{ij} enthält die unterschiedlichen Besetzungen der Hyperfeinstrukturzustände vor dem Hochfrequenzübergang und die Transmissionswahrscheinlichkeiten der Zustände durch die nachfolgenden Sechspolmagnete. In der Gleichung (8.4) ist er für Wasserstoff angegeben, im Falle von Deuterium ist die Summation im Zähler über sechs Koeffizienten $\sigma_i\sigma_i'$ durchzuführen. Bei Messungen mit einem Kalibriermagneten mit einer Separationseffizienz von 100 % gilt für den Korrekturfaktor $\kappa_{ij} = 2$ (bei einem Wasserstoffatomstrahl) bzw. $\kappa_{ij} = 3$ (für einen Deuteriumstrahl).

$$\kappa_{ij} \;=\; \frac{\sum_{i=1}^{4} \sigma_i\sigma_i'}{\sigma_i\sigma_i' \,+\, \sigma_j\sigma_j' \,-\, (\sigma_i\sigma_j' \,+\, \sigma_j\sigma_i')} \quad . \tag{8.4}$$

8.1.1 Effizienzmessungen mit Kalibriermagnet

In der Abbildung 8.1 sind die gemessenen Intensitätsverhältnisse R_{ij} für die beiden Wasserstoff-Starkfeldübergänge SFT 1 - 4 und SFT 2 - 4 in Abhängigkeit vom angelegten Magnetstrom des C-Magnets dargestellt. Der Strom in den Gradientenspulen betrug 2,05 A, wodurch sich ein Feldgradienten von $\sim$ 0,16 mT/cm ergibt.

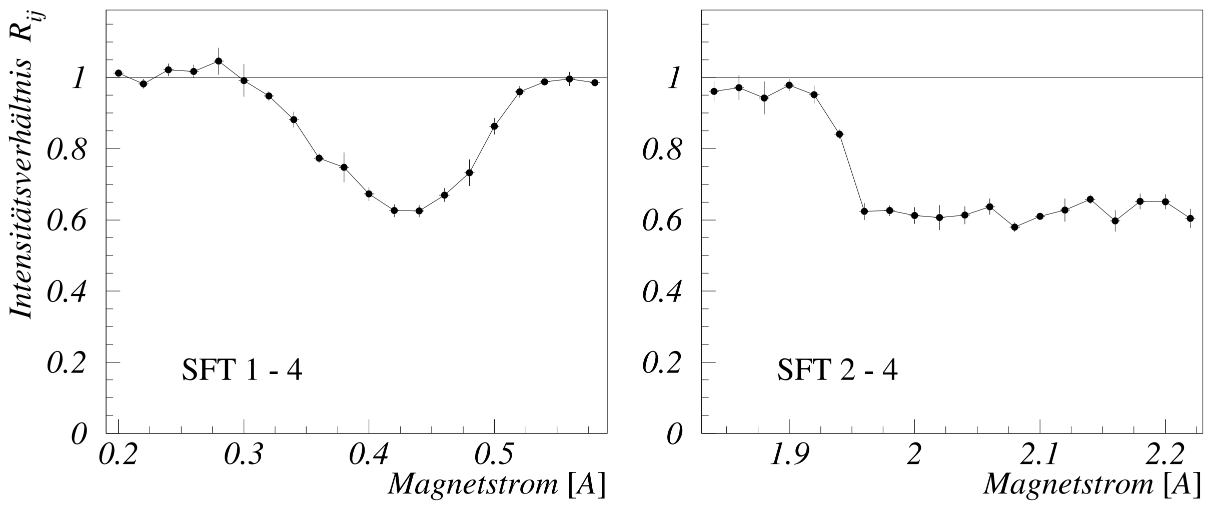

Abb. 8.1: *Gemessene Intensitätsverhältnisse für die beiden Starkfeldübergänge von Wasserstoff in Abhängigkeit vom Magnetstrom des statischen Magnetfeldes.*

Man erkennt für den SFT 1 - 4 einen Bereich von etwa 0,2 A, in welchem eine Abnahme des Intensitätsverhältnisses auftritt. Ein minimales Verhältnis der beiden Intensitätssignale, welches einer maximalen Vertauschung im Hochfrequenzübergang entspricht, ist allerdings nur bei Magnetströmen von (0,41 - 0,45) A ersichtlich. Unter Verwendung der Transmissionsmatrix (C.1) ergibt sich für den Korrekturfaktor κ_{14} ein Wert von 2,488 und somit für die Vertauschungseffizienz aufgrund des gemessenen Verhältnisses von $0,625 \pm 0,010$ ein Wert von $\epsilon_{14} = 0,933 \pm 0,025$.
Bei dem SFT 2 - 4 zeigt sich zum einen eine deutlich schnellere Abnahme des Intensitätsverhältnisses als beim SFT 1 - 4, was auf den Zusammenhang zwischen Resonanzfrequenz und erforderlicher Magnetfeldstärke zurückgeführt werden kann (siehe hierzu Abbildung 4.8 rechts oben), zum anderen erkennt man, daß die gemessenen Werte ab einem Magnetstrom von 2,05 A fluktuieren und innerhalb des gezeigten Magnetstrombereiches bis 2,22 A nicht wieder ansteigen. Dieses Verhalten ist durch die Inhomogenitäten des statischen Magnetfeldes und durch die Streufelder des Hochfrequenzfeldes begründet, wodurch bei hohen Magnetfeldern in den Randgebieten des Hochfrequenzübergangs Bereiche existieren, in welchen die Resonanzbedingung noch erfüllt wird. Für Messungen unter Verwendung des Starkfeldübergangs SFT 2 - 4 sollten aus diesem Grund die Magnetströme maximal 2,04 A betragen. Das aus den ersten fünf Meßpunkten ermittelte Intensitätsverhältnis von $0,620 \pm 0,003$ ergibt eine Vertauschungseffizienz von $\epsilon_{24} = 0,951 \pm 0,007$ ($\kappa_{24} = 2,503$).

Im Fall der Deuterium-Starkfeldübergänge konnte der Resonanzregelkreis infolge technischer Unzulänglichkeiten bisher nicht eingesetzt werden, weswegen die Messungen ausschließlich bei fest eingestellter Frequenz durchgeführt werden mußten. Bei diesen Messungen zeigten sich starke Schwankungen in den gemessenen Signalintensitäten (siehe Abbildung 8.2), welche auf die fehlende Frequenzanpassung und die damit verursachten Instabilitäten des Hochfrequenzsignals, welche mit Hilfe der Pick-up-Spule beobachtet wurden, zurückgeführt werden können.
In der Abbildung 8.2 sind die gemessenen Intensitätsverhältnisse für alle Deuterium-Starkfeldübergänge dargestellt. Man erkennt für die beiden Übergänge SFT 1 - 6 und SFT 2 - 6 jeweils eine signifikante Abnahme des Intensitätsverhältnisses und ein Minimum, welches in beiden Fällen auf einen Strombereich von 0,04 A begrenzt ist. Ein solcher Minimalwert des Intensitätsverhältnisses ist hingegen beim SFT 2 - 5 / 3 - 6 nicht vorhanden, aufgrund der Frequenz von 390 MHz des eingestrahlten Hochfrequenzfeldes wäre er in der Gegend von 1,47 A zu erwarten. Darüberhinaus sollte das Minimum dieses Übergangs deutlich tiefer sein, als daß der anderen Hochfrequenzübergänge, da beim SFT 2 - 5 / 3 - 6 zwei Umbesetzungen gleichzeitig stattfinden. Da dieser Übergang im Breit–Rabi–Polarimeter aufgrund der Doppelumbesetzung nicht verwendet wird, ist das gezeigte Verhalten unkritisch in Bezug auf spätere Messungen, allerdings deutet es darauf hin, daß die Geometrie des Resonators für π-Übergänge (siehe Kapitel 5.2) noch optimiert werden muß,

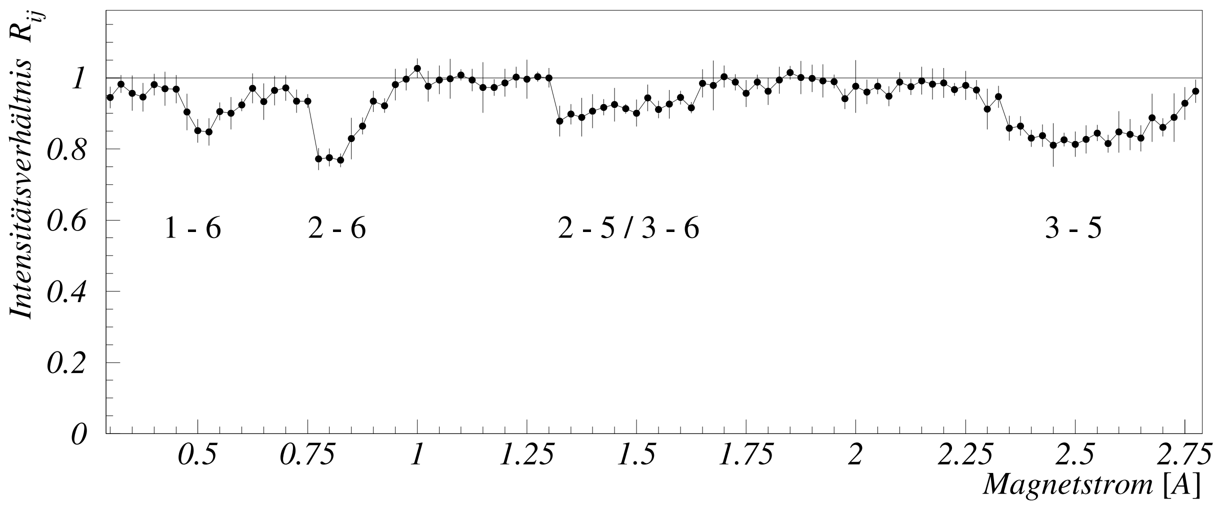

Abb. 8.2: *Gemessene Intensitätsverhältnisse für die Starkfeldübergänge von Deuterium in Abhängigkeit vom Magnetstrom des statischen Magnetfeldes. Durch die Beschriftungen werden die unterschiedlichen Intensitätsabnahmen den entsprechenden Hochfrequenzübergängen zugeordnet.*

was auch durch die niedrige Vertauschungseffizienz des anderen π-Übergangs SFT 1 - 6 bestätigt wird. Wie schon beim SFT 2 - 4 für Wasserstoff, so ist beim SFT 3 - 5 ein sehr weiter Strombereich zu erkennen, in welchem die Resonanzbedingung für eine Vertauschung erfüllt ist. Dieser Signalverlauf ist wiederum durch die Streufelder des statischen Magnetfeldes und des Hochfrequenzfeldes begründet.
Für die Korrekturfaktoren κ_{ij} der drei beim Breit–Rabi–Polarimeter eingesetzten Hochfrequenzübergänge ergeben sich aus der Transmissionsmatrix (C.2) die Werte $\kappa_{16} = 3,635$, $\kappa_{26} = \kappa_{35} = 3,747$ und somit errechnen sich die Vertauschungseffizienzen der Hochfrequenzübergänge aufgrund der gemessenen Intensitätsverhältnisse zu $\epsilon_{16} = 0,546 \pm 0,018$ $\epsilon_{26} = 0,857 \pm 0,015$ und $\epsilon_{35} = 0,664 \pm 0,021$.

Eine Ursache für die sehr niedrigen Effizienzen der Starkfeldübergänge für Deuterium sind die eingangs erwähnten Instabilitäten der Hochfrequenzamplitude. Desweiteren sollte die Geometrie der Resonatorstäbe für diese Winkelkavität noch optimiert werden, allerdings ist hierzu erst eine Wiederholung der Messung 8.2 mit funktionstüchtigem Resonanzregelkreises notwendig.

8.1.2 Effizienzmessungen bei Spintemperaturgleichgewicht

Die Messungen der Intensitätsverhältnisse R_{ij} für die Wasserstoff-Starkfeldübergänge bei einem polarisierten Atomstrahl aus der Spinaustauschquelle erfolgten in vergleichbarer

Weise wie in den Abbildungen 8.1 oder 10.2. Die zusätzlich vor und nach dieser Messung ermittelte Elektronenspinpolarisation betrug $P_e = 0,535 \pm 0,018$.
Die aus dieser Polarisation zu errechnenden relativen Besetzungszahlen sind $(\sigma_1; \ldots; \sigma_4) = (0,589; 0,178; 0,055; 0,178)$ und ergeben zusammen mit den Werten $(\sigma_1'; \ldots; \sigma_4') = (0,508; 0,492; 0,0; 0,0)$ aus der Tabelle 6.3 folgenden Wert für den Korrekturfaktor $\kappa_{14} = 1,852$. Hierdurch berechnet sich die Effizienz für den SFT 1 - 4 zu $\epsilon_{14} = 0,895 \pm 0,025$, welche damit im Rahmen des Meßfehlers sehr gut mit dem Wert der ersten Messung übereinstimmt, obwohl bei der Messung mit Spintemperaturgleichgewicht der eingangs erwähnte systematische Fehler aufgrund einer möglicherweise niedrigeren Elektronenspinpolarisation noch nicht berücksichtigt wurde und sich hierdurch die gemessene Effizienz noch leicht zu einem höheren Wert verschieben könnte.
Da bei einem Wasserstoffatomstrahl im Fall von Spintemperaturgleichgewicht die Hyperfeinstrukturzustände $|2\rangle$ und $|4\rangle$ gleichbesetzt sind, ist es mit dieser Methode nicht möglich, eine Vertauschungseffizienz des Hochfrequenzübergangs SFT 2 - 4 zu bestimmen.

Aufgrund der beschriebenen Probleme beim Betrieb des Resonanzregelkreises konnten keine Messungen mit dem polarisierten Strahl aus der Spinaustauschquelle für die Deuterium-Starkfeldübergänge durchgeführt werden, bei welchen eine Bestimmung der Effizienzen möglich gewesen wäre.

8.2 Die Effizienzen der Mittelfeldübergänge

Im Fall der Effizienzen der Mittelfeldübergänge muß unterschieden werden zwischen den Übergängen, bei welchen nur eine Umbesetzung stattfindet (MFT 2 - 3 bei Wasserstoff und MFT 3 - 4 bei Deuterium) und jenen, bei welchen nacheinander für mehrere Vertauschungen die Resonanzbedingungen im Resonator erfüllt sind.

Bei erstgenannten Hochfrequenzübergängen erfolgt die Herleitung der Gleichung für die Vertauschungseffizienz analog zu jener für die Starkfeldübergänge und führt dementsprechend auch zur Beziehung (8.3). Die aus den Messungen bei Spintemperaturgleichgewicht (siehe Abbildung 8.3) und mit Kalibriermagnet (siehe Abbildungen 8.4 und 8.5) ermittelten Vertauschungseffizienzen sind in der abschließenden Tabelle 8.1 aufgeführt.

Für die Übergänge mit mehreren Umbesetzungen ist die Gleichung (8.3) nicht mehr anwendbar. Die hierfür korrekte Form der Effizienzgleichung kann wiederum mit Hilfe der sukzessiven Anwendung der Beziehungen (8.1) und dem Vergleich der beiden Signalintensitäten bei ein- und ausgeschaltetem Hochfrequenzübergang abgeleitet werden. In (8.5) ist diese Verknüpfung der Beziehungen (8.1) für den MFT 1 - 3 aufgeführt.

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \underset{KM}{\overset{LDS}{\longrightarrow}} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \end{pmatrix} \underset{1-2}{\overset{MFT}{\longrightarrow}} \begin{pmatrix} \epsilon_{12}\sigma_2 + (1-\epsilon_{12})\sigma_1 \\ \epsilon_{12}\sigma_1 + (1-\epsilon_{12})\sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \end{pmatrix} \underset{2-3}{\overset{MFT}{\longrightarrow}} \begin{pmatrix} \epsilon_{12}\sigma_2 + (1-\epsilon_{12})\sigma_1 \\ \epsilon_{23}\sigma_3 + (1-\epsilon_{23})(\epsilon_{12}\sigma_1 + (1-\epsilon_{12})\sigma_2) \\ \epsilon_{23}(\epsilon_{12}\sigma_1 + (1-\epsilon_{12})\sigma_2) + (1-\epsilon_{23})\sigma_3 \\ \sigma_4 \end{pmatrix}$$

$$\overset{SP}{\longrightarrow} \begin{pmatrix} \epsilon_{12}\,\sigma_2\,\sigma'_1 \;+\; (1-\epsilon_{12})\,\sigma_1\,\sigma'_1 \\ \epsilon_{23}\,\sigma_3\,\sigma'_2 \;+\; (1-\epsilon_{23})(\epsilon_{12}\,\sigma_1\,\sigma'_2 + (1-\epsilon_{12})\,\sigma_2\,\sigma'_2) \\ \epsilon_{23}(\epsilon_{12}\,\sigma_1\,\sigma'_3 + (1-\epsilon_{12})\,\sigma_2\,\sigma'_3) \;+\; (1-\epsilon_{23})\sigma_3\,\sigma'_3 \\ \sigma_4\,\sigma'_4 \end{pmatrix} \quad . \tag{8.5}$$

Für die Effizienz des Wasserstoff-Mittelfeldübergangs MFT 1 - 3 ergibt sich damit

$$\epsilon_{13} \;=\; \epsilon_{12}\,\epsilon_{23} \;=\; \frac{\left(1 - \frac{I^{HFT,an}}{I^{HFT,aus}}\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{4} \sigma_i \sigma'_i\right) \;-\; b\,\epsilon_{23}}{\frac{a}{\epsilon_{23}} \;+\; c} \quad , \tag{8.6}$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} a &= \sigma_1\sigma'_1 + \sigma_2\sigma'_2 - \sigma_1\sigma'_2 - \sigma_2\sigma'_1 = (\sigma_1 - \sigma_2)(\sigma'_1 - \sigma'_2) \quad , \\ b &= \sigma_2\sigma'_2 + \sigma_3\sigma'_3 - \sigma_2\sigma'_3 - \sigma_3\sigma'_2 = (\sigma_2 - \sigma_3)(\sigma'_2 - \sigma'_3) \quad , \\ c &= \sigma_1\sigma'_2 + \sigma_2\sigma'_3 - \sigma_2\sigma'_2 - \sigma_1\sigma'_3 = (\sigma_1 - \sigma_2)(\sigma'_2 - \sigma'_3) \quad . \end{aligned} \tag{8.7}$$

Die Gleichung (8.6) kann auch auf den Deuterium-Mittelfeldübergang MFT 2 - 4 übertragen werden. Hierzu muß die Summation im Zähler wiederum auf sechs Koeffizienten $\sigma_i\sigma'_i$ erweitert werden und sämtliche Ziffern in den Indizes der Effizienzen und der Koeffizienten a, b und c müssen jeweils um eins erhöht werden ($\epsilon_{13} \to \epsilon_{24}$, $\sigma_2\sigma'_2 \to \sigma_3\sigma'_3, \ldots$).
Die Herleitung für die Zusammensetzung der gemessenen Strahlintensität für den Deuterium-Mittelfeldübergang MFT 1 - 4, welche in analoger Weise durchzuführen ist, soll hier nicht näher beschrieben werden, für das Verhältnis der gemessenen Intensitäten von ein- und ausgeschaltetem Hochfrequenzübergang erhält man

$$\frac{I^{HFT,an}}{I^{HFT,aus}} \;=\; 1 - \frac{a\,\epsilon_{12} \;+\; b\,\epsilon_{23} \;+\; d\,\epsilon_{34} \;+\; c\,\epsilon_{12}\,\epsilon_{23} \;+\; e\,\epsilon_{23}\,\epsilon_{34} \;+\; f\,\epsilon_{12}\,\epsilon_{23}\,\epsilon_{34}}{\sum_{i=1}^{6} \sigma_i\,\sigma'_i} \quad , \tag{8.8}$$

mit:

$$\begin{aligned} d &= \sigma_3\sigma'_3 + \sigma_4\sigma'_4 - \sigma_3\sigma'_4 - \sigma_4\sigma'_3 = (\sigma_3 - \sigma_4)(\sigma'_3 - \sigma'_4) \quad , \\ e &= \sigma_2\sigma'_3 + \sigma_3\sigma'_4 - \sigma_2\sigma'_4 - \sigma_3\sigma'_3 = (\sigma_2 - \sigma_3)(\sigma'_3 - \sigma'_4) \quad , \\ f &= \sigma_1\sigma'_3 + \sigma_2\sigma'_4 - \sigma_2\sigma'_3 - \sigma_1\sigma'_4 = (\sigma_1 - \sigma_2)(\sigma'_3 - \sigma'_4) \quad , \end{aligned} \tag{8.9}$$

und den Koeffizienten a, b und c gemäß (8.7). Für die Vertauschungseffizienz des MFT 1 - 4 ergibt sich damit:

$$\epsilon_{14} \;=\; \epsilon_{12}\,\epsilon_{23}\,\epsilon_{34} \;=\; \frac{\left(1-\frac{I^{HFT,an}}{I^{HFT,aus}}\right)\cdot\left(\sum_{i=1}^{6}\sigma_i\sigma_i'\right) \;-\; \left(b\,\epsilon_{23} \,+\, d\,\epsilon_{34} \,+\, e\,\epsilon_{23}\,\epsilon_{34}\right)}{\frac{a}{\epsilon_{23}\,\epsilon_{34}} \,+\, \frac{c}{\epsilon_{34}} \,+\, f}\,. \quad (8.10)$$

Da sich die Vertauschungseffizienzen des MFT 1 - 3 und des MFT 2 - 4 jeweils aus dem Produkt zweier Einzeleffizienzen zusammensetzen (siehe Gleichung (8.6)), ist eine Messung der Strahlintensitäten bei ein- und ausgeschaltetem Hochfrequenzübergang nun nicht mehr für eine Effizienzbestimmung ausreichend.

Eine Möglichkeit zur Durchführung einer Effizienzmessung,welche erstmals in [Lin 93] angewandt wurde und in [Bra 95] ausführlich beschrieben ist, basiert auf der Verwendung eines zweiten Hochfrequenzübergangs vor dem Mittelfeldübergang. Da dieses Verfahren immer dann angewandt werden muß, wenn der zu analysierende Atomstrahl nicht auf direktem Wege von der Quelle oder dem Kalibriermagneten zum Mittelfeldübergang gelangen kann, wurden beim Breit–Rabi–Polarimeter zwei Magnetfeldkombinationen, bestehend aus C-Magnetfeld und Gradientenfeld (siehe Kapitel 4.2.3), aufgebaut, so daß gleichzeitig vor dem Mittelfeldübergang noch ein Starkfeldübergang betrieben werden kann.

Da diese Methode unter anderem sehr zeitaufwendig ist, wurde beim Breit–Rabi–Polarimeter zum ersten Mal ein anderes Verfahren angewandt, bei welchem man sich die unterschiedliche Besetzung der Zustände des aus der Spinaustauschquelle kommenden polarisierten Strahls zu Nutze macht. Dieses Verfahren zur Bestimmung der Vertauschungseffizienzen kann allerdings nur dann verwendet werden, wenn sich die Spinaustauschquelle im Spintemperaturgleichgewicht befindet und wenn Quelle, Kalibriermagnet und Mittelfeldübergang auf einer Achse liegen.
Bei dieser Technik der Effizienzbestimmung werden die beiden bisher verwendeten Messmethoden zur Ermittlung des Intensitätsverhältnisses von ein- und ausgeschaltetem Hochfrequenzübergang miteinander kombiniert. Hierzu wird zuerst eine Messung des Verhältnisses R_{ij} mit dem Atomstrahl aus der Spinaustauschquelle durchgeführt. Wie in der Abbildung 8.3 zu erkennen ist, können aufgrund der verschiedenen Besetzungen der Hyperfeinstrukturzustände zwei Strombereiche unterschieden werden, bei welchen die Resonanzbedingung entweder nur für die Umbesetzung 2 - 3 oder für die beiden Umbesetzungen 1 - 2 und 2 - 3 erfüllt ist. Das bei dieser Messung im Resonanzbereich von „1 - 2 + 2 - 3“ ermittelte Intensitätsverhältnis $R_{ij} = I^{HFT,an}/I^{HFT,aus}$ ist in die Gleichung (8.6) einzusetzen und dementsprechend müssen auch die Koeffizienten a, b und c dieser Gleichung aus den Parametern σ_i und σ_i' für diese Messung errechnet werden.

Zur Bestimmung der in die Gleichung (8.6) noch einzusetzenden Effizienz ϵ_{23} dient die

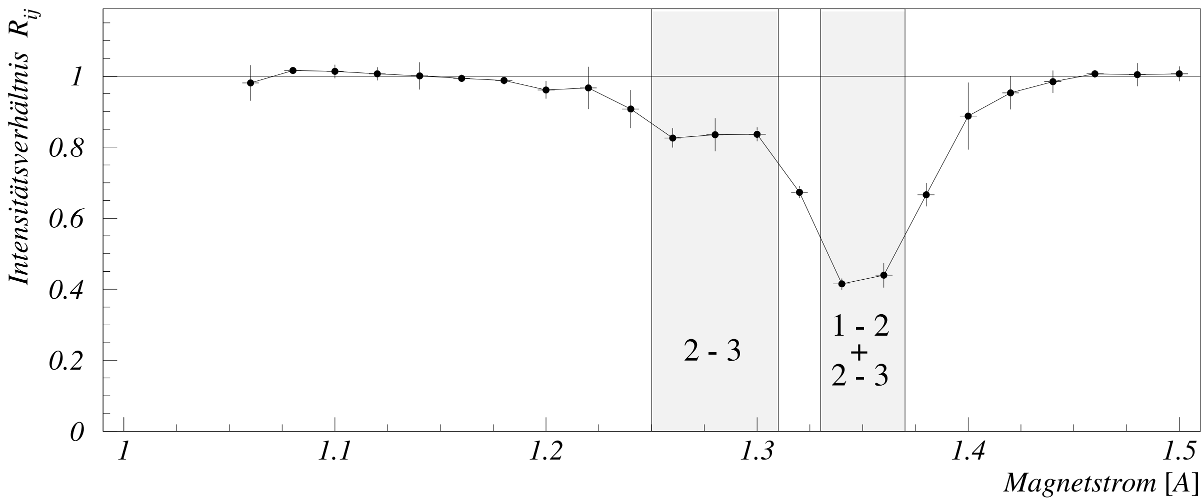

Abb. 8.3: *Gemessene Intensitätsverhältnisse für die Mittelfeldübergänge von Wasserstoff in Abhängigkeit vom Magnetstrom des statischen Magnetfeldes bei Verwendung des polarisierten Strahls aus der Spinaustauschquelle. Mit Hilfe der schraffierten Flächen werden die Strombereiche gekennzeichnet, bei welchen die Resonanzbedingung entweder nur für die Umbesetzung 2 - 3 oder für beide Umbesetzungen 1 - 2 und 2 - 3 erfüllt ist.*

Messung des Intensitätsverhältnisses bei Verwendung des Kalibriermagneten (siehe Abbildung 8.4). Bei dieser Messung wird die Abnahme des Intensitätssignals ausschließlich durch die Umbesetzung 2 - 3 (bzw. 3 - 4 bei Deuterium) verursacht, da die Zustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$ (bzw. $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$) aufgrund des Kalibriermagneten gleichbesetzt[9] sind. So kann nach Gleichung (8.3) für den entsprechenden Strombereich, welcher aufgrund der Messsung bei Spintemperaturgleichgewicht festgelegt wurde, die Effizienz ϵ_{23} ermittelt werden.
Die Ergebnisse für die gemessenen Effizienzen ϵ_{23} und ϵ_{13} und für die hieraus errechnete Effizienz ϵ_{12} sind ebenso in der Tabelle 8.1 aufgeführt, wie die Effizienzen für den Deuterium-Mittelfeldübergang MFT 2 - 4.

Zur Bestimmung der Vertauschungseffizienz des MFT 1 - 4 wären eigentlich jeweils drei Intensitätsmessungen bei ein- und ausgeschaltetem Hochfrequenzübergang unter verschiedenen Bedingungen notwendig, da sich die Effizienz ϵ_{14} aus drei Einzeleffizienzen zusammensetzt (siehe Gleichung (8.10)). Mit Hilfe der beiden Meßmethoden ist es allerdings auch möglich, bei nur zwei Messungen die Effizienz zu ermitteln. Hierfür muß mit der Intensitätsmessung unter Verwendung des Atomstrahls aus der Spinaustauschquelle zuerst untersucht werden, bei welchem Strombereich die Resonanzbedingung für alle drei Umbeset-

[9]Bei einem Wasserstoffatomstrahl ist Unterschied in der Besetzung der Zustände geringer als 0,5 %, bei Deuterium sogar unterhalb von 0,1 %, so daß in guter Näherung eine Gleichbesetzung angenommen werden kann.

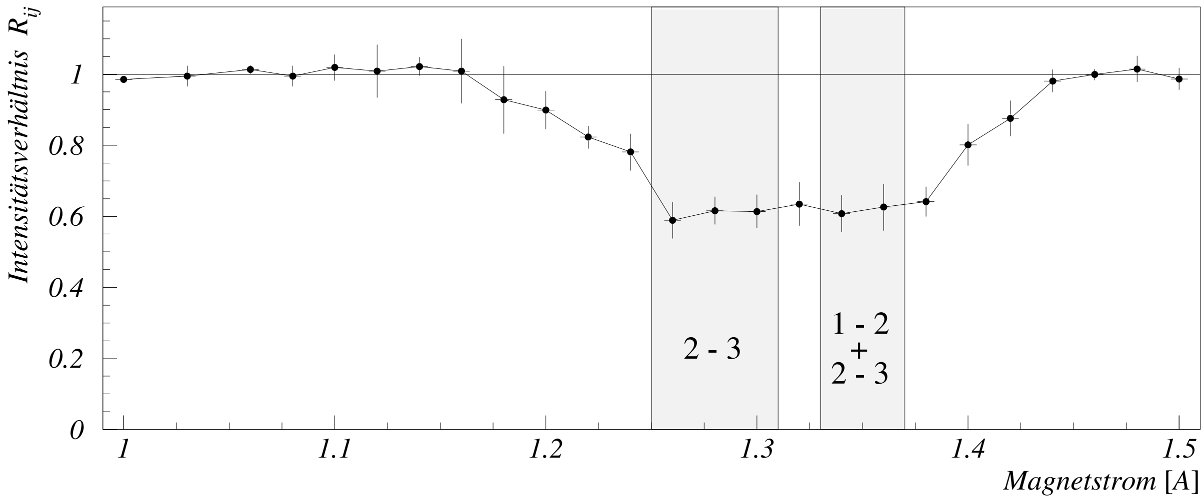

Abb. 8.4: *Gemessene Intensitätsverhältnisse für die Mittelfeldübergänge von Wasserstoff in Abhängigkeit vom Magnetstrom des statischen Magnetfeldes bei Verwendung des Kalibriermagneten . Die Strombereiche, bei welchen die Resonanzbedingung für die Umbesetzungen 2 - 3 oder 1 - 2 und 2 - 3 erfüllt ist (schraffierte Flächen), wurden mit Hilfe der Abbildung 8.3 festgelegt.*

zungen (1 - 2, 2 - 3, 3 - 4) erfüllt ist und anschließend das Verhältnis $R_{ij} = I^{HFT,an}/I^{HFT,aus}$ für diesen Bereich gemessen werden. Ist bei diesen Magnetströmen auch eine hohe Vertauschungseffizienz ϵ_{34} gegeben, was mit Hilfe der Messung bei Verwendung des Kalibriermagneten (siehe Abbildung 8.5) ermittelt werden kann, so ist die Effizienz ϵ_{23} entweder größer oder gleich dem Wert, welcher für den vorherigen Strombereich gemessen wurde und dieser Wert der Vertauschungseffizienz darf daher zur Bestimmung der Effizienz des MFT 1 - 4 herangezogen werden.
Bei den Messungen mit dem polarisierten Strahl aus der Spinaustauschquelle war es nicht möglich, einen Magnetstrombereich zu definieren, in welchem die Resonanzbedingung für alle drei Umbesetzungen erfüllt gewesen wäre (vergleiche Abbildung 10.4). Es konnte zwar eine geringe Abnahme des Intensitätsverhältnisses im Anschluß an den Magnetstrombereich des MFT 2 - 4 festgestellt werden, weswegen auf die geringe Effizienz für die Umbesetzung ϵ_{12} geschlossen werden kann, allerdings waren die gemessenen Signalamplituden starken Schwankungen unterlegen und ermöglichten vor allen Dingen im Strombereich von 0,56 A, bei welchem die Resonanzbedingung für den MFT 1 - 4 aufgrund der gewählten Frequenz des Hochfrequenzfeldes erfüllt ist, nicht die Festlegung eines Minimalwertes für das Intensitätsverhältnis. Verschiedene Studien zur Optimierung des MFT 1 - 4, zum Beispiel durch Veränderungen der Gradientenfeldstärke, werden in [Han 98] zu finden sein.

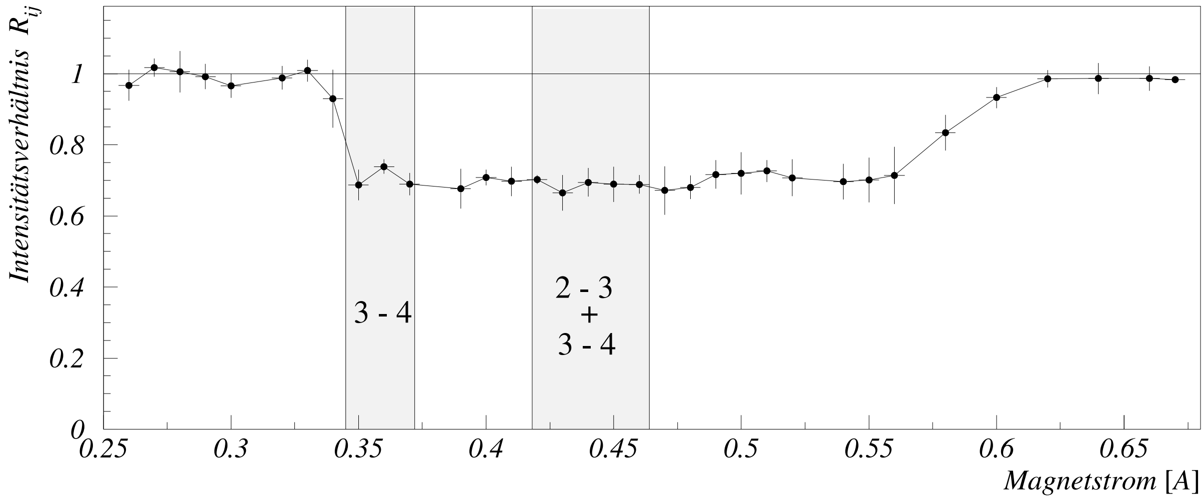

Abb. 8.5: *Gemessene Intensitätsverhältnisse für die Mittelfeldübergänge von Deuterium in Abhängigkeit vom Magnetstrom des statischen Magnetfeldes bei Verwendung des Kalibriermagneten . Die Strombereiche, bei welchen die Resonanzbedingung für die Umbesetzungen 3-4 oder 2-3 und 3-4 erfüllt ist (schraffierte Flächen), wurden mit Hilfe einer Messung festgelegt, welche vergleichbar war zu jener in Abbildung 10.4.*

	Übergang	Umbesetzung	ϵ_{ij} (LDS)	ϵ_{ij} (KM)
Wasserstoff	SFT 1-4		$0,895 \pm 0,025$	$0,933 \pm 0,025$
	SFT 2-4			$0,951 \pm 0,007$
	MFT 2-3		$0,996 \pm 0,003$	$0,978 \pm 0,005$
	MFT 1-3		$0,994 \pm 0,012$	
	MFT 1-3	1-2	$1,012 \pm 0,012$	
	MFT 1-3	2-3		$0,982 \pm 0,004$
Deuterium	SFT 1-6			$0,546 \pm 0,018$
	SFT 2-6			$0,857 \pm 0,015$
	SFT 3-5			$0,664 \pm 0,021$
	MFT 3-4		$0,970 \pm 0,009$	$1,027 \pm 0,042$
	MFT 2-4		$1,036 \pm 0,040$	
	MFT 2-4	2-3	$0,972 \pm 0,078$	
	MFT 2-4	3-4		$1,066 \pm 0,068$

Tab. 8.1: *Ermittelte Vertauschungseffizienzen für die Hochfrequenzübergänge des Polarimeters. In der vorletzten Spalte sind die Effizienzen aufgeführt, welchen unter Verwendung des polarisierten Atomstrahls aus der Spinaustauschquelle (LDS) ermittelt wurden, in der letzten Spalte die Effizienzen der Messungen mit dem Kalibriermagneten (KM).*

9 Fehlerbetrachtung

Auf die meisten der systematischen und statistischen Fehler wurde innerhalb der Arbeit schon an den betreffenden Stellen hingewiesen, dennoch sollen sie hier nochmals zusammenfassend aufgeführt werden.

9.1 Die statistischen Fehler

Die statistischen Fehler sämtlicher Messungen werden durch die Fehler der Strahlintensitätsmessungen bestimmt, wobei zwischen den Polarisationsmessungen, den Messungen mit Kalibriermagnet und den Dissoziationsgradmessungen unterschieden werden muß.

Bei letzteren ergeben sich aufgrund der hohen Strahlintensitäten von molekularem Wasserstoff oder Deuterium und aufgrund der Tatsache, daß der Strahl auf direktem Wege das Massenspektrometer erreichen kann und keine axialen Strahlblenden in den Strahlengang gebracht werden, die geringsten statistischen Fehler. Die gewählte Integrationszeit am Lock-In Verstärker betrug drei Sekunden und es wurden üblicherweise 100 Meßwerte im zeitlichen Abstand von jeweils 0,2 Sekunden aufgenommen, deren Mittelwert und Standardabweichung anschließend berechnet wurden. Der Wert des aus der Standardabweichung ermittelten absoluten statistischen Fehlers lag bei allen Messungen unter 0,01. Da zur Minimierung des systematischen Fehlers die Signalamplituden bei ein- und ausgeschaltetem Dissoziator jeweils zweimal in symmetrisch abwechselnder Reihenfolge gemessen wurden (Dissoziator aus/an/an/aus) und noch eine weitere Messungen zur Bestimmung des Restgasflusses notwendig war (siehe Kapitel 9.2), betrug die Gesamtmeßdauer zur Bestimmung des Dissoziationsgrades etwa zwei bis drei Minuten.

Befand sich während der Signalintensitätsmessungen eine axiale Strahlblende vor den Sechspolmagneten des Analysiersystems (zum Beispiel bei Messungen der Elektronenspinpolarisation oder bei Messungen der Vertauschungseffizienz der Hochfrequenzübergänge mit Hilfe des polarisierten Strahls aus der Spinaustauschquelle), so wurde hierdurch eine Verschlechterung des Signal-zu-Untergrund Verhältnisses um etwa einen Faktor drei verursacht, weswegen die Integrationszeit am Lock-In Verstärker auf zehn Sekunden erhöht werden mußte. Der Mittelwert und die Standardabweichung wurden bei den meisten Messungen aus je 100 Meßpunkten ermittelt, welche im zeitlichen Abstand von 0,5 Sekunden detektiert wurden. Da der Dissozationsgrad in großem Maße mitentscheidend ist für die absolute Anzahl an transmittierten Teilchen und somit für die Signalamplitude, zeigte sich bei diesen Messungen, wie auch bei den Messungen mit dem Kalibriermagneten, eine starke Abhängigkeit der Standardabweichung und damit des statistischen Fehlers vom Dissoziationsgrad. Während bei Dissoziationsgraden ab ungefähr 0,50 der absolute stati-

stische Fehler jeweils unterhalb von 0,01 lag und sich auch für höhere Dissoziationsgrade nur im Bereich von Promille veränderte, ließ sich schon bei geringfügig abnehmendem Dissoziationsgrad ein deutlicher Anstieg des statistischen Fehlers erkennen. Hierbei wurden Werte bis maximal 0,05 erreicht.
Durch die Optimierung des Vakuumssytems im Januar 1998, angesichts derer eine deutliche Verbesserung des Signal-zu-Untergrund Verhältnisses erwartet werden kann, sollte der statistische Fehler auch bei niedrigeren Dissoziationsgraden auf Werte von maximal 0,02 reduziert werden können.
Dies trifft auch für jene Intensitätsmessungen zu, bei welchen sich der Kalibriermagnet im Strahlengang befindet und hierdurch eine weitere Verminderung der Strahlintensität um etwa 40 % hervorgerufen wird. Bei den erwähnten Effizienzmessungen der Deuterium-Mittelfeldübergänge wurden für diesen Aufbau statistische Fehler bis maximal 0,06 festgestellt, welche auch durch eine größere Anzahl an Meßpunkten nicht verringert werden konnten. Eine Verlängerung der Integrationszeit war bei dem verwendeten Lock-In Verstärker zum einen nicht möglich, zum anderen erscheinen Integrationszeiten von mehr als zehn Sekunden nicht mehr sinnvoll, da sich hiermit auch die Meßzeiten deutlich verlängern würden und Langzeiteffekte, wie zum Beispiel eine kontinuierliche Drift im Teilchenfluß, zu einer Verschlechterung des systematischen Fehlers führen würden.

9.2 Die systematischen Fehler

Bezüglich des systematischen Fehlers muß im Fall der Dissoziationsgradmessungen unterschieden werden zwischen den Messungen, bei welchen der Dissoziationsgrad aus den Strahlintensitäten von atomarem und molekularem Wasserstoff bzw. Deuterium bei brennender Entladung des Dissoziators ermittelt wird und jenen Messungen, welchen die Intensitäten der Wasserstoff- oder Deuteriummoleküle bei ein- und ausgeschaltetem Dissoziator zugrunde liegen (siehe Kapitel 3.3).

Für die erstgenannte Methode muß zur Bestimmung des Dissoziationsgrades α unter Berücksichtigung der dissoziativen Ionisation der Moleküle (siehe Kapitel 7), der unterschiedlichen Nachweiswahrscheinlichkeiten von Atomen und Molekülen im Massenspektrometer (siehe Kapitel 7) und der unvollständigen Separation der Atome in den Sechspolmagneten (siehe Kapitel 6.3) die Gleichung (3.8) wie folgt abgeändert werden:

$$\alpha = \left(1 + \frac{2}{k_5} \cdot \frac{\epsilon_1\, \sigma_1^{ion}\, I_2}{\epsilon_2\, \sigma_2^{ion} \cdot (I_1 - k_1 \cdot I_2 - k_2 \cdot I_{18})}\right)^{-1} \quad . \tag{9.1}$$

Die Koeffizienten ϵ_i, σ_i^{ion}, I_i, k_1 und k_2 sind identisch jenen in Kapitel 7, der Korrekturfaktor k_5 berücksichtigt die unvollständige Separation in den Sextupolen des Analysiersystems (für eine Separation von 100 % gilt $k_5 = 2$). Die Gleichung (9.1) ist bei Messungen

mit einen Wasserstoffatomstrahl anzuwenden, bei Deuteriumstrahlen muß sie in der folgenden Weise umgeschrieben werden: $\epsilon_1 \to \epsilon_2$, $\epsilon_2 \to \epsilon_4$, $\sigma_1^{ion} \to \sigma_2^{ion}$, $\sigma_2^{ion} \to \sigma_4^{ion}$, $I_1 \to I_2$, $I_2 \to I_4$, $k_1 \to k_4$, $k_2 = 0$.
Im Rahmen verschiedener Untersuchungen war es allerdings nicht möglich, auch bei einer vernachlässigbaren dissoziativen Ionisation von Wassermolekülen ($I_{18} \approx 0$) einen Wert für den Faktor

$$\frac{2}{k_5} \cdot \frac{\epsilon_1\, \sigma_1^{ion}}{\epsilon_2\, \sigma_2^{ion}}$$

zu ermitteln, da sich unter anderem Abhängigkeiten dieses Faktors vom Dissoziationsgrad oder vom Teilchenfluß ergaben, welche aber jeweils nicht reproduziert werden konnten [Ran 97, Kil 97]. Die Bestimmung des Dissoziationsgrades nach dieser Methode ist mit dem Breit–Rabi–Polarimeter daher nicht möglich, allerdings kann das Verfahren als relativer Dissoziationsgradmonitor eingesetzt werden, wenn es beispielsweise im Verlauf langer Meßreihen nicht möglich ist, den Dissoziator kurz auszuschalten, aber dennoch geringe Änderungen im Dissoziationsgrad und damit in den Signalintensitäten beobachtet werden sollen. Der systematische Fehler beträgt in diesem Fall etwa 0,03 [Kil 97].

Erfolgt die Bestimmung des Dissoziationsgrades mittels der Intensitäten bei ein- und ausgeschaltetem Dissoziator, so muß zur Minimierung des systematischen Fehlers die Strahlintensität $I_{2,R}$ bzw. $I_{4,R}$, welche die Intensität aufgrund des Restgasflusses von der Sextupolkammer in die Detektorkammer beschreibt, gemessen und die Gleichung (3.10) folgendermaßen modifiziert werden.

$$\alpha = 1 \; - \; \frac{I_2^{an} \; - \; I_{2,R}^{an}}{I_2^{aus} \; - \; I_{2,R}^{aus}} \quad . \tag{9.2}$$

I^{an} und I^{aus} bezeichnen die gemessenen Signalintensitäten bei ein- bzw. ausgeschaltetem Dissoziator.
Zur Messung des Intensitätsanteils $I_{2,R}$ bzw. $I_{4,R}$ kann der direkte Strahl aus der Spinaustauschquelle mit Hilfe eines in der Hochfrequenzkammer angebrachten Strahlblockers (siehe Abbildung 4.1) unterbrochen werden. Bei diesen Messungen zeigte sich, daß die Intensitäten des Restgasflusses bei ein- und ausgeschaltetem Dissoziator im Rahmen der Meßgenauigkeit identische Werte besitzen, weswegen gilt $I_{2,R}^{an} = I_{2,R}^{aus} = I_{2,R}$. Weitere Effekte, welche zum systematischen Fehler beitragen können, wie zum Beispiel der minimal veränderte Teilchenfluß bei an- und ausgeschaltetem Dissoziator aufgrund der Druckunterschiede im Dissoziatorrohr, spielen eine untergeordnete Rolle, so daß für den systematischen Gesamtfehler bei der Dissoziationsgradmessungen nach (9.2) ein Wert von 0,01 angenommen werden kann.

Bei den Polarisations- und Kalibrationsmessungen ist der systematische Fehler abhängig von den Genauigkeiten, welche bei der Kalibration der polarisationsanalysierenden Komponenten erreicht wurden. In diesen systematischen Fehler gehen die Fehler der Vertauschungseffizienzen (siehe Kapitel 8), die Fehler der Transmissionen (siehe Kapitel 6.4) und die Fehler beim Nachweis der Atome im Quadrupol-Massenspektrometer (siehe Kapitel 7) ein, wobei die letzten beiden Korrekturen unter anderem durch die Verwendung der axialen Strahlblenden sehr gering sind und im Vergleich zum Fehler der Vertauschungseffizienzen ϵ_{ij}, welcher den systematischen Fehler maßgeblich bestimmt, nahezu vernachlässigt werden können.

Wird die Elektronenspinpolarisation aus den Signalintensitäten bei ein- und ausgeschaltetem Pumplaser der Spinaustauschquelle ermittelt, so werden, wie in Kapitel 6.3 beschrieben, zu hohe Werte berechnet. Der systematische Fehler hierfür skaliert mit der tatsächlich vorhandenen Elektronenspinpolarisation und beträgt bei Polarisationen von 0,2 etwa 0,005 und bei Elektronenpolarisationen von 0,6 etwa 0,015.

Die Größe des systematischen Fehlers, welcher durch die Vernachlässigung asymmetrischer Effizienzen entstehen könnte (siehe Kapitel 8), kann anhand der in Abbildung 10.2 gezeigten Messung abgeschätzt werden, da in dieser Messung aufgrund der Variation des Magnetstromes von $-3,0\,\mathrm{A}$ bis $+3,0\,\mathrm{A}$ die gemessenen Intensitätsverhältnisse einmal einem Hochfrequenzübergang bei einem negativen und einmal bei einem positiven Gradientenfeld entsprechen. Für den Wasserstoff-Starkfeldübergang SFT 1 - 4 wird anhand dieser Messung ein Wert von maximal 0,04 ermittelt. Da für alle anderen Hochfrequenzübergänge, abgesehen von den Deuterium-Starkfeldübergängen, höhere Effizienzen ermittelt wurden (siehe Kapitel 8.2) und die Adiabatenbedingung (siehe Gleichung (5.6)) demnach bei diesen Übergängen besser erfüllt wird, kann der Wert von 0,04 als maximaler Fehler angenommen werden.
Durch weitergehende Optimierungen der Hochfrequenzübergänge und durch die Verwendung einer größeren axialen Strahlblende vor dem Kalibriermagneten sollen in nächster Zeit nicht nur höhere Vertauschungseffizienzen erzielt werden, sondern auch die Asymmetrien in den Verhältnissen ϵ_{ij} gemessen werden, wodurch der systematische Fehler deutlich reduziert werden kann.

10 Der Nachweis von Spintemperaturgleichgewicht

Wie im Kapitel 2.3 erläutert wurde, wird in einer lasergepumpten Spinaustauschquelle der maximale Kernspinpolarisationsgrad nur dann erreicht, wenn sich das System im Spintemperaturgleichgewicht befindet.
Eine Möglichkeit zum Nachweis dieses Gleichgewichtszustandes ist durch die Verwendung der relativen Besetzungszahlen n_i gegeben, da diese im Spintemperaturgleichgewicht der Bedingung (2.1) genügen. Da allerdings zur Bestimmung der relativen Besetzungszahlen die Signalintensitäten bei ein- und ausgeschaltetem Hochfrequenzübergang für mindestens drei verschiedene Übergänge gemessen werden müssen (im Fall von Wasserstoff, bei einem Deuteriumatomstrahl werden fünf Verhältnisse benötigt; siehe hierzu Kapitel 3.1), ist diese Methode nicht nur zeitaufwendig, sondern erfordert außerdem den Einsatz von drei bzw. fünf Hochfrequenzübergängen, deren Vertauschungseffizienzen sehr genau bekannt sein müssen, da ansonsten aufgrund der sich aufsummierenden Fehler der Nachweis nicht erbracht werden kann.

Mit Hilfe eines zweiten Verfahrens kann der Nachweis über das Vorliegen von Spintemperaturgleichgewicht auch dann erbracht werden, wenn mindestens einer der entsprechenden Hochfrequenzübergänge zur Verfügung steht [Ste 97b]. Grundlage dieser Methode ist das Verhältnis R_{ij} der Signalintensitäten bei ein- und ausgeschaltetem Hochfrequenzübergang im Fall von Spintemperaturgleichgewicht:
Allgemein ergibt sich für einen Wasserstoff-Hochfrequenzübergang, dessen Vertauschungseffizienz 100 % beträgt, folgendes Intensitätsverhältnis (siehe Gleichung (3.4)):

$$R_{ij} \;=\; \frac{I^{HFT,an}}{I^{HFT,aus}} \;=\; 1 - \frac{n_i - n_j}{n_1 + n_2} \quad . \tag{10.1}$$

Befindet sich das System im Spintemperaturgleichgewicht, so gilt für die relativen Besetzungszahlen (unter Verwendung der Gleichung (2.1)):

$$n_1 \;=\; Ne^{\beta}\,, \quad n_2 \;=\; n_4 \;=\; N\,, \quad n_3 \;=\; Ne^{-\beta} \tag{10.2}$$

mit

$$N \;=\; \left(e^{\beta} + e^{-\beta} + 2\right)^{-1} \tag{10.3}$$

und man erhält in diesem Fall beispielsweise für den Wasserstoff-Starkfeldübergang SFT 1 - 4 folgendes Verhältnis der Signalintensitäten:

$$R_{14} = \frac{2N}{N(1+e^{\beta})} = \frac{2\,(1+e^{\beta})}{(1+e^{\beta})^2} = \frac{2 + e^{-\beta} + e^{-\beta} + e^{\beta} - e^{\beta}}{2 + e^{\beta} + e^{-\beta}} = 1 \;+\; \frac{e^{-\beta} - e^{\beta}}{2 + e^{\beta} + e^{-\beta}} \tag{10.4}$$

Zusammen mit der Elektronenspinpolarisation gemäß (1.11)

$$P_e = n_1 - n_3 + (n_2 - n_4) \cdot \cos 2\theta = n_1 - n_3 = N(e^{\beta} - e^{-\beta}) = \frac{e^{\beta} - e^{-\beta}}{2 + e^{\beta} + e^{-\beta}} \tag{10.5}$$

ergibt sich aus der Gleichung (10.4) nachfolgende Beziehung zwischen dem Intensitätsverhältnis und der Elektronenspinpolarisation.

$$R_{14} \; = \; 1 \; - \; P_e \quad . \tag{10.6}$$

Unter der Voraussetzung des Spintemperaturgleichgewichtes sind auch für alle anderen Wasserstoff- oder Deuterium-Hochfrequenzübergänge die Intensitätsverhältnisse R_{ij} ausschließlich Funktionen der Elektronenspinpolarisation P_e, wie dies in den Gleichungen (10.9) und (10.10) [Ste 97c] für die im Breit–Rabi–Polarimeter verwendeten Hochfrequenzübergänge zusammenfassend dargestellt ist. Die Herleitungen für diese Intensitätsverhältnisse erfolgen in analoger Weise wie für den Wasserstoff-Starkfeldübergang SFT 1 - 4, dabei lauten die relativen Besetzungszahlen für einen Deuteriumatomstrahl (siehe auch Gleichung (2.1)):

$$n_1 = Ne^{3/2 \cdot \beta}\,, \quad n_2 = n_6 = Ne^{1/2 \cdot \beta}\,, \quad n_3 = n_5 = Ne^{-1/2 \cdot \beta}\,, \quad n_4 = Ne^{-3/2 \cdot \beta} \tag{10.7}$$

und die Elektronenspinpolarisation ist gegeben durch (siehe Gleichung (1.17)):

$$P_e = n_1 - n_4 + (n_2 - n_6) \cos 2\theta_+ + (n_3 - n_5) \cos 2\theta_- = N\,(e^{3/2 \cdot \beta} - e^{-3/2 \cdot \beta}) \quad . \tag{10.8}$$

Sowohl die Verhältnisse im Falle eines Wasserstoffatomstrahls (10.9), als auch jene im Falle von Deuterium (10.10) sind unter der Annahme einer Vertauschungseffizienz von 100 % angegeben, wobei jeweils die erste Zeile die Signalverhältnisse für die Starkfeldübergänge und die zweite Zeile jene für die Mittelfeldübergänge enthält.

$$\begin{aligned} R_{14} &= 1 - P_e \;, & R_{24} &= 1 \;, \\ R_{13} &= \frac{1 - P_e}{1 + P_e} \;, & R_{23} &= \frac{1 + P_e^2}{1 + P_e} \;. \end{aligned} \tag{10.9}$$

$$\begin{aligned} R_{16} &= \frac{3 - 2P_e - P_e^2}{3 + P_e^2} \;, & R_{26} &= 1 \;, & R_{35} &= 1 \;, \\ R_{14} &= \frac{1 - P_e}{1 + P_e} \;, & R_{24} &= \frac{3 - P_e + 5P_e^2 + P_e^3}{3 + 3P_e + P_e^2 + P_e^3} \;, & R_{34} &= \frac{3 + P_e + 5P_e^2 - P_e^3}{3 + 3P_e + P_e^2 + P_e^3} \;. \end{aligned} \tag{10.10}$$

$$P_z = 0: \quad \text{Wasserstoff:} \;\; R_{ij} = \frac{1}{1 + P_e} \;. \quad \text{Deuterium:} \;\; R_{ij} = \frac{1}{3} + \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{1 + P_e} \;. \tag{10.11}$$

Die in (10.11) aufgeführten Gleichungen beschreiben die Verhältnisse für alle Übergänge von Wasserstoff bzw. Deuterium für den Fall, daß der Kernspin unpolarisiert ist ($P_z = 0$). Zur Berechnung der Abhängigkeit dieser Intensitätsverhältnisse von der Elektronenspinpolarisation wurde angenommen, daß die Zustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$ (für Deuterium $|1\rangle$, $|2\rangle$ und $|3\rangle$) und die Zustände $|3\rangle$ und $|4\rangle$ (für Deuterium $|4\rangle$, $|5\rangle$ und $|6\rangle$) jeweils gleich besetzt sind, was identisch ist der Annahme, daß keine Übertragung der Elektronenspinpolarisation mittels Spinaustauschstößen auf den Kernspin stattgefunden hat. Diese Situation ist zum Beispiel dann gegeben, wenn über der Pumpzelle der Spinaustauschquelle ein hohes Magnetfeld angelegt wurde und wenn gleichzeitig die Aufenthaltsdauer der Atome in dieser Pumpzelle aufgrund der gewählten Geometrie der Glasapparatur nur sehr kurz ist. Die graphische Darstellung der hier aufgeführten Signalverhältnisse R_{ij} enthält die Abbildung 10.1.

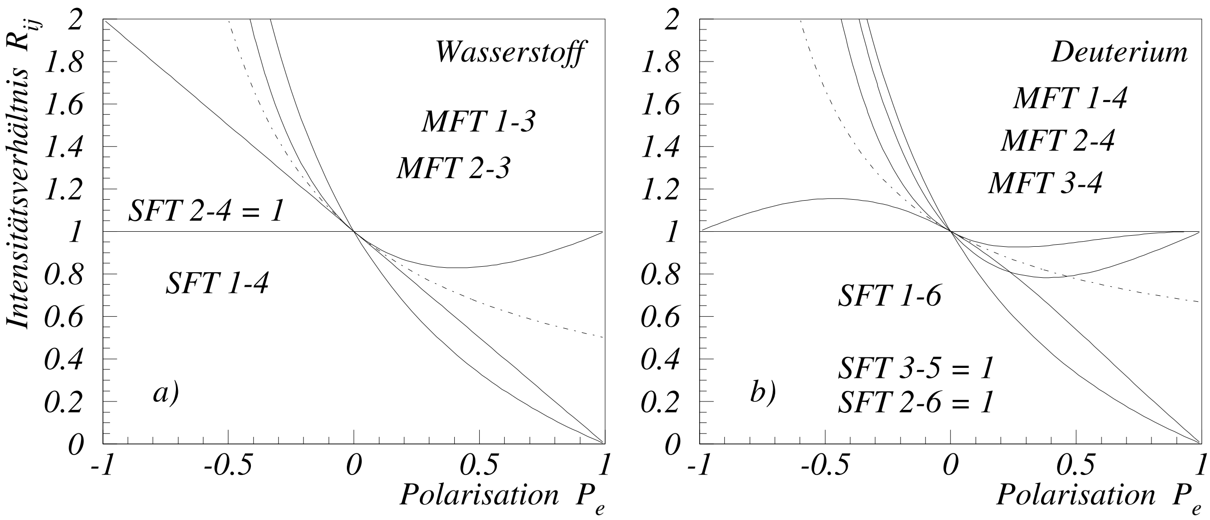

Abb. 10.1: *Erwartete Intensitätsverhältnisse R_{ij} in Abhängigkeit von der Elektronenspinpolarisation P_e für sämtliche Hochfrequenzübergänge des Breit–Rabi–Polarimeters im Fall von Spintemperaturgleichgewicht für a) einen Wasserstoff- und b) einen Deuteriumatomstrahl. Durch die strichpunktierten Linien wird jeweils das Verhältnis für $P_z = 0$ angegeben.*

In der Abbildung 10.1 a) erkennt man, daß die Intensitätsverhältnisse für die Wasserstoff-Hochfrequenzübergänge MFT 1 - 3 und SFT 1 - 4 mit zunehmender Elektronenspinpolarisation P_e abnehmen und bei der maximalen Elektronenpolarisation von 100 % auf Null absinken. Im Gegensatz dazu beträgt beim MFT 2 - 3 das minimale Vertauschungsverhältnis $R_{23,min} = 0,828$ und wird bei einer Elektronenspinpolarisation von $P_e = 0,414$ erreicht. Für den Nachweis des Spintemperaturgleichgewichtes ist ferner zu beachten, daß die Intensitätsverhältnisse im Fall von Spintemperaturgleichgewicht und bei $P_z = 0$ spe-

ziell für den MFT 2 - 3 und den SFT 1 - 4 bei Elektronenspinpolarisationen im Bereich von $0 \leq P_e \leq 0,3$ nur gering voneinander abweichen, so daß für den Nachweis des Spintemperaturgleichgewichtes Polarisationsgrade $P_e \geq 0,3$ angestrebt werden sollten.
Die Verwendung von Atomstrahlen mit einer negativen Elektronenspinpolarisation ist für den Beweis des Gleichgewichtszustandes nicht sehr gut geeignet. Zwar zeigt sich mit einer Abnahme der Polarisation eine deutlich Zunahme der Intensitätsverhältnisse, wobei ab Polarisationsgraden von $P_e \leq -0,3$ auch eine gute Unterscheidung zwischen den Verhältnissen für Spintemperaturgleichgewicht und für $P_z = 0$ gegeben ist, jedoch ist die Anzahl der Teilchen, welche das Massenspektrometer erreichen und dort nachgewiesen werden können, mit abnehmender Elektronenspinpolarisation deutlich reduziert und es ergeben sich damit große statische Fehler. Diese Abnahme in der Absolutzahl an detektierten Teilchen ist dadurch begründet, daß sich bei einer negativen Elektronenpolarisationen ein überwiegender Anteil der Strahlatome in Zuständen mit $m_s = -\frac{1}{2}$ befindet, welche in den Sechspolmagneten defokussiert und somit aus dem Atomstrahl entfernt werden.
Aus demselben Grund sollten im Fall der Deuterium-Hochfrequenzübergänge (siehe Abbildung 10.1 b)) ebenfalls nur Atomstrahlen mit einer positiven Elektronenpolarisation verwendet werden, aber auch in diesem Fall ist der Nachweis des Spintemperaturgleichgewichtes deutlich schwieriger als bei einem Wasserstoffatomstrahl: Der Mittelfeldübergang MFT 1 - 4, welcher für den Nachweis sehr gut geeignet wäre, da bei dessen Verwendung schon bei niedrigen Polarisationen signifikante Unterschiede in den Intensitätsverhältnissen zu erkennen wären, welche auch gut von denen für $P_z = 0$ abgegrenzt werden könnten, konnte bisher noch nicht mit einer ausreichenden Vertauschungseffizienz in Betrieb genommen werden. Beim Mittelfeldübergang MFT 2 - 4, dessen minimales Intensitätsverhältnis im Bereich von $P_e \approx 0,39$ liegt, ist erst ab einer Elektronenspinpolarisation von $P_e \geq 0,6$ eine gute Unterscheidung zwischen dem Verhältnis der Signalintensitäten bei Spintemperaturgleichgewicht und bei $P_z = 0$ möglich und der Übergang MFT 3 - 4, bei dessen Einsatz ab einer Polarisation von $P_e \geq 0,3$ eine Differenzerung zwischen den Verhältnissen für Spintemperaturgleichgewicht und $P_z = 0$ gemacht werden kann, besitzt im Fall von Spintemperaturgleichgewicht nur eine minimales Intensitätsverhältnis von $R_{34} \approx 0,93$, so daß sich schon bei absoluten statischen Fehlern von 0,02 ein Nachweis des Spintemperaturgleichgewichtes als schwierig erweist. Da im Fall von Spintemperaturgleichgewicht die Zustände $|2\rangle$ und $|6\rangle$ und die Zustände $|3\rangle$ und $|5\rangle$ jeweils gleichbesetzt sind, wird bei Verwendung der Starkfeldübergänge nur durch den SFT 1 - 6 ein sich änderendes Intensitätsverhältnis verursacht, welches ab einer Polarisation von $P_e \geq 0,3$ von dem Verhältnis für $P_z = 0$ unterschieden werden kann.

Wird die Elektronenspinpolarisation nach der in Kapitel 3.2 beschriebenen Methode ermittelt, so kann unter Verwendung von (10.9) oder (10.10) das für den Fall von Spintemperaturgleichgewicht zu erwartende Signalverhältnis R_{ij} für den eingesetzten Hochfrequenzübergang abgeleitet werden. Ist die Vertauschungseffizienz des Hochfrequenzübergangs geringer als 100 %, so kann das Signalverhältnis wie folgt berechnet werden:

$$R_{ij}^{real} = 1 - \epsilon_{ij} \cdot (1 - R_{ij}^{ideal}) \tag{10.12}$$

Dabei bezeichnet ϵ_{ij} die Effizienz des Übergangs, R_{ij}^{real} das tatsächliche und R_{ij}^{ideal} das ideale Verhältnis gemäß (10.9) bis (10.11).
Ist das gemessene Signalverhältnis nicht identisch mit einem der errechneten für maximale oder minimale Kernspinpolarisation, so ist es mit dieser Meßmethode nicht möglich, den Polarisationsgrad des Kernspins anzugeben. Da die Messung allerdings in sehr kurzer Zeit durchgeführt werden kann, eignet sie sich neben dem Nachweis von Spintemperaturgleichgewicht besonders gut für die Optimierung der Betriebsparameter einer Spinaustauschquelle (zum Beispiel bezüglich der Feldstärke des über der Pumpzelle angelegten Magnetfeldes).

10.1 Spintemperaturgleichgewicht für Wasserstoffatomstrahlen

Wie im Kapitel 2.3 beschrieben wurde, ist die Zeitdauer, welche ein Ensemble benötigt, um das Spintemperaturgleichgewicht zu erreichen, proportional zum Quadrat des über der Pumpzelle angelegten Magnetfeldes und proportional zur Zeitdauer zwischen zwei Spinaustauschstößen zwischen polarisierten Atomen (siehe Gleichung (2.4)). Die Geometrie der Glasapparatur einer lasergepumpten Spinaustauschquelle und die Wahl der Parameter Teilchenfluß und Magnetfeld sind daher ausschlaggebend, ob dieser Gleichgewichtszustand in einer Spinaustauschquelle erreicht werden kann.
Für die Messungen der Abbildung 10.2, in welcher das Intensitätsverhältnis für ein- und ausgeschalteten Starkfeldübergang in Abhängigkeit vom Magnetstrom des C-Magneten aufgetragen ist, wurde über der Pumpzelle ein Magnetfeld von 150 mT angelegt. Die Dichte an Wasserstoffatomen in der Pumpzelle betrug $1,7 \cdot 10^{14}\,\mathrm{cm}^{-3}$ bei einem Teilchenfluß von $4,5 \cdot 10^{17}\,\mathrm{s}^{-1}$.
Durch die hell schraffierten Flächen werden in dieser Abbildung die Strombereiche gekennzeichnet, bei welchen aufgrund des eingestrahlten Hochfrequenzfeldes mit einer Frequenz von 1456 MHz die Resonanzbedingung für die Starkfeldübergänge SFT 1 - 4 bzw. SFT 2 - 4 erfüllt ist. Die Nullpunktsverschiebung der Resonanzbereiche wird dabei durch das Gradientenfeld verursacht, welches dem statischen Feld des C-Magneten überlagert wird. Die dunkler schraffierten Bereiche deuten die Intensitätsverhältnisse R_{ij} an, welche aufgrund der gemessenen Elektronenspinpolarisation von $P_e = 0,535 \pm 0,018$ und der Vertauschungseffizienzen $\epsilon_{14} = 0,933 \pm 0,025$ bzw. $\epsilon_{24} = 0,951 \pm 0,007$ (siehe Tabelle 8.1)

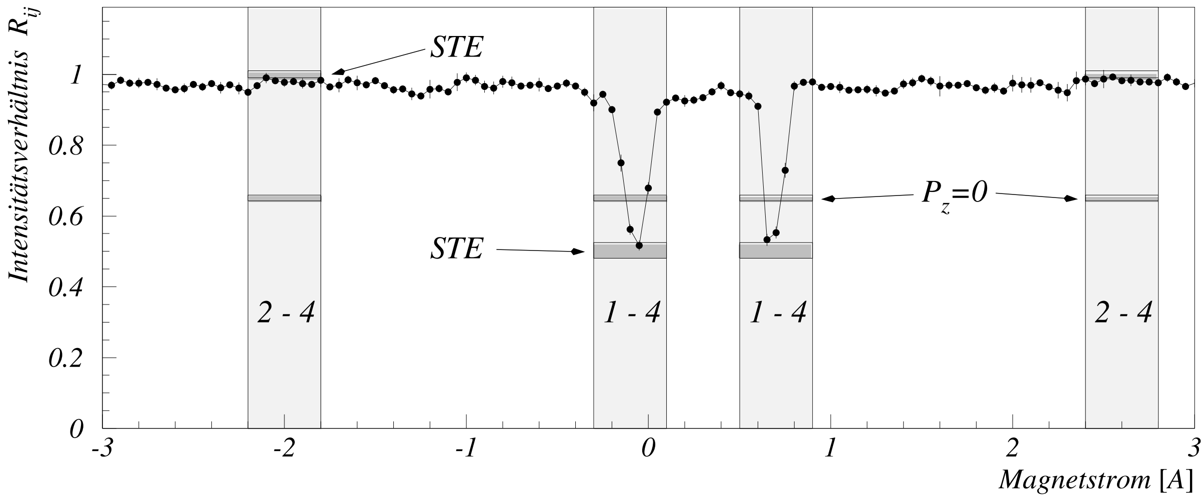

Abb. 10.2: *Gemessene Intensitätsverhältnisse bei ein- und ausgeschaltetem Starkfeldübergang in Abhängigkeit vom Magnetstrom des statischen Magnetfeldes. Die hell schraffierten Flächen markieren die Strombereiche, bei welchen die Resonanzbedingung für den SFT 1-4 bzw. für den SFT 2-4 erfüllt ist, die dunkleren Flächen kennzeichnen die Intensitätsverhältnisse, welche aufgrund der Elektronenspinpolarisation P_e und der Vertauschungseffizienzen ϵ_{ij} für den Fall von Spintemperaturgleichgewicht (STE) oder von $P_z = 0$ errechnet wurden.*

der Starkfeldübergänge für den Fall von Spintemperaturgleichgewicht oder für den Fall von $P_z = 0$ mit Hilfe der Gleichungen (10.9), (10.11) und (10.12) errechnet wurden. Dabei unterscheiden sich bei der gewählten Elektronenpolarisation von $P_e = 0,535$ die Intensitätsverhältnisse für Spintemperaturgleichgewicht und für $P_z = 0$ um mindestens 0,14, so daß eine eindeutige Zuordnung der gemessenen Intensitätsverhältnisse beim Vorliegen von minimaler oder maximaler Kernspinpolarisation möglich ist.

Bei der in der Abbildung 10.2 gezeigten Messung erkennt man, daß die gemessenen Intensitätsverhältnisse im Rahmen der Meßfehler sowohl für den Starkfeldübergang SFT 1-4, als auch für den Übergang SFT 2-4 mit den errechneten Verhältnissen für den Fall von Spintemperaturgleichgewicht übereinstimmen, so daß anhand dieser Messung erstmals gezeigt werden kann, daß in einer lasergepumpten Spinaustauschquelle auch für hohe Teilchenflüsse und bei Magnetfeldern von 150 mT das Spintemperaturgleichgewicht und damit der maximale Kernspinpolarisationgrad ausschließlich aufgrund von Spinaustauschstößen zwischen polarisierten Wasserstoffatomen erreicht werden kann [Ste 97b], sofern die geometrischen Abmessungen der Spinaustauschquelle dahingehend optimiert wurden.

Dieses Ergebnis kann durch eine weitere Messung bestätigt werden, welche nach der gleichen Methode durchgeführt wurde und bei welcher anstelle der Starkfeldübergänge die

Mittelfeldübergänge verwendet wurden.

Bei dieser Messungen, welche in der Abbildung 10.3 gezeigt wird, waren die Parameter bezüglich Teilchfluß, Teilchendichte in der Pumpzelle und angelegtem Magnetfeld identisch zu denen in der Messung mit den Starkfeldübergängen. Allerdings lag die Elektro-

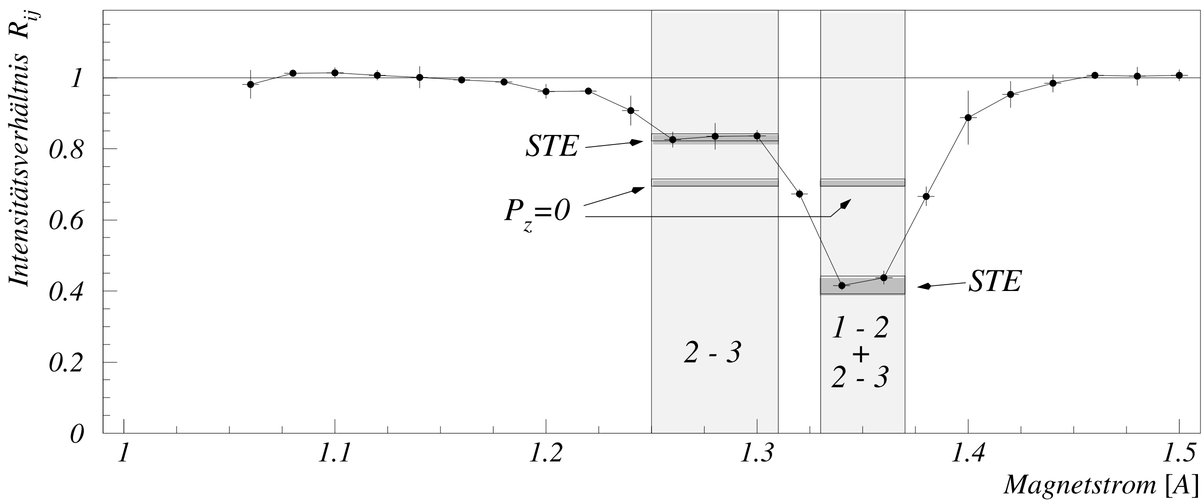

Abb. 10.3: *Gemessene Intensitätsverhältnisse bei ein- und ausgeschaltetem Mittelfeldübergang in Abhängigkeit vom Magnetstrom des statischen Magnetfeldes. Die hell schraffierten Flächen geben die Strombereiche an, bei welchen die Resonanzbedingung entweder nur für die Umbesetzung 2-3 oder für beide Umbesetzungen 1-2 und 2-3 erfüllt ist. Die dunkleren Flächen markieren die Intenstitätsverhältnisse, welche aufgrund der Elektronenspinpolarisation P_e und der Vertauschungseffizienzen ϵ_{ij} für den Fall von Spintemperaturgleichgewicht (STE) oder von $P_z = 0$ errechnet wurden.*

nenspinpolarisation bei $P_e = 0,417 \pm 0,026$, da für den Mittelfeldübergang MFT 2-3 bei dieser Polarisation das Intensitätsverhältnis im Fall von Spintemperaturgleichgewicht nahe dem Minimalwert ist (siehe Abbildung 10.1), die Signalverhältnisse bei Spintemperaturgleichgewicht sich aber dennoch sowohl für den Mittelfeldübergang MFT 2-3, als auch für den MFT 1-3 deutlich von den Verhältnissen für $P_z = 0$ unterscheiden. Diese Intensitätsverhältnisse, welche aus den Effizienzen $\epsilon_{23} = 0,978$ und $\epsilon_{13} = 0,994$ (siehe Tabelle 8.1) und dem vorliegenden Polarisationsgrad unter Verwendung der Gleichungen (10.9), (10.11) und (10.12) berechnet wurden, sind in der Abbildung 10.3 mit Hilfe der dunkel schraffierten Flächen dargestellt.

Wie schon bei den Messungen mit den Starkfeldübergängen (siehe Abbildung 10.2), so zeigt sich in der Abbildung 10.3 auch für die Mittelfeldübergänge eine sehr gute Übereinstimmung der gemessenen Intensitätsverhältnisse mit den für Spintemperaturgleichgewicht errechneten Werten, so daß für einen Wasserstoffatomstrahl das Erreichen dieses Gleichgewichtszustandes bewiesen wurde.

10.2 Spintemperaturgleichgewicht für Deuteriumatomstrahlen

Da in die Gleichung (2.4), durch welche die Zeitdauer für das Erreichen von Spintemperaturgleichgewicht beschrieben wird, nebem dem über der Pumpzelle angelegten Magnetfeld auch das kritische Magnetfeld B_c eingeht, kann der oben gezeigte Nachweis über das Erreichen von Spintemperaturgleichgewicht im Fall eines Wasserstoffatomstrahls auch bei identischen Randbedingungen nicht auf Deuterium übertragen werden ($B_c^H \approx 4,5 \cdot B_c^D$). Eine Messung zum Nachweis dieses Gleichgewichtszustandes für einen Deuteriumatomstrahl zeigt die Abbildung 10.4, bei welcher dieselbe Glasapparatur verwendet wurde, wie im Fall der Wasserstoffmessungen.
Das über der Pumpzelle angelegte Magnetfeld besaß bei dieser Messung eine Feldstärke von 100 mT und der Teilchenfluß betrug $3,0 \cdot 10^{17}\,\mathrm{s}^{-1}$. Der Elektronenspinpolarisations-

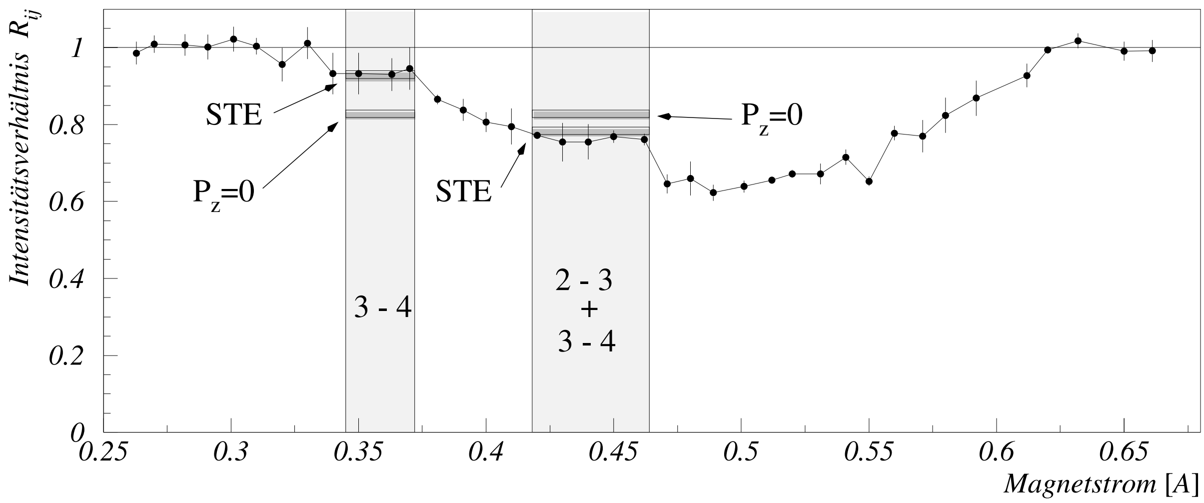

Abb. 10.4: *Gemessene Intensitätsverhältnisse bei ein- und ausgeschaltetem Mittelfeldübergang in Abhängigkeit vom Magnetstrom des statischen Magnetfeldes. Die hell schraffierten Flächen markieren die Strombereiche, bei welchen die Resonanzbedingung für den MFT 3-4 bzw. für den MFT 2-4 erfüllt ist, die dunkleren Flächen kennzeichnen die Intensitätsverhältnisse, welche aufgrund der Elektronenspinpolarisation P_e und der Vertauschungseffizienzen ϵ_{ij} für den Fall von Spintemperaturgleichgewicht (STE) oder von $P_z = 0$ errechnet wurden.*

grad hatte einen Wert von $P_e = 0,347 \pm 0.012$, so daß sich das Intensitätverhältnis im Fall von Spintemperaturgleichgewicht für den Mittelfeldübergang MFT 3-4 in der Nähe

des Minimalwertes befindet (siehe Abbildung 10.1 b)).
Die dunkel schraffierten Flächen in dieser Abbildung markieren wiederum die aus dem Polarisationgrad P_e und den Vertauschungseffizienzen $\epsilon_{34} = \epsilon_{24} = 1$ [10] unter Verwendung der Gleichungen (10.10) und (10.11) errechneten Intensitätsverhältnisse, die helleren Flächen geben die Magnetstrombereiche an, in welchen jeweils die Resonanzbedingung für die entsprechenden Mittelfeldübergänge erfüllt ist.

Wie in den Abbildungen 10.4 und 10.1 zu erkennen ist, besitzen bei der vorliegenden Elektronenspinpolarisation die Intensitätsverhältnisse für minimale ($P_z = 0$) und maximale (STE) Kernspinpolarisation im Fall des Mittelfeldübergangs MFT 2 - 4 nur gering voneinander abweichende Werte ($R_{24} = 0,784$ für STE, $R_{24} = 0,828$ für $P_z = 0$), so daß der Nachweis von Spintemperaturgleichgewicht mit Hilfe dieses Übergangs nicht eindeutig erbracht werden, auch wenn die gemessenen Werte im Rahmen der Meßfehler mit den errechneten übereinstimmen. Für den Nachweis zusätzlich erschwerend waren bei dieser Messung die starken Signalschwankungen,wie auch anhand der eingezeichneten Fehler verdeutlicht wird, welche auf die schon mehrfach erwähnten Saugleistungsschwankungen zurückgeführt werden können.

Im Fall des Mittelfeldübergangs MFT 3 - 4 unterscheiden sich die errechneten Werte für Spintemperaturgleichgewicht und $P_z = 0$ um 0,102, so daß bei dem vorliegenden Polarisationsgrad sowohl ein minimales Intensitätsverhältnis für diesen Hochfrequenzübergang bei Spintemperaturgleichgewicht erreicht wird, als auch die Intensitätsverhältnisse für minimale und maximale Kernspinpolarisation gut voneinander getrennt werden können.
Wie in der Abbildung 10.4 zu erkennen ist, ergab sich bei der Messung eine gute Übereinstimmung des gemessenen Signalverhältnisses mit dem errechneten, so daß mit Hilfe dieser Messung erstmals nachgewiesen werden konnte, daß in einer lasergepumpten Spinaustauschquelle auch für einen Deuteriumatomstrahl die maximale Kernspin- und Tensorpolarisation ausschließlich mittels Spinaustauschstößen erreicht werden kann.

Zur Verifizierung dieses Ergebnisses werden weitere Messungen mit den Mittelfeldübergängen durchgeführt werden, wobei mit Hilfe einer Variation der Pumplaserleistung verschiedene Elektronenspinpolarisationen angestrebt werden, so daß auch bei Verwendung des MFT 2 - 4 gesicherte Aussagen über das Vorliegen des Spintemperaturgleichgewichtes möglich sind. Da bei diesem Hochfrequenzübergang, wie eingangs dieses Kapitels beschrieben wurde, die Intensitätsverhältnisse für Spintemperaturgleichgewicht und für $P_z = 0$ bis zu Elektronenspinpolarisationen von $P_e \approx 0,55$ nur gering voneinander abweichen und dementsprechend sämtliche Fehler weitestgehend minimiert werden sollten, ist eine Realisierung der Messungen zum eindeutigen Beweis des Spintemperaturgleichgewichtes

[10] Die gemessenen Werte für die Vertauschungseffizienzen sind im Rahmen der Meßfehler mit $\epsilon_{34} = \epsilon_{24} = 1$ verträglich (siehe Tabelle 8.1).

erst dann möglich, wenn die in Kapitel 4.1 beschriebene Optimierung des Vakuumsystems, wodurch sich eine deutliche Reduzierung des statistischen Fehlers ergeben sollte, und die dazu parallel durchgeführten Umbauten zur Optimierung der lasergepumpten Spinaustauschquelle abgeschlossen wurden.

11 Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war die Planung und der Aufbau eines Breit–Rabi–Polarimeters, welches die Analyse von Wasserstoff- und Deuteriumatomstrahlen einer lasergepumpten Spinaustauschquelle hinsichtlich ihres Dissoziationsgrades und ihrer Polarisation ermöglicht.

Im Rahmen verschiedener Studien konnte mit Hilfe des Polarimeters anhand der in Erlangen aufgebauten Spinaustauschquelle erstmals experimentell nachgewiesen werden, daß sowohl für einen Wasserstoff-, als auch für einen Deuteriumatomstrahl das Spintemperaturgleichgewicht erreicht wird. Durch diese Messungen wird die Annahme bestätigt, daß in einer Spinaustauschquelle auch bei hohen Teilchenflüssen von $\sim 7 \cdot 10^{17}\,\mathrm{s}^{-1}$ der maximale Kernspinpolarisationsgrad ausschließlich mittels Spinaustauschstößen zwischen polarisierten Atomen erreicht werden kann, wenn die Geometrie der Spinaustauschquelle bezüglich der Verweildauer der Atome in der Pumpzelle und somit im Bezug auf die Anzahl der Spinaustauschstöße optimiert wird.

Im Hinblick auf die Effizienz der polarisationsanalysierenden Komponenten des Breit–Rabi–Polarimeters konnte im Verlauf dieser Arbeit gezeigt werden, daß trotz der Strahltemperaturen von 500 K, und der damit verbundenen hohen Teilchengeschwindigkeiten, für die Wasserstoff-Mittelfeldübergänge und für die Deuterium-Mittelfeldübergänge MFT 3 - 4 und MFT 2 - 4 Vertauschungseffizienzen von annähernd 100 % erreicht werden und daß die Vertauschungseffizienzen im Fall der Wasserstoff-Starkfeldübergänge jeweils über 90 % betragen. Eine Optimierung der Deuterium-Starkfeldübergänge, deren Effizienzen unterhalb dieses Wertes lagen, konnte bisher aufgrund von Schwierigkeiten mit der Hochfrequenzansteuerung noch nicht durchgeführt werden.
Durch die Verwendung von axialen Strahlblenden, deren Dimensionen mit Hilfe von Monte–Carlo Simulationen optimiert wurden, konnte für die beiden Sextupole, welche nach den Hochfrequenzübergängen befestigt sind, eine Separationseffizienz von 100 % verwirklicht werden, wobei sich nahezu eine Gleichverteilung der fokussierten Zustände ergab.

Auf einige Möglichkeiten zur technischen Verbesserung des Breit–Rabi–Polarimeters oder zur Verifizierung von Messergebnissen wurde schon innerhalb der Arbeit hingewiesen, dennoch sollen sie an dieser Stelle noch einmal zusammenfassend aufgeführt werden:

- Die Optimierung des Vakuumsystems (siehe Kapitel 4) zur Verbesserung des Signal-zu-Untergrund Verhältnisses und zur Vermeidung von Signalfluktuationen aufgrund von Saugleistungsschwankungen der Refrigerator-Kryopumpen.

- Der Einsatz der betriebfertigen und getesteten Elektronik und Software zur Einzelpulszählung (siehe Kapitel 4.4), welche bisher aufgrund der Saugleistungsschwankungen nicht verwendet werden konnte. Hierdurch kann eine deutliche Verbesserung der Sensitivität des Atomstrahldetektors und eine Reduzierung der Meßzeiten erreicht werden.

- Weitere Messungen zum Nachweis des Spintemperaturgleichgewichtes für Deuterium nach abgeschlossener Optimierung der lasergepumpten Spinaustauschquelle und des Vakuumsystems, wobei sowohl die Mittelfeldübergänge, als auch die optimierten Starkfeldübergänge eingesetzt werden sollen.
- Die Verschiebung der hinteren beiden Sextupole zur Erhöhung der Signalamplitude im Massenspektrometer. Die hierfür optimalen Positionen wurden mit Hilfe der Monte-Carlo Simulationen ermittelt (siehe Kapitel 6.5), ein Umbau war bisher aber aufgrund der eingeschränkten Saugleistungen der Vakuumpumpen nicht möglich.

Trotz der noch ausstehenden Optimierungen und Umbauten, ist das Breit–Rabi–Polarimeter schon in seiner jetzigen Form ein sehr gutes Meßgerät zur Analyse und Optimierung aller charakteristischen Parameter einer lasergepumpten Spinaustauschquelle im Hinblick auf den Einsatz eines solchen Quellentyps für ein internes Speicherringtarget.

„…
Und wenn ihr dies nicht glauben wullt
Vom Schrie, vom Schra, vom Schreiben,
Dann seid Ihr schließlich selber schuld
Und lasst es eben bleiben. “

James Krüss
Der Zauberer Korinthe

A Druckverhältnisse im Breit–Rabi–Polarimeter

H_2-Fluß $[s^{-1}]$	Totaldrücke [mbar]				
	Dissoziator	1. Pumpstufe	2. Pumpstufe	3. Pumpstufe	4. Pumpstufe
$2,2 \cdot 10^{17}$	$1,12 \cdot 10^{-1}$	$5,0 \cdot 10^{-6}$	$0,9 \cdot 10^{-7}$	$5,0 \cdot 10^{-7}$	$4,9 \cdot 10^{-8}$
$4,5 \cdot 10^{17}$	$2,26 \cdot 10^{-1}$	$7,0 \cdot 10^{-6}$	$3,0 \cdot 10^{-7}$	$8,0 \cdot 10^{-7}$	$6,4 \cdot 10^{-8}$
$6,7 \cdot 10^{17}$	$3,19 \cdot 10^{-1}$	$9,0 \cdot 10^{-6}$	$5,0 \cdot 10^{-7}$	$10,5 \cdot 10^{-7}$	$13,0 \cdot 10^{-8}$

Tab. A.1: *Gemessene Druckverteilungen in den verschiedenen Vakuumbereichen der Spinaustauschquelle und des Breit–Rabi–Polarimeters bei Gaseinlaß.*

Pumpstufe	Hersteller	Typenbezeichnung	Saugleistung für H_2
Kalibrierkammer	Leybold	RPK 1500 U3	2000 l/s
HFT-Kammer	Leybold	RPK 1500 U3	2000 l/s
	Leybold	Turbovac 340 M	370 l/s
Sextupolkammer	Balzers	USP 035 + UPK 150 A	3600 l/s
	Balzers-Pfeiffer	TPH 180 H	130 l/s
Detektorkammer	Balzers	USP 035 + UPK 150 A	3600 l/s
	Balzers-Pfeiffer	TPU 180 H	130 l/s
Vorvakuum	Edwards	ESDP 30 Scroll	25 m^3/h
Regenerationssystem	Balzers-Pfeiffer	TPH 140	110 l/s
	Alcatel	350 C	3,7 m^3/h
ab Januar 1998	Pfeiffer	TPH 2200	2800 l/s
	Balzers-Pfeiffer	Duo 004 B	4,0 m^3/h

Tab. A.2: *Saugleistungen der verwendeten Vakuumpumpen.*

B Abmessungen des Breit–Rabi–Polarimeters

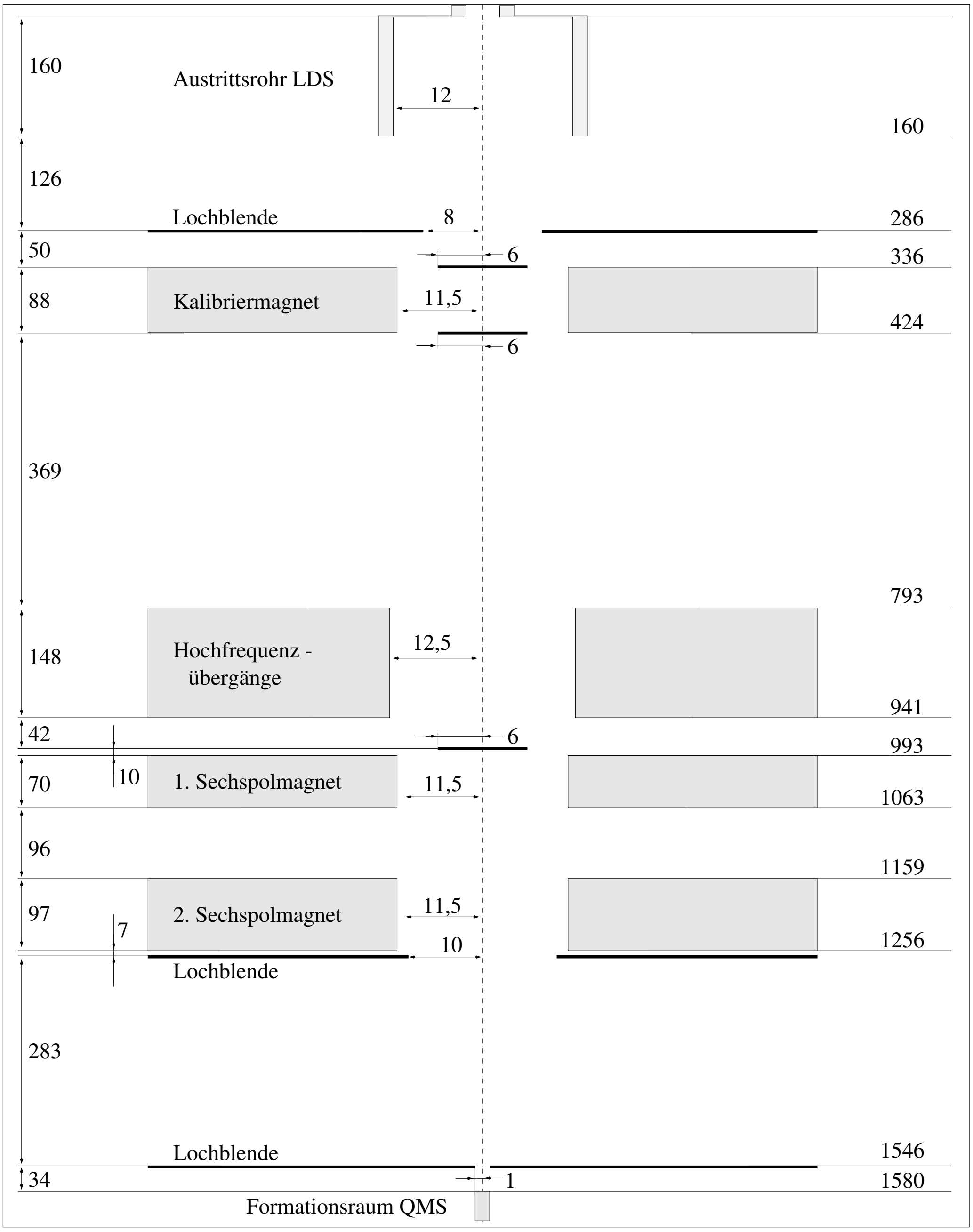

Abb. B.1: *Skizze des Polarimeters (Größenangaben in mm. Maßstäbe: horizontal 1:1,05, vertikal: 1:9,56). Die absoluten Abstände der Komponenten sind auf der rechten Seite angegeben (Nullpunkt: Beginn des Austrittsrohres der Quelle), die relativen Abstände links. Bezugspunkt der in der Mitte bezeichneten Radien ist die Atomstrahlachse.*

C Transmissionmatrizen

Errechnete Transmissionsmatrix für einen Wasserstoffatomstrahl bei einer Strahltemperatur von 300 K:

$$\sigma^{H,300} = \begin{pmatrix} 0.2093 & 0.2088 & 0.0 & 0.0 \\ 0.2087 & 0.2082 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0411 & 0.0410 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0415 & 0.0414 & 0.0 & 0.0 \end{pmatrix} \quad . \tag{C.1}$$

Errechnete Transmissionsmatrix für einen Deuteriumatomstrahl bei einer Strahltemperatur von 300 K:

$$\sigma^{D,300} = \begin{pmatrix} 0.09517 & 0.09233 & 0.09236 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.09517 & 0.09232 & 0.09235 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.09517 & 0.09232 & 0.09232 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.01818 & 0.01764 & 0.01765 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.01819 & 0.01765 & 0.01765 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.01819 & 0.01765 & 0.01765 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \end{pmatrix} \quad . \tag{C.2}$$

Abbildungsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

Literaturverzeichnis

[Abr 58] A. Abragam, J.M. Winter; Phys. Rev. Lett. **1** (1958) 374.

[Ack 97] K. Ackerstaff et al. (HERMES-Collaboration); Phys. Lett. **B404** (1997) 383.

[And 60] L.W. Anderson et al.; Phys. Rev. **120** (1960) 1279.

[And 92] L.W. Anderson, T. Walker; Nucl. Inst. and Meth. **A316** (1992) 123.

[And 93] T. Walker, L.W. Anderson; Nucl. Inst. and Meth. **A334** (1993) 313.

[Ard 64] M. v. Ardenne; *Tabellen zur angewandten Physik Bd. 2*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin (1964) 138.

[Arn 94] L. Arnaudon et al.; CERN-SL-94-71-BI (1994), Z. Phys. **C66** (1995) 45.

[Bal] Balzers; *Partialdruckmessung in der Vakuumtechnik*, Liechtenstein.

[Bar 81] M.D. Barker et al.; *Proc. 5th Int. Symp. on Polarization Phenomena in Nuclear Physics*, Santa Fe 1980; G.G. Ohlsen et al. (eds.); AIP Conf. Proc. **69** (1981) 931.

[Bar 95] D.P. Barber, C. Großhauser et al.; Phys. Lett. **B343** (1995) 436.

[Bau 79] B. Bauer; *Staatsexamensarbeit*, MPI f. Kernphysik, Heidelberg (1979).

[Bau 96] C. Baumgarten; *Diplomarbeit*, Universität Hamburg (1996).

[Bec 95] M. Beckmann; *Diplomarbeit*, Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg (1995).

[Beu 65] R. Beurtey; *Proc. 2nd Int. Symp. on Polarization Phenomena of Nucleons*, Karlsruhe; P. Huber, P. Schopper (eds.); American Institute of Physics, New York (1965) 33.

[Blo 46] F. Bloch; Phys. Rev. **70** (1946) 460.

[Bra 95] B. Braun; *Dissertation*, Universität München (1995), DESY-HERMES 95-47.

[Bra 97] B. Braun; *private Mitteilung*, Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg (1997).

[Bre 31] G. Breit, I.I. Rabi; Phys. Rev. **38** (1931) 2082.

[Brü 85] W. Brückner, E. Steffens et al.; *Physics with antiprotons at LEAR in the ACOL ERA*, Tignes 1985; U. Gastaldi et al. (eds); Edition Frontieres (1985) 245.

[Bur 67] C.N. Burrous, A.J. Lieber, V.T. Zaviantseff; Rev. Scien. Inst. **38** (1967) 1477.

[CER 94] CERN Program Library entry Y250; *HBOOK - Statistical Analysis and Histogramming*, Version 4.22, CERN - CN Division, Genf (1994).

[Dür 95] M. Düren; *Habilitationsschrift*, Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg, DESY-HERMES 95–02 (1995).

[Fed 97] J.A. Fedchak et al.; Nucl. Inst. and Meth. **A391** (1997) 405.

[Fer 95] M. Ferro–Luzzi et al.; Nucl. Inst. and Meth. **A364** (1995) 44.

[Gab 95] E.-M. Gabriel; *Diplomarbeit*, MPI für Kernphysik, Heidelberg (1995).

[Gal] Galileo Electro Optics Corp.; *Galileo Electron Multiplier Handbook.*, Scientific Instrument Services, Ringoes / USA.

[Gau 92] H.G. Gaul, E. Steffens; Nucl. Inst. and Meth. **A316** (1992) 297.

[Ger 21] W. Gerlach, O. Stern; Z. Phys. **8** (1921) 110.

[Ger 22] W. Gerlach, O. Stern; Z. Phys. **9** (1922) 349.

[Gol 96] A. Golendoukhin; *Proc. 12^{th} International Symposium on High-Energy Spin Physics*, Amsterdam 1996; de Jager et al. (eds.), World Scientific (1997) 331.

[Gro 94] C. Großhauser; *Diplomarbeit*, Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg (1994).

[Gro 97] C. Großhauser, W. Kilian, B. Ranzenberger, K. Rith, J. Stenger; *Proc. of the 12^{th} International Symposium on High-Energy Spin Physics*, Amsterdam 1996; de Jager (Edt.), World Scientific (1997) 340.

[Hae 67] W. Haeberli; Ann. Rev. Nucl. Science **17** (1967) 373.

[Hae 85] W. Haeberli; *Proc. Workshop on Nucl. Phys. with Stored, Cooled Beams*, Bloomington / Indiana 1984; P. Schwandt and H.O. Meyer (eds.); AIP Conf. Proc. **128** (1985) 251.

[Hal 80] K. Halbach; Nucl. Inst. and Meth. **169** (1980) 1.

[Han 98] W.P. Hanich; *Diplomarbeit*, Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg, in Vorbereitung.

[Her 90] The HERMES Collaboration; *Proposal*, DESY PRC 90/01 (1990).
Technical Design Report, DESY PRC 93/06 (1993).

[Hid] Hiden Analytical; *Restgasanalyse mit Quadrupol-Massenspektrometern*, Technische Information, Ried / Kochel.

[Hor 95] E. Hornung; *Schaltpläne für HF-Regelung der Starkfeldübergänge*, MPI f. Kernphysik, Heidelberg (1995).

[Kas 77] D. Kassen; *Dissertation*, Universität Heidelberg (1977).

[Kil 97] W. Kilian; *Diplomarbeit*, Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg (1997).

[Kla 96] E. van Klaveren; *Undergraduate Thesis*, NIKHEF / University of Amsterdam (1996).

[Koc 95] N. Koch; *Diplomarbeit*, Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg (1995).

[Koc 97] N. Koch; *private Mitteilung*, (1997).

[Kol 97] H. Kolster; *private Mitteilung*, (1997) .

[Kus 59] P. Kusch, V.W. Hughes; *Handbuch der Physik* **37/1**, Springer-Verlag, Berlin (1959).

[Lin 93] M.T. Lin; *Diplomarbeit*, Universität Heidelberg (1993).

[May 85] T. Mayer-Kuckuk; *Atomphysik*, 3. überarbeitete u. erweiterte Auflage, Teubner, Stuttgart (1985) 192 - 208.

[May 92] T. Mayer-Kuckuk; *Kernphysik*, 5. überarbeitete u. ergänzte Auflage, Teubner, Stuttgart (1992) 54 - 55.

[Mei 92] H. Meinke, F. Gundlach, K. Lange; *Taschenbuch der Hochfrequenztechnik*, 5. überarbeitete Auflage, Band 2, Springer, Berlin (1992) L 49.

[Mes 90] A. Messiah; *Quantenmechanik 2*, 3. Auflage, de Gruyter & Co., Berlin (1990) 223.

[Met 95] A. Metz; *Diplomarbeit*, Universität München (1995), DESY-HERMES 95-01.

[Nag 95] W. Nagengast; *Diplomarbeit*, Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg (1995).

[Nag 98a] W. Nagengast, A. Nass, C. Großhauser, K. Rith, F. Schmidt; J. Appl. Phys. (1998) im Druck.

[Nag 98b] W. Nagengast; *Dissertation*, Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg, in Vorbereitung.

[Nas 98] A. Nass; *Diplomarbeit*, Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg (1998).

[Ori 87] O.J. Orient, S.K. Srivastava; J. Phys. B **20** (1987) 3923.

[Poe 94] M. Poelker et al.; Phys. Rev. **A 50** (1994) 2450.

[Poe 95] M. Poelker et al.; Nucl. Inst. and Meth. **A 364** (1995) 58.

[Phi 87] R.J. Philpott; Nucl. Inst. and Meth. **A 259** (1987) 317.

[Ran 97] B. Ranzenberger; *Diplomarbeit*, Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg (1997).

[Rap 65] D. Rapp, P. Englander–Golden; J. Chem. Phys. **43** (1965) 1464.

[Rap 65b] D. Rapp, P. Englander–Golden, D.D. Briglia; J. Chem. Phys. **42** (1965) 4081.

[Rit 91] K. Rith; *Proc. Workshop on Polarized Gas Targets for Storage Rings*, Heidelberg 1991; H.G. Gaul, E. Steffens, K. Zapfe (eds.), (1991) 3.

[Sch] F. Schmidt; *Dissertation*, Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg, in Vorbereitung.

[Sch 81] K.P. Schüler; *Proc. in High Energy Physics with Polarized Beams and Polarized Targets*, Lausanne 1980; C. Joseph and J. Soffer (eds.); Experimentia Suppl. **38** (1991) 460.

[Sch 91] P. Schiemenz, A. Ross, G. Graw; Nucl. Inst. and Meth. **A305** (1991) 15.

[Sim 94] I. Simiantonakis; *Diplomarbeit*, Universität Heidelberg (1994).

[Ste 77] E. Steffens et al.; Rev. Phys. Appliquè **12** (1977) 1567.

[Ste 92] J. Stenger; *Diplomarbeit*, MPI für Kernphysik, Heidelberg (1992).

[Ste 95a] J. Stenger; *Dissertation*, Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg (1995), DESY-HERMES 95-43.

[Ste 95b] J. Stenger, K. Rith; Nucl. Inst. and Meth. **A361** (1995) 60.
Errata Nucl. Inst. and Meth. **A378** (1996) 360.

[Ste 97a] J. Stenger et al.; Nucl. Inst. and Meth. **A384** (1997) 333.

[Ste 97b] J. Stenger, C. Großhauser et al.; Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 4177.

[Ste 97c] J. Stenger, C. Großhauser et al.; *Proc. of the Int. Workshop on polarized beams and gas targets*, Urbana / Illinois 1997, im Druck.

[Swe 88] D.R. Swenson, L.W. Anderson; Nucl. Inst. and Meth. **B29** (1988) 627.

[Tak 78] K. Takayanagi, H. Suzuki; *Cross sections for atomic processes*, Vol. 1, Research Information Center, Institute of Plasma Physics, Nagoya (1978) M-D-7.

[Tho 87] G.E. Thomas et al.; Nucl. Inst. and Meth. **A257** (1987) 32.

[Tip 95] P.A. Tippler; *Physik*, korrigierter Nachdruck der 1. Auflage, Spektrum Akademie Verlag, Heidelberg, Berlin, Oxford (1995) 526.

[Tup 86] D. Tupa et al.; Phys. Rev. **A33** (1986) 1045.

[Tup 87] D. Tupa, L.W. Anderson; Phys. Rev. **A36** (1987) 2142.

[Wal 93] T. Walker, L.W. Anderson; Nucl. Inst. and Meth. **A334** (1993) 313.

[Wil 89] D. Wille; *Repetitorium der linearen Algebra, Teil 1*, 1. Auflage, C. Feldmann Verlag, Springe (1989) 109.

[Wut 88] M. Wutz, H. Adam, W. Walcher; *Theorie und Praxis der Vakuumtechnik*, 4. verbesserte Auflage, Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig / Wiesbaden (1988).

Danksagung

Am Ende meiner Arbeit möchte ich all jenen danken, deren Mithilfe und Unterstützung zur Entstehung und zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben, sei es nun auf fachlicher oder auf menschlicher Ebene.
Da dieser Personenkreis in den vergangenen drei Jahren jedoch auf eine recht stattliche Anzahl angewachsen ist, wäre es möglich, daß der eine oder andere aus Versehen in der Auflistung vergessen worden ist. Nichtsdestotrotz denke ich, daß jeder, sei er hier erwähnt oder nicht, sehr genau um seinen Beitrag für mich und dieses Papier weiß und sollte sein Name auf dieser Seite fehlen, so sei ihm versichert, ich habe seine „Hilfe“, in welcher Form sich diese auch immer geäußert haben mag, dennoch nicht gänzlich aus meinem Gedächtnis gestrichen.

Prof. Dr. Klaus Rith danke ich für die Vergabe der Arbeit, sowie für die gewährten Freiräume und für die Betreuung im Verlauf ihrer Erstellung.

Ein herzlicher Dank gilt sämtlichen ehemaligen und aktuellen Mitgliedern der Erlanger Quellen-Gruppe, wobei ich besonders Wolfgang Nagengast (der sich zusätzlich auch noch die Qual des Korrekturlesens aufgebürdet hat), Frank Schmidt und Jürgen Wilbert hervorheben möchte, da sie mich nicht nur in den letzten Monaten in jeglicher Hinsicht unterstützt haben. Nicht zu vergessen sind natürlich Marc Beckmann, Peter Hanich, Wolfgang Kilian, Norbert Koch (wie gering wäre doch der Betrag der Telephonrechnung ohne Dich), Alexander Naß, Bernd Ranzenberger und nicht zuletzt Jörn Stenger.

Bernd Braun und Hauke Kolster danke ich zum einen für die Überlassung verschiedenster Software und zum anderen für die vielen Tips und Hinweise, durch welche mir so mancher Holzweg erspart geblieben ist. Erwähnen möchte ich in diesem Zusammenhang auch Herrn Hornung von der Elektronischen Werkstatt des MPI für Kernphysik in Heidelberg. Ohne dessen zahlreiche Informationen und Schaltpläne wäre die Fertigstellung einiger Komponenten sicherlich nicht so reibungslos von statten gegangen.

Den Mitarbeitern der Gruppe Rith möchte ich für das gute Arbeitsklima danken, allen voran Andreas Gute, der immer ein offenes Ohr und ein Laugencroissant für mich hatte. Aber auch Thomas Benisch, Stefan Bernreuther, Peter Budz, Manfred Ferstl, Frank Neunreither, Christoph Weiskopf, Tom Wölfel und allen anderen. Prof. Dr. Erhard Steffens danke ich für die vielen informativen Gespräche und Hinweise zu meiner Arbeit. Nicht vergessen darf ich natürlich unsere Sekretärin Frau Löhner.

Der mechanischen Werkstatt des Physikalischen Institutes unter der Leitung von Herrn Heimpel und Herrn Muhr danke ich nicht nur für die immer zur vollen Zufriedenheit durchgeführten Arbeiten, sondern auch für deren Beratung und Hilfe bei schwierigen feinmechanischen Problemen.

Herrn Harrer und Herrn Nickl, sowie deren Mitarbeitern danke ich für die schnelle Unterstützung bei allen technischen Problemen und für deren Unterstützung bei Dreh- und Fräsarbeiten.
Außerdem gilt mein Dank noch der elektronischen Werkstatt des Physikalischen Institutes unter der Leitung von Herrn Merkel.

Herrn Prof. Dr. Wolfgang Kretschmer danke ich für die Mitbegutachtung dieser Arbeit.

Akad. Dir. F. Krug und Rainer Engelbrecht vom Institut für Hochfrequenztechnik der Uni Erlangen danke ich für die leihweise Überlassung ihres Signalgenerators und für deren Hilfestellung bei Fragen der Hochfrequenztechnik.

Andi, Olaf, Thomas und Ulli möchte ich sowohl deren Gastfreundschaft danken, durch welche mir der Horror der DESY-Baracken jedesmal erspart geblieben ist, als auch für deren Beitrag zur Gestaltung meiner außerphysikalischen Momente während meiner Aufenthalte in Hamburg.

Gerd, Kai, Karin, Martin und Nadine danke ich einfach für alles, was sie in den letzten Jahren für uns geleistet haben. Eine explizite Erwähnung all dessen würde nicht nur den Rahmen einer Danksagung sprengen.

Auch möchte ich meinen Eltern danken, deren materielle, ideelle und moralische Unterstützung ein Grundstein für meine, nach nunmehr 22 Jahren abgeschlossene Ausbildung war.

Mein größter Dank gilt allerdings meiner Imke und unseren beiden Söhnen Jonathan und Jendrik, die mir während der gesamten Zeit mit Ihrer Liebe und ihrem Verständnis geholfen haben und zum Dank dafür nur mit ausgefallenen Wochenenden und Urlauben und mit meinen miesen Launen belohnt wurden. Was würde ich nur ohne Euch anstellen !?

Lebenslauf

Name:	Carsten Holger Axel Großhauser
Geburtsdatum:	28. Januar 1969
Geburtsort:	Nürnberg
Eltern:	Dr. Franz Großhauser und Brigitte Großhauser, geb. Gerngroß
Staatsangehörigkeit:	deutsch
Familienstand:	verheiratet seit 06.12.1994 mit Imke Großhauser, geb. Hogrefe
	Kinder: Jonathan Großhauser, geb. 17.03.1994 Jendrik Großhauser, geb. 28.06.1996
	Schulischer und beruflicher Werdegang
09/75 – 03/78	Grundschule Erlangen
04/78 – 07/79	Grundschule Schwabach
09/79 – 06/88	Wolfram-von-Eschenbach Gymnasium, Schwabach
06/88	Allgemeine Hochschulreife
07/88 – 09/89	Grundwehrdienst
10/89 – 11/94	Studium der Physik (Diplom) an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
10/91	Vordiplom Physik
05/93 – 07/94	Diplomarbeit in Experimentalphysik, angefertigt am Deutschen Elektronen Synchrotron (DESY), Hamburg
07/93	erster Teil der Diplom-Hauptprüfung Physik (Nebenfach: Biophysik und medizinische Technik)
11/94	zweiter Teil der Diplom-Hauptprüfung Physik
seit 01/95	Wissenschaftlicher Angestellter an der Friedrich–Alexander–Universität Erlangen–Nürnberg