

---

## Anhang A

# Linienintensitäten der Quadrupolaufspaltung

Die Linien einer Quadrupolaufspaltung in einem gemessenen Spektrum sind gleich hoch. Diese Tatsache ist Voraussetzung dafür, die Quadrupolaufspaltungen in den Spektren überhaupt identifizieren zu können; das gilt besonders dann, wenn sich mehrere Defektkomponenten in einem Spektrum überlagern, von denen die Dubletts geringe oder verschwindend kleine Intensität haben (siehe Auswertung der Experimente, besonders an InSb.) Es wird begründet, warum bei der gegebenen Sonde und Kristallstruktur von vornherein ein gleiches Intensitätsverhältnis vorausgesetzt werden kann.

Nach Gleichung (6) spaltet das angeregte Niveau  $I = \frac{3}{2}$  des  $^{119}\text{Sn}$  in zwei Zustände auf, die beide in denselben Grundzustand übergehen (vergleiche Abb.6). Die Übergänge geschehen unter  $\gamma$ -Emissionen, die sich aus  $M1$  und  $E2$ -Strahlung zusammensetzen. Das Wahrscheinlichkeitsverhältnis beider Strahlungsarten ist jedoch

$$\left| \frac{X(E2)}{X(M1)} \right| \simeq 10^{-4}$$

so dass von einer reinen  $M1$ -Strahlung ausgegangen werden kann [FNT<sup>+</sup>62]. Für Linie (1) sind zwei Übergänge möglich:

$m$		$m_0$	$C^2$
$-\frac{3}{2}$	$\rightarrow$	$-\frac{1}{2}$	3
$+\frac{3}{2}$	$\rightarrow$	$+\frac{1}{2}$	3

Für Linie (2) sind vier Übergänge möglich:

$m$		$m_0$	$C^2$
$-\frac{1}{2}$	$\rightarrow$	$-\frac{1}{2}$	2
$+\frac{1}{2}$	$\rightarrow$	$+\frac{1}{2}$	2
$-\frac{1}{2}$	$\rightarrow$	$+\frac{1}{2}$	1
$+\frac{1}{2}$	$\rightarrow$	$-\frac{1}{2}$	1

Die Nachweiswahrscheinlichkeit eines  $\gamma$ -Ereignisses bei einem Übergang vom Zustand  $|\frac{3}{2}, m\rangle$  in den Grundzustand  $|\frac{1}{2}, m_0\rangle$  ist gegeben als Produkt der Übergangswahrscheinlichkeit und der  $M1$ -Ausstrahlcharakteristik

$$I_\gamma \propto \left| \left\langle \frac{1}{2}, m_0 \left| \hat{M}(M1) \right| \frac{3}{2}, m \right\rangle \right|^2 \cdot F_{lm}(\theta)$$

Hierbei ist  $\hat{M}(M1)$  der Multipoloperator des Kernüberganges vom angeregten Zustand in den Grundzustand, mit dem die Systemgrößen Energie, Drehimpuls und Parität erhalten bleiben, und  $F_{lm}(\theta)$  die normierte Winkelverteilung des dabei erzeugten  $\gamma$ -Quants.  $F_{lm}(\theta)$  folgt direkt aus der Lösung der Maxwell-Gleichungen nach Multipolfeldern unter der Annahme großer Entfernung von  $\gamma$ -Detektion zu  $\gamma$ -Quelle ([Jac62]). Die relativen Wahrscheinlichkeiten der einzelnen Übergänge  $P$  können nach Anwendung des Wigner-Eckart-Theorems aus den Clebsch-Gordan Koeffizienten ( $C^2$ ) ermittelt werden, die in den obenstehenden Tabellen auf ganze Zahlen normiert sind. Die relativen, winkelabhängigen Nachweiswahrscheinlichkeiten der beiden Linien (1) und (2) werden damit

$$\begin{aligned} I_{(1)}(\theta) &= (3 + 3) F_{l_1}(\theta) &= 3 + 3 \cos^2 \theta \\ I_{(2)}(\theta) &= (2 + 2) F_{l_0}(\theta) + (1 + 1) F_{l_1}(\theta) &= 5 - 3 \cos^2 \theta \end{aligned}$$

und somit das Intensitätsverhältnis der Quadrupollinien als Funktion von  $\theta$

$$\Rightarrow \frac{I_{(1)}}{I_{(2)}}(\theta) = \frac{1 + \cos^2 \theta}{\frac{2}{3} + \sin^2 \theta} \quad (\text{A.1})$$

$\theta$  bedeutet den Winkel, den die Hauptachse des elektrischen Feldgradienten ( $\vec{V}_{zz}$ ) mit der Richtung des  $\gamma$ -Emission einschließt. In Abbildung A.1 ist (A.1) graphisch dargestellt im Bereich von  $0^\circ$  bis  $180^\circ$ .

Alle CdTe-Proben, die in den Experimenten untersucht werden, sind einkristallin und in  $[1\ 1\ 1]$ -Richtung orientiert. Die Neutrinorückstoßtechnik

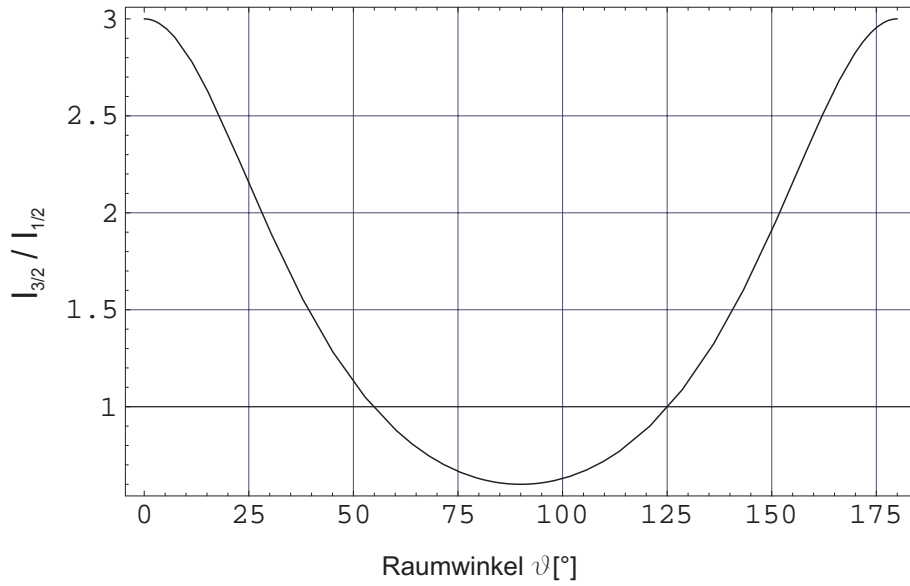


Abbildung A.1: Intensitätsverhältnis der Quadrupollinien vs. kristallfester Winkel der Detektion

erzeugt Situationen mit Feldgradienten durch Ersetzungsstoß eines Nachbaratoms. Betrachtet man die Symmetrie des Zinkblendegitters, sind dadurch genau vier Raumrichtungen unterscheidbar, in die der Feldgradient weisen kann. Da der Detektor normal zur  $[1\ 1\ 1]$ -Richtung steht, bilden die drei übrigen Raumrichtungen mit der Emission des detektierten  $\gamma$ -Quants jeweils einen Winkel von  $\theta = 109.471^\circ$ .

Richtung des EFG	$\theta$ [°]
$[1\ 1\ 1]$	0.0
$[-1\ 1\ 1]$	109.471
$[1\ -1\ 1]$	109.471
$[1\ 1\ -1]$	109.471

Alle vier Raumrichtungen sind bezüglich der Bildung eines Feldgradienten gleich wahrscheinlich, so dass sich die jeweiligen Intensitätsbeiträge einfach addieren. Der Beitrag mit der Winkelorientierung  $\theta = 109.471^\circ$  geht darum dreifach ein, während der Beitrag mit  $\theta = 0^\circ$  einfach eingeht, das heißt

$$\frac{I_{(1)}}{I_{(2)}} (\angle [1\ 1\ 1]) = \frac{(1 + \cos^2(0^\circ)) + 3 \cdot (1 + \cos^2(109.471^\circ))}{(\frac{2}{3} + \sin^2(0^\circ)) + 3 \cdot (\frac{2}{3} + \sin^2(109.471^\circ))} = 1$$

Wie die Funktion in Abbildung A.1 zeigt, wird die dominante Intensität der  $I_{(1)}$ -Linie bei  $0^\circ$  (Verhältnis 3:1) genau kompensiert durch die Beiträge der Emissionen aus  $109.471^\circ$  (Verhältnis 5:7). Im idealen Fall ist also ein Linienintensitätsverhältnis jeder Quadrupolaufspaltung von exakt 1:1 zu erwarten. In der Realität wird aber zum einen die Orientierung des Kristalls von der nominellen  $[1\ 1\ 1]$ -Richtung um einen unbekanntem Fehler abweichen; zum anderen ist der Detektor räumlich ausgedehnt, und zwar deckt er einen Öffnungswinkel von  $34^\circ$  ab (Abstand Probe-Detektor: 5 cm, Durchmesser der Absorberkreisplatte im Detektor 3 cm), das entspricht einem Raumwinkel von  $0.08\pi$ . Die genaue Berechnung der relativen Intensitäten in Abhängigkeit der Winkelsituation belegen jedoch, dass in einer Zinkblendestruktur bei äquivalenter EFG-Bildung in Richtung einer der vier  $sp^3$ -Bindungen das Verhältnis  $\frac{I_{(1)}}{I_{(2)}}$  einer Quadrupolaufspaltung unter *jedem* beliebigen Beobachtungswinkel gleich 1 ist. Damit wird ein möglicher herstellungsbedingter Fehler der Kristallorientierung unbedeutend, wie auch die Raumwinkelauweitung des Detektors.

Als Beispiel kann der Polarwinkel der Detektororientierung von  $[1\ 1\ 1]$  nach  $[0\ 0\ 1]$  verändert werden. Dann betragen die Winkel zwischen Detektion und  $[1\ 1\ 1]$  beziehungsweise  $[1\ 1\ -1]$   $54.731^\circ$ , die zwischen Detektion und  $[-1\ 1\ 1]$  beziehungsweise  $[1\ -1\ 1]$   $125.529^\circ$ :

Richtung des EFG	$\theta[^\circ]$
$[1\ 1\ 1]$	54.731
$[-1\ 1\ 1]$	125.529
$[1\ -1\ 1]$	125.529
$[1\ 1\ -1]$	54.731

Aus (A.1) folgt damit

$$\frac{I_{(1)}}{I_{(2)}} (\angle [0\ 0\ 1]) = \frac{2 \cdot (1 + \cos^2(54.731^\circ)) + 2 \cdot (1 + \cos^2(125.529^\circ))}{2 \cdot (\frac{2}{3} + \sin^2(54.731^\circ)) + 2 \cdot (\frac{2}{3} + \sin^2(125.529^\circ))} = 1$$

Abbildung A.1 veranschaulicht, dass bei diesen beiden  $\theta$ -Werten das Intensitätsverhältnis gerade gleich 1 beträgt, folglich auch das Verhältnis mit allen vier Winkeln bei gleicher Gewichtung.

Bewegt man den Detektor polar in die  $[1\ 1\ 0]$ -Position, sind die Winkelverhältnisse

Richtung des EFG	$\theta[^\circ]$
[ 1 1 1]	35.2644
[-1 1 1]	90.0
[ 1 -1 1]	90.0
[ 1 1 -1]	215.2644

die eingesetzt in (A.1) wieder ein Intensitätsverhältnis von 1 liefern. Wegen der Symmetrie der Kristallstruktur gilt die Betrachtung auch für die azimuthale Veränderung der Detektorposition, genauso wie für alle aus Polar- und Azimuthwinkel gebildeten Winkelpositionen um [1 1 1].

Eine  $T_d$ -Symmetrie der EFG-Verteilung einkristalliner Proben äußert sich also in einem Mößbauerspektrum bei Verwendung einer Sonde mit  $I = \frac{3}{2}$  unter jedem Beobachtungswinkel als Quadrupolaufspaltung mit gleicher Linienintensität.

