

---

# Experimentdurchführung

Die beiden untersuchten Materialien InSb und CdTe wurden mit demselben Ziel und derselben Methode untersucht. Dennoch verlangen die Unterschiede der Bindungseigenschaften unterschiedliche Arten der Versuchsdurchführung. Die Defektchemie von CdTe bestimmt in größerem Maß das Implantationsverhalten der Ionen und der Defekte als die von InSb; das gleiche gilt für die Implantationsausheilung. Der Grund liegt auch hier hauptsächlich in der größeren Ionizität von CdTe, die die Bildung von Leerstellen begünstigt und die Löslichkeit von Fremdatomen stark verringert. Darum wurde die Stöchiometrie von CdTe durch eine Vor- und Nachimplantationsausheilung unter Te-Dampf kontrolliert und der eingestellte Leitungstyp überprüft. Das InSb dagegen wurde nur nach der Implantation unter Edelgasfluss ausgeheilt.

Die Sonden verhalten sich bei der Implantation ähnlich. Sie dringen in InSb und CdTe über denselben Reaktionskanal durch Rückstoßimplantation gleich weit in den Festkörper ein. Die Massenähnlichkeit der beteiligten Materialelemente erlaubt es, die Parameter des Implantationsaufbaus von InSb auf CdTe unverändert zu übertragen. Die Anordnung des Experimentes und die Konstruktion des Kryostaten verhindern eine zu große Absorption der 24keV  $\gamma$ -Strahlintensität des Mößbauerüberganges (14%). Nichtresonante  $\gamma$ -Strahlung blendet der Detektor wegen seiner geringen Ansprechwahrscheinlichkeit für abweichende Energien weitgehend aus.

Wie das nächste Kapitel zeigen wird, verlangen die unterschiedlichen Ergebnisse jeweils eine etwas andere Vorgehensweise bei der Auswertung der Spektren, die in der Bestanpassung der Spektren mittels der Minimierungsprozedur MINUIT besteht.

## Probenpräparation

Die InSb-Proben stammen von der Firma MCP Wafer Technology Ltd.. Sie sind undotiert, n-leitend und haben nominell eine Ladungsträgerkonzentration von  $(1.0 - 2.1)10^{14} \text{ cm}^{-3}$ . Die Angabe der Ladungsträgerkonzentration weist wieder auf den defekt-chemischen Unterschied zum CdTe; InSb enthält auch im thermodynamischen Gleichgewicht Antistrukturatome und eine relativ große Menge an Fremdatomen, so dass seine Ladungsträgerkonzentration nur mit einer großen Fehlertoleranz anzugeben ist. Die CdTe-Proben stammen von der Firma CRYSTEC und sind mit der vertikalen Bridgeman-Methode gezüchtet; um sie p-leitend einzustellen, wurden sie vor der Implantation unter Te-Dampf ausgeheilt -nach dem im Kapitel *Punktdefekte in InSb und CdTe* erläuterten Prinzip- und nach der Implantation unter denselben Bedingungen nochmals ausgeheilt; um sie als p-leitend zu identifizieren, genügte eine Feststellung der Seebeck-Spannungspolarität (s.Anhang C).

Alle Proben beider Materialsorten sind einseitig poliert und jeweils in [1 1 1]-Richtung orientiert. InSb wurde nur an der Oberfläche gereinigt und so der Implantation ausgesetzt. CdTe dagegen musste vor der Implantation stöchiometrisch eingestellt werden, um konstante Ausgangssituationen zu gewährleisten. Grund dafür ist wieder die höhere Ionizität der II-VI Halbleiter gegenüber den III-V Halbleitern: ein Abweichen von der Stöchiometrielinie führt zu einer starken Zunahme von Leerstellen, die bestimmen aber gerade das Platzangebot und regeln das Einbauverhalten implantierter Atome [QS88].

Zunächst wurden die CdTe-Proben in einer Brom(0.5%)-Methanol(99.5%) Mischung für 1min geätzt, nachdem sie vorher in zwei Methanol- und einem Aceton-Bad gereinigt worden waren, um eventuelle Spuren von einer Poliermasse zu entfernen, mit der die Firma CRYSTEC die eine Oberfläche der Kristalle poliert hatte. Die Methanol-Spülung wurde am Ende wiederholt. Zusammen mit tellurreichem CdTe-Quellmaterial wurde die CdTe-Probe in einer Quarzampulle bis zu einem Druck von ca.  $10^{-4}$ mbar evakuiert. In diesem Zustand wurde die Ampulle durch Hochtemperaturabschmelzen versiegelt; in einem auf  $700^\circ\text{C}$  vorgeheizten Kammerofen heilte daraufhin die Probe in der entstehenden Te-reichen Dampfdruckatmosphäre für 48 Stunden aus, wobei sie mit dem Quellmaterial nicht in Berührung kam. Stöchiometrisch hält in diesem Moment der Te-Dampf den Zustand des Materials auf der Te-reichen Seite, indem es die Belegung der Cd-Leerstellen verhindert, wie in *Thermodynamik von Punktdefekten* erläutert (s.Abb.3). Sofort nach Ausheilung wurde die Ampulle in einem Wasserbad auf Raumtemperatur abgekühlt; dieses Quenching im thermodynamischen Nichtgleichgewicht konserviert die

Stöchiometrie des Kristalls, bildet also im Zustandsdiagramm Abb.3 den Wert von 700°C auf RT ab. Während des Ausheilens rauht der Materialaustausch zwischen Atmosphäre und Grenzfläche des Kristalls die Oberfläche etwas auf, weshalb die Probe anschließend wieder durch CRYSTEC poliert und auf die oben beschriebene Art erneut geätzt wurde [Rei98]. Nachdem durch die Prüfung der Seebeck-Spannungspolarität die p-Leitung des CdTe festgestellt war, wurde die Probe schließlich in den Strahlengang für die Implantation montiert.

Der definierte Ladungszustand und die chemische Zusammensetzung des Materials wurden dadurch erhalten, dass die Ausheilung der Strahlungsschäden nach der Implantation unter denselben defekt-chemischen Bedingungen wiederholt wurde. Die Dauer beschränkte sich dabei auf 20min, um noch ausreichende Aktivität der Probe für die Messung zu garantieren. Die Temperatur betrug 685°C, 600°C und 450°C. Von ihr hängt wesentlich die Bildung neuer Defekte während der 'Ausheilung' ab, s. Kapitel *Messungen an CdTe*. Der Leitungstyp wurde nach Abklingen der gesamten Radioaktivität nochmals überprüft. Alle Temperschritte oberhalb der Raumtemperatur wurden wie die Implantationsausheilung durchgeführt.

Das InSb wurde unvorbehandelt bestrahlt, die Strahlenschädenausheilung geschah in einem Quarzrohr unter Ar-Gasfluss bei einer Temperatur von 420°C in einem Rohrofen. Eine optische Überprüfung mit dem Mikroskop stellte sicher, dass die Oberfläche glatt geblieben ist, also kein Material mit der Umgebung ausgetauscht hat [Wen95].

## Probenimplantation

Die Implantation erfüllt zwei Aufgaben gleichzeitig. Sie plaziert die radioaktiven Sonden in den Halbleiter und bevölkert den Te-Zustand als Vorläuferisotop. Die Implantationsmethode ist so gewählt worden, dass sowohl die Reichweite und Homogenität der Sondenverteilung in der Probe als auch der Wirkungsquerschnitt für die Erzeugung von Te möglichst maximiert wurden. Die günstigsten Parameter für die Implantation durch Protonenbestrahlung und Schwerionenreaktion sind bereits für die Versuche an InSb ermittelt worden [Wen95]. Eine Te-Bevölkerung durch Protonenbestrahlung ist im CdTe nicht möglich, da es keine Reaktion eines Protons mit einem der in CdTe hauptsächlich enthaltenen Isotope gibt, die  $^{119}\text{Te}$  erzeugt. Die Parameter der Schwerionenreaktion lassen sich dagegen direkt auf CdTe übertragen. Hier entstehen in einem ersten Schritt die radioaktiven  $^{119}\text{Te}$ -Vorläufersonden durch eine Compoundkernreaktion; in einem zweiten Schritt dringen sie über

den erhaltenen Rückstoß in das Halbleitermaterial ein. Der Einsatz von CdTe ändert lediglich die Eindringtiefe der Te-Atome.

Alle Bestrahlungen wurden am ISL<sup>7</sup> des HMI<sup>8</sup> ausgeführt. Abb.12 zeigt schematisch den Aufbau zur Schwerionenreaktion mit darauffolgender Rückstoßimplantation.

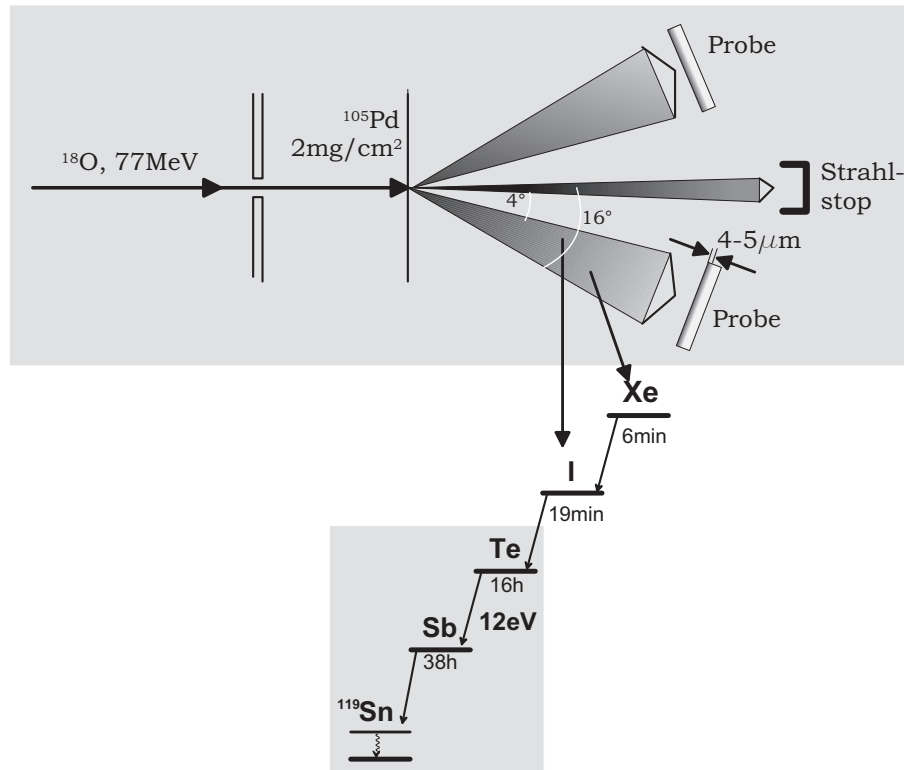


Abbildung 12: Schema des Aufbaus zur Schwerionenreaktion und Rückstoßimplantation von <sup>119</sup>Te in Draufsicht.

die günstigste Reaktion aus und stimmte die kinetische Ionenenergie mit den relativen Wirkungsquerschnitten aller beteiligten Reaktionskanäle, der Targetdicke und der Probenanordnung miteinander ab.

Die Forderung nach einem möglichst hohen Wirkungsquerschnitt bei gleichzeitig großer Eindringtiefe der Sonden in der Probe ergab als geeignetste

<sup>7</sup>Ionenstrahllabor

<sup>8</sup>Hahn-Meitner-Institut Berlin

Reaktionen



Eine zu 92% angereicherte Pd-Folie bildet hier das Target für die auftreffenden  $^{18}\text{O}$  Projektile (s.Abb.12).

Die beteiligten Reaktionskanäle konnten gammaspektroskopisch identifiziert werden, und ein Simulationsprogramm (CASCADE) erlaubt die Berechnung der Wirkungsquerschnitte der Reaktionskanäle, mit denen sich wiederum für die gewählte Reaktion Targetdicke und Projektilenergie aufeinander abstimmen lassen: vor der Reaktion darf der Energieverlust der Projektile im Target nur so groß sein, dass die Endenergie noch hinreichenden relativen Wirkungsquerschnitt hat, und nach der Reaktion darf der Energieverlust der Reaktionsprodukte im Target nur so klein sein, dass ihre Energie beim Austritt noch zur Implantation in den Proben ausreicht. Gleichzeitig soll das Target möglichst dick sein, um den Projektilstrom und die Sondenausbeute maximieren zu können. Die Abstimmung der Anforderungen ergab eine  $^{18}\text{O}$  Ionenenergie von 77MeV und eine  $^{105}\text{Pd}$ -Targetdicke von  $2\mu\text{m}$ , das entspricht  $2\frac{\text{mg}}{\text{cm}^2}$ , ein Wert, der herstellungsbedingt nicht unterschritten werden konnte. Die Zielprodukte  $^{119}\text{Xe}$  und  $^{119}\text{I}$  zerfallen mit Halbwertszeiten von 6min beziehungsweise 19.3min über  $\beta^+$  und  $EC$  zum  $^{119}\text{Te}$ -Zustand, auf dem sie für  $t_{\frac{1}{2}} = 16.05\text{h}$  verbleiben, die Sonden sind also nach einer Wartezeit von etwa 1h praktisch alle entweder Te oder Sb.

Schließlich sollten noch die Proben in einem Winkel zum Primärstrahl so angeordnet sein, dass sie weder vom Primärstrahl selbst noch von den Protonen und Neutronen getroffen werden, die bei der Sondenreaktion unvermeidlich mitentstehen und durch parasitäre Reaktionen die Sondenproduktion verunreinigen. Hierfür liefert das Programm TRIM die Intensitätsverteilungen in Abhängigkeit vom Winkel für die Zielprodukte  $^{119}\text{Xe}$  und  $^{119}\text{I}$ , die parasitären Nukleonen sowie den Primärstrahl  $^{18}\text{O}$ . Demnach liegt die intensivste Ausbeute der Zielprodukte in Vorwärtsstrahlrichtung und nimmt mit größerem Polarwinkel ab; noch stärker nehmen jedoch, wegen der geringeren Kernladungszahlen, der Primärstrahl und die rückgestreuten Pd-Kerne in Richtung größerer Winkel ab, so dass als Kompromiss zwischen gewünschter und unerwünschter Reaktionsausbeute die Probenhalter bei einem minimalen Winkel von  $4^\circ$  begannen und bis zum maximalen Winkel von  $16^\circ$  reichten, symmetrisch zur Strahlachse, s.Abb.12.

CdTe unterscheidet sich von InSb in Bezug auf die Implantation in den Massen und Kernladungen der Kristallatome. Sie beeinflussen geringfügig die

Reichweite der implantierten Sonden sowie der erzeugten Defekte. Es wird vorausgesetzt, dass der Ausheilschritt nach Implantation sämtliche Defekte in beiden Materialsorten beseitigt und die Sondenvorläufer auf einen Gitterplatz bewegt. Darum können die Implantationsschäden, zumindest die nächste Sondenumgebung betreffend, außer Acht bleiben. Eine Simulation der Reichweite der implantierten Sonden mit dem Programm TRIM ergab für CdTe nur eine kleine Differenz zu InSb, wenn man dieselbe Implantationsmethode annimmt: das Maximum der Sondenkonzentration in CdTe liegt bei etwa  $3\mu\text{m}$ , in InSb bei etwa  $4\mu\text{m}$  Eindringtiefe. Der Simulation liegt die sogenannte LSS-Theorie [LSS63] zu Grunde, nach der die implantierten Ionen annähernd gaußverteilt um die projektierte Reichweite liegen. Darum wurden in den CdTe-Experimenten dieselben Parameter der Implantation wie bei InSb verwendet.

## Experimentaufbau

Da die radioaktiven Vorläuferisotope der Sonde in das zu untersuchende Material implantiert werden, handelt es sich bei den Versuchen um sogenannte Emissions- bzw. Quellexperimente. Die Gitterposition der Sonde wird hier im Wesentlichen durch die chemischen Eigenschaften ihres Mutterisotops Te bestimmt, ihre Hyperfeinwechselwirkung mit der Umgebung jedoch von der Sn-Sonde selbst [Lan92]. Bei der Neutrinorückstoßmethode verändert noch der Zerfall von Mutterisotop zu Sonde mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit  $P$  die Position der Sonde und erzeugt so eine isolierte Punktdefektsituation. Abb.13 beschreibt schematisch die Versuchsanordnung. Die Vorläuferisotope Te und Sb legen durch Ausheileinwirkung oder Rückstoßprozess die Sondenposition fest, der interne Übergang der Sn-Sonde  $I_e(3/2^+) \rightarrow I_g(1/2^+)$  trägt die über die Hyperfeinwechselwirkung erhaltene Energieinformation über das emittierte  $\gamma$ -Quant nach außen. Die  $\gamma$ -Quanten werden vom Detektor in elektronische Impulse umgewandelt. Der Detektor enthält den Absorber und einen Gaszähler; er ist von G. Weyer entwickelt worden (zur Beschreibung [Wey81]).

Die Halbleiterprobe befindet sich auf tiefer Temperatur, 4.2K oder 77K, um ein großes Signal/Untergrund Verhältnis, das heißt einen großen Debye-Waller-Faktor (ca. 0.7) zu erhalten. Die Probe schwimmt in einem LHe-Bad innerhalb eines Kryostaten, siehe Abb.14. Der Detektor befindet sich stets auf Raumtemperatur.

Ferner soll die tiefe Temperatur möglichst viele nach der Implantationsausheilung durch Rückstoß entstandenen Defekte einfrieren.

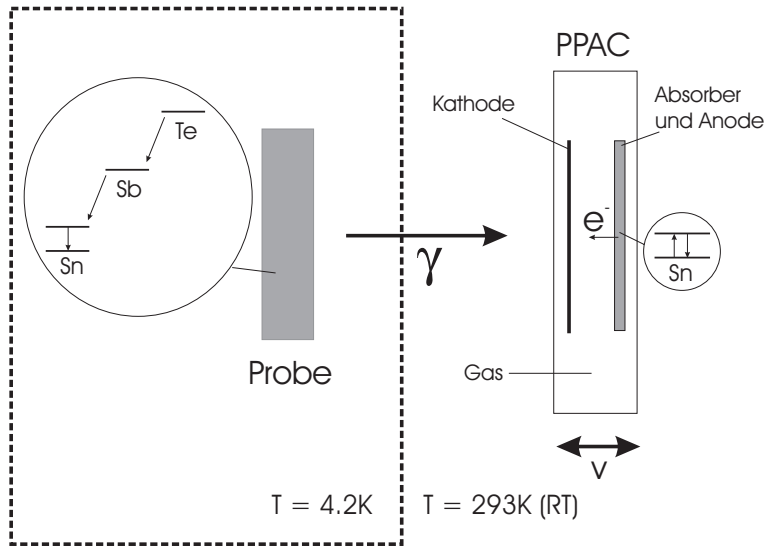


Abbildung 13: Schema der Versuchsanordnung als Quellexperiment in Rückstreuengeometrie

Außerdem absorbiert das LHe einen Großteil der Elektronen und Positronen, die von unerwünschten Nebenprodukten der Implantation stammen.

Folgende Materialien schwächen die Strahlung auf dem Weg aus dem Kristall in den Detektor (vgl. Abb.14). Die Probe ist zur besseren Justierung im Probenhalter in 0.1mm dicke Al-Folie einfach eingewickelt. Der Probenraum ist in der optischen Achse mit drei Mylar-Fenstern (je  $d = 0.1\text{mm}$ ) abgeschlossen; der Abstand zwischen Probe und Fenster beträgt 2cm, den im Normalbetrieb flüssiges Helium ausfüllt. Schließlich ist der Detektor noch mit Al-Folie an der Vorderseite einfach bedeckt.

Die Abschwächung der Strahlung beschreibt das Verhältnis von der die Materialdicke  $x$  durchtretende Intensität  $I$  zu der Anfangsintensität  $I_0$

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\mu x}$$

Der Schwächungskoeffizient  $\mu$  hängt vor allem von der Materialdichte ab, so dass im Experiment die Strahlintensität durch die Al-Folien um 7%, das LHe um 5% und die Mylar-Fenster um 2% abgeschwächt wird. Das bedeutet, dass der im Detektor eintreffende 24keV-Strahl insgesamt nur um 14% gegenüber dem ursprünglichen in der Intensität geschwächt ist. Würde der Probenraum mit  $\text{LN}_2$  gefüllt sein, betrüge die Abschwächung insgesamt 32%. Darum wurden die CdTe-Messungen bei 77K im erwärmten He-Gas und nicht in  $\text{LN}_2$  durchgeführt.

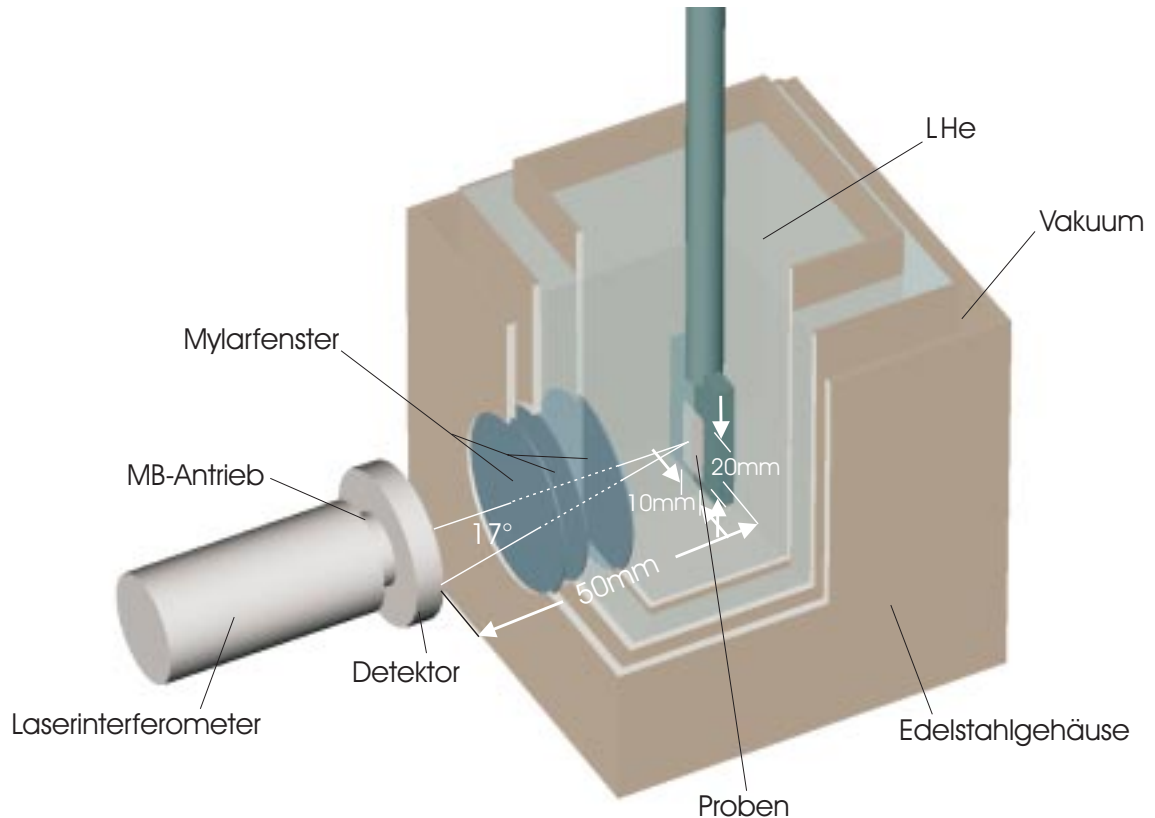


Abbildung 14: Isometrische Ansicht der Experimentgeometrie im Bereich der Strahlung

Zu der Abschwächung trägt noch die Eigenabsorption des Materials selbst bei. Sie ist je nach Material und Eindringtiefe der Sonden unterschiedlich. In CdTe erreichen die Te-Atome über die Rückstoßimplantation eine Tiefe von etwa  $4\mu\text{m}$ , ihr Intensitätsverlust ist darum viel geringer (ca. 2%) als der in InSb, wo die durch Protonenbeschuss erzeugten Sonden die gesamte Probendicke belegen (75%). Die Ausgangsintensität liegt aber in InSb um eine Größenordnung höher und sorgt so für die bessere Spektrenstatistik.

Das  $\gamma$ -Quant tritt in den PPAC<sup>9</sup>-Detektor ein und trifft dort auf den integrierten Absorber (s. Abb.13). Er enthält das Sn-Atom im Grundzustand in der Verbindung  $\text{CaSnO}_3$ ; das  $\gamma$ -Quant versetzt das Sn in den angeregten Mößbauerzustand. Anschließend geht das Atom wieder in den Grundzustand über und entsendet seinerseits ein Photon. Da  $^{119}\text{Sn}$  aber zum Teil konver-

<sup>9</sup>Parallel Plate Avalanche Chamber



tiert ist, emittiert es auch Elektronen mit einer Wahrscheinlichkeit, die vom Konversionskoeffizienten  $\alpha = 5.12$  bestimmt ist.

$$\alpha = \frac{N - N_\gamma}{N_\gamma}$$

Daraus folgt, dass von der Gesamtzahl  $N$  von Emissionen und Absorptionen 16.3% aus  $\gamma$ -Übergängen bestehen, 83.7% dagegen aus Elektronenübergängen  $N - N_\gamma$ .

Der Absorber ist an der Oberfläche mit Graphit beschichtet und liegt an negativer Spannung gegenüber einer ebenfalls mit Graphit beschichteten Platte in ca.2 mm Entfernung (vgl. Abb.13). Die Spannung zwischen diesen beiden Elektroden beträgt im Betrieb 500V - 700V; der Zwischenraum ist mit 30mbar Isobutan als Zählgas gefüllt. Der Detektor vereinigt also Absorber und PPAC: das vom Kernübergang erzeugte Konversionselektron löst eine Ladungslawine im Hochspannungsfeld aus, die an der Anode einen Spannungspuls ablegt, der elektronisch weiterverarbeitet wird.

In den Experimenten ist die Breite der Linien größer als die natürliche Linienbreite von  $^{119}\text{Sn}$ . Eine Abschätzung zeigt, dass dafür weniger die effektive Absorberdicke von  $\text{CaSnO}_3$  verantwortlich ist als eine kleine Quadrupolaufspaltung, die auf die Körnigkeit des gepressten Absorbermaterials zurückgeht [Wen95]. Aus Kalibrationsmessungen mit einer  $\text{CaSnO}_3$ -Quelle mit bekannter Linienbreite folgt für den benutzten Detektor unter Lorentzkurvenanpassung eine minimale Linienbreite von  $\frac{\Gamma}{2} = 0.41(1) \frac{\text{mm}}{\text{s}}$ .

Ein Vorexperiment diente der Abschätzung des Cosinuseffektes, der vom Abstand zwischen Quelle und Absorber abhängt. Abb.15 zeigt die Abhängigkeit, wie sie in Vorexperimenten mit einer  $\text{CaSnO}_3$ -Standardquelle gefunden worden ist. Bei einem Abstand von 5 cm wird bereits das Minimum der Halbwertsbreite  $\frac{\Gamma}{2}$  erreicht. In allen Experimenten befand sich darum der Detektor in 5 cm Entfernung von der Probenmitte auf der optischen Achse. Allein für die Spektren, die bei 77K aufgenommen wurden, befand sich der Detektor etwas näher ( $d = 3.8\text{cm}$ ) an der Probe, um das verschlechterte Signal/Untergrund Verhältnis durch eine höhere Zählrate auszugleichen. Nach Abb.15 erhöht sich damit die Linienbreite zwar auf  $0.49 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$ , ermöglicht aber in den betreffenden Spektren immer noch eine Identifizierung der Linien, da ihre Maxima mehr als  $1 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$  voneinander entfernt liegen (s.Abb.37).

Der Ladungsimpuls im Detektor signalisiert eine Resonanzabsorption, die mit dem Geschwindigkeitswert verknüpft werden muss, mit der sich der De-

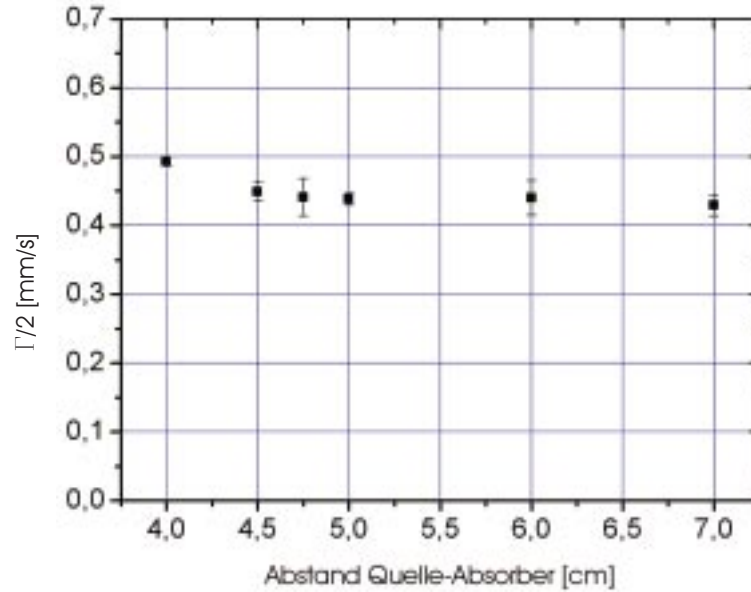


Abbildung 15: Halbe Halbwertsbreite einer Standard einzellinie, aufgenommen mit einer  $\text{CaSnO}_3$ -Quelle und dem im Experiment eingesetzten Detektor [Wey81], der einen  $\text{CaSnO}_3$ -Absorber enthält.

tektor in dem Moment bewegt. Beide Signale fasst der MCA<sup>10</sup> zusammen. Abb.16 stellt den Weg der Signale an Hand eines Blockschaltbildes der beteiligten Elemente und der Signalformen dar. Ein Hauptverstärker verarbeitet das vorverstärkte Ereignissignal des Detektors zu einem bipolaren Signal, das durch einen SCA<sup>11</sup> zu einem logischen NIM-Puls für die Aufnahme in den MCA aufbereitet wird. Die so gewonnenen 'counts' bilden die y-Werte des Spektrums. Auf der anderen Seite treibt ein Funktionsgenerator den Mößbauermotor mit konstanter Beschleunigung an, das heißt gibt ein sägezahnförmiges Geschwindigkeitsprofil vor; gleichzeitig wählt er proportional der aktuellen Geschwindigkeit einen Kanal des MCA an, das heißt schaltet ständig nach einem bestimmten Geschwindigkeitszuwachs einen Kanal voran. Die 512 Kanäle des MCA bilden somit die x-Werte des Spektrums. Das Geschwindigkeitsverhalten des Mößbauermotors wird noch durch ein Laserinterferometer (Wissel MVC-450) laufend überprüft. Ein PC steuert über die serielle Schnittstelle den MCA und liest ihn periodisch aus.

<sup>10</sup>Multi Channel Analyzer

<sup>11</sup>Single Channel Analyzer

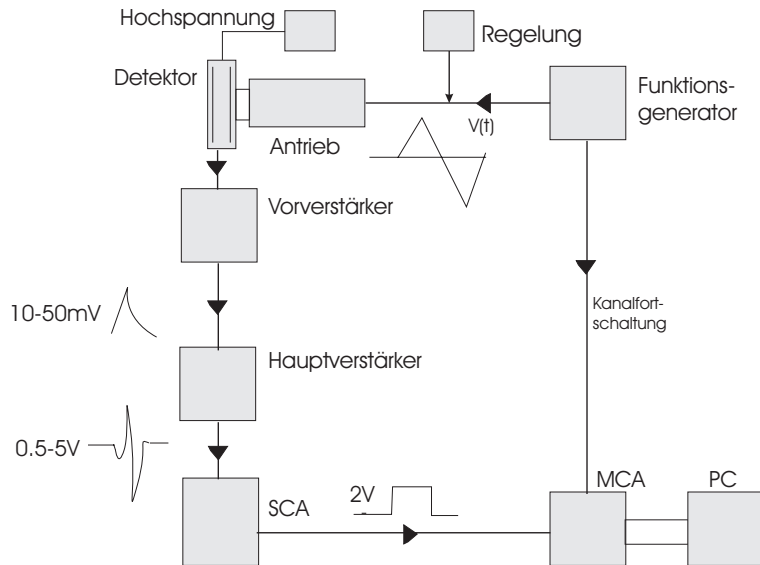


Abbildung 16: Blockschaltbild der Datenaufnahme in dem Mößbauerspektroskopie-Aufbau. Neben die Bauelemente sind die Formen des Signals aus dem Detektor bzw. der Funktion des Generators angegeben. Der Regler für den Antrieb ist ein Laserinterferometer.

## Auswertemethode

Ein Steuerprogramm<sup>12</sup> speichert die Daten und stellt sie in Spektren dar. Es nutzt zur Geschwindigkeitskalibration die Maximalgeschwindigkeit des Antriebs, wie sie das Laserinterferometer ermittelt.

Die Auswertung der Daten besteht in der möglichst guten Anpassung der Spektren. Kriterium dafür ist der Minimalwert des Funktionals

$$\chi^2(\underline{c}) = \sum_i \frac{(f(v_i; \underline{c}) - y_i)^2}{\sigma^2(y_i)} \longrightarrow \min \quad \underline{c} : \text{Fitparametervektor}$$

mit  $f$  der Modellfunktion, die sich aus Lorentzkurven zusammensetzt. Die Summe erstreckt sich über die 512 Kanäle eines ungefalteten Spektrums, von denen jeder einem Geschwindigkeitswert  $v_i$  entspricht und einen Messwert  $y_i$  enthält, die Anzahl der Impulse pro Kanal. Da ein solcher nichtlinearer direkter Fit automatisch keine eindeutige Lösung liefert, müssen physikalische Argumente hinzugenommen werden sowie mehrere Minimierungsverfahren kombiniert werden [Grz98].

Das am CERN entwickelte Programm MINUIT zur  $\chi^2$ -Minimierung verwen-

<sup>12</sup>RAPID von L. Stadler in FORTRAN 90, Berlin 1999

det zwei Prozeduren. Das Gauß-Newton-Verfahren sucht ausgehend vom Startvektor  $\underline{c}_0$  im Parameterraum die Richtung, entlang der sich der Wert des Funktionals verringert. Es findet die Richtung über die lokale Approximation mittels Taylorentwicklung bis zum 2. Grad, also durch Bildung der Jacobi- und Hessematrix. Am Minimum wiederholt es die Suche und nähert sich so iterativ einem stationären Punkt, der lokal das Funktional minimiert. Durch dieses Abstiegsverfahren wird zwar ein lokales Minimum gefunden, aber nicht unbedingt das absolute. MINUIT setzt darum vor dem Gauß-Newton-Verfahren die Monte-Carlo-Methode ein: in einem Teilbereich des Parameterraumes sucht es statistisch-gleichverteilte Vektoren  $\underline{c}$  auf, und berechnet nacheinander  $\chi^2(\underline{c})$ . Am Minimum setzt es  $\underline{c}_0$  an und startet das Gauß-Newton-Verfahren. Am neuen Minimum bilden die Werte der Kovarianzmatrix die Fehler für die Ergebnisparameter  $\underline{c}$ . In den Experimenten überschreiten jedoch systematische Fehler der Messanordnung diese rein statistischen Fehlergrenzen bei weitem; sie kommen vor allem von der Probenbeschaffenheit und vom Mößbauerantrieb, der von der idealen Geschwindigkeitsfunktion abweicht.

Auch bei diesem kombinierten Verfahren hängt das Ergebnis noch sehr von der Wahl des Teilbereiches für den Startwert ab; gerade bei den vorliegenden Daten an InSb entscheiden physikalische Argumente zwischen unterschiedlichen Auswertungen, die fast gleiche  $\chi^2$ -Werte liefern. Im Fall des CdTe legen auch externe Argumente, die sich auf das Zeit- und Temperverhalten beziehen, die Startwerte fest.

MINUIT sucht den Kanal, an dem das Spektrum gefaltet wird, durch Differenzvergleich. Der Kanal, um den die Daten am symmetrischsten liegen, bestimmt das Programm, indem es vom mittleren Kanal 256 ausgehend den  $y_i$ -Wert des Kanals in fortschreitender positiver Richtung von dem Wert in entsprechender negativer Richtung subtrahiert; durch Vergleich aller Gesamtdifferenzen wird so iterativ der günstigste Faltungspunkt bestimmt.

Die Spektren aus den Experimenten an InSb sind sukzessiv gefittet worden: Wann immer in einem Experiment ein Spektrum ausschließlich eine Linie enthielt, wurden deren Parameter - Lage, Breite, Aufspaltung - ermittelt und in die übrigen Spektren desselben Experimentes übernommen. Nur so war es möglich, alle Linienkomponenten aufzulösen (s. *Messungen an InSb*); Die Linienkomponenten der Spektren an CdTe liegen so weit auseinander, dass ihre Parameter (Lage, Breite, Aufspaltung) aus jedem Spektrum direkt bestimmt werden konnten (s. *Messungen an CdTe*).