
Messungen an CdTe

Die Messungen an CdTe sind, bis auf die Ausheilmethode, genauso wie am InSb durchgeführt worden. Die Auswertung stützte sich sowohl auf die Hyperfeinparameter, Isomerieverschiebung und Quadrupolaufspaltung, als auch auf die Linienintensität: ihr Verhalten nach Temperungen und ihre Veränderung in Abhängigkeit des Zeitverlaufes eines Experimentes.

Die Ergebnisse unterscheiden sich deutlich von denen an InSb. Es können nur zwei Linienkomponenten identifiziert werden, von denen nur eine vom Neutrinorückstoß erzeugt ist. Ihre Isomerieverschiebungen deuten auf substitutionelle Plätze der Sonde hin, ihre Quadrupolaufspaltungen auf extrem große Verzerrungen der nächsten Umgebungen. Der substitutionelle Platz in vollständiger Kristallumgebung ist spontan verzerrt. Eine Messung bei höherer Temperatur zeigt, dass diese Verzerrung mit relativ geringer Aktivierungsenergie aufzuheben ist und darum auf einen Jahn-Teller-Effekt zurückgeführt werden kann. Die neutrinorückstoßinduzierte Defektlinie wird als Ersetzungsstoß eines Nachbaratoms gedeutet; die entstandene Leerstelle und vermutlich eine zusätzliche Verzerrung verursachen den großen Feldgradienten, der bislang mit dieser Sonde nur in Polymeren gemessen worden ist. Eine interstitielle Sondenposition kann nicht festgestellt werden.

Eine zusätzliche Einzellinie tritt nur bei Ausheiltemperaturen von $T > 600^\circ\text{C}$ auf. Ihre Isomerieverschiebung von $IS \sim 0 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$ und das Verhalten ihrer Linienintensität als Funktion der Sondenanteile lassen darauf schließen, dass bei diesen Temperaturen die Sb-Sonde intrinsischen Sauerstoff einfängt und SbO_2 Komplexe formt, die in den Spektren als tetravalentes Sn sichtbar werden.

Ergebnisse

Mittels GDMS¹³ wurde vor den Versuchen die Reinheit und stöchiometrische Zusammensetzung der CdTe-Proben spektroskopiert. Die häufigsten Verunreinigungsanteile der Probe CdTe-0299 waren

Element	Anteil [ppm atom-%]
Na	11.5
S	33.7
Zn	$1.3 \cdot 10^6$
O	68.0
C	100.0
N	170.0

Die häufigsten Verunreinigungen der übrigen Proben, CdTe-1199, CdTe-0400a, CdTe-0400b, CdTe-0900, CdTe-1100, waren

Element	Anteil [ppm atom-%]
Na	0.02
S	11.0
Zn	550.0
O	130.0
C	550.0
N	26.0

Alle CdTe-Proben sind durch Schwerionenreaktion aktiviert worden.

Die Bestrahlungsdauer t_b , der relative Wirkungsquerschnitt $\frac{\sigma_g}{\sigma_m} \in \{28, 1\}$ und die nachfolgenden Zeitpunkte von Ausheilung t_a und Temperungen t_t, t_{t2} legen eindeutig die Aktivitäten der Sonden zu jedem Zeitpunkt fest. Damit sind die Sondenanteile in jedem beliebigen Messintervall $[start, stop]$ ebenfalls gegeben.

Das Verhalten der Aktivitäten über die Gesamtmesszeit stellt Abb.27 für die Probe CdTe-1100 dar. Man erkennt leicht die auf Grund Wirkungsquerschnitt und Halbwertszeit etwa 4mal so große Aktivität von Te gegenüber Sb zu dem Zeitpunkt, wenn der Strahl abgeschaltet wird. Wichtig für die Interpretation der Spektren sind nur die Sb-Aktivitäten. Sie geben, integriert über die Zeit, gerade die Anzahl der detektierbaren Sn-Übergänge an. Abb.28 verringert darum den Bildausschnitt auf Sb-Aktivitäten. Der Zeitnullpunkt be-

¹³Glow Discharge Mass Spectroscopy

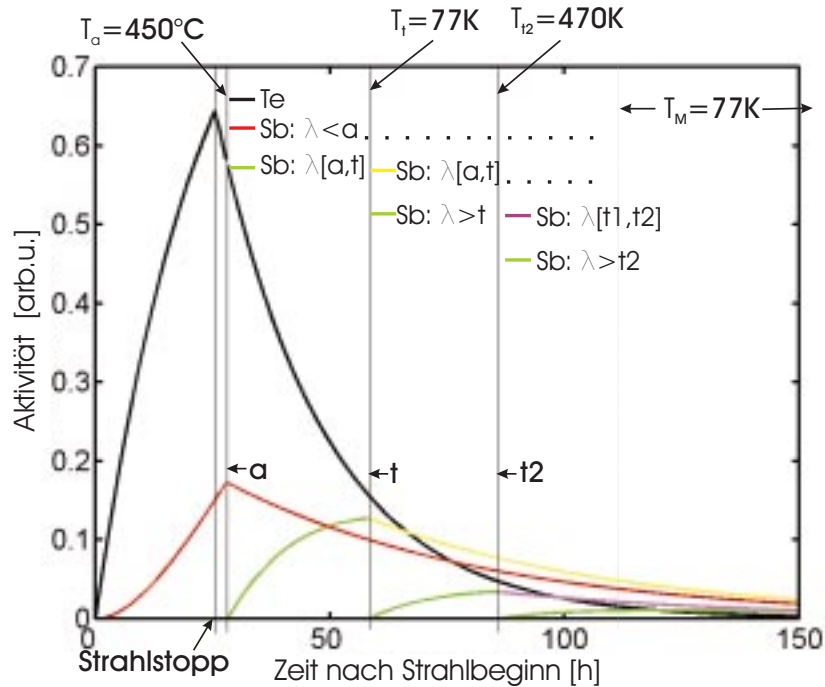


Abbildung 27: CdTe-1100 Aktivitäten

a: Ausheilzeitpunkt, T_a : Temperatur der Ausheilung, t_1 : Zeitpunkt des ersten Temperns, T_1 : Temperatur des ersten Temperns, t_2 : Zeitpunkt des zweiten Temperns, T_2 : Temperatur des zweiten Temperns, T_M : erhöhte Messtemperatur, die von 4.2 K abweicht; die Pfeile zeigen den Zeitabschnitt von T_M an (siehe *Interpretation*). Die Bestrahlung dauerte 25:30h.

zieht sich auf den Beginn der Bestrahlung. Nach Bestrahlungsende ('Strahlstopp') beanspruchte die Weiterverarbeitung der Probe 2:40h. Diese Zeit beinhaltet das Abklingen der schnell zerfallenden Reaktionsprodukte und das Ausheilen der Probe unter Te-Dampf. Der Moment, an dem die Probe anschließend im 4.2K-He-Bad eingetaucht wurde, wird für die Rechnung mit dem Zeitpunkt gleichgesetzt, an dem die Probe ausgeheilt wurde ('a'). Der Fehler von ca. 10min, der sich daraus ergibt, muss in Kauf genommen werden, da von vornherein nicht klar ist, wie die Raumtemperatur, die zwischen Ausheilschritt und Abkühlung auf die Probe einwirkt, die Defekte innerhalb des Kristalls verändert. Er liegt ohnehin innerhalb der Fehler von Bestrahlungsdauer und relativem Wirkungsquerschnitt.

Von nun an ('a') steht die Probe für Messungen zur Verfügung. Die Messphase gliedert sich ab jetzt in drei Abschnitte,

- den Zeitabschnitt nach der Ausheilung, vor dem ersten Tempern

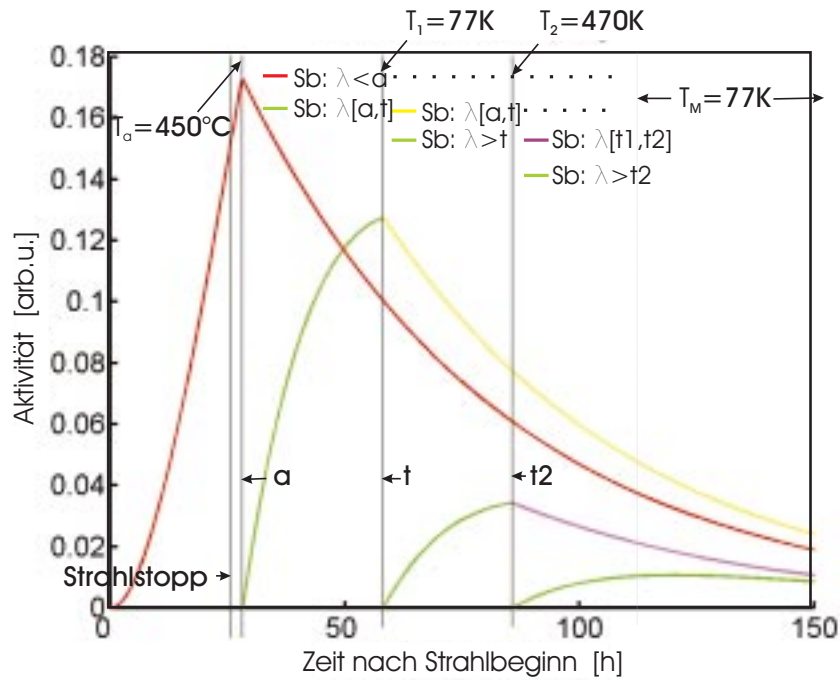


Abbildung 28: CdTe-1100 Aktivitäten; Ausschnitt ohne Te

- den Zeitabschnitt nach dem ersten, vor dem zweiten Tempern
- den Zeitabschnitt nach dem zweiten Tempern.

Jeder Abschnitt, innerhalb dessen das jeweilige Messintervall $[start, stop]$ liegt, schreibt vor, wie die Anteile der Sonden aufzugliedern sind. Im ersten Abschnitt setzt sich jedes Spektrum aus Sonden zusammen, die bereits vor der Ausheilung zum Sb zerfallen waren ($<a$), und Sonden, die erst nach der Ausheilung zum Sb zerfallen sind ($>t$). Wie im Kapitel *Zeitverhalten* erläutert, legt dieser Messabschnitt die Defekterzeugungswahrscheinlichkeit P mit

$$P = \frac{\text{Intensität der Defektlinie}}{[a, t]}$$

offen. Spektren, die im zweiten Abschnitt aufgenommen werden, müssen ausgewertet werden unter Berücksichtigung dreier Sondenanteile: der Anteile aus dem ersten Abschnitt, nämlich $<a$ und $[a, t]$, zuzüglich der Sonden, die erst nach dem Temperschnitt zum Sb zerfallen sind $>t$.

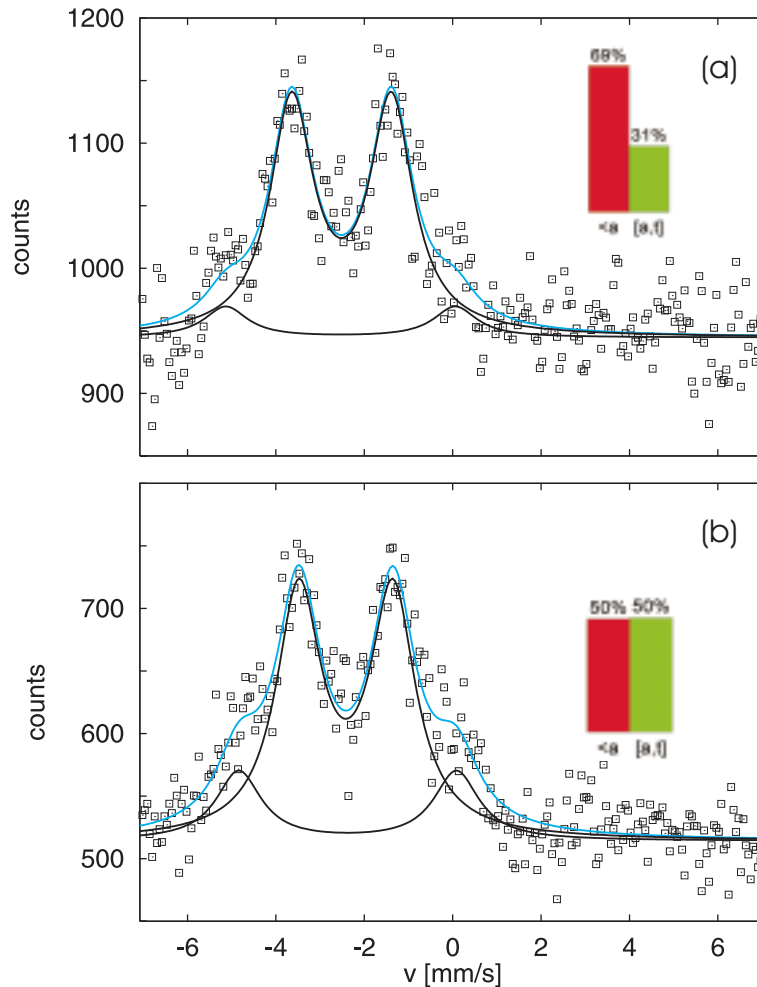


Abbildung 29: Messung CdTe-1100. Betrachtung des zeitabhängigen Verhaltens der Intensität.

a): Spektrum von ^{119}Sn in CdTe im Zeitintervall [3:01h, 14:17h] nach Ausheilen der Strahlenschäden bei 450°

b): Spektrum wie oben, aufgenommen im Zeitintervall [15:15h, 29:11h] nach Ausheilung. Die Spektren sind relativ zum Absorber CaSnO_3 aufgenommen worden.

Die Balkendiagramme stellen die verschiedenen Sondenanteile dar, siehe Kapitel *Zeitverhalten der Intensität*.

Entsprechend ergeben sich für den dritten Abschnitt vier Klassen von Sonden, die drei aus dem vorhergehenden Abschnitt $\langle a, [a, t], [t, t_2]$, sowie zusätzlich $> t_2$, die Sonden, die erst nach dem zweiten und letzten Tempern zum Sb geworden sind. Abb.29 stellt zwei Spektren des ersten Abschnitts dar. Sie sind zeitlich aufeinanderfolgend aufgenommen. Wie ein Vergleich mit den globalen Aktivitätsverläufen Abb.28 veranschaulicht, wächst hier in

späteren Messintervallen der Anteil $[a,t]$ an, während der Anteil $<a$ mit der Zerfallskonstante abnimmt. Die Balkendiagramme in jedem Spektrum geben explizit diese Anteile an.

Die eingezeichnete Anpassung der Daten enthält zwei Dubletts.

CdTe-1100(a)		[3:01h,14:17h]			
Linie	A[%]	$\frac{\Gamma}{2}$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	IS [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	ΔQ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	
1	88.27(4)	0.59(4) [‡]	2.52(3)	2.25(5)	
2	11.73(4)	0.59(4) [‡]	2.5(1)	5.2(3)	

CdTe-1100(b)		[15:15h,29:11h]			
Linie	A[%]	$\frac{\Gamma}{2}$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	IS [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	ΔQ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	
1	77.84(3)	0.61(3) [‡]	2.42(2)	2.13(4)	
2	22.16(3)	0.61(3) [‡]	2.38(7)	4.93(15)	

Genau wie in InSb müssen wegen der Zinkblendegeometrie Quadrupolaufspaltungen, die aus Gitterplatz-Leerstelle Situationen stammen, gleiche Linienintensitäten in beiden Schultern haben (s.Anhang A). Die beiden Maxima als zwei Schultern eines Dubletts zu deuten wird dadurch nahegelegt, dass ihre Intensitäten genau gleich groß sind. Vor allem aber kann mit dieser Deutung dieser Linie der substitutionelle Gitterplatz zugeordnet werden, die mit Sicherheit auch in diesem Experiment vorhanden sein muss. Ihre Isomerieverschiebung muss nämlich nahe den Werten liegen, die die Sn-Sonde in III-V- und Elementhalbleitern hat. Auch diese Erwartung wäre mit dem Ansatz des vorliegenden Fits erfüllt mit $IS \sim 2.5$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$] (s.Abb.8).

Im Fall der beiden anderen, kleineren Peaks an den Füßen des Dubletts fällt auf, dass auch sie gleiche Intensität haben, und zwar sowohl in Spektrum (a) als auch (b). Die Menge $[a,t]$ ist der Anteil der defektfähigen Sonden. $[a,t]$ kann variiert werden, indem beliebige Zeitfenster als Messintervalle gewählt werden und die entsprechenden Spektren durch Addition der betreffenden Daten zusammengestellt werden. Eine solche Analyse der Daten des gesamten ersten Abschnitts ergibt nun, dass beide Peaks gleichmäßig und proportional zu $[a,t]$ anwachsen. Auch hier liegt darum vermutlich eine Quadrupolaufspaltung vor. Ihre Isomerieverschiebung liegt nahe der des inneren Dubletts (1). Nach diesem Ansatz müsste das Dublett (2) die durch den Neutrinorückstoß erzeugte Defektsituation repräsentieren.

Die Zuordnung der Linien kann erst durch ein Temperexperiment überprüft

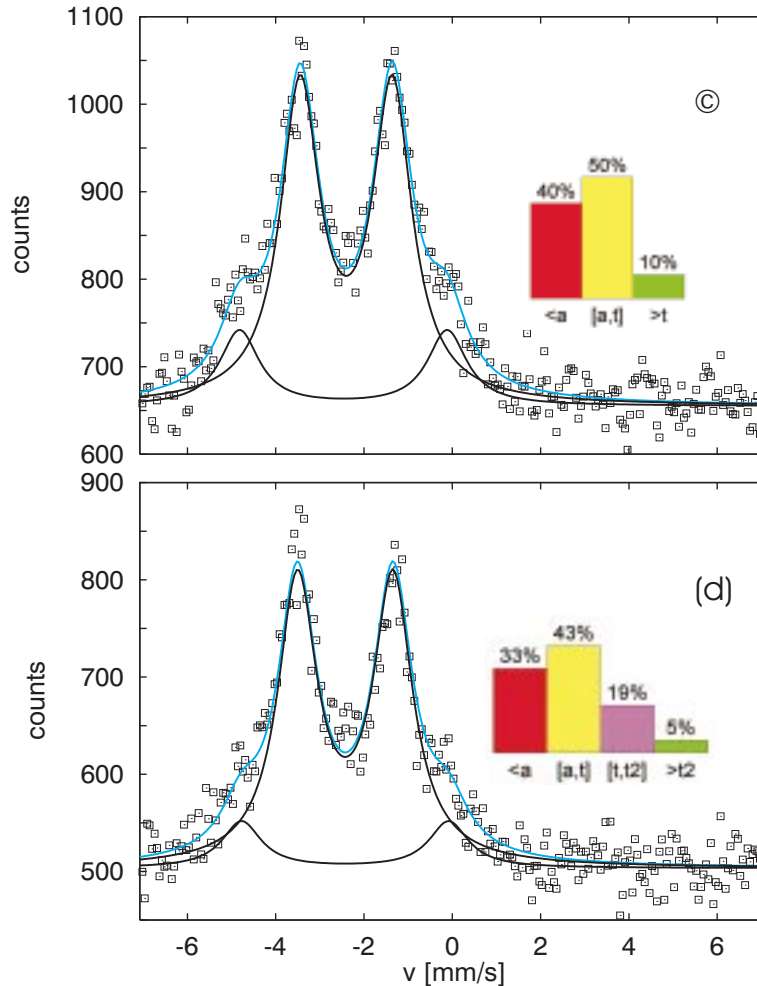


Abbildung 30: Messung CdTe-1100. Betrachtung der Stabilität der Defektlinie nach Temperatur.

Die Spektren sind nach denen aus Abb.29 aufgenommen worden:

c) Spektrum aufgenommen im Messintervall [30:11h, 52:30h], nach einer Temperung bei $T_t = 77\text{K}$

d) Spektrum aufgenommen im Messintervall [58:23h, 84:16h], nach einer weiteren Temperung bei $T_{t2} = 450\text{K}$

Die Balkendiagramme geben die Sondenanteile der Spektren an.

werden. Die Aktivierungsenergie eines Defektes muss kleiner sein als die des regulären Gitterplatzes. Nimmt ab einer bestimmten Tempertemperatur das Dublett (2) in der Intensität ab, während (1) auch bei hohen Temperaturen noch stabil bleibt, würde das den Ansatz bestätigen.

Die Probe wurde darum ca. 30h nach dem ersten Ausheilen bei 77K 10min

lang getempert. Die Messung tritt damit in den zweiten Abschnitt ein. Abb.30 zeigt im Spektrum (a) die Wirkung auf die Linienkomponenten. Die relative Höhe des äußeren Dubletts (2) ist nach dem Tempern ungefähr gleich geblieben. In dieses Spektrum gehen aber drei Anteile ein. Der Anteil der Sonden, die schon vor der ersten Ausheilung zum Sb zerfallen waren, $< a$, beträgt nur noch 40%, der Anteil, der erst nach dem Tempern zum Sb zerfallen ist, 10%. Die Hälfte aller Atome, 50%, ist demnach zwischen Ausheilung und Temperung zum Sb zerfallen [a,t]. Wäre die Temperung auf Defekte wirkungslos gewesen, wäre das äußere Dublett (2), das ja jetzt als Folge des Neutrinorückstoßes angenommen wird, in jedem Fall gegenüber Abb.29(b) wesentlich angewachsen.

Die Wirkung der Temperung wird noch augenfälliger bei höherer Temperatur. Abb.30 Spektrum (b) deckt die Messzeit [58:23h, 84:16h] ab, befindet sich im dritten Abschnitt, die mit einer Temperung bei $T_{t2} = 470\text{K}$ anfang. Die Sonden teilen sich nun in vier Gruppen auf (siehe Balkendiagramm). Nun hat offensichtlich die Intensität von Linie (2) stark gegenüber (1) abgenommen. Die Mehrheit aller enthaltenen Atome sind nach dem ersten Ausheilen und vor dem letzten Tempern zum Sb zerfallen, nämlich [a,t] + [t,t2]=62%. Sie war der Wirkung der Temperschritte ausgesetzt, die eindeutig die Linie (2) zum Teil ausgeheilt hat, während sie das Dublett (1) intakt ließ.

Nachstehend sind die Fitparameter von Abb.30 aufgelistet.

CdTe-1100b(c)		[58:23h,84:16h]			
Linie	A[%]	$\frac{\Gamma}{2}$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	IS [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	ΔQ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	
1	80.59(2)	0.53(2) [‡]	2.40(1)	2.09(3)	
2	19.41(2)	0.53(2) [‡]	2.47(5)	4.70(10)	

CdTe-1100b(d)		[30:11h,52:30h]			
Linie	A[%]	$\frac{\Gamma}{2}$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	IS [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	ΔQ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	
1	85.86(2)	0.53(2) [‡]	2.43(1)	2.17(3)	
2	14.14(2)	0.53(2) [‡]	2.43(7)	4.69(15)	

Dass Linie (2) in beiden Schultern gleichmäßig anwuchs und abnahm, bestätigt, sie als Quadrupolaufspaltung anzusehen. Dass sie überhaupt mit den defektfähigen Atomen anwuchs und nach einer Temperung abnahm, bestätigt, sie als Ausdruck von durch den Neutrinorückstoß induzierten Defekten anzusehen. Dass demgegenüber Linie (1) in allen Fällen konstant blieb, was die Intensität betrifft, bestärkt die Annahme, sie als Ausdruck der substitu-

tionellen Sondenposition aufzufassen. Es bleibt die Ursache der Linienaufspaltung zu klären.

Unterstützt wird die Interpretation durch sämtliche anderen Experimente. Der Zeitverlauf der Aktivitäten im Experiment CdTe-0299 gibt Abb.31 an.

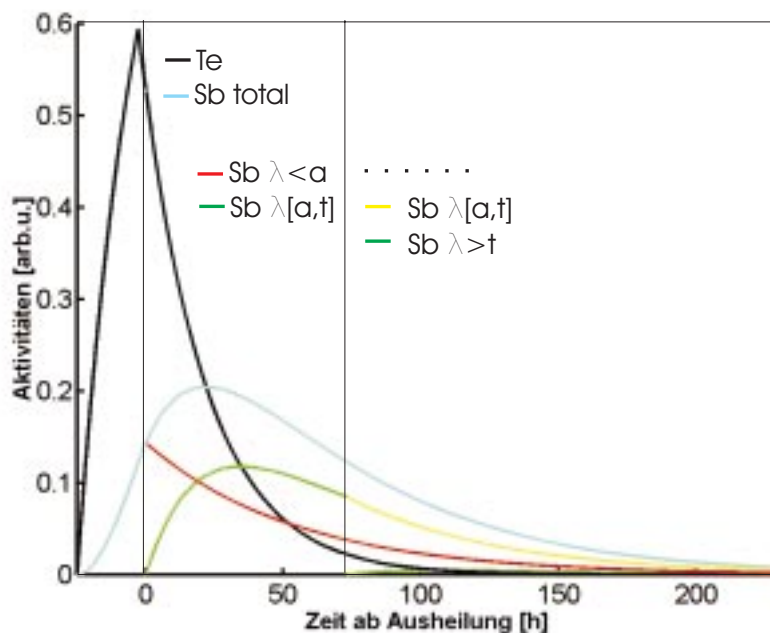


Abbildung 31: Messung CdTe-0299. Aktivitäten. Die Bestrahlung dauerte 22:10h. Der Zeitnullpunkt ist auf den Ausheilzeitpunkt gelegt. Der Temperzeitpunkt lag bei $t=76h$, die Temperatur bei $T_t = 140K$.

Die Aktivierung entspricht in der Technik dem Versuch CdTe-1100; die Dauer der Bestrahlung, der Ausheilzeitpunkt, sowie Temperzeitpunkt und -temperatur unterscheiden sich. Es wurde nur einmal getempert, der Versuch unterteilt sich darum in zwei Zeitabschnitte. Aus jedem Abschnitt stammt ein Spektrum in Abb.32, a) wurde unmittelbar vor der Temperung aufgenommen, b) kurz danach.

Deutlich ist die Wirkung des Tempereingriffs im Spektrum (b) gegenüber (a) zu erkennen. Die Messintervalle wurden so gewählt, dass die relevanten Sondenanteile optimiert wurden: in (a) nehmen die defektfähigen Atome $[a,t]$ fast 70% ein, in (b) kann dieselbe Menge hinsichtlich ihrer Temperstabilität geprüft werden ($[a,t]=69\%$), und die jetzt noch defektbildenden Sonden ver-

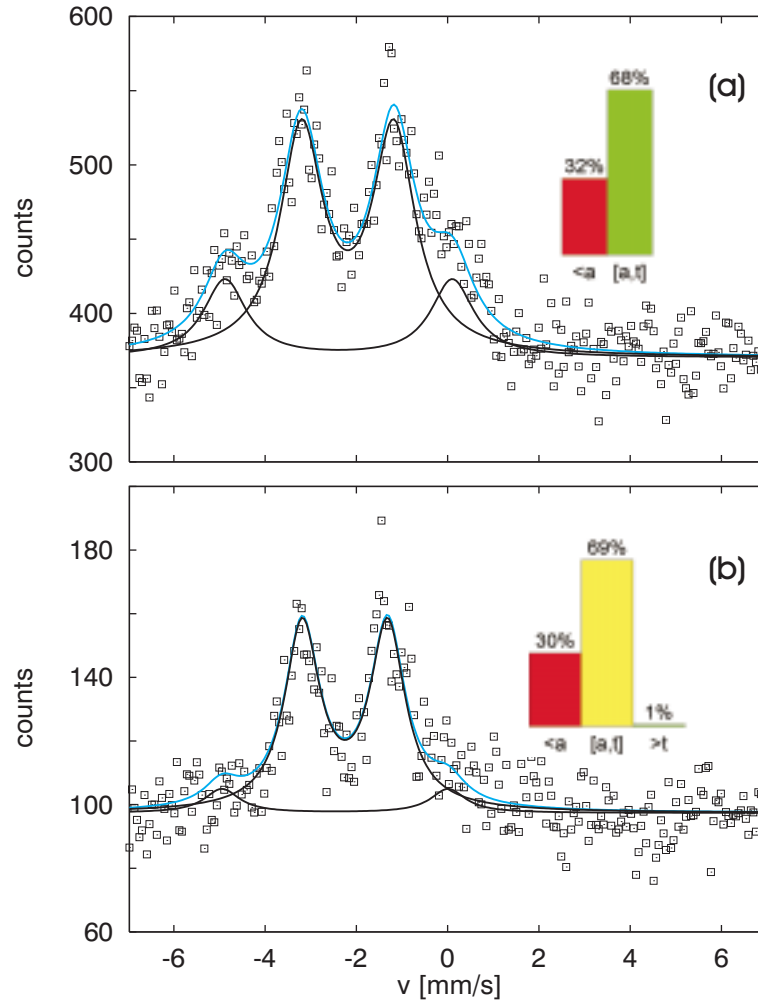


Abbildung 32: Messung CdTe-0299. Betrachtung der Stabilität der Defektlinie nach Temperung. a) Spektrum aufgenommen im Zeitintervall [57:53h, 75:32h], nach Ausheilung der Strahlenschäden bei $T_a = 610^\circ\text{C}$

b) Spektrum aufgenommen im Zeitintervall [76:17h, 81:55h], nach einer Temperung bei $T_t = 140\text{K}$

Die Balkendiagramme geben die Sondenanteile der Spektren an.

schwinden praktisch ($>t=1\%$).

In diesem Versuch stimmen die Parameter der Messung mit denen der anderen Experimente überein (s. Tabellen). Auch hier verringern sich die beiden Schultern des äußeren Dubletts gleichmäßig unter der Wirkung der Temperung, ein Beleg, sie überhaupt als Quadrupolaufspaltung zu deuten und einer Defektsituation zuzuordnen. Das innere Dublett bleibt auch hier stabil, was einer substitutionellen Gitterposition entspricht.

CdTe-0299(a) [57:53h,75:33h]

Linie	A[%]	$\frac{\Gamma}{2}$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	IS [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	ΔQ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]
1	74(3)	0.57(3) [‡]	2.19(2)	2.02(5)
2	26(3)	0.57(3) [‡]	2.39(6)	5.0(1)

CdTe-0299(b) [76:17h,81:55h]

Linie	A[%]	$\frac{\Gamma}{2}$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	IS [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	ΔQ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]
1	88.54(6)	0.46(4) [‡]	2.25(3)	1.87(5)
2	11.45(4)	0.46(4) [‡]	2.5(2)	5.0(4)

Der erste Abschnitt eines Experimentes liefert die Defekterzeugungswahrscheinlichkeit P . Die Daten aus sämtlichen durchgeführten Versuchen stellt Abb.33 zusammen.

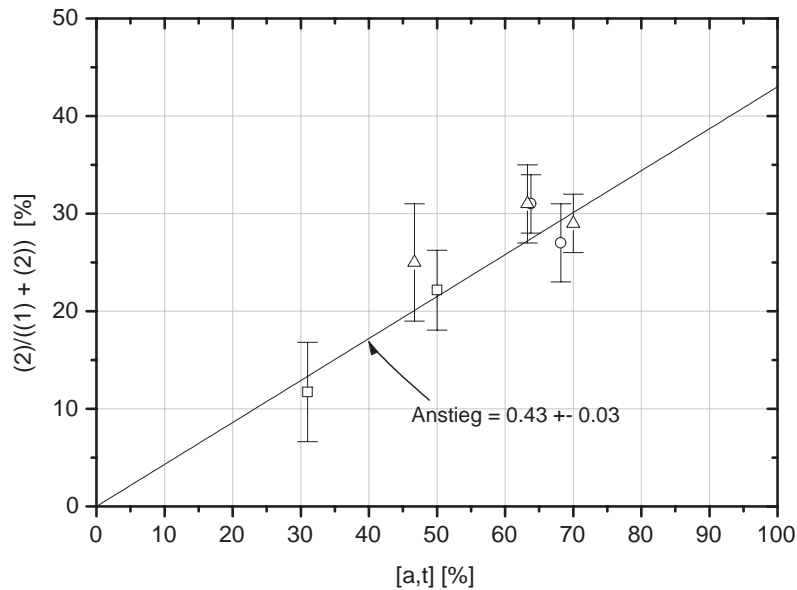


Abbildung 33: Defekterzeugung vs Anteil defektfähiger Atome

(2): Intensität des äußeren Dubletts

(1): Intensität des inneren Dubletts

[a,t]: Anteil der Sonden, die nach dem Ausheilen einen Rückstoß durch Neutrinoemission erfahren haben. Das Diagramm fasst die Daten mehrerer Experimente zusammen.

○: Experiment CdTe0299

△: Experiment CdTe1199

□: Experiment CdTe1100

Es sind hier die relativen Intensitäten des Dubletts (2), das mit dem Defekt indentifiziert werden kann, über den Anteil der defektfähigen Atome [a,t] aufgetragen. Der Quotient, hier also der Anstieg, ergibt P . Er beträgt $P = 0.43(3)$.

Nach dem im Abschnitt *Zeitverhalten der Intensität* beschriebenen Verfahren kann mit dieser Kenntnis die wirkliche Temperstabilität der Defekte bestimmt werden. Das Ergebnis stellt Abb.34 als Defektanteil über der Temperatur dar. Die für den Temperaturbereich [0K, 900K] verfügbaren Daten sind in drei Bereiche eingeteilt. Im Bereich 1 bis etwa 140K ist die Temperwirkung auf die Defekte stark; im Bereich 2 bis etwa 500K bleiben die Defekte von den Temperaturen unberührt, erst danach, im Bereich 3, heilen sie allmählich vollständig aus.

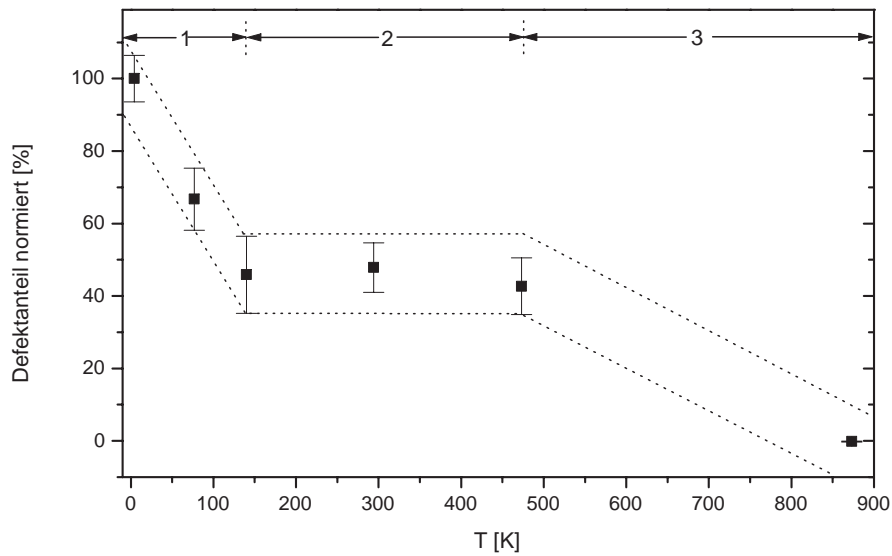


Abbildung 34: Ausheilverhalten der Defektkomponente in CdTe. Die Intensität der Linie bei Abwesenheit jeder Temperung ist auf 100% normiert. Gestrichelte Linien dienen der Übersichtlichkeit.

Die Grenzen zwischen den Bereichen sind nicht genau anzugeben, da die Messwerte relativ weit auseinanderliegen, besonders im Bereich 3 zwischen 500K und 900K.

Interpretation

Auch im CdTe verursacht der Neutrinorückstoßprozess die Bildung einer Defektkomponente. Durch das Temper- und Zeitverhalten ihrer Intensität kann sie eindeutig mit der Quadrupolaufspaltung (2) identifiziert werden. Ihre Intensität steigt proportional zu $[a,t]$, das heißt zur Menge der Rückstoßereignisse. Abb.33 stellt diesen Zusammenhang an Hand aller verfügbaren Daten dar. Aus ihm folgt, dass die Wahrscheinlichkeit, einen Defekt zu bilden, bei jedem $\text{Te} \rightarrow \text{Sb}$ -Zerfall ca. 40% beträgt. Selbst wenn dieser Wert größere Fehlergrenzen haben wird, als die graphisch ermittelten ($\pm 3\%$), ist er im Vergleich zum InSb plausibel ($P_{\text{InSb}} \sim 25\%$).

Im Unterschied zum InSb kann der Zerfall vom metastabilen Te her, ${}^m\text{Te} \rightarrow \text{Sb}$, nicht untersucht werden. Mit den verfügbaren Ionenstrahlarten gibt es mit Cd oder Te keine Reaktion, die diesen Zustand in ausreichender Menge bevölkert. Damit kann zwar auf diese Art nicht bewiesen werden, dass die Defektlinie allein von der Rückstoßenergie abhängt. Da aber die Ausheilung hauptsächlich am Te-Zustand geschieht, sind die Sonden in CdTe Eigenatome. Experimentelle Überprüfungen der Defektchemie von CdTe zeigen, dass Te im Te-Untergitter bei einer Ausheiltemperatur von $\sim 600^\circ\text{C}$ vollständig löslich ist. Sogar Ausheilungen bei hohen Temperaturen ($>900^\circ\text{C}$) und Te-reicher Atmosphäre plazieren einen nur geringen Anteil von Te auf Antistrukturplätze, also Cd-Plätze [Ber99]. Te-Zwischengitterplätze sind nicht beobachtet worden.

Mit den gegebenen Messparametern lauten also die Zuordnungen der Linien

- ① Sn_{Te} . Auf Grund der Stöchiometrie im thermodynamischen Gleichgewicht und der Temperaturstabilität bis hohe Temperaturen ($>800\text{K}$) muss Linie (1) mit dem substitutionellen Gitterplatz Sn_{Te} identifiziert werden. Die Isomerieverschiebung von $IS \in [2.2 \frac{\text{mm}}{\text{s}}, 2.5 \frac{\text{mm}}{\text{s}}]$ bestärkt ebenso diese Annahme. Die Quadrupolaufspaltung von $\Delta Q \in [2.1 \frac{\text{mm}}{\text{s}}, 2.5 \frac{\text{mm}}{\text{s}}]$ kann als stabiler Effekt darum nur auf eine Verzerrung der lokalen Sondenumgebung zurückgeführt werden, vermutlich ein Jahn-Teller-Effekt. Die Umgebung am Ort der Sonde hat einen elektrischen Feldgradienten von $V_{zz} = 250(40) \frac{\text{V}}{\text{\AA}^2}$. Dieser Wert ist für Defektstrukturen in Verbindungshalbleitern sehr groß (vergleiche Abb.35); zum Beispiel wurde mit PAC an der Sonde ${}^{111}\text{In}$ auf Cd-Platz in CdTe ein Feldgradient von $V_{zz} = 40(4) \frac{\text{V}}{\text{\AA}^2}$ gemessen [APPH95].

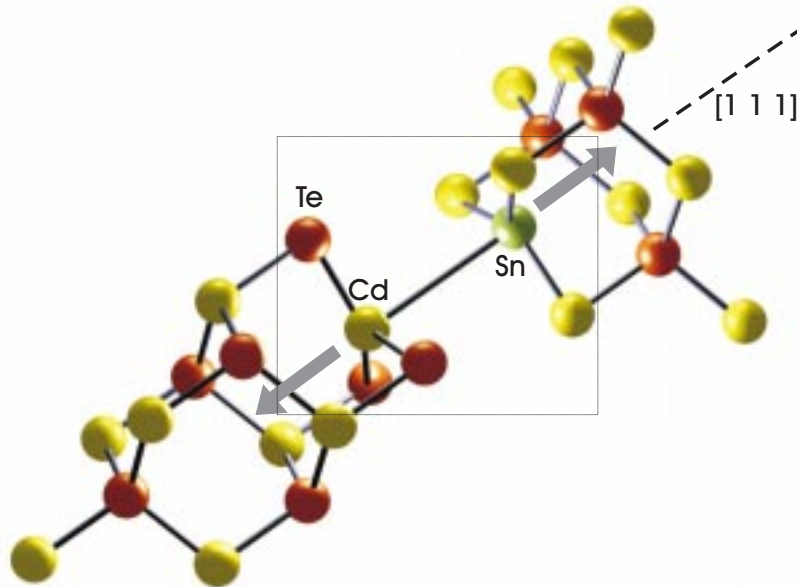


Abbildung 35: Strukturelle Deutung von ①. Die Sn-Sonde verursacht eine trigonale Verzerrung des Zinkblendegitters. Diese verringert die T_d -Symmetrie der regulären Struktur zu einer C_{3v} -Symmetrie (Anhang B). Innerhalb des eingezeichneten Rechtecks ist die Symmetrie erkennbar.

- ② $\text{Sn}_{\text{Te}}\text{-V}_{\text{Cd}}$ Die Linie (2) kann auf Grund ihrer Instabilität bei schon $T_t \sim 70\text{K}$ einer Defektsituation zugeordnet werden. Ihr Intensitätsverhalten in Abhängigkeit der Rückstoßprozesse ($[a,t]$) hat gezeigt, dass der Defekt vom Neutrinorückstoß erzeugt sein muss. Die Isomeriever-schiebung von $IS \in [2.4 \frac{\text{mm}}{\text{s}}, 2.5 \frac{\text{mm}}{\text{s}}]$ weist auch hier auf einen substitu-tionellen Gitterplatz hin. Vor allem fällt die extrem große Quadrupol-aufspaltung $\Delta Q \in [4.7 \frac{\text{mm}}{\text{s}}, 5.2 \frac{\text{mm}}{\text{s}}]$ auf. Sie entspricht einem Feldgra-dienten, der noch um den Faktor $2\frac{1}{2}$ größer ist als der bei ①, nämlich $V_{zz} = 625(50) \frac{\text{V}}{\text{\AA}^2}$.

Alle drei Kriterien erfüllt allein die Annahme, dass das Sondenatom beim Zerfall $\text{Te} \rightarrow \text{Sb}$ ein benachbartes Cd vom Gitterplatz verdrängt hat; anschließend wird es sich wahrscheinlich auf den ursprünglichen Te-Platz zurückbewegt haben - dafür spricht die hohe Ionizität des Materials CdTe, die die Besetzung von Antistrukturplätzen im thermody-namischen Gleichgewicht weitgehend ausschließt. Zu dieser Annahme passt ebenso die Isomeriever-schiebung, die sich nur geringfügig von der

in ① unterscheidet. Ein so großer Feldgradient beruht vermutlich noch auf einer zusätzlichen Gitterverzerrung. Die Richtung einer solchen Verzerrung kann aus den Daten nicht ermittelt werden, wegen des benachbarten freien Gitterplatzes ist aber anzunehmen, dass Sonde und Leerstelle zusammenrücken und damit eine hohe lokale Asymmetrie um die Sonde erzeugen, wie im Strukturbild eingezeichnet (vergleiche Abb.36).

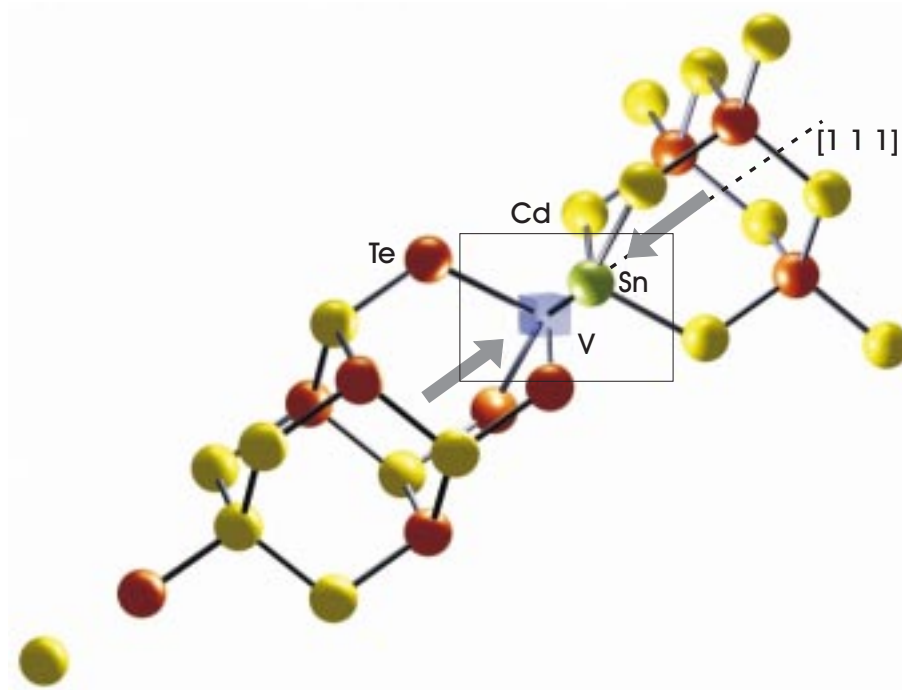


Abbildung 36: Strukturelle Deutung von ②.

Für die Annahme, dass durch den Ersetzungsstoß ein Cd-Atom ins Zwischengitter in weiterer Entfernung von der Sonde verlagert wird (siehe Abb.36 links unten), spricht das Ausheilverhalten der Proben. Abb.34 hat gezeigt, dass die Defektkomponente in drei Temperaturbereichen unterschiedlich ausheilt. Mit der jetzt gewonnenen Interpretation aktivieren bereits geringe Temperaturen (Bereich 1) das interstitielle Cd und bewegen es auf die durch den Ersetzungsstoß der Sonde entstandene Leerstelle V_{Cd} . Möglich ist es deswegen, weil sich diese Atome noch in der elastischen oder elektrostatischen Reichweite der Anion-Leerstelle befinden, sie also rekombiniert ausheilen. Ab einer Grenztemperatur werden alle Atome dieser Sorte rekombiniert

sein; die übrigen befinden sich entweder außerhalb der elastischen oder Coulomb-Reichweite, oder sie sind an Grenzflächen gebunden. Diesen mittleren Temperaturen entspricht Bereich 2. Ab einer noch höheren Temperatur können die Leerstellen selbst anfangen zu wandern. Dadurch vervollständigt sich die unmittelbare Sondenumgebung wieder mit Cd-Atomen, und der Defektanteil nimmt in den Spektren ab, bis er vollständig ausgeheilt ist. Dieser Vorgang geschieht im Bereich 3.

Die Berücksichtigung des Ausheilverhaltens ist deswegen wichtig, weil sie die einzig denkbare zweite Deutung von ② ausschließt. Allein ausgehend von den Mößbauerparametern könnte nämlich das Sondenatom durch den Rückstoß das benachbarte Cd ersetzt haben, aber gleichzeitig der freiwerdende Platz von dem Cd besetzt worden sein. Eine Jahn-Teller-Verzerrung von Sn_{Cd} würde den riesigen Feldgradient in diesem Fall erklären müssen. Das zweistufige Ausheilverhalten widerspricht aber dieser Überlegung.

Im Unterschied zu InSb, in dem nach Neutrinorückstoß vier Sondenpositionen identifiziert werden konnten, zeigen die Messungen in CdTe nur zwei. Besonders der naheliegende Fall, dass sich die Sonde ins Zwischengitter bewegt und einen interstitiellen Platz einnimmt, tritt in CdTe nicht ein. Die beiden beobachteten Isomerieverschiebungen ($IS \in [2.0 \frac{\text{mm}}{\text{s}}, 2.5 \frac{\text{mm}}{\text{s}}]$) liegen so nahe an allen bisher bekannten Werten für die Gitterplatzposition der Sonde ^{119}Sn in Halbleitern, dass die zugehörigen Kontaktelektronen keine $5s^2$ -Konfiguration haben können [WPD83], sondern ebenfalls zu einer Gitterposition gehören müssen. Auch nach der semitheoretischen Überlegung von Lees und Flinn (11) [She78], die die Abhängigkeit der Isomerieverschiebung von der effektiven Zahl von $5s$ und $5p$ -Elektronen angibt, muss die Isomerieverschiebung mit einem substitutionellen Gitterplatz identifiziert werden.

Demgegenüber ist die Umgebung des Defektes ② derart gestört, dass sie zu einer Quadrupolaufspaltung führt, die zu den größten zählt, die jemals mit dieser Sonde und diesem Absorber gemessen worden sind. Werte von über $4 \frac{\text{mm}}{\text{s}}$ wurden nur an Polymeren gemessen, und fast durchgängig mit der Verbindung Dimethylzinn (Me_2Sn). In kovalenten Sn-C Bindungen wurde gefunden, dass der Wert der Quadrupolaufspaltung $|\Delta Q|$ sich recht gut mit der Beziehung

$$|\Delta Q| \propto \left(1 - \frac{3}{4} \sin^2 \theta\right)^{\frac{1}{2}}$$

beschreiben lässt, wobei θ den C-Sn-C Winkel bedeutet [dSMF⁺99]. Für $\Delta Q > 4\frac{\text{mm}}{\text{s}}$ liegen die Werte für θ sämtlich zwischen 160° und 180° . Auch im Fall des CdTe ist darum der Winkel des Sn-Atoms zu den nächsten Nachbarn vermutlich noch größer als in der Abbildung 36 angedeutet.

Test des Jahn-Teller-Effektes

Die Quadrupolaufspaltung von ① lässt wegen ihrer Hyperfein- und Temperaturparameter keine andere Deutung zu als die einer Jahn-Teller-verzerrten substitutionellen Gitterposition. Dabei geht die lokale Umgebung der Sonde von einer kubisch-tetraedrischen Symmetrie (T_d) in eine trigonal-verzerrte Symmetrie (C_{3v}) über, wie im Anhang B erläutert. Die Energieverschiebung gegenüber dem ungestörten Gitter liegt in der Größenordnung von $< 0.5\text{eV}$, wenn man EPR-Messungen in CdTe an V_{Cd}^- zugrunde legt [EOM⁺93]. Eine relativ geringe Erhöhung der Temperatur müsste darum die Verzerrung aus ihrem lokalen Energieminimum aktivieren können, so dass sie zwischen verschiedenen äquivalenten Minima springt. Die Verzerrung, und damit der Feldgradient, würde so ihre Richtung ständig wechseln. Der statische Jahn-Teller-Effekt ginge in einen dynamischen über.

Spektrum e) in Abb.37 ist unmittelbar nach dem Spektrum d) aufgenommen worden (vergleich auch Abb.30), und zwar im Zeitintervall [84:24h, 128:02h], also im Abschnitt 3. Die Messtemperatur betrug nun allerdings 77K. Dazu wurde der Probenraum im Kryostaten über einen Temperaturregler gegen leicht nachströmendes He-Gas ständig geheizt. Weil das flüssige He damit verdampft war, konnte es nicht mehr die Untergrundstrahlung absorbieren. Ferner nimmt bei dieser Temperatur der Debye-Waller-Faktor von etwa 0.72 auf etwa 0.47 ab (zur Berechnung siehe Kapitel *Punktdefektuntersuchung: Präzision und Auflösung der Spektren*), was das Peak/Untergrund Verhältnis noch weiter verschlechtert. Dennoch ist erkennbar, wie sich die Spektrenstruktur verändert hat. Die beiden Dubletts haben nun ungefähr gleiche Intensität, wohingegen das Spektrum kurz davor (Abb.30d)) noch vom inneren Dublett dominiert wurde.

Die Beobachtung passt in das Bild eines dynamischen Jahn-Teller-Effektes. Nur das innere Dublett, die Konfiguration Sn_{Te} , ist ja der Jahn-Teller-Verzerrung unterworfen, so dass das äußere Dublett, die Konfiguration $\text{Sn}_{\text{Te}} - V_{\text{Cd}}$ unverändert - bis auf die Verringerung des Peak-Untergrund Verhältnisses - sichtbar bleibt. Das bestätigen die Messparameter: sowohl Isomeriever-schiebung als auch Quadrupolaufspaltung des äußeren Dubletts bei 77K

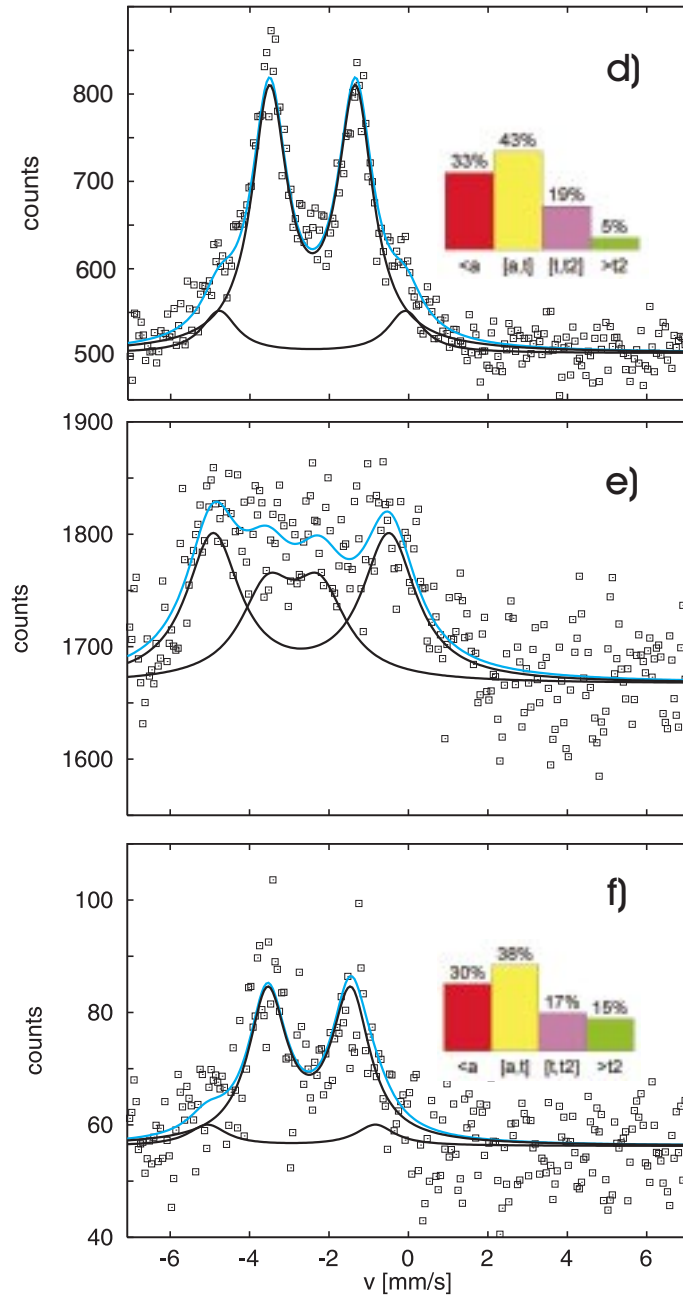


Abbildung 37: Messung CdTe-1100, Überprüfung der Jahn-Teller-Verzerrung. d) Spektrum aufgenommen bei $T = 4.2\text{K}$, im Zeitintervall [58:23h, 84:16h] (= Spektrum Abbildung 30 d)) e) Spektrum aufgenommen bei einer Messtemperatur von $T = 77\text{K}$, im Zeitintervall [84:24h, 128:02h] f) Spektrum aufgenommen bei $T = 4.2\text{K}$, im Zeitintervall [128:20h, 133:20h]. Messparameter siehe 4.

CdTe-1100(e)			[84:24h,128:02h]		
Linie	A[%]	$\frac{\Gamma}{2}$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	IS [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	ΔQ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	
1	37(7)	0.82(11) [‡]	2.90(12)	1.3(3)	
2	63(6)	0.82(11) [‡]	2.70(7)	4.43(15)	

CdTe-1100(f)			[128:20h,133:20h]		
Linie	A[%]	$\frac{\Gamma}{2}$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	IS [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	ΔQ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	
1	88(9)	0.59(8) [‡]	2.50(6)	2.09(12)	
2	12(9)	0.58(8) [‡]	2.9(6)	4.2(8)	

Tabelle 4: Fitparameter von Spektrum CdTe-1100(e) und CdTe-1100(f), vgl. Abb.37(e) (f). Für CdTe-1100(d) siehe Abb.30.

entsprechen -innerhalb der Messungenauigkeit- den Werten des äußeren Dubletts bei 4.2K. Außerdem stimmt ihre Intensität mit der erwarteten Intensität überein. Die erwartete Intensität kann berechnet werden, indem das Peak/Untergrund Verhältnis des 77K-Spektrum mit dem Peak/Untergrund Verhältnis eines vorhergehenden 4.2K-Spektrums in Beziehung gesetzt wird, nachdem vorher, ähnlich der Normierung zur Temperuntersuchung (s.Kapitel *Zeitverhalten der Intensität*), vom 77K-Spektrum die inzwischen neu entstandene Defektintensität subtrahiert worden ist. Das Peak/Untergrund Verhältnis ~ 0.5 liegt dann nahe bei dem Verhältnis der Debye-Waller-Faktoren von 77K und 4.2K, nämlich 0.64. Die Differenz beider Werte geht auf die bei 77K fehlende LHe-Absorption zurück, die den resonanten Strahlungsanteil noch einmal senkt. Vor der Betrachtung muss sichergestellt sein, dass die Messtemperatur von 77K keine Temperwirkung auf die Defekte hatte.

Da vor der Messung die letzte Temperung bei 450K stattfand, kann nur die lange Messzeit für die Temperwirkung verantwortlich sein. Die Anwendung von 77K über eine Zeitdauer von 44h muss darum in die Temperatur übersetzt werden, die sie bei 10min betragen müsste, um dieselbe Aktivierungsenergie der Probe zuzuführen. Angenähert verhält sich die Aktivierungsenergie zur Ausheiltemperatur T , Sprungfrequenz des auszuheilenden Defektes ν_0 und Dauer der Temperung t wie

$$E_a = k_B T \ln(\nu_0 t)$$

woraus bei gleicher Sprungfrequenz bei einer Defektsorte für das Verhältnis zweier Temperzeiten und -temperaturen folgt

$$T_2 \ln t_2 \cong T_1 \ln t_1$$

Das bedeutet, dass die Messung bei 77K über 44h einer 10min-Temperung bei $T_t \sim 260\text{K}$ entsprach. Diese Temperatur liegt aber mitten in dem Bereich, in dem die Defektlinie stabil bleibt (Abb.34). Folglich kann ausgeschlossen werden, dass eine unwillkürliche Temperung obige Intensitätsabschätzung für das äußere Dublett bei der 77K-Messung gestört hat.

Drastisch gesunken ist dagegen die Intensität des inneren Dubletts. Sie beträgt bei 77K nur noch 10% von der in den vorangehenden Spektren, die bei 4.2K aufgenommen worden sind. Ob sich ein Dublett überhaupt noch ausbildet, erlaubt das Spektrum nicht mehr zu entscheiden. Weil die Jahn-Teller-Verzerrung bei 77K zwischen verschiedenen Raumrichtungen dauernd springt, zeigt das Spektrum einen Mittelwert über die Messzeit. Erwartungsgemäß verwischt die Aufspaltung (s.Abb.37). Dass die Intensität so auffällig abnimmt, kann eine theoretische Betrachtung qualitativ erklären. S.Dattagupta untersuchte die Auswirkung eines Sprungprozesses der Sonde ^{57}Fe auf die Linie des gemessenen Mößbauerspektrums [Dat87]. Er nimmt dabei als Ursache der Dynamik eine schwache Kopplung der Probe mit einem sogenannten Wärmebad an (Abb.38), um das Problem mittels der Störungstheorie erster Ordnung berechnen zu können (LRT: linear response theory). Der Eigenwert des magnetischen Kernspinoperators I_z springt wegen

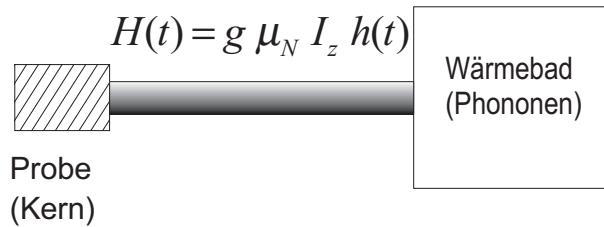


Abbildung 38: Modell eines Zweizustands-Prozesses in Störungstheorie erster Ordnung (schwache Kopplung), nach [Dat87]. g : g -Faktor, μ_N : Kernmagneton, I_z : magnetische Komponente des Kernspins, $h(t)$: effektives Hyperfeinfeld

des Wärmebades zwischen zwei erlaubten Werten $\pm \frac{1}{2}$. Dadurch sieht der Kern ein effektives Hyperfeinfeld $h(t)$, das zwischen den beiden gleichwahrscheinlichen Werten $+h_0$ und $-h_0$ wechselt. Die Nichtdiagonalelemente der Sprungmatrix \hat{W} dieses Prozesses messen somit die Übergangsrate λ

$$\langle -h_0 | \hat{W} | +h_0 \rangle = \langle +h_0 | \hat{W} | -h_0 \rangle = \frac{1}{2} \lambda$$

Nach diesem Ansatz verhält sich die Intensität des Überganges proportional den Clebsch-Gordan Koeffizienten des entsprechenden Operators A (hier: Dipoloperator), den den *internen* Übergang des Quantensystems beschreibt, und einer imaginären (Laplace-transformierten) Korrelationsfunktion, die oszilliert. Die Linienform in Abhängigkeit der Emissionsenergie (hier als Frequenz ω) mit Berücksichtigung unterschiedlicher g -Faktoren im angeregten (g_1) und Grundzustand (g_0)

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \sum_{m_0, m_1} \langle I_1, m_1 | A^\dagger | I_0, m_0 \rangle^2 \left\{ i\omega + \frac{\Gamma}{2} + \frac{\mu_N^2 h^2 (g_0 m_0 - g_1 m_1)^2}{i\omega + \frac{\Gamma}{2} + \lambda} \right\}^{-1}$$

stellt Abb.39 für verschiedenen Übergangsraten λ dar. Im Fall mittlerer

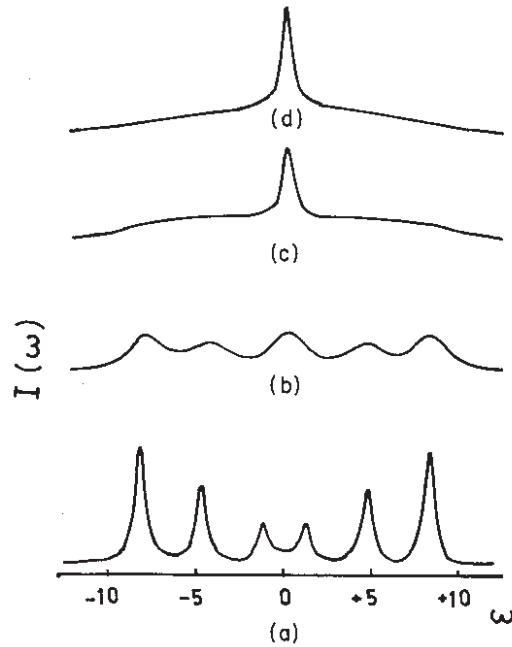


Abbildung 39: Liniengestalt eines ^{57}Fe -Mößbauerspektrums in einem zwischen zwei Zuständen fluktuierenden Hyperfeinfeld als Funktion der Übergangsrates λ nach [Dat87]. Die Hyperfeinparameter sind $j\mu_N g_1 = 3.55$ und $h\mu_N g_0 = -5.65$. ω ist gegeben in Einheiten der natürlichen Linienbreite Γ ($\Gamma = 0.1$). (a) $\lambda = 0.25$, (b) $\lambda = 1.0$, (c) $\lambda = 2.5$, (d) $\lambda = 3.75$.

Übergangsrates, in der die Übergangsfrequenz zwischen den Sprungzuständen in etwa gleich der internen Übergangsfrequenz der Quantenzustände ist, sinkt

die Intensität des Spektrums deutlich und die Signalstruktur verschmiert (b). Im Unterschied dazu fallen bei sehr viel schnellerem Übergang alle Peaks in eine Einzellinie zusammen (d). Im Fall sehr langsamer Übergänge (a) erhält sich die Spektrenstruktur, da dieser Fall dem statischen nahekommt.

Im vorliegenden Fall handelt es sich also offensichtlich um einen dynamischen Jahn-Teller-Effekt, wobei die mittlere Lebensdauer einer Verzerrung in etwa gleich der Lebensdauer des Mößbauerniveaus ^{119}Sn ist.

Ausheilverhalten des Sb

In den Spektren nach einer Ausheilung bei hoher Temperatur $T_a > 600^\circ\text{C}$ bildet sich eine weitere Linie aus.

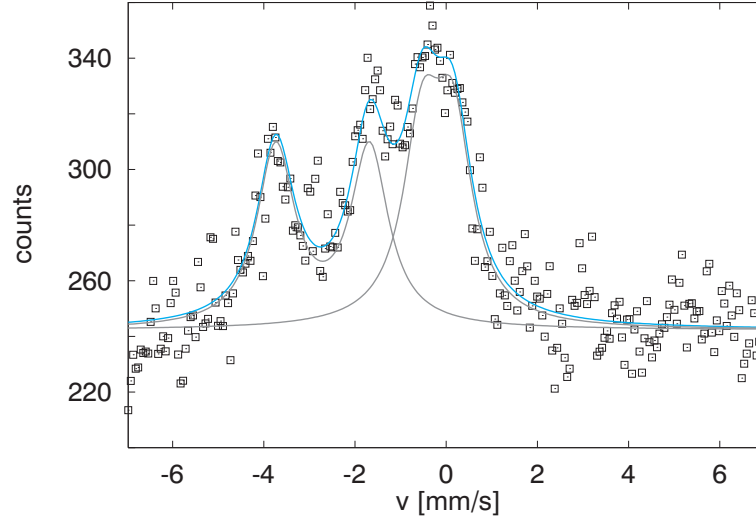


Abbildung 40: Spektrum CdTe-0299(c). Die Messung folgte auf die Spektren in Abb.32, nachdem die Probe bei 600°C ein zweites Mal ausgeheilt worden ist. Messzeitintervall [124:28h, 152:41h]

CdTe-0299(c)		[124:28h,152:41h]		
Linie	A[%]	$\frac{\Gamma}{2}$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	IS [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	ΔQ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]
1	49(3)	0.498 [†]	2.71(4)	2.05(7)
2	51(2)	0.498 [†]	0.19(4)	0.68(8)

Tabelle 5: Fitparameter von Spektrum CdTe-0299(c). Die mit [†] gekennzeichneten Werte sind konstant gesetzt.

Das Spektrum in Abb.40 entstand unmittelbar nach einer zweiten Temperung der Probe bei 600°C , die die Defektlinie (2) des vorhergehenden Spektrums ausheilen sollte (Abb.32(b)). In Übereinstimmung mit den dargestellten Ergebnissen ist nur noch das innere Dublett sichtbar. Zusätzlich ist aber um $IS \sim 0$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$] eine neue Linie herangewachsen, die mit einer kleinen Aufspaltung $\Delta Q \sim 0.7$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$] angepasst ist. Ihre Intensität entspricht in etwa der

Menge der zu diesem zweiten Temperzeitpunkt bereits als Sb vorliegenden Sonden (70%). Die Hyperfeinparameter deuten auf einen tetravalenten Zustand der Sonde hin, Sn^{4+} . Die Intensität lässt eine Komplexbildung des Sb vermuten, die nach dem Zerfall zum Sn noch Bestand hat. Ein Vergleich mit Mößbauerexperimenten in Silber unter kontrolliertem Sauerstoffdruck und kontrollierter Implantation von radioaktivem ^{119}Sb zeigen eindeutig SbO_2 -Komplexbildung [NdW83][ADN⁺83].

Dieser Vermutung wurde nachgegangen, indem die Veränderung der Linienintensität mit dem Anteil der bei Ausheilung als Sb vorliegenden Atome, $\langle a \rangle$, beobachtet wurde. Dazu wurden in zwei Experimenten die Bestrahlungsdauer und der Ausheilzeitpunkt so gewählt, dass der Anteil $\langle a \rangle$ einmal sehr klein und einmal sehr groß gegenüber $[a, t]$ wurde. Zwischenwerte ließen sich durch Verschiebung des Messzeitfensters auswählen. Für das erste Ziel, die Minimierung von $\langle a \rangle$, wurde die Probe möglichst kurz bestrahlt, doch noch so lange, dass die Statistik für eine verlässliche Datenanalyse ausreichte. Damit bleiben die schon während der Bestrahlung vom Te zum Sb zerfallenen Atome gering. Aus dem gleichen Grund muss auch die Verarbeitungszeit zwischen Strahlstopp und Messstart möglichst kurz sein. Die Ausheiltemperatur wurde auf 685°C eingestellt; sie liegt damit weit über der erwarteten Schwellentemperatur zur Komplexbildung ($\sim 600^\circ\text{C}$), wie sie sich in den anderen Experimenten gezeigt hat; sie liegt damit auch weit über der Schwellentemperatur, wie sie von der SbO_2 -Bildung in Ag berichtet wird. Die Werte liegen bei 433K [NdW83]; 600K [HP73]; 400K [ADN⁺83].

CdTe-0400-1		[34:14h,50:56h]			
Linie	A[%]	$\frac{\Gamma}{2}$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	IS [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	ΔQ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	
1	62(1)	0.512 [†]	2.37(3)	1.99(6)	
2	15(2)	0.512 [†]	2.50(6)	4.7 [†]	
3	23(3)	0.512 [†]	0.09(7)	0.4 [†]	

Tabelle 6: Fitparameter von Spektrum CdTe-0400-1. Die mit [†] gekennzeichneten Werte sind konstant gesetzt.

Abb.41 gibt oben die Aktivitätsverläufe an, wie sie durch eine sehr kurze Bestrahlung von nur 8:30h und einer anschließenden Verarbeitungszeit von 1:20h im Experiment erreicht wurden. Mit einer Messung in einem mittleren Zeitfenster zum Beispiel (siehe Markierungen) konnte der Anteil $\langle a \rangle$ auf 17% gedrückt werden. Das Spektrum darunter veranschaulicht beispielhaft das

CdTe-0400-2			[0:50h,9:50h]	
Linie	A[%]	$\frac{\Gamma}{2}$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	IS [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]	ΔQ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]
1	9(2)	0.512 [†]	2.63(13)	2.08 [†]
2	2(2)	0.512 [†]	2.6(2)	4.6(7)
3	89(2)	0.950 [†]	0.20(2)	0.0(2)

Tabelle 7: Fitparameter von Spektrum CdTe-0400-2. Die mit [†] gekennzeichneten Werte sind konstant gesetzt. Zu beachten ist die größere Breite von Linie 3.

gefundene Ergebnis: neben den beiden Dubletts (grün), die den Situationen ① und ② in ihren Parametern entsprechen (siehe *Interpretation*), erhebt sich bei $IS = 0.1$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$] eine Linie mit kleiner Aufspaltung $\Delta Q = 0.4$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]. Ihr Flächenanteil kann dem berechneten Anteil $\langle a \rangle$ zugeordnet werden.

Abb.42 zeigt das Ergebnis nach einer Bestrahlung für den umgekehrten Fall, die Maximierung von $\langle a \rangle$. Hier wurde die Probe möglichst lange aktiviert und dazu noch anschließend lange bei Raumtemperatur gelagert; als die Ausheiltemperatur von 685°C auf den Kristall einwirkte, hat sich bereits ein möglichst großer Anteil Te in Sb umgewandelt. Die Abbildung gibt oben wieder die Aktivitätsverläufe an; die Bestrahlung dauerte 30:00h, die anschließende Wartezeit 21:00h. Da die erste Messung kurz nach der Ausheilung startete (s.Markierungen), konnte in dem entsprechenden Spektrum (unten) ein berechneter Anteil $\langle a \rangle$ von 92% erreicht werden. Er ist gleich dem gemessenen Flächenanteil unter der Linie bei $IS \sim 0.2$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$]. Das innere Dublett ist bereits so klein, dass sich seine Lage und Aufspaltung (grün) nur noch ungefähr andeuten. Das äußere ist wegen zu geringer Intensität gar nicht mehr detektierbar.

Das Zeitfenster der Messungen wurde in beiden Experimenten so variiert, dass der sich ergebende Anteil $\langle a \rangle$ den Wertebereich zwischen den beiden Extremen (17% und 92%) möglichst gut abdeckte. In Abb.43 sind die gemessene Intensität der Linie bei $IS \sim 0$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$] dem Sb-Anteil bei Ausheilung gegenübergestellt. Die Ausheilung fand jedesmal bei der Temperatur $T_a = 685^\circ\text{C}$ statt. Wie auch im Spektrum bei maximalem $\langle a \rangle$, Abb.42, wurde die Linienbreite nicht immer an die anderen Breiten gekoppelt, sondern die Gesamtfläche unter den Daten bei 0 [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$] zusammengefasst. Die Form der Linie behält nämlich nicht die gleiche Breite bei. Vermutlich ist in ihr noch eine weitere Einzellinie oder mehrere Einzellinien enthalten, die auf einen anderen Oxidationzustand von Sn zurückgehen. Je nach Sn-Konzentration wurden in

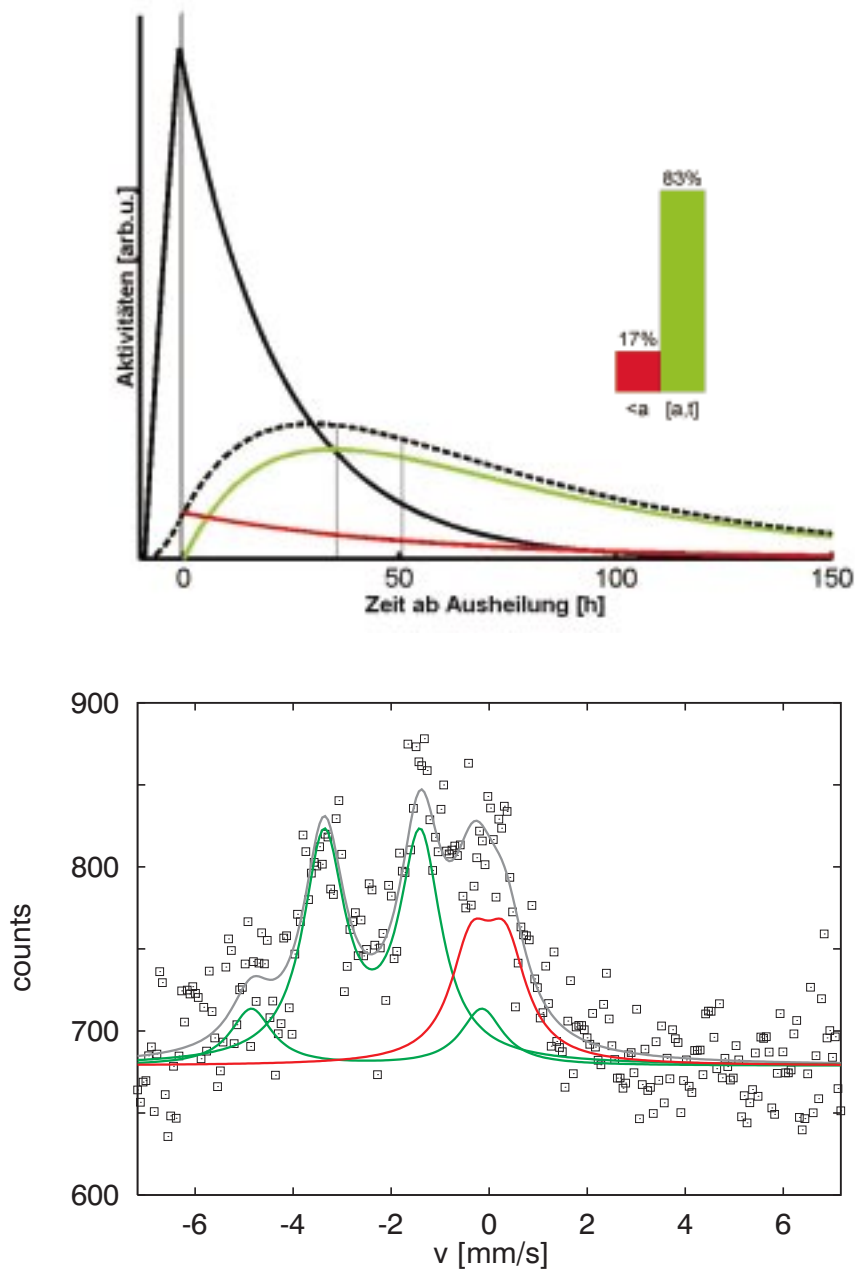


Abbildung 41: Aktivierung und Messung einer CdTe-Probe (CdTe-0400-1) zur Minimierung von $\langle a \rangle$.

Oben: Aktivitäten der Sb-Atome. Die Bestrahlung dauerte 8:30h, die Zeit zwischen Strahlstopp und Ausheilung 1:20h. Das Messintervall des Spektrums ist durch senkrechte Markierungen angegeben, die darin enthaltenen Sondenanteile im Balkendiagramm.

Unten: Spektrum von Sn in CdTe im Zeitintervall [34:14h, 50:56h], Sondenanteile siehe Balkendiagramm. Die Intensitäten der Linien entsprechen jeweils den Anteilen gleicher Farbe.

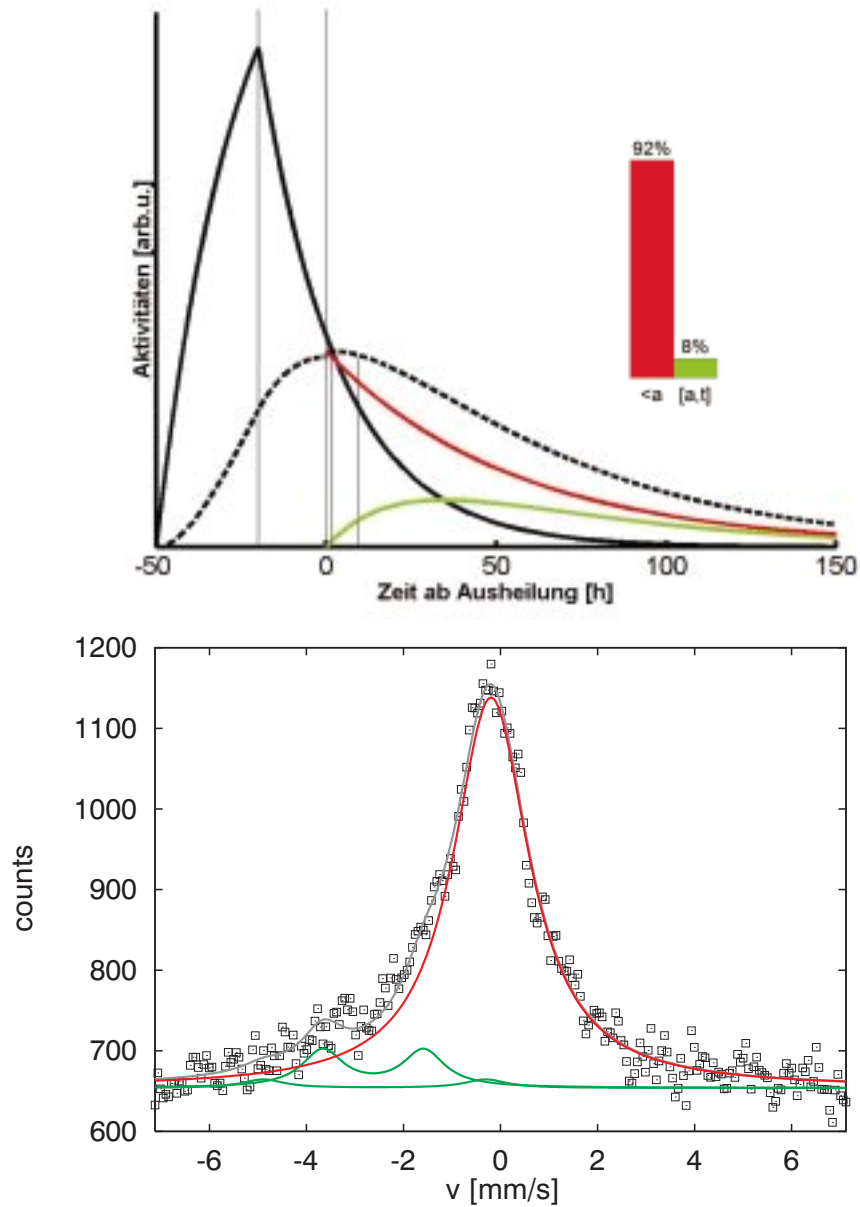


Abbildung 42: Aktivierung und Messung einer CdTe-Probe (CdTe-0400-2) zur Maximierung von $\langle a \rangle$.

Oben: Aktivitäten der Sb-Atome. Die Bestrahlung dauerte 30:00h, die Zeit zwischen Strahlstopp und Ausheilung 21:00h. Das Messintervall des Spektrums ist durch senkrechte Markierungen angegeben, die darin enthaltenen Sondenanteile im Balkendiagramm.

Unten: Spektrum von Sn in CdTe im Zeitintervall [0:50h, 9:50h], Sondenanteile siehe Balkendiagramm. Die Intensitäten der Linien entsprechen jeweils den Anteilen gleicher Farbe.

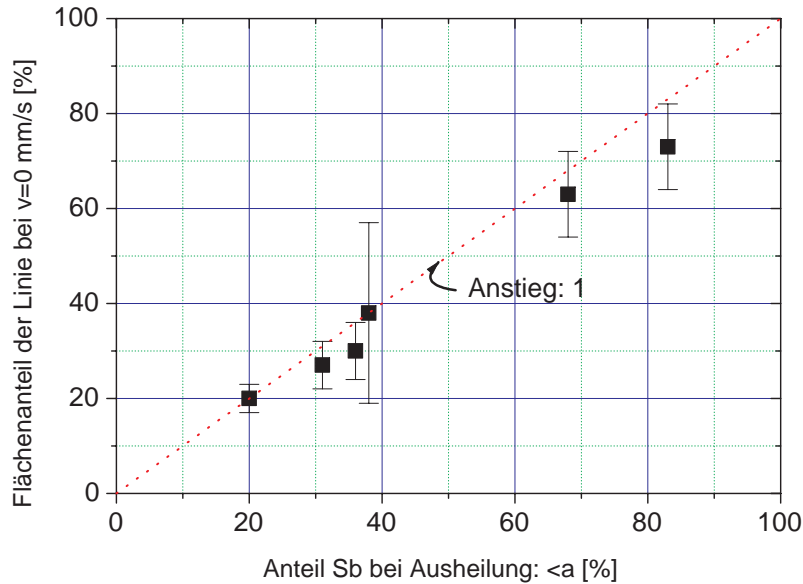


Abbildung 43: Relative Linienintensität bei $IS \sim 0$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$] vs Anteil Sb bei Ausheilung. Die Linie hat keine konstante Breite, die Intensität bezieht sich auf den Flächenanteil unter der Linie. Die Ausheilung bezieht sich auf eine Temperatur von $T_a = 685^\circ\text{C}$.

Ag verschiedene Anteile von SnO_4 und SnO_2 -Komplexen festgestellt [HP73]. Da sie beide vom Ladungszustand Sn^{4+} begleitet sind, liegen sie beide nahe an $IS = 0$ [$\frac{\text{mm}}{\text{s}}$], wobei die höhere Oxidation vermutlich etwas größere Isomeriewerschiebung hat [ADN⁺83]. Erst eine genauere Untersuchung bei Änderung der Ausheiltemperatur kann sie möglicherweise voneinander trennen.

In jedem Fall zeigt die Linie alle Eigenschaften eines SnO_2 -Komplexes. Sie kann wegen der identischen Abhängigkeit von Intensität und Anteil Sb im Ausheilmoment (Abb.43) auf eine innere Oxidation zum SbO_2 beziehungsweise SbO_4 -Zustand zurückgeführt werden.

