

DISSERTATION

**Oberflächenanalysemittels TEY
(Total Electron Yield)**

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der
Technischen Wissenschaften unter der Leitung von

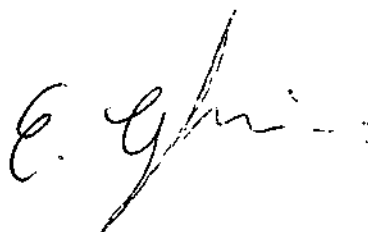
o. Univ. Prof. Dr. Horst Ebel

eingereicht an der Technischen Universität Wien
Technisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

Von

Dipl.-Ing. Elyass Ghassemi
Matr. Nr. 8927375

Wien, im Mai 2003



Kurzfassung

Photoabsorption von Röntgenquanten in der Probe führt zur Emission von Elektronen von der Probenoberfläche. Die emittierten Elektronen sind von ihrem Ursprung her Photo-, Auger- und Sekundärelektronen.

Durch einen Elektronendetektor (channeltron) wird die Anzahl der emittierten Elektronen pro Zeiteinheit erfaßt.

Man kann sich der Gleichungen der RFA (Röntgenfluoreszenzanalyse) bedienen, um den Elektronenfluß theoretisch zu beschreiben. Dabei wird die Ausbreitung der Fluoreszenzstrahlung durch eine Beschreibung der Elektronenbewegung in der Probe ersetzt. Die Ionisation der einzelnen Niveaus ist identisch zur RFA, aber in TEY sind auch die nicht strahlenden Prozesse der Atomrelaxation von Bedeutung.

Die Messungen an binären oder auch Mehrstoffproben liefern quantitative Informationen über die Zusammensetzung. Dabei wird die Quantenenergie von knapp unterhalb bis knapp oberhalb der Absorptionskanten der Elemente in der Probe variiert. Im Falle der Anwesenheit der jeweiligen Elemente in der Probe beobachtet man einen sprunghaften Anstieg im **TEY-Signal**.

Die Auswertung des Signals dient zur Bestimmung von Konzentrationen bei homogenen Proben. In dieser Arbeit wird die Messung des Elektronenflusses herangezogen um die Konzentration eines Elements in binären Proben zu bestimmen.

Als Beispiel wurde das binäre System Ag-Cu gewählt. Der Elektronenfluß wird vor und nach der K-Kante von Cu bzw. von Ag gemessen und die Differenz der Werte des Elektronenflusses oberhalb und unterhalb der jeweiligen Kante gebildet. Diese als Jump bezeichnete Differenz dient als Mass für die Cu- bzw. Ag-Konzentration. Wenn die Quantenenergie unterhalb der K-Kante von Cu ist, kann das K-Niveau nicht angeregt werden und somit entstehen keine **K-Strahlungen**, die auch zur Sekundäranregung Anlass geben. Wenn die Quantenenergie oberhalb der K-Kante von Cu ist, wird das **K-Niveau** angeregt und somit entstehen neben den charakteristischen K-Strahlungen von Cu auch die KLL Auger Elektronen und anschliessend LMM- und MNN-Auger Elektronen, die vorher nicht vorhanden waren. Auch hier variiert der Jump an der K-Kante von Cu mit der Konzentration von Cu. Analoges gilt für Ag.

In dieser Arbeit wird der beschriebene Jump theoretisch berechnet und durch Vergleich des gemessenen Jumps mit dem berechneten kann man die Konzentration der Elemente Cu und Ag in der binären Probe bestimmen.

Gegenstand dieser Arbeit war, das Total electron yield Verfahren in der quantitativen Analytik einzusetzen und ein universelles Rechenprogramm zu entwickeln, das die gesamte Austrittswahrscheinlichkeit von Elektronen aus homogenen Reinelement- und Mehrelementproben ($Z = 10$ bis $Z = 50$) mit ebenen Oberflächen bei Beschuß mit monochromatischen Röntgenquanten zu berechnen gestattet und die Konzentrationen binärer Legierungen bestehend aus den Elementen $Z = 10$ bis $Z = 50$ liefert.

Zur Berechnung der Wirkungsquerschnitte für die Verwendung im Analytikprogramm werden die aus den **Scofield-Dateien** erarbeiteten Koeffizienten der Ausgleichsrechnung verwendet.

Die Austrittswahrscheinlichkeit der Elektronen hängt vom chemischen Element, der kinetischen Energie und der Tiefe x , bezogen auf die Probenoberfläche ab und wurde mit Hilfe eines Monte Carlo Programms berechnet.

Abstract

Photo absorption of x-ray quanta in the sample causes an electron emission from the sample surface. The emitted electrons can be detected by an electron detector (channeltron) and are photo, Auger and secondary electrons.

By using the equations of RFA the electron flux can be quantified. The propagation of the fluorescence radiation is replaced by a description of the electron transport in the sample. The ionization of the different levels is identical to RFA, but in TEY the non radiating processes of atomic relaxation are also important.

Quantitative information on composition of binary or multi element samples can be obtained by the following procedure: The quantum energy has to be tuned from below to above the absorption edges of the elements in the sample. In the case of its presence in the sample a jumplike increase of the TEY signal is observed.

The evaluation of the signal is used for the determination of concentrations of homogeneous binary samples. As example the system Ag-Cu was selected. The electron flux is measured in the vicinity of the K-edge of Cu and of Ag and the difference of values above and below the edge will be evaluated. This jump is a measure for the Cu and Ag concentration. If quantum energy is below the **K-edge** of Cu, the **K-level** cannot be excited and there are no K-radiations. If the quantum energy is above the K-edge of Cu, the K-level will be excited and thus, there are characteristic K-radiations of Cu and KLL-, LMM- and MNN-Auger electrons, which were before inexistent. The jump at the K-edge of Cu varies with concentration. The same is valid for Ag.

In this work the theory of TEY is developed and the jumps are computed and by comparison of the measured jumps concentration of the elements Ag and Cu can be determined.

The subject of this work was to use the total electron yield (TEY) procedure in quantitative surface analysis and to develop a computer program, to compute the escape probability of electrons from homogeneous pure element and alloy samples ($Z = 10$ to $Z = 50$) with plane and smooth surfaces. The program allows to evaluate concentrations of binary alloys consisting of elements $Z = 10$ to $Z = 50$.

The escape probability of electrons depends on the chemical element, kinetic energy and the depth x (related to sample surface) and was computed with a Monte Carlo program and photoelectric absorption coefficients of shells and subshells are from **Scofield's** database.

Danksagung

Von den vielen Personen, die zur Entstehung dieser Arbeit beigetragen haben, gilt mein herzlicher Dank im besonderen:

Herrn o. Univ. Prof. Dr. Horst Ebel, der mir bei vielen fachlichen Gesprächen zu einem tieferen Verständnis der **Röntgenphysik** geholfen **hat**, für die sehr freundliche und geduldige Betreuung meiner Arbeit und die bemühte Hilfestellung, die er mir im Laufe meiner Arbeit zukommen liess.

Herrn Robert Svagera, der mich in vielfältiger Weise **unterstützt** hat, für die Bereitstellung der Messergebnisse, die Durchführung und Auswertung der XPS- und RFA-Messungen und die Hilfe bei technischen Fragen,

Herrn Ao. Univ. Prof. Johann Wernisch für die Durchführung und Auswertung der ESMA-Messungen,

Meinem Bruder Herrn Dipl. -Ing. Asghar Ghassemi für die vielen wertvollen und fachlichen Diskussionen und Berechnungen.

Inhaltsverzeichnis

1.	EINLEITUNG.....	2
2.	ALLGEMEINES ZUR ELEKTRONENEMISSION AUS REINELEMENTEN.....	3
3.	BERECHNUNG DER PHOTOABSORPTIONSKOEFFIZIENTEN.....	7
3.1	ELEMENT KOHLENSTOFF (C).....	9
3.2	ELEMENT MAGNESIUM (MG).....	13
3.3	ELEMENT GERMANIUM (GE).....	18
3.4	ELEMENT EUROPIUM (Eu).....	24
3.5	ELEMENT URAN (U).....	32
4.	DIE AUSTRITTSWAHRSCHEINLICHKEIT DER ELEKTRONEN....	41
5.	ELEKTRONENAUSBEUTE.....	47
5.1	THEORIE.....	47
5.1.1	<i>Die Primäranregung in einem Reinelement in TEY (Photo- und Auger Elektronen).....</i>	<i>47</i>
5.1.2	<i>Die Sekundäranregung in der quantitativen RFA.....</i>	<i>55</i>
5.1.3	<i>Die Sekundäranregung in einem Reinelement in TEY (Photo- und Auger Elektronen).....</i>	<i>59</i>
5.1.4	<i>Die Primäranregung in einer Legierung in TEY (Photo- und Auger Elektronen).....</i>	<i>60</i>
5.1.5	<i>Die Sekundäranregung in einer Legierung in TEY (Photo- und Auger Elektronen).....</i>	<i>65</i>
5.2	BERECHNUNG DER ELEKTRONENAUSBEUTE NACH PHOTOIONISATION DES K- NIVEAUS.....	73
5.2.1	<i>Berechnung des von der Primäranregung herrührenden Anteils.....</i>	<i>73</i>
5.2.2	<i>Berechnung des von der Sekundäranregung herrührenden Anteils.....</i>	<i>76</i>
5.2.3	<i>Berechnung der gesamten Elektronenausbeute (elektron yield).....</i>	<i>78</i>
5.2.4	<i>Berechnung des von der Primäranregung herrührenden Anteils in einer Legierung.....</i>	<i>80</i>
5.2.5	<i>Berechnung des von der Sekundäranregung herrührenden Anteils in einer Legierung.....</i>	<i>82</i>
5.2.6	<i>Berechnung der gesamten Elektronenausbeute in einer Legierung.....</i>	<i>83</i>
6.	KONZENTRATIONSBESTIMMUNG.....	85
7.	SCHLUSSFOLGERUNG.....	92
8.	VERWENDETE SYMBOLE.....	94
9.	ANHANG.....	96
10.	LITERATURVERZEICHNIS.....	116

1. Einleitung

Durchgehen Röntgenstrahlen Materie, so wird deren Intensität durch Absorptionsprozesse an den Atomen geschwächt. Photoelektrische Absorption erfolgt, wenn ein Elektron eines Probenatoms aus seiner Schale entfernt wird. Die meisten dieser Photoelektronen verlieren aufgrund inelastischer Stöße auf ihrem Weg innerhalb der Probe kinetische Energie. Deswegen können nur ein Bruchteil dieser Elektronen die Probe verlassen. Neben Photoelektronen treten Auger- und Sekundärelektronen in Erscheinung.

Die Photoelektronen entstehen bei Photoionisation verschiedener Niveaus in der Probe. Daher sind viele unterschiedliche kinetische Energien zu erwarten. Auger Elektronen rühren von nicht strahlender Relaxation her. Die Sekundärelektronen entstehen durch Elektronenstoß-Prozesse und liefern einen verhältnismässig hohen Beitrag zum TEY-Signal.

Die aus der Probe emittierten Elektronen werden unter Vakuumbedingungen durch einen Elektronendetektor (channeltron) erfasst.

Bei der qualitativen Analyse einer Probe mittels TEY wird die Energie der Röntgenstrahlung von unterhalb bis oberhalb einer Absorptionskante des gegebenen Elements variiert. Ist dieses Element in der Probe vorhanden, so beobachtet man einen sprunghaften Anstieg des TEY-Signals.

Bei der quantitativen Analyse wird aus der Höhe dieser Zunahme die Konzentration des Elements in der Probe errechnet. Die Stärke des Anstieges ist abhängig von der Röntgenstrahlung, der Fluoreszenzausbeute, dem Photoabsorptionskoeffizienten, dem Absorptionskantensprung und der chemischen Zusammensetzung der untersuchten Probe.

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit den theoretischen Grundlagen und der Entwicklung eines Rechenprogramms für die quantitative Oberflächenanalytik mittels TEY (Total Electron Yield).

2. Allgemeines zur Elektronenemission aus Reinelementen

Die nachfolgenden Ausführungen dienen zur Einführung in die Entwicklung eines Rechenprogramms, das die gesamte Austrittswahrscheinlichkeit $p_{i,ges}$ von Elektronen aus kompakten, homogenen Reinelement-Proben ($Z=10$ bis $Z=50$) mit ebenen Oberflächen bei Beschuß mit monochromatischen Röntgenquanten zu berechnen gestattet.

Die Quantenenergie wird dabei von knapp unterhalb bis knapp oberhalb der K-Kante des jeweiligen Elements variiert.

Das Eindringen der Röntgenquanten in die Probe führt zu einer Elektronenemission, die hauptsächlich durch Photoionisation und Auger-Effekt zustande kommt. Durch Photoabsorption eines Röntgenquants wird ein Elektron aus seiner Schale j herausgeschlagen und verläßt das Atom. Die Leerstelle in der Schale j kann unter Emission eines charakteristischen Photons oder strahlungslos durch einen Elektronenübergang von einer höheren Schale k aufgefüllt werden. Die Fluoreszenzausbeute ω_j beschreibt den Prozentsatz der Emission eines charakteristischen Photons und die Auger-Elektronenausbeute a_{ij} jenen Prozentsatz für einen strahlungslosen Übergang, der zur Emission eines Auger-Elektrons führt.

Es gilt

$$a_{ij} = 1 - \omega_j \quad (2.1)$$

wobei das Element durch den Index i und die Schale durch den Index j gekennzeichnet werden.

Die Elektronen werden entweder primär durch die eintretenden Röntgenquanten oder sekundär durch charakteristische K-, und L-Strahlungen des jeweiligen Elements ausgelöst. Unter Berücksichtigung der Auger Elektronenausbeuten a_{ij} und der Übergangswahrscheinlichkeit p_{ijk} der K-Strahlungen - i Element, j Schale mit Vakanz (im konkreten Fall steht j für die K-Schale), k Schale aus der die Vakanz in j aufgefüllt wird - sollen dann die Austrittswahrscheinlichkeiten der Elektronen sowohl bei Primär- als auch bei Sekundäranregung berechnet werden.

Die so ausgelösten Elektronen verlieren im Festkörperverband durch inelastische Stöße einen Teil oder ihre gesamte ursprüngliche Energie. Durch diesen Energieverlust ist nur ein Bruchteil der Elektronen imstande, den Festkörperverband zu verlassen.

Im Rechenprogramm werden zuerst die Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,i}$ und $\tau_{E,ij}$ für eine Quantenenergie E des Elements i über alle Elektronenniveaus bzw. für die einzelnen Elektronenniveaus j für die einfallende und für charakteristische Röntgenstrahlungen berechnet. Abb. 2.1 zeigt die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,i}$ (voll gezeichneter Verlauf) und $\tau_{E,ij}$ für Cu im Quantenenergiebereich von 1 bis 300 keV.

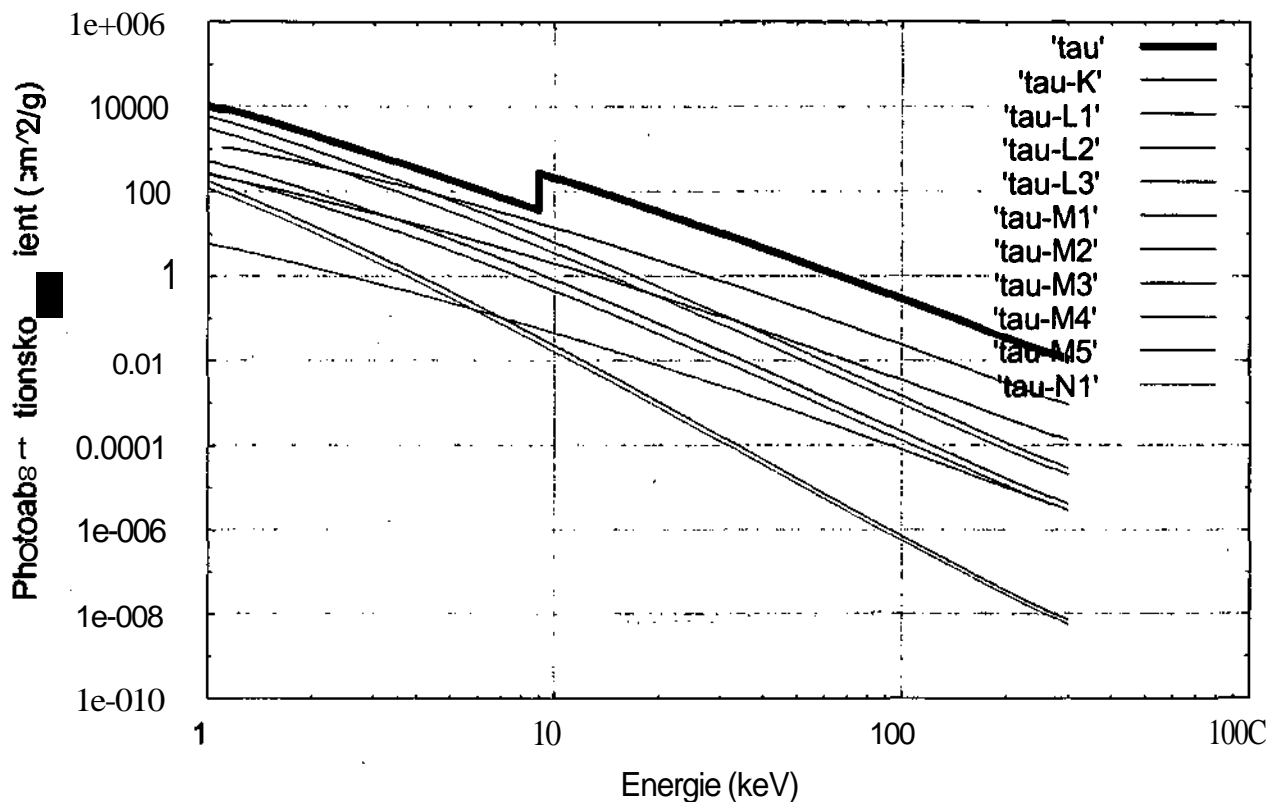


Abb. 2.1: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,i}$ und $\tau_{E,j}$ für Cu

Im Falle der Primäranregung wird die Schwächung der einfallenden Röntgenquanten mittels des Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,i}$ berechnet und aus dem photoelektrischen Absorptionskoeffizienten $\tau_{E,j}$ einer bestimmten Schale die Wahrscheinlichkeit für die Auslösung eines Photoelektrons aus derselben bestimmt. Die kinetische Startenergie E_{kin} des Photoelektrons errechnet sich aus der Einstein-Gleichung

$$E_{kin,E,i,j} = E - E_{B,i,j} \quad (2.2)$$

$E = h\nu \dots$ Energie des Röntgenquants

$E_{B,i,j} \dots$ Bindungsenergie eines Elektrons in der Schale j des Elements i

Die Austrittswahrscheinlichkeit $P_i(x)$ für ein Elektron, das sich in eine beliebige Richtung bewegt, hängt vom chemischen Element, seiner kinetischen Energie und der Tiefe x, bezogen auf die Probenoberfläche ab [2].

Abb. 2.2 zeigt für Elektronen mit einer kinetischen Energie von 5 keV im Element Kupfer (Cu, Z = 29) die Austrittswahrscheinlichkeit $P_i(x)$ in Abhängigkeit von der Probtiefe x in einen Kegel mit dem Öffnungswinkel von $+20^\circ$.

Da die Elektronen, wie bereits erwähnt, Energie beim Durchlaufen des Festkörpers verlieren, erreichen nur verhältnismäßig wenige die Probenoberfläche.

Die Austrittswahrscheinlichkeit wurde mit Hilfe eines Monte Carlo Programms berechnet

Bei dem verwendeten Rechenmodell sind nur elastische und inelastische Stoßprozesse beinhaltet. Die Auslösung von niederenergetischen Sekundärelektronen ist nicht eingeschlossen. Aus diesem Grunde werden hier nur jene Elektronen in die Rechnung **einbezogen**, deren Energie beim Verlassen der Festkörperoberfläche größer als 0.05 keV ist.

Experimentell kann dieser Tatsache durch Anlegen eines positiven Potentials von 50 V der Probe gegenüber dem Erdpotential (oder dem Detektoreingang) Rechnung getragen werden.

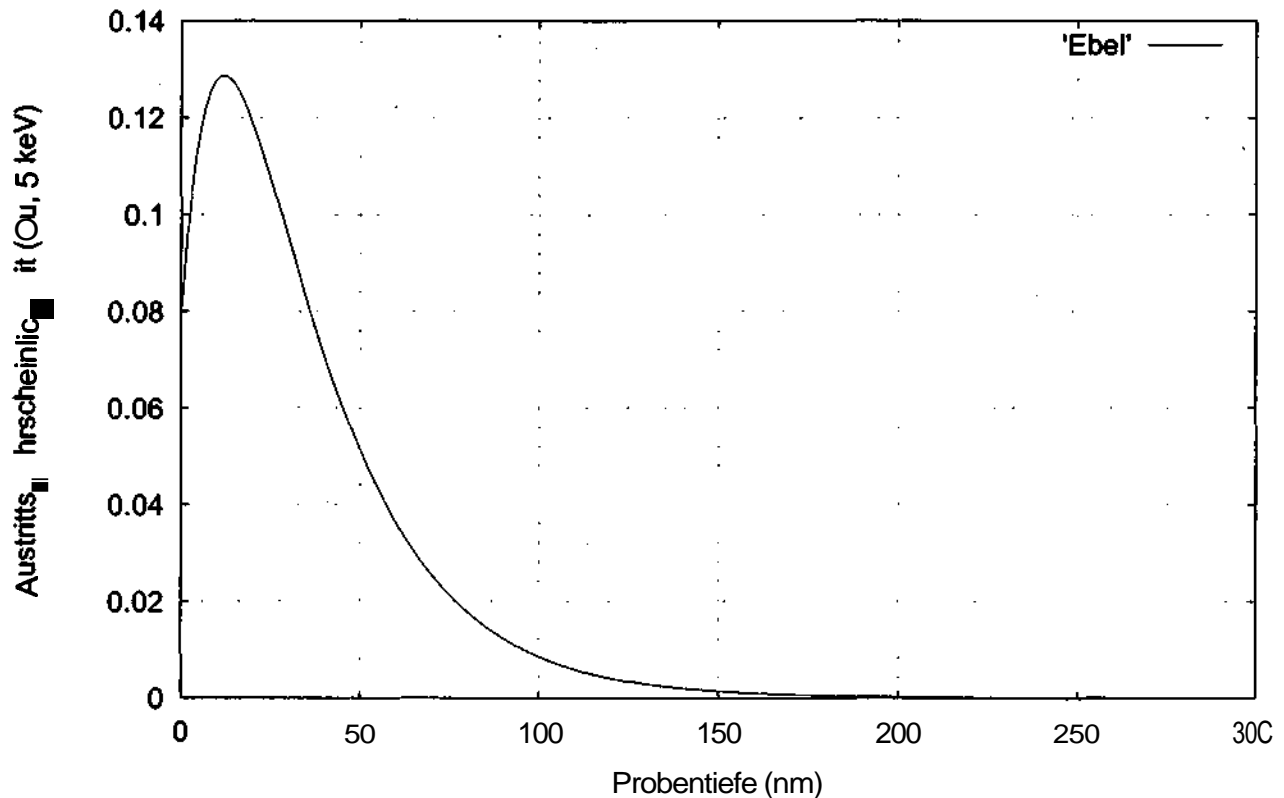


Abb. 2.2: Die Austrittswahrscheinlichkeit der Elektronen für Cu

Nach der Photoionisation können im Verlaufe der Rückkehr des ionisierten Atoms in den Grundzustand charakteristische Röntgenstrahlungen und Auger-Elektronen emittiert werden. Diese Prozesse werden noch ausführlich behandelt werden.

Im Falle der Sekundäranregung wird ein Elektron einer kernferneren Schale des betrachteten Elements durch photoelektrische Absorption charakteristischer $K\alpha$ - und $K\beta$ -Strahlungen aus einem benachbarten Atom herausgeschlagen.

Mit den in der vorliegenden Arbeit entwickelten theoretischen Grundlagen und dem auf diesen aufbauenden Computeralgorithmus kann dann beispielsweise der im Bereich der K-Kante experimentell zu beobachtende sprunghafte Anstieg der Elektronenemission in Abhängigkeit von der Ordnungszahl berechnet werden. In der Abbildung 2.3 wird die Elektronenausbeute (electron yield) versus Z gezeigt. Wird die Elektronenausbeute mit der Anzahl der je Sekunde auf die Probe auftreffenden Röntgenquanten **multipliziert**, so

erhält man die Anzahl der Elektronen, die je Sekunde die Probenoberfläche innerhalb des **Detektionsraumwinkels** mit einer Energie grosser als 0.05 keV verlassen

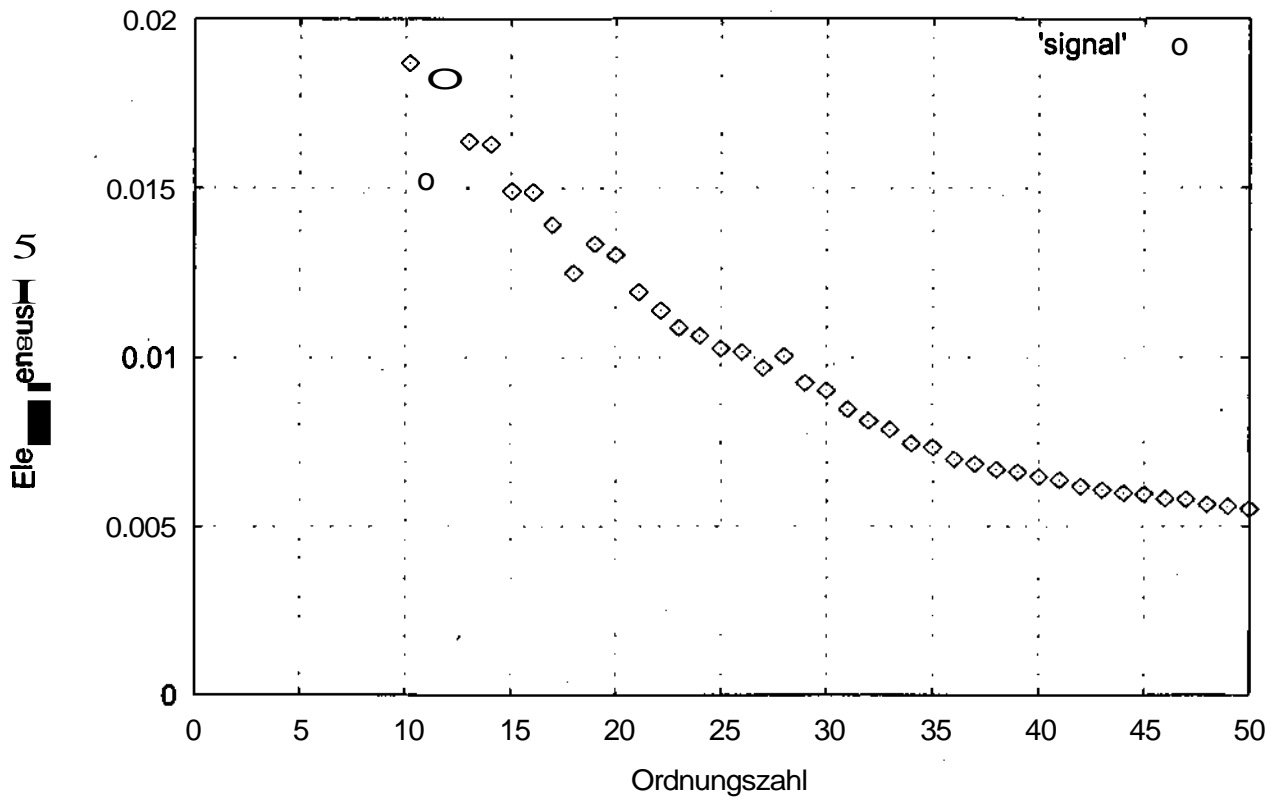


Abb. 2.3: Die gesamte Wahrscheinlichkeit der Elektronenemission für eine Quantenenergie knapp oberhalb der K-Kante (0.0001 keV)

3. Berechnung der Photoabsorptionskoeffizienten

Um die Berechnung und graphische Darstellung der Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ für die einzelnen Elemente i , Elektronenniveaus j und $\tau_{E,i}$ in sämtlichen Bereichen durchzuführen, werden die Kantenenergiewerte und die aus den Scofield-Dateien [11] erarbeiteten least squares fit-Koeffizienten a_0, a_1, \dots, a_5 5. Ordnung verwendet.

Die Isf-Koeffizienten a_0, a_1, \dots, a_5 für Photoabsorptionskoeffizienten gelten von der zugehörigen Absorptionskante bis 300 keV.

Unter Verwendung dieser Isf-Koeffizienten a_0, a_1, \dots, a_5 in der Gleichung einer Parabel 5. Ordnung

$$parabel_{ij} = a_0 \cdot (\log(e))^0 + a_1 \cdot (\log(e))^1 + a_2 \cdot (\log(e))^2 + a_3 \cdot (\log(e))^3 + a_4 \cdot (\log(e))^4 + a_5 \cdot (\log(e))^5 \quad (3.1)$$

a_0 - a_5 Die Isf-Koeffizienten
 e Die Quantenenergie

werden die Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ im Programm durch die folgende Gleichung berechnet [1].

$$\tau_{E,ij} = e^{parabel_{ij}} \quad (3.2)$$

Um die Photoabsorptionskoeffizienten TEJ zu berechnen, werden die berechneten Scofield-Kurven für tau-Werte der einzelnen Schalen bei der vorgegebenen Energie E der Röntgenquanten aufsummiert.

$$\tau_{E,i} = \sum_j e^{parabel_{ij}} \quad (3.3)$$

Die notwendigen Kantenenergien zur Berechnung der Photoabsorptionskoeffizienten sind in den verwendeten Dateien enthalten.

Die Dateien enthalten das Element-Symbol, die Ordnungszahl, das Atomgewicht und die Dichte des Elements. Dann stehen die Isf-Koeffizienten der kohärenten und der inkohärenten Streukoeffizienten. Es folgen dann die Kanten-Symbole, Energie, Kanten-Sprünge und Isf-Koeffizienten a_0, a_1, \dots, a_5 der jeweiligen Schalen und schließlich am Ende die Isf-Koeffizienten für den K-, L-, M- und N-Bereich des jeweiligen Elements, die über die globalen Energiebereiche K, L, M und N Gültigkeit besitzen [19].

Zum besseren Verständnis der hier getroffenen Aussagen werden die Elemente Kohlenstoff (C, $Z = 6$), Magnesium (Mg, $Z = 12$), Germanium (Ge, $Z = 32$), Europium (Eu, $Z = 63$) und Uran (U, $Z = 92$) als Beispiel gewählt.

Zuerst werden zur Berechnung der Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ und $\tau_{E,i}$ für die genannten Elemente die zugehörigen Dateien C.mu, Mg.mu, Ge.mu, Eu.mu und U.mu vorgestellt und danach werden die berechneten Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ und $\tau_{E,i}$ des jeweiligen Elements graphisch dargestellt. Die Dateien können auch im Internet aufgerufen werden [19].

Zum Zweck eines Vergleiches zwischen den Originaldaten von Scofield und der Approximation wird der relative Fehler zwischen den beiden Datensätzen berechnet.

$$\delta_{rel.} = \frac{\tau_{appr} - \tau_{Scof}}{\tau_{Scof}} \cdot 100 \quad (3.4)$$

Die einzelnen Werte des relativen Fehlers werden dann über $\log(E)$ in sämtlichen Bereichen der Quantenenergie graphisch dargestellt.

3.1 Element Kohlenstoff (C)

Tabelle 3.1 zeigt die Datei C.mu [19]. Wie bereits erwähnt, werden die Kantenenergiewerte und die aus den Scofield-Dateien [11] erarbeiteten Isf-Koeffizienten a_0, a_1, \dots, a_5 aus der C.mu-Datei eingelesen, um damit die Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ (Gleichung 3.2) unter Verwendung der Gleichung einer Parabel 5. Ordnung (Gleichung 3.1) zu berechnen.

Um die Photoabsorptionskoeffizienten TEJ zu berechnen, werden die berechneten Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ für die einzelnen Schalen aufsummiert (Gleichung 3.3) [1].

```

C   Z   A   rho
   6   12.01   1.5800E+00

C   coherent and incoherent Isf-coefficients
7.91854D-02 -7.99405D-02 -5.61046D-01 1.62800D-01 -3.08342D-02 2.20439D-03
-4.38737D+00 2.00237D+00 -5.28937D-01 4.92130D-02 8.47357D-04 -3.48693D-04

C   edge-energies edge-jumps and Isf-coefficients
K
0.2838   1.00000
7.65364E+00 -2.78741E+00 -1.37677E-01 1.96116E-02 -2.98011E-03 2.89855E-04
L1
0.0000   1.00000
4.57421E+00 -2.67634E+00 -1.79007E-01 2.92292E-02 -4.25967E-03 3.60446E-04
L2
0.0064   1.00000
4.66525E-01 -3.73811E+00 -1.18200E-01 1.05356E-02 -1.45275E-03 3.24198E-04
L3
0.0064   1.00000
1.15307E+00 -3.73074E+00 -1.36656E-01 2.07451E-02 -4.02221E-03 5.30615E-04
global data

C   Isf-coefficients of K- L- M- and N-range
7.70074E+00 -2.78442E+00 -1.38562E-01 1.97959E-02 -3.00544E-03 2.91352E-04
0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00
0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00
0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00

```

Tabelle 3.1: Die Datei C.mu zur Berechnung der Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ und TEJ für C

Die Abbildungen 3.1, 3.2, 3.3 und 3.4 zeigen die Energieabhängigkeit der Photoabsorptionskoeffizienten TEJ und $\tau_{E,ij}$ für das Element C im Quantenenergiebereich von 1 bis 300 keV.

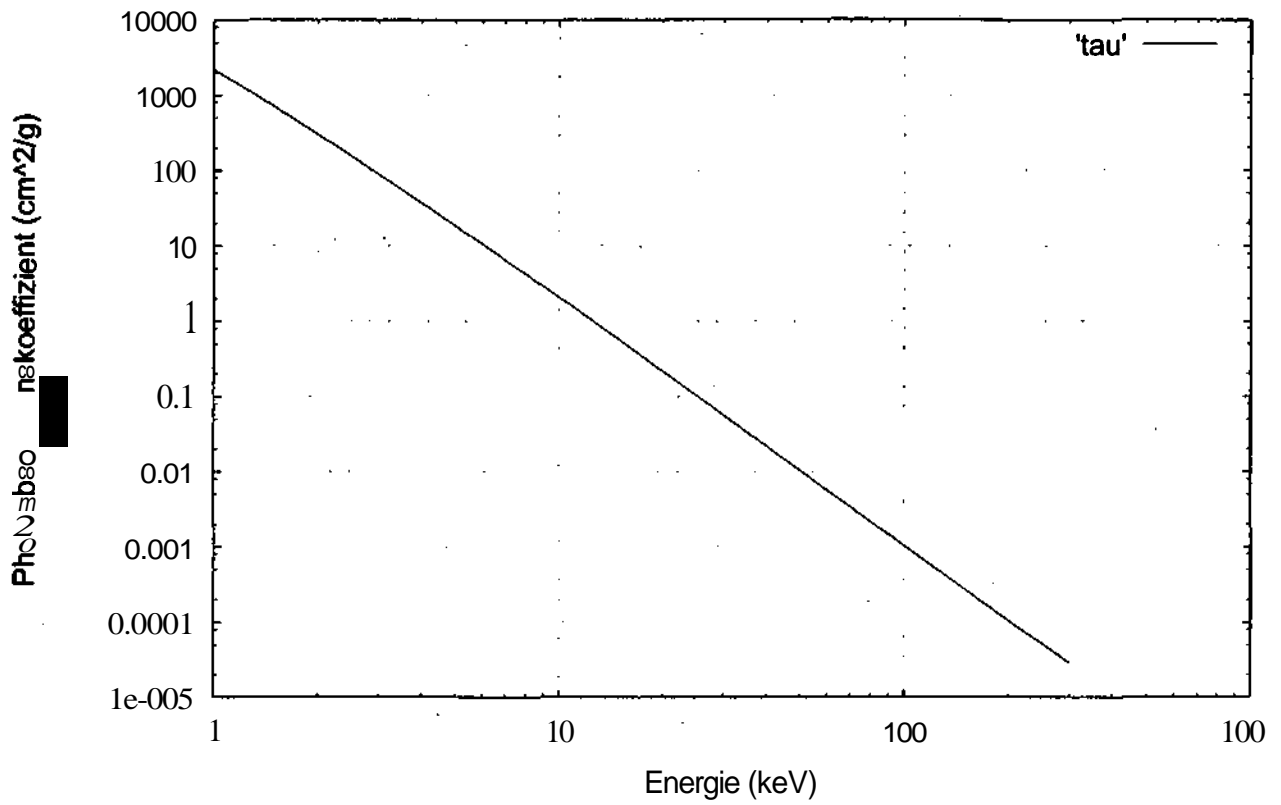


Abb. 3.1: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,C}$ für C

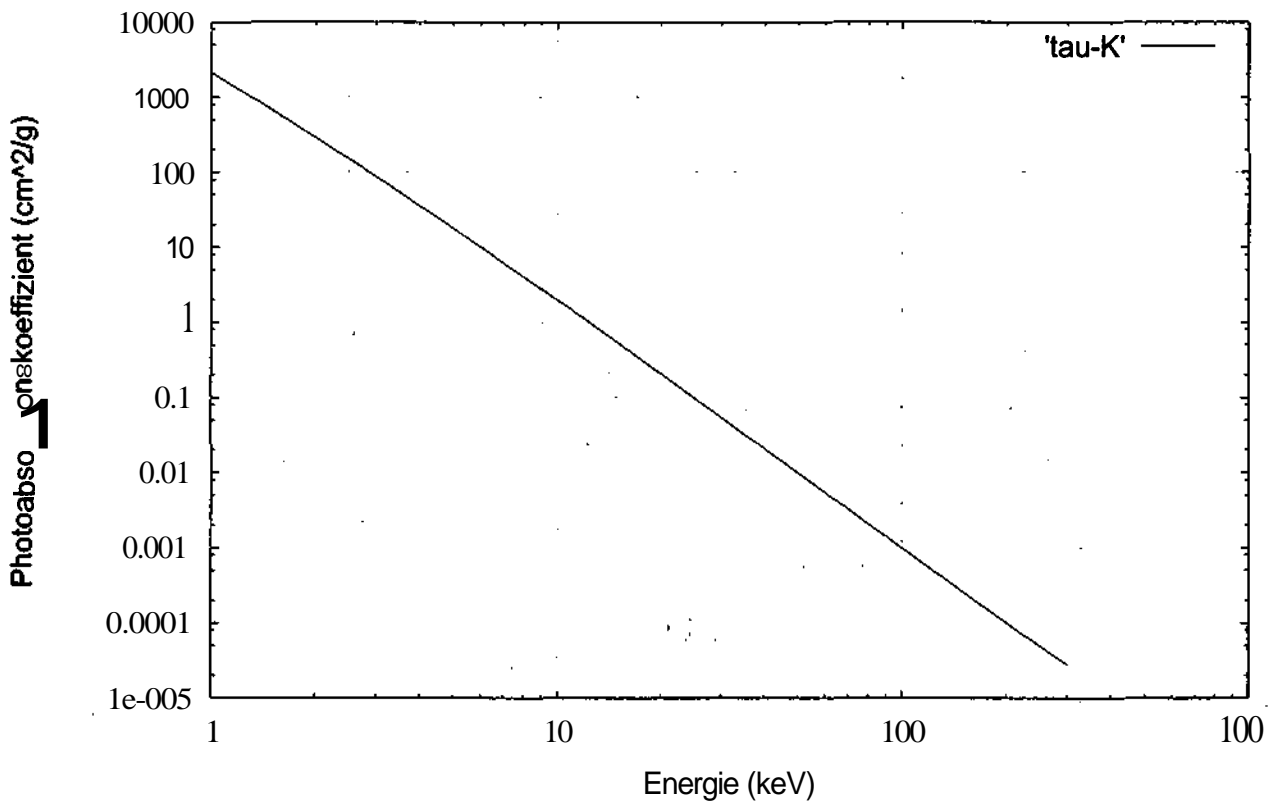


Abb. 3.2: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,C,K}$ für C

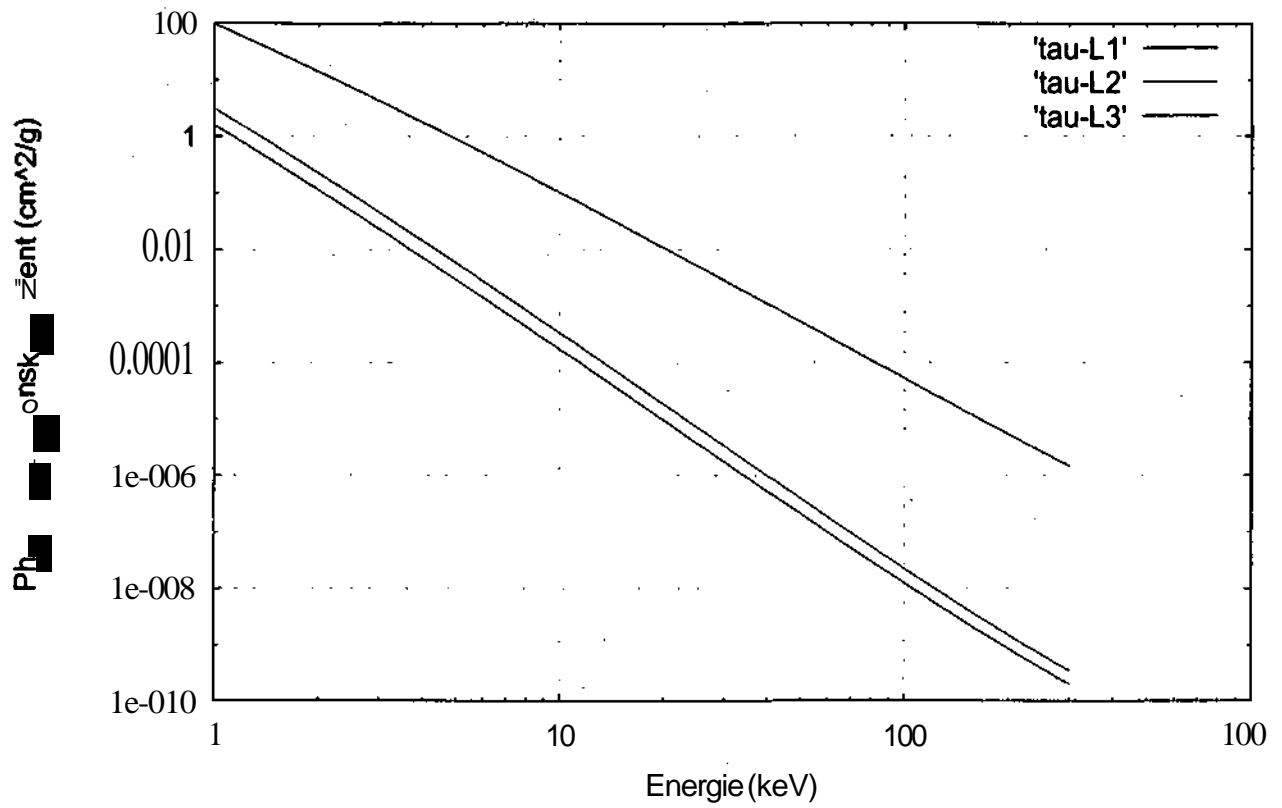


Abb. 3.3: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,CL1}$, $\tau_{E,CL2}$ und $\tau_{E,CL3}$ für C

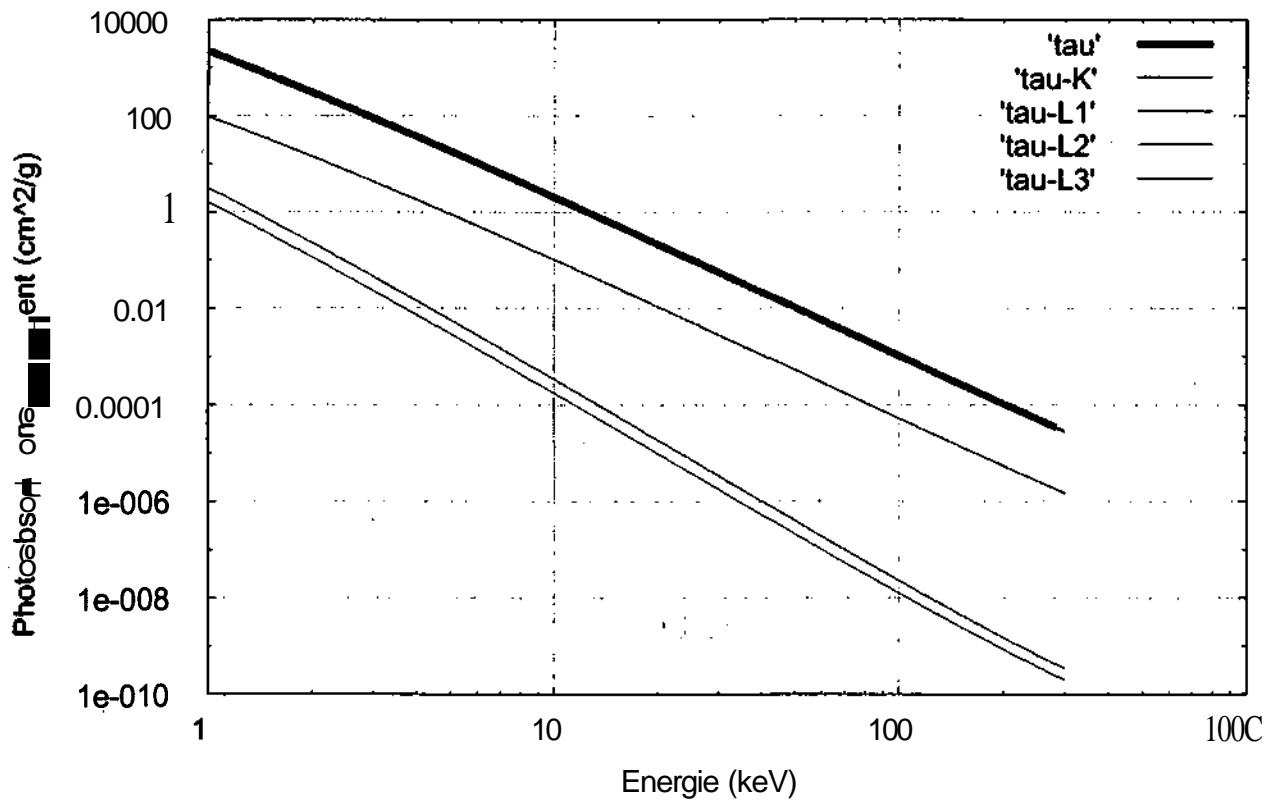


Abb. 3.4: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,C}$ und $\tau_{E,Cj}$ für C

Um den relativen Fehler zwischen **Scofield** und der Approximation zu berechnen bedienen wir uns der Gleichung 3.4 für die einzelnen **tau-Werte**.

Die einzelnen Werte des relativen Fehlers werden dann über $\log(E)$ graphisch dargestellt. Abb. 3.5 zeigt die graphische Darstellung des relativen Fehlers für das Element C.

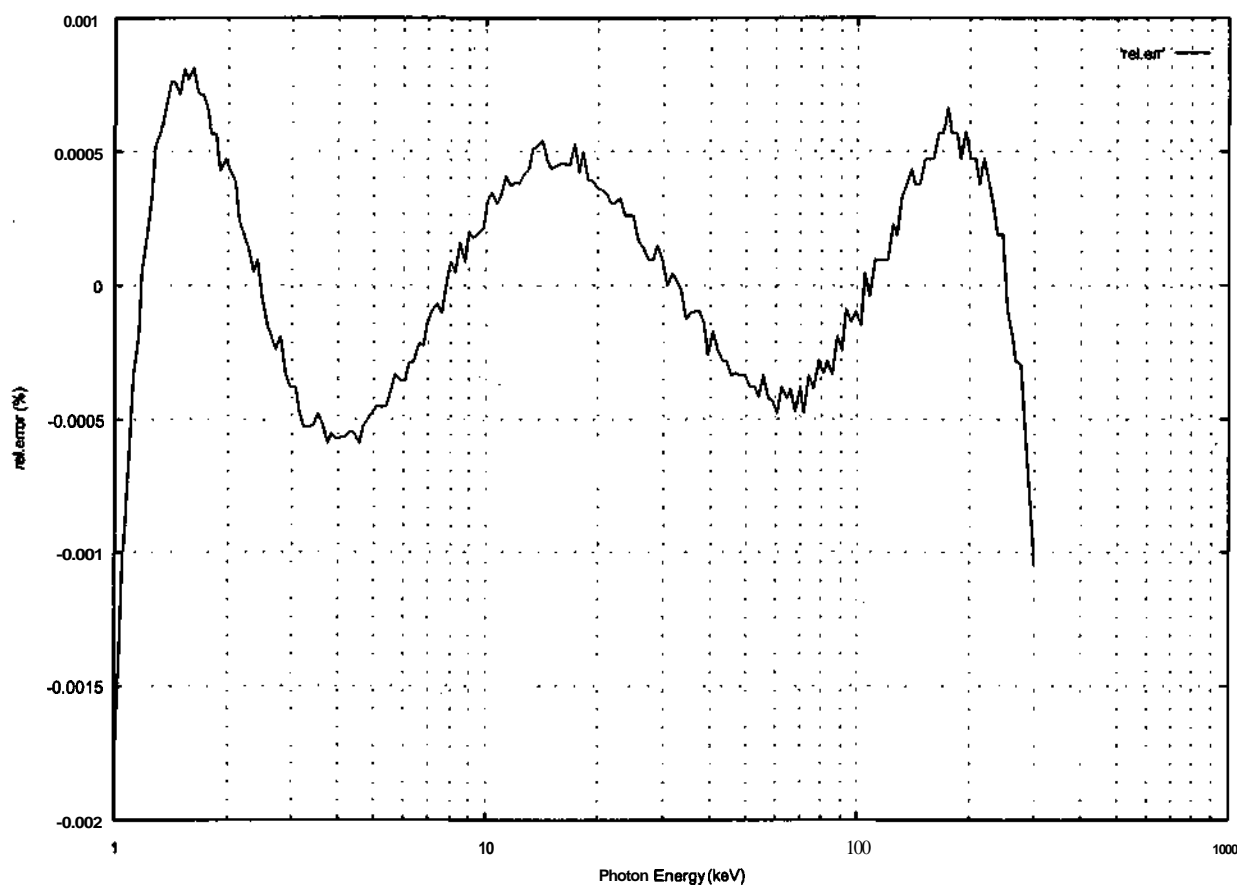


Abb. 3.5: Graphische Darstellung des relativen Fehlers über der Quantenenergie für die Beschreibung von $\tau_{E,C}$ durch eine Parabel 5. Ordnung

Wie aus der Abb. 3.5 ersichtlich ist, bewegt sich der relative Fehler im Element C für eine Berechnung der tau-Werte in allen Bereichen zwischen 0.0008 bis -0.0017 Prozent [1].

3.2 Element Magnesium (Mg)

Tabelle 3.2 zeigt die Datei **Mg.mu** [19]. Analog zur Tabelle 3.1 für das Element C werden auch hier die Kantenenergiewerte und die aus den Scofield-Dateien [11] erarbeiteten Isf-Koeffizienten a_0, a_1, \dots, a_5 aus der Mg.mu-Datei eingelesen, um damit die Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ (Gleichung 3.2) zu berechnen.

Um die Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,i}$ zu berechnen, werden die berechneten Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ für die einzelnen Schalen aufsummiert (Gleichung 3.3).

```
Mg  Z  A  rho
12  24.32  1.7400E+00
```

```
Mg  coherent and incoherent Isf-coefficients
7.54835D-01 -1.78851D-01 1.77755D-02 -1.55956D-01 3.38143D-02 -2.27470D-03
-4.14837D+00 1.10942D+00 -1.07798D-01 1.38836D-03 -4.11634D-03 5.26751D-04
```

```
Mg  edge-energies edge-jumps and Isf-coefficients
```

```
K
1.30500 12.13438
9.10694E+00 -2.07789E+00 -4.40011E-01 1.14416E-01 -1.85596E-02 1.27010E-03
```

```
L1
0.0894 1.00000
6.17826E+00 -2.21072E+00 -2.21075E-01 2.51119E-02 -3.21004E-03 3.00476E-04
```

```
L2
0.0514 1.00000
4.93686E+00 -3.21103E+00 -1.67544E-01 -3.33455E-03 3.10218E-03 -5.75950E-05
```

```
L3
0.0514 1.00000
5.61487E+00 -3.21362E+00 -1.74897E-01 1.63918E-03 1.46735E-03 8.77800E-05
```

```
M1
0.0000 1.00000
3.17976E+00 -2.22704E+00 -2.05116E-01 1.95137E-02 -2.32254E-03 2.46837E-04
```

```
global data
```

```
Mg  Isf-coefficients of K- L- M- and N-range
```

```
9.20225E+00 -2.12204E+00 -4.11959E-01 1.05586E-01 -1.72025E-02 1.18924E-03
6.82438E+00 -2.66186E+00 -7.46165E-02 -3.45611E-03 5.84869E-03 -7.76722E-03
0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00
0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00
```

Tabelle 3.2: Die Datei Mg.mu zur Berechnung der Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ und $\tau_{E,i}$ für Mg

Die Abbildungen 3.6, 3.7, 3.8, 3.9 und 3.10 zeigen die Energieabhängigkeit der Photoabsorptionskoeffizienten $T_{E,J}$ und $\tau_{E,ij}$ für das Element Mg im Quantenenergiebereich von 1 bis 300 keV.

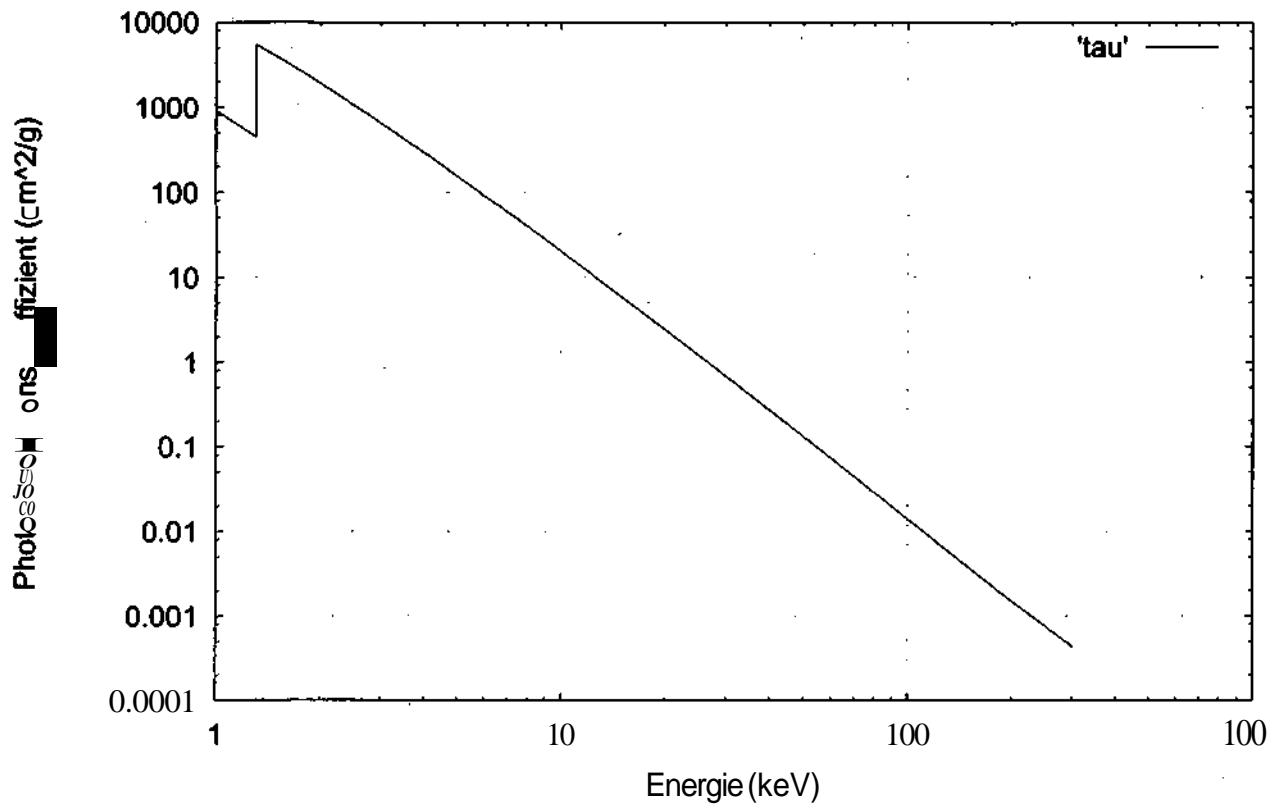


Abb. 3.6: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,Mg}$ für Mg

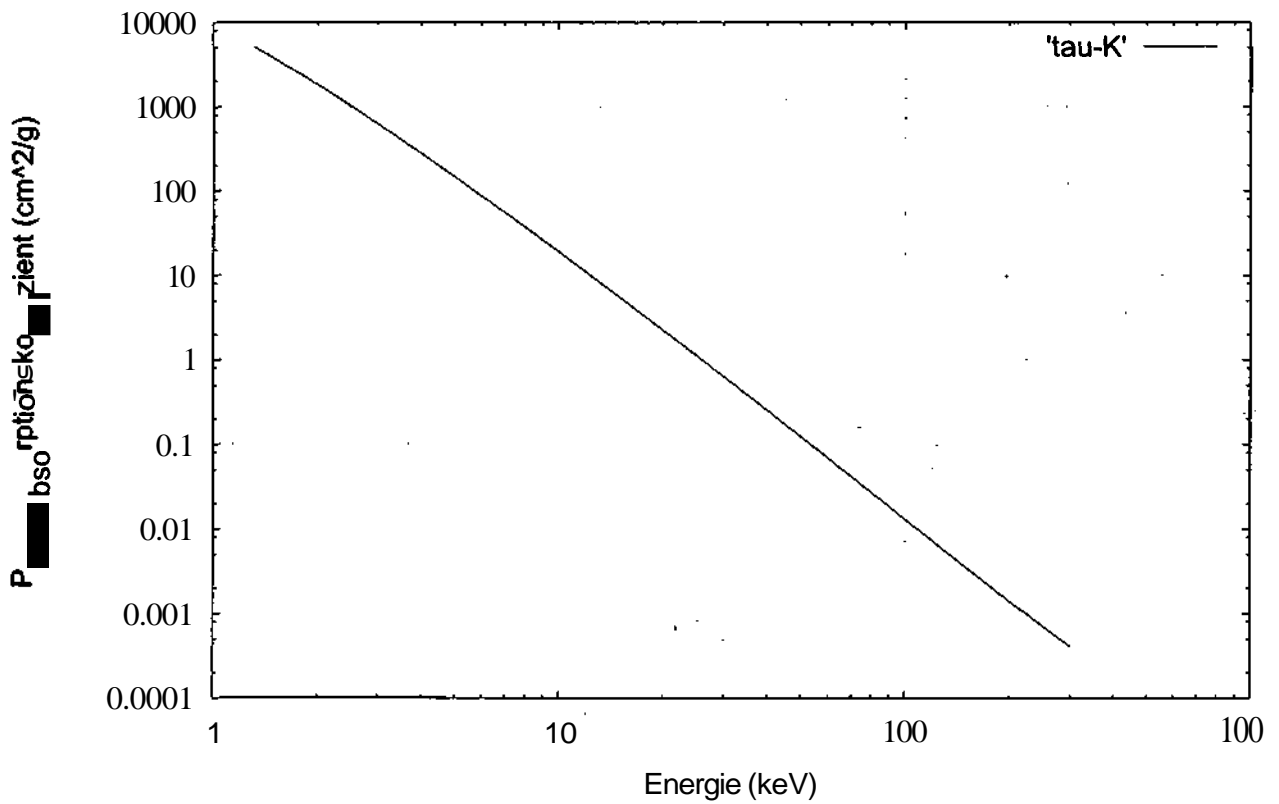


Abb. 3.7: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,MgK}$ für Mg

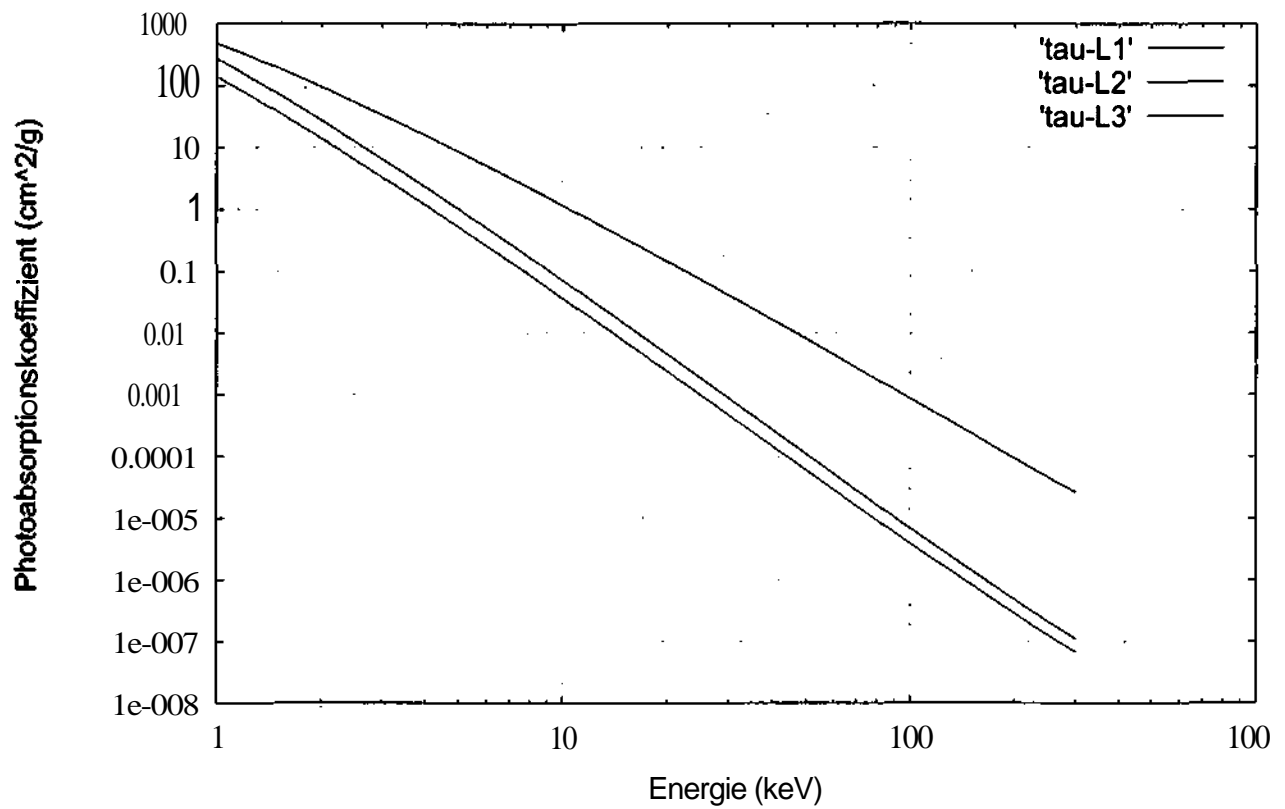


Abb. 3.8: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,MgL1}$, $\tau_{E,MgL2}$ und $\tau_{E,MgL3}$ für Mg

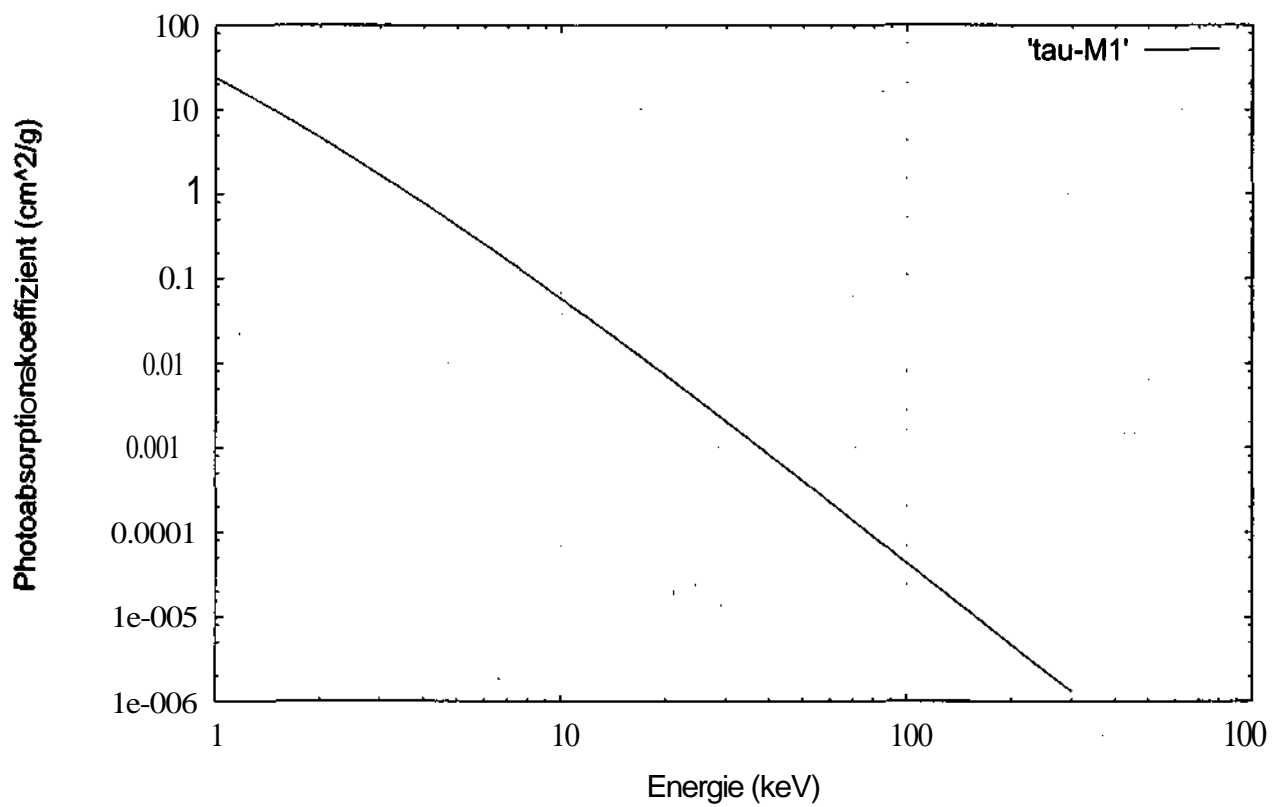


Abb. 3.9: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,MgM1}$ für Mg

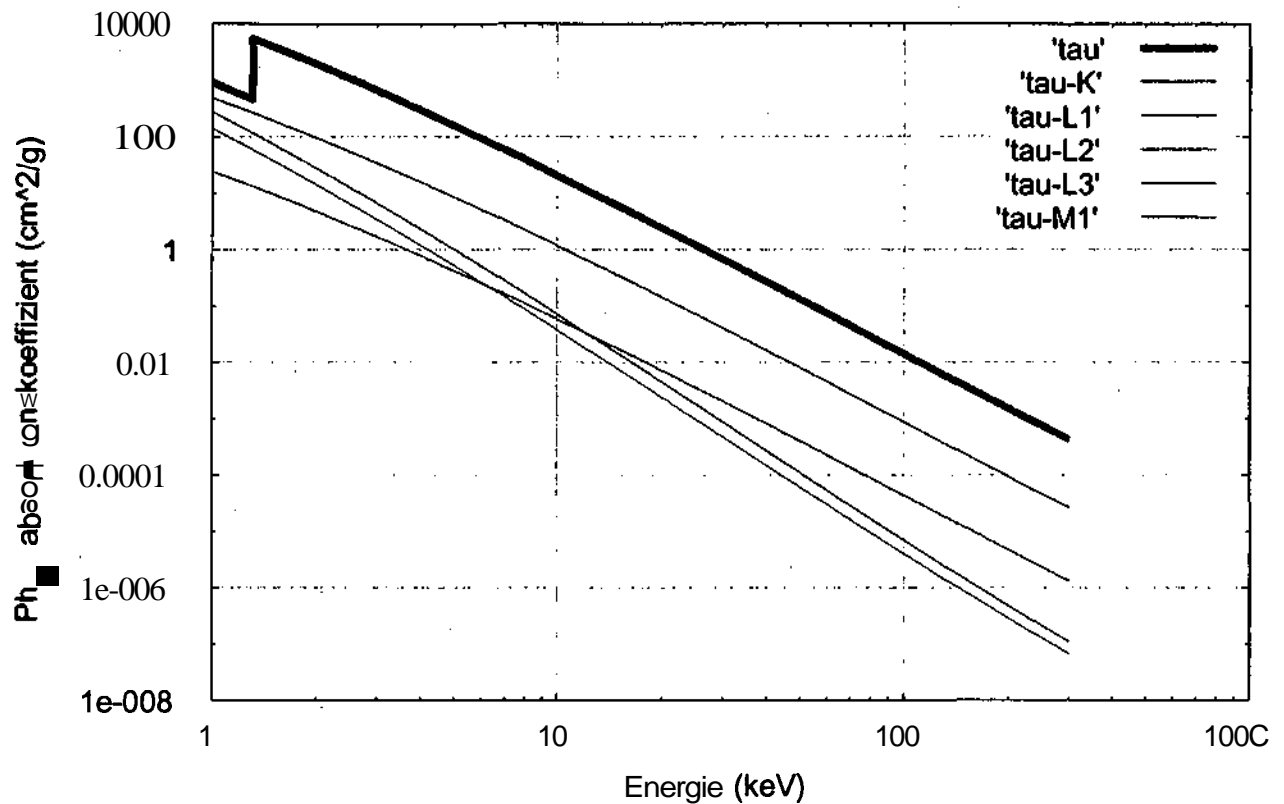


Abb. 3.10: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,Mg}$ und $\tau_{E,Mgj}$ für Mg

Wir bedienen uns wieder der Gleichung 3.4, um den relativen Fehler zwischen Scofield und der Approximation für die einzelnen **tau-Werte** zu berechnen.

Die einzelnen Werte des relativen Fehlers zwischen Scofield und der Approximation für das Element Mg werden dann über $\log(E)$ in den sämtlichen Bereichen dargestellt. Abb. 3.11 zeigt den relativen Fehler zwischen Scofield und der Approximation für das Element Mg.

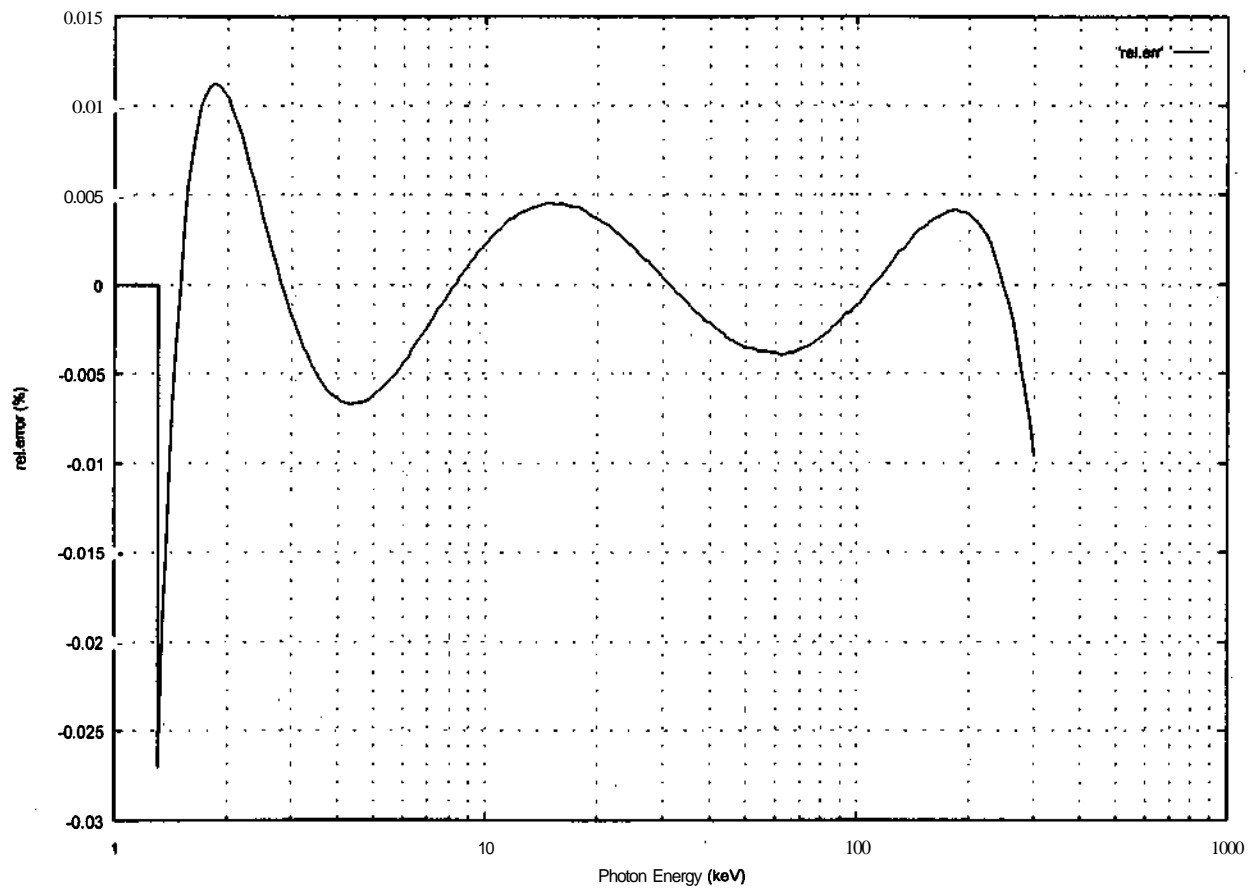


Abb. 3.11: Graphische Darstellung des relativen Fehlers über der Quantenenergie für die Beschreibung von $\tau_{E,Mg}$ durch eine Parabel 5. Ordnung

Wie aus der Abb. 3.11 ersichtlich ist, bewegt sich der relative Fehler im Element Mg für eine Berechnung der tau-Werte in allen Bereichen zwischen 0.011 bis -0.027 Prozent [1].

3.3 Element Germanium (Ge)

Tabelle 3.3 zeigt die Datei Ge.mu [19]. Die Kantenenergiwerte und die aus den Scofield-Dateien [11] erarbeiteten Isf-Koeffizienten a_0, a_1, \dots, a_5 werden aus der Datei Ge.mu eingelesen, um damit die Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ (Gleichung 3.2) zu berechnen.

Um die Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,i}$ zu berechnen, werden die berechneten Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ für die einzelnen Schalen (Gleichung 3.3) aufsummiert.

```
Ge  Z  A  rho
32  72.59  5.3230E+00
```

```
Ge  coherent and incoherent Isf-coefficients
1.67150D+00 -1.19408D-01 2.08657D-02 -1.38114D-01 2.82575D-02 -1.82226D-03
-5.07909D+00 1.62791D+00 -3.77200D-01 8.99987D-02 -1.77735D-02 1.29234D-03
```

```
Ge  edge-energies edge-jumps and Isf-coefficients
```

```
K
11.10310 7.41591
6.27893E+00 3.58940E+00 -2.93809E+00 7.08701E-01 -8.99493E-02 4.66870E-03
L1
1.41430 1.13496
7.03111E+00 -1.01945E+00 -5.39112E-01 1.15582E-01 -1.84059E-02 1.27061E-03
L2
1.24780 1.37490
7.99003E+00 -1.60736E+00 -9.65152E-01 3.06039E-01 -5.43964E-02 3.84870E-03
L3
1.21670 4.63967
8.79843E+00 -2.05354E+00 -5.81994E-01 1.53894E-01 -2.75188E-02 2.07589E-03
M1
0.1800 1.00000
5.62568E+00 -1.68210E+00 -1.76325E-01 1.58932E-02 -4.62887E-03 5.10703E-04
M2
0.1279 1.00000
5.79733E+00 -2.01823E+00 -3.56613E-01 4.11455E-02 -5.59294E-03 5.76417E-04
M3
0.1208 1.00000
6.46425E+00 -2.04746E+00 -3.64483E-01 4.72033E-02 -7.52562E-03 7.39740E-04
M4
0.0287 1.00000
5.49502E+00 -3.20522E+00 -2.76673E-01 1.05959E-02 9.34708E-04 1.58028E-04
M5
0.0287 1.00000
5.87470E+00 -3.21375E+00 -2.81073E-01 1.38638E-02 -5.19398E-04 3.16658E-04
N1
0.0000 1.00000
3.25828E+00 -1.76999E+00 -1.22874E-01 1.73438E-04 -2.38854E-03 3.87117E-04
```

```

N2
0.0000 1.00000
1.66922E+00 -2.05405E+00 -3.01939E-01 1.68886E-02 -1.03182E-03 2.63746E-04
N3
0.0000 1.00000
2.32226E+00 -2.07285E+00 -3.32156E-01 3.44617E-02 -5.30895E-03 5.95726E-04
global data

```

```

Ge Isf-coefficients of K- L- M- and N-range
7.16975E+00 2.74347E+00 -2.55653E+00 6.20935E-01 -7.97782E-02 4.19744E-03
9.48127E+00 -2.11297E+00 -1.57966E-01 -1.62041E-01 1.03153E-01 -1.74082E-02
7.54411E+00 -2.35389E+00 -1.27728E-01 1.33092E-02 -2.51376E-02 2.00599E-02
0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00

```

Tabelle 3.3: Die Datei **Ge.mu** zur Berechnung der Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ und $\tau_{E,i}$ für Ge

Die Abbildungen 3.12, 3.13, 3.14, 3.15, 3.16 und 3.17 zeigen die Energieabhängigkeit der Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,i}$ und $\tau_{E,ij}$ für das Element Ge im Quantenenergiebereich von 1 bis 300 keV.

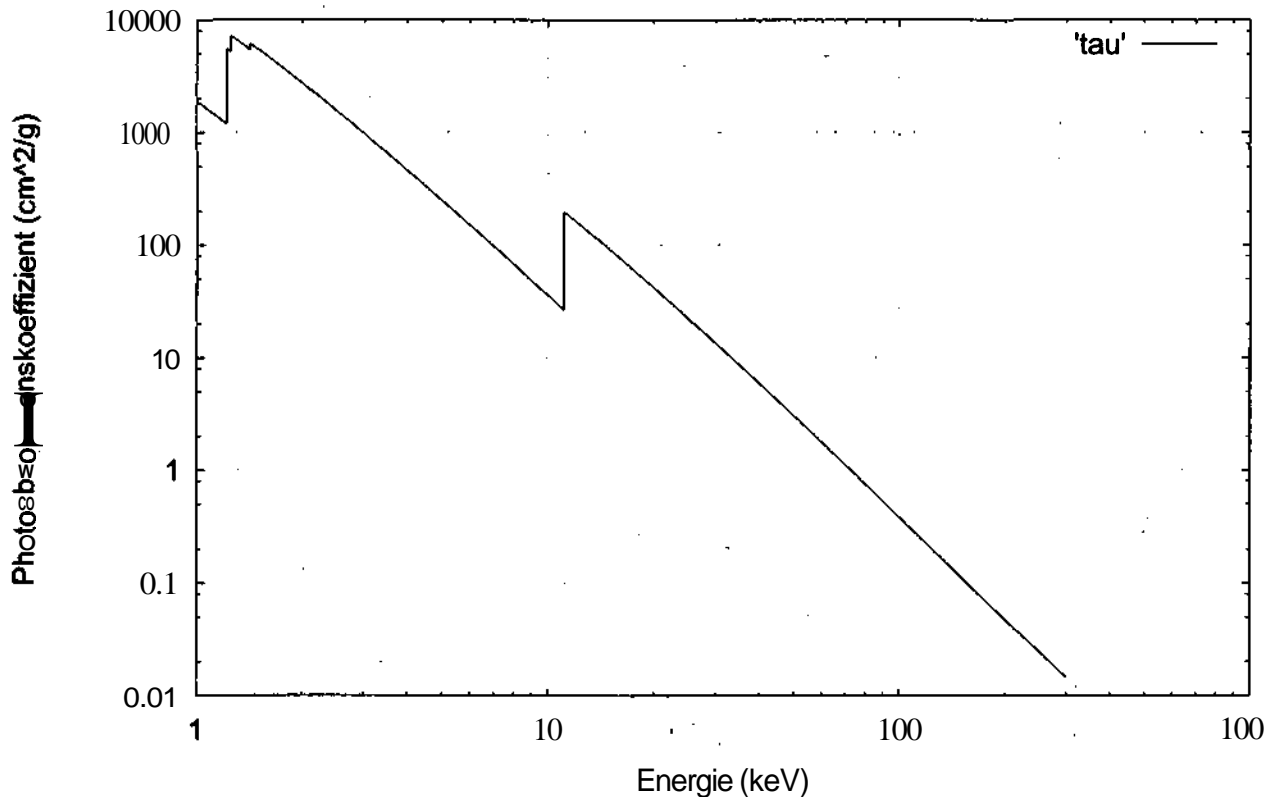


Abb. 3.12: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,Ge}$ für Ge

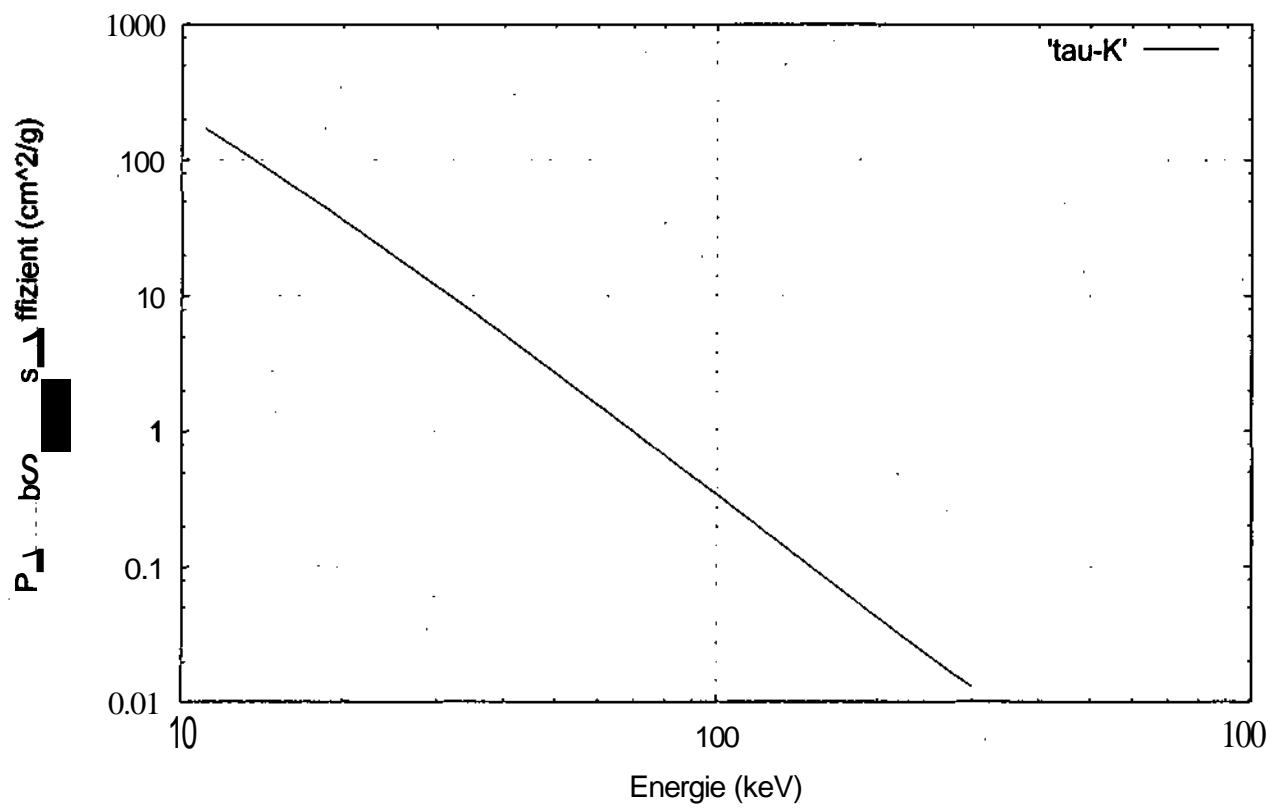


Abb. 3.13: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,GeK}$ für Ge

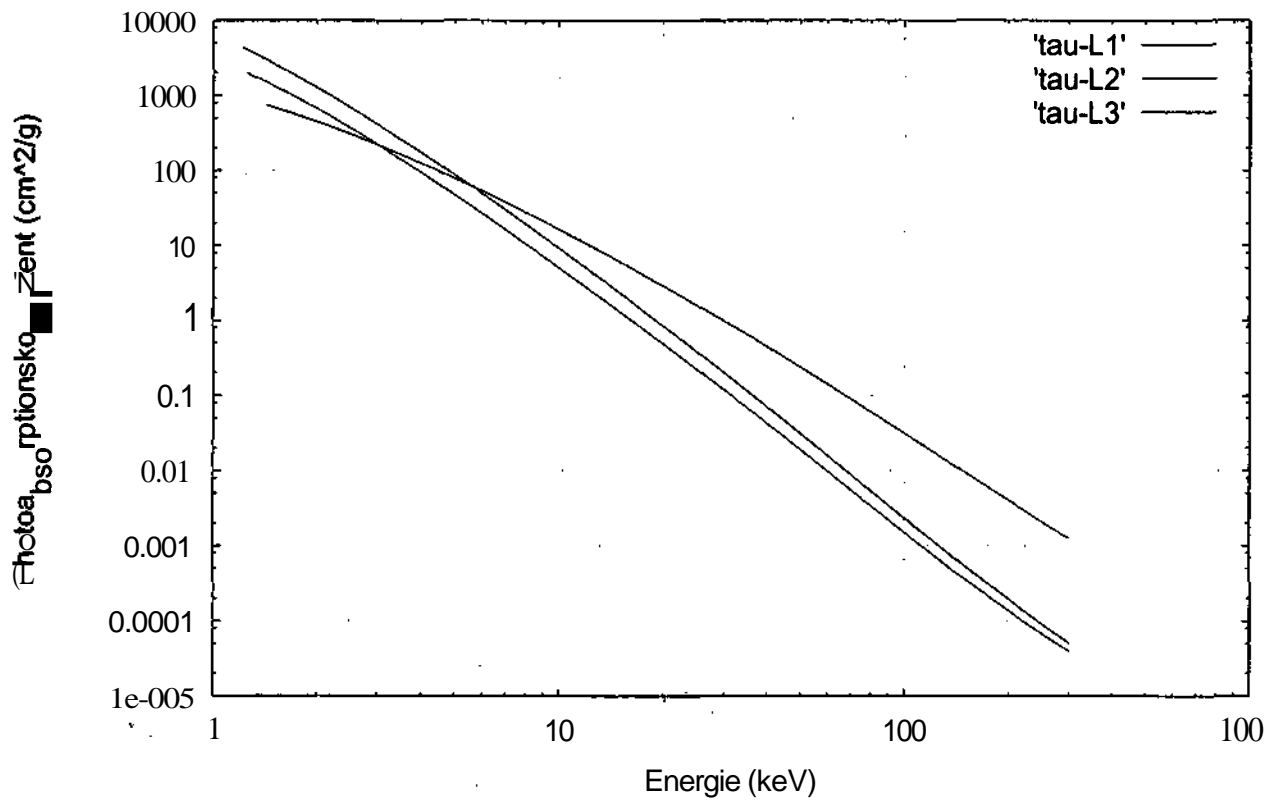


Abb. 3.14: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,GeL1}$, $\tau_{E,GeL2}$ und $\tau_{E,GeL3}$ für Ge

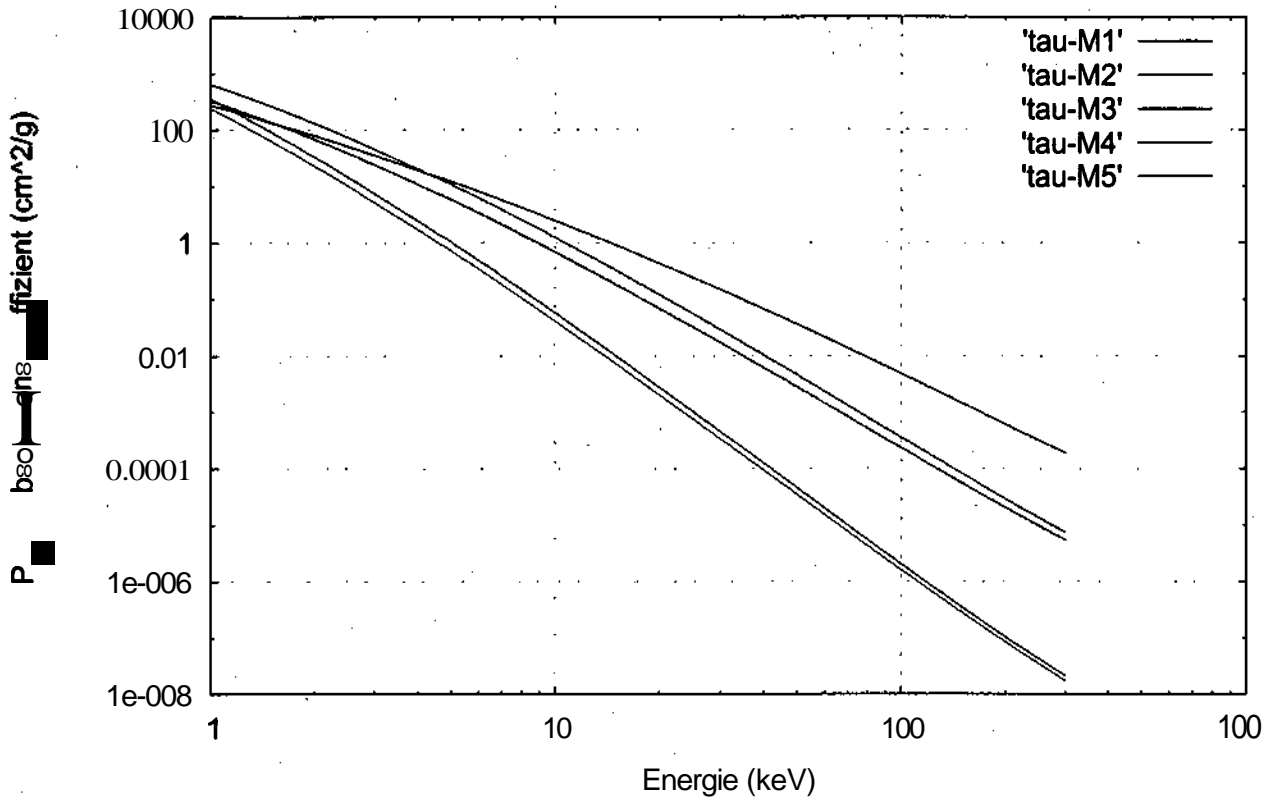


Abb. 3.15: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,GeM1}, \dots, \tau_{E,GeM5}$ für Ge

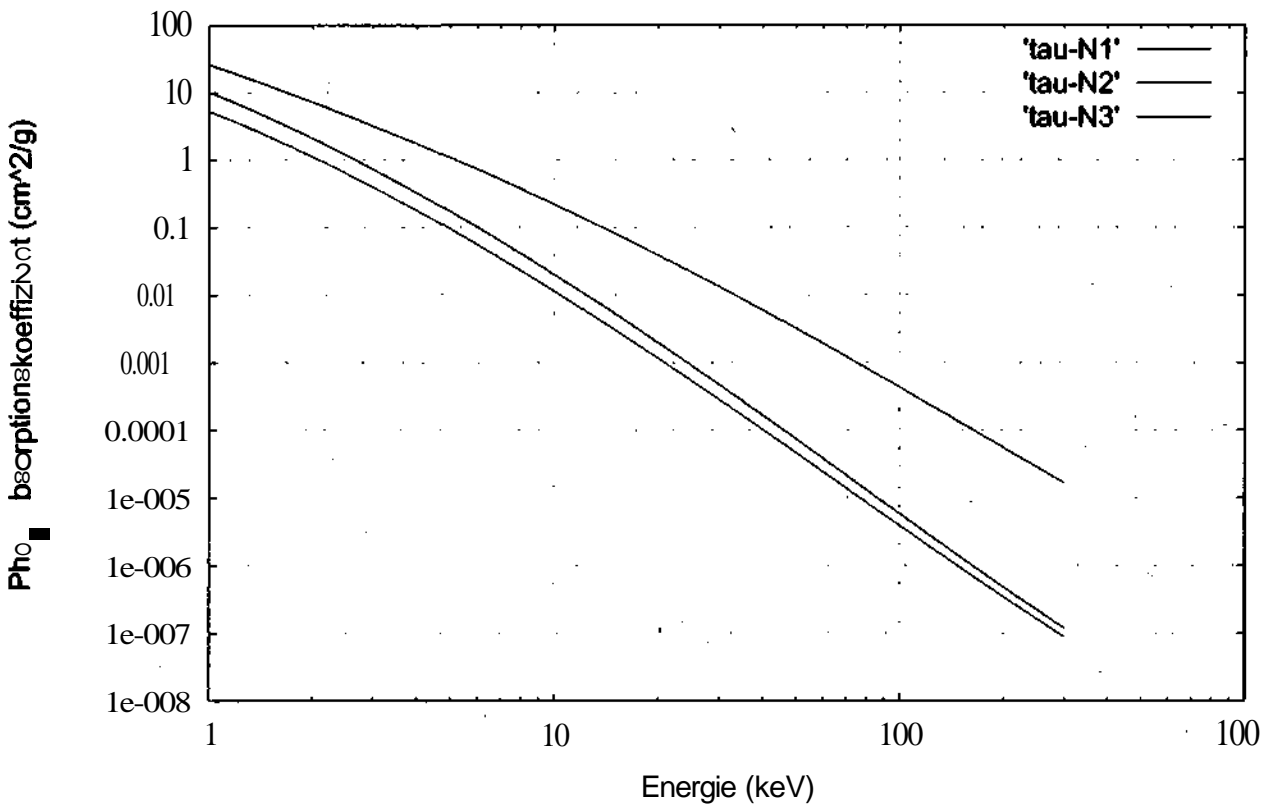


Abb. 3.16: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,GeN1}, \tau_{E,GeN2}$ und $\tau_{E,GeN3}$ für Ge

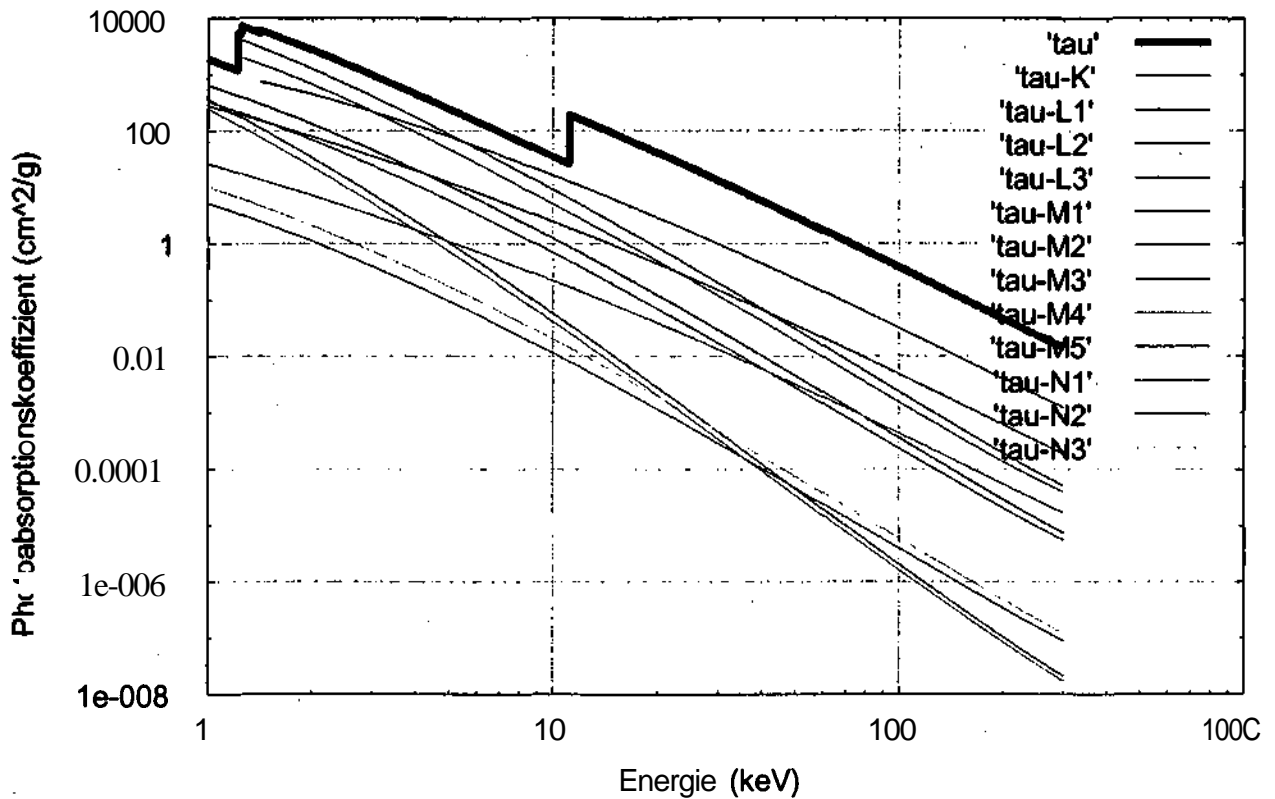


Abb. 3.17: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,Ge}$ und $\tau_{E,Gej}$ für Ge

Wir bedienen uns wieder der Gleichung 3.4, um den relativen Fehler zwischen Scofield und der Approximation für die einzelnen **tau-Werte** zu berechnen.

Die einzelnen Werte des relativen Fehlers zwischen Scofield und der erfolgten Approximation für das Element Ge werden dann über $\log(E)$ dargestellt. Abb. 3.18 zeigt die graphische Darstellung des relativen Fehlers zwischen Scofield und der Approximation für das Element Ge.

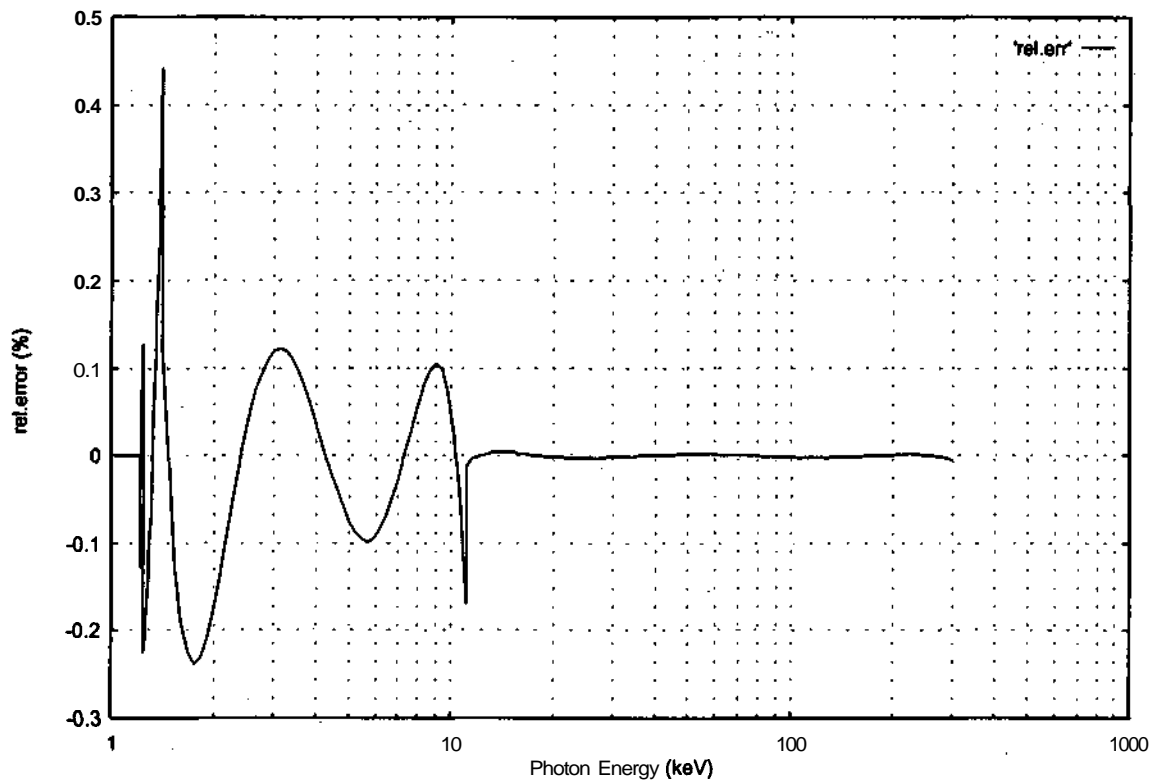


Abb. 3.18: Graphische Darstellung des relativen Fehlers über der Quantenenergie für die Beschreibung von $\tau_{E,Ge}$ durch eine Parabel 5. Ordnung

Wie aus der Abb. 3.18 zu ersehen ist bewegt sich der relative Fehler im Element Ge für eine Berechnung der tau-Werte in allen Bereichen zwischen 0.45 bis -0.22 Prozent [1].

3.4 Element Europium (Eu)

Tabelle 3.4 zeigt die Datei Eu.mu [19]. Für das Element EU werden auch hier die Kantenenergiewerte und die aus den Scofield-Dateien [11] erarbeiteten Isf-Koeffizienten a_0, a_1, \dots, a_5 aus der Datei Eu.mu eingelesen, um damit die Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ (Gleichung 3.2) zu berechnen.

Unter Verwendung der Gleichung 3.3 werden dann die für die einzelnen Schalen berechneten Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ aufsummiert, um die Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,i}$ zu berechnen.

EU Z A rho
63 152.00 5.2590E+00

EU coherent and incoherent Isf-coefficients
2.28956D+00 -8.48155D-02 -3.56876D-02 -8.22997D-02 1.47220D-02 -8.12613D-04
-5.14961D+00 1.26489D+00 -1.18933D-01 1.98266D-03 -2.61002D-03 2.87366D-04

EU edge-energies edge-jumps and Isf-coefficients

K
48.51900 5.57718
2.69501E+01 -1.84893E+01 6.81483E+00 -1.38568E+00 1.32892E-01 -4.78721E-03

L1
8.05200 1.15534
4.08722E+00 2.93666E+00 -2.27726E+00 5.56376E-01 -7.47076E-02 4.09163E-03

L2
7.61700 1.37153
4.79777E+00 4.58675E+00 -3.72295E+00 9.47512E-01 -1.25189E-01 6.72297E-03

L3
6.97690 2.77344
6.31821E+00 3.58832E+00 -3.33549E+00 8.68869E-01 -1.18355E-01 6.53792E-03

M1
1.80000 1.04260
5.75974E+00 -6.58259E-01 -6.27047E-01 1.66989E-01 -2.79792E-02 1.83409E-03

M2
1.61390 1.05859
6.05576E+00 -4.38577E-01 -7.77048E-01 1.49440E-01 -2.11760E-02 1.43213E-03

M3
1.48060 1.14985
7.07996E+00 -8.67038E-01 -6.19112E-01 1.12279E-01 -1.74419E-02 1.29858E-03

M4
1.16060 1.47685
8.28888E+00 -2.07650E+00 -5.21136E-01 8.93061E-02 -1.40796E-02 1.19190E-03

M5
1.13090 3.60475
8.71284E+00 -2.23889E+00 -4.10373E-01 4.88891 E-02 -8.01306E-03 8.63353E-04

N1
0.3602 1.00000
4.96668E+00 -1.42098E+00 -2.40944E-01 6.40351 E-02 -1.39147E-02 1.06345E-03

N2
0.2839 1.00000
5.09417E+00 -1.25382E+00 -3.39309E-01 3.83568E-02 -7.47041 E-03 7.69593E-04

N3
0.2566 1.00000
5.92514E+00 -1.45752E+00 -2.87655E-01 2.55343E-02 -6.37096E-03 7.39801 E-04

N4
0.1332 1.00000
6.17327E+00 -1.83942E+00 -4.84467E-01 5.52033E-02 -7.54832E-03 7.77183E-04

N5
0.1332 1.00000
6.55216E+00 -1.87407E+00 -4.95920E-01 6.48711E-02 -1.07050E-02 1.07384E-03

N6
0.0000 1.00000
4.65595E+00 -3.25400E+00 -3.33027E-01 1.82881E-02 -1.86932E-03 4.88289E-04

N7
0.0000 1.00000
4.90175E+00 -3.25515E+00 -3.60499E-01 3.39896E-02 -5.77488E-03 8.12716E-04

O1
0.0318 1.00000
3.32463E+00 -1.58290E+00 -1.59125E-01 4.18846E-02 -1.07336E-02 8.74935E-04

O2
0.2200 1.00000
3.22711E+00 -1.42752E+00 -2.49054E-01 1.79137E-02 -5.39866E-03 6.95793E-04

O3
0.2200 1.00000
3.98383E+00 -1.57965E+00 -2.12035E-01 3.14370E-03 -3.12499E-03 5.55981 E-04

P1
0.0000 1.00000
8.84011E-01 -1.69664E+00 -4.49841 E-02 -5.07514E-03 -2.25313E-03 3.15377E-04

global data

Eu Isf-coefficients of K- L- M- and N-range
2.51462E+01 -1.59092E+01 5.59145E+00 -1.10920E+00 1.02401E-01 -3.45821E-03
2.06663E+01 -1.98906E+01 1.27025E+01 -4.53012E+00 7.86640E-01 -5.36077E-02
9.67870E+00 -2.41892E+00 3.89215E-01 -3.94059E-01 1.22944E-01 -1.14225E-02
7.70090E+00 -1.85446E+00 -2.58688E-01 3.57592E-02 -2.13472E-01 7.75799E-01

Tabelle 3.4: Die Datei Eu.mu zur Berechnung der Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ und $\tau_{E,i}$ für EU

Die Abbildungen 3.19, 3.20, 3.21, 3.22, 3.23, 3.24, 3.25, 3.26 und 3.27 zeigen die Energieabhängigkeit der Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,i}$ und $\tau_{E,ij}$ für das Element EU im Quantenenergiebereich von 1 bis 300 keV.

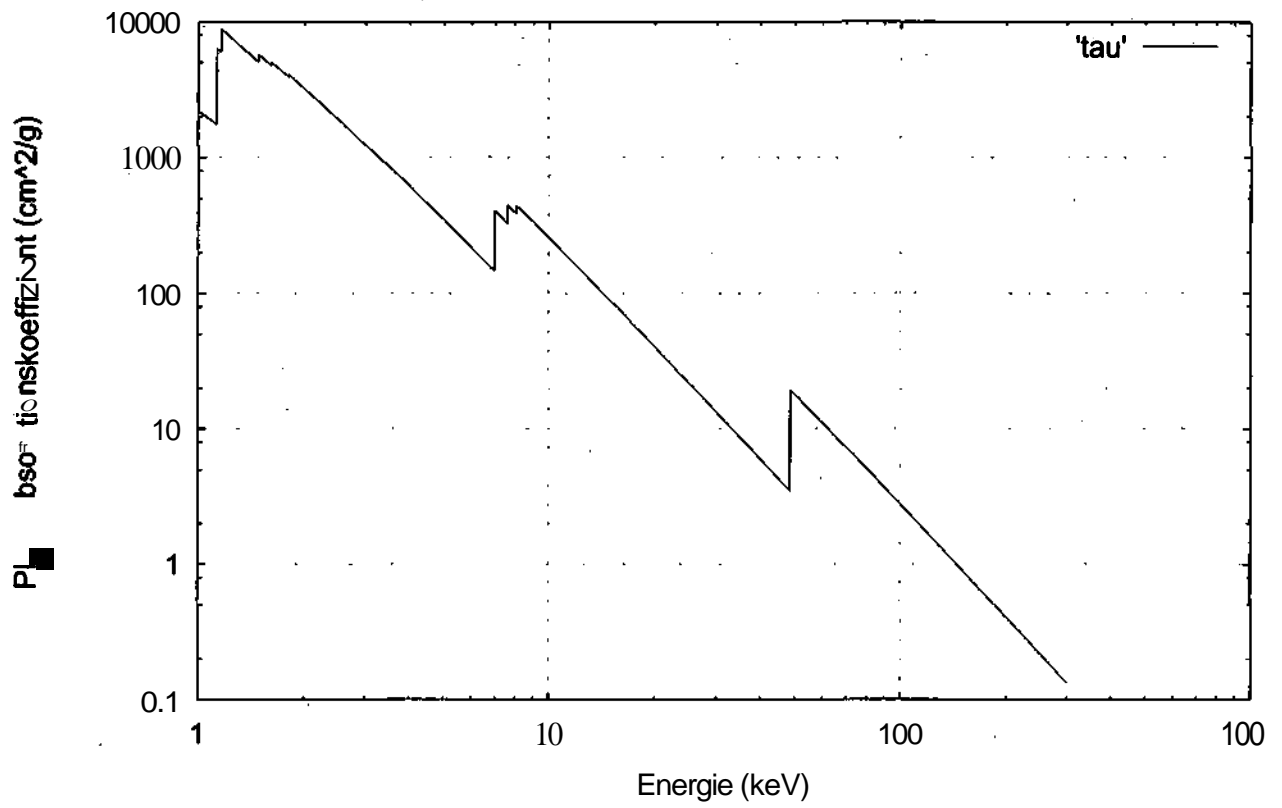


Abb. 3.19: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,EU}$ für EU

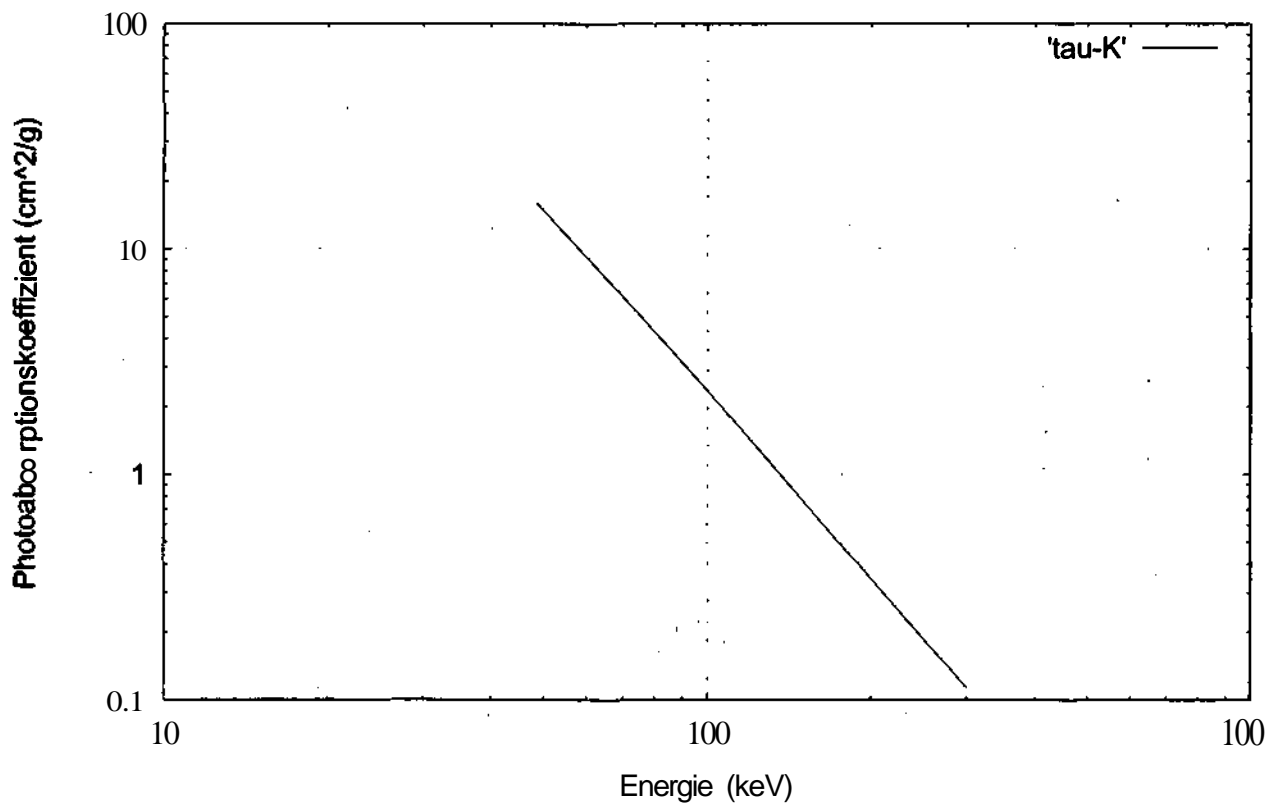


Abb. 3.20: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,EUK}$ für EU

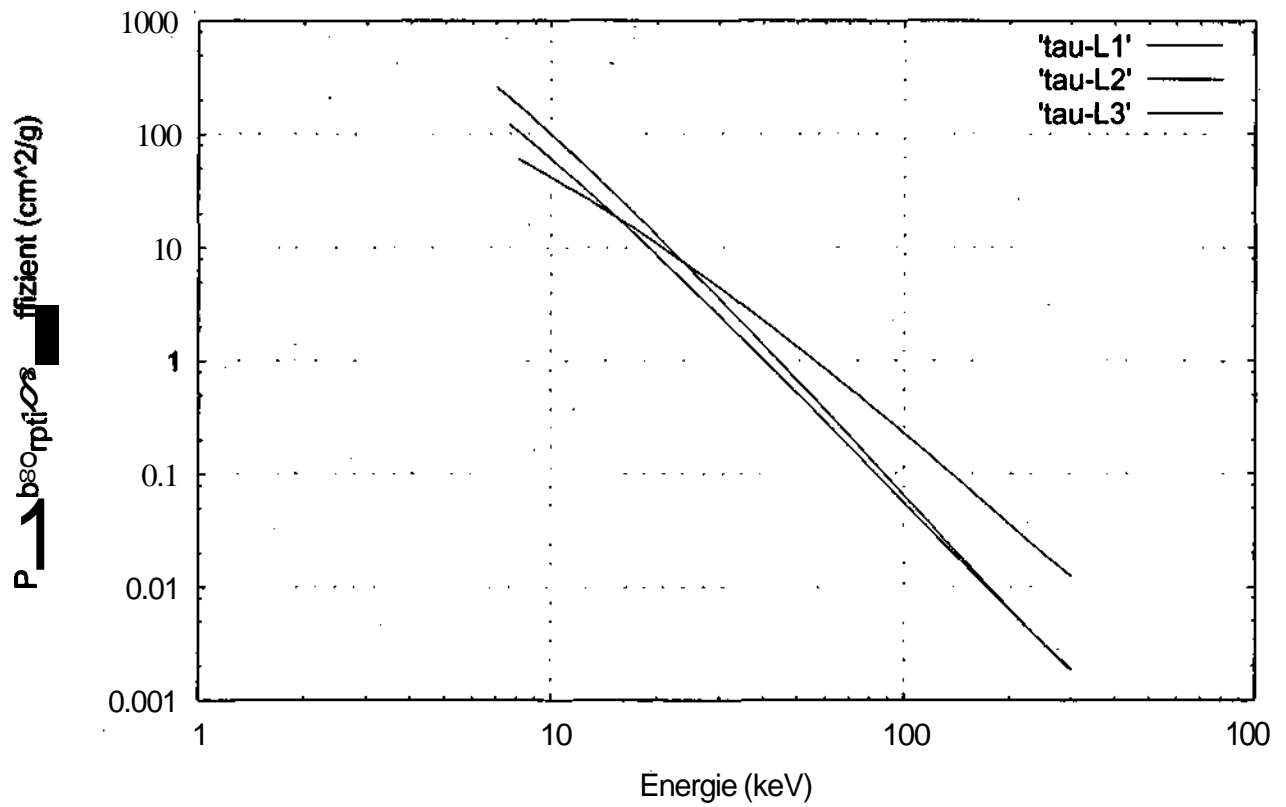


Abb. 3.21: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,EuL1}$, $\tau_{E,EuL2}$ und $\tau_{E,EuL3}$ für Eu

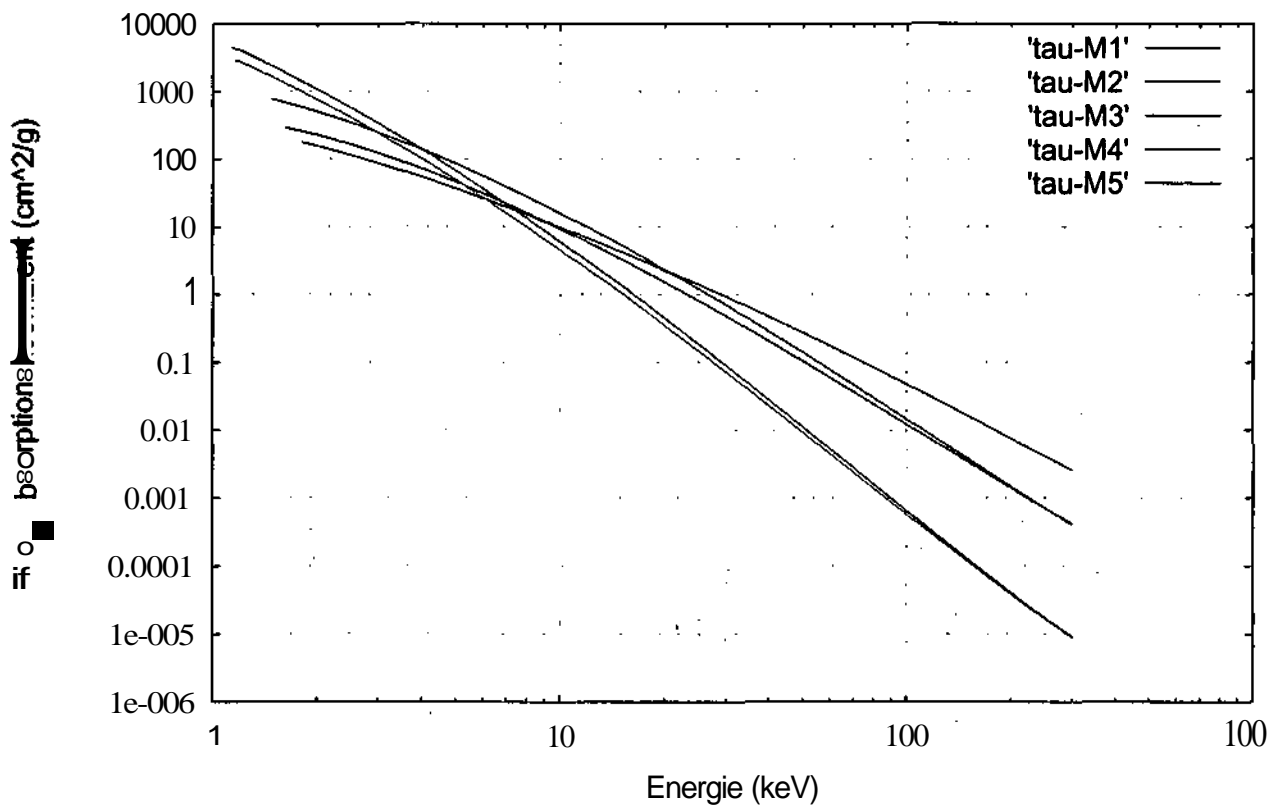


Abb. 3.22: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,EuM1}$ — $\tau_{E,EuM5}$ für Eu

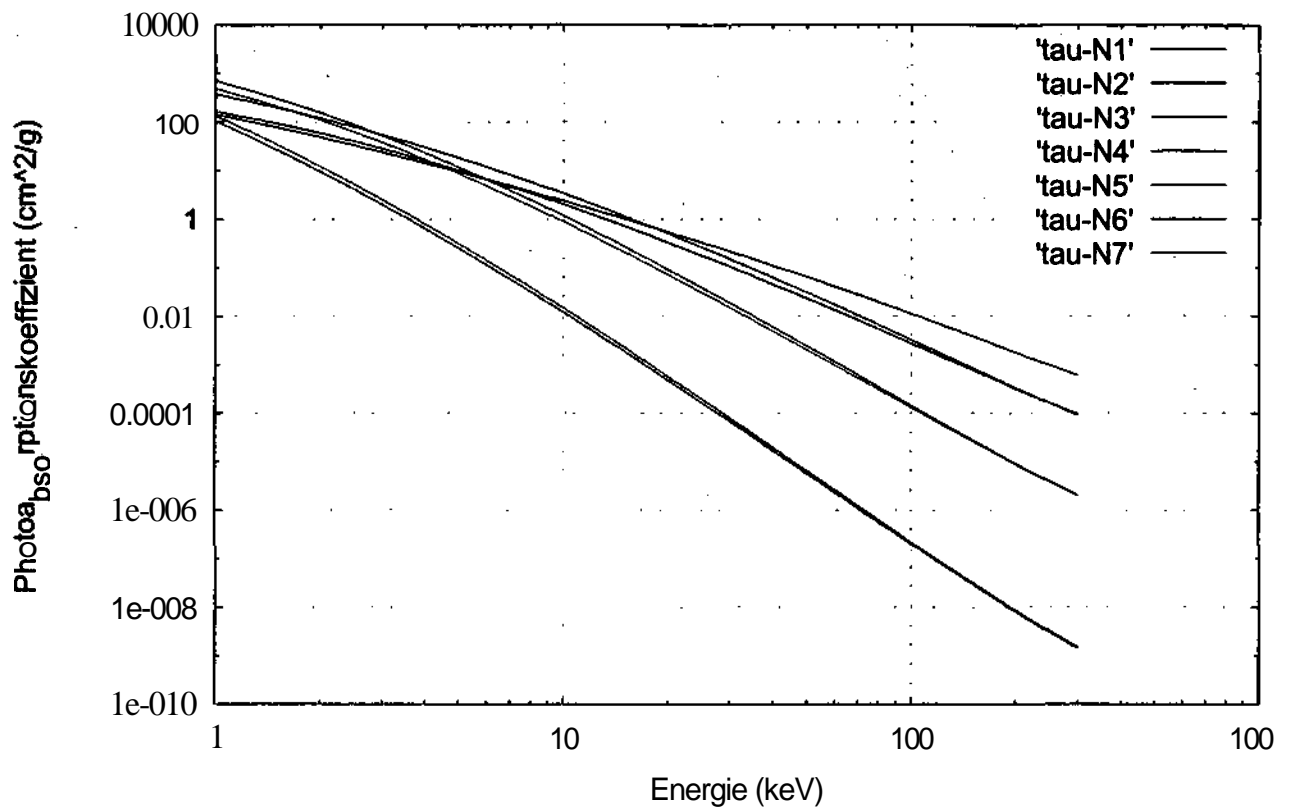


Abb. 3.23: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,EuN1}$, ... $\tau_{E,EuN7}$ für EU

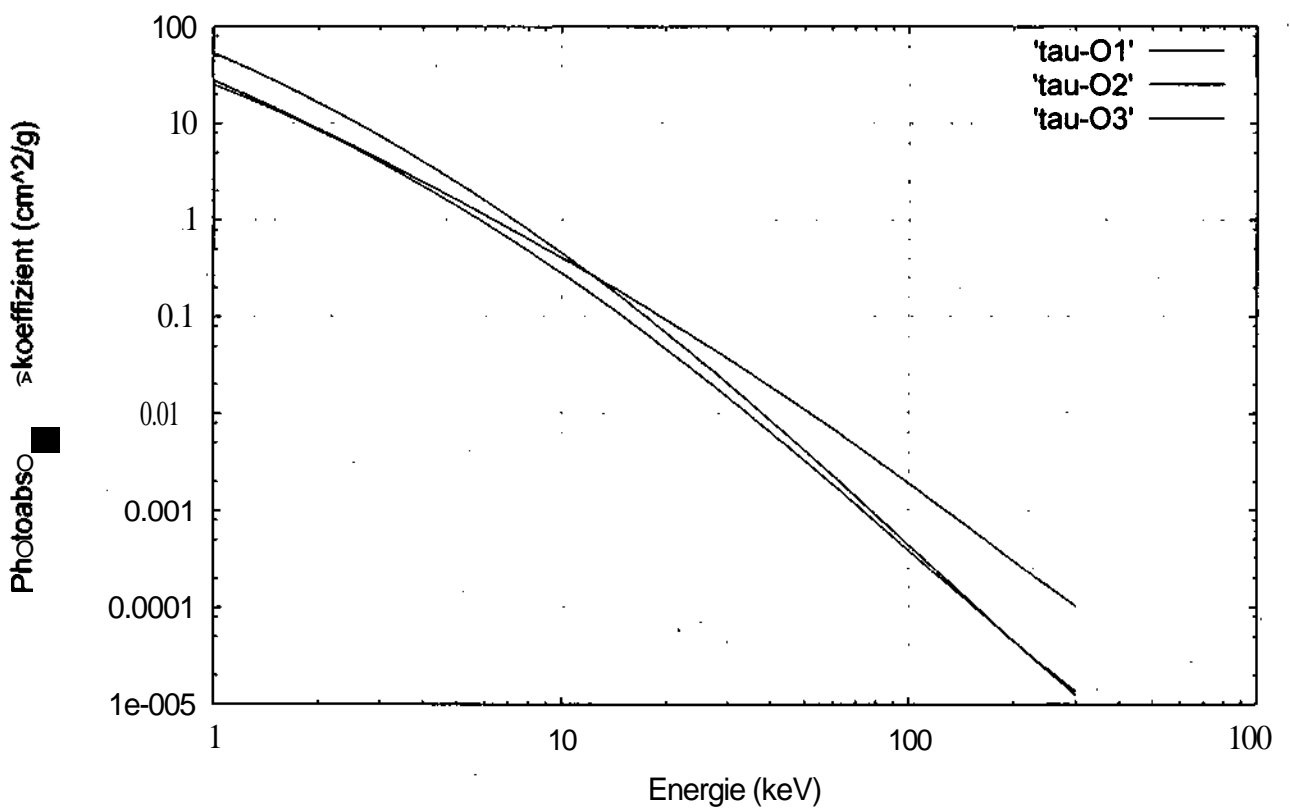


Abb. 3.24: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,EuO1}$, $\tau_{E,EuO2}$ und $\tau_{E,EuO3}$ für EU

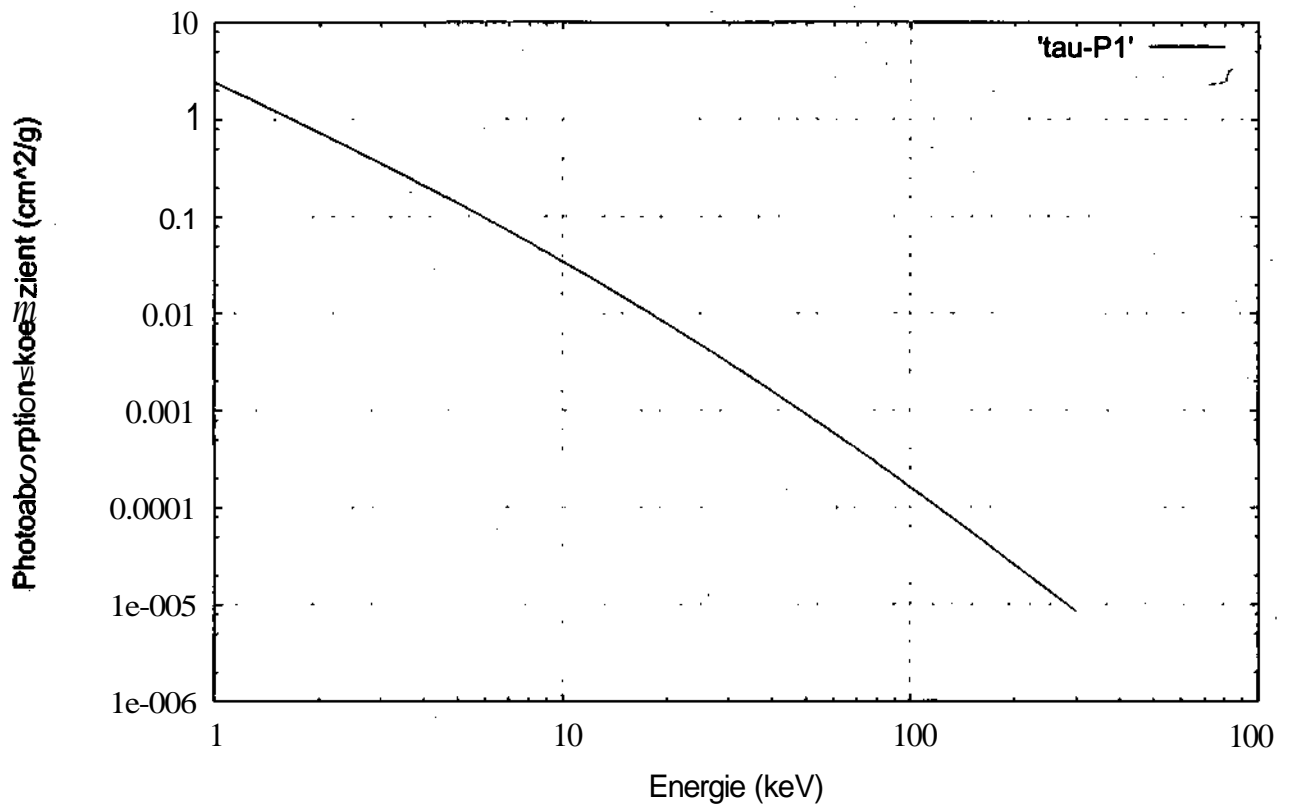


Abb. 3.25: Die Energieabhängigkeit von τ_{E,EuP_1} für EU

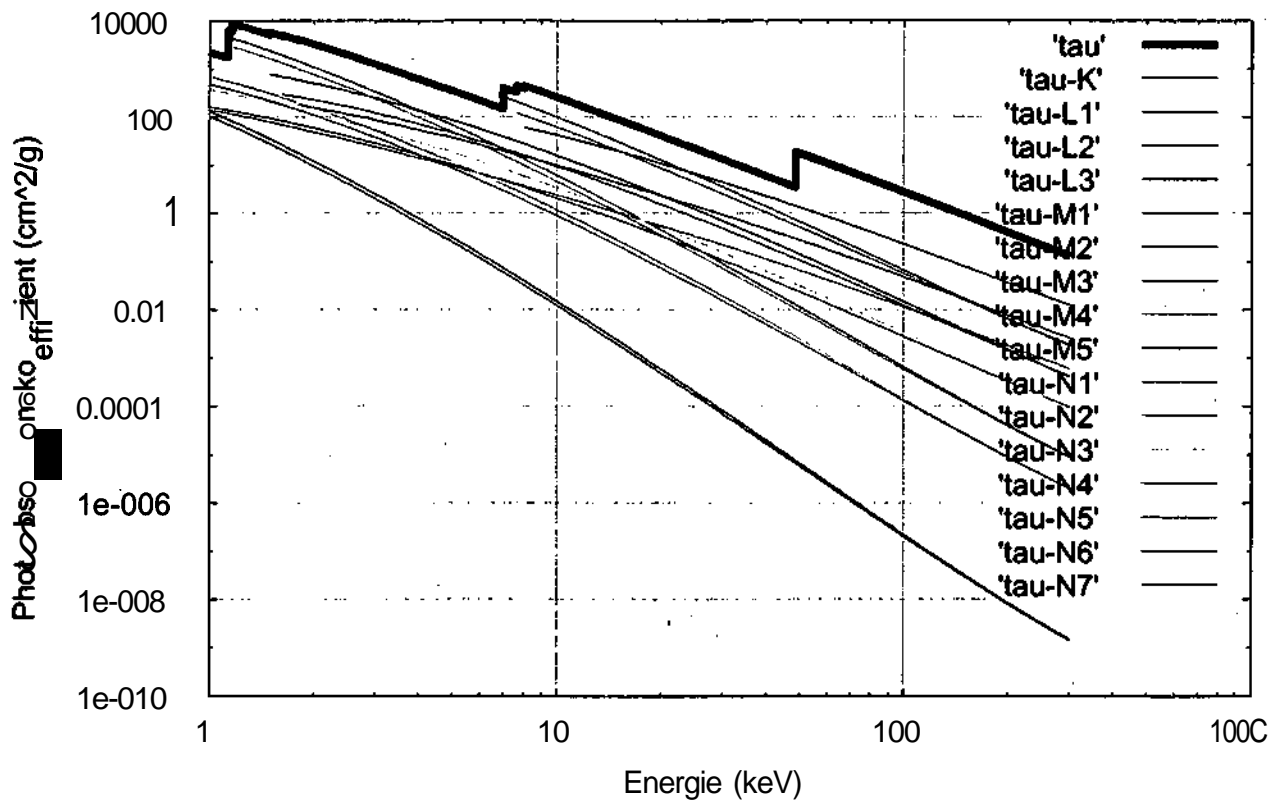


Abb. 3.26: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,Eu}$ und τ_{E,Eu_j} für EU

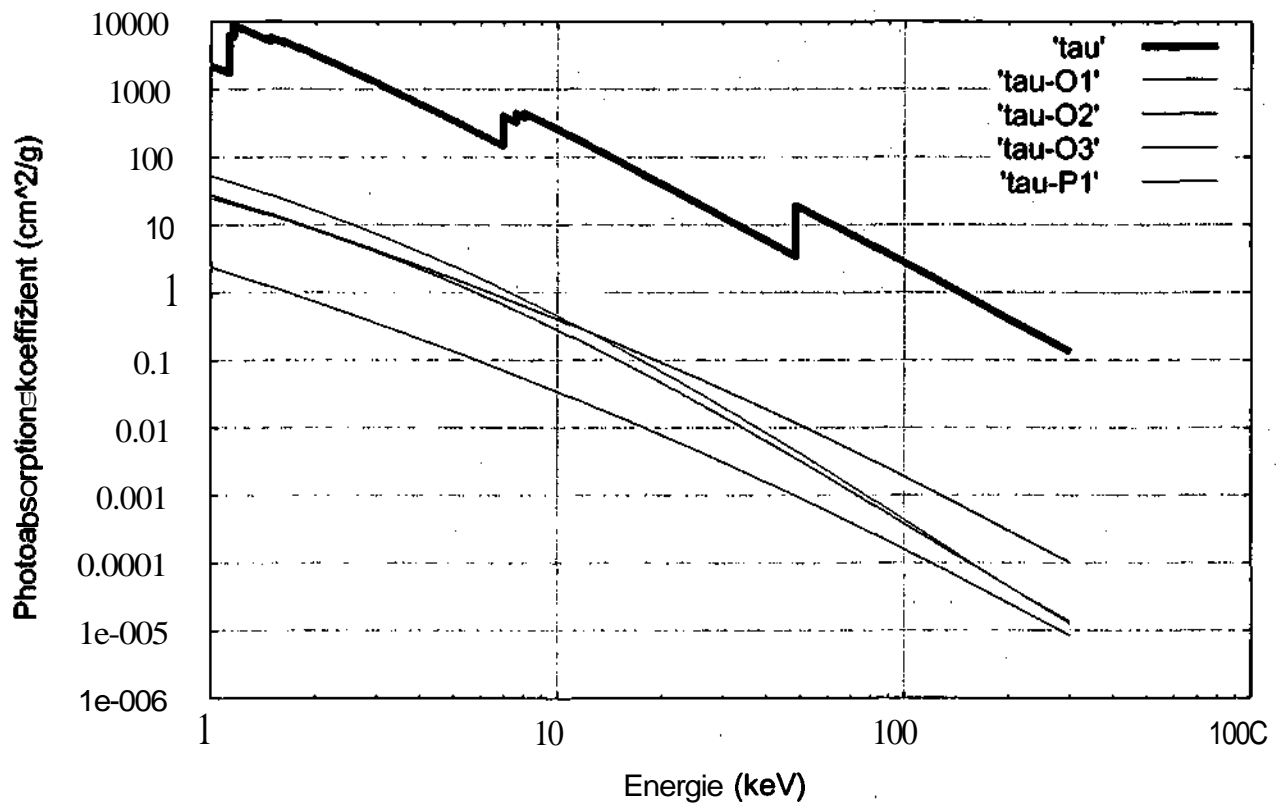


Abb. 3.27: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,Eu}$ und $\tau_{E,Eu}$ für EU

Wir bedienen uns wieder der Gleichung 3.4, um den relativen Fehler zwischen **Scofield** und der erfolgten Approximation für die einzelnen **tau-Werte** zu berechnen.

Die einzelnen Werte des **relativen** Fehlers zwischen **Scofield** und der erfolgten Approximation für das Element EU werden dann über $\log(E)$ in den sämtlichen Bereichen dargestellt. Abb. 3.28 zeigt die graphische Darstellung des relativen Fehlers zwischen **Scofield** und der Approximation für das Element EU.

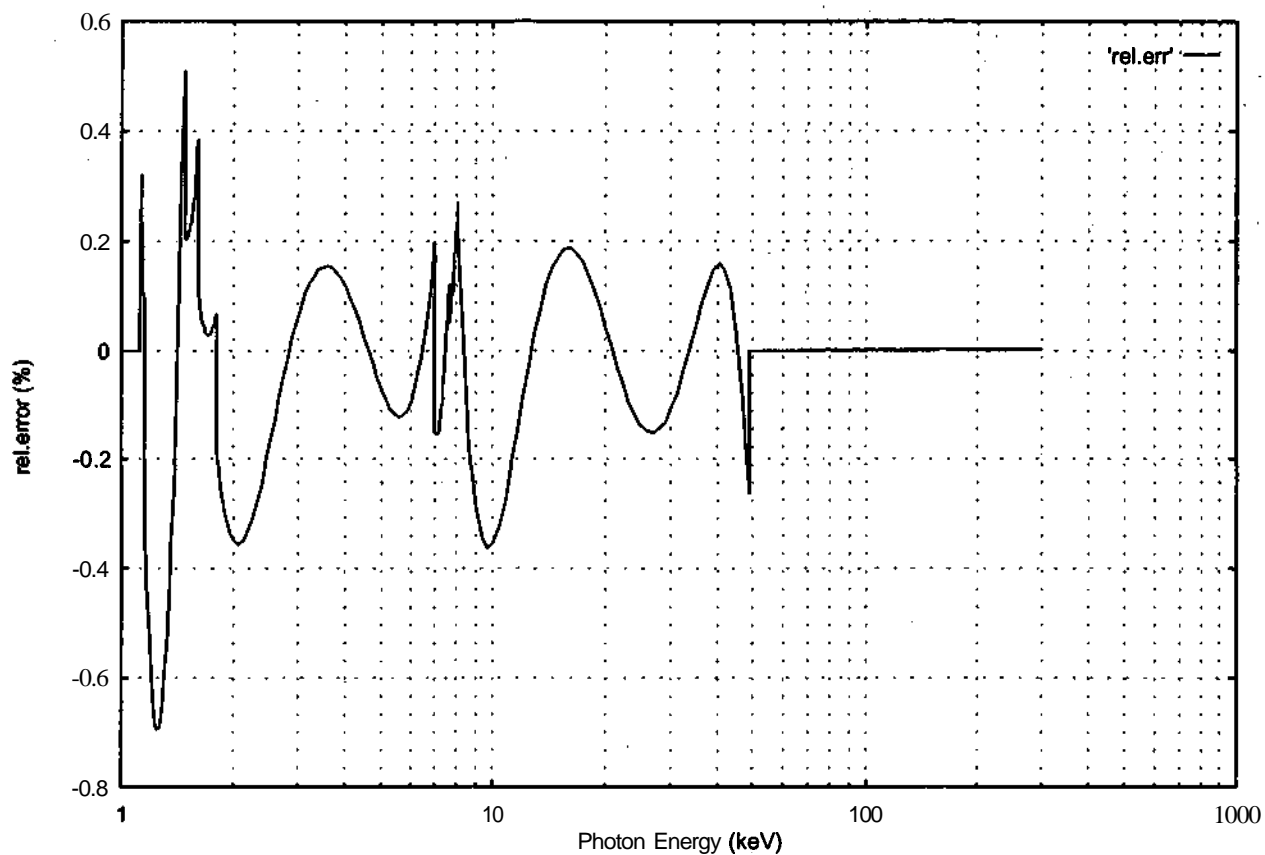


Abb. 3.28: Graphische Darstellung des relativen Fehlers über der Quantenenergie für die Beschreibung von $\tau_{E,EU}$ durch eine Parabel 5. Ordnung

Wie aus der Abb. 3.28 zu ersehen ist, bewegt sich der relative Fehler im Element EU für eine Berechnung der **tau-Werte** in allen Bereichen zwischen 0.51 bis -0.7 Prozent [1].

3.5 Element Uran (U)

Tabelle 3.5 zeigt die Datei U.mu [19]. Um die Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ unter Verwendung der Gleichung einer Parabel 5. Ordnung (Gleichung 3.2) zu berechnen, werden auch hier die Kantenenergiewerte und die aus den Scofield-Dateien [11] erarbeiteten Isf-Koeffizienten a_0, a_1, \dots, a_5 aus der Datei U.mu eingelesen.

Unter Verwendung der Gleichung 3.3 werden dann die für die einzelnen Schalen berechneten Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ aufsummiert, um die Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,i}$ zu berechnen.

U Z A rho
92 238.07 1.9050E+01

U coherent and incoherent Isf-coefficients
2.61152D+00 -1.49099D-01 6.14063D-02 -1.09016D-01 1.76262D-02 -9.11483D-04
-5.40008D+00 1.30038D+00 -1.50801D-01 1.51278D-02 -4.29923D-03 3.44626D-04

U edge-energies edge-jumps and Isf-coefficients

K

115.60610 4.23660
1.41877E+02 -1.25314E+02 4.63335E+01 -8.63695E+00 7.94950E-01 -2.88761E-02

L1

21.75740 1.15407
-1.29512E+01 2.16627E+01 -1.05720E+01 2.42850E+00 -2.85676E-01 1.35511E-02

L2

20.94760 1.41914
-1.17755E+01 2.31350E+01 -1.15871E+01 2.63783E+00 -3.04869E-01 1.42328E-02

L3

17.16630 2.38716
1.46984E+01 -7.29594E+00 2.68390E+00 -7.17857E-01 8.68174E-02 -3.92349E-03

M1

5.54800 1.04174
4.33040E+00 5.06906E-01 -8.06505E-01 1.44753E-01 -1.71239E-02 9.12523E-04

M2

5.18220 1.06064
2.33963E+00 3.92868E+00 -2.58824E+00 5.82824E-01 -7.34989E-02 3.91252E-03

M3

4.30340 1.16589
6.16019E+00 6.52730E-01 -1.21255E+00 2.69150E-01 -3.82846E-02 2.35570E-03

M4

3.72760 1.42194
8.63967E+00 -1.04039E+00 -8.20522E-01 1.59121E-01 -2.18970E-02 1.46794E-03

M5

3.55170 2.41845
9.02493E+00 -1.02550E+00 -9.06651E-01 1.96434E-01 -2.96170E-02 2.04362E-03

N1

1.44080 1.01652
4.55662E+00 -7.52167E-01 -3.81542E-01 6.79954E-02 -9.32457E-03 5.47522E-04

N2
 1.27260 1.01059
 4.12063E+00 1.70135E-01 -7.82665E-01 1.45166E-01 -1.98382E-02 1.26022E-03
 N3
 1.04490 1.06019
 6.01226E+00 -9.25479E-01 -4.18462E-01 7.10952E-02 -1.34313E-02 1.10214E-03
 N4
 0.7804 1.00000
 6.28115E+00 -4.54583E-01 -1.02394E+00 2.32058E-01 -3.67901E-02 2.58056E-03
 N5
 0.7377 1.00000
 6.77661E+00 -6.88079E-01 -9.06782E-01 1.93307E-01 -3.13918E-02 2.31083E-03
 N6
 0.3913 1.00000
 7.59532E+00 -2.27804E+00 -5.86367E-01 9.12205E-02 -1.34929E-02 1.17559E-03
 N7
 0.3809 1.00000
 7.85155E+00 -2.32111E+00 -5.71003E-01 8.48151E-02 -1.26389E-02 1.13124E-03
 O1
 0.3237 1.00000
 3.77801E+00 -1.31924E+00 -1.65130E-01 3.06361E-02 -6.89186E-03 5.45969E-04
 O2
 0.2593 1.00000
 3.54929E+00 -9.30122E-01 -2.13846E-01 -1.92167E-03 -9.23256E-04 2.99499E-04
 O3
 0.1951 1.00000
 4.91772E+00 -1.39962E+00 -1.59100E-01 -4.66018E-04 -3.47969E-03 5.49575E-04
 O4
 0.1050 1.00000
 4.92919E+00 -1.16576E+00 -4.58482E-01 3.17959E-02 -3.59302E-03 4.91850E-04
 O5
 0.0963 1.00000
 5.35288E+00 -1.27483E+00 -4.38315E-01 2.92742E-02 -4.60789E-03 6.50508E-04
 O6
 0.0000 1.00000
 3.40406E+00 -2.09747E+00 -5.60496E-01 5.92970E-02 -6.36960E-03 6.62948E-04
 O7
 0.0000 1.00000
 3.64147E+00 -2.13227E+00 -5.77078E-01 7.23035E-02 -9.98125E-03 9.73569E-04
 P1
 0.0707 1.00000
 2.37634E+00 -1.50262E+00 -8.07840E-02 7.01604E-03 -3.00783E-03 2.76822E-04
 P2
 0.0423 1.00000
 2.00697E+00 -1.14397E+00 -1.38029E-01 -9.20226E-03 -1.74145E-03 4.29554E-04
 P3
 0.0323 1.00000
 3.17366E+00 -1.49411E+00 -1.15347E-01 -9.18450E-03 -2.79717E-03 5.40932E-04
 P4
 0.0000 1.00000
 7.61223E-02 -1.26083E+00 -3.63496E-01 -7.20944E-03 3.56992E-03 6.97900E-06

```

P5
0.0000 1.00000
4.20014E-01 -1.35362E+00 -3.80372E-01 9.62834E-03 -1.34374E-03 4.39567E-04
Q1
0.0000 1.00000
2.88598E-01 -1.70882E+00 1.79004E-02 -7.55657E-03 -3.62943E-03 4.80878E-04
global data

```

```

U Isf-coefficients of K- L- M- and N-range
1.49745E+02 -1.31683E+02 4.85248E+01 -9.01983E+00 8.28409E-01 -3.00278E-02
9.75370E+01 -1.14716E+02 5.85728E+01 -1.51610E+01 1.94576E+00 -9.91697E-02
1.08129E+01 -1.43405E+00 -1.95032E+00 1.39469E+00 -4.36034E-01 4.97288E-02
8.88704E+00 -1.80085E+00 -2.23031E-01 -4.28291E-02 3.96552E-02 -4.29167E-03

```

Tabelle 3.5: Die Datei U.mu zur Berechnung der Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,ij}$ und $\tau_{E,i}$ für U

Die Abbildungen 3.29, 3.30, 3.31, 3.32, 3.33, 3.34, 3.35, 3.36, 3.37 und 3.38 zeigen die Energieabhängigkeit der Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,i}$ und $\tau_{E,ij}$ für das Element U im Quantenenergiebereich von 1 bis 300 keV.

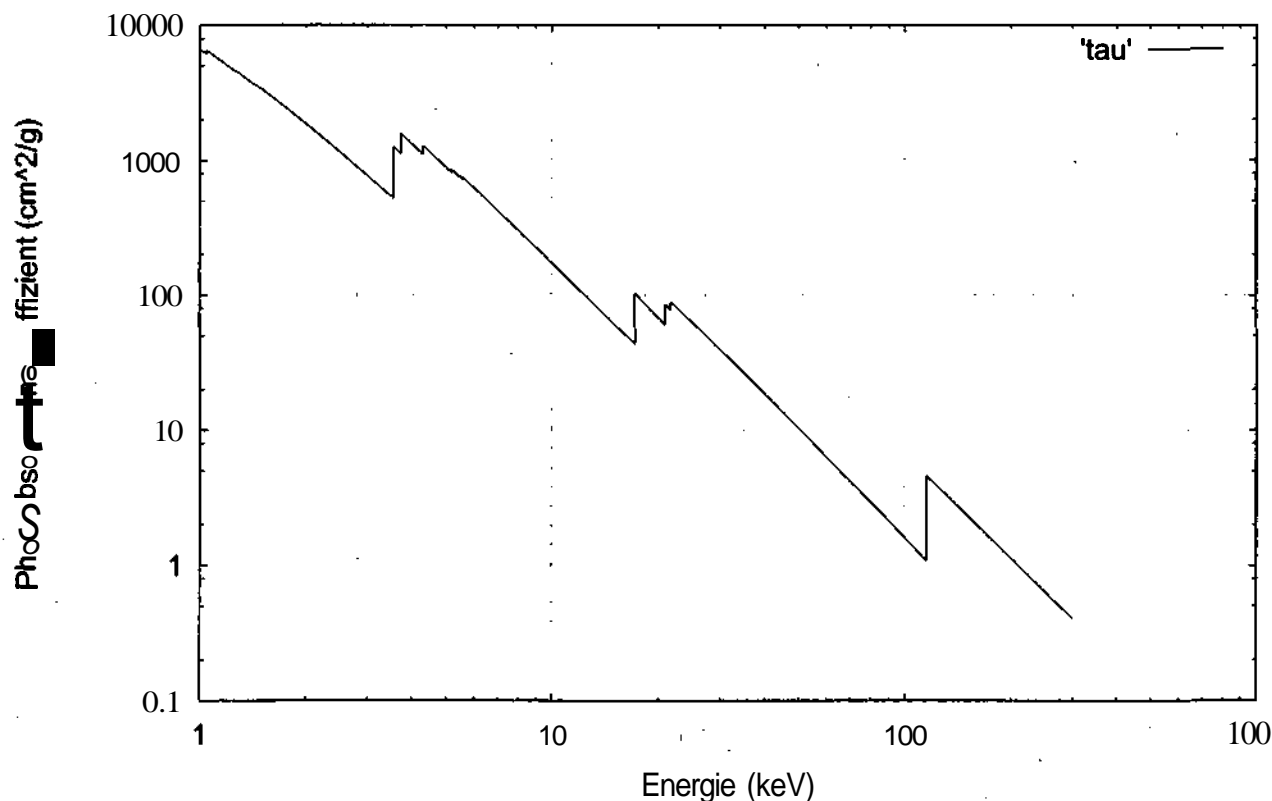


Abb. 3.29: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,U}$ für U

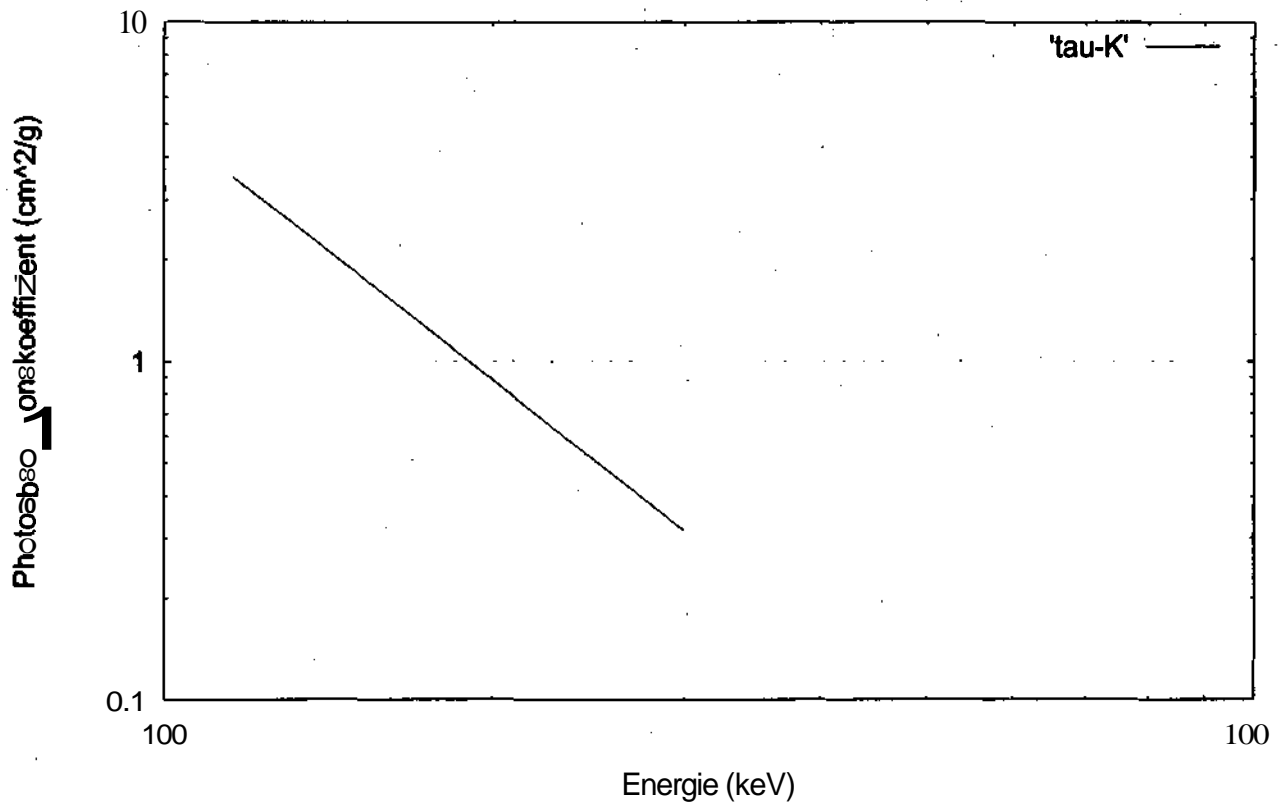


Abb. 3.30: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,UK}$ für U

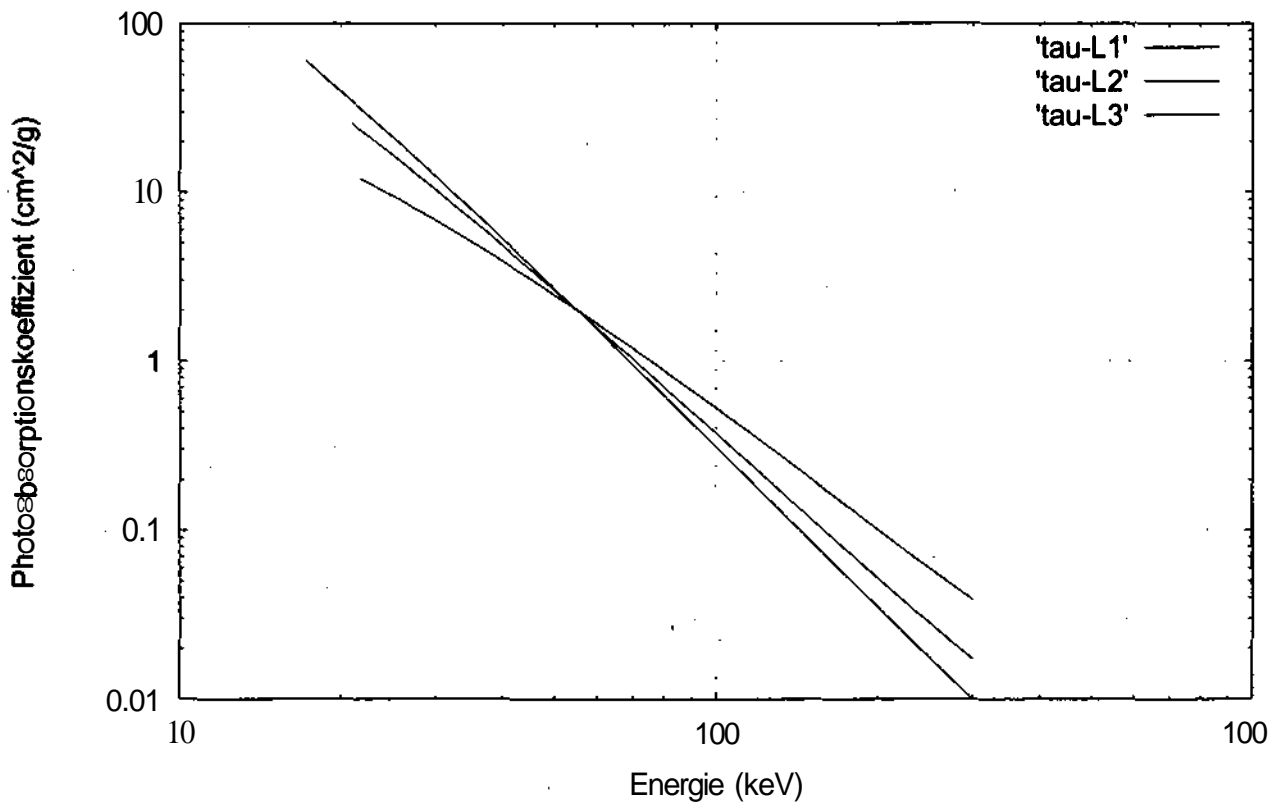


Abb. 3.31: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,UL1}$, $\tau_{E,UL2}$ und $\tau_{E,UL3}$ für U

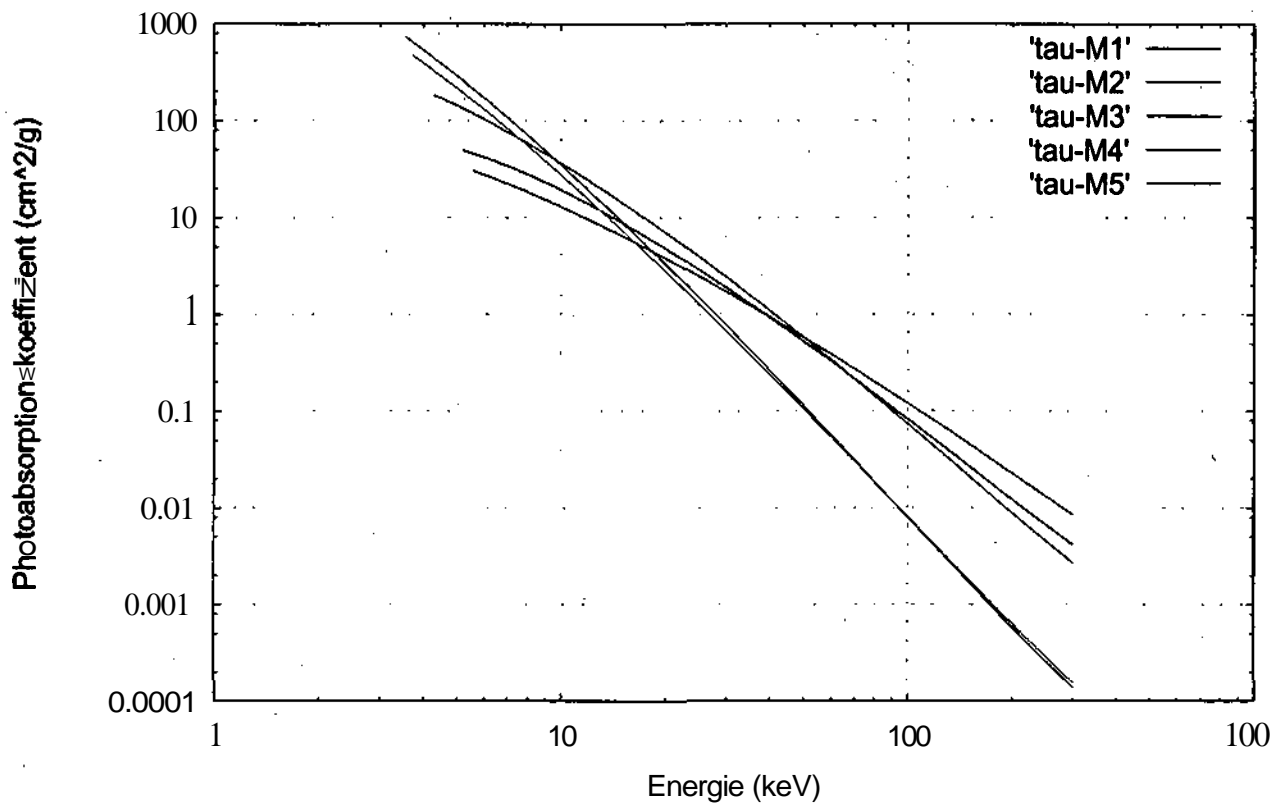


Abb. 3.32: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,UM1}$ — $\tau_{E,UM5}$ für U

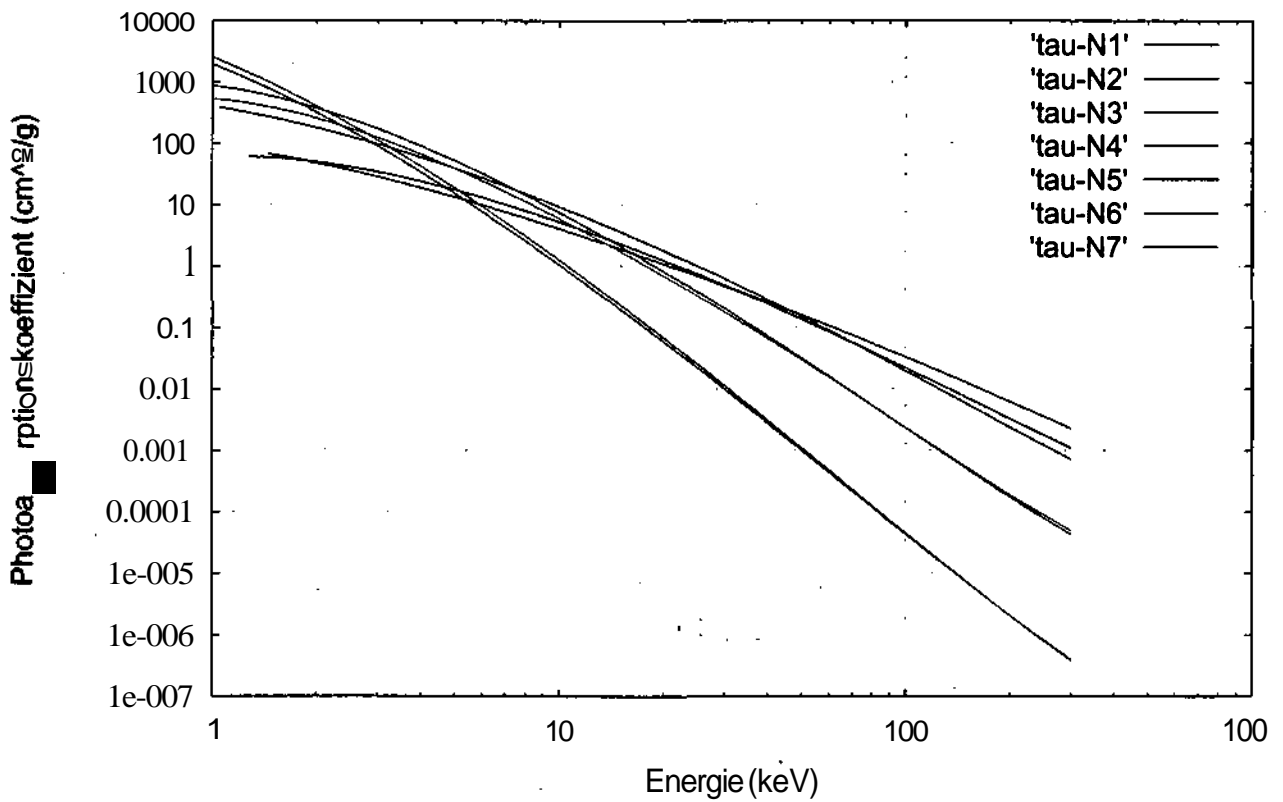


Abb. 3.33: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,UN1}$ — $\tau_{E,UN7}$ für U

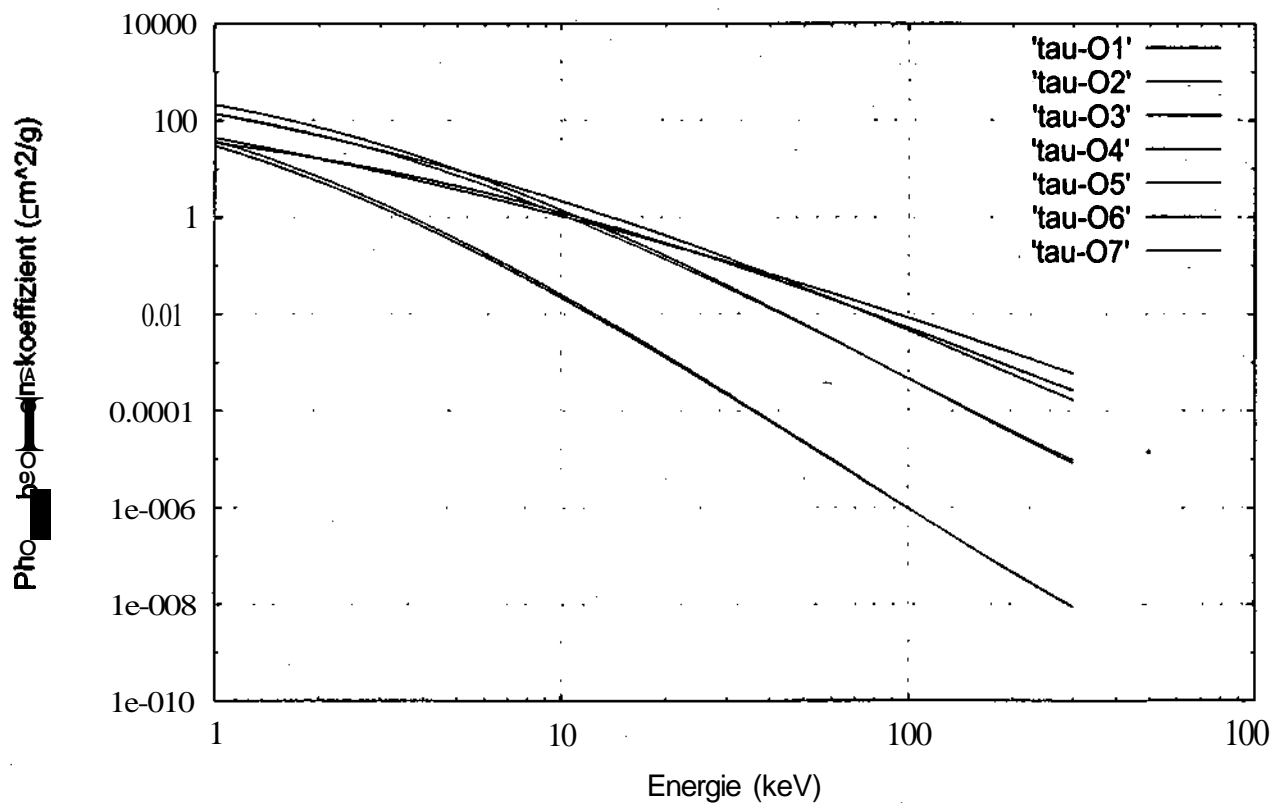


Abb. 3.34: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,UO1}$, ... $\tau_{E,UO7}$ für U

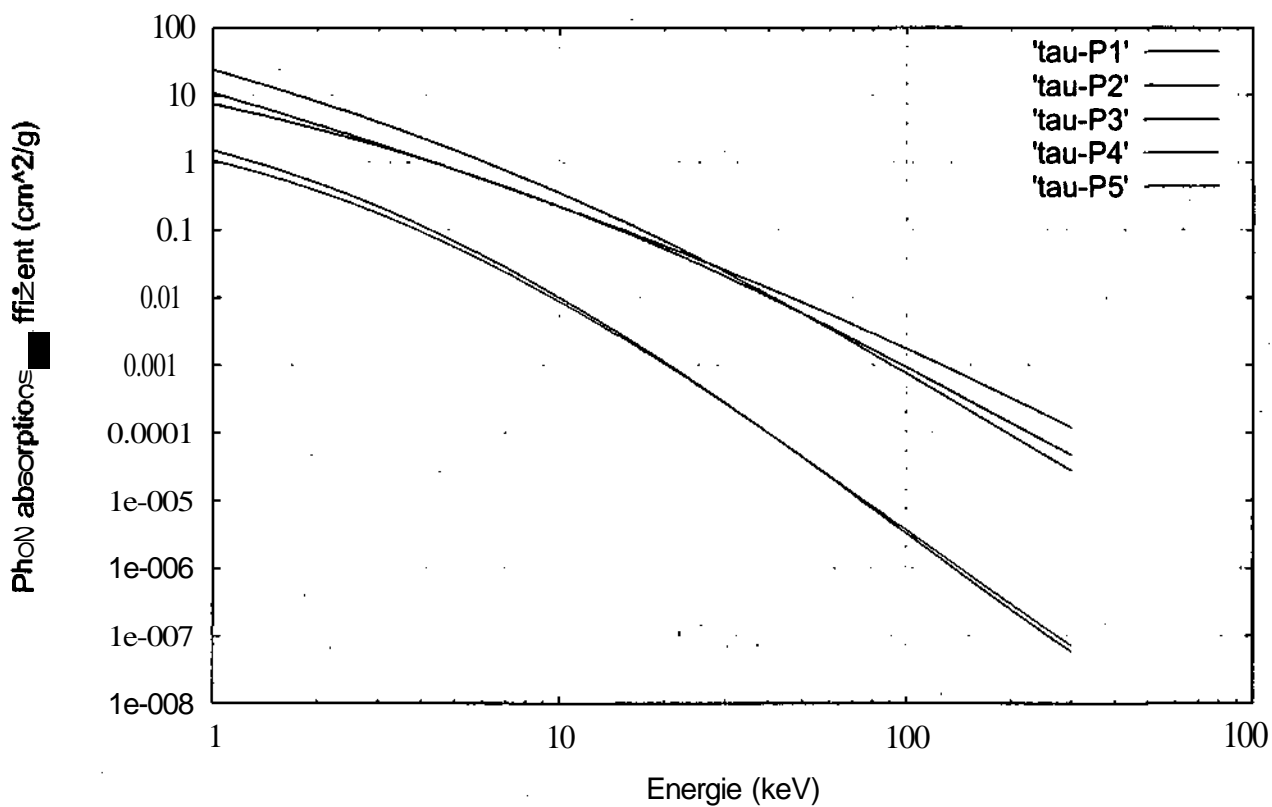


Abb. 3.35: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,UP1}$, — $\tau_{E,UP5}$ für U

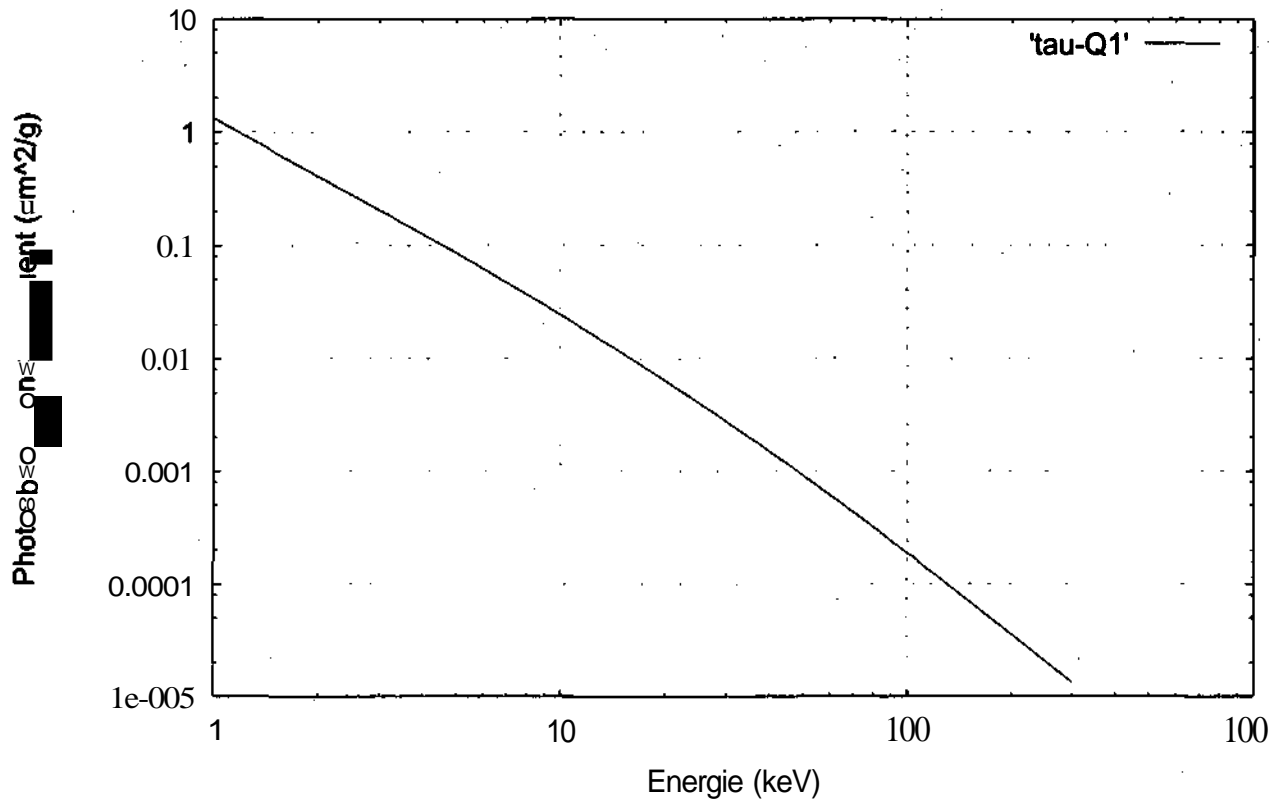


Abb. 3.36: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,UQ1}$ für U

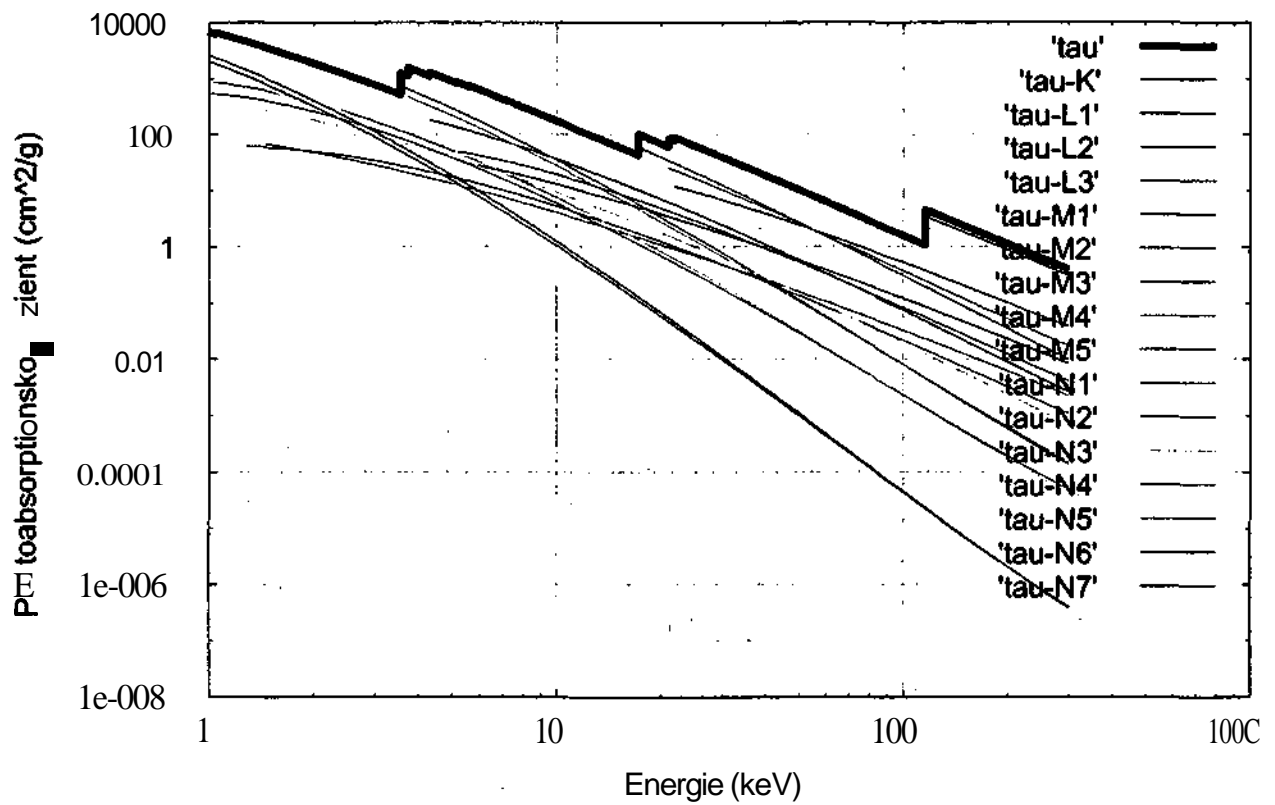


Abb. 3.37: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,U}$ und $\tau_{E,UK}, \dots, \tau_{E,UN7}$ für U

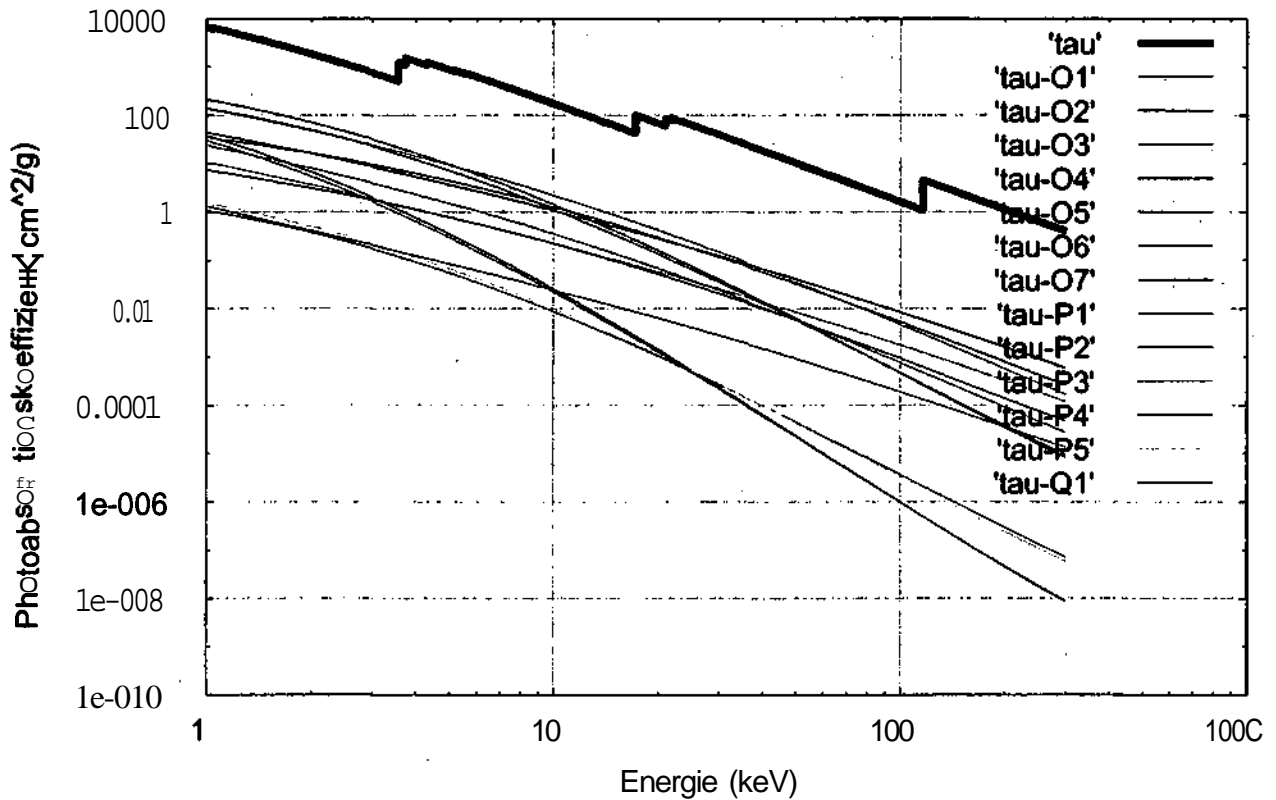


Abb. 3.38 Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,U}$ und $\tau_{E,U01}, \dots, \tau_{E,UQ1}$ für U

Wir bedienen uns wieder der Gleichung 3.4, um den relativen Fehler zwischen Scofield und der Approximation für die einzelnen **tau-Werte** zu berechnen.

Die einzelnen Werte des relativen Fehlers zwischen Scofield und der Approximation für das Element U werden dann über $\log(E)$ in den sämtlichen Bereichen dargestellt. Abb. 3.39 zeigt die graphische Darstellung des relativen Fehlers zwischen Scofield und der Approximation für das Element U.

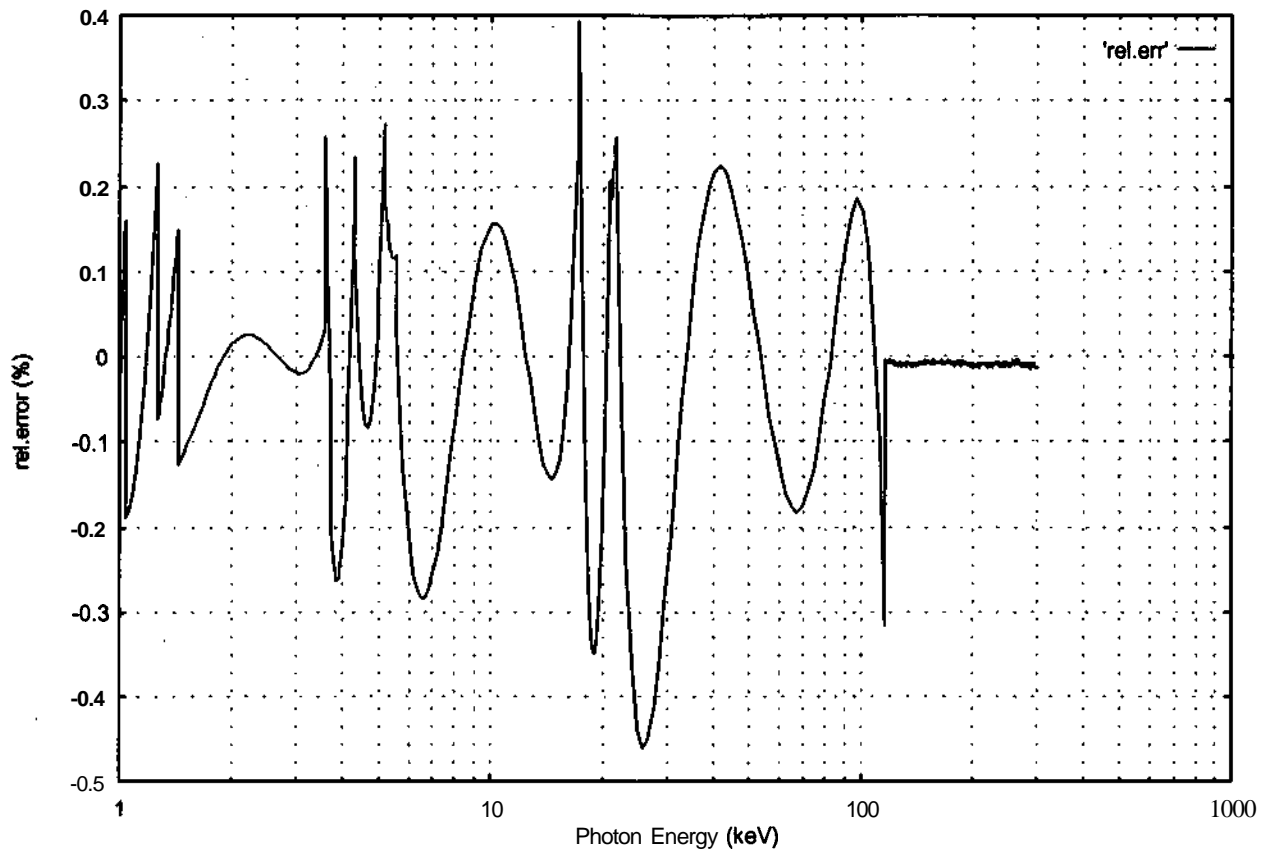


Abb. 3.39: Graphische Darstellung des relativen Fehlers über der Quantenenergie für die Beschreibung von $\tau_{E,U}$ durch eine Parabel 5. Ordnung

Wie aus der Abb. 3.39 zu ersehen ist, bewegt sich der relative Fehler im Element U für eine Berechnung der **tau-Werte** in allen Bereichen zwischen 0.4 bis -0.46 Prozent [1].

4. Die Austrittswahrscheinlichkeit der Elektronen

Die Austrittswahrscheinlichkeit $P_i(x)$ des Elements i für Elektronen mit einer kinetischen Energie E_{kin} aus der Tiefe x einer Probe mit der Dichte ρ_i wird beschrieben durch

$$P_i(x) = A_1 \cdot \exp\left(-\frac{1}{\rho_i \lambda_1} \cdot \rho_i x\right) - A_2 \cdot \exp\left(-\frac{1}{\rho_i \lambda_2} \cdot \rho_i x\right) \quad (4.1)$$

mit den Amplituden

$$A_1 = \exp\left[\sum_{j=1}^4 C_{3,j} \cdot \alpha_2^{j-1} + \log(E_{kin}) \cdot \sum_{j=1}^4 C_{4,j} \cdot \alpha_2^{j-1}\right] \quad (4.2)$$

$$A_2 = \exp\left[\sum_{j=1}^4 C_{5,j} \cdot \alpha_2^{j-1} + \log(E_{kin}) \cdot \sum_{j=1}^4 C_{6,j} \cdot \alpha_2^{j-1}\right] \quad (4.3)$$

und den Wirkungsquerschnitten

$$\frac{1}{\rho_i \lambda_1} = \exp\left[\sum_{j=1}^4 C_{1,j} \cdot \log(E_{kin})^{j-1}\right] \quad (4.4)$$

$$\frac{1}{\rho_i \lambda_2} = \exp\left[\sum_{j=1}^4 C_{2,j} \cdot \log(E_{kin})^{j-1}\right] \quad (4.5)$$

in cm^2/g , deren Zahlenwerte aus least squares fits von $P_i(x)$ durch ein Monte Carlo-Programm ermittelt worden sind [2].

Dabei sind ρ_i die Dichte des Elements i , j eine Zählgröße, λ_1 und λ_2 die freien Weglängen und E_{kin} die kinetische Energie, die beispielsweise durch die Einstein-Gleichung (Gleichung 2.2) beschrieben wird.

Die Gleichung 4.1 für $P_i(x)$ gilt mit den in der Tabelle 4.1 angegebenen Koeffizienten für Elektronenenergien von 0.05 bis 30 keV und Elemente mit Ordnungszahlen $Z = 11$ bis $Z = 79$ [2].

Beim Auftreffen der Röntgenquanten auf die Probe können Elektronen, deren Bindungsenergie unterhalb der Energie $h\nu$ der einfallenden Strahlung ist, aus dem Atomverband herausgeschlagen und emittiert werden (Photoelektronen). Zusätzlich können im Zuge des Relaxationsprozesses Auger Elektronen emittiert werden. Die emittierten Elektronen besitzen definierte kinetische Energien.

Die Koeffizienten C_{ij} für die Beschreibung der Amplituden A_1 (Gleichung 4.2) und A_2 (Gleichung 4.3) und Wirkungsquerschnitte $1/\rho\lambda_1$ (Gleichung 4.4) und $1/\rho\lambda_2$ (Gleichung 4.5) sind in der nachstehenden Tabelle enthalten [2].

	$j = 1$	$j = 2$	$j = 3$	$j = 4$
$C_{1,i}$	1.284E+01	-1.214E+00	-1.118E-01	8.395E-03
$C_{2,i}$	1.367E+01	-1.203E+00	-1.086E-01	7.830E-03
$C_{3,i}$	-3.417E+00	1.529E-01	-2.240E-03	1.074E-05
$C_{4,i}$	1.724E-01	-6.483E-03	8.096E-05	-2.863E-07
$C_{5,i}$	-4.050E+00	1.858E-01	-3.116E-03	1.547E-05
$C_{6,i}$	2.438E-01	-9.934E-03	1.275E-04	-3.908E-07

Tabelle 4.1: Die Koeffizienten C_{ij} für die Beschreibung von $A_1, A_2, 1/\rho\lambda_1$ und $1/\rho\lambda_2$

Die Elektronen verlassen die Probe in alle Richtungen, wobei ein Anteil innerhalb eines Doppelkegels mit den Öffnungswinkeln α_1 und α_2 in den Detektor gelangt. Die Winkel α_1 und α_2 beziehen sich, wie aus der nachstehenden Abb. 4.1 zu ersehen ist, ebenso wie der Einfallswinkel α auf das Lot auf die Probenoberfläche [2].

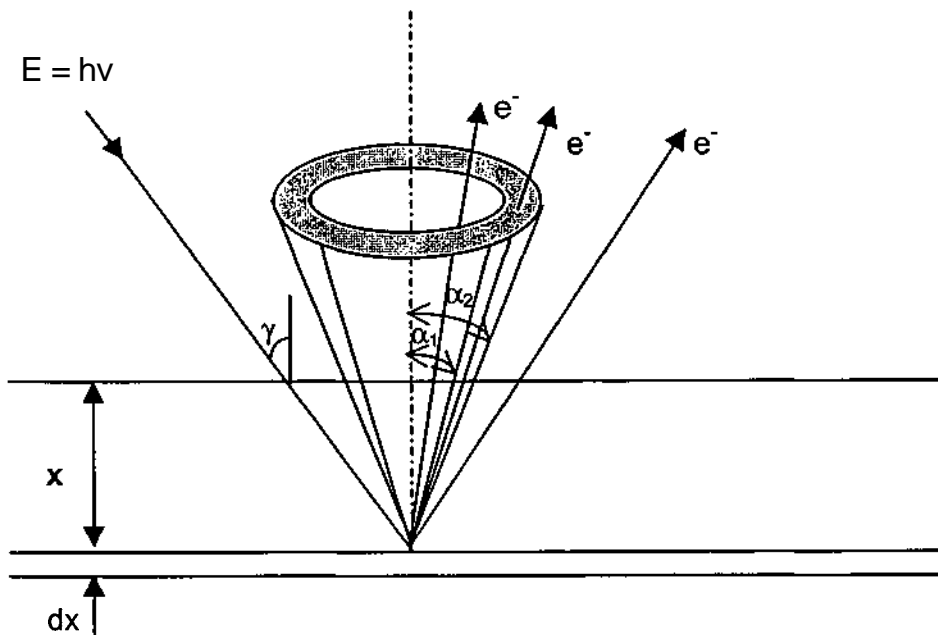


Abb. 4.1: Geometrie des Detektionsraumwinkels Ω

Um die Austrittswahrscheinlichkeit $P_i(x)$ der Elektronen besser zu verstehen, werden die Elemente Aluminium (Al, $Z = 13$), Kupfer (Cu, $Z = 29$), Silber (Ag, $Z = 47$) und Gold (Au, $Z = 79$) als Beispiel gewählt.

Wie erwähnt, hängt die Austrittswahrscheinlichkeit $P_i(x)$ (Gleichung 4.1) für ein Elektron vom chemischen Element, seiner kinetischen Energie und der Tiefe x , bezogen auf die Probenoberfläche ab.

Folgende Abbildungen zeigen für Elektronen mit einer kinetischen Energie von 2, 5, 10 und 20 keV in den Elementen Al, Cu, Ag und Au die Austrittswahrscheinlichkeiten $P_i(x)$ in Abhängigkeit von x . Die Koeffizienten C_{ij} für die Beschreibung der Amplituden A_1 und A_2 und Wirkungsquerschnitte $1/\rho\lambda_1$ und $1/\rho\lambda_2$ werden aus der Tabelle 4.1 entnommen.

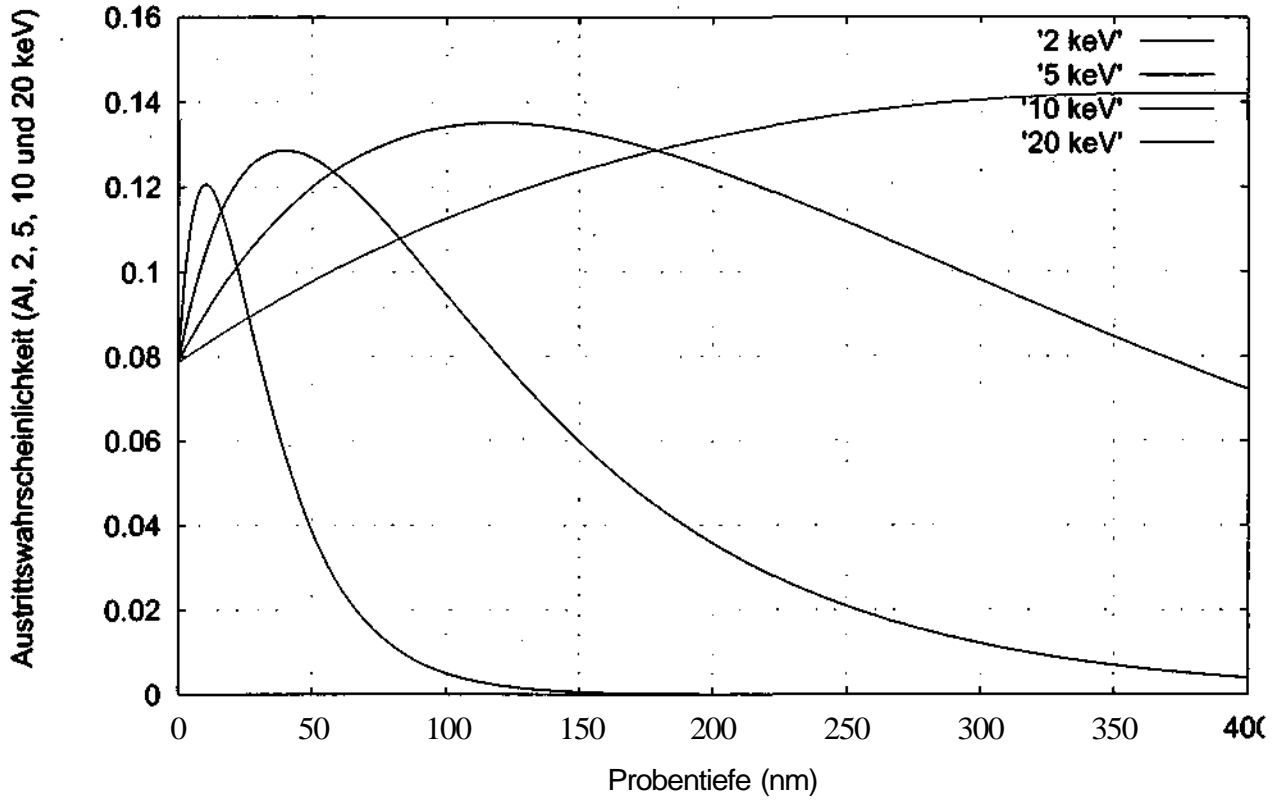


Abb. 4.2: Die Austrittswahrscheinlichkeiten $P_e(x)$ für Elektronen in Al

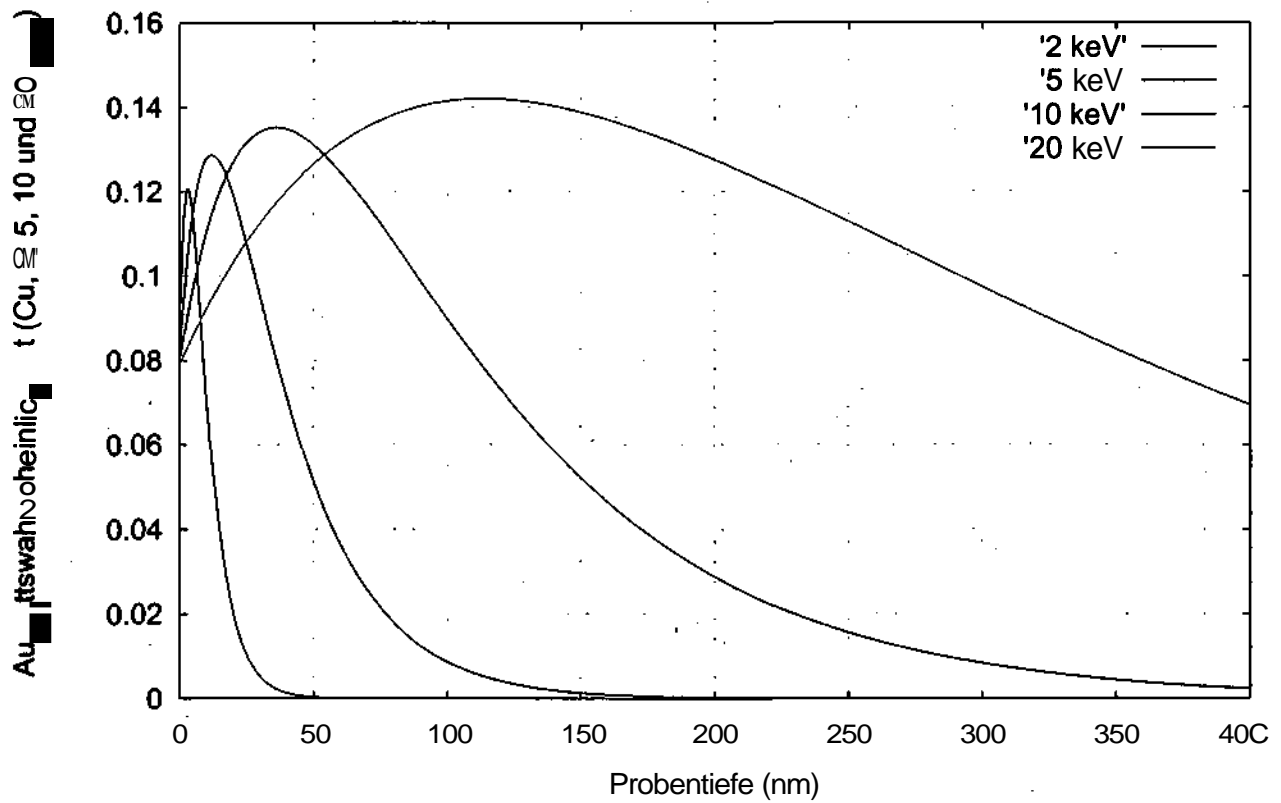


Abb. 4.3: Die Austrittswahrscheinlichkeiten $P_e(x)$ für Elektronen in Cu

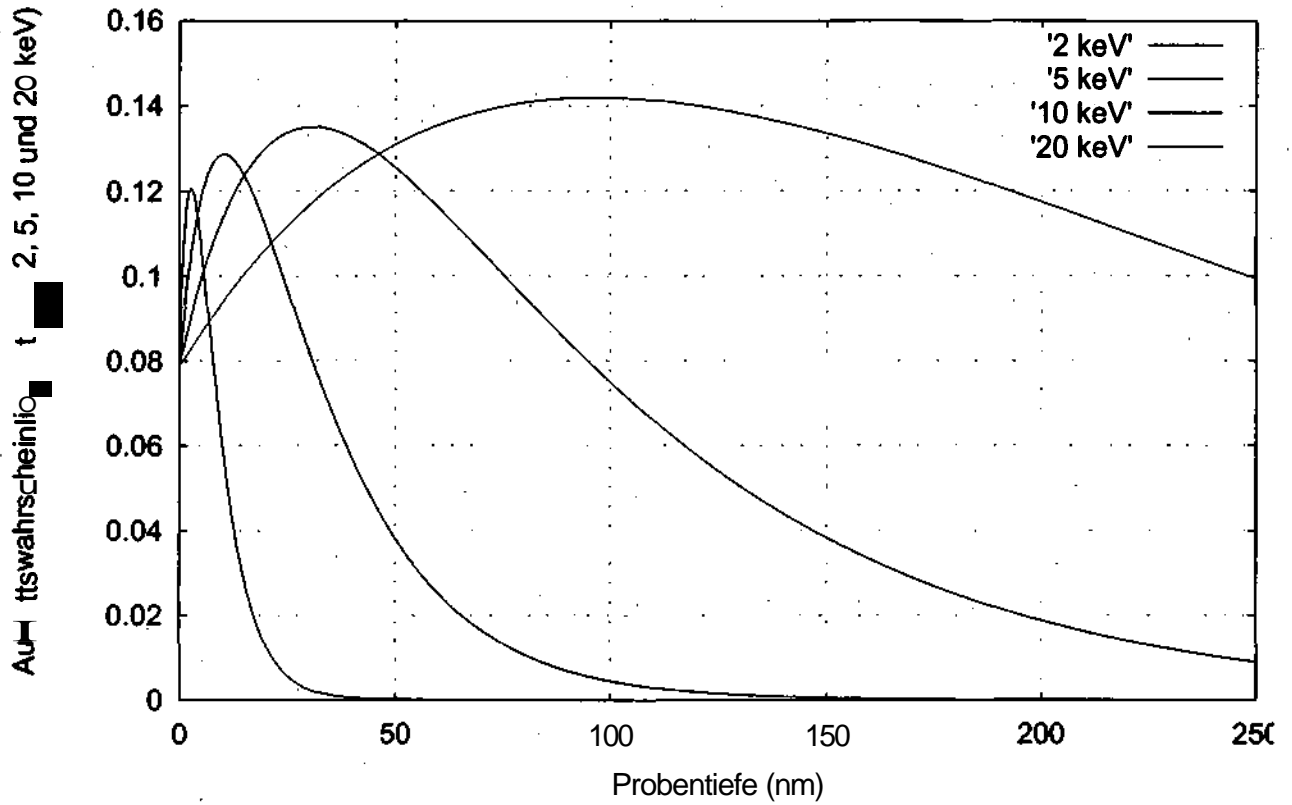


Abb. 4.4: Die Austrittswahrscheinlichkeiten $P_i(x)$ für Elektronen in Ag

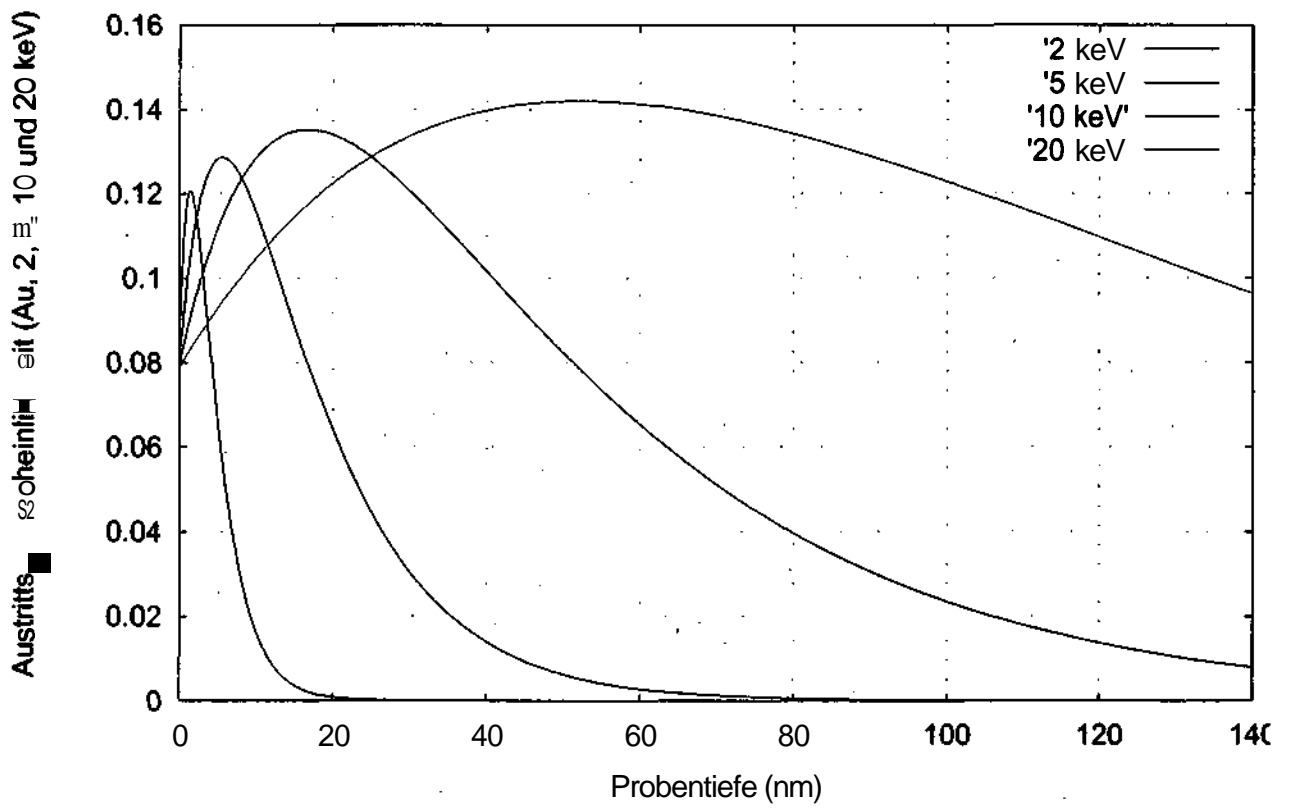


Abb. 4.5: Die Austrittswahrscheinlichkeiten $P_i(x)$ für Elektronen in Au

Wie aus den Abbildungen 4.2, 4.3, 4.4 und 4.5 zu ersehen ist, sind die Austrittswahrscheinlichkeiten $P_i(x)$ für Elektronen in verschiedenen Elementen proportional zur kinetischen Energie. Neben der kinetischen Energie werden die Austrittswahrscheinlichkeiten $P_j(x)$ auch durch die Tiefe beeinflusst.

Die Verläufe der Austrittswahrscheinlichkeiten $P_j(x)$ weisen bei einer bestimmten Tiefe ein typisches Maximum auf.

Die Tabelle 4.2 zeigt bei verschiedenen kinetischen Energien in den Elementen Al, Cu, Ag und Au das Maximum und auch die zugehörige Tiefe t_{max} (nm), bei der die Austrittswahrscheinlichkeit $P_j(x)$ am größten ist.

Element	$E_{kin} \rightarrow$	2 keV	5 keV	10 keV	20 keV
Al	t_{max} (nm)	10.3	39.7	119	375.4
	Wahrsch.	0.1206594	0.128645	0.1351568	0.1419676
Cu	t_{max} (nm)	3.1	12	36	113.5
	Wahrsch.	0.1206588	0.128645	0.1351568	0.1419676
Ag	t_{max} (nm)	2.7	10.2	30.6	96.6
	Wahrsch.	0.1206515	0.128645	0.1351568	0.1419676
Au	t_{max} (nm)	1.4	5.5	16.6	52.4
	Wahrsch.	0.1206409	0.128644	0.1351568	0.1419676

Tabelle 4.2: Die Tiefe t_{max} (nm) und das Maximum für Austrittswahrscheinlichkeiten $P_i(x)$ in den Elementen Al, Cu, Ag und Au

Um einen besseren Überblick über die Austrittswahrscheinlichkeiten $P_i(x)$ in Abhängigkeit von der kinetischen Energie für Elektronen in allen Elementen (Al, Cu, Ag und Au) zu haben, wird das Produkt aus Dichte des jeweiligen Elements und die Tiefe t_{max} , bei der die Austrittswahrscheinlichkeit $P_i(x)$ am größten ist, über der kinetischen Energie (Abb. 4.6) dargestellt.

Aus der Abb. 4.6 sieht man die Abhängigkeit des Produktes von ρ_i (g/cm³) des jeweiligen Elements i und der Tiefe t_{max} (nm) unter dem Maximum der Austrittswahrscheinlichkeit $P_i(x)$ von der kinetischen Energie. Die Zahlenwerte der Datenpunkte sind elementunabhängig und nehmen bei einer Energiezunahme von 2 nach 20 keV (Faktor 10) von 20 auf etwa 1000 (Faktor 50) zu.

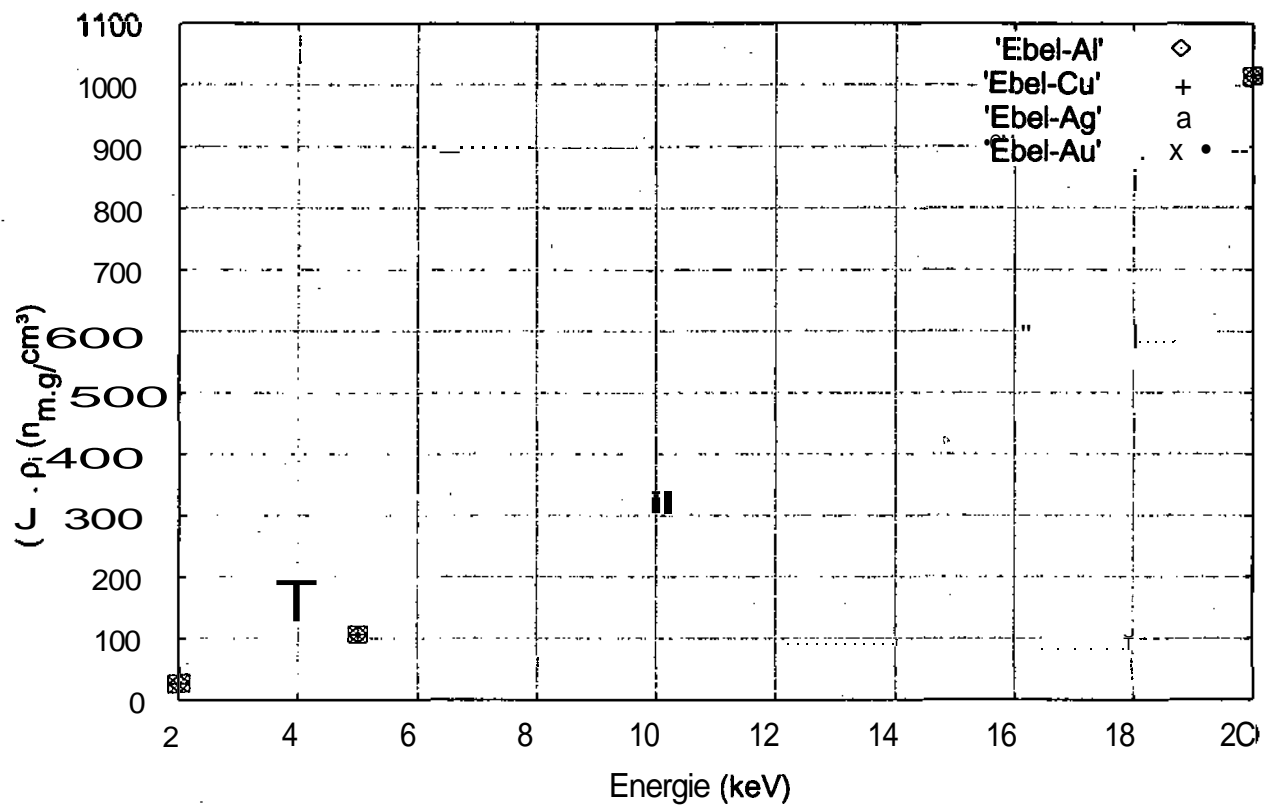


Abb. 4.6: Die Abhängigkeit des Produktes von ρ_i (g/cm^3) des jeweiligen Elements i und der Tiefe t_{max} (nm) unter dem Maximum der Austrittswahrscheinlichkeit $P_i(x)$ der kinetischen Energie

5. Elektronenausbeute

5.1 Theorie

5.1.1 Die Primäranregung in einem Reinelement in TEY (Photo- und Auger Elektronen)

Um die Zahl der photoabsorbierten Röntgenquanten in einem in der Tiefe x befindlichen differentiell kleinen Volumen in einem chemischen Element angeben zu können, muß die Schwächung des Photonenflusses von der Probenoberfläche entlang des Weges $x / \cos\alpha$ berücksichtigt werden (Abb. 5.1) [1].

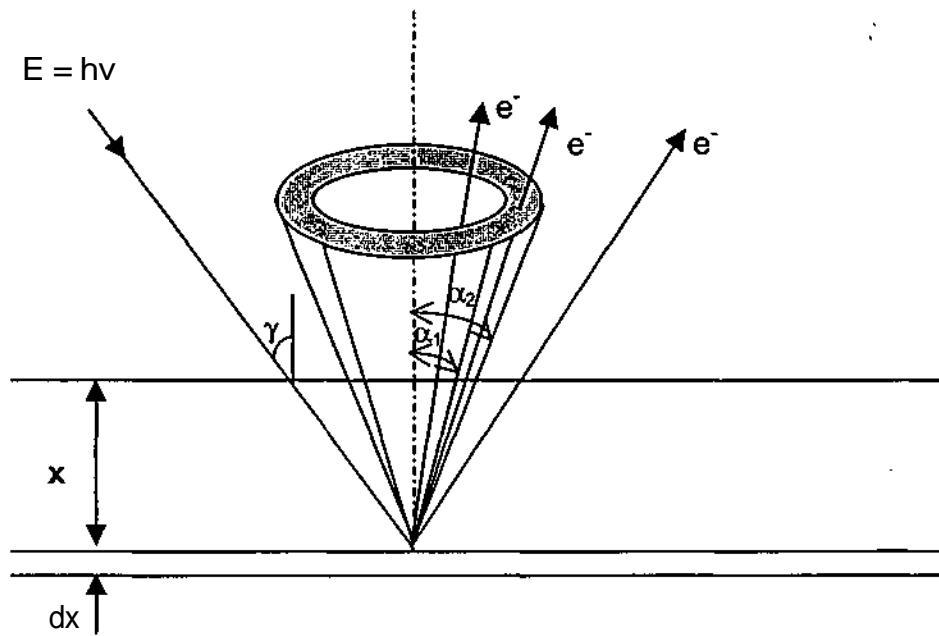


Abb. 5.1: Geometrie der Primäranregung

$$e^{-\tau_{E,i} \cdot \rho_i \cdot \frac{x}{\cos\alpha}}$$

$\tau_{E,i}$ Photoabsorptionskoeffizient für Röntgenstrahlung mit der Quantenenergie E im Element i

ρ_i Dichte des Elements i in $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$

Die ankommenden Röntgenquanten durchsetzen das Volumenelement $A \cdot dx$ (A ... Querschnittsfläche, dx ... Dicke) entlang des Weges $dx / \cos\alpha$ und werden

$$e^{-\tau_{E,i} \cdot \rho_i \cdot \frac{x}{\cos\alpha}} \cdot \frac{dx}{\cos\alpha} \cdot \rho_i \tau_{E,i}$$

Photoabsorptionen erfahren [1].

Um die einzelnen Elektronenniveaus zu berücksichtigen, wird nur der Anteil des Photoabsorptionskoeffizienten des betreffenden Niveaus j des Elements i , nämlich $\tau_{E,ij} / \tau_{E,i}$, in die Rechnung einbezogen [1].

$$e^{-\tau_{E,i} \cdot \rho_i \cdot \frac{x}{\cos \alpha}} \cdot \frac{dx}{\cos \alpha} \cdot \rho_i \cdot \tau_{E,i} \cdot \frac{\tau_{E,ij}}{\tau_{E,i}}$$

Die Austrittswahrscheinlichkeit der Elektronen aus der Probe nunmehr berücksichtigt und über die gesamte Strecke von $x = 0$ bis $x = \infty$ integriert.

$$\int_{x=0}^{\infty} e^{-\tau_{E,i} \cdot \rho_i \cdot \frac{x}{\cos \alpha}} \cdot \frac{1}{\cos \alpha} \cdot \rho_i \cdot \tau_{E,i} \cdot \frac{\tau_{E,ij}}{\tau_{E,i}} \cdot P_i(x) \cdot dx$$

Durch Einsetzen der Austrittswahrscheinlichkeit $P_i(x)$ ergibt sich

$$\frac{1}{\cos \alpha} \cdot \rho_i \cdot \tau_{E,ij} \cdot \int_{x=0}^{\infty} e^{-\tau_{E,i} \cdot \rho_i \cdot \frac{x}{\cos \alpha}} \cdot \left[A_1 \cdot e^{-\frac{1}{\rho_i \lambda_1} \rho_i x} - A_2 \cdot e^{-\frac{1}{\rho_i \lambda_2} \rho_i x} \right] \cdot dx$$

$$\frac{1}{\cos \alpha} \cdot \rho_i \cdot \tau_{E,ij} \cdot \left[A_1 \cdot \int_{x=0}^{\infty} e^{-\rho_i \left(\frac{\tau_{E,i}}{\cos \alpha} + \frac{1}{\rho_i \lambda_1} \right) x} \cdot dx - A_2 \cdot \int_{x=0}^{\infty} e^{-\rho_i \left(\frac{\tau_{E,i}}{\cos \alpha} + \frac{1}{\rho_i \lambda_2} \right) x} \cdot dx \right]$$

$$P_{ij} = \frac{1}{\cos \alpha} \cdot \tau_{E,ij} \cdot \left[A_1 \cdot \frac{1}{\left(\frac{\tau_{E,i}}{\cos \alpha} + \frac{1}{\rho_i \lambda_1} \right)} - A_2 \cdot \frac{1}{\left(\frac{\tau_{E,i}}{\cos \alpha} + \frac{1}{\rho_i \lambda_2} \right)} \right] \quad (5.1.1.1)$$

Die Analoggröße zum photoelektrischen Schwächungskoeffizienten T für die Röntgenstrahlung ist für die austretenden Elektronen der Wirkungsquerschnitt $\frac{1}{\rho \lambda}$.

Beide Größen werden in der Einheit cm^2/g ausgegeben.

Der letzte Ausdruck gibt den Beitrag der aus der Probe emittierten Photoelektronen in Folge von Photoionisation einer bestimmten Unterschale j an. Damit das gesamte Ausmaß der emittierten Photoelektronen ermittelt werden kann, muß die Summe über alle Elektronenniveaus gebildet werden [1] [2].

$$pres = \sum_j p_{ij} \quad (5.1.1.2)$$

$$j = K, L1, L2, L3, M1, \dots$$

Wird ein Elektron als Folge einer Energieübertragung etwa durch Eindringen der Röntgenquanten aus dem Atomverband entfernt, so wird der Vorgang Ionisation genannt und das emittierte Elektron als Photoelektron bezeichnet.

Bis hier wurde im Rechenprogramm das Ausmaß der aus der Probe emittierten **Photoelektronen** berechnet.

Die emittierten Photoelektronen besitzen eine kinetische Energie, die aus der Einstein-Gleichung (Gleichung 2.2) berechnet wird. Dazu braucht man die Energie des Röntgenquants $h\nu$, die im Rechenprogramm und auch im Experiment von knapp unterhalb bis knapp oberhalb der K-Kante des jeweiligen Elements variiert und die Bindungsenergie des Elektrons $E_{B,ij}$, die für das gewählte Element eingelesen wird.

Die Bindungsenergien der Kanten stehen in den Tabellen gleich in der ersten Stelle nach den Kanten-Symbolen.

In der Gleichung 5.1.1.1 beschreibt der Faktor $\tau_{E,ij}$ die Wahrscheinlichkeit für photoelektrische Absorption der Quantenstrahlung mit der Energie E im Niveau j des Elements i . Sollen Elektronen des Relaxationsprozesses erfasst werden, so ist anstelle von $\tau_{E,ij}$ mit den im nächsten Abschnitt erarbeiteten Faktoren P_{KLL} , P_{LMM} und P_{MNN} zu operieren.

Auger Elektronen

Treffen Photonen auf Atome **auf**, so können unterschiedliche Wechselwirkungen (kohärente und inkohärente Streuung, photoelektrische Absorption und anschließende Emission von charakteristischer Röntgenstrahlung oder von Auger Elektronen) beobachtet werden. Für Total Electron Yield (TEY) sind der Photoeffekt und der Augereffekt von Bedeutung.

Beim Photoeffekt wird ein Elektron durch ein Photon aus der Atomhülle herausgeschlagen. Die Wahrscheinlichkeit für die Emission eines Photoelektrons ist proportional zum jeweiligen photoelektrischen Absorptionkoeffizienten.

$$P_{1s1/2} = \tau_{E,i,K} \quad (5.1.1.3)$$

$$P_{2s,p} = \tau_{E,i,L} \quad (5.1.1.4)$$

$$P_{3spd} = \tau_{E,i,M} \quad (5.1.1.5)$$

$$P_{4spdf} = \tau_{E,i,N} \quad (5.1.1.6)$$

Die anfängliche kinetische Energie eines Photoelektrons ergibt sich aus der Differenz der Energie des Photons und der Bindungsenergie des Elektrons (Einstein-Gleichung).

$$E_{1s1/2} = h\nu - E_{i,K} \quad (5.1.1.7)$$

$$E_{2sp} = h\nu - \langle E_{i,L} \rangle \quad (5.1.1.8)$$

$$E_{3spd} = h\nu - \langle E_{i,M} \rangle \quad (5.1.1.9)$$

$$E_{4spdf} = h\nu - \langle E_{i,N} \rangle \quad (5.1.1.10)$$

Bei einem strahlenden Übergang geht ein Elektron von einer äusseren Schale (oder Unterschale) bei gleichzeitiger Emission charakteristischer Strahlung auf die freie Position über. Die Wahrscheinlichkeit für die Emission möglicher Strahlungen errechnet sich gemäß (s. a. Diagramme 1 und 2)

$$pK\alpha = \tau_{E,i,K} \omega_{i,K} \cdot p_{i,K,L23} \quad (5.1.1.11)$$

$$pK\beta = \tau_{E,i,K} \omega_{i,K} \cdot p_{i,K,M23} \quad (5.1.1.12)$$

$$pL\alpha, \beta = \tau_{E,i,L} (\omega_{i,K} \cdot p_{i,K,L23} \cdot \omega_{i,L} \cdot p_{i,L,M} + 2 \cdot (1 - \omega_{i,K}) \cdot \omega_{i,L} \cdot p_{i,L,M}) + \tau_{E,i,L} \cdot \omega_{i,L} \cdot p_{i,L,M} \quad (5.1.1.13)$$

Die Quantenenergie der Fluoreszenzstrahlung entspricht der Differenz der beiden am Übergang beteiligten Energieniveaus.

Bei einem nichtstrahlenden Übergang geht ein Elektron einer höheren Schale in eine niedrigere über und übergibt die Differenz der Bindungsenergien an ein zweites Elektron.

Dieses Elektron verlässt das Atom und wird als Auger Elektron bezeichnet. Die Wahrscheinlichkeiten für die Emission von Auger Elektronen sind proportional zu (s. a. Diagramme 1, 2 und 3)

$$P_{KLL} = \tau_{E,i,K} \cdot (1 - \omega_{i,K}) \quad (5.1.1.14)$$

$$P_{LUM} = \tau_{E,i,K} (\omega_{i,K} \cdot P_{i,K,L23} \cdot (1 - \omega_{i,L}) + 2 \cdot (1 - \omega_{i,K}) \cdot (1 - \omega_{i,L})) + \tau_{E,i,L} \cdot (1 - \omega_{i,L}) \quad (5.1.1.15)$$

$$P_{MNN} = \tau_{E,i,K} (\omega_{i,K} \cdot P_{i,K,M23} + \omega_{i,K} \cdot P_{i,K,L23} \cdot \omega_{i,L} \cdot P_{i,L,M} + 2 \cdot \omega_{i,K} \cdot P_{i,K,L23} \cdot (1 - \omega_{i,L}) + 2(1 - \omega_{i,K}) \cdot \omega_{i,L} \cdot P_{i,L,M} + 4 \cdot (1 - \omega_{i,K}) \cdot (1 - \omega_{i,L})) + \tau_{E,i,L} \cdot (\omega_{i,L} \cdot P_{i,L,M} + 2(1 - \omega_{i,L})) + \tau_{E,i,M} \quad (5.1.1.16)$$

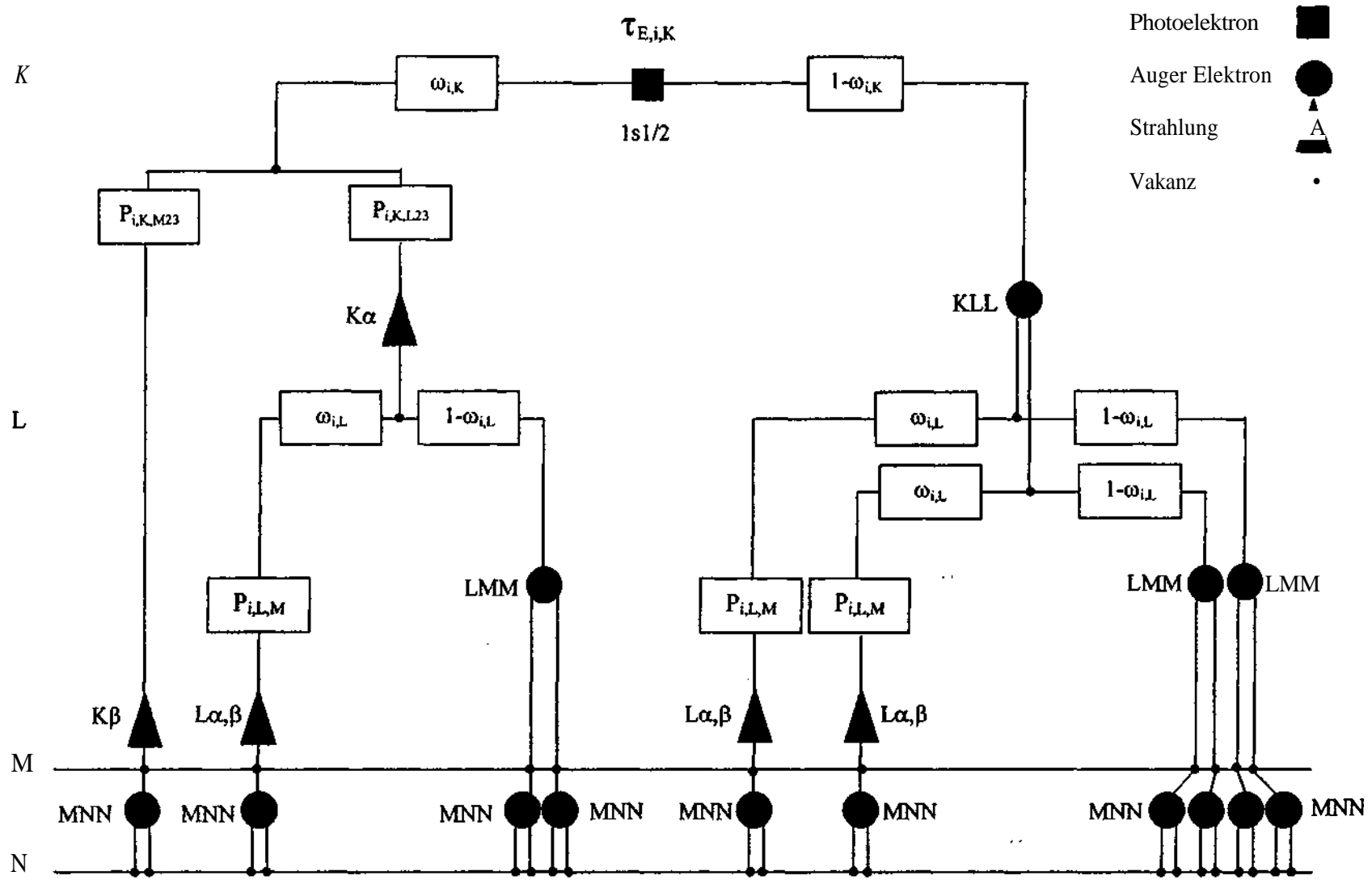
Die kinetische Energie eines Auger Elektrons entspricht der beim Übergang des ersten Elektrons gewonnenen Energie abzüglich seiner eigenen Bindungsenergie.

$$E_{KLL} = E_{i,K} - 2 \cdot \langle E_{i,L} \rangle \quad (5.1.1.17)$$

$$E_{LMM} = \langle E_{i,L} \rangle - 2 \cdot \langle E_{i,M} \rangle \quad (5.1.1.18)$$

$$E_{MNN} = \langle E_{i,M} \rangle - 2 \cdot \langle E_{i,N} \rangle \quad (5.1.1.19)$$

Die Diagramme 1,2 und 3 zeigen die photoelektrische Absorption in verschiedenen Schalen und nachfolgende strahlende und nichtstrahlende Übergänge.



- Photoelektron
- Auger Elektron
- Strahlung
- Vakanz

Diagramm 1. Emission der Röntgenstrahlungen $K\alpha$, $K\beta$ und $L\alpha, \beta$, des $1s$ -Photoelektrons und der KLL-, LMM- und MNN-Auger Elektronen nach Photoionisation der K-Schale

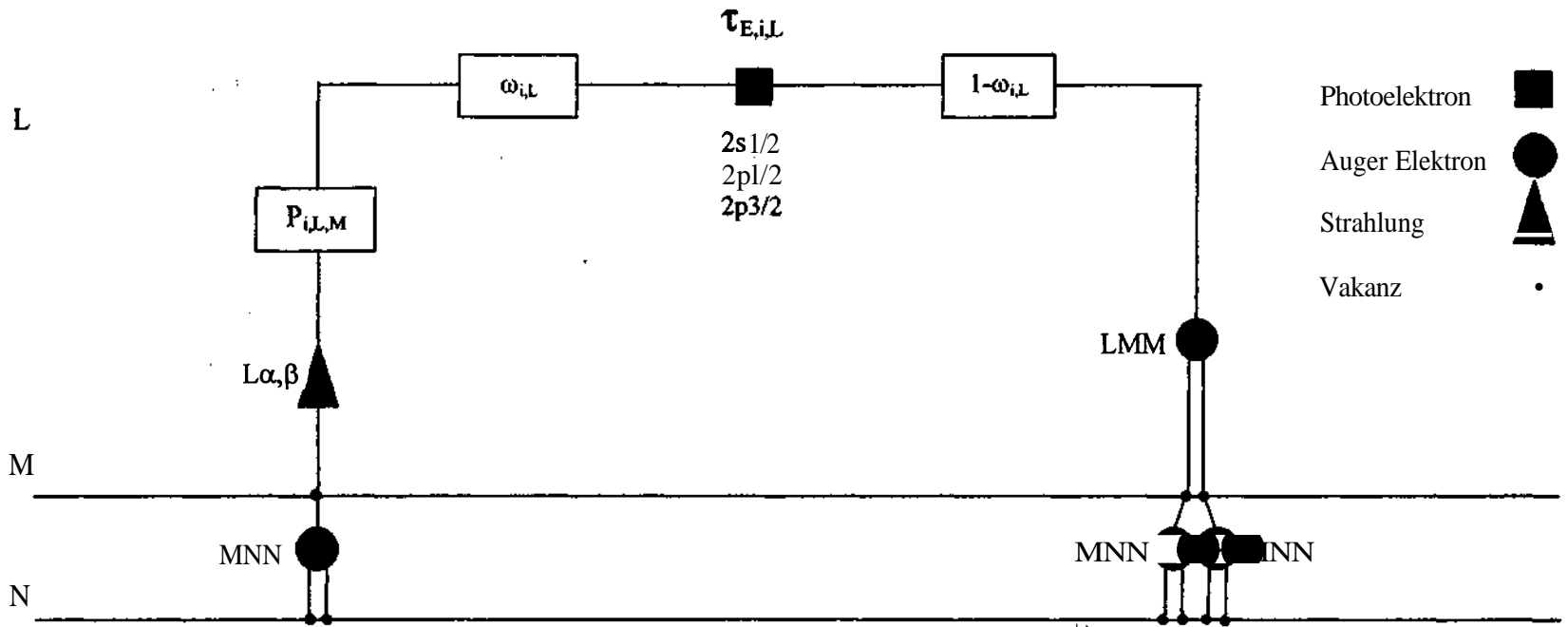


Diagramm 2. Emission der Röntgenstrahlungen $L\alpha, \beta$, der 2s bzw. 2p-Photoelektronen und LMM- und MNN-Auger Elektronen nach Photoionisation der L-Schale

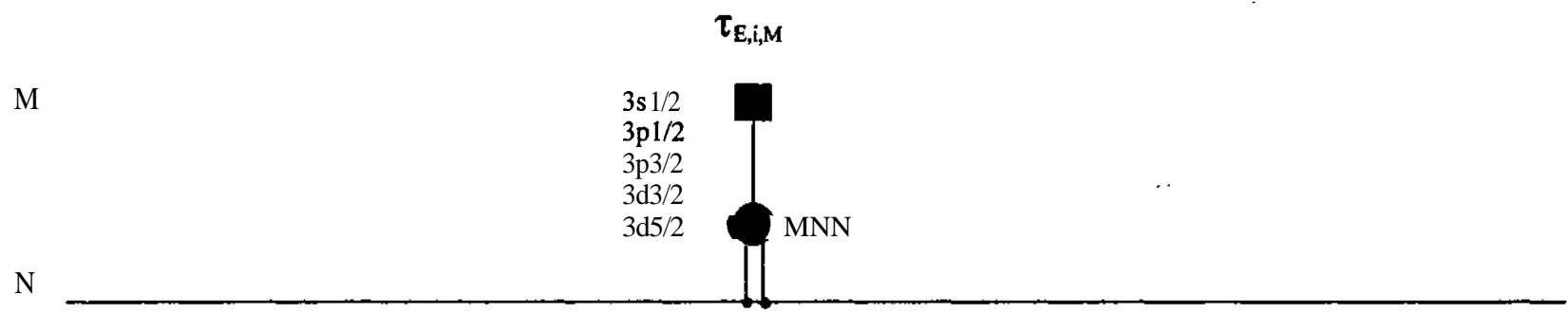


Diagramm 3. Emission der 3s-, 3p- bzw. 3d-Photoelektronen und des MNN Auger Elektrons nach Photoionisation der M-Schale

In den vorangegangenen Gleichungen spielt die Fluoreszenzausbeute eine wesentliche Rolle. Abb. 5.2 zeigt die Wahrscheinlichkeit für die Emission eines charakteristischen Photons. Somit hat man einen besseren Überblick über die Wahrscheinlichkeit für einen strahlenden Übergang (ω_{ij}) oder die Wahrscheinlichkeit für einen nichtstrahlenden Übergang ($1-\omega_{ij}$) [18].

Die Fluoreszenzausbeute ω_K beschreibt für die **K-Schale** der Elemente Lithium (Li, $Z = 3$) bis Plutonium (Pu, $Z = 94$), die Fluoreszenzausbeute ω_L für die **L-Schale** der Elemente Natrium (Na, $Z = 11$) bis Plutonium (Pu, $Z = 94$) und die Fluoreszenzausbeute ω_M für die **M-Schale** der Elemente Kalium (K, $Z = 19$) bis Plutonium (Pu, $Z = 94$) den Prozentsatz der Emission eines charakteristischen K-, L- oder M-Photons.

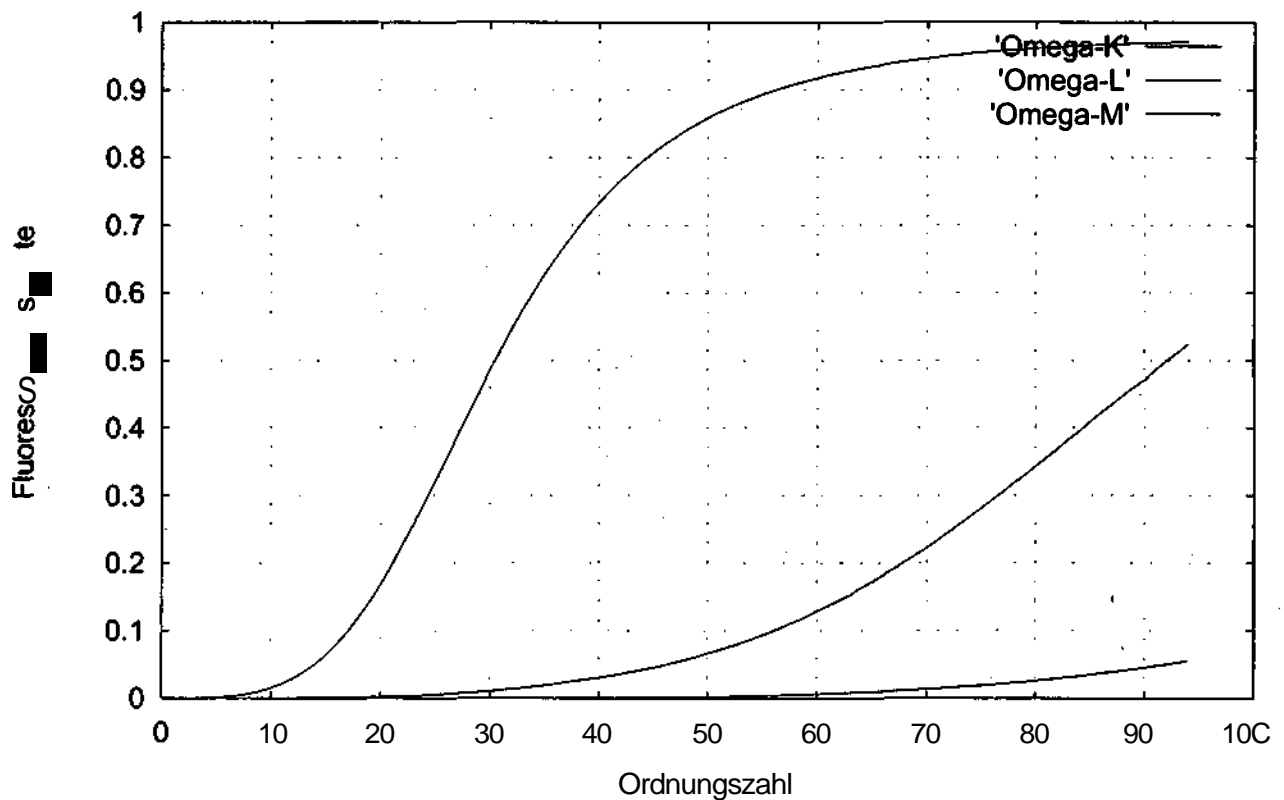


Abb. 5.2: Die Fluoreszenzausbeute ω_K , ω_L und ω_M in Abhängigkeit von der Ordnungszahl (J. H. Hubbell).

5.1.2 Die Sekundäranregung in der quantitativen RFA

In der quantitativen Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA) wird der Beitrag der Sekundäranregung zur gemessenen Fluoreszenzstrahlung ijk folgendermassen errechnet. Die Herleitung des von der Sekundäranregung herrührenden Beitrags zur gemessenen Fluoreszenzzählrate wird anhand der Abbildungen 5.3 und 5.4 vorgenommen [1].

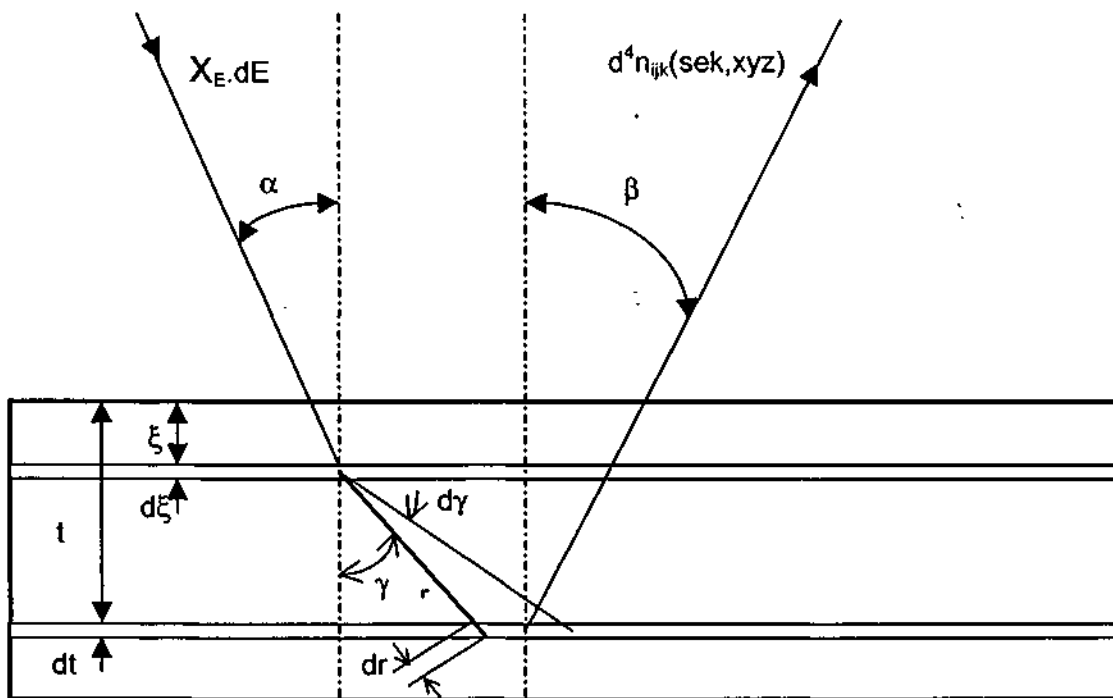


Abb. 5.3: Geometrie zur Sekundäranregung, Teil 1

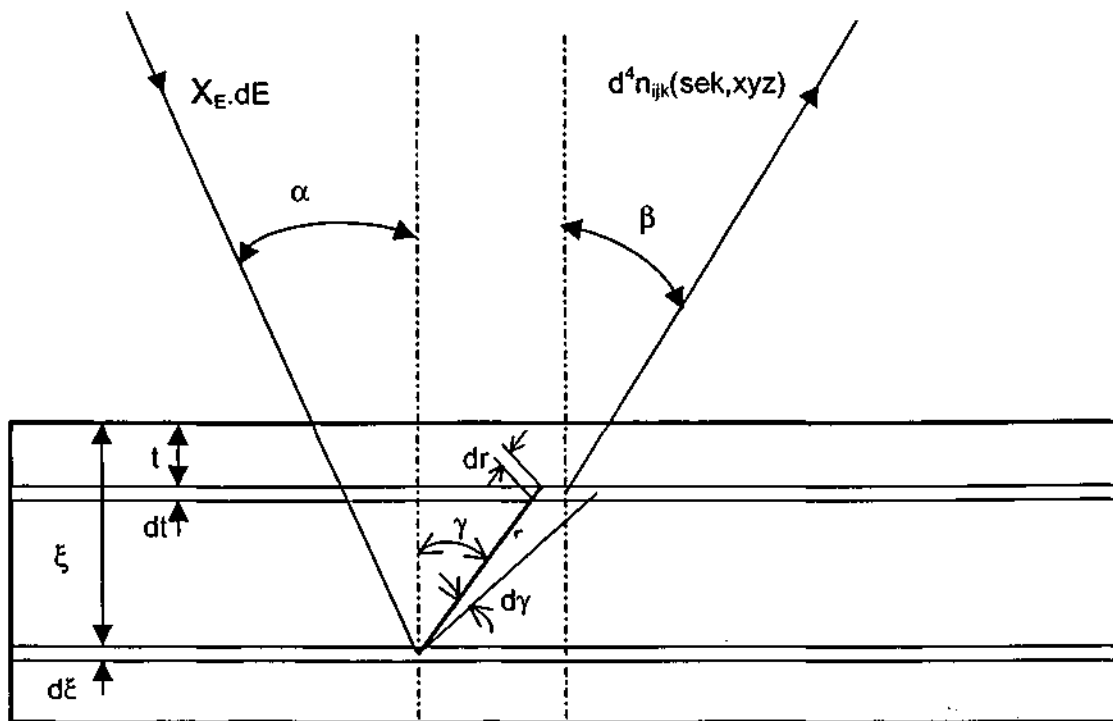


Abb. 5.4: Geometrie zur Sekundäranregung, Teil 2

Ähnlich zur Primäranregung wird ein Volumen $A \cdot d\xi$ betrachtet, in welchem die von der Röntgenröhre kommende Strahlung eine charakteristische Fluoreszenzstrahlung anregt.

Diese Strahlung wird zur Unterscheidung von der in der Analytik verwendeten ijk durch das Zahlentripel xyz gekennzeichnet. Die in $A \cdot d\xi$ erzeugte xyz -Fluoreszenzstrahlung erfüllt den gesamten Raumwinkel 4π gleichmäßig. Betrachtet man den unter dem Winkel γ zum Flächenlot in Richtung $A \cdot dt$ sich ausbreitenden Anteil, so beträgt der, in einen Winkelbereich von γ bis $\gamma + d\gamma$ gelangende Anteil

$$\frac{2 \cdot r \cdot \sin \gamma \pi \cdot r \cdot d\gamma}{4 \pi \cdot r^2} = \frac{\sin \gamma \cdot d\gamma}{2}$$

Sodann ist die Schwächung der xyz -Strahlung entlang des Weges r und die Absorption in dr zu quantifizieren. Aus der Abb. 5.3 folgen für r

$$r = \frac{t - \xi}{\cos \gamma}$$

und für das Wegstück dr innerhalb des Volumens $A \cdot dt$

$$dr = \frac{dt}{\cos \gamma}$$

In der folgenden Gleichung wird die entlang dr erzeugte ijk -Fluoreszenzstrahlung beschrieben. Die weiteren Überlegungen können daher in Analogie zur Primäranregung geführt werden

Um die Integration über eine Singularität zu umgehen, wird die Sekundäranregung wie aus den Abbildungen 5.3 und 5.4 zu ersehen ist in zwei Anteile zerlegt. Der Anteil $d^4 n_{ijk}(sek, xyz)$ gemäß Abb. 5.3 errechnet sich zu

$$d^4 n_{ijk}(sek, xyz)_1 = \bar{\chi} \cdot A \cdot \frac{\cos \alpha}{d^2} \cdot e^{-\tau_{F,c} \cdot \rho_c \cdot \xi} \cdot \frac{f}{\omega_a} \cdot \frac{d\xi}{\cos \beta} \cdot \rho_c \cdot c_i \cdot \tau_{F,c} \cdot M_{F,c} \cdot p_{F,c} \cdot \omega_{xy} \cdot \frac{\sin \gamma \cdot d\gamma}{2} \cdot e^{-\tau_{xyz,c} \cdot \rho_c \cdot \frac{t}{\cos \gamma}} \cdot \frac{dt}{\cos \gamma} \cdot c_i \cdot \rho_c \cdot \tau_{xyz,i} \cdot M_{ij} \cdot \omega_{ij} \cdot p_{ijk} \cdot \frac{\Omega}{4\pi} \cdot e^{-\tau_{ijk,c} \cdot \rho_c \cdot \frac{t}{\cos \beta}} \cdot \epsilon_{ijk} \quad (5.1.2.1)$$

dabei sind

$$e^{-\tau_{F,c} \cdot \rho_c \cdot \frac{\xi}{\cos \alpha}} \quad \text{Abschwächung von der Oberfläche zu } A \cdot d\xi$$

$\tau_{E,x}$ Photoabsorptionskoeffizient für die Anregungsstrahlung im Element x

$e^{-\tau_{xyz,c} \rho_c \frac{t-\xi}{\cos \gamma}}$ Abschwächung entlang r

$\tau_{xyz,i}$ Photoabsorptionskoeffizient für die E_{xy} -Linie im Element i

$e^{-\tau_{ijk,c} \rho_c \frac{t}{\cos \beta}}$ Abschwächung von A.dt zur Oberfläche

Mit den Abkürzungen

$$Const = \frac{A \cdot \cos \alpha}{d} \cdot I \cdot \frac{1}{\cos \alpha} \cdot \frac{\Omega}{4\pi},$$

$$B_{ijk} = M_{ij} \cdot \omega_{ij} \cdot p_{ijk}$$

und

$$B_{xyz} = M_{x,y} \cdot p_{xyz} \cdot \omega_{xy}$$

lautet die Gleichung

$$d * n_{ijk}(sek, xyz)_1 = \frac{1}{2} Const \cdot B_{ijk} \cdot B_{xyz} \cdot C_i \cdot C_x \cdot \tau_{E,x} \cdot \tau_{xyz,i} \cdot E_{ijk} \cdot \rho_c^2 \cdot x_E \cdot \frac{\sin \gamma}{\cos \gamma} \cdot e^{-\left(\frac{\tau_{ijk,c}}{\cos \beta} + \frac{\tau_{xyz,c}}{\cos \gamma}\right) \rho_c \cdot t} \cdot e^{-\left(\frac{\tau_{E,c}}{\cos \alpha} + \frac{\tau_{xyz,c}}{\cos \gamma}\right) \rho_c \cdot \xi} \cdot dE \cdot dy \cdot dt \cdot d\xi \quad (5.1.2.2)$$

Das Integrationsintervall von ξ kann für die in Abb. 5.3 gezeigte Geometrie von 0 bis t erstreckt werden. Anschließend wird über f von 0 bis ∞ , über γ von 0 bis $\pi/2$ und über E von E_{xy} bis E_0 integriert. Aus der Abb. 5.4 folgen für r

$$r = \frac{\xi - t}{\cos \gamma}$$

und für dr wieder

$$dr = \frac{-dt}{\cos \gamma}$$

und damit für den zweiten Anteil der Sekundärstrahlung $d^4 n_{ijk}(sek,xyz)_2$

$$d^4 n_{ijk}(sek,xyz)_2 = \frac{1}{2} \text{Const} \cdot B_{ijk} \cdot B_{xyz} \cdot c_i \cdot c_x \cdot \tau_{E,x} \cdot \tau_{xyz,i} \cdot \mathcal{E}_{ijk} \cdot \rho_c^2 \quad (5.1.2.3)$$

$$\cdot x_E \frac{\sin \gamma}{\cos \gamma} \cdot \left\{ \frac{\tau_{ijk,c}}{\cos \beta} + \frac{\tau_{xyz,c}}{\cos \gamma} \right\} \rho_c \cdot \left\{ \frac{\kappa_x}{\cos \alpha} + \frac{\tau_{xyz,c}}{\cos \gamma} \right\} \rho_c \cdot \xi \cdot dE \cdot d\gamma \cdot dt \cdot d\xi$$

Die Integrationsintervalle entsprechend der in Abb. 5.4 gezeigten Geometrie lauten für ξ von f bis ∞ , für t von 0 bis ∞ , für y von 0 bis $rc/2$ und für E wieder von E_{xy} bis E_0 .

Als Summe aus den beiden Sekundärstrahlungsanteilen $d^4 n_{ijk}(sek,xyz)_1$ (Gleichung 5.1.2.2) und $d^4 n_{ijk}(sek,xyz)_2$ (Gleichung 5.1.2.3) wird schließlich

$$n_{ijk}(sek,xyz) = \frac{1}{2} \text{Const} \cdot B_{ijk} \cdot B_{xyz} \cdot c_i \cdot c_x \cdot \tau_{xyz,i} \cdot \mathcal{E}_{ijk} \cdot \int_{E_{xy}}^{E_0} \frac{x_E \cdot \tau_{E,x}}{\frac{\tau_{E,c}}{\cos \alpha} + \frac{\tau_{ijk,c}}{\cos \beta}} \quad (5.1.2.4)$$

$$\left[\frac{\cos \beta}{\tau_{ijk,c}} \cdot \ln \left\{ 1 + \frac{1}{\cos \beta} \cdot \frac{\tau_{ijk,c}}{\tau_{xyz,c}} \right\} + \frac{\cos \alpha}{\tau_{E,c}} \cdot \ln \left\{ 1 + \frac{1}{\cos \alpha} \cdot \frac{\tau_{E,c}}{\tau_{xyz,c}} \right\} \right] dE$$

gefunden [1].

5.1.3 Die Sekundäranregung in einem Reinelement in TEY(Photo- und Auger Elektronen)

Im Falle der Sekundäranregung in einem Reinelement wird ein Elektron in einer Schale eines Nachbaratoms durch charakteristische $K\alpha$ - oder $K\beta$ -Strahlung herausgeschlagen.

Beispielsweise kann die $K\beta$ -Strahlung des Elements i die L-Schale eines Nachbaratoms ionisieren. Somit entsteht eine Vakanz in der L-Schale.

Um die Sekundäranregung in einem Reinelement i zu beschreiben modifizieren wir die bereits beschriebene Gleichung 5.1.2.4 der Sekundäranregung für Mehrelementproben in der Röntgenfluoreszenzanalyse. Somit erhalten wir im Falle der Ionisation durch $K\alpha$ -Strahlung

$$p_{i,j,m}(s) = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\cos \alpha} \cdot \tau_{E,i,K} \cdot \omega_{iK} \cdot p_{i,KL23} \cdot \tau_{Krad,i,level} \cdot \sum_{i=1}^2 \left(\frac{1}{\cos \alpha} \right)^{i+1} \cdot \frac{A_i}{\tau_{E,i} + C_i} \cdot \left(\frac{1}{C_i} \cdot \log \left(1 + \frac{C_i}{\tau_{Krad,i}} \right) + \frac{\cos \alpha}{\tau_{E,i}} \cdot \log \left(1 + \frac{\tau_{E,i}}{\cos \alpha \cdot \tau_{Krad,i}} \right) \right) \quad (5.1.3.1)$$

und im Falle der Ionisation durch $K\beta$ -Strahlung

$$p_{i,j,m}(s) = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\cos \alpha} \cdot \tau_{E,i,K} \cdot \omega_{iK} \cdot p_{i,KM23} \cdot \tau_{Krad,i,level} \cdot \sum_{i=1}^2 \left(\frac{1}{\cos \alpha} \right)^{i+1} \cdot \frac{A_i}{\tau_{E,i} + C_i} \cdot \left(\frac{1}{C_i} \cdot \log \left(1 + \frac{C_i}{\tau_{Krad,i}} \right) + \frac{\cos \alpha}{\tau_{E,i}} \cdot \log \left(1 + \frac{\tau_{E,i}}{\cos \alpha \cdot \tau_{Krad,i}} \right) \right) \quad (5.1.3.2)$$

wobei C_i die Abkürzung für $\frac{1}{M}$ ist [1][2][3].

5.1.4 Die Primäranregung in einer Legierung in TEY (Photo- und Auger Elektronen)

Die Gleichung 5.1.1.1 zur Berechnung der emittierten Photoelektronen aus einem Reinelement wird hier herangezogen um den Beitrag der aus einer binären Legierungsprobe emittierten Photoelektronen in Folge von Photoionisation einer bestimmten Unterschale j eines Elements zu bestimmen.

Die zwei Elemente in der binären Legierungsprobe werden durch den Index $i=1$ bzw. $i=2$ gekennzeichnet. Es wird $\tau_{E,i}$ durch $\tau_{E,c}$ ersetzt. Dabei bezeichnet der Index c die binäre Legierungsprobe.

$$\tau_{E,c} = c_1 \cdot \tau_{E,1} + c_2 \cdot \tau_{E,2}$$

$$p_{ij}(\text{prim}_{\text{Legierung}}) = c_i \cdot \frac{1}{\cos \alpha} \cdot \tau_{E,ij} \cdot \left[A_1 \cdot \frac{1}{\left(\frac{\tau_{E,c}}{\cos a} + \frac{1}{\rho_i \lambda_1} \right)} - A_2 \cdot \frac{1}{\left(\frac{\tau_{E,c}}{\cos a} + \frac{1}{\rho_i \lambda_2} \right)} \right] \quad (5.1.4.1)$$

- $\tau_{E,c}$ Photoabsorptionskoeffizient für Röntgenstrahlung mit der Quantenenergie E in der Legierung c
- c_1 Die Konzentration des ersten Elements in der binären Legierungsprobe
- c_2 Die Konzentration des zweiten Elements in der binären Legierungsprobe

In der Gleichung 5.1.4.1 sind die gesuchten Konzentrationen zuzüglich zu c_1 und c_2 auch in $\tau_{E,c}$ enthalten. Das gesamte Ausmaß der emittierten Photoelektronen wird ermittelt, in dem die Summe über alle Elektronenniveaus gebildet wird [1][2].

$$pres_{\text{Legierung}} = \sum_j p_{ij}(\text{prim}_{\text{Legierung}}) \quad (5.1.4.2)$$

$j = K, L1, L2, L3, M1, \dots$

Auger Elektronen

Analog zur Primäranregung in einem Reinelement ist die Wahrscheinlichkeit für die Emission eines Photoelektrons aus einer binären Legierungsprobe proportional zum jeweiligen photoelektrischen Absorptionskoeffizienten. Wir modifizieren die Gleichungen 5.1.1.3 bis 5.1.1.6 für die zwei Elemente $i = 1$ und $i = 2$ in einer binären Legierungsprobe

$$p_{1s1/2} = c_i \cdot \tau_{E,i,K} \quad (5.1.4.3)$$

$$p_{2s,p} = c_i \cdot \tau_{E,i,L} \quad (5.1.4.4)$$

$$p_{3spd} = c_i \cdot \tau_{E,i,M} \quad (5.1.4.5)$$

$$p_{4spdf} = c_i \cdot \tau_{E,i,N} \quad (5.1.4.6)$$

Die Gleichungen 5.1.1.7 bis 5.1.1.10 für Berechnung der anfänglichen kinetischen Energie eines Photoelektrons, die sich aus der Differenz der Energie des Photons und der Bindungsenergie des Elektrons ergeben, bleiben unverändert.

$$(5.1.1.7) \quad E_{1s1/2} = h\nu - E_{i,K}$$

$$(5.1.1.8) \quad E_{2sp} = h\nu - \langle E_{i,L} \rangle$$

$$(5.1.1.9) \quad E_{3spd} = h\nu - \langle E_{i,M} \rangle$$

$$(5.1.1.10) \quad E_{4spdf} = h\nu - \langle E_{i,N} \rangle$$

Die Wahrscheinlichkeit für einen strahlenden Übergang in einem Element der binären Legierungsprobe ergibt sich durch Berücksichtigung des Konzentrationsanteiles des betreffenden Elements c_i bei den Gleichungen 5.1.1.11 bis 5.1.1.13 zu

$$pK\alpha = c_i \cdot \tau_{E,i,K} \cdot \omega_{i,K} \cdot p_{i,K,L23} \quad (5.1.4.7)$$

$$pK\beta = c_i \cdot \tau_{E,i,K} \cdot \omega_{i,K} \cdot p_{i,K,M23} \quad (5.1.4.8)$$

$$pL\alpha, \beta = c_i \cdot \tau_{E,i,K} \cdot (\omega_{i,K} \cdot p_{i,K,L23} \cdot \omega_{i,L} \cdot p_{i,L,M} + 2 \cdot (1 - \omega_{i,K}) \cdot \omega_{i,L} \cdot p_{i,L,M}) + \tau_{E,i,L} \cdot \omega_{i,L} \cdot p_{i,L,M} \quad (5.1.4.9)$$

Durch Berücksichtigung von q auch bei den Gleichungen 5.1.1.14 bis 5.1.1.16 erhalten wir die Wahrscheinlichkeiten für die Emission von Auger Elektronen des betreffenden Elements

$$p_{KLL} = c_i \cdot \tau_{E,i,K} \cdot (1 - \omega_{i,K}) \quad (5.1.4.10)$$

$$p_{LMM} = c_i \cdot \tau_{E,i,K} \cdot (\omega_{i,K} \cdot p_{i,K,L23} \cdot (1 - \omega_{i,L}) + 2 \cdot (1 - \omega_{i,K}) \cdot (1 - \omega_{i,L})) + \tau_{E,i,L} \cdot (1 - \omega_{i,L}) \quad (5.1.4.11)$$

$$p_{MNN} = c_i \cdot \tau_{E,i,K} \cdot \omega_{i,K} \cdot p_{i,K,M23} + \omega_{i,K} \cdot p_{i,K,L23} \cdot \omega_{i,L} \cdot p_{i,L,M} + 2 \cdot \omega_{i,K} \cdot p_{i,K,L23} \cdot (1 - \omega_{i,L}) + 2(1 - \omega_{i,K}) \cdot \omega_{i,L} \cdot p_{i,L,M} + 4 \cdot (1 - \omega_{i,K}) \cdot (1 - \omega_{i,L}) + \tau_{E,i,L} \cdot (\omega_{i,L} \cdot p_{i,L,M} + 2(1 - \omega_{i,L})) + \tau_{E,i,M} \quad (5.1.4.12)$$

Die Gleichungen 5.1.1.17 bis 5.1.1.19 für die kinetische Energie eines Auger Elektrons werden unverändert übernommen

$$(5.1.1.17) \quad E_{KLL} = E_{j,K} - 2 \cdot \langle E_{i,L} \rangle$$

$$(5.1.1.18) \quad E_{LMM} = \langle E_{i,L} \rangle - 2 \cdot \langle E_{i,M} \rangle$$

$$(5.1.1.19) \quad E_{MNN} = \langle E_{i,M} \rangle - 2 \cdot \langle E_{i,N} \rangle$$

Die Abb. 5.5 zeigt die graphische Darstellung der mittleren kinetischen Energie der KLL-, LMM- und MNN-Auger Elektronen in Abhängigkeit von Ordnungszahl.

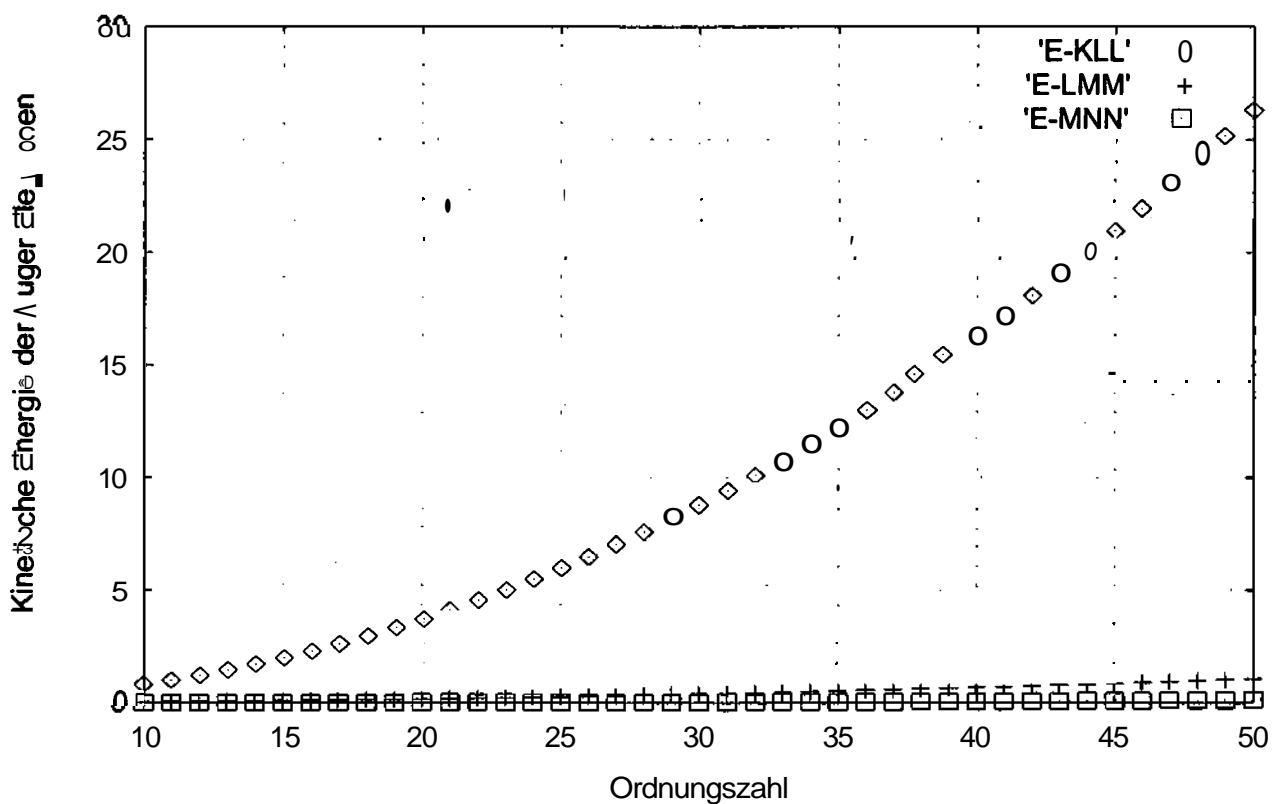


Abb. 5.5: Die Abhängigkeit der mittleren kinetischen Energie der KLL-, LMM- und MNN-Auger Elektronen von Ordnungszahl

Wie aus der Abb. 5.5 zu ersehen ist, hat der Verlauf der kinetischen Energie der KLL Auger Elektronen im Vergleich zum Verlauf der kinetischen Energie der LMM- und MNN-Auger Elektronen einen starken Anstieg. Der Grund liegt darin, dass die kinetische Energie der KLL Auger Elektronen durch Bindungsenergie der Elektronen in der K-Schale des jeweiligen Elements vorgegeben ist und, dass die Bindungsenergie der Elektronen in der **K-Schale** sehr viel grosser als die Bindungsenergie der Elektronen in der L-, M- und N-Schale ist.

Die Bindungsenergie des Elektrons ist abhängig von der Kernladungszahl des Elements und von der Schale, in der es sich befindet.

Da ein Elektron nur dann angeregt werden kann, wenn die Energie des Photons ausreicht, um es aus dem Atom zum **Fermi-Niveau** zu heben, zeigen die Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,Cu}$ und $\tau_{E,Ag}$ aus der Abb. 5.6 jeweils beim Erreichen der Bindungsenergie einer Schale charakteristische Kanten.

Die Berechnung der Wahrscheinlichkeit zur Emission der Photoelektronen und KLL-, LMM- und MNN-Auger Elektronen im hier erarbeiteten Rechenprogramm am Beispiel der binären Legierung AgCu erfolgt für Quantenenergien knapp unterhalb bis knapp oberhalb (0.0001 bis 0.0001) der K-Kanten der Elemente Ag und Cu.

Die Abb. 5.6 zeigt die Energieabhängigkeit der Photoabsorptionskoeffizienten $\tau_{E,Ag}$ und $\tau_{E,Cu}$ für die Elemente Ag und Cu im Quantenenergiebereich von 1 bis 300 keV und soll dazu dienen, die in diesem Kapitel beschriebenen Grundlagen und das auf diesen aufbauende Rechenprogramm besser zu verstehen.

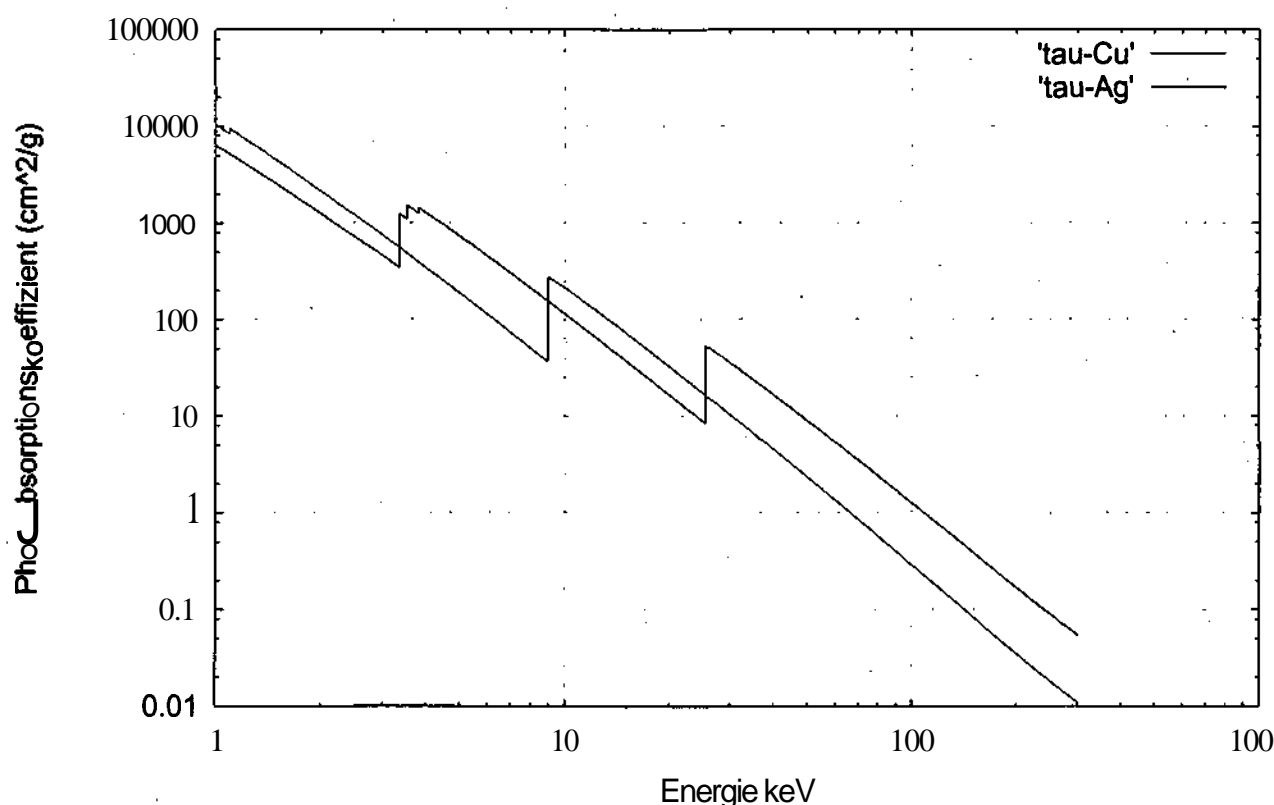


Abb. 5.6: Die Energieabhängigkeit von $\tau_{E,Cu}$ und $\tau_{E,Ag}$ für die Elemente Cu und Ag

Wie aus der Abb. 5.6 zu ersehen ist, werden für eine Quantenenergie knapp unterhalb bis knapp oberhalb der K-Kante des Elements Cu die Elektronen in der **K-Schale** des Elements Ag nicht angeregt und somit werden keine KLL Auger Elektronen und Photoelektronen aus der K-Schale des Elements Ag emittiert.

Weiters ist aus der Abb. 5.6 zu ersehen, dass eine Quantenenergie knapp unterhalb bis knapp oberhalb der K-Kante des Elements Ag ausreicht, um die Elektronen in sämtlichen Schalen des Elements Cu anregen zu können und somit werden KLL-, LMM-

und MNN-Auger Elektronen und auch Photoelektronen aus sämtlichen Schalen des Elements Cu emittiert.

5.1.5 Die Sekundäranregung in einer Legierung in TEY (Photo- und Auger Elektronen)

Bei der Sekundäranregung in einer Legierung sind die charakteristischen $K\alpha$ - und $K\beta$ -Strahlungen der Elemente verantwortlich für die zusätzliche Anregung der Elektronenemission.

Im Falle der hier als Beispiel gewählten binären CuAg-Legierung tragen die charakteristische $K\alpha$ - und $K\beta$ -Strahlungen einer der beiden Atomsorten zur Sekundäranregung bei. Das Nachbaratom, aus dem ein Elektron herausgeschlagen wird, kann daher ein Atom des Elements Ag oder ein Atom des Elements Cu sein.

Im Rechenprogramm wird die Quantenenergie von unterhalb bis oberhalb einer Absorptionskante der jeweiligen Elemente der Legierung variiert.

Um die Sekundäranregung in einer Legierung zu beschreiben, modifizieren wir die bereits beschriebene Gleichung 5.1.3.1 der Sekundäranregung für Reinelementproben in TEY.

Die zwei Elemente in der binären Legierungsprobe werden durch den Index $i=1$ bzw. $i=2$ gekennzeichnet. Es wird $\tau_{E,i}$ durch $\tau_{E,c}$ und $\tau_{Krad,i}$ durch $\tau_{Krad,c}$ ersetzt.

Somit erhält man

$$I_{i,j,m}^{Legierung} = \frac{I_{i,j,m}^{Rein}}{2 \cos \alpha} \left(\tau_{E,c} + \tau_{Krad,c} \right) \sum_{i=1}^2 \frac{A_i}{\tau_{E,c} + C_1} \cdot \left(\frac{1}{C_1} \cdot \log \left(1 + \frac{C_1}{\tau_{Krad,c}} \right) + \frac{\cos \alpha}{\tau_{E,c}} \cdot \log \left(1 + \frac{\tau_{E,c}}{\cos \alpha \cdot \tau_{Krad,c}} \right) \right) \quad (5.1.5.1)$$

$$k = L, M$$

mit

$\tau_{E,c}$ Photoabsorptionskoeffizient für Röntgenstrahlung mit der Quantenenergie E in der Legierung c

$\tau_{Krad,c}$ der photoelektrische Gesamtschwächungskoeffizient

C_1 die Konzentration des ersten Elements in der binären Legierung

C_2 die Konzentration des zweiten Elements in der binären Legierung

$C_i = \frac{1}{\rho_i \lambda_i}$ Wirkungsquerschnitt in cm^2/g

dabei ist

$$\tau_{E,c} = c_1 \cdot \tau_{E,1} + c_2 \cdot \tau_{E,2}$$

$$\tau_{Krad,c} = c_1 \cdot \tau_{Krad,k\alpha 1,1} + c_2 \cdot \tau_{Krad,k\alpha 1,2} \text{ im Falle der Anregung durch } K\alpha \text{ des Elements 1}$$

$$\tau_{Krad,c} = c_1 \cdot \tau_{Krad,k\alpha 2,1} + c_2 \cdot \tau_{Krad,k\alpha 2,2} \text{ im Falle der Anregung durch } K\alpha \text{ des Elements 2}$$

$$\tau_{Krad,c} = c_1 \cdot \tau_{Krad,k\beta 1,1} + c_2 \cdot \tau_{Krad,k\beta 1,2} \text{ im Falle der Anregung durch } K\beta \text{ des Elements 1}$$

$$\tau_{Krad,c} = c_1 \cdot \tau_{Krad,k\beta 2,1} + c_2 \cdot \tau_{Krad,k\beta 2,2} \text{ im Falle der Anregung durch } K\beta \text{ des Elements 2}$$

$$\tau_{Krad,i,level} \sim c_i \cdot c_1 \cdot \tau_{Krad,k\alpha 1,j}$$

$$\tau_{Krad,i,level} = c_i \cdot c_2 \cdot \tau_{Krad,k\alpha 2,j}$$

$$\tau_{Krad,i,level} \sim c_i \cdot c_1 \cdot \tau_{Krad,k\beta 1,j}$$

$$\tau_{Krad,i,level} = c_i \cdot c_2 \cdot \tau_{Krad,k\beta 2,j}$$

wobei der Index c_i die binäre Legierungsprobe, der Index y das durch charakteristische Strahlung ionisierte Niveau und der Index i das Element, in dem das Niveau j ionisiert wird, bezeichnet. Somit kann c_i gleich c_1 oder c_2 gesetzt werden.

Das gesamte Ausmaß der emittierten Photoelektronen wird ermittelt, in dem die Summe über alle Elektronenniveaus gebildet wird [1][2][3].

Auger Elektronen

Analog zur Primäranregung in einer Legierung wird für die Berechnung der Wahrscheinlichkeit zur Emission der Photo- und Auger Elektronen im Falle der Sekundäranregung der Konzentrationsanteil des betreffenden Elements c_i berücksichtigt.

Um die Wahrscheinlichkeit zur Emission der Photo- und Auger Elektronen im Falle der Sekundäranregung in einer Legierung zu berechnen, werden die entsprechenden Gleichungen für die Primäranregung in einer Legierung unverändert übernommen

Durch die Gleichungen 5.1.4.3 bis 5.1.4.6 wird die Wahrscheinlichkeit für die Emission eines Photoelektrons, die proportional zum jeweiligen photoelektrischen Absorptionskoeffizienten ist, berechnet.

Durch die Gleichungen 5.1.1.7 bis 5.1.1.10 wird die anfängliche kinetische Energie eines Photoelektrons, die sich aus der Differenz der Energie des Photons und der Bindungsenergie des Elektrons ergibt, berechnet.

Die Wahrscheinlichkeit für einen strahlenden Übergang in einem Element der binären Legierungsprobe ergibt sich durch die Gleichungen 5.1.4.7 bis 5.1.4.9

Durch die Gleichungen 5.1.4.10 bis 5.1.4.12 erhalten wir die Wahrscheinlichkeiten für die Emission von Auger Elektronen des betreffenden Elements

Die Gleichungen 5.1.1.17 bis 5.1.1.19 für die kinetische Energie eines Auger Elektrons werden unverändert übernommen

Die Quantenenergie E_{ijk} und die Übergangswahrscheinlichkeit p_{ijk}

Die Quantenenergie E_{ijk} und die Übergangswahrscheinlichkeit p_{ijk} für die charakteristische $K\alpha$ - und $K\beta$ -Strahlung, die durch das gewichtete Mittel

$$E_{iK\alpha} = \frac{I_{iKL3} \cdot E_{iKL3} + I_{iKL2} \cdot E_{iKL2}}{I_{iKL3} + I_{iKL2}} \quad (5.1.5.2)$$

$$E_{iK\beta} = \frac{\sum_j I_{iKk} \cdot E_{iKk}}{\sum_j I_{iKk}} \quad (5.1.5.3)$$

mit $k = M2, M3, M4, M5, N2, N3, \dots$

und relativen Intensitäten

$$p_{iK\alpha} = \frac{I_{iKL3} + I_{iKL2}}{\sum_k I_{iKk}} \quad (5.1.5.4)$$

$$p_{iK\beta} = 1 - \frac{I_{iKL3} + I_{iKL2}}{\sum_k I_{iKk}} \quad (5.1.5.5)$$

mit $k = L2, L3, M2, M3, \dots$

ausgedrückt werden, können aus der nachstehenden Tabelle (Tabelle 5.1) entnommen werden. Dabei wird das Element durch den Index i bezeichnet.

Die in der Tabelle 5.1 angegebenen Energiewerte E_{ijk} und Übergangswahrscheinlichkeiten p_{ijk} für die charakteristische $K\alpha$ -, $K\beta$ - und L -Strahlung für die Elemente Neon (Ne $Z = 10$) bis Zinn (Sn $Z = 50$) sind aus der Tabelle Johnson Jr. und E. W. White entnommen.

Element	chem. Zeichen	Ordnungszahl
char. Linie	Energie	Übergangswahrscheinlichkeit

Element Ne 10

Ka	0.84800e+00	1.00000e+02
Kb	0.00000e+00	0.00000e+00
L	0.00000e+00	0.00000e+00

Element Na 11

Ka	1.04100e+00	9.90099e-01
Kb	1.06900e+00	9.90099e-03
L	0.00000e+00	0.00000e+00

Element Mg 12

Ka 1.25300e+00 9.86193e-01

Kb 1.29850e+00 1.38067e-02

L 0.00000e+00 0.00000e+00

Element Al 13

Ka 1.46800e+00 9.90075e-01

Kb 1.55500e+00 9.24703e-03

L 0.00000e+00 0.00000e+00

Element Si 14

Ka 1.73900e+00 9.74026e-01

Kb 1.83250e+00 2.59740e-02

L 0.00000e+00 0.00000e+00

Element P 15

Ka 2.01300e+00 9.61538e-01

Kb 2.13750e+00 3.84615e-02

L 0.00000e+00 0.00000e+00

Element S 16

Ka 2.30700e+00 9.14634e-01

Kb 2.46600e+00 8.53659e-02

L 0.00000e+00 0.00000e+00

Element Cl 17

Ka 2.62100e+00 9.49367e-01

Kb 2.81500e+00 5.06329e-02

L 0.00000e+00 0.00000e+00

Element Ar 18

Ka 2.95700e+00 9.09091e-01

Kb 3.19000e+00 9.09091e-02

L 0.00000e+00 0.00000e+00

Element K 19

Ka 3.31200e+00 9.09036e-01

Kb 3.58901e+00 9.09642e-02

L 2.61000e-01 1.00000e+00

Element Ca 20

Ka 3.69000e+00 9.09036e-01

Kb 4.01201e+00 9.09642e-02

L 3.40696e-01 1.00000e+00

Element Sc 21

Ka 4.08800e+00 8.82249e-01

Kb 4.46003e+00 1.17751e-01

L 3.94652e-01 1.00000e+00

Element Ti 22

Ka 4.50800e+00 8.82249e-01
Kb 4.93103e+00 1.17751e-01
L 4.51571e-01 1.00000e+00

Element V 23

Ka 4.94900e+00 8.82249e-01
Kb 5.42604e+00 1.17751e-01
L 5.10682e-01 1.00000e+00

Element Cr 24

Ka 5.41100e+00 8.92698e-01
Kb 5.94607e+00 1.07302e-01
L 5.73590e-01 1.00000e+00

Element Mn 25

Ka 5.89400e+00 8.82197e-01
Kb 6.47957e+00 1.17803e-01
L 6.38025e-01 1.00000e+00

Element Fe 26

Ka 6.39800e+00 8.82197e-01
Kb 7.05707e+00 1.17803e-01
L 7.00628e-01 1.00000e+00

Element Co 27

Ka 6.92400e+00 8.82197e-01
Kb 7.64809e+00 1.17803e-01
L 7.68965e-01 1.00000e+00

Element Ni 28

Ka 7.47100e+00 8.82197e-01
Kb 8.25100e+00 1.17803e-01
L 8.45872e-01 1.00000e+00

Element Cu 29

Ka 8.04000e+00 8.52127e-01
Kb 8.90339e+00 1.47873e-01
L 9.28425e-01 1.00000e+00

Element Zn 30

Ka 8.63000e+00 8.80592e-01
Kb 9.57142e+00 1.19408e-01
L 1.01157e+00 1.00000e+00

Element Ga 31

Ka 9.24100e+00 8.75452e-01
Kb 1.02633e+01 1.24548e-01
L 1.10439e+00 1.00000e+00

Element Ge 32
Ka 9.87400e+00 8.74381e-01
Kb 1.09817e+01 1.25619e-01
L 1.19506e+00 1.00000e+00

Element As 33
Ka 1.05300e+01 8.66802e-01
Kb 1.17284e+01 1.33198e-01
L 1.29026e+00 1.00000e+00

Element Se 34
Ka 1.12070e+01 8.56898e-01
Kb 1.24822e+01 1.43102e-01
L 1.38844e+00 1.00000e+00

Element Br 35
Ka 1.19070e+01 8.51982e-01
Kb 1.33008e+01 1.48018e-01
L 1.49089e+00 1.00000e+00

Element Kr 36
Ka 1.26310e+01 8.47170e-01
Kb 1.41303e+01 1.52830e-01
L 1.60058e+00 LOOOOOe+00

Element Rb 37
Ka 1.33730e+01 8.47170e-01
Kb 1.49812e+01 1.52830e-01
L 1.71100e+00 LOOOOOe+00

Element Sr 38
Ka 1.41400e+01 8.47123e-01
Kb 1.58577e+01 1.52877e-01
L 1.82520e+00 LOOOOOe+00

Element Y 39
Ka 1.49310e+01 8.42318e-01
Kb 1.67716e+01 1.57682e-01
L 1.94468e+00 LOOOOOe+00

Element Zr 40
Ka 1.57440e+01 8.28317e-01
Kb 1.77003e+01 1.71683e-01
L 2.06979e+00 LOOOOOe+00

Element Nb 41
Ka 1.65810e+01 9.28160e-01
Kb 1.87234e+01 7.18396e-02
L 2.19691e+00 LOOOOOe+00

Element Mo 42
Ka 1.74410e+01 8.42649e-01
Kb 1.96516e+01 1.57351e-01
L 2.32735e+00 1.00000e+00

Element Tc 43
Ka 1.83250e+01 8.47458e-01
Kb 2.06521e+01 1.52542e-01
L 2.45876e+00 1.00000e+00

Element Ru 44
Ka 1.92330e+01 8.47410e-01
Kb 2.16930e+01 1.52590e-01
L 2.60077e+00 1.00000e+00

Element Rh 45
Ka 2.01650e+01 8.42649e-01
Kb 2.27772e+01 1.57351e-01
L 2.80824e+00 1.00000e+00

Element Pd 46
Ka 2.11210e+01 8.37474e-01
Kb 2.38576e+01 1.62526e-01
L 2.96148e+00 1.00000e+00

Element Ag 47
Ka 2.21010e+01 8.28226e-01
Kb 2.50091e+01 1.71774e-01
L 3.11804e+00 1.00000e+00

Element Cd 48
Ka 2.31060e+01 8.24176e-01
Kb 2.61681e+01 1.75824e-01
L 3.27902e+00 1.00000e+00

Element In 49
Ka 2.41360e+01 8.24131e-01
Kb 2.73531e+01 1.75869e-01
L 3.40579e+00 1.00000e+00

Element Sn 50
Ka 2.51910e+01 8.19627e-01
Kb 2.85641e+01 1.80373e-01
L 3.57372e+00 1.00000e+00

Tabelle 5.1: Die aus der Tabelle Johnson Jr. und E. W. White errechneten Energiewerte E_{ijk} und Übergangswahrscheinlichkeiten p_{ijk} für die charakteristischen Ka-, K β - und L-Strahlungen der Elemente Neon (Ne Z = 10) bis Zinn (Sn Z = 50).

5.2 Berechnung der Elektronenausbeute nach Photoionisation des K-Niveaus

Die im Punkt 5.1 gegebenen Ausführungen zur Primär- und Sekundäranregung der Elektronenemission wurden in ein globales Rechenprogramm umgesetzt (s. a. Anhang). Dabei wurden der Eintrittswinkel der Röntgenquanten $\gamma = 78^\circ$ und der Kegelwinkel $\alpha = 20^\circ$ angenommen

5.2.1 Berechnung des von der Primäranregung herrührenden Anteils

Die Elektronen werden „primär“ durch die eintretenden Röntgenquanten ausgelöst. Die durch die eintretenden Röntgenquanten ausgelösten Elektronen werden als Photoelektron bezeichnet. Die Abb. 5.7 zeigt die Elektronenausbeute der aus der Probe emittierten Photoelektronen in Folge von Primäranregung.

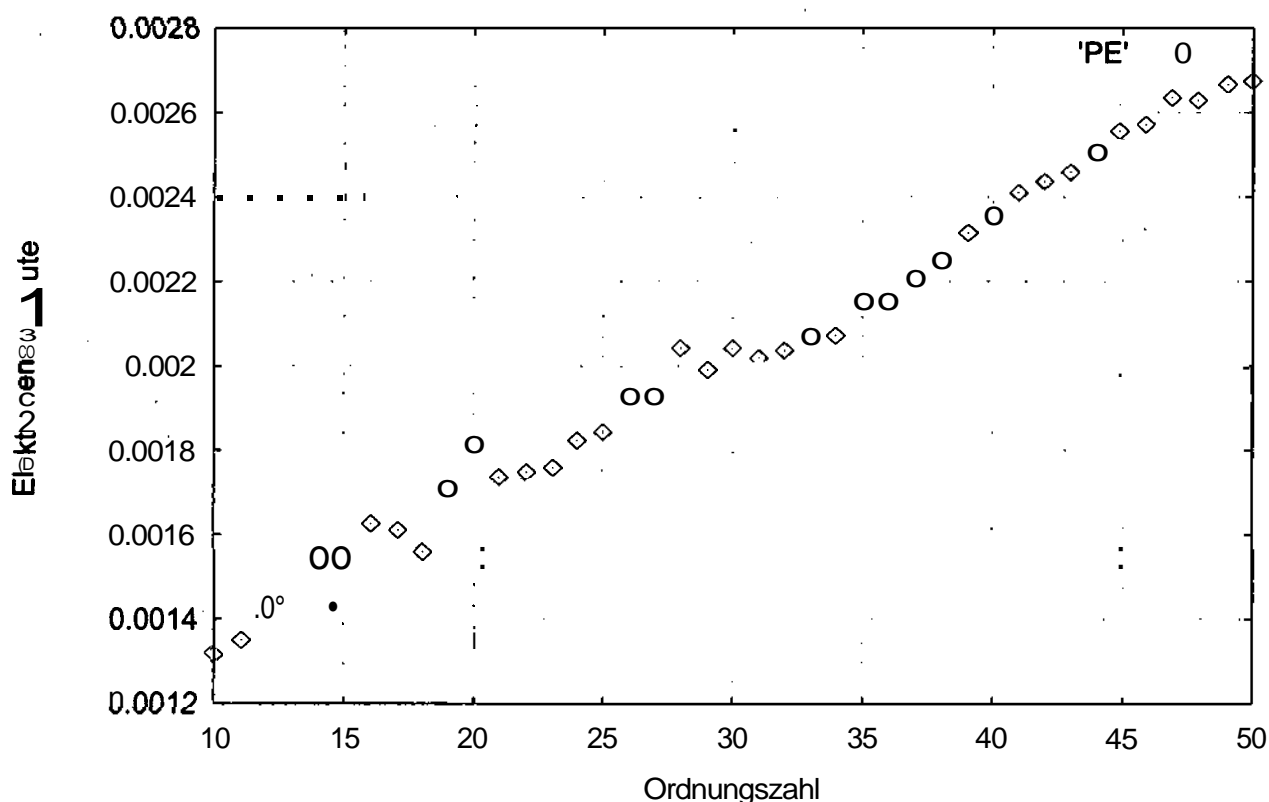


Abb. 5.7: Die Elektronenausbeute von Photoelektronen nach Primäranregung

Wie aus der Abb. 5.7 zu ersehen ist, ist die Elektronenausbeute von Photoelektronen annähernd proportional zur Ordnungszahl des jeweiligen Elements.

Nach dem Photoeffekt wird die Vakanz in der ionisierten Schale aufgefüllt. Wenn die Auffüllung der Vakanz durch einen nichtstrahlenden Übergang erfolgt, dann entstehen Auger Elektronen

Die Abbildungen 5.8, 5.9 und 5.10 zeigen die Elektronenausbeute von KLL-, LMM- und MNN-Auger Elektronen nach der Primäranregung.

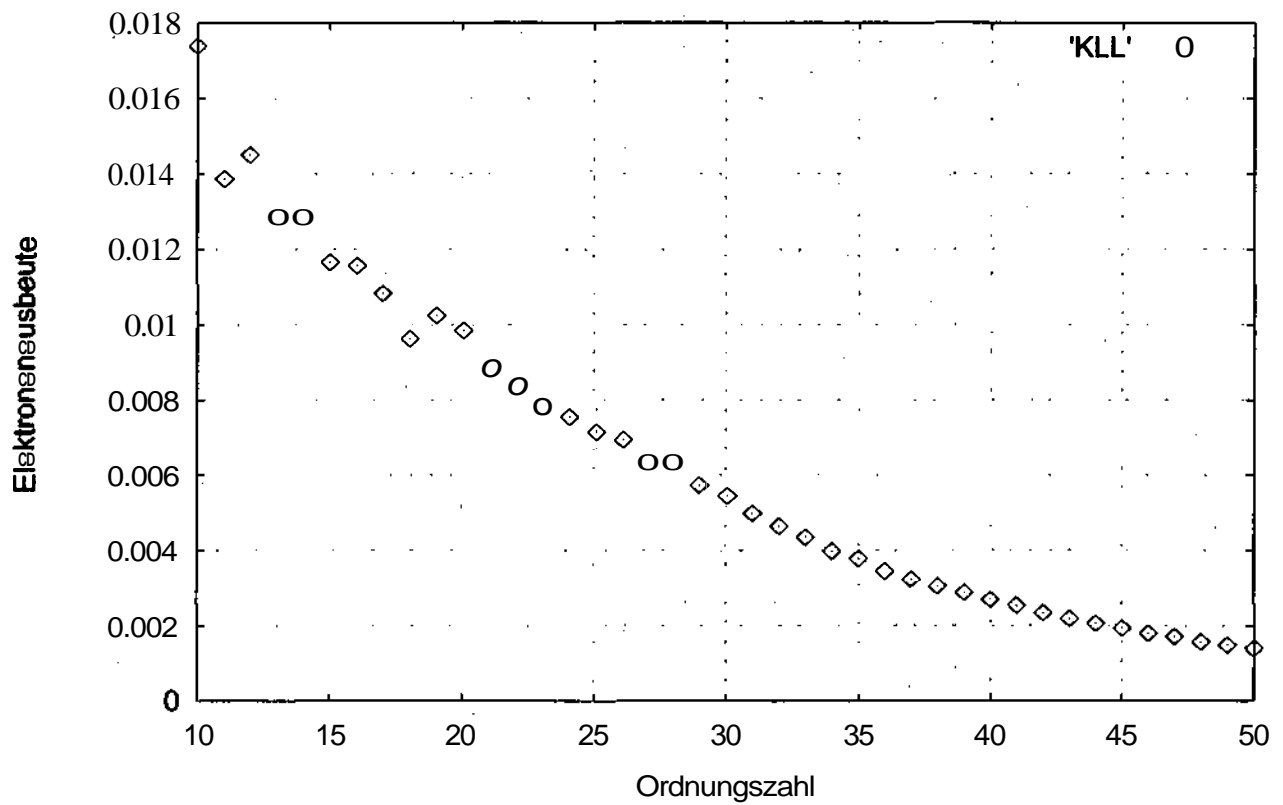


Abb. 5.8: Die Elektronenausbeute von KLL-Auger Elektronen nach Primäranregung

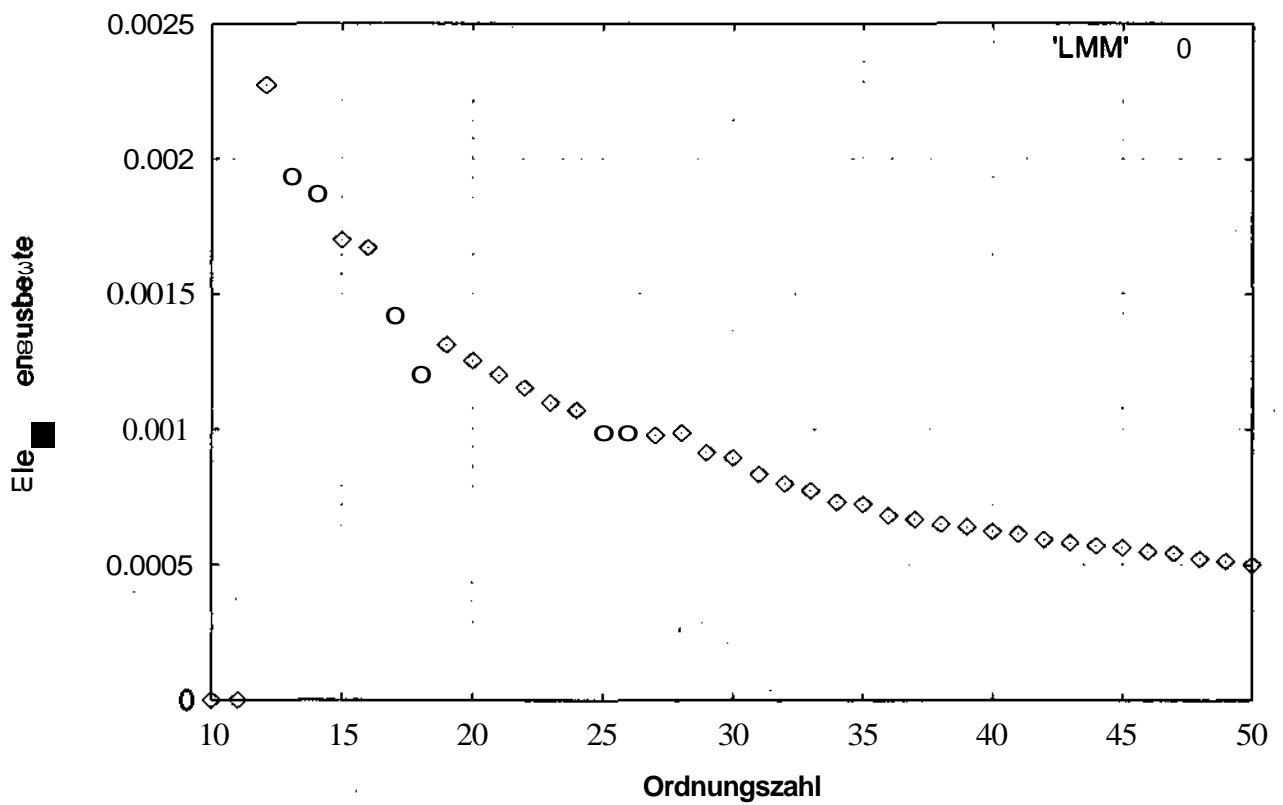


Abb. 5.9: Die Elektronenausbeute von LMM-Auger Elektronen nach Primäranregung

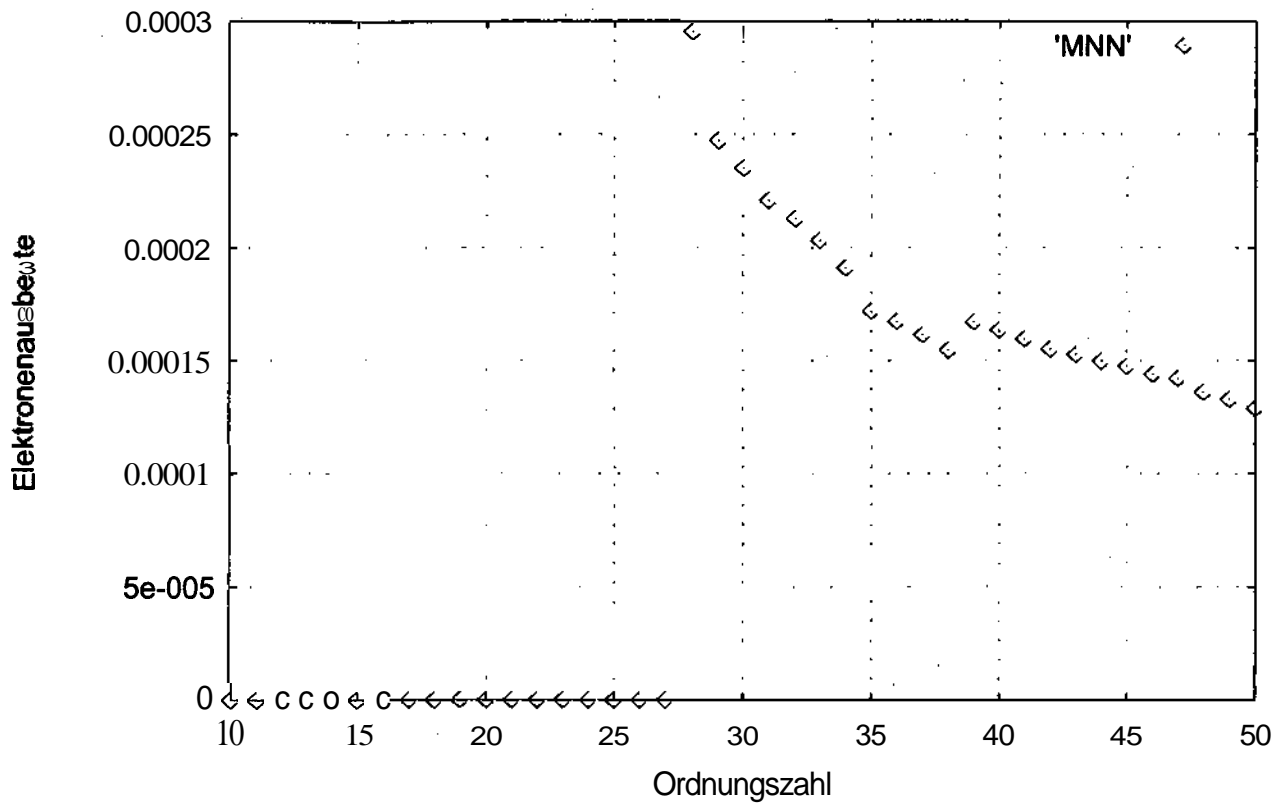


Abb. 5.10: Die Elektronenausbeute von MNN-Auger Elektronen nach Primäranregung

Aus diesem Ergebnis ist deutlich zu ersehen, dass die KLL-Auger Elektronen den grössten Beitrag zur Elektronenemission nach K-Ionisation liefern.

5.2.2 Berechnung des von der Sekundäranregung herrührenden Anteils

Die Elektronen können durch charakteristische $K\alpha$ - und $K\beta$ -Strahlung des jeweiligen Elements in der L-, M- oder N-Schale eines Atoms aus dem Atomverband herausgeschlagen werden. Somit entstehen wie im Falle der Primäranregung Photo- und auch Auger Elektronen.

Die Abb. 5.11 zeigt die Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen nach der Sekundäranregung durch charakteristische $K\alpha$ -Strahlung und die Abb. 5.12 die Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen nach der Sekundäranregung durch charakteristische $K\beta$ -Strahlung.

In der Abb. 5.13 sieht man die gesamte Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen nach der Sekundäranregung durch charakteristische $K\alpha$ und $K\beta$ -Strahlung.

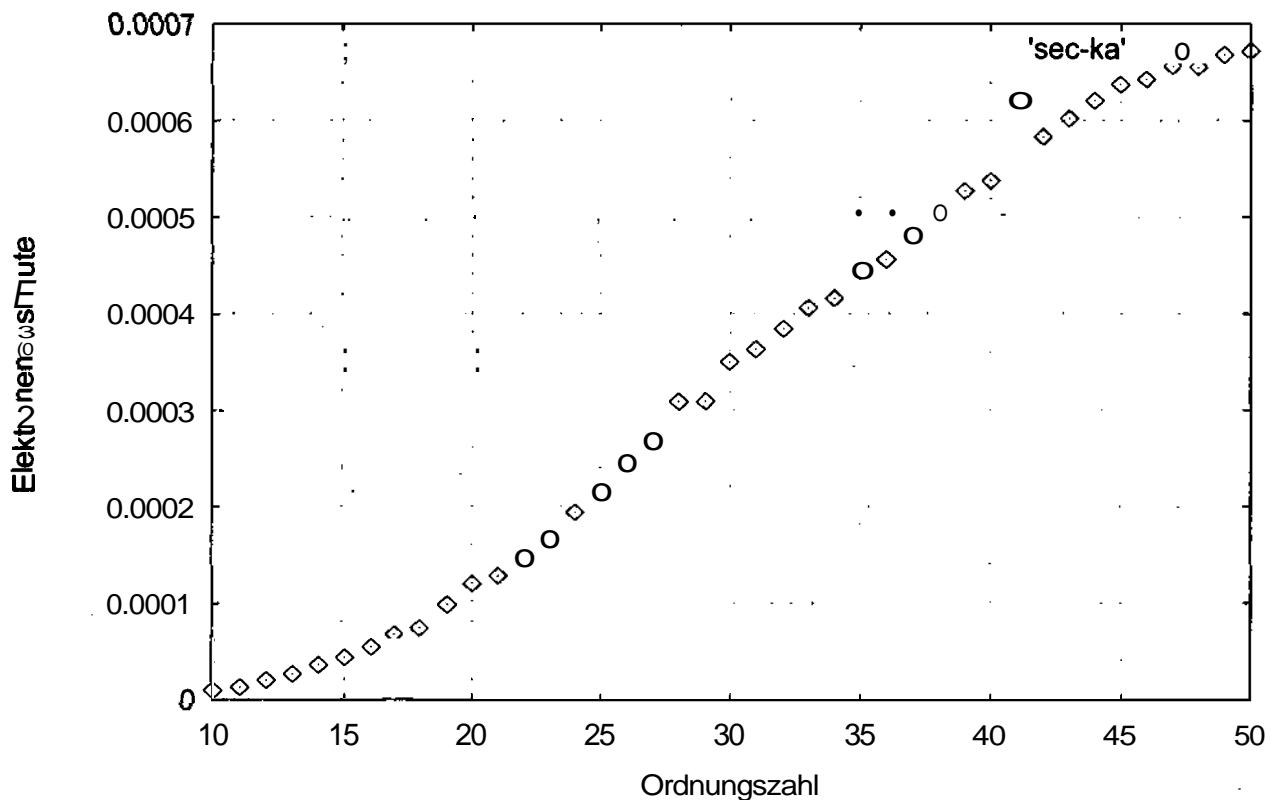


Abb. 5.1 1: Die Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen nach Sekundäranregung durch $K\alpha$ -Strahlung

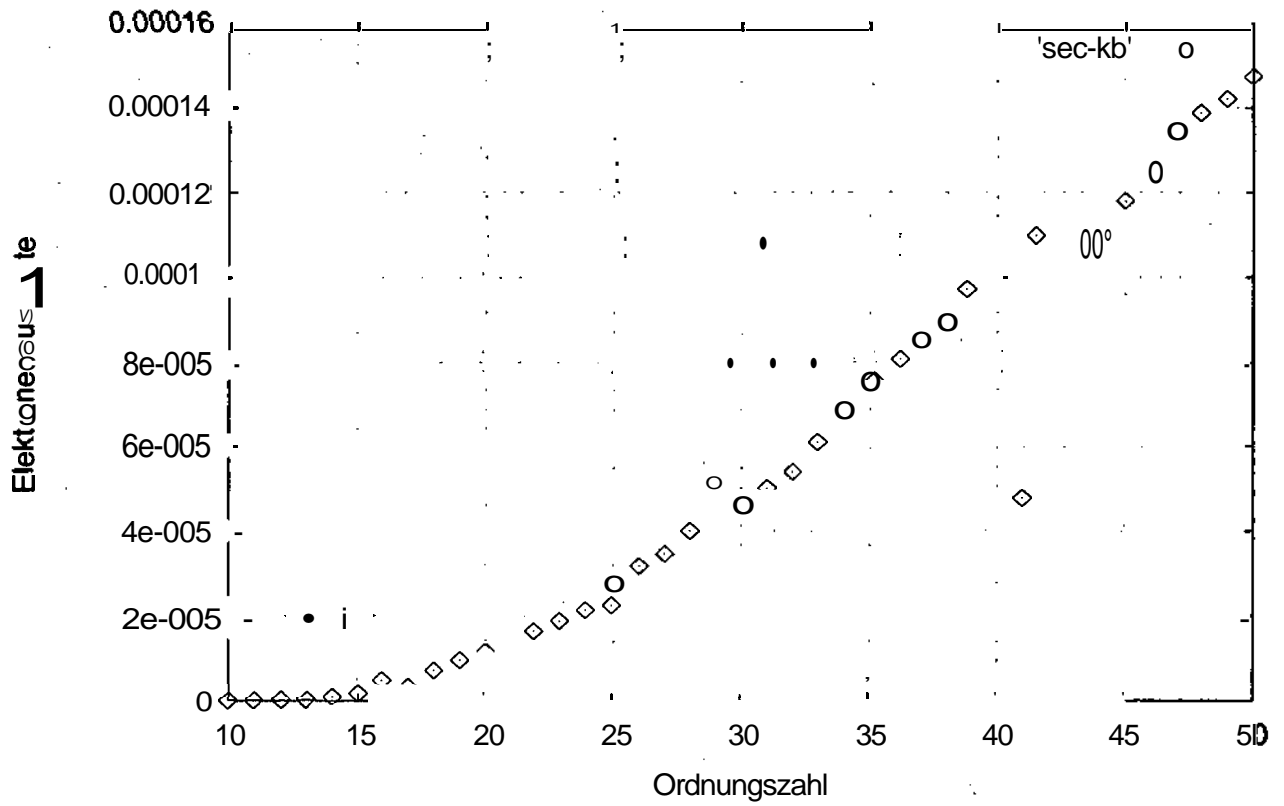


Abb. 5.12: Die Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen nach Sekundäranregung durch K β -Strahlung

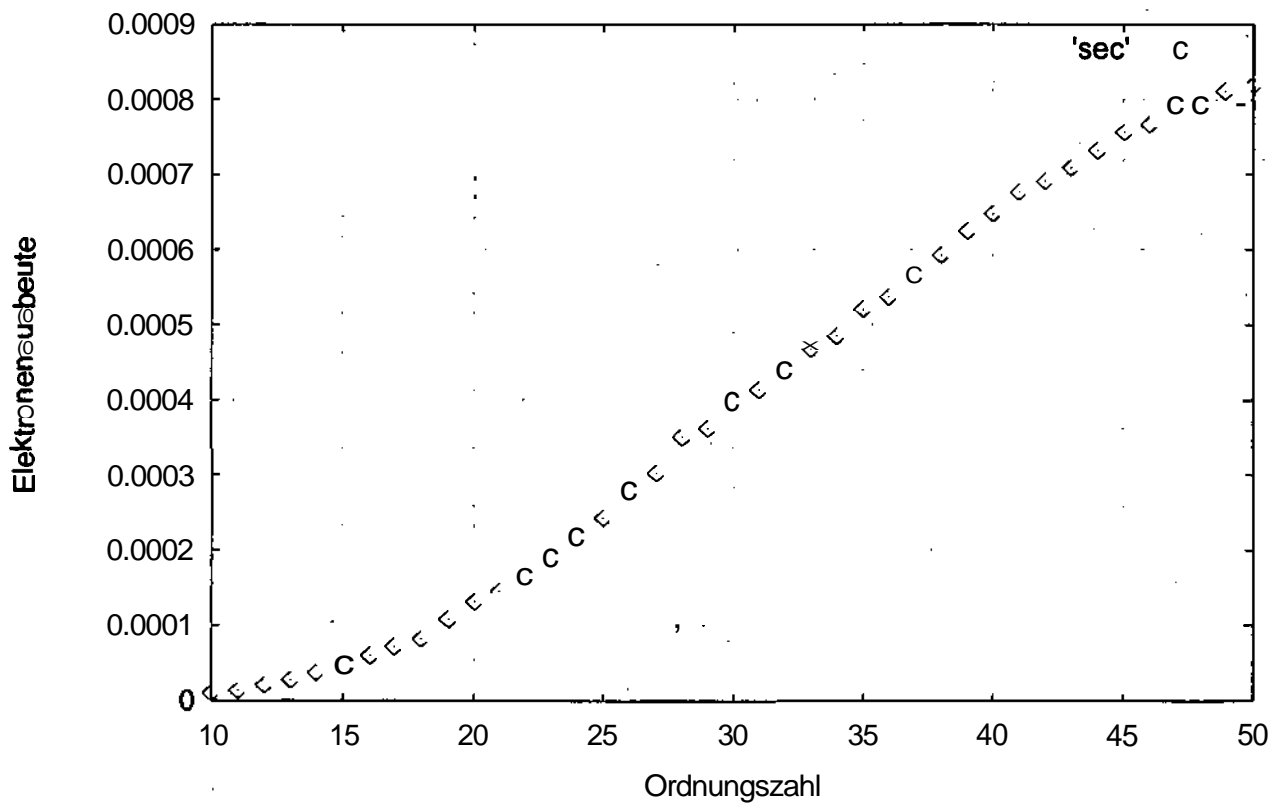


Abb. 5.13: Die Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen nach Sekundäranregung durch K α - und K β -Strahlung

5.2.3 Berechnung der gesamten Elektronenausbeute (elektron yield)

Die Berechnung der Emission von Photo- und Auger Elektronen nach Primäranregung und Photo- und Auger Elektronen nach Sekundäranregung erfolgt knapp oberhalb der K-Kante (0.0001 keV) und knapp unterhalb der K-Kante (0.0001 keV) der jeweiligen Elemente.

Die Abb. 5.14 zeigt den im Bereich der K-Kante sprunghaften Anstieg der Elektronenemission. Diese Grosse (**Jump**, Sprung) ist auch der Messung zugänglich.

Die Abb. 5.15 zeigt die gesamte Elektronenausbeute (electron yield) in Abhängigkeit von der Ordnungszahl.

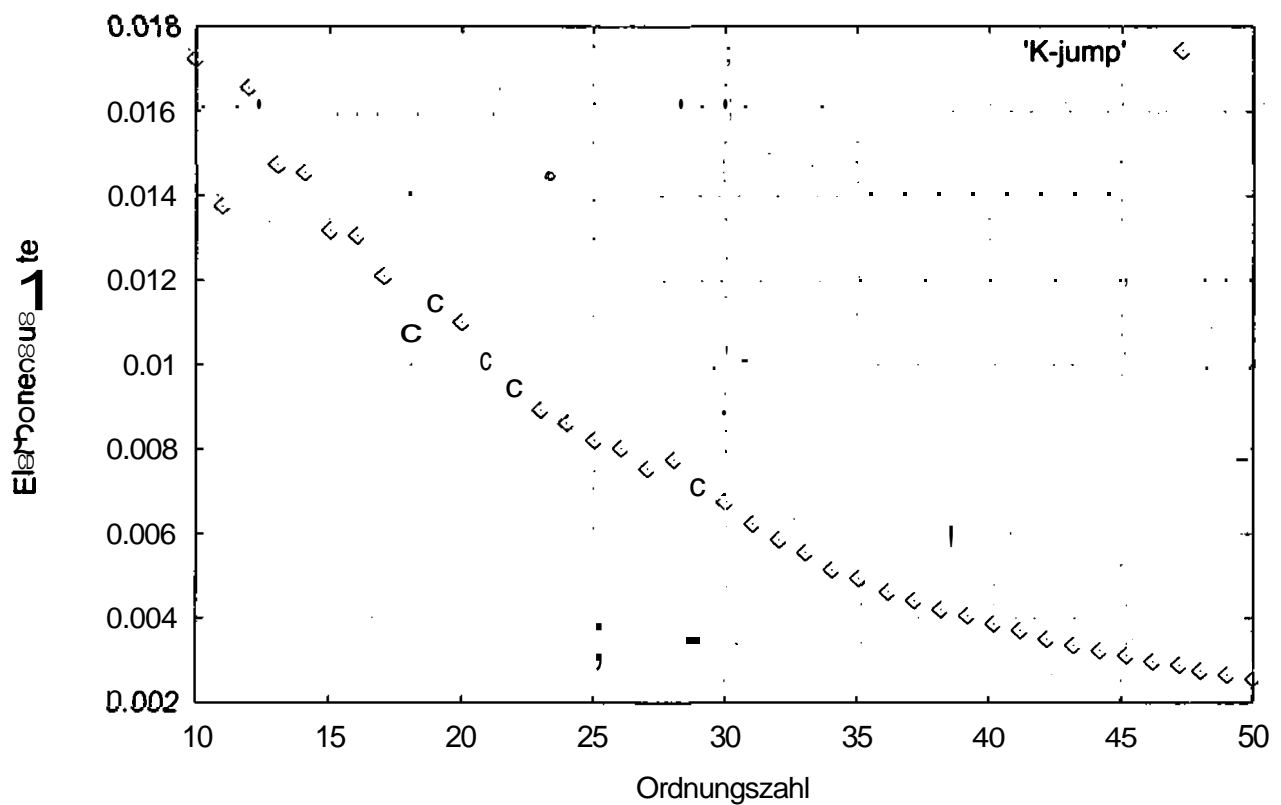


Abb. 5.14: Die Differenz der Elektronenausbeute für Quantenenergie unmittelbar vor und nach der K-Kante des jeweiligen Elements

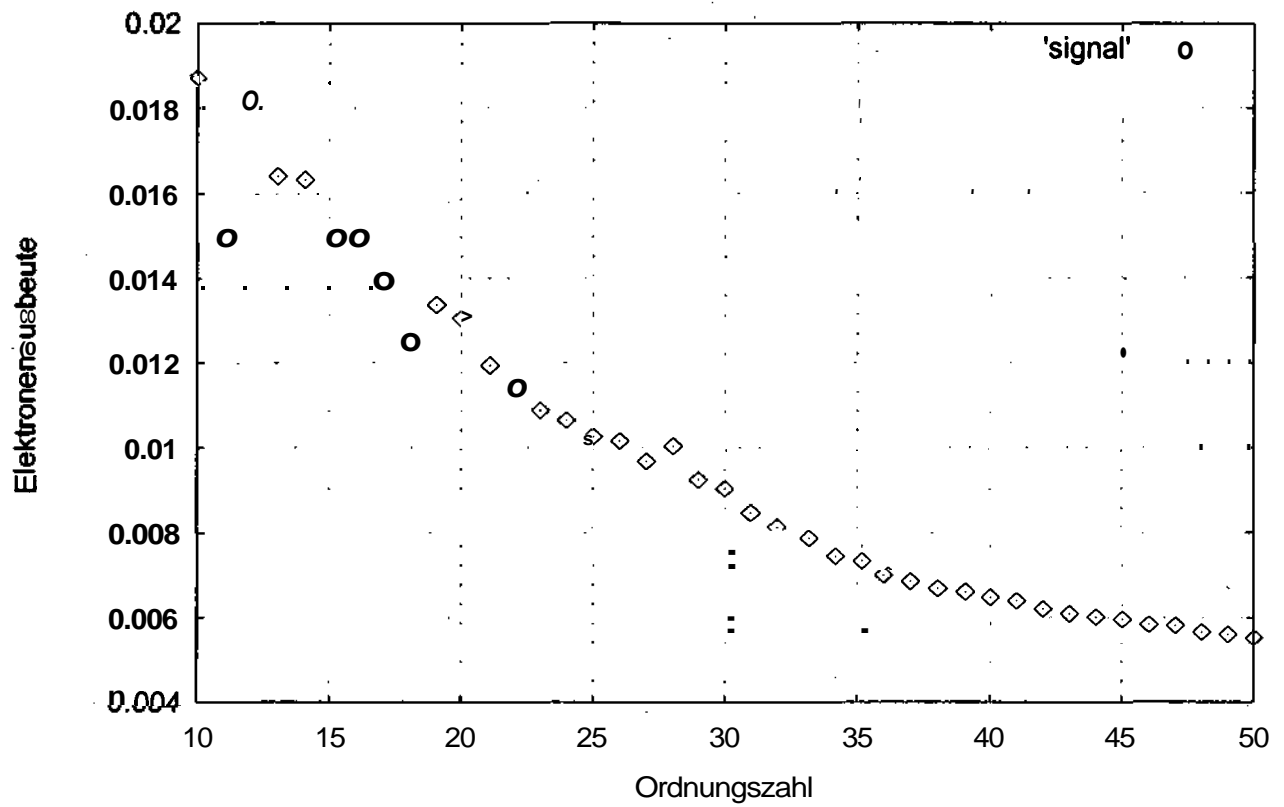


Abb. 5.15: Die Elektronenausbeute (electron yield) für eine Quantenenergie knapp oberhalb der K-Kante (0.0001 keV)

5.2.4 Berechnung des von der Primäranregung herrührenden Anteils in einer Legierung

Bei der qualitativen Analyse einer binären Probe mittels TEY wird die Energie der Röntgenstrahlung von unterhalb bis oberhalb einer Absorptionskante des gegebenen Elements variiert. Wenn die Energie die Bindungsenergie einer Absorptionskante übersteigt, werden die Elektronen aus der Schale ausgelöst. Diese Elektronen werden als Photoelektronen bezeichnet.

Die Abb. 5.16 zeigt die Elektronenausbeute von Photoelektronen aus einer binären Probe CuAg mit einem Konzentrationsverhältnis von 50% für Cu und Ag durch Primäranregung.

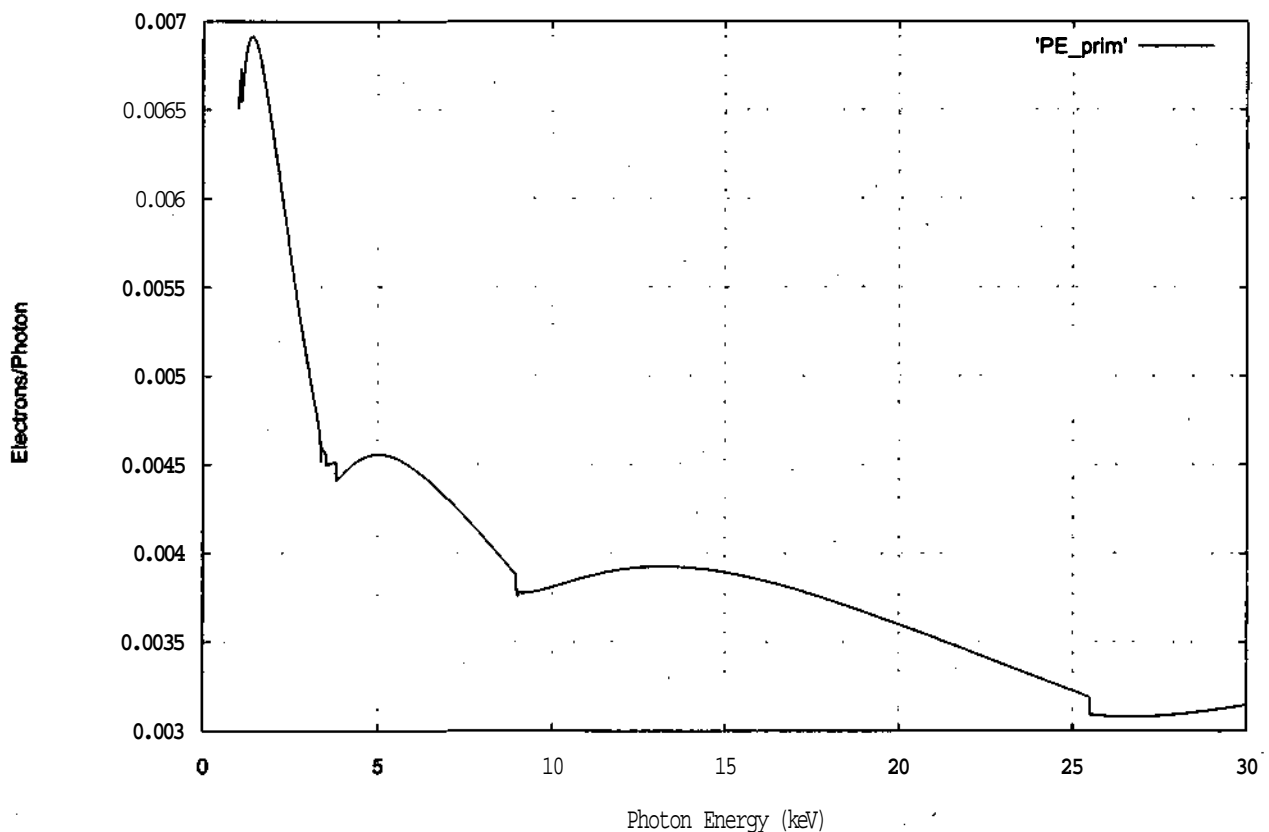


Abb. 5.16: Die Elektronenausbeute von Photoelektronen aus der binären Probe CuAg mit einem Konzentrationsverhältnis von 50% für Cu und Ag durch Primäranregung

Wie aus der Abb 5.16 ersichtlich ist, werden die Absorptionskanten von Cu und Ag bei steigender Energie bemerkbar.

Zum besseren Verständnis der Abb. 5.16 sind die Bindungsenergien der L1-,L2,L-3 und K-Kante von Cu und Ag in der nachstehenden Tabelle 5.2 angegeben. Anhand der Tabelle 5.2 kann man die Absorptionskanten von Cu und Ag in der Abb. 5.16 finden.

Kante	Cu	Ag
K	8.9789 keV	25.514 keV
L1	1.0961 keV	3.8058 keV
L2	0.951 keV	3.5237 keV
L3	0.9311 keV	3.3511 keV

Tabelle 5.2: Kantenenergien von Cu und Ag

Nach dem Photoeffekt wird die entstehende Vakanz in der ionisierten Schale aufgefüllt und somit können in Folge eines nichtstrahlenden Überganges Auger Elektronen aus der binären Probe CuAg emittiert werden

Die Abb. 5.17 zeigt die Elektronenausbeute von Auger Elektronen aus einer binären Probe CuAg mit einem Konzentrationsverhältnis von 50% für Cu und Ag durch Primäranregung.

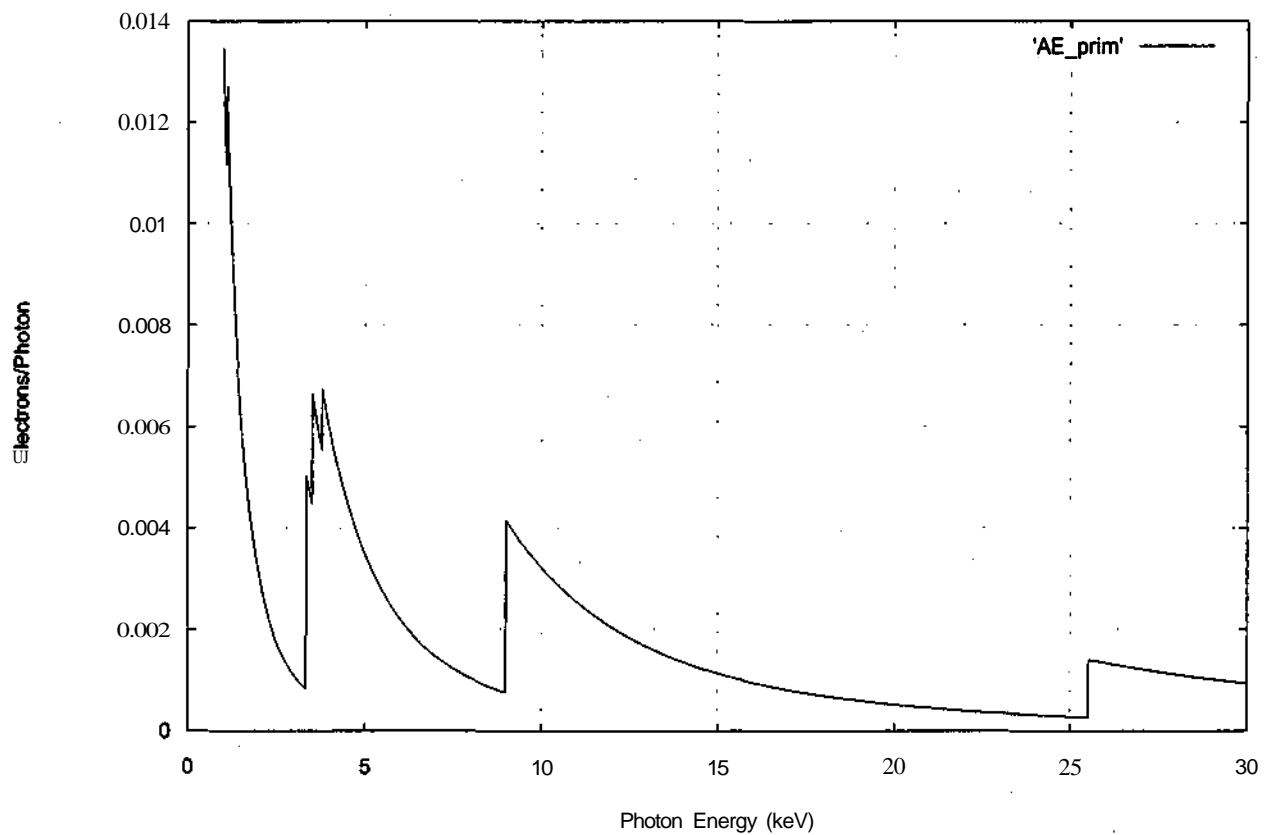


Abb. 5.17: Die Elektronenausbeute von Auger Elektronen aus der binären Probe CuAg mit einem Konzentrationsverhältnis von 50% für Cu und Ag durch Primäranregung

Wie aus der Abb. 5.17 zu sehen ist, hat die Elektronenausbeute von Auger Elektronen durch Primäranregung einen größeren Beitrag als die von Photoelektronen zur gesamten Elektronenausbeute.

5.2.5 Berechnung des von der Sekundäranregung herrührenden Anteils in einer Legierung

Die charakteristischen $K\alpha$ - und $K\beta$ -Strahlungen von Cu und Ag führen zur zusätzlichen Anregung der Elektronenemission. Abb. 5.18 zeigt die Elektronenausbeute von **Photo**- und Auger Elektronen aus einer binären Probe CuAg mit einem Konzentrationsverhältnis von 50% für Cu und Ag durch Sekundäranregung.

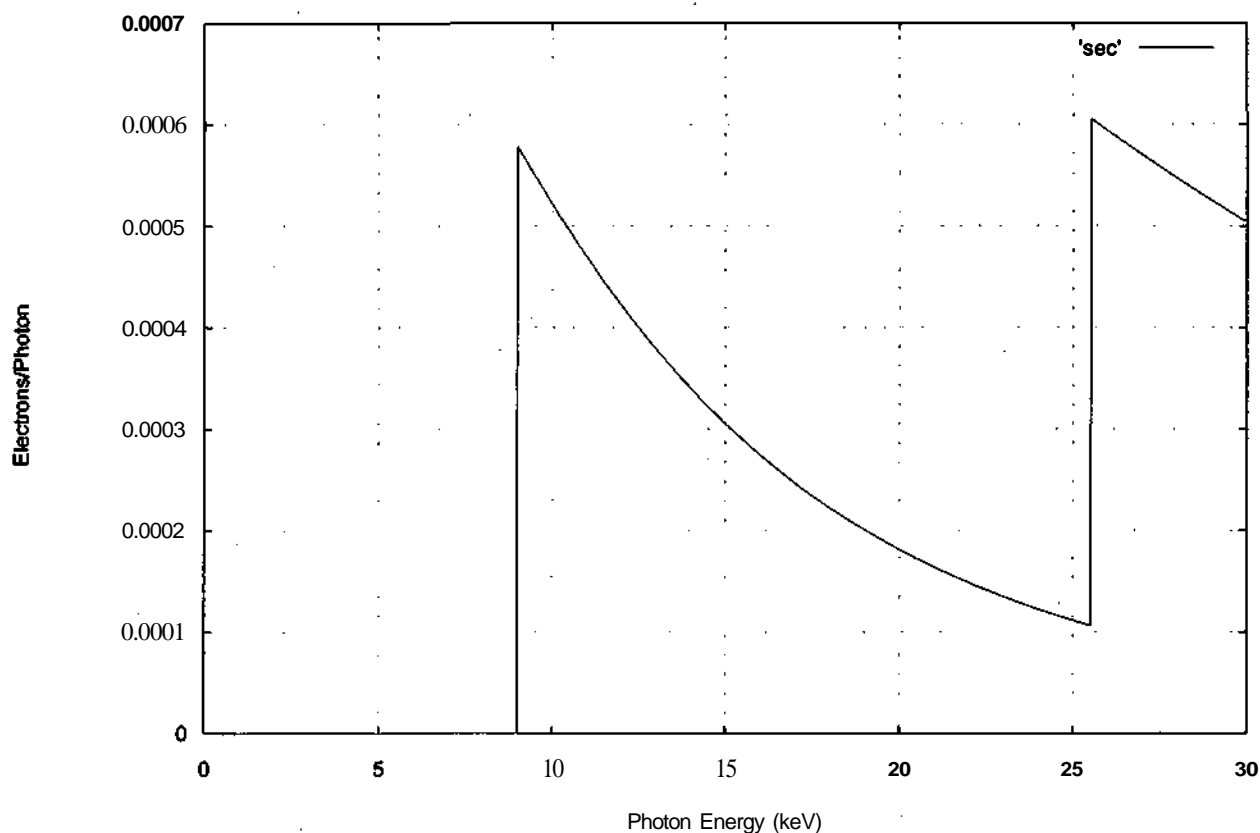


Abb. 5.18: Die Elektronenausbeute von **Photo**- und Auger Elektronen aus der binären Probe CuAg mit einem Konzentrationsverhältnis von 50% für Cu und Ag durch Sekundäranregung

In der Abb. 5.18 sind die Kantensprünge von Cu und Ag deutlich zu sehen.

5.2.6 Berechnung der gesamten Elektronenausbeute in einer Legierung

Die Abb. 5.19 zeigt die gesamte Elektronenausbeute aus der binären Legierung CuAg durch die Primär- und Sekundäranregung.

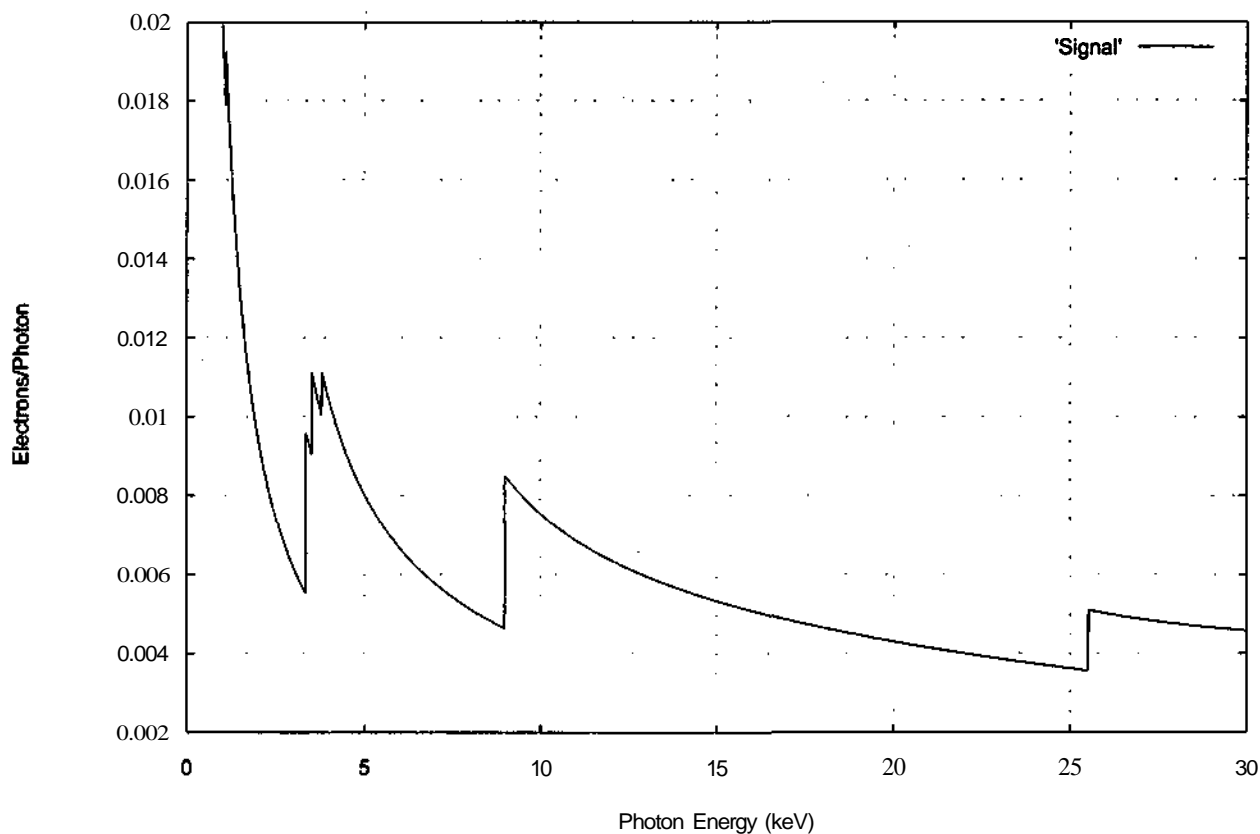


Abb. 5.19: Die gesamte Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen aus einer binären Probe CuAg mit einem Konzentrationsverhältnis von 50% für Cu und Ag durch Primär- und Sekundäranregung

Zum besseren Vergleich der Beiträge von Photo- und Auger Elektronen zur gesamten Elektronenausbeute aus der binären Probe CuAg durch Primär- und Sekundäranregung werden alle Beiträge in der Abb. 5.20 dargestellt.

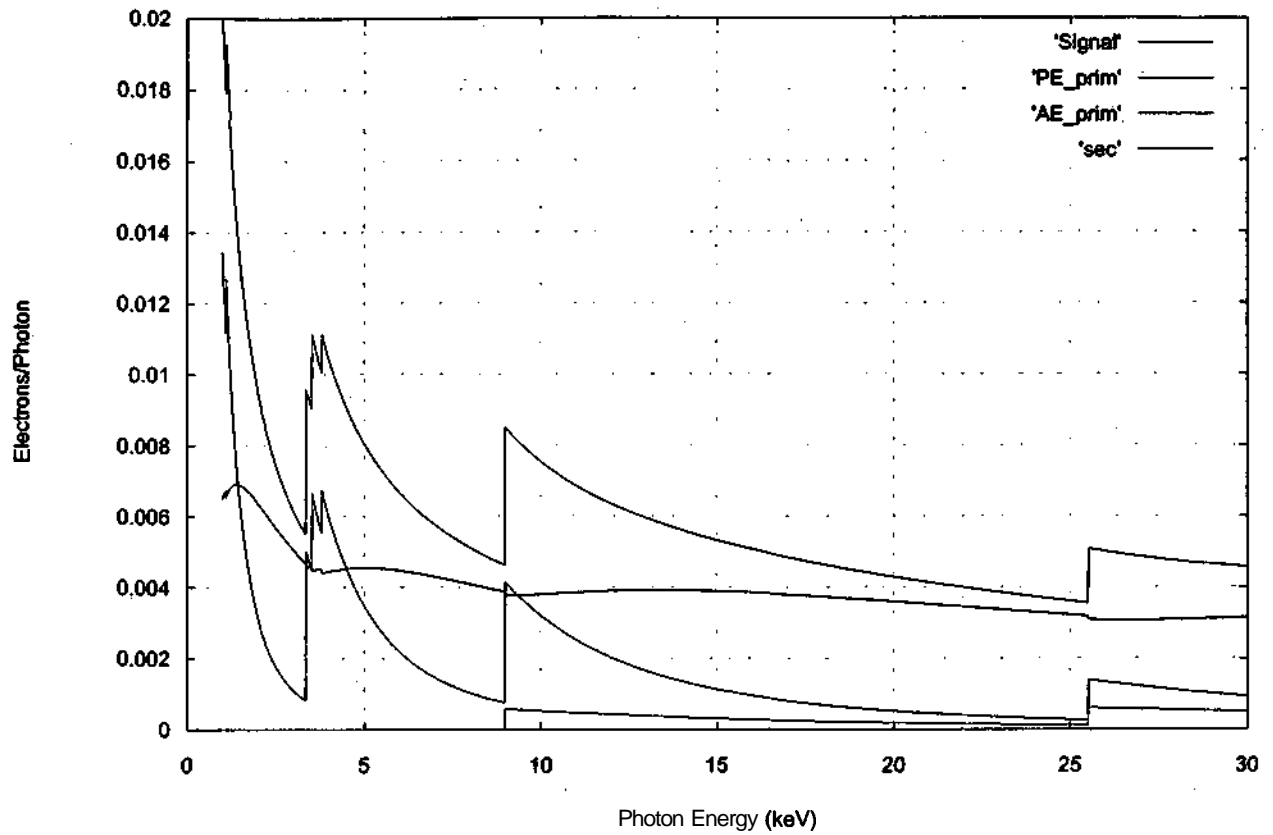


Abb. 5.20: Die Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen aus einer binären Probe CuAg mit einem Konzentrationsverhältnis von 50% für Cu und Ag durch **Primär-** und Sekundär-anregung

Wie aus der Abb. 5.20 zu sehen ist, hat die Emission von Auger Elektronen durch Primär-anregung den größten Beitrag zur gesamten Elektronenausbeute.

6. Konzentrationsbestimmung

Wenn man die Energie der Röntgenstrahlung in einem Bereich unmittelbar vor und nach einer bestimmten Kantenenergie eines Elements variiert, dann beobachtet man ein sprunghaftes Anwachsen des **TEY-Signals**, das von der Konzentration des Elements in der Probe abhängt. Die Konzentrationszunahme eines Elements ist proportional zu dem TEY-Signal.

Im Rechenprogramm wird aus der Höhe dieser Zunahme die Konzentration eines Elements in einer binären Probe bestimmt.

In einer binären Legierung wie in der als Beispiel gewählten CuAg-Legierung besteht eine Relation zwischen Konzentrationen von Elementen und dem TEY-Sprung. Die Abbildungen 6.1 bis 6.6 zeigen die Abhängigkeit des TEY-Signals von der Konzentration der Elemente in binären CuAg-Legierungen. Zum besseren Vergleich der Beiträge von Photo- und Auger Elektronen durch Primär- und Sekundäranregung zum TEY-Signal werden alle Beiträge in den Abbildungen dargestellt.

Die Abb. 6.1 zeigt das TEY-Signal und den Beitrag der Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen durch Primär- und Sekundäranregung zum TEY-Signal für reines Ag.

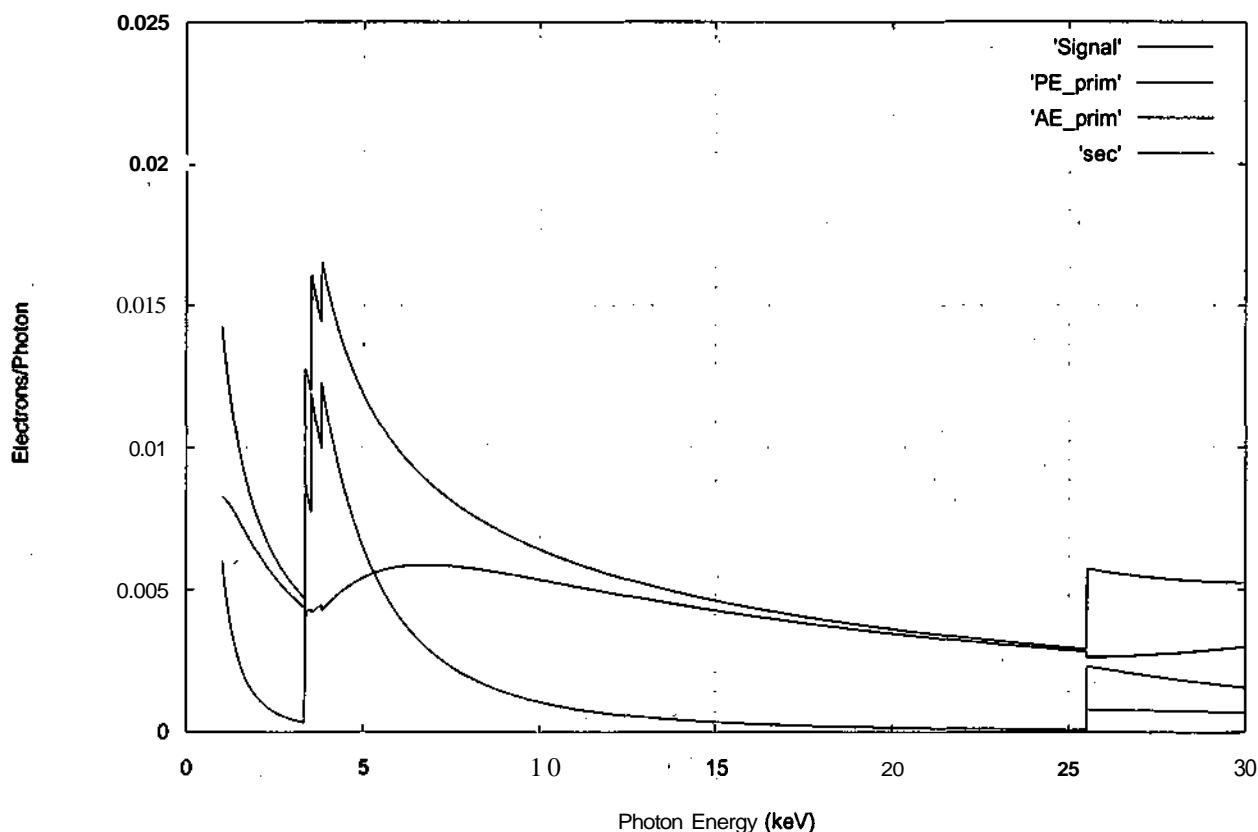


Abb. 6.1: Die Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen aus Ag durch Primär- und Sekundäranregung

Mit zunehmender Energie von 1 keV bis 30 keV sieht man in der Abb. 6.1 nur ein Anwachsen des **TEY-Signals** bei der L- und K-Absorptionskante von Ag. Der Grund dafür liegt darin, dass die Probe aus reinem Ag besteht.

Mit zunehmender Cu-Konzentration der CuAg-Legierungen sieht man in den nächsten Abbildungen die Abhängigkeit des TEY-Signals von der Konzentration der Elemente in der binären Legierung.

Die Abb. 6.2 zeigt das **TEY-Signal** und den Beitrag der Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen durch Primär- und Sekundäranregung zum TEY-Signal mit einer Konzentration von 20% für Cu und 80% für Ag.

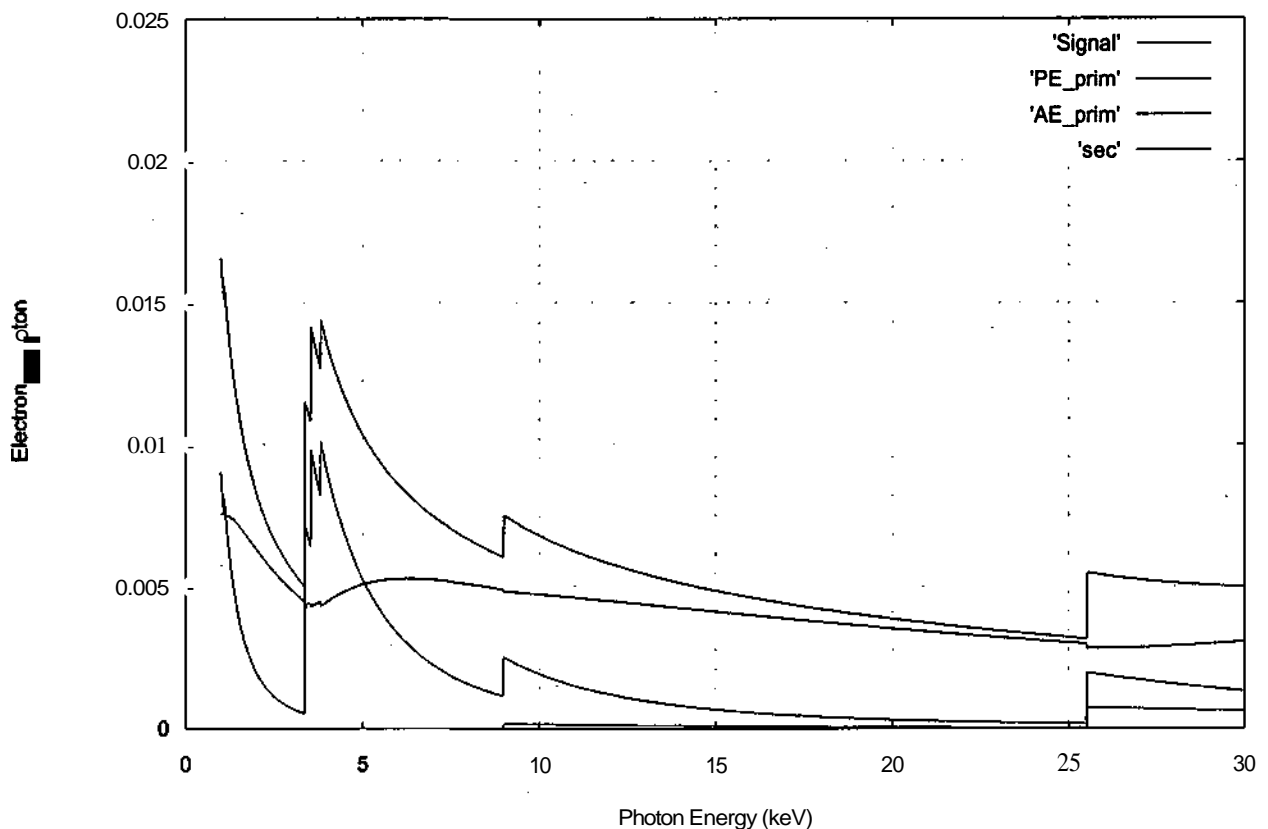


Abb. 6.2: Das TEY-Signal und die Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen aus der CuAg-Legierung durch Primär- und Sekundäranregung mit einem Konzentrationverhältnis von 20% für Cu und 80% für Ag

Durch Vergleich zwischen Abb. 6.2 und Abb. 6.1 sieht man mit der Zunahme der Cu-Konzentration auf 20% ein Anwachsen seines TEY-Signals und mit der Abnahme der Ag-Konzentration auf 80% ein Abnehmen seines TEY-Signals in der CuAg-Legierung.

Die Abb. 6.3 zeigt das TEY-Signal und den Beitrag der Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen durch Primär- und Sekundäranregung zum TEY-Signal mit einer Konzentration von 40% für Cu und 60% für Ag.

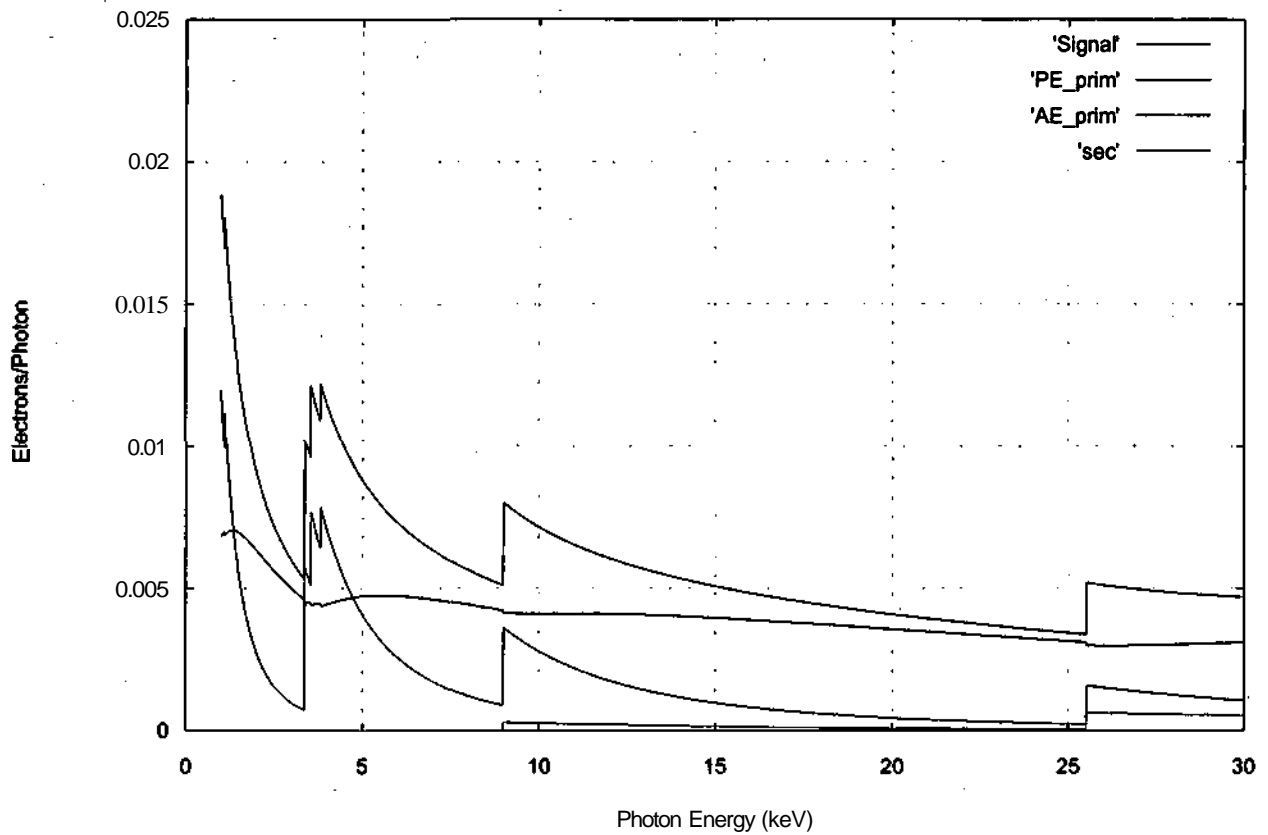


Abb. 6.3: Das **TEY-Signal** und die Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen aus der CuAg-Legierung durch Primär- und Sekundäranregung mit einem Konzentrationsverhältnis von 40% für Cu und 60% für Ag

In der Abb. 6.3 sieht man, dass mit der Cu-Konzentrationszunahme auf 40% das TEY-Signal von Cu anwächst und mit der **Ag-Konzentrationsabnahme** auf 60% das TEY-Signal von Ag abnimmt.

Die Abb. 6.4 zeigt das TEY-Signal und den Beitrag der Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen durch Primär- und Sekundäranregung zum TEY-Signal mit einer Konzentration von 60% für Cu und 40% für Ag.

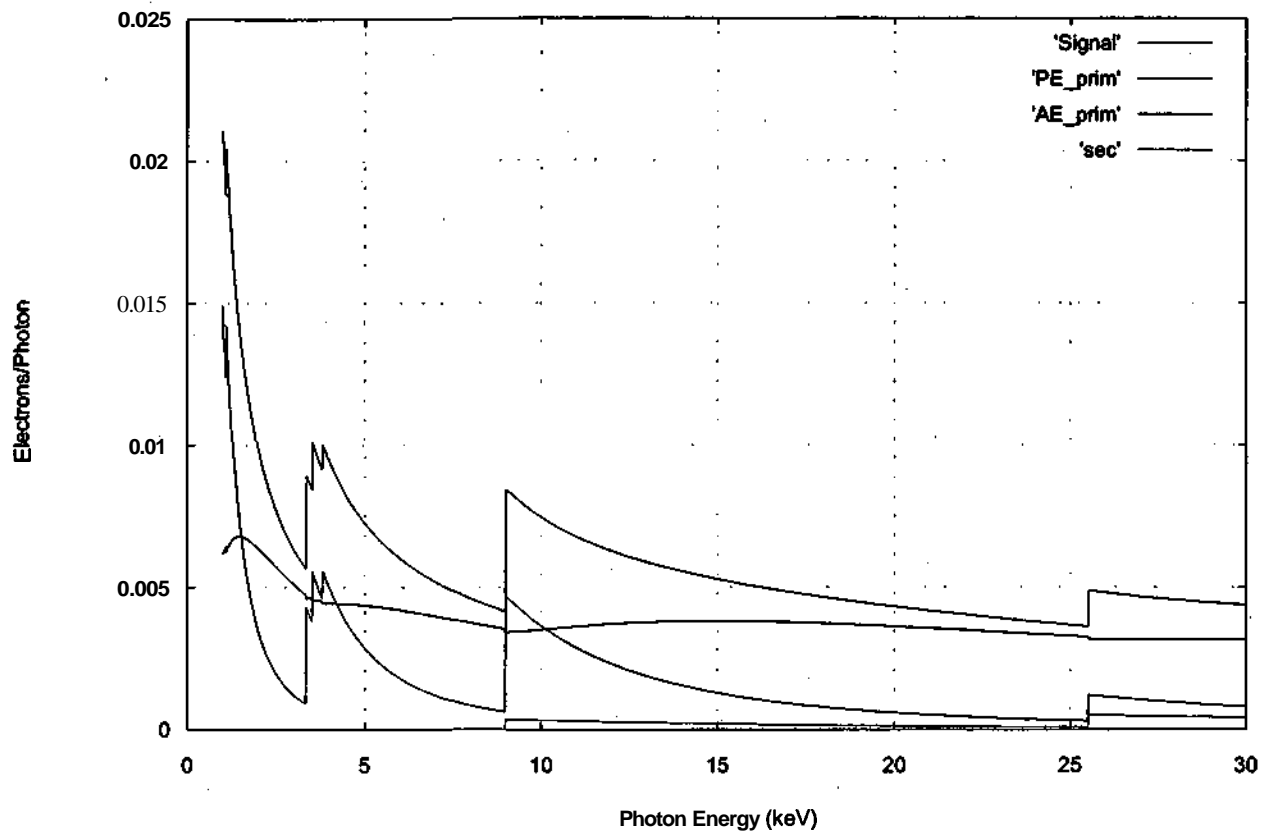


Abb. 6.4: Das TEY-Signal und die Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen aus der CuAg-Legierung durch Primär- und Sekundäranregung mit einem Konzentrationsverhältnis von 60% für Cu und 40% für Ag

In der Abb. 6.4 sieht man die Abhängigkeit des TEY-Signals von der Konzentration der Elemente. Mit der Cu-Konzentrationszunahme auf 60% wächst sein TEY-Signal und mit der Ag-Konzentrationsabnahme auf 40% nimmt sein TEY-Signal weiter ab.

Die Abb. 6.5 zeigt das TEY-Signal und den Beitrag der Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen durch Primär- und Sekundäranregung zum TEY-Signal mit einer Konzentration von 80% für Cu und 20% für Ag.

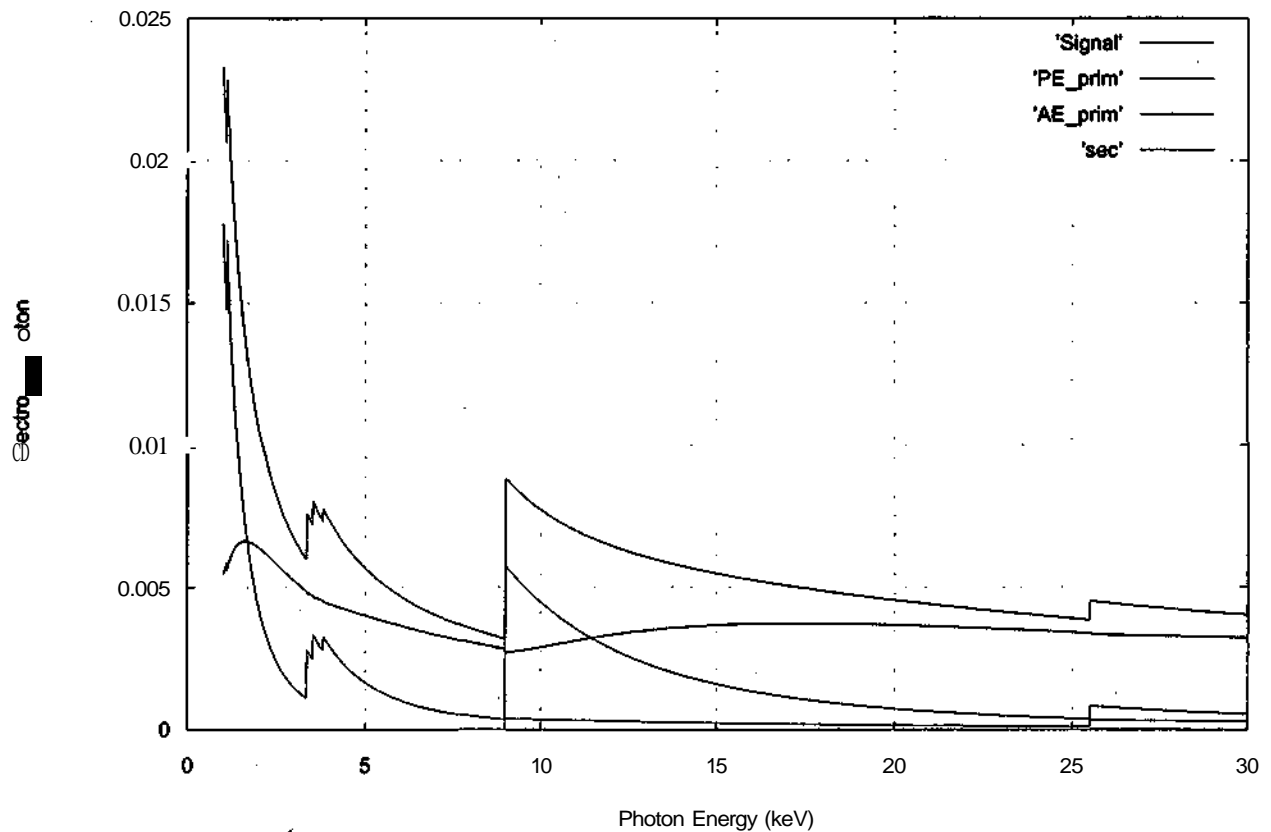


Abb. 6.5: Das TEY-Signal und die Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen aus der CuAg-Legierung durch Primär- und Sekundäranregung mit einem Konzentrationsverhältnis von 80% für Cu und 20% für Ag

Aus der Abb. 6.5 sieht man das angewachsene Cu-TEY-Signal bei einer Konzentration von 80% und das abgenommene Ag-TEY-Signals bei einer Konzentration von 20%.

Die Abb. 6.6 zeigt das TEY-Signal und den Beitrag der Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen durch Primär- und Sekundäranregung zum TEY-Signal für reines Cu.

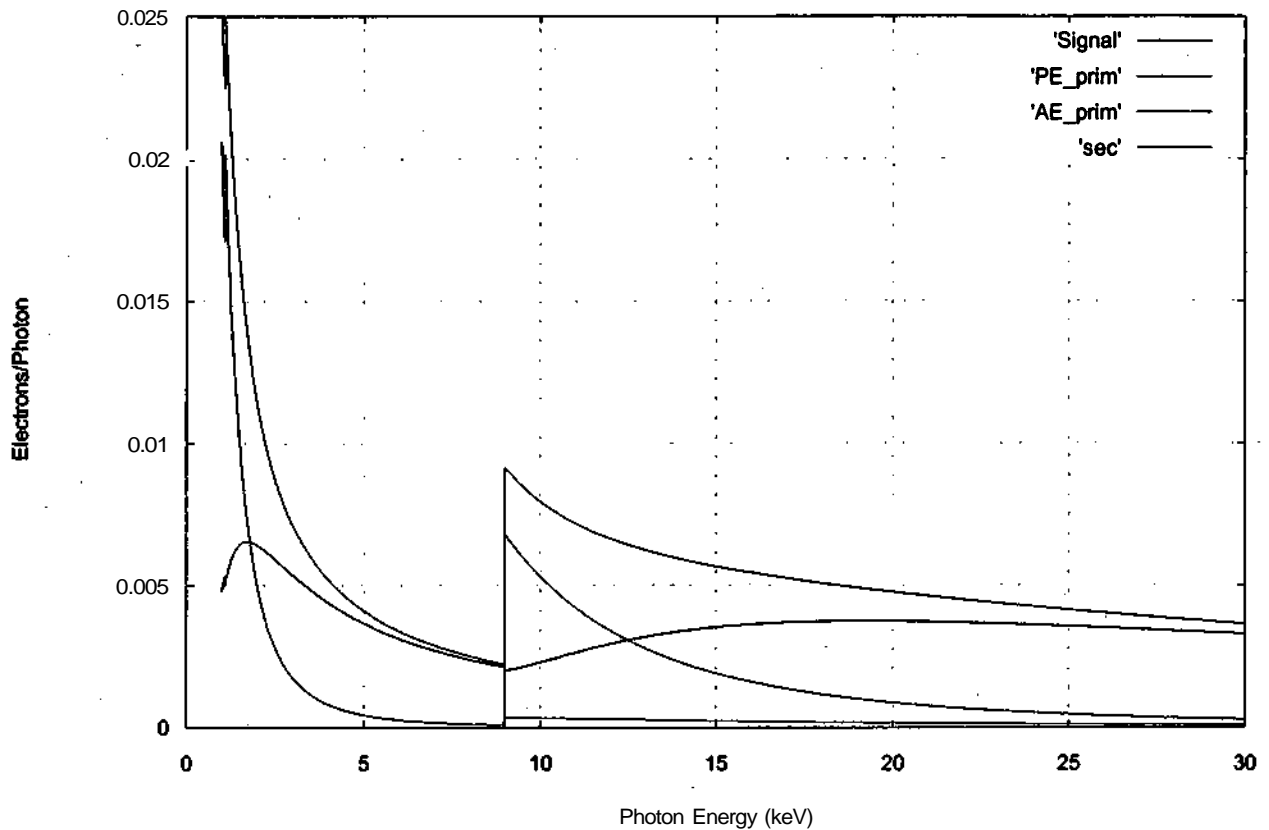


Abb. 6.6: Das **TEY-Signal** und die Elektronenausbeute von Photo- und Auger Elektronen aus Cu durch Primär- und Sekundäranregung

Aus der Abb. 6.6 ist zu ersehen, dass die Probe aus reinem **Cu** besteht, weil das **TEY-Signal** bei der **L1-**, und **K-Absorptionskante** des Elements **Cu** auf einen Maximalwert angewachsen ist, während das **Ag-Signal** nicht mehr erscheint.

Alle diese Abbildungen zeigen die Abhängigkeit des **TEY-Signals** von der Konzentration der Elemente **Cu** und **Ag** in der binären **CuAg-Legierung**. Wie bereits erwähnt, wird im Rechenprogramm die Konzentration eines Elements durch das Verhältnis seines **TEY-Signals** zur Konzentration von 100% errechnet. In der nachstehenden Tabelle 6.1 sind die reduzierten **K-Kantensprünge** der jeweiligen **Cu-** und **Ag-Konzentration** angegeben.

Cu-Konzentration	red. K-Kantensprünge	Ag-Konzentration	red. K-Kantensprünge
0%	0	0%	0
20%	.2218093	20%	.2317595
40%	.4328359	40%	.4424927
60%	.6327977	60%	.6383152
80%	.8219231	80%	.8232535
100%	1	100%	1

Tabelle 6.1: Reduzierten **K-Kantensprünge** der jeweiligen **Cu-** und **Ag-Konzentration**

Der Verlauf der reduzierten **K-Kantensprünge** wird für Schrittweite 0.001 interpoliert, um für das gemessene Signal das Konzentrationsverhältnis von Cu und Ag in der binären CuAg-Legierung zu bestimmen.

Die Abb. 6.7 zeigt die Konzentrationsabhängigkeit der reduzierten K-Kantensprünge von Cu und Ag in binären **CuAg-Legierungen**.

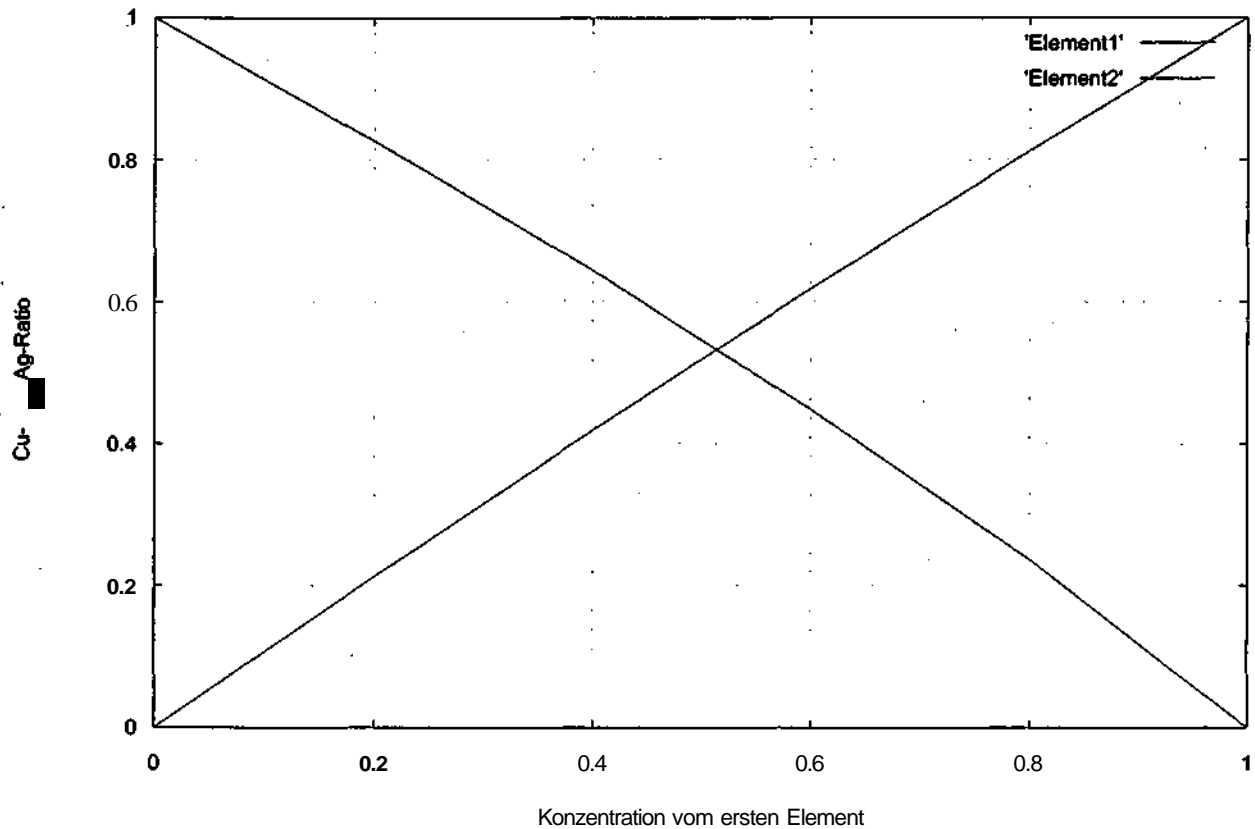


Abb. 6.7: Konzentrationsabhängigkeit der reduzierten K-Kantensprünge von Cu und Ag in binären CuAg-Legierungen

7. Schlussfolgerung

Die Analogiebetrachtung zwischen der Theorie der quantitativen Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA) und der Oberflächenanalytik mittels Vermessung des absorptionsbedingten Kantensprunges der Elektronenemission von Festkörperproben (TEY) baut auf folgenden Gedankengängen auf:

Die quantitative RFA wird im allgemeinen Fall mit polychromatischer Primärstrahlung bewerkstelligt. Es wird also die von der Röntgenröhre kommende Röntgenstrahlung ohne zusätzliche Konditionierung verwendet. In TEY wird die Strahlung monochromatisiert und die vom Monochromator durchgelassene Energie (Bandpass) muß systematisch variiert werden.

Die globale Absorption der in die Probe eintretenden Röntgenstrahlung ist für beide Verfahren identisch.

Die Absorption in bestimmten Atomniveaus reduziert sich bei der RFA auf jenes Atomniveau, welches für die Emission der charakteristischen Fluoreszenzstrahlung des jeweiligen Probenelements verantwortlich ist. In TEY sind neben diesem Niveau auch all jene in die Betrachtungen einzubeziehen, deren Bindungsenergie kleiner ist als die anregende Röntgenstrahlung. Das bedeutet, dass die photoelektrischen Absorptionskoeffizienten der Schalen und der Subschalen in TEY benötigt werden.

Wird in der RFA von den Relaxationsprozessen nur jener für die Emission der charakteristischen Strahlungen benötigt, so sind es in TEY auch die strahlungslosen Prozesse, die zur Emission von Auger-Elektronen Anlaß geben. Es sind also sämtliche Werte für die Fluoreszenzausbeuten von jedem der Probenatome erforderlich.

Die Absorption der charakteristischen Strahlungen der Probenatome wird in TEY durch den Transport der Photo- und der Auger-Elektronen ersetzt. Ein wesentliches Detail stellt hier die Kenntnis der kinetischen Anfangsenergie der Elektronen dar.

Unter Berücksichtigung der Primär- und der Sekundäranregung werden in der RFA etwa 10 bis 20 Strahlungsanteile berechnet, während dies in TEY auch im einfachsten Fall eines binären Systems bereits 60 und mehr Anteile sind. Das bedeutet aber, dass im Falle von TEY programmtechnisch ein vergleichsweise wesentlich grösseres Datenmaterial zu bewältigen ist. Vom Prinzip her sind die Gleichungen für die Beschreibung der Signale in RFA und TEY vergleichbar.

Der Berechnung der TEY-Signale sind nur die Elektronenausbeuten zugänglich, nicht aber die Zahlenwerte der tatsächlich gemessenen Elektronenströme. Dies rührt daher, dass dazu eine genaue Kenntnis der monochromatischen Photonenströme vonnöten wäre. Um dieses Problem zu umgehen, werden Referenzmessungen an Reinelementproben ausgeführt. Der Quotient aus dem gemessenen jump der zu analysierenden Probe und jenem der Reinelementprobe wird als relativer jump bezeichnet. Dieser kann mit dem hier vorgestellten theoretischen Konzept berechnet werden. Das zuletzt gezeigte Diagramm beschreibt die Konzentrationsabhängigkeit der relativen Ag-K- und Cu-K-jumps in Abhängigkeit von der Probenzusammensetzung.

Zur Bestimmung der Zusammensetzung einer unbekannt Probe mit n Elementen sind insgesamt $n-1$ relative jumps zu vermessen und der Auswertung zuzuführen. Die

Probenzusammensetzung folgt dann unter zusätzlicher Berücksichtigung der Tatsache, dass die Summe der Konzentrationen gleich 1 sein muß. Werden alle n jumps in die Auswertung einbezogen, so handelt es sich um die Auswertung eines überbestimmten Gleichungssystems. Analog zur Berechnung der Konzentrationen mittels des fundamentalen Parameteransatzes der RFA wird auch in TEY die Zusammensetzung der Proben über ein Iterationsverfahren erhalten.

8. Verwendete Symbole

P_{ij}	partielle Elektronenausbeute (z. B. Photoelektron aus der Subschale j des Elements i)
P_{ijk}	Übergangswahrscheinlichkeit bei der Emission charakteristischer Röntgenstrahlung
$P_{i,ges}$	Gesamtelektronenausbeute (electron yield)
$P_i(x)$	Austrittswahrscheinlichkeit eines Elektrons aus der Tiefe x im Element i
ω_{ij}	Fluoreszenzausbeute
a_{ij}	Wahrscheinlichkeit für die Emission eines Auger-Elektrons (Auger Elektronenausbeute)
$\tau_{a,b}$	photoelektrischer Absorptionskoeffizient (cm^2/g). Der Index a charakterisiert die Röntgenstrahlung und der Index b den Absorber
$\tau_{E,ij}$	photoelektrischer Absorptionskoeffizient (cm^2/g). Der Index E charakterisiert die Quantenenergie der Röntgenstrahlung und die Indizes ij das Element i und die Schale j
$\tau_{E,c}$	photoelektrischer Absorptionskoeffizient (cm^2/g) in einer binären Probe. Der Index c bezeichnet die binäre Probe.
t_{appr}	aus der Isf-Beschreibung errechneter photoelektrischer Absorptionskoeffizient
τ_{Scof}	photoelektrischer Absorptionskoeffizient aus der Scofield- Datei
$\tau_{krad,i}$	photoelektrischer Absorptionskoeffizient (cm^2/g) in einem Reinelement. Der Index i charakterisiert das Element
$\tau_{krad,c}$	photoelektrischer Absorptionskoeffizient (cm^2/g) in einer binären Probe. Der Index c charakterisiert die binäre Probe
$\tau_{krad,i,level}$	photoelektrischer Absorptionskoeffizient (cm^2/g) in einem Reinelement oder auch in einem Element der binären Probe. Der Index i charakterisiert das Element und der Index $level$ die ionisierte Schale
c_1 und c_2	Konzentration des ersten bzw. zweiten Elements der binären Probe in Gewichtsteilen
E	Quantenenergie (keV)

$E_{kin,E,ij}$	kinetische Energie (keV) eines Photoelektrons, das von einem Röntgenquant der Energie E in der j -Schale des Elements i ausgelöst wird
$E_{B,ij}$	Bindungsenergie (keV) eines Elektrons in der j -Schale des Elements i
a_0, \dots, a_5	Isf Koeffizienten für eine Parabel 5. Ordnung
δ_{rel}	relativer Fehler
$\frac{1}{\rho_i \lambda_1}$ bzw. $\frac{V}{\rho_i \lambda_2}$	Wirkungsquerschnitte für den Elektronentransport im Element i
I	relative Intensität der charakteristischen Strahlungen

9. Anhang

'Das Program TEY.BAS

```
DECLARE SUB setlogx ()
DECLARE SUB setlogy ()
DECLARE SUB init (gnupath1$)
DECLARE SUB setgrid ()
DECLARE SUB daten (kurve() AS SINGLE, name$)
DECLARE SUB plot ()
DECLARE SUB setline (name$)
DECLARE SUB xlabel (wort$)
DECLARE SUB ylabel (wort$)
```

```
DECLARE SUB offnemu1 (element$, en)
DECLARE SUB omegas (oz)
DECLARE SUB Strahlung (element$)
```

```
#####
```

'Gleichungen zur Escape probability

```
DEF fncross1 = EXP(12.84-.214 * LOG(ek) - .1118 * LOG(ek)^2+ .008395 * LOG(ek)^3)
DEF fncross2 = EXP(13.67-1.203 * LOG(ek) - .1086 * LOG(ek)^2+ .00783 * LOG(ek)^3)
DEF fncoef3 = (-3.417 + .1529 * alpha - .00224 * alpha ^2 + 1.074E-05 * alpha ^3)
DEF fncoef4 = (.1724 - .006483 * alpha + 8.096E-05 * alpha ^2 - 2.863E-07 * alpha ^3)
DEF fncoef5 = (-4.05 + .1858 * alpha - .003116 * alpha ^2 + 1.547E-05 * alpha ^3)
DEF fncoef6 = (.2438 - .009934 * alpha + .0001275 * alpha ^2 - 3.908E-07 * alpha ^3)
DEF fnamp1 = EXP(fncoef3 + LOG(ek) * fncoef4)
DEF fnamp2 = EXP(fncoef5 + LOG(ek) * fncoef6)
```

```
#####
```

'Escape probability (Primäranregung)

```
DEF fnp1 = fnamp1 / (taug / COS(gamma) + fncross1)
DEF fnp2 = fnamp2 / (taug / COS(gamma) + fncross2)
DEF fnp = 1 / COS(gamma) * tauij * (fnp1 - fnp2)
```

'Escape probability (Sekundäranregung) Eingabe, e, taukrad, alph, gamma, omegak, 'omegal, 'tauG und taul

```
DEF fnabcd = 1 / fncross1 * LOG(1 + fncross1 / taukrad)
DEF fnbcde = fnabcd + COS(gamma) / tauG * LOG(1 + tauG / COS(gamma) / taukrad)
DEF fncdef = fnamp1 / (taug / COS(gamma) + fncross1) * fnbcde
DEF fndefg = 1 / fncross2 * LOG(1 + fncross2 / taukrad)
DEF fnefgh = fndefg + COS(gamma) / tauG * LOG(1 + tauG / COS(gamma) / taukrad)
DEF fnfghi = fnamp2 / (taug / COS(gamma) + fncross2) * fnefgh
```

'Sekundäranregung durch Ka und Kb

```
DEF fnsas = tauk * omegak * taukradlevel / 2
DEF fnsae = fnsas * (fncdef - fnfghi) / COS(gamma)
```

```
'Sekundäranregung durch L
DEF fnsas1 = taul + tauk * omegak * pka + tauk * (1 - omegak) * 2
DEF fnsas2 = fnsas1 * omegal * taukradlevel / 2
DEF fnsael = fnsas2 * (fncdef - fnfghi) / COS(gamma)
```

```
#####
CLS
```

```
pi = 4 * ATN(1)
gamma = 78 * pi / 180           'Eintrittswinkel zum Lot
alpha = 20                     'Öffnungswinkel
DIM show(3000, 2), aug(3000, 2), pe(3000, 2), sek(3000, 2)
```

```
#####
INPUT "Element 1"; el1$
INPUT "Element 2"; el2$
```

```
element$ = LCASE$(MID$(el1$, 1, 1)) + MID$(el1$, 2, 1)
```

```
OPEN "d:\elyas\el_z.dat" FOR INPUT AS #1
FORi = 1 TO 100
IF EOF(1) < 0 THEN GOTO Ordnungszahl
INPUT #1, elem$
IF elem$ = element$ THEN oz = i
NEXT i
Ordnungszahl:
CLOSE #1
oz1 = oz
```

```
element$ = UCASE$(MID$(element$, 1, 1)) + MID$(element$, 2, 1)
```

```
CALL strahlung(element$)
eka1 = eka: pka1 = pka: ekb1 = ekb: pkb1 = pkb: el1 = el
```

```
CALL omegas(oz1)
omegaki = omegak: omegal1 = omegal: omegami = omegam
```

```
element$ = LCASE$(MID$(el2$, 1, 1)) + MID$(el2$, 2, 1)
```

```
OPEN "d:\elyas\el_z.dat" FOR INPUT AS #11
FORi = 1 TO 100
IF EOF(11) < 0 THEN GOTO Ordnung
INPUT #11, elem$
IF elem$ = element$ THEN oz = i
NEXT i
Ordnung:
CLOSE #11
oz2 = oz
```

```
element$ = UCASE$(MID$(element$, 1, 1)) + MID$(element$, 2, 1)
```

```
CALL strahlung(element$)
```

eka2 = eka: pka2 = pka: ekb2 = ekb: pkb2 = pkb: el2 = el

CALL omegas(oz2)

omegak2 = omegak: omegal2 = omegal: omegam2 = omegam

CALL offnemu1(el1\$, eka1)

taukrada11 = taug: taukrada1l1 = taul: taukrada1m1 = taum: taukrada1n1 = taun

CALL offnemu1(el2\$, eka1)

taukrada12 = taug: taukrada1l2 = taul: taukrada1m2 = taum: taukrada1n2 = taun
taukrada1k2 = tauk

CALL offnemu1(el1\$, ekb1)

taukradb11 = taug: taukradb1l1 = taul: taukradb1m1 = taum: taukradb1n1 = taun

CALL offnemu1(el2\$, ekb1)

taukradb12 = taug: taukradb1l2 = taul: taukradb1m2 = taum: taukradb1n2 = taun
taukradb1k2 = tauk

CALL offnemu1(el1\$, el1)

taukradl11 = taug: taukradl1m1 = taum: taukradl1n1 = taun

CALL offnemu1(el2\$, el1)

taukradl12 = taug: taukradl1m2 = taum: taukradl1n2 = taun

CALL offnemu1(el2\$, eka2)

taukrada22 = taug: taukrada2l2 = taul: taukrada2m2 = taum: taukrada2n2 = taun

CALL offnemu1(el1\$, eka2)

taukrada21 = taug: taukrada2l1 = taul: taukrada2m1 = taum: taukrada2n1 = taun
taukrada2k1 = tauk

CALL offnemu1(el2\$, ekb2)

taukradb22 = taug: taukradb2l2 = taul: taukradb2m2 = taum: taukradb2n2 = taun

CALL offnemu1(el1\$, ekb2)

taukradb21 = taug: taukradb2l1 = taul: taukradb2m1 = taum: taukradb2n1 = taun
taukradb2k1 = tauk

CALL offnemu1(el2\$, el2)

taukradl22 = taug: taukradl2m2 = taum: taukradl2n2 = taun

CALL offnemu1(el1\$, el2)

taukradl21 = taug: taukradl2m1 = taum: taukradl2n1 = taun

DIM prop1(10), prop2(10)

prop1(1) = 1 - omegak1

prop2(1) = 1 - omegak2

prop1(2) = pka1 * omegak1 * (1 - omegal1) + 2 * (1 - omegak1) * (1 - omegal1)

prop2(2) = pka2 * omegak2 * (1 - omegal2) + 2 * (1 - omegak2) * (1 - omegal2)

prop1(3) = 1 - omegal1
prop2(3) = 1 - omegal2

pr1 = omegak1 * pkb1 * (1 - omegam1)
pro1 = pr1 + omegak1 * pka1 * (1 - omegal1) * 2 * (1 - omegam1)
prp1 = pro1 + 2 * (1 - omegak1) * (1 - omegal1) * (1 - omegam1) * 2
prop1(4) = prp1 + ((1 - omegak1) * omegal1 + (1 - omegak1) * (1 - omegal1) * 2) * (1 - omegam1)
pr2 = omegak2 * pkb2 * (1 - omegam2)
pro2 = pr2 + omegak2 * pka2 * (1 - omegal2) * 2 * (1 - omegam2)
prp2 = pro2 + 2 * (1 - omegak2) * (1 - omegal2) * (1 - omegam2) * 2
prop2(4) = prp2 + ((1 - omegak2) * omegal2 + (1 - omegak2) * (1 - omegal2) * 2) * (1 - omegam2)

prop1(5) = omegal1 * (1 - omegam1) + (1 - omegal1) * 2 * (1 - omegam1)
prop2(5) = omegal2 * (1 - omegam2) + (1 - omegal2) * 2 * (1 - omegam2)

prop1(6) = 1 - omegam1
prop2(6) = 1 - omegam2

prop1(7) = 1 - omegal1
prop2(7) = 1 - omegal2

prop1(8) = omegal1 * (1 - omegam1) + (1 - omegal1) * 2 * (1 - omegam1)
prop2(8) = omegal2 * (1 - omegam2) + (1 - omegal2) * 2 * (1 - omegam2)

prop1(9) = 1 - omegam1
prop2(9) = 1 - omegam2

prop1(10) = 1 - omegam1
prop2(10) = 1 - omegam2

#####

FOR konz = 0 TO 10 STEP 2
c1 = konz / 10
c2 = 1 - c1

FOR i = 0 TO 3000
en = 1 + (30 - 1) / 3000 * i
show(i, 2) = 0: aug(i, 2) = 0: pe(i, 2) = 0: sek(i, 2) = 0
show(i, 1) = 0: aug(i, 1) = 0: pe(i, 1) = 0: sek(i, 1) = 0

show(i, 1) = en: aug(i, 1) = en: pe(i, 1) = en: sek(i, 1) = en
'primärangeregte Photoelektronen

CALL offnemu1(e1\$, en)
tauk1 = tauk
tauijk1 = c1 * tauk
tauil1 = c1 * taul
tauilm1 = c1 * taum
tauijn1 = c1 * taun

taug1 = taug
ek1 = ekk
el1 = ekl
em1 = ekm
en1 = ekn
kedge1 = kedge
mek1 = mek
mel1 = mel
mem1 = mem
men1 = men

CALL offnemu1(el2\$, en)

tauk2 = tauk
tauijk2 = c2 * tauk
tauijl2 = c2 * taul
tauijm2 = c2 * taum
tauijn2 = c2 * taun
taug2 = taug
ek2 = ekk
el2 = ekl
em2 = ekm
en2 = ekn
kedge2 = kedge
mek2 = mek
mel2 = mel
mem2 = mem
men2 = men

taug = c1 * taug1 + c2 * taug2

tauij = tauijk1: ek = ek1
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = fnp
tauij = tauijk2: ek = ek2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + fnp

tauij = tauijl1: ek = el1
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + fnp
tauij = tauijl2: ek = el2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + fnp

tauij = tauijm1: ek = em1
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + fnp
tauij = tauijm2: ek = em2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + fnp

tauij = tauijn1: ek = en1
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + fnp
tauij = tauijn2: ek = en2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + fnp
pe(i, 2) = show(i, 2)

'primär angeregte Augerelektronen

anfang = show(i, 2)

tau_{ij} = tau_{ijk1}: ek = mek1 - 2 * mel1

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + prop1(1) * fnp

tau_{ij} = tau_{ijk2}: ek = mek2 - 2 * mel2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + prop2(1) * fnp

tau_{ij} = tau_{ijk1}: ek = mel1 - 2 * mem1

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + prop1(2) * fnp

tau_{ij} = tau_{ijk2}: ek = mel2 - 2 * mem2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + prop2(2) * fnp

tau_{ij} = tau_{ijl1}: ek = mel1 - 2 * mem1

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + prop1(3) * fnp

tau_{ij} = tau_{ijl2}: ek = mel2 - 2 * mem2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + prop2(3) * fnp

tau_{ij} = tau_{ijk1}: ek = mem1 - 2 * men1

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + prop1(4) * fnp

tau_{ij} = tau_{ijk2}: ek = mem2 - 2 * men2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + prop2(4) * fnp

tau_{ij} = tau_{ijl1}: ek = mem1 - 2 * men1

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + prop1(5) * fnp

tau_{ij} = tau_{ijl2}: ek = mem2 - 2 * men2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + prop2(5) * fnp

tau_{ij} = tau_{ijm1}: ek = mem1 - 2 * men1

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + prop1(6) * fnp

tau_{ij} = tau_{ijm2}: ek = mem2 - 2 * men2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + prop2(6) * fnp

aug(i, 2) = show(i, 2) - anfang

#####

'Sekundäranregung durch Ka und Kb

begin = show(i, 2)

taukrad = c1 * taukrada11 + c2 * taukrada12

'L PE Ka1 in L1

taukradlevel = c1 * c1 * taukrada11: tauk = tauk1

ek = eka1 - mel1: omegak = omegak1

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka1 * fnsae

'0

'K PE Ka1 in K1

'0

'K PE Kb1 in K1

taukrad = c1 * taukradal 1 + c2 * taukradal 2

'K PE Ka1 in K2

taukradlevel = c1 * c2 * taukradal k2: tauk = taukl

ek = eka1 - mek2: omegak = omegak1

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka1 * fnsae

$\text{taukrad} = c1 * \text{taukrada11} + c2 * \text{taukrada12}$ 'L PE Ka1 in L2
 $\text{taukradlevel} = c1 * c2 * \text{taukradal12}$: tauk = tauk1
 $\text{ek} = \text{eka1} - \text{mel2}$: omegak = omegaki
 IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka1 * fnsae

$\text{taukrad} = c1 * \text{taukradb11} + c2 * \text{taukradb12}$ 'K PE Kb1 in K2
 $\text{taukradlevel} = c1 * c2 * \text{taukradb1k2}$: tauk = tauk1
 $\text{ek} = \text{ekb1} - \text{mek2}$: omegak = omegaki
 IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb1 * fnsae

$\text{taukrad} = c1 * \text{taukradbl1} + c2 * \text{taukradb12}$ 'L PE Kb1 in L2
 $\text{taukradlevel} = c1 * c2 * \text{taukradbl12}$: tauk = tauk1
 $\text{ek} = \text{ekb1} - \text{mel2}$: omegak = omegaki
 IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb1 * fnsae

$\text{taukrad} = c1 * \text{taukradbl1} + c2 * \text{taukradb12}$ 'L PE Kb1 in L1
 $\text{taukradlevel} = c1 * c1 * \text{taukradbl11}$: tauk = tauk1
 $\text{ek} = \text{ekb1} - \text{mel1}$: omegak = omegaki
 IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb1 * fnsae

$\text{taukrad} = c1 * \text{taukrada21} + c2 * \text{taukrada22}$ 'L PE Ka2 in L2
 $\text{taukradlevel} = c2 * c2 * \text{taukrada2l2}$: tauk = tauk2
 $\text{ek} = \text{eka2} - \text{mel2}$: omegak = omegak2
 IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka2 * fnsae

'0 'K PE Ka2 in K2

'0 K PE Kb2 in K2

$\text{taukrad} = c1 * \text{taukradb21} + c2 * \text{taukradb22}$ 'L PE Kb2 in L2
 $\text{taukradlevel} = c2 * c2 * \text{taukradb2l2}$: tauk = tauk2
 $\text{ek} = \text{ekb2} - \text{mel2}$: omegak = omegak2
 IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb2 * fnsae

$\text{taukrad} = c1 * \text{taukrada21} + c2 * \text{taukrada22}$ 'L PE Ka2 in L1
 $\text{taukradlevel} = c1 * c2 * \text{taukrada2l1}$: tauk = tauk2
 $\text{ek} = \text{eka2} - \text{mel1}$: omegak = omegak2
 IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka2 * fnsae

$\text{taukrad} = c1 * \text{taukradb21} + c2 * \text{taukradb22}$ 'L PE Kb2 in L1
 $\text{taukradlevel} = c1 * c2 * \text{taukradb2l1}$: tauk = tauk2
 $\text{ek} = \text{ekb2} - \text{mel1}$: omegak = omegak2
 IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb2 * fnsae

$\text{taukrad} = c1 * \text{taukradal1} + c2 * \text{taukrada12}$ 'M PE Ka1 in M1
 $\text{taukradlevel} = c1 * c1 * \text{taukrada1m1}$: tauk = tauk1
 $\text{ek} = \text{eka1} - \text{mem1}$: omegak = omegaki
 IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka1 * fnsae

$\text{taukrad} = c1 * \text{taukradal1} + c2 * \text{taukrada12}$ 'M PE Ka1 in M2

taukradlevel = c1 * c2 * taukrada1m2: tauk = tauk1
ek = eka1 - mem2: omegak = omegaki
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka1 * fnsae

taukrad = c1 * taukradb11 + c2 * taukradb12
taukradlevel = c1 * c1 * taukradbl m1: tauk = taukl
ek = ekb1 - mem1: omegak = omegaki
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb1 * fnsae

'M PE Kb1 in M1

taukrad = c1 * taukradbl 1 + c2 * taukradb12
taukradlevel = c1 * c2 * taukradb1m2: tauk = taukl
ek = ekb1 - mem2: omegak = omegaki
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb1 * fnsae

'M PE Kb1 in M2

taukrad = c1 * taukrada21 + c2 * taukrada22
taukradlevel = c1 * c2 * taukrada2k1: tauk = tauk2
ek = eka2 - mek1: omegak = omegak2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka2 * fnsae

'M PE Ka2 in K1

taukrad = c1 * taukrada21 + c2 * taukrada22
taukradlevel = c2 * c2 * taukrada2m2: tauk = tauk2
ek = eka2 - mem2: omegak = omegak2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka2 * fnsae

'M PE Ka2 in M2

taukrad = c1 * taukrada21 + c2 * taukrada22
taukradlevel = c1 * c2 * taukrada2m1: tauk = tauk2
ek = eka2 - mem1: omegak = omegak2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka2 * fnsae

'M PE Ka2 in M1

taukrad = c1 * taukradb21 + c2 * taukradb22
taukradlevel = c2 * c2 * taukradb2m2: tauk = tauk2
ek = ekb2 - mem2: omegak = omegak2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb2 * fnsae

'M PE Kb2 in M2

taukrad = c1 * taukradb21 + c2 * taukradb22
taukradlevel = c1 * c2 * taukradb2m1: tauk = tauk2
ek = ekb2 - mem1: omegak = omegak2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb2 * fnsae

'M PE Kb2 in M1

taukrad = c1 * taukradb21 + c2 * taukradb22
taukradlevel = c1 * c2 * taukradb2k1: tauk = tauk2
ek = ekb2 - mek1: omegak = omegak2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb2 * fnsae

'M PE Kb2 in K1

taukrad = c1 * taukrada11 + c2 * taukrada12
taukradlevel = c1 * c1 * taukrada1n1: tauk = taukl
ek = eka1 - men1: omegak = omegaki
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka1 * fnsae

'N PE Ka1 in N1

taukrad = c1 * taukradal 1 + c2 * taukrada12
taukradlevel = c1 * c2 * taukradal n2: tauk = taukl

'N PE Ka1 in N2

ek = eka1 - men2: omegak = omegak1
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka1 * fnsae

taukrad = c1 * taukradb11 + c2 * taukradb12 'N PE Kb1 in N1
taukradlevel = c1 * c1 * taukradb1n1: tauk = tauk1
ek = ekb1 - men1: omegak = omegak1
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb1 * fnsae

taukrad = c1 * taukradbl 1 + c2 * taukradbl 2 'N PE Kb1 in N2
taukradlevel = c1 * c2 * taukradb1n2: tauk = taukl
ek = ekb1 - men2: omegak = omegakl
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb1 * fnsae

taukrad = c1 * taukrada21 + c2 * taukrada22 'N PE Ka2 in N2
taukradlevel = c2 * c2 * taukrada2n2: tauk = tauk2
ek = eka2 - men2: omegak = omegak2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka2 * fnsae

taukrad = c1 * taukrada21 + c2 * taukrada22 'N PE Ka2 in N1
taukradlevel = c1 * c2 * taukrada2n1: tauk = tauk2
ek = eka2 - men1: omegak = omegak2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka2 * fnsae

taukrad = c1 * taukradb21 + c2 * taukradb22 'N PE Kb2 in N2
taukradlevel = c2 * c2 * taukradb2n2: tauk = tauk2
ek = ekb2 - men2: omegak = omegak2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb2 * fnsae

taukrad = c1 * taukradb21 + c2 * taukradb22 'N PE Kb2 in N1
taukradlevel = c1 * c2 * taukradb2n1: tauk = tauk2
ek = ekb2 - men1: omegak = omegak2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb2 * fnsae

'Augerelektronen
'Ka und Kb, AE KLL, LMM und MNN

'0 'KLL1 Ka1

'0 'KLL1 Kb1

taukrad = c1 * taukrada11 + c2 * taukrada12 'KLL2 Ka1
taukradlevel = c1 * c2 * taukradal k2: tauk = taukl
ek = mek2 - 2 * mel2: omegak = omegakl
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka1 * prop2(1) * fnsae

taukrad = c1 * taukradbl 1 + c2 * taukradb12 'KLL2 Kb1
taukradlevel = c1 * c2 * taukradb1k2: tauk = taukl
ek = mek2 - 2 * mel2: omegak = omegakl
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb1 * prop2(1) * fnsae

'0 'KLL2 Ka2

'0

'KLL2 Kb2

taukrad = c1 * taukrada21 + c2 * taukrada22

'KLL1 Ka2

taukradlevel = c1 * c2 * taukrada2k1: tauk = tauk2

ek = mek1 - 2 * mel1: omegak = omegak2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka2 * prop1(1) * fnsae

taukrad = c1 * taukradb21 + c2 * taukradb22

'KLL1 Kb2

taukradlevel = c1 * c2 * taukradb2k1: tauk = tauk2

ek = mek1 - 2 * mel1: omegak = omegak2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb2 * prop1(1) * fnsae

taukrad = c1 * taukrada11 + c2 * taukrada12

'LMM1 Ka1

taukradlevel = c1 * c1 * taukrada1l1: tauk = tauk1

ek = mel1 - 2 * mem1: omegak = omegak1

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka1 * prop1(7) * fnsae

taukrad = c1 * taukradal1 + c2 * taukrada12

'LMM2 Ka1

taukradlevel = c1 * c2 * taukradal1l2: tauk = tauk1

ek = mel2 - 2 * mem2: omegak = omegak1

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka1 * prop2(7) * fnsae

taukrad = c1 * taukradb11 + c2 * taukradb12

'LMM2 Kb1

taukradlevel = c1 * c2 * taukradb1l2: tauk = tauk1

ek = mel2 - 2 * mem2: omegak = omegak1

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb1 * prop2(7) * fnsae

taukrad = c1 * taukradb11 + c2 * taukradb12

'LMM1 Kb1

taukradlevel = c1 * c1 * taukradb1l1: tauk = tauk1

ek = mel1 - 2 * mem1: omegak = omegak1

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb1 * prop1(7) * fnsae

taukrad = c1 * taukrada21 + c2 * taukrada22

'LMM2 Ka2

taukradlevel = c2 * c2 * taukrada2l2: tauk = tauk2

ek = mel2 - 2 * mem2: omegak = omegak2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka2 * prop2(7) * fnsae

taukrad = c1 * taukrada21 + c2 * taukrada22

'LMM1 Ka2

taukradlevel = c1 * c2 * taukrada2l1: tauk = tauk2

ek = mel1 - 2 * mem1: omegak = omegak2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka2 * prop1(7) * fnsae

taukrad = c1 * taukradb21 + c2 * taukradb22

'LMM2 Kb2

taukradlevel = c2 * c2 * taukradb2l2: tauk = tauk2

ek = mel2 - 2 * mem2: omegak = omegak2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb2 * prop2(7) * fnsae

taukrad = c1 * taukradb21 + c2 * taukradb22

'LMM1 Kb2

taukradlevel = c1 * c2 * taukradb2l1: tauk = tauk2

ek = mel1 - 2 * mem1: omegak = omegak2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb2 * prop1(7) * fnsae

taukrad = c1 * taukrada11 + c2 * taukrada12 'MNN1 Ka1

taukradlevel = c1 * c1 * taukradal1: tauk = tauk1

ek = mem1 - 2 * men1: omegak = omegak1

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka1 * prop1(8) * fnsae

taukrad = c1 * taukrada11 + c2 * taukradal2 'MNN2 Ka1

taukradlevel = c1 * c2 * taukradal2: tauk = taukl

ek = mem2 - 2 * men2: omegak = omegakl

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka1 * prop2(8) * fnsae

taukrad = c1 * taukradb11 + c2 * taukradb12 'MNN1 Kb1

taukradlevel = c1 * c1 * taukradb11: tauk = taukl

ek = mem1 - 2 * men1: omegak = omegakl

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb1 * prop1(8) * fnsae

taukrad = c1 * taukrada21 + c2 * taukrada22 'MNN2 Ka2

taukradlevel = c2 * c2 * taukrada21: tauk = tauk2

ek = mem2 - 2 * men2: omegak = omegak2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka2 * prop2(8) * fnsae

taukrad = c1 * taukrada21 + c2 * taukrada22 'MNN1 Ka2

taukradlevel = c1 * c2 * taukrada21: tauk = tauk2

ek = mem1 - 2 * men1: omegak = omegak2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka2 * prop1(8) * fnsae

taukrad = c1 * taukradb21 + c2 * taukradb22 'MNN2 Kb2

taukradlevel = c2 * c2 * taukradb21: tauk = tauk2

ek = mem2 - 2 * men2: omegak = omegak2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb2 * prop2(8) * fnsae

taukrad = c1 * taukradb21 + c2 * taukradb22 'MNN1 Kb2

taukradlevel = c1 * c2 * taukradb21: tauk = tauk2

ek = mem1 - 2 * men1: omegak = omegak2

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb2 * prop1(8) * fnsae

taukrad = c1 * taukradbl1 + c2 * taukradb12 'MNN2 Kb1

taukradlevel = c1 * c2 * taukradbl1: tauk = taukl

ek = mem2 - 2 * men2: omegak = omegakl

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb1 * prop2(8) * fnsae

taukrad = c1 * taukradal1 + c2 * taukrada12 'MNN1 Ka1

taukradlevel = c1 * c1 * taukradal1: tauk = taukl

ek = mem1 - 2 * men1: omegak = omegakl

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka1 * prop1(9) * fnsae

taukrad = c1 * taukradal1 + c2 * taukrada12 'MNN2 Ka1

taukradlevel = c1 * c2 * taukradal1: tauk = taukl

ek = mem2 - 2 * men2: omegak = omegakl

IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka1 * prop2(9) * fnsae

tauhrad = c1 * taukradb11 + c2 * taukradb12 'MNN1 Kb1
tauhradlevel = c1 * c1 * taukradb1m1: tauk = tauk1
ek = mem1 - 2 * men1: omegak = omegak1
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb1 * prop1(9) * fnsae

tauhrad = c1 * taukradb1 + c2 * taukradb12 'MNN2 Kb1
tauhradlevel = c1 * c2 * taukradb1m2: tauk = taukl
ek = mem2 - 2 * men2: omegak = omegakl
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb1 * prop2(9) * fnsae

tauhrad = c1 * taukrada21 + c2 * taukrada22 'MNN2 Ka2
tauhradlevel = c2 * c2 * taukrada2m2: tauk = tauk2
ek = mem2 - 2 * men2: omegak = omegak2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka2 * prop2(9) * fnsae

tauhrad = c1 * taukrada21 + c2 * taukrada22 'MNN1 Ka2
tauhradlevel = c1 * c2 * taukrada2m1: tauk = tauk2
ek = mem1 - 2 * men1: omegak = omegak2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pka2 * prop1(9) * fnsae

tauhrad = c1 * taukradb21 + c2 * taukradb22 'MNN2 Kb2
tauhradlevel = c2 * c2 * taukradb2m2: tauk = tauk2
ek = mem2 - 2 * men2: omegak = omegak2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb2 * prop2(9) * fnsae
sek(i, 2) = show(i, 2) - begin

tauhrad = c1 * taukradb21 + c2 * taukradb22 'MNN1 Kb2
tauhradlevel = c1 * c2 * taukradb2m1: tauk = tauk2
ek = mem1 - 2 * men1: omegak = omegak2
IF ek > .05 THEN show(i, 2) = show(i, 2) + pkb2 * prop1(9) * fnsae
sek(i, 2) = show(i, 2) - begin
678

IF show(i, 1) <= kedge1 THEN jum1 = show(i, 2): kk = i
IF show(i, 1) > kedge1 AND i = kk + 1 THEN jum2 = show(i, 2)

IF show(i, 1) <= kedge2 THEN jum3 = show(i, 2): xx = i
IF show(i, 1) > kedge2 AND i = xx + 1 THEN jum4 = show(i, 2)
NEXT i

#####

jump1 = jum2 - jum1
jump2 = jum4 - jum3

IF konz = 0 THEN jumpl k0 = 0: jump2k100 = jump2
IF konz = 2 THEN jumpl k20 = jump1: jump2k80 = jump2
IF konz = 4 THEN jumpl k40 = jump1: jump2k60 = jump2
IF konz = 6 THEN jumpl k60 = jump1: jump2k40 = jump2
IF konz = 8 THEN jumpl k80 = jump1: jump2k20 = jump2
IF konz = 10 THEN jumpl k100 = jump1: jump2k0 = 0


```

IF konz = 0 THEN PRINT "Konzentrationsverhältnisse "; el1$; " = 0%", el2$; " = 100%"
IF konz = 2 THEN PRINT "Konzentrationsverhältnisse "; el1$; " = 20%", el2$; " = 80%"
IF konz = 4 THEN PRINT "Konzentrationsverhältnisse "; el1$; " = 40%", el2$; " = 60%"
IF konz = 6 THEN PRINT "Konzentrationsverhältnisse "; el1$; " = 60%", el2$; " = 40%"
IF konz = 8 THEN PRINT "Konzentrationsverhältnisse "; el1$; " = 80%", el2$; " = 20%"
IF konz = 10 THEN PRINT "Konzentrationsverhältnisse "; el1$; " = 100%", el2$; " = 0%"
INPUT ; "Enter "; stop$

```

```

CALL init("\")
CALL setgrid
'CALL setlogx
'CALL setlogy
CALL daten(show(), "Signal")
CALL daten(pe(), "PE_prim")
CALL daten(aug(), "AE_prim")
CALL daten(sek(), "sec")
CALL setline("Signal")
CALL setline("PE_prim")
CALL setline("AE_prim")
CALL setline("sec")
CALL xlabel("Photon Energy (keV)")
CALL ylabel("Electrons/Photon")
'CALL nokey
CALL plot
NEXT konz

```

```

#####
DIM ratio1(5, 2), ratio2(5, 2)

```

```

ratio1(0, 1) = 0: ratio1(0, 2) = 0
ratio1(1, 1) = .2: ratio1(1, 2) = jump1 k20 / jump1 k100
ratio1(2, 1) = .4: ratio1(2, 2) = jump1 k40 / jump1 k100
ratio1(3, 1) = .6: ratio1(3, 2) = jump1 k60 / jump1 k100
ratio1(4, 1) = .8: ratio1(4, 2) = jump1 k80 / jump1 k100
ratio1(5, 1) = 1: ratio1(5, 2) = 1

```

```

ratio2(0, 1) = 0: ratio2(0, 2) = 0
ratio2(1, 1) = .2: ratio2(1, 2) = jump2k20 / jump2k100
ratio2(2, 1) = .4: ratio2(2, 2) = jump2k40 / jump2k100
ratio2(3, 1) = .6: ratio2(3, 2) = jump2k60 / jump2k100
ratio2(4, 1) = .8: ratio2(4, 2) = jump2k80 / jump2k100
ratio2(5, 1) = 1: ratio2(5, 2) = 1

```

```

OPEN "d:\elyas\konzentr.txt" FOR OUTPUT AS #1
PRINT #1, "c1      gerechnet  c2      gerechnet"
FOR i = 0 TO 5
PRINT #1, ratio1(i, 1), ratio1(i, 2), ratio2(i, 1), ratio2(i, 2)
NEXT i
CLOSE #1
END

```

SUB offnemu1 (element\$, en)

SHARED taug, taul, taum, taun, tauk

SHARED mek, mel, mem, men, ekk, ekl, ekm, ekn, ELS, EMS, ENS

SHARED kedge

taug = 0: taul = 0: taum = 0: taun = 0: tauk = 0:

mel = 0: mem = 0: men = 0: ekk = 0: ekl = 0: ekm = 0: ekn = 0: ELS = 0: EMS=0: ENS=0

DIM a(5)

OPEN "d:\Tau_Mu\output\" + element\$ + ".mu" FOR INPUT AS #13

FOR i = 1 TO 8 STEP 1

INPUT #13, z\$

NEXT i

FORj = 1 TO 30

IF EOF(13) < 0 THEN GOTO endfor221

INPUT #13, z\$

IF EOF(13) < 0 THEN GOTO endfor221

INPUT #13, edge, jump

IF EOF(13) < 0 THEN GOTO endfor221

INPUT #13, a(0), a(1), a(2), a(3), a(4), a(5)

IF z\$ = "K" THEN kedge = edge

IF z\$ = "K" THEN

IF en > edge THEN

tauk = EXP(a(0) + a(1) * LOG(en) + a(2) * LOG(en)^2 + a(3) * LOG(en)^3 + a(4) *
LOG(en)^4 + a(5) * LOG(en)^5)

ekk = en - edge

mek = edge

END IF

END IF

IF z\$ = "L1" OR z\$ = "L2" OR z\$ = "L3" THEN

IF en > edge THEN

anzL = anzL + 1: ELS = ELS + edge

taul = taul + EXP(a(0) + a(1) * LOG(en) + a(2) * LOG(en)^2 + a(3) * LOG(en)^3 +
a(4) * LOG(en)^4 + a(5) * LOG(en)^5)

END IF

END IF

IF z\$ = "M1" OR z\$ = "M2" OR z\$ = "M3" OR z\$ = "M4" OR z\$ = "M5" THEN

IF en > edge THEN

anzM = anzM + 1: EMS = EMS + edge

taum = taum + EXP(a(0) + a(1) * LOG(en) + a(2) * LOG(en)^2 + a(3) * LOG(en)^3
+ a(4) * LOG(en)^4 + a(5) * LOG(en)^5)

END IF

END IF

IF z\$ = "N1" OR z\$ = "N2" OR z\$ = "N3" OR z\$ = "N4" OR z\$ = "N5" OR z\$ = "N6" OR
z\$ = "N7" THEN

```

IF en > edge THEN
anzN = anzN + 1: ENS = ENS + edge
taun = taun + EXP(a(0) + a(1) * LOG(en) + a(2) * LOG(en) ^2 + a(3) * LOG(en) ^3 +
a(4) * LOG(en) ^4 + a(5) * LOG(en) ^5)
END IF
END IF

NEXT j
endfor221:
CLOSE #13

IF anzL > 0 THEN mel = ELS / anzL
IF anzM > 0 THEN mem = EMS / anzM
IF anzN > 0 THEN men = ENS / anzN

taug = taul + taum + taun + tauk

IF mel > 0 THEN ekl = en - mel
IF mem > 0 THEN ekm = en - mem
IF men > 0 THEN ekn = en - men

END SUB

```

'Mittlere Energie der L-Schale
'Mittlere Energie der M-Schale
'Mittlere Energie der N-Schale

'tau.gesamt

'kinetische Energie der L-Schale
'kinetische Energie der M-Schale
'kinetische Energie der N-Schale

```
SUB omegas (oz)
'einlesen von omegaK,omegaL und omegaM
```

```
SHARED omegak, omegal, omegam
```

```
ordzahl = oz: kk = 0: ll = 0: mm = 0
```

```
OPEN "d:\elyas\omega_K.dat" FOR INPUT AS #14
OPEN "d:\elyas\omega_L.dat" FOR INPUT AS #15
OPEN "d:\elyas\omega_M.dat" FOR INPUT AS #16
```

```
FOR i = 0 TO 100                                'omegaK
IF kk = 0 THEN INPUT #14, zk, omk
IF zk = ordzahl THEN omegak = omk: kk = 1: CLOSE #14

IF ll = 0 THEN INPUT #15, zl, omL                'omegaL
IF zl = ordzahl THEN omegal = omL
IF ll = 0 THEN IF EOF(15) = -1 THEN ll = 1: CLOSE #15

IF mm = 0 THEN INPUT #16, zm, omM                'omegaM
IF zm = ordzahl THEN omegam = omM
IF mm = 0 THEN IF EOF(16) = -1 THEN mm = 1: CLOSE #16
NEXT i
```

```
END SUB
```

```
SUB Strahlung (element$)
```

```
SHARED ka, eka, pka, kb, ekb, pkb, L, el, pl
```

```
OPEN "D:\elyas\KAB-E-P.dat" FOR INPUT AS #17
```

```
FOR i = 0 TO 210
IF EOF(17) = -1 THEN GOTO endfor2
INPUT #17, line$
IF MID$(line$, 10, 2) = element$ OR MID$(line$, 10, 2) = element$ + " " THEN
INPUT #17, ka, eka, pka
INPUT #17, kb, ekb, pkb
INPUT #17, L, el, pl
GOTO endfor2
END IF
NEXT i
endfor2:
CLOSE #17
```

```
END SUB
```

'Das Program C1C2.BAS zur Bestimmung der Konzentration vom ersten und zweiten
'Element der binären Probe

```
DECLARE SUB init (gnupath1$)
DECLARE SUB setgrid ()
DECLARE SUB daten (kurve() AS SINGLE, name$)
DECLARE SUB plot ()
DECLARE SUB setline (name$)
DECLARE SUB xlabel (wort$)
DECLARE SUB ylabel (wort$)
```

```
anz = 2
n = 1000: nmax = 1000
yp1 = 1E+31: ypn = 1E+31
DIM y2(n), u(nmax)
DIM xa(n), ya(n), y2a(n)', x(n), y(n),
DIM erg1(3000, 2), erg2(3000, 2)
DIM x(100), y(100)
DIM dede(400, 2)
DIM cece(100, 2)
```

```
#####
OPEN "d:\elyas\konzentr.txt" FOR INPUT AS #1
INPUT #1, a$
```

```
FOR i = 1 TO 6
INPUT #1, ratel1(i, 1), ratel1(i, 2), ratel2(i, 1), ratel2(i, 2)
NEXT i
CLOSE #1
```

```
#####
FOR ii = 1 TO anz
i = 6
m = i
```

```
FOR i = 1 TO 6
IF ii = 1 THEN dede(i, 1) = ratel1(i, 1): dede(i, 2) = ratel1(i, 2)
IF ii = 2 THEN dede(i, 1) = ratel2(i, 1): dede(i, 2) = ratel2(i, 2)
NEXT i
FOR j = 1 TO 6
x(j) = dede(j, 1): y(j) = dede(j, 2)
NEXT j
```

```
#####
IF yp1 > 9.9E+29 THEN
y2(1) = 0: u(1) = 0
ELSE
y2(1) = -.05: u(1) = (3 / (x(2) - x(1))) * ((y(2) - y(1)) / (x(2) - x(1)) - yp1)
END IF
```

```
FOR i = 2 TO m - 1:n-1
```

```

sig = (x(i) - x(i - 1)) / (x(i + 1) - x(i - 1))
p = sig * y2(i - 1) + 2
y2(i) = (sig - 1) / p
u(i) = (6 * ((y(i+1)-y(i)) / (x(i+1)-x(i)) - (y(i)-y(i-1)) / (x(i)-x(i-1)))) / (x(i+1)-x(i-1)) - sig * u(i-1)) / p
NEXT i

```

```

IF ypn > 9.9E+29 THEN
qn = 0: un = 0
ELSE
qn = .5: un = (3 / (x(n) - x(n - 1))) * (ypn - (y(n) - y(n - 1)) / (x(n) - x(n - 1)))
END IF

```

```

y2(n) = (un - qn * u(n - 1)) / (qn * y2(n - 1) + 1)

```

```

FOR k = n - 1 TO 1 STEP -1
y2(k) = y2(k) * y2(k + 1) + u(k)
NEXT k

```

```

FOR i = 1 TO m 'n
xa(i) = x(i): ya(i) = y(i)
NEXT i

```

```

FOR x = 0 TO 1.001 STEP .001
x = (CLNG(x * 1000) / 1000)

```

```

klo = 1: khi = m 'n

```

```

100
IF (khi - klo) > 1 THEN
k = (khi + klo) / 2
IF xa(k) > x THEN
khi = k
ELSE
klo = k
END IF
GOTO 100
END IF

```

```

h = xa(khi) - xa(klo)
IF h = 0 THEN PRINT "Bad xa input": GOTO ende
a = (xa(khi) - x) / h
b = (x - xa(klo)) / h
y = a * ya(klo) + b * ya(khi) + ((a ^ 3 - a) * y2a(klo) + (b ^ 3 - b) * y2a(khi)) * (h ^ 2) / 6

```

```

j = CLNG(x * 1000)
x = (CLNG(x * 1000) / 1000)
IF ii = 1 THEN erg1(j, 1) = x: erg1(j, 2) = y
IF ii = 2 THEN erg2(j, 1) = x: erg2(j, 2) = y
NEXT x
NEXT ii

```

```

OPEN "d:\elyas\konzen.txt" FOR OUTPUT AS #10
PRINT #10, "ccu"; TAB(16); "gem."; TAB(38); "cag"; TAB(54); "gem."
FOR i = 0 TO 1000
PRINT #10, erg1(i, 1); TAB(16); erg1(i, 2); TAB(38); erg2(i, 1); TAB(54); erg2(i, 2)
NEXT i
CLOSE #10
ende:

```

```

#####
DIM el1(1000, 2), el2(1000, 2)

```

```

OPEN "d:\elyas\konzen.txt" FOR INPUT AS #11
INPUT #11, weiter$
FOR i = 0 TO 1000
INPUT #11, el1(i, 1), el1(i, 2), el2(i, 1), el2(1000 - i, 2)
IF el1(i, 1) = 1 THEN GOTO 1000
NEXT i
CLOSE #11
1000

```

```

CALL init("\")
CALL setgrid
CALL daten(el1(), "Element1")
CALL daten(el2(), "Element2")
CALL setline("Element1")
CALL setline("Element2")
CALL xlabel("Konzentration vom ersten Element")
CALL ylabel("Cu- und Ag-Ratio")
'CALL title(element$)
'CALL nokey
CALL plot

```

nochmals:

```

INPUT "Gemessener Wert vom ersten Element? ", gem1
INPUT "Gemessener Wert vom zweiten Element? ", gem2

```

```

konz1 = 0: konz2 = 0

```

```

FOR i = 0 TO 1000
IF gem1 = el1(i, 2) THEN konz1 = el1(i, 1): GOTO 300
IF gem1 > el1(i, 2) THEN konz1 = el1(i, 1)
IF gem1 < el1(i, 2) THEN GOTO 300
NEXT i
300

```

```

FOR i = 0 TO 1000
IF gem2 = el2(i, 2) THEN konz2 = 1 - el2(i, 1): GOTO 400
IF gem2 < el2(i, 2) THEN konz2 = 1 - el2(i, 1)
IF gem2 > el2(i, 2) THEN GOTO 400
NEXT i
400

```

```
PRINT "c1 = "; konz1, "c2 = "; konz2
PRINT
INPUT "Der n„chste gemessene Wert (j or n)? "; jorN$
IF UCASE$(jorN$) = "J" THEN GOTO nochmals
END
```


10. Literaturverzeichnis

- [1] H. Ebel: „Angewandte Röntgenphysik I“, Vorlesungsskriptum, 1995
- [2] H. Ebel, R. Svagera, M. F. Ebel and Wolfgang s. M. Werner: "Comparison of three universal curves for the escape probability of x-ray excited electrons-I.theory", *Advances in X-ray Analysis*, Vol.44, (2001) 380 - 385
- [3] H. Ebel, R. Svagera and M. F. Ebel: "Total electron yield of electrons emitted by x-ray excitation from layered $Al_xGa_{1-x}As$ -GaAs structures", *X-Ray spectrometry* 31 (2002) 437 - 440
- [4] Nikolaus Praxmarer: „Röntgenographische Untersuchungen an extrem dünnen Schichten mittels XPS, RFA, TEY und ESMA“, Diplomarbeit am Institut für Angewandte und Technische Physik der Technischen Universität Wien, 1997
- [5] Mohammad Ali Memar: „Werkstoffanalyse mittels röntgenstrahlinduzierter Elektronenemission“, Dissertation am Institut für Angewandte und Technische Physik der Technischen Universität Wien, 1997
- [6] Matthias Baron: „Bestimmung der charakteristischen Kenngrößen dünner AlGaAs-Schichten“, Diplomarbeit am Institut für Angewandte und Technische Physik der Technischen Universität Wien, 1997
- [7] Christian Hager: "Quantitative Analyse mittels Total Electron Yield (TEY). Computersimulationen und Nachweisgrenze", Diplomarbeit am Institut für Angewandte und Technische Physik der Technischen Universität Wien, 1996
- [8] Mario Lindner: „Bestimmung der Dicke dünner Schichten im Nanometerbereich mittels TEY“, Dissertation am Institut für Angewandte und Technische Physik der Technischen Universität Wien, 1997
- [9] Norbert Zagler: „Total-electron-yield Röntgenanalytik“, Diplomarbeit am Institut für Angewandte und Technische Physik der Technischen Universität Wien, 1994
- [10] Abdallah A. Shaltout: „The Fundamental Parameter Approach of Quantitative XRFA Investigation of Photoelectric Absorption Coefficients“, Dissertation am Institut für Angewandte und Technische Physik der Technischen Universität Wien, 2003
- [11] J. H. Scofield, Theoretical Photoionization Cross Sections from 1 to 1500 keV, Lawrence Livermore Laboratory, UCRL-51326, 1973
- [12] W. T. Elam, B. D. Ravel and J. R. Sieber, *Rad. Phys. Chem.*, 63, 121, 2002
- [13] H. Ebel, R. Svagera, M. F. Ebel, A. Shaltout, H. Hubbell, *X-Ray Spectrom.* 2003
- [14] Gernot Eder: „Atomphysik“, 2. Auflage, Wissenschaftsverlag Mannheim/Wien/Zürich 1989

- [15] Bernhard Bröcker: „dtv-Atlas zur Atomphysik Tafeln und Texte“, 5. Auflage, Deutsche Taschenbuch Verlag 1993
- [16] Klaus Bethge, Gernot Gruber: „Physik der Atome und Moleküle“, VCH Verlagsgesellschaft 1990
- [17] Günter Zschornack: „Atomdaten für die Röntgenspektroanalyse“, Springer-Verlag 1989
- [18] J. H. Hubbell: „J. Phys. Chem. Ref. Data“, Vol. 23, No. 2, 1994
- [19] <http://www.ifp.tuwien.ac.at/forschung/horst.ebel>