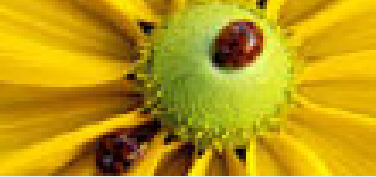


Röntgenabsorption

Valeriano Ferreras Paz

Universität Stuttgart



Übersicht

● Inhalt

[Röntgenstrahlung](#)

[Röntgenabsorption](#)

[Röntgenabsorptionsspektroskopie](#)

[Methoden \(XANES/EXAFS\)](#)

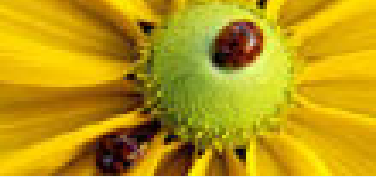
[Experimentelle Aspekte](#)

[Beispielspektren](#)

[Zusammenfassung](#)

[Literatur](#)

Übersicht



Inhalt

Übersicht

● Inhalt

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

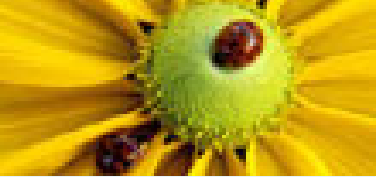
Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur

- Grundlagen der Röntgenstrahlung
 - ◆ Erzeugung
 - ◆ Spektrum
- Röntgenabsorption
 - ◆ Absorption
 - ◆ Auger-Effekt
- Grundlagen der Röntgenabsorptionsspektroskopie
- Methoden
 - ◆ XANES/NEXAFS
 - ◆ EXAFS
- Experimentelle Aspekte
 - ◆ Quellen
 - ◆ Detektion
- Beispielspektren
- Zusammenfassung



Röntgenstrahlung

Übersicht

Röntgenstrahlung

- Röntgenstrahlung
- Röntgenröhre
- Röntgenspektrum
- Bremsspektrum
- Charakteristische Strahlung
- Charakteristische Strahlung (2)
- Charakteristische Strahlung (3)

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

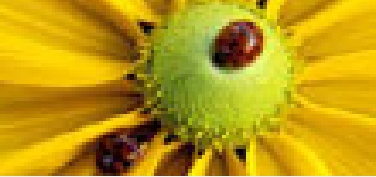
Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur



Röntgenstrahlung

- Erzeugung von Röntgenstrahlung (klassisch):
 - ◆ in einer Röntgenröhre
- Für Röntgenabsorptionsspektroskopie:
 - ◆ Mittels Synchrotronstrahlung

Übersicht

Röntgenstrahlung

● Röntgenstrahlung

- Röntgenröhre
- Röntgenspektrum
- Bremsspektrum
- Charakteristische Strahlung
- Charakteristische Strahlung (2)
- Charakteristische Strahlung (3)

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur

Röntgenröhre

Glühkathoden-Röntgenröhre

- Hochevakuiertes Glaskolben
(Vakuum: $< 10^{-5}$ mbar um Stöße mit Luftmolekülen zu minimieren)
- Glühkathode (Erzeugung freier Elektronen)
- Beschleunigungsspannung ca.
 $U_0 = 1\text{kV} \dots 150\text{kV}$
- Abbremsung in Anodenmaterial (Umsetzung ca. 95% Wärme, 5% Röntgenstrahlung)
- Wellenlängenbereich: $\lambda = 0.1 \dots 10\text{\AA}$
- Frequenzbereich: $3 \cdot 10^{17} - 3 \cdot 10^{19}\text{Hz}$

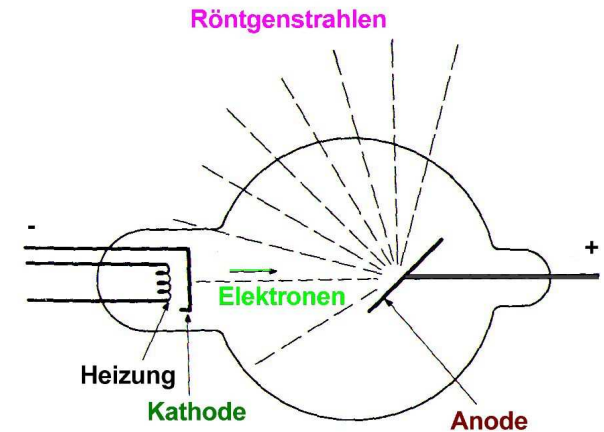


Abbildung 1: Aufbau Röntgenröhre [4]

Röntgenspektrum

Beschuß der Anode mit Elektronen
(Beschleunigungsspannung U_0)

Spektrale Zerlegung des emittierten
Röntgenlichtes liefert:

- kontinuierliches Spektrum, sogenanntes
Bremspektrum

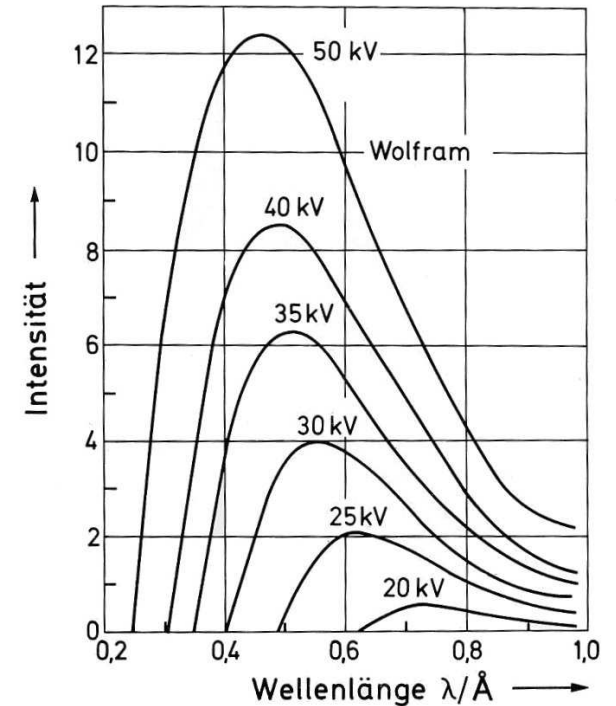


Abbildung 2: Bremspektrum [7]

Röntgenspektrum

Beschuß der Anode mit Elektronen
(Beschleunigungsspannung U_0)

Spektrale Zerlegung des emittierten
Röntgenlichtes liefert:

- kontinuierliches Spektrum, sogenanntes Bremspektrum
- unter gewissen umständen Linienspektrum, sogenanntes charakteristisches Spektrum

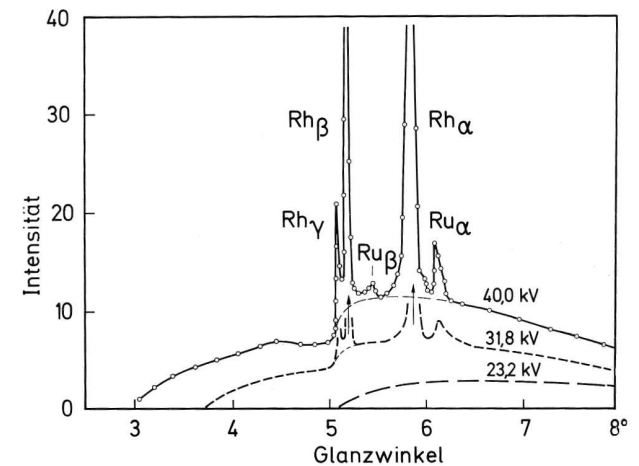


Abbildung 2: charakteristische Strahlung [7]

Bremsspektrum

Entstehung des Bremsspektrums:

- Beschleunigte Elektronen mit kinetischer Energie $E_0 = e \cdot U_0$
- Eintritt in Einflußbereich der Anodenatome
- Abbremsung im Feld der Atome (Anodenmaterial)
- beschleunigte Ladung strahlt (klassische Elektrodynamik)
- Aussenden eines Lichtquants: $h\nu = E_0 - E$
- Grenzfrequenz $h\nu_{max} = E_0 = e \cdot U_0$
- Anfangs- und Endzustände sind nicht gequantelt
→ kontinuierliches Spektrum

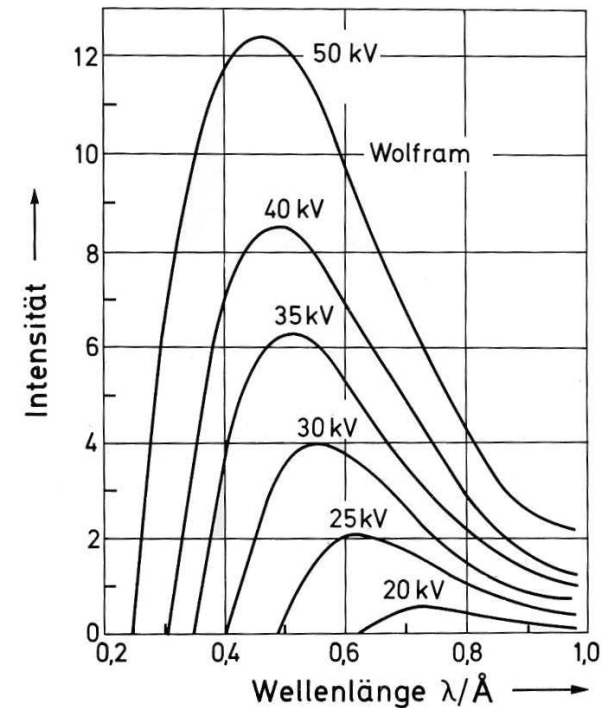
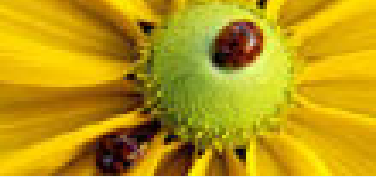


Abbildung 3: Bremsspektrum [7]



Charakteristische Strahlung

- Bei hinreichend hoher Elektronenenergie:
 - überlagertes Linienspektrum sichtbar (charakteristisch für das Anodenmaterial)
- Erklärung:
 - ◆ schnelle Elektronen können Elektronen in inneren Schalen "ausschlagen"
 - ◆ Elektronen aus äußeren Schalen füllen das entstandene "Loch"
 - ◆ Bindungsenergie wird als charakteristisches Lichtquant emittiert → Linienspektrum

Übersicht

Röntgenstrahlung

- Röntgenstrahlung
- Röntgenröhre
- Röntgenspektrum
- Bremsspektrum
- Charakteristische Strahlung
- Charakteristische Strahlung (2)
- Charakteristische Strahlung (3)

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur

Charakteristische Strahlung

Übersicht

Röntgenstrahlung

- Röntgenstrahlung
- Röntgenröhre
- Röntgenspektrum
- Bremsspektrum
- Charakteristische Strahlung
- Charakteristische Strahlung (2)
- Charakteristische Strahlung (3)

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur

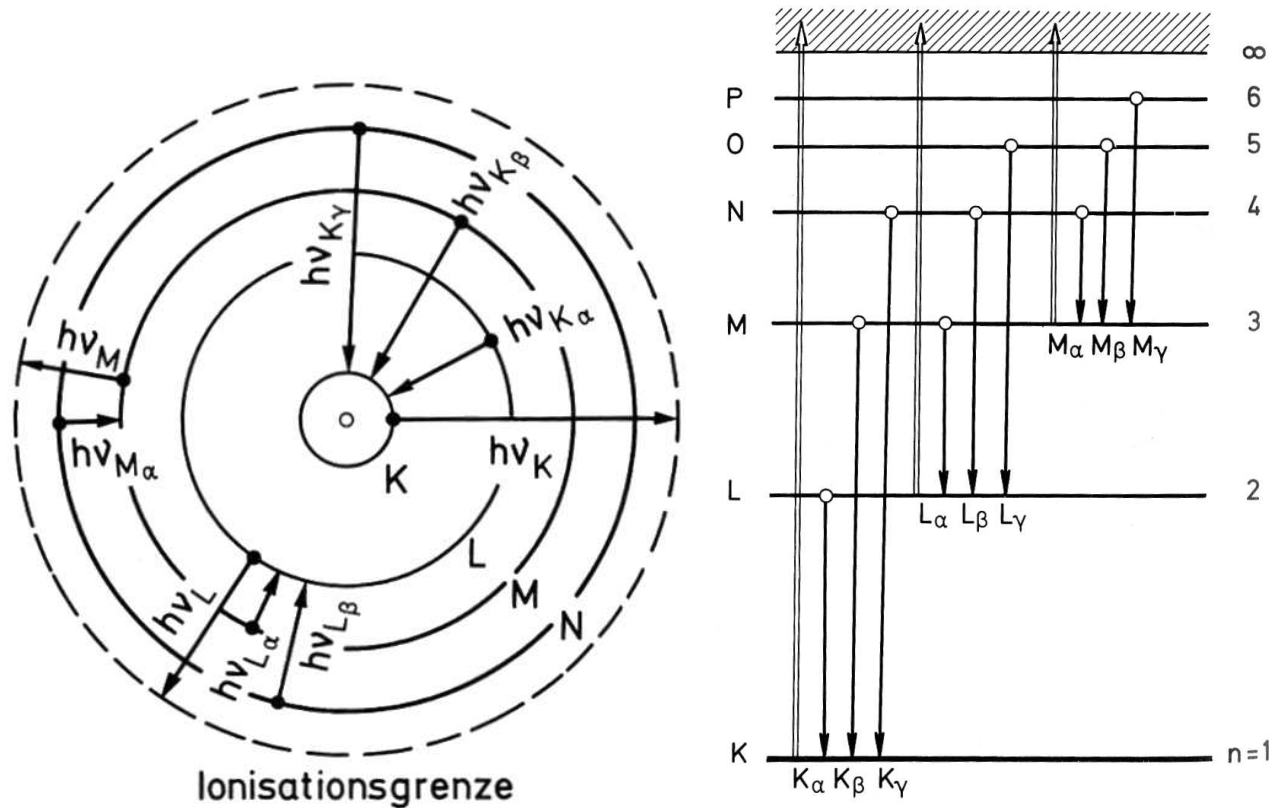
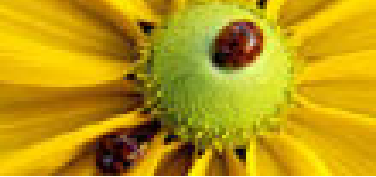


Abbildung 4: Erklärung der K,L,M-Serien [7]

- Zusammenfassung zu Serien K,L,M,N, ..
- Linien innerhalb der Serien mit griechischen Indizes benannt



Charakteristische Strahlung

Noch zu Beachten:

- Feinstrukturaufspaltung (Beachten von Bahndrehimpuls und Spin der Elektronen)
- Aufspaltung der Schalen (Nummeriert mit Römischen Zahlen)

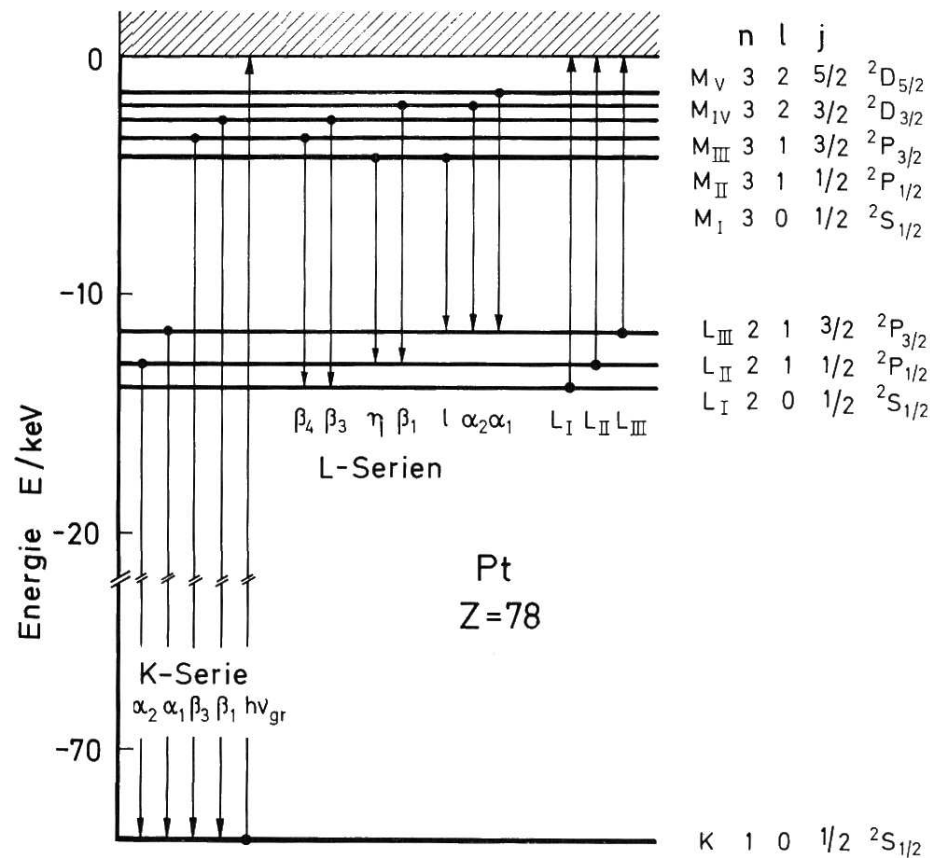
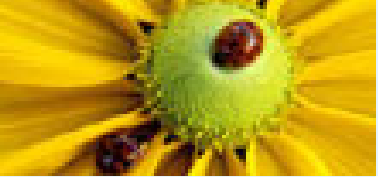


Abbildung 5: Feinstruktur der Röntgenspektren [7]



Röntgenabsorption

[Übersicht](#)

[Röntgenstrahlung](#)

[Röntgenabsorption](#)

- Absorption
- Absorptionsspektrum
- Erklärung
- Auger-Effekt
- Auger-Elektron

[Röntgenabsorptionsspektroskopie](#)

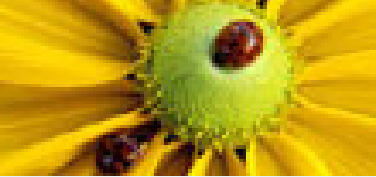
[Methoden \(XANES/EXAFS\)](#)

[Experimentelle Aspekte](#)

[Beispielspektren](#)

[Zusammenfassung](#)

[Literatur](#)



Absorption

Röntgenstrahlung = elektromagnetische Strahlung
→ Absorption und Streuung

■ Absorption:

◆ $I = I_0 \cdot e^{-\mu x}$ (Lambert-Beer'sches Gesetz)

◆ Halbwertsdicke: $d = \mu^{-1} \ln(2)$

z.B. bei 100kV: $d_{AL} = 1,6 \text{ cm}$; $d_{Pb} = 1,1 \cdot 10^{-2} \text{ cm}$

◆ μ : Absorptionskoeffizient

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

● Absorption

● Absorptionsspektrum

● Erklärung

● Auger-Effekt

● Auger-Elektron

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur



Absorptionsspektrum

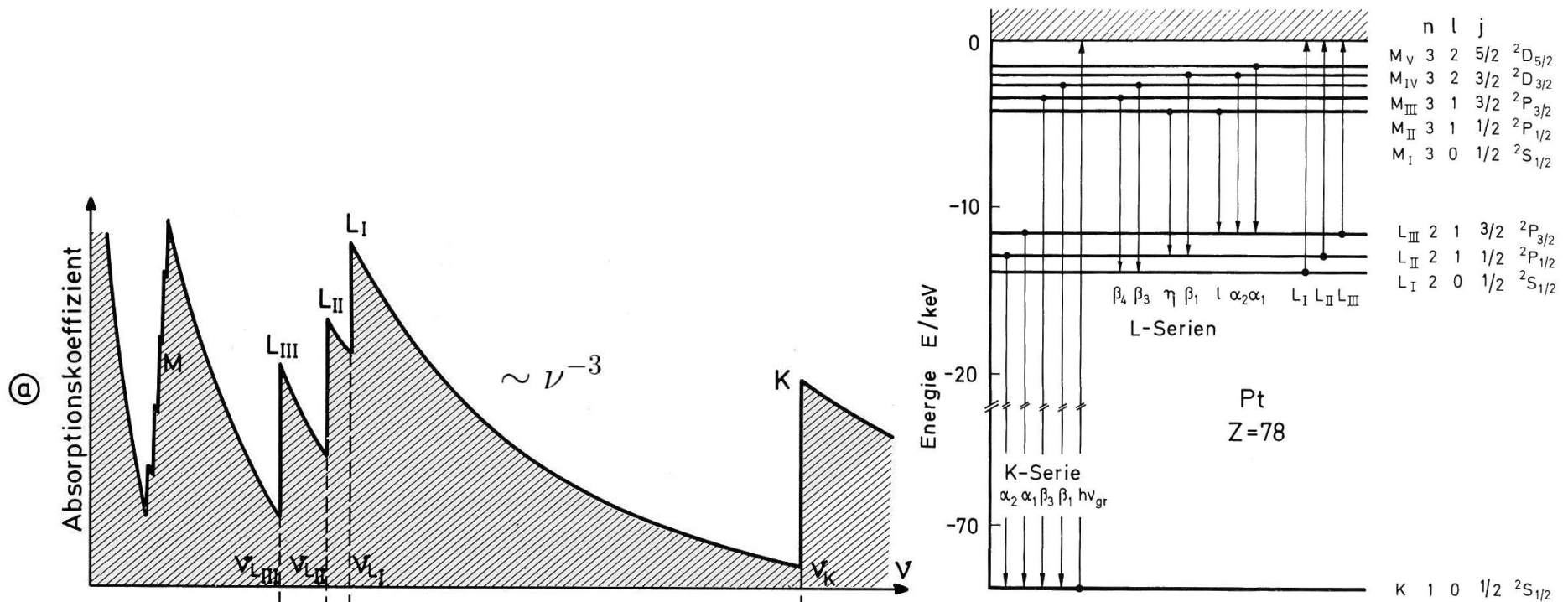
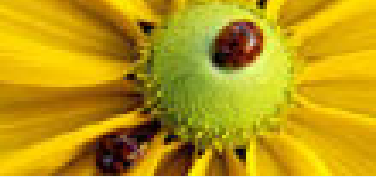


Abbildung 6: Röntgen-Absorptionsspektrum [7]

- Auffälligkeiten des Röntgenabsorptionsspektrums:
 - ◆ starkes Abnehmen des Absorptionskoeffizienten mit zunehmender Quantenenergie
 - ◆ Auftreten von Absorptionskanten, entsprechend den Seriengrenzen K, L, M, ... (inklusive Unterschalen z.B. L_I, L_{II}, L_{III})



Erklärung

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

- Absorption
- Absorptionsspektrum
- Erklärung
- Auger-Effekt
- Auger-Elektron

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

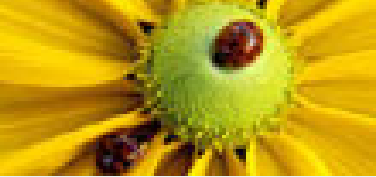
Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur

■ Erklärung:

- ◆ Zur Absorption von Röntgenlicht muß ein Elektron aus einer inneren Schale in einen höheren Zustand gehoben werden
- ◆ äußere Schalen sind bereits besetzt → Freie Zustände erst über der Seriegrenze kontinuierlich verfügbar → oft findet Ionisierung des Atoms statt
- ◆ Absorptionskanten treten bei Anregung aus innerer Schale ins Grenzkontinuum auf
- ◆ ν^{-3} -Abhängigkeit:
 - Berechnung aus Absorptionswahrscheinlichkeit (Absorptionsquerschnitt) eines Photons für ein gegebenes Elektron



Auger-Effekt

- "Löcher" in inneren Schalen nicht zwingend durch Relaxation äußerer Elektronen unter Emission von Röntgenstrahlung gefüllt
 - ◆ Strahlungsfreier Prozess: Auger-Effekt möglich
 - Gleichzeitiges Füllen der Lücke und Emission eines Elektrons!

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

- Absorption
- Absorptionsspektrum
- Erklärung
- **Auger-Effekt**
- Auger-Elektron

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur

Auger-Elektron

Beispielsweise:

- K-Schale wird ionisiert
- L-Elektron fällt in K-Schale
- freigewordene Energie wird zur Emission eines weiteren Elektrons der L-Schale verwendet
→ verläßt Atom
- Zwei "Löcher" in der L-Schale können von Elektronen äußerer Schalen gefüllt werden
→ Emission weiterer Auger-Elektronen aus M-Schale möglich, usw.

Röntgen-Emission

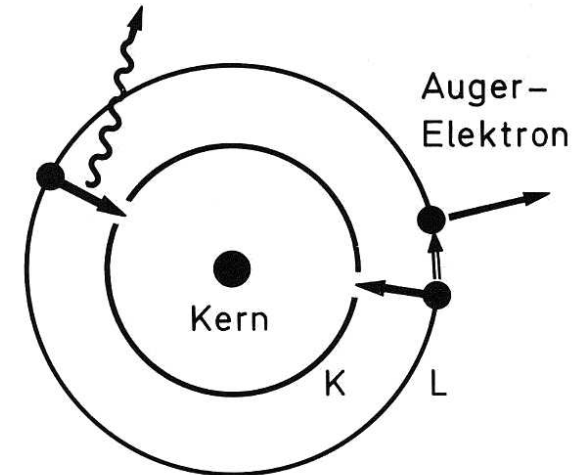
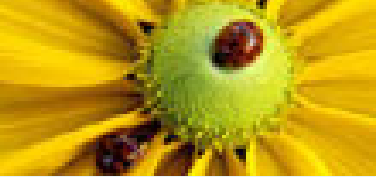


Abbildung 7: Auger-Elektron [7]



[Übersicht](#)

[Röntgenstrahlung](#)

[Röntgenabsorption](#)

[Röntgenabsorptionsspektroskopie](#)

- Absorptionskoeffizient
- Erklärung der Feinstruktur
- Streuung des Photoelektrons
- Streuung des Photoelektrons (2)

[Methoden \(XANES/EXAFS\)](#)

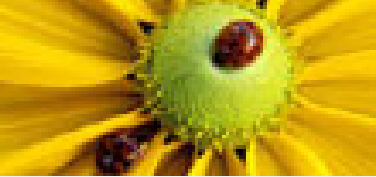
[Experimentelle Aspekte](#)

[Beispielspektren](#)

[Zusammenfassung](#)

[Literatur](#)

Röntgenabsorptionsspektroskopie



Absorptionskoeffizient

Nähere Betrachtung der Absorptionskanten:

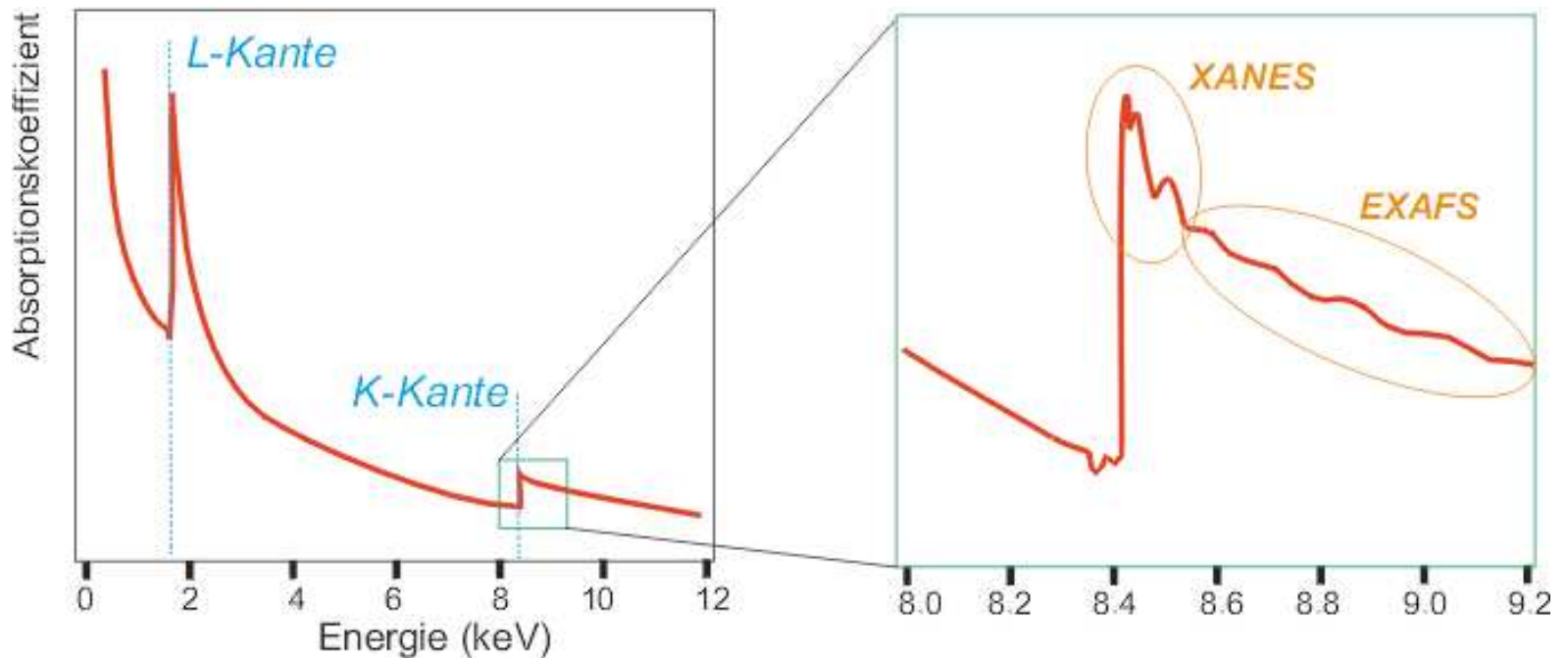


Abbildung 8: Feinstruktur der Absorptionskanten [12]

- große Oszillationen in Kantennähe
- periodische Oszillation des Absorptionskoeffizienten im höherenergetischen Bereich

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

● Absorptionskoeffizient

● Erklärung der Feinstruktur

● Streuung des Photoelektrons

● Streuung des Photoelektrons
(2)

Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur

Erklärung der Feinstruktur

- Photon der Energie $E = h\nu$ absorbiert
- Anregung eines Rumpfelektrons in unbesetzte Zustände oberhalb der Fermienergie (oder Ionisierung)
- Bei Emission eines Photoelektrons:
 - ◆ Energie: $E_{kin} = h\nu_{ph} = E - E_0$
 - ◆ E_0 : Schwellenenergie eines speziellen Rumpfniveaus
 - ◆ DeBroglie-Wellenlänge: $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e(E - E_0)}}$
- Füllen der entstandenen Lücke:
 - ◆ Emission eines Fluoreszenzelektrons
 - ◆ strahlungslos durch Emission eines Auger-Elektrons

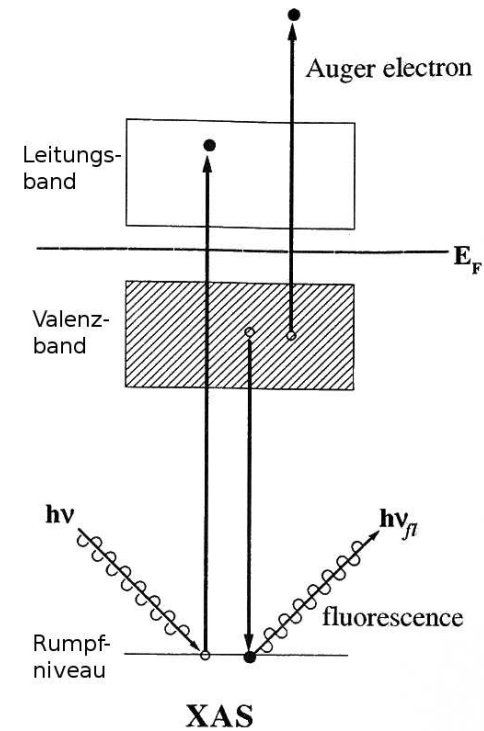
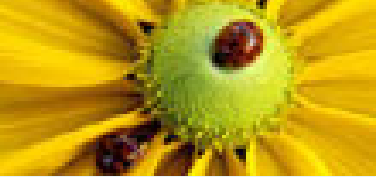


Abbildung 9: Schematische Darstellung der Elektronenanregung [9]

Streuung des Photoelektrons



Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

● Absorptionskoeffizient

● Erklärung der Feinstruktur

● **Streuung des Photoelektrons**

● Streuung des Photoelektrons
(2)

Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur

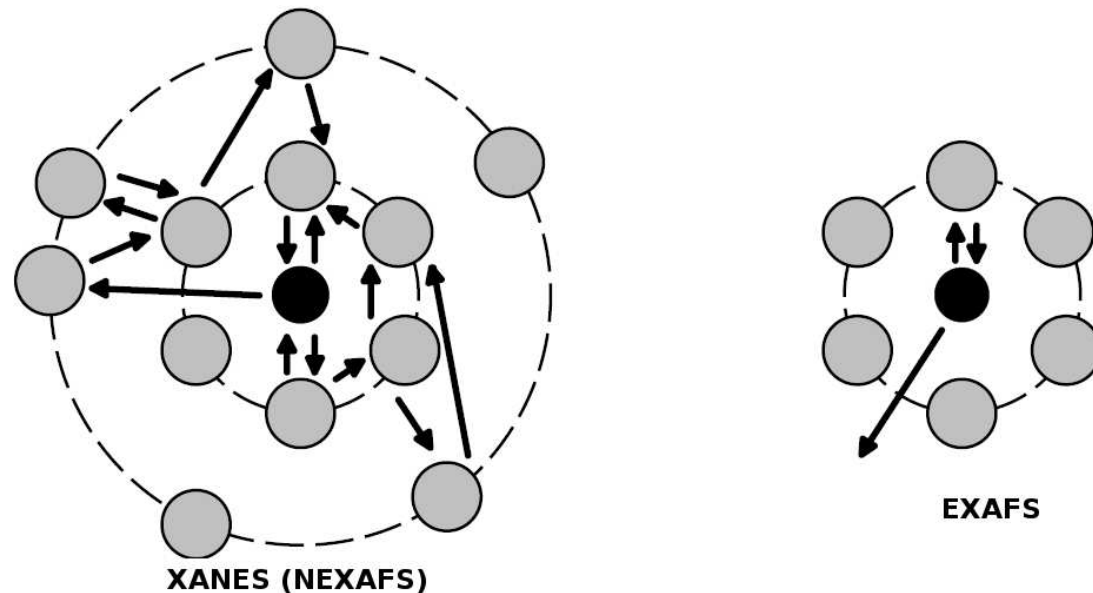


Abbildung 10: Streuung des Photoelektrons [13]

- Streuung abhängig von der kinetischen Energie des Elektrons
 - ◆ geringe kinetische Energie (große Wellenlänge)
 - hauptsächlich Mehrfachstreuung
 - ◆ hohe kinetische Energie (kleine Wellenlänge)
 - Einfachstreuung zwischen Atompaaaren vorherrschend

Streuung des Photoelektrons

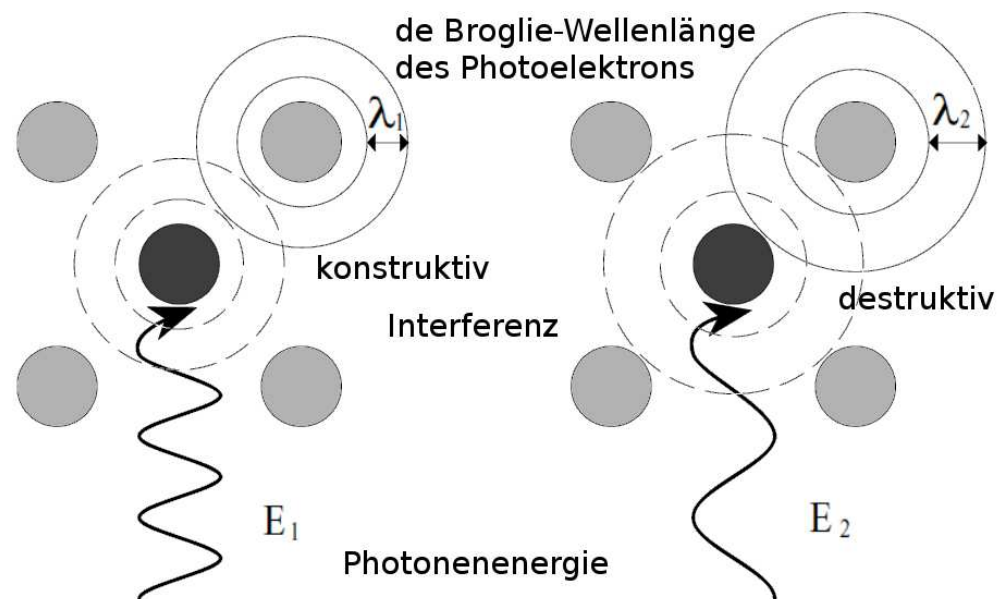


Abbildung 11: Interferenz der gestreuten Photoelektronenmateriewellen [13]

- Einstrahlung mit Energien E_1, E_2 ($E_1 > E_2$)
- Wellenlängen: $\lambda_1 < \lambda_2$
- Abstand zwischen Atomen konstant
- Konstruktive bzw. destruktive Interferenz möglich
- Beeinflussung des Absorptionskoeffizienten
- Oszillationen in den aufgenommenen Kurven

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

● Absorptionskoeffizient

● Erklärung der Feinstruktur

● Streuung des Photoelektrons

● Streuung des Photoelektrons (2)

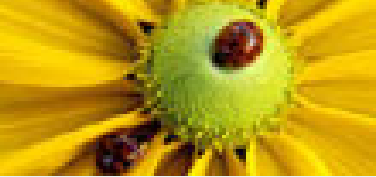
Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur



[Übersicht](#)

[Röntgenstrahlung](#)

[Röntgenabsorption](#)

[Röntgenabsorptionsspektroskopie](#)

Methoden (XANES/EXAFS)

- Übersicht
- XANES / NEXAFS
- Auswahlregeln und Polarisation
- EXAFS

[Experimentelle Aspekte](#)

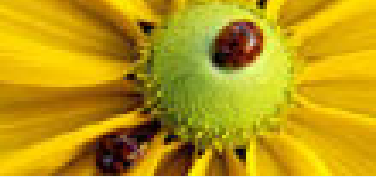
[Beispielspektren](#)

[Zusammenfassung](#)

[Literatur](#)

Methoden (XANES/EXAFS)

Übersicht



- Übersicht
- Röntgenstrahlung
- Röntgenabsorption
- Röntgenabsorptionsspektroskopie
- Methoden (XANES/EXAFS)
 - Übersicht
 - XANES / NEXAFS
 - Auswahlregeln und Polarisation
 - EXAFS
- Experimentelle Aspekte
- Beispielspektren
- Zusammenfassung
- Literatur

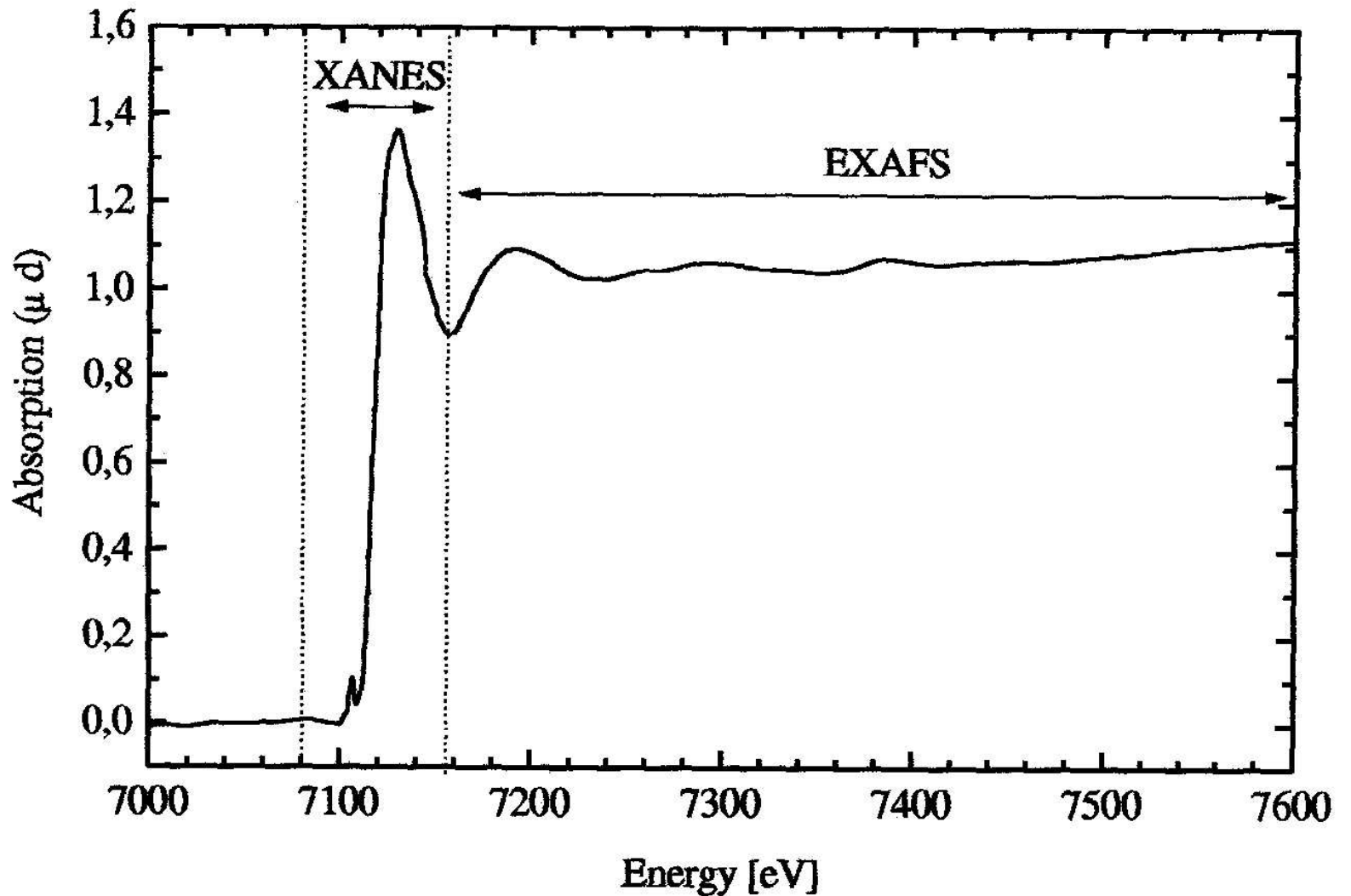
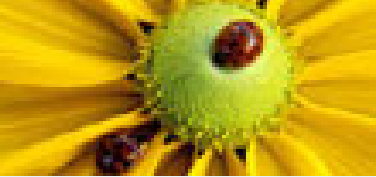


Abbildung 12: Übersicht (Eisen K-Kante) [5]



XANES / NEXAFS

XANES (X-Ray Absorption Near Edge Structure)

auch:

NEXAFS (Near Edge X-Ray Absorption Fine Structure)

- Energiebereich bis einige 10eV oberhalb der Kante
- Anregung von Elektronen innerer Schalen in unbesetzte Zustände oberhalb der Fermikante (beachte Auswahlregeln)
- Wellenlänge der Photoelektronen größer als Abstand zu Nachbaratomen
- starke Streuung an umgebenden Atomen (Mehrfachstreuung)
- Interferenz der ausgehenden und der gestreuten Elektronenwelle am Ort des Absorberatoms
- Wellenfunktion stark durch Vielfachstreuungen bestimmt
- Absorptionskoeffizient in diesem Bereich enthält Informationen über die unbesetzte lokale Zustandsdichte im absorbierenden Atom
- XANES ermöglicht somit Einsicht in elektronische Struktur

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

● Übersicht

● XANES / NEXAFS

● Auswahlregeln und

Polarisation

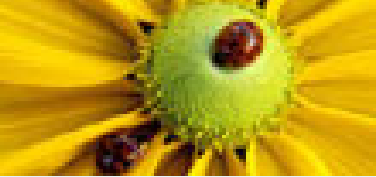
● EXAFS

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur



Auswahlregeln und Polarisation

- Absorptionkoeffizient μ u.a. bestimmt durch:
 - ◆ Übergangsmatrixelemente (Anfangszustand zu Endzustand)
 - ◆ Zustandsdichte des Endzustandes
- Übergangsmatrixelemente liefern Dipolauswahlregeln:
 - ◆ $\Delta l = \pm 1$ (z.B. $O1s$ zu $O2p$)
 - ◆ $\Delta m = 0, \pm 1$
- Einstrahlung mit polarisierter Strahlung:
 - ◆ Matrixelemente abhängig von Polarisationsrichtung des \vec{E} -Feldes
 - ◆ z.B. Übergang von $O1s$ Zustand durch ein parallel zur x-Richtung polarisiertes Feld nur in $O2p_x$ möglich
 - ◆ \rightarrow durch Ausrichtung der Probe gezielte Untersuchung von Zuständen möglich

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

● Übersicht

● XANES / NEXAFS

● Auswahlregeln und
Polarisation

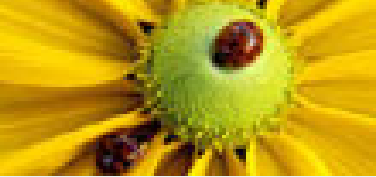
● EXAFS

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur



EXAFS

EXAFS (Extended X-Ray Absorption Fine Structure)

- Energiebereich von ca. 40eV bis 1000eV oberhalb der Kante
- kinetische Energie des Elektrons groß genug, dass Einfachstreuung überwiegt
- Wellenlänge kleiner als Abstand zu Nachbaratomen
- Interferenzeffekt zwischen auslaufender und einfach gestreuter Elektronenwelle
- Modulation des Absorptionskoeffizienten μ
- im Vergleich zu NEXAFS-Struktur kleine Amplitude (→ gutes SNR über weiten Energiebereich nötig)
- Nur Wechselwirkung zwischen Atompaaren wiedergegeben
- Periodizität der Oszillationen lässt direkt auf Bindungslängen zu Nachbaratomen rückschließen
- EXAFS ermöglicht Einblick in strukturelle Umgebung des Atoms (Symmetrien, Koordinationszahlen, etc.)
- Auswertung einfacher als bei NEXAFS, da direkt die Umgebung des Atoms wiedergespiegelt wird

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

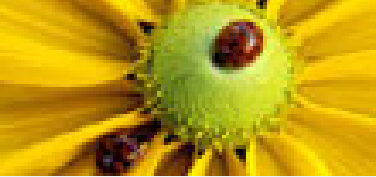
- Übersicht
- XANES / NEXAFS
- Auswahlregeln und Polarisierung
- EXAFS

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur



Experimentelle Aspekte

[Übersicht](#)

[Röntgenstrahlung](#)

[Röntgenabsorption](#)

[Röntgenabsorptionsspektroskopie](#)

[Methoden \(XANES/EXAFS\)](#)

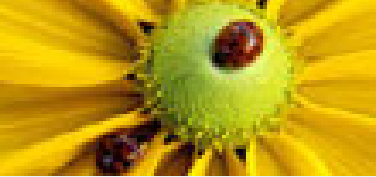
Experimentelle Aspekte

- Quellen
- Synchrotron
- Synchrotron (2)
- Strahlrohre und Monochromator
- Detektionsmethoden
- Detektionsmethoden (2)
- Detektionsmethoden (3)

[Beispielspektren](#)

[Zusammenfassung](#)

[Literatur](#)



Quellen

- Quellen für XANES und EXAFS
 - ◆ Intensität die mit Röntgenröhren erreichbar ist zu gering
→ Messungen über mehrere Tage
 - ◆ Synchrotronstrahlungsquellen:
→ Messungen in einigen Minuten
- Anforderungen
 - ◆ monochromatische Strahlung
 - ◆ Strahlung über weiten Wellenlängenbereich variierbar
- Somit: Röntgenquelle mit kontinuierlichem Spektrum und nachgeschaltetem Monochromator

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

● Quellen

- Synchrotron
- Synchrotron (2)
- Strahlrohre und Monochromator
- Detektionsmethoden
- Detektionsmethoden (2)
- Detektionsmethoden (3)

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur

Synchrotron

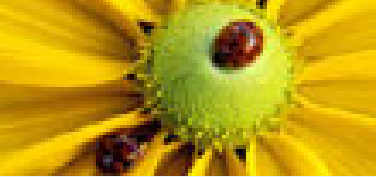


Abbildung 13: Synchrotron des ESRF in Grenoble [2]

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

● Quellen

● **Synchrotron**

● Synchrotron (2)

● Strahlrohre und
Monochromator

● Detektionsmethoden

● Detektionsmethoden (2)

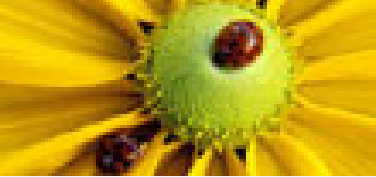
● Detektionsmethoden (3)

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur

Synchrotron



Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

- Quellen
- Synchrotron
- **Synchrotron (2)**
- Strahlrohre und Monochromator
- Detektionsmethoden
- Detektionsmethoden (2)
- Detektionsmethoden (3)

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur

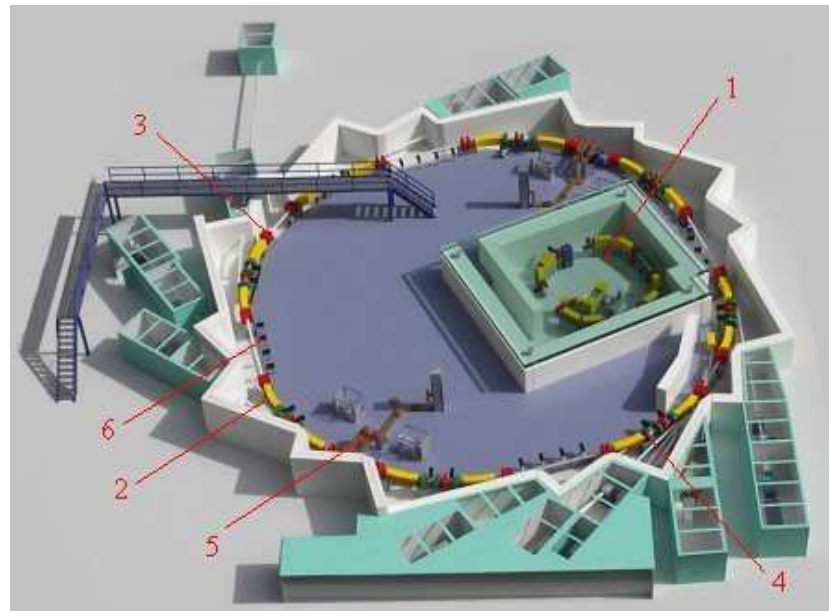
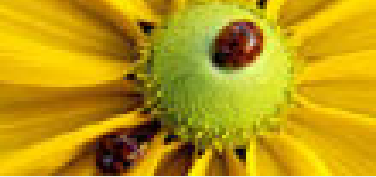


Abbildung 14: Synchrotron (ANKA) [1]

1. Injektor
2. Ablenkmagnete (Quellen der Synchrotronstrahlung)
3. Quadropolmagnete zur Korrektur der Bahnen
4. Sextupolmagnete zur Korrektur der Bahnen
5. Beschleunigungsfelder (Ausgleich der Energieverluste)
6. Hochvakuumsystem



Strahlrohre und Monochromator

- Fokussierung der Strahlung mittels Spiegeln
- mit Hilfe von optischen Gittern (hoher Liniendichte)
Separation der Wellenlängen
(→ Monochromator)

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

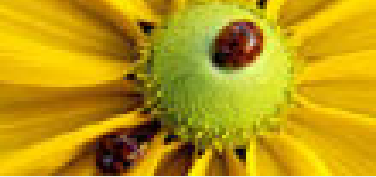
Experimentelle Aspekte

- Quellen
- Synchrotron
- Synchrotron (2)
- **Strahlrohre und Monochromator**
- Detektionsmethoden
- Detektionsmethoden (2)
- Detektionsmethoden (3)

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur



Detektionsmethoden

■ Transmissionsmessung

- ◆ direkte Nachweismethode (Messung des Absorptionskoeffizienten)

- ◆
$$I(E) = I_0(E)e^{-\mu_T(E)d} \rightarrow \mu_T(E) = \frac{1}{d} \ln \frac{I_0(E)}{I(E)}$$

- ◆ Probleme:

- Aufnahme des kompletten Untergrundsignales
 - geringe Dicke erforderlich (Absorptionslänge)
 - Schwierigkeiten zur Herstellung solch dünner Schichten ($\approx 0,1 \mu\text{m}$)

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

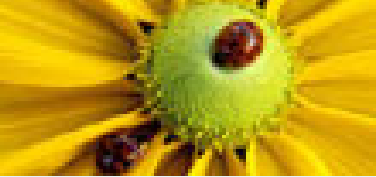
Experimentelle Aspekte

- Quellen
- Synchrotron
- Synchrotron (2)
- Strahlrohre und Monochromator
- **Detektionsmethoden**
- Detektionsmethoden (2)
- Detektionsmethoden (3)

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur



Detektionsmethoden

- Total electron yield (TEY)
 - ◆ indirekte Nachweismethode
 - ◆ Auger-Elektronen führen meist inelastische Stöße mit anderen Elektronen durch
 - Sekundärelektronenlawine
 - ◆ Zahl der Auger-Elektronen ist proportional zum Absorptionskoeffizienten
 - ◆ Nachweis mittels Sekundärelektronenvervielfacher (Channeltron)
 - ◆ Vorteile:
 - experimentell einfacher und preiswerter (als Transmissionsmessung)
 - ◆ Nachteile:
 - Probe muss ausreichend leitfähig sein
 - Oberflächensensitiv aufgrund geringer Informationstiefe (Übergangsmetalloxide $\approx 4\text{nm}$)
 - Oberflächenpräparation im Ultrahochvakuum von Vorteil

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

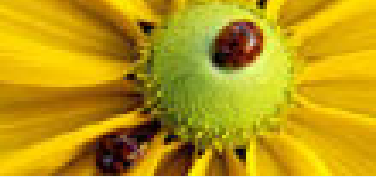
Experimentelle Aspekte

- Quellen
- Synchrotron
- Synchrotron (2)
- Strahlrohre und Monochromator
- Detektionsmethoden
- Detektionsmethoden (2)
- Detektionsmethoden (3)

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur



Detektionsmethoden

■ Fluoreszenzdetektion

- ◆ indirekte Nachweismethode
- ◆ Füllen der Lücke im Rumpfniveau unter Emission eines Fluoreszenzphotons
- ◆ Zahl der Fluoreszenzphotonen ist proportional zu Absorptionskoeffizient
- ◆ Nachweis mittels Dioden
- ◆ Vorteile:
 - geringe Anforderungen an Oberflächenpräparation
- ◆ Nachteile:
 - Selbstabsorptionseffekte (Absorption durch Probe)
→ Verfälschung der Spektren

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

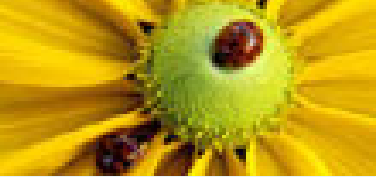
Experimentelle Aspekte

- Quellen
- Synchrotron
- Synchrotron (2)
- Strahlrohre und Monochromator
- Detektionsmethoden
- Detektionsmethoden (2)
- Detektionsmethoden (3)

Beispielspektren

Zusammenfassung

Literatur



[Übersicht](#)

[Röntgenstrahlung](#)

[Röntgenabsorption](#)

[Röntgenabsorptionsspektroskopie](#)

[Methoden \(XANES/EXAFS\)](#)

[Experimentelle Aspekte](#)

[Beispielspektren](#)

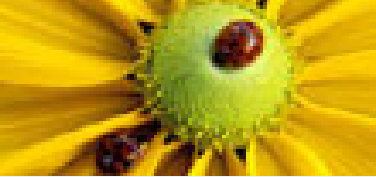
- Beispiel für NEXAFS
- NEXAFS Spektren
- Anwendung von NEXAFS
- Auswertung am Beispiel von EXAFS
- Auswertung am Beispiel von EXAFS (2)

[Zusammenfassung](#)

[Literatur](#)

Beispielspektren

Beispiel für NEXAFS



Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

● Beispiel für NEXAFS

● NEXAFS Spektren

● Anwendung von NEXAFS

● Auswertung am Beispiel von EXAFS

● Auswertung am Beispiel von EXAFS (2)

Zusammenfassung

Literatur

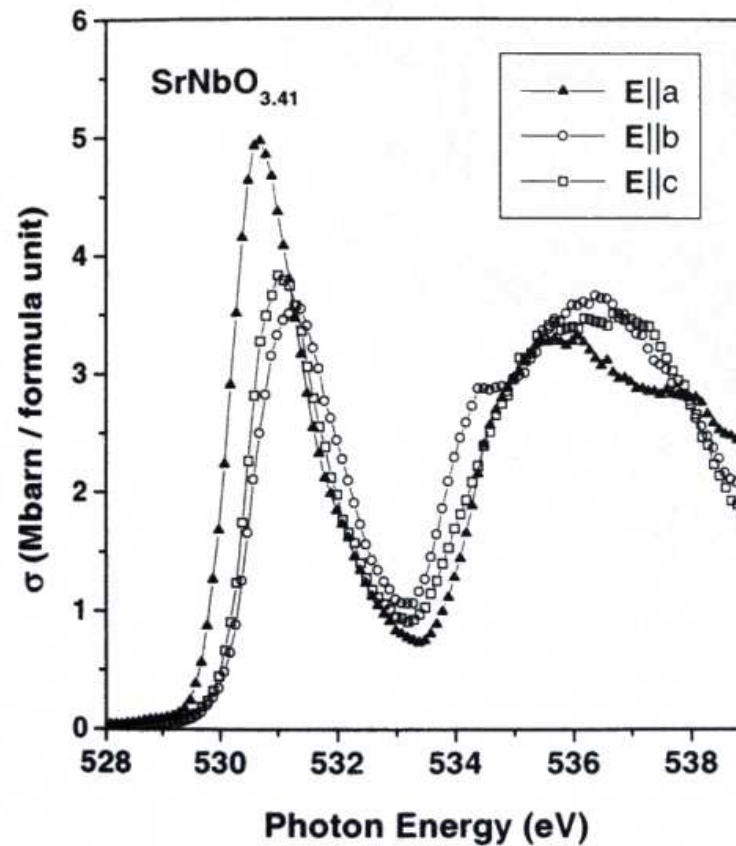


Abbildung 15: $O1s$ -NEXAFS Spektren für $\text{SrNbO}_{3.41}$ [9]

NEXAFS Spektren

Beispielsweise:

- Kristallachsen a,b,c
- Drei Messung mit Polarisationen parallel zu a,b,c
- Anregung von O1s in unbesetzte O2p Orbitale
- Selektion durch Polarisation ($O2p_x$, $O2p_y$, $O2p_z$)
- unbesetzte Zustandsdichte ist proportional zu Höhe des Peaks
- Position in Energierichtung gibt Aussage über die energetische Lage der Zustände (hier: Leichte Verschiebung des Peaks für $E||a$ zu geringeren Energien \rightarrow Anisotropie der elektronischen Struktur)

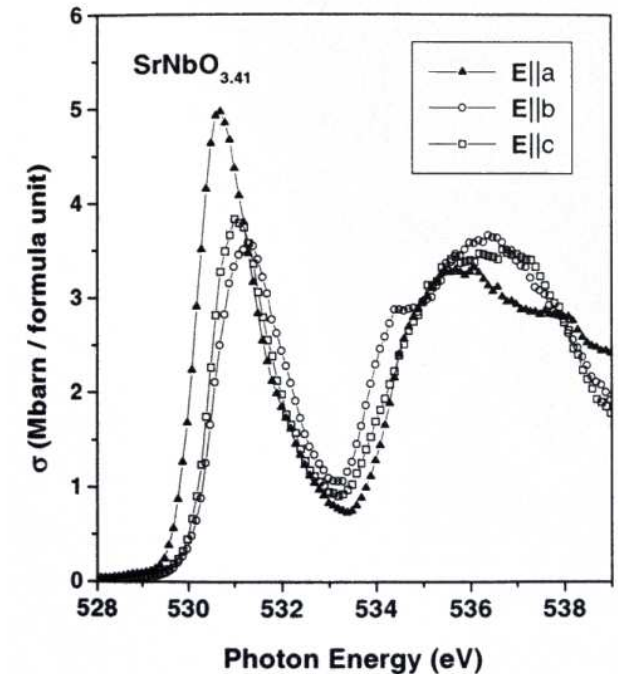
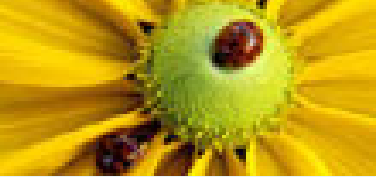


Abbildung 16: O1s-NEXAFS Spektren [9]



Anwendung von NEXAFS

Zum Beispiel:

Untersuchung von Hochtemperatursupraleitersystemen

- Untersuchung der für die Supraleitung verantwortlichen elektronischen Zustände
- Einfluss von Dotierung und Konzentration bestimmen

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

● Beispiel für NEXAFS

● NEXAFS Spektren

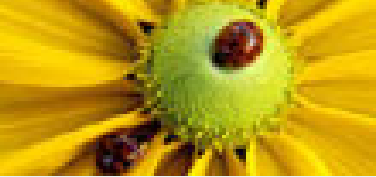
● Anwendung von NEXAFS

● Auswertung am Beispiel von EXAFS

● Auswertung am Beispiel von EXAFS (2)

Zusammenfassung

Literatur



Auswertung am Beispiel von EXAFS

■ Wellenzahl für Photoelektron

→ Dispersionsrelation: $k = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2} (E - E_0)}$

◆ eigentlich wichtige Größe:

- $\chi(k) = \frac{\mu(k) - \mu_0(k)}{\mu_0(k)}$

- $\mu_0(k)$: Beitrag des freien Atoms (keine Rückstreuung an Nachbaratomen)

- → $\chi(k)$ beinhaltet nur noch Einfluß von Nachbaratomen

- ◆ Fouriertransformation von $\chi(k)$ liefert direkt die radiale Verteilungsfunktion für das Absorberatom

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

● Beispiel für NEXAFS

● NEXAFS Spektren

● Anwendung von NEXAFS

● Auswertung am Beispiel von EXAFS

● Auswertung am Beispiel von EXAFS (2)

Zusammenfassung

Literatur

Auswertung am Beispiel von EXAFS

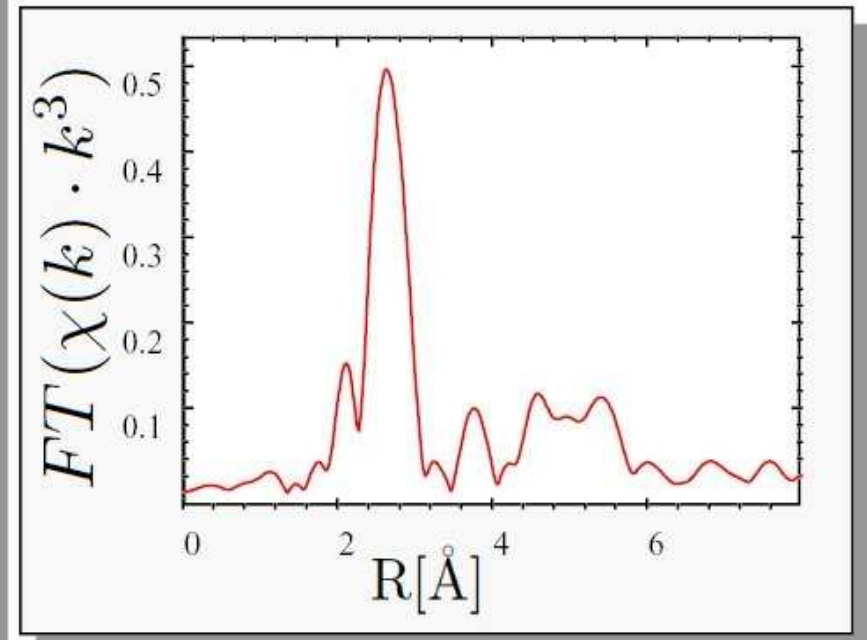
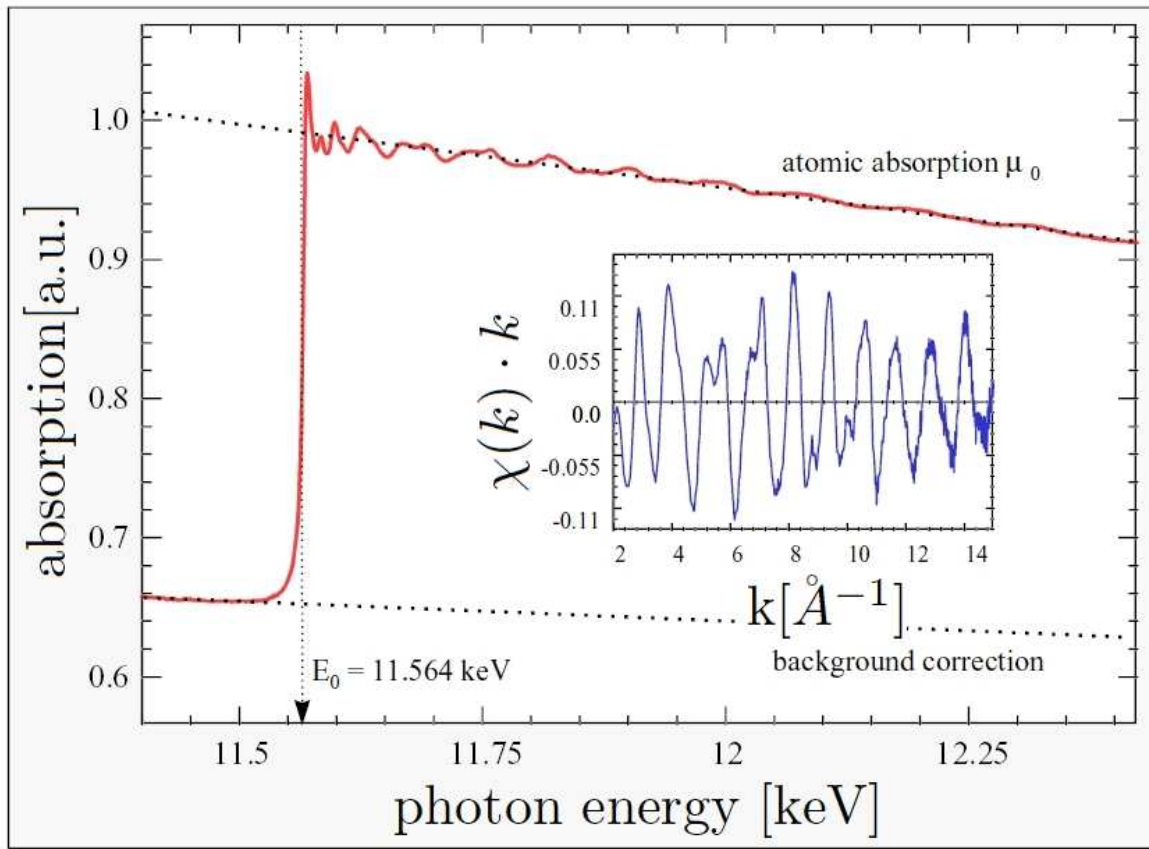
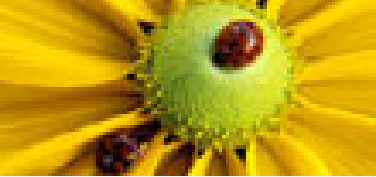


Abbildung 17: Auswertung der EXAFS Spektren (Pt-L_{III}-Kante) [8]



Zusammenfassung

[Übersicht](#)

[Röntgenstrahlung](#)

[Röntgenabsorption](#)

[Röntgenabsorptionsspektroskopie](#)

[Methoden \(XANES/EXAFS\)](#)

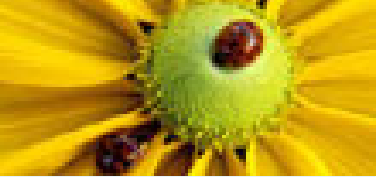
[Experimentelle Aspekte](#)

[Beispielspektren](#)

[Zusammenfassung](#)

● Zusammenfassung

[Literatur](#)



Zusammenfassung

- Röntgenabsorptionsspektroskopie (2 wichtige Methoden)
 - ◆ XANES
 - liefert Informationen über unbesetzte elektronische Zustände
 - ◆ EXAFS
 - ermöglicht die Untersuchung der strukturellen Umgebung des Absorberatoms

Übersicht

Röntgenstrahlung

Röntgenabsorption

Röntgenabsorptionsspektroskopie

Methoden (XANES/EXAFS)

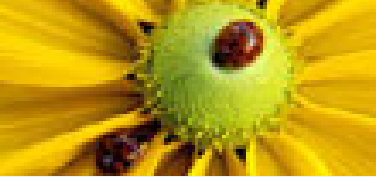
Experimentelle Aspekte

Beispielspektren

Zusammenfassung

● Zusammenfassung

Literatur



[Übersicht](#)

[Röntgenstrahlung](#)

[Röntgenabsorption](#)

[Röntgenabsorptionsspektroskopie](#)

[Methoden \(XANES/EXAFS\)](#)

[Experimentelle Aspekte](#)

[Beispielspektren](#)

[Zusammenfassung](#)

Literatur

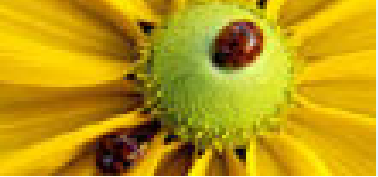
- Literatur
- Literatur 2

Literatur



Literatur

- [1] ANKA. <http://www.anka-online.de/>. – Online Ressource
- [2] *Penner-Hahn Research Group: Synchrotron Images*
- [3] BERGMANN ; SCHAEFER: *Aufbau der Materie*. 2. Auflage. de Gruyter, 1981
- [4] BREWER, William: *Vorlesung Aufbau der Materie (II)*.
http://www.physik.fu-berlin.de/~brewer/vm_atom.html. – Online Ressource
- [5] BRUNSCH, Sven: *Strukturuntersuchungen zum Einbau von Fremdionen und nanoskaligen Silberteilchen in Silikatgläser mit Hilfe der Röntgenabsorptionsspektroskopie*, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Diss., 2000. <http://sundoc.bibliothek.uni-halle.de/diss-online/00/00H155/index.htm>. – Elektronische Ressource
- [6] GERHOLD, S.: Untersuchung der elektronischen Struktur von Hochtemperatursupraleitern und verwandten Übergangsmetalloxiden mit Nahkanten-Röntgenabsorptionsspektroskopie / Forschungszentrum Karlsruhe. 2001 (FZKA 6575). – Forschungsbericht
- [7] HAKEN, Hermann ; WOLF, Hans-Christoph: *Atom- und Quantenphysik*. 8. Auflage. Springer-Verlag, 2004
- [8] HATJE, Ulrich: *Anwendung der zeitaufgelösten Röntgenabsorptionsspektroskopie auf zeolithische Systeme der heterogenen Katalyse*, Universität Hamburg, Diss., 1999.
http://www.physnet.uni-hamburg.de/services/fachinfo/dissfb12_1999.html. – Elektronische Ressource
- [9] KUNTSCHER, Christiane A.: *Photoemissions- und Röntgenabsorptionsspektroskopie am quasi-eindimensionalen System $Sr_{1-y}La_yNbO_{3.5-x}$* , Universität Karlsruhe (TH), Diss., 2000



Literatur

- [10] MERZ, M.: Röntgenabsorptionsspektroskopie an entzwilligten Einkristallen des Hochtemperatursupraleitersystems $Y_{1-x}RE_xBa_2Cu_{3-z}M_zO_{7-y}$ / Forschungszentrum Karlsruhe. 1997 (FZKA 6044). – Forschungsbericht
- [11] MESCHEDE, Dieter: *Gerthsen Physik*. 21. Auflage. Springer-Verlag, 2002
- [12] MILETICH, Ronald: *Skript: Grundzüge der Mineralogie*. Version: 2004.
<http://www.uni-heidelberg.de/institute/fak12/min/aktuelles/aktuelles.htm>. – Online Ressource
- [13] NEUHÄUSLER, Ulrich: *Untersuchung zum elementspezifischen Kontrast an Absorptionskanten mit dem Röntgenmikroskop*, Georg-Augus-Universität Göttingen, Diplomarbeit, 1996.
<http://wwwuser.gwdg.de/~uneuhae/>. – Elektronische Ressource