

Abb. 4. Bändermodell: 1. Anregung: Band-Band; 2. Anregung: Term-Band; 3. Anregung: Term-Term; 4. Rekombination: Term-Term; 5. Rekombination: Term-Term.

Im Rekombinationsakt werden zwei Banden emittiert, die den Übergängen vom angeregten (Übergang 4) bzw. Grundzustand (Übergang 5) des Ga-Ions zur Zn-Lücke entsprechen.

Dieses Modell kann also ohne weitere Voraussetzungen das Fehlen einer Photoleitung in der 3,06 eV-Bande und den großen Energieunterschied zwischen Anregungs- und Rekombinationsbande erklären. In einem Lamb-Klick-Modell würde die 3,06 eV-Anregung ein Elektron zu einem  $\text{Ga}^{+++}$ -Ion heben. Das Bandenmaximum der entsprechenden Rekombination liegt bei 1,86 eV, was für ein einzelnes, einwertiges Ion eine zu große

Relaxation bedeuten würde. Im vorgeführten Modell ist diese Relaxation durchaus möglich.

Nun muß noch das von der Zusammensetzung abhängige Intensitätsverhältnis der beiden Banden gedeutet werden. Da bei einem so großen Überschuß an  $\text{Ga}^{3+}$ -Ionen mit einer Bildung von Zn-Lücken immer zu rechnen ist und zwischen der Zn-Lücke und dem Ga-Ion eine Coulombsche Wechselwirkung besteht, wird bei relativer Abnahme der Anzahl der Zn-Lücken die Zahl der eng benachbarten  $[\text{Zn}]\text{-Ga}^{3+}$ -Assoziate langsamer abnehmen als die der weit voneinander entfernten Paare, so daß die Intensität der roten Bande relativ zunimmt. Dementsprechend wächst die Bedeutung der 3,3 eV-Photoleitfähigkeitsbande mit wachsender Anzahl der Zn-Lücken (S-Überschuß), da diese Bande einem Übergang von der Zn-Lücke zur Leitfähigkeitsbande entspricht.

Bezüglich des Einflusses der Temperatur kann folgendes gesagt werden: Bei Kühlung wächst die Population im Grundzustand des Ga-Ions und damit auch das Rot/Grün-Verhältnis.

Die Autoren sind Fr. K. JOSEPOVITS für die sorgfältige Durchführung der Untersuchungen zu Dank verpflichtet.

## Zur Anregung charakteristischer Röntgen-Strahlung durch Photoelektronen

HORST EBEL, FRANK LANDLER  
und HANSJÖRG DIRSCHMID

Institut für Angewandte Physik, Technische Hochschule Wien  
und I. Institut für Mathematik, Technische Hochschule Wien  
(Z. Naturforsch. 26 a, 927–928 [1971]; eingegangen am 5. März 1971)

Wird eine Probe durch das kontinuierliche Spektrum einer Röntgen-Röhre zur Fluoreszenzstrahlung angeregt, so können Photoelektronen aus dem K-Niveau, die von primären Photonen mit mindestens der doppelten Anregungsenergie  $E_K$  herrühren, ihrerseits die charakteristische K-Strahlung anregen. Die Einschränkung auf das K-Niveau wird zur Vereinfachung der Überlegungen vorgenommen und ist zulässig, da beispielsweise bei Kupfer die Absorption zu etwa 90% in diesem Niveau erfolgt.

Beim Eindringen wird die auf die Probenoberfläche auftreffende primäre Photonenzahl  $N_0(\lambda) \cdot d\lambda$  aus dem Wellenlängenintervall  $\lambda$  bis  $\lambda + d\lambda$  bis zum Erreichen des Schichtelements  $\Delta x$  in der Tiefe  $x$  exponentiell geschwächt<sup>1</sup>. Die Photonenzahl  $N(\lambda, x) \cdot d\lambda$  in der Tiefe  $x$  beträgt

$$N(\lambda, x) d\lambda = N_0(\lambda) d\lambda \exp[-\mu(\lambda) x / \sin \varphi]. \quad (1)$$

$\varphi$  ist der Winkel zwischen der einfallenden Strahlung und der Probenoberfläche und  $\mu(\lambda)$  der lineare Ab-

sorptionskoeffizient der Probe für eine Strahlung der Wellenlänge  $\lambda$ . Im Schichtstück  $\Delta x$  werden  $dN(\lambda, x)$  Photonen im K-Niveau absorbiert.

$$dN(\lambda, x) = N(\lambda, x) d\lambda \mu(\lambda) \cdot \frac{S_K - 1}{S_K} \cdot \frac{\Delta x}{\sin \varphi} \quad (2)$$

$S_K \dots$  Absorptionskantensprung.

Mit dem Faktor  $k$ , der die Wahrscheinlichkeit dafür angibt, daß das Photoelektron sein Ursprungsatom ohne Energieverlust zu verlassen vermag, erhält man die Anzahl der Elektronen  $dN_e$  aus den Gln. (1) und (2) zu

$$dN_e = k \mu(\lambda) \frac{S_K - 1}{S_K} \cdot \frac{\Delta x}{\sin \varphi} N_0(\lambda) d\lambda \cdot \exp[-\mu(\lambda) x / \sin \varphi]. \quad (3)$$

Auf diese Elektronen können die Überlegungen von MOTT und MASSEY<sup>2</sup> angewandt werden.

Beträgt der K-Ionisationsquerschnitt des betrachteten Elementes  $Q(E, E_K)$ , so ist die Zahl  $dz$  der K-Ionisationen eines Elektrons der Energie  $E$ , das im Target den Weg  $dz$  zurücklegt, durch den Ausdruck

$$dz = \frac{\varrho L}{A} Q(E, E_K) dz \quad (4)$$

gegeben ( $\varrho L/A$  ist die Zahl der Atome je Volumeneinheit). Somit wird die Anzahl der erzeugten  $i$ -Photonen

$$dn_i = W p_i dz \quad (5)$$

$W \dots$  Auger-Faktor,  $p_i \dots$  Übergangswahrscheinlichkeit.

Sonderdruckanforderungen an Dozent Dr. HORST EBEL, Institut für Angewandte Physik, Technische Hochschule Wien, A-1040 Wien, Karlsplatz 13.

\* Herrn Prof. Dr. F. REGLER zu seinem 70. Geburtstag gewidmet.

<sup>1</sup> R. O. MÜLLER, Spektrochemische Analysen mit Röntgen-Fluoreszenz, Oldenbourg, München 1967.

<sup>2</sup> N. F. MOTT u. H. S. MASSEY, The Theory of Atomic Collisions, Clarendon Press, Oxford 1949.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

Der Energieverlust  $-dE$  des Elektrons entlang des Weges  $dx$  beträgt nach MOTT und MASSEY<sup>2</sup>

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{2\pi e^4 Q L Z}{A E} \ln \frac{2E}{I} \quad (6)$$

und der Ionisationsquerschnitt  $Q(E, E_K)$  ist durch

$$Q(E, E_K) = \frac{Z_K \pi e^4}{E \cdot E_K} b \ln \frac{4E}{B} \quad (7)$$

gegeben [ $I$  mittleres Ionisationspotential ( $18,4 \cdot 10^{-12}$  erg),  $Z$  Ordnungszahl,  $Z_K=2$  (Anzahl der Elektronen in der K-Schale),  $b$  Zahlenfaktor (0,35 für das K-Niveau),  $B = [1,65 + 2,35 \cdot \exp(1-U)] E_K$ ,  $U = E/E_K$ ].

Für die Anzahl  $n_i$  der  $i$ -Photonen

$$n_i = W p_i \frac{Q L}{A} \int_{E_0}^{E_K} Q(E, E_K) \frac{dx}{dE} dE \quad (8)$$

folgt mit den Gln. (6) und (7) und ausgeführtem Integral

$$n_i = W p_i \frac{2b}{Z} \left\{ U_0 - 1 + \frac{I}{2E_K} [\text{Ei}(\alpha_0) - \text{Ei}(\alpha_K)] \ln \frac{2I}{B} \right\}, \quad (9)$$

wobei  $\alpha_0 = \ln(2E_0/I)$  und  $\alpha_K = \ln(2E_K/I)$  zu setzen sind.  $E_0$  ist die Anfangsenergie des Elektrons und errechnet sich aus der Wellenlänge  $\lambda$  des absorbierten Photons zu

$$E_0 = (hc/\lambda) - E_K. \quad (10)$$

Mit  $n_i$  ist die Anzahl der von einem Elektron erzeugten  $i$ -Photonen bekannt. Wenn Gl. (3) die Anzahl der möglichen Photoelektronen angibt, so erhält man zusammen mit Gl. (9) die Anzahl der durch K-Photoelektronen erzeugten  $i$ -Photonen

$$dN_i = n_i dN_e. \quad (11)$$

Es wird nun weiter angenommen, daß die Photoelektronen ihre Energie ausschließlich innerhalb der Probe abgeben. Der Prozentsatz der Photoelektronen, der die Probenoberfläche verläßt, ist vergleichsweise gering und wird vernachlässigt.

Die im Schichtelement  $\Delta x$  erzeugten  $i$ -Photonen werden quellenförmig in alle Raumrichtungen emittiert. Der Kollimator läßt davon nur den Bruchteil  $\Omega/4\pi$  zum Detektor gelangen. Bis zum Austritt aus der Probe wird die  $i$ -Strahlung der Wellenlänge  $\alpha$  um den Faktor

$$\exp[-\mu(\alpha) x / \sin \psi] \quad (12)$$

geschwächt, wobei  $\mu(\alpha)$  der lineare Absorptionskoeffizient der Probe für die  $i$ -Strahlung und  $\psi$  der auf die Probenoberfläche bezogene Beobachtungswinkel der Strahlung ist. Damit errechnet sich der Beitrag zur  $i$ -Intensität vom Schichtstück  $\Delta x$  in der Tiefe  $x$ . Da die Strahlung — zumindest theoretisch — in allen Tiefen der Probe entsteht, muß über  $x$  von Null bis Unendlich integriert werden. Aus den Gln. (11), (12) wird

nach Integration die von den Photoelektronen herrührende Fluoreszenzintensität erhalten.

$$dN_i = k \frac{\Omega}{4\pi} \frac{n_i}{\sin \varphi} N_0(\lambda) d\lambda \mu(\lambda) \cdot \frac{S_K - 1}{S_K} \frac{1}{\mu(\lambda)/\sin \varphi + \mu(\alpha)/\sin \psi}. \quad (13)$$

Zur numerischen Berechnung wurde für  $N_0(\lambda)$  die Kramerssche Näherung verwendet.

Da nur jener Anteil der Photonen interessiert, der mindestens die Energie  $2E_K$  besitzt, ist das Integral über  $dN_i$  von  $\lambda_0$  bis  $\lambda_K/2$  zu erstrecken. Daraus folgt der gesamte, durch K-Photoelektronen zusätzlich erzeugte Anteil an  $i$ -Strahlung.

$$N_i = k \frac{\Omega}{4\pi} \frac{S_K - 1}{S_K} \propto \int_{\lambda_0}^{\lambda_K/2} n_i \frac{\mu(\lambda) \cdot \frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0 \lambda^2}}{\mu(\lambda) + \mu(\alpha) \cdot \frac{\sin \varphi}{\sin \psi}} d\lambda. \quad (14)$$

Wird  $N_i$  ins Verhältnis zur klassisch angeregten Fluoreszenzstrahlung  $N$  gesetzt, so erhält man Auskunft über die Größe des Beitrages zur gesamten  $i$ -Strahlung.

Die numerische Berechnung wurde mit dem Computer IBM 7040 der Technischen Hochschule Wien ausgeführt. Zufolge des Fehlens geeigneter Zahlenwerte in der Literatur war der Faktor  $k$  mit Eins anzunehmen.

Das Ergebnis der numerischen Bestimmung von  $N_i/N$  ist für das Element Kupfer aus Abb. 1 zu sehen. Da der Beitrag im behandelten Spannungsbereich unterhalb 3 Promille liegt, ist eine experimentelle Überprüfung unmöglich.

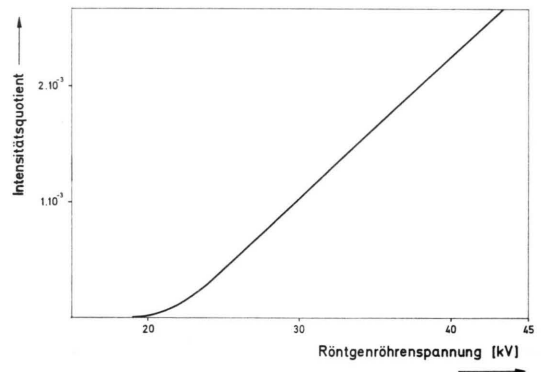


Abb. 1. In Promille angegebener Intensitätsquotient aus durch Photoelektronen und durch Primärquanten angeregter Fluoreszenzstrahlung von Kupfer in Abhängigkeit von der Röntgenröhrenspannung.

Die Untersuchungen wurden aus Mitteln des Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung in Österreich — 775 — subventioniert.