

## Einleitung in die Röntgenabsorptionsspektroskopie

### **Abstract**

Die Röntgenabsorptionsspektroskopie ist eine Messmethode zur Bestimmung der lokalen elektronischen und räumlichen Struktur einer Probe. Gemessen wird die Absorption in Abhängigkeit von einfallender Energie. Das Spektrum zeigt dabei neben den durch Auslösung tief gebundener Elektronen charakteristischen Absorptionskanten eine zusätzliche Feinstruktur (Oszillationen) oberhalb dieser Kanten.

Unterschieden wird hierbei der Nahkantenbereich (NEXAFS - near edge x-ray absorption fine structure) und der erweiterte Bereich (EXAFS – extended x-ray absorption fine structure).

In diesem Vortrag wird der EXAFS- Bereich detailliert behandelt. Dieser gibt Aufschluss über die physikalische Nahordnung des Absorberatoms, d.h. über Bindungslängen, Koordinationszahlen und strukturelle Unordnung. EXAFS- Spektroskopie als lokale Messmethode bietet dabei den Vorteil, dass sie keine langreichweitige Ordnung in der Probe voraussetzt, und damit amorphe Festkörper untersuchbar sind. Sie findet Anwendung in vielen wissenschaftlichen Forschungsbereichen, wie z.B. in der Materialforschung, Umweltforschung und Katalysatortechnik.

Zur Experimentdurchführung wird eine Synchrotronquelle, ein Monochromator zur Variation der Energie und Detektoren für die Intensitätsmessung je nach Messmethode (Transmissions- und Fluoreszenzmessung) benötigt.

Eine theoretische Beschreibung von EXAFS erklärt die Feinstruktur durch Interferenz von emittierter Photoelektronwelle und der an Nachbaratomen gestreuten Welle (Modell: short range single electron single scattering).

Basierend auf dieser Theorie liefert eine Analyse des Spektrums unter Verwendung von effektiven Computercodes dann die gesuchten Strukturparameter.

Als Beispiel für eine Anwendung von EXAFS dient eine Untersuchung des PCM- Materials (phase change memory)  $\text{Ge}_{15}\text{Sb}_{85}$ . Das EXAFS- Spektrum zeigt jedoch, dass es bei Kristallisation des Materials zu Phasentrennung kommt, was z.B. die Verwendung als Datenspeicher unmöglich macht.

### **Literatur:**

F. Hippert, E. Geissler, E. Lelièvre-Berna, J. L. Hodeaus, J.-R. Regnard, (Eds.) , Neutron and X-ray Spectroscopy, Springer, 2006, S.131-167

Jens Falta, Thomas Möller, Forschung mit Synchrotronstrahlung, Vieweg + Teubner, S.172-182

P. Zalden, C. Bichara, J. van Eijk, C. Braun, W. Bensch, M. Wuttig, Atomic structure of amorphous and crystallized  $\text{Ge}_{15}\text{Sb}_{85}$ , Journal of applied physics 107, 2010

J. J. Rehr, R. C. Albers, Theoretical approaches to x-ray absorption fine structure, Reviews of Modern Physics, Vol. 72, No. 3, July 2000