

Inhaltsverzeichnis

1.	Röntgenphysik und Praxis	11
1.1.	Historische Entwicklung der Röntgenphysik	11
1.2.	Bedeutung von Atomdaten für die Praxis	14
2.	Physikalische Grundlagen	17
2.1.	Elektronenkonfigurationen und Atomgrundzustandsterme	17
2.1.1.	Besetzung von Elektronenzuständen	17
2.1.2.	Systematisierung der Elektronenniveaus	19
2.1.2.1.	<i>LS</i> -Kopplung	19
2.1.2.2.	<i>jj</i> -Kopplung	28
2.2.	Struktur der Elektronenhülle	35
2.3.	Charakteristische Röntgenstrahlung	42
2.3.1.	Klassifizierung	42
2.3.2.	Linienprofil	49
2.3.3.	Röntgenemissionsraten	55
2.3.3.1.	Einsteinsche Übergangswahrscheinlichkeiten	55
2.3.3.2.	Berechnung relativistischer Röntgenemissionsraten	57
2.3.3.3.	Näherungen zur Berechnung der Röntgenemissionsraten	60
2.3.3.4.	Winkelkorrelationen	62
2.3.3.5.	Röntgenemissionsraten in ionisierten Atomen	62
2.3.4.	Röntgenübergangs-Energieverschiebungen	65
2.3.4.1.	Physikalische Ausgangssituation	65
2.3.4.2.	Isotopieeffekte	67

2.3.4.3.	Chemische Verschiebungen	69
2.3.4.4.	Hyperfeinstrukturaufspaltung	72
2.3.4.5.	Atomstrukturverschiebungen für Übergänge mit $\Delta Z = 1$	74
2.3.4.6.	Dynamische Verschiebungen	75
2.3.4.7.	Röntgensatelliten bei Außenschalenvakanzen	76
2.3.4.8.	Röntgensatelliten bei Innerschalenvakanzen	81
2.4.	Fluoreszenzausbeuten	85
2.4.1.	Bedeutung für Forschung und Praxis	85
2.4.2.	Bezeichnungen und Definitionen	85
2.4.3.	Natürliche Linienbreite der atomaren Niveaus und Fluoreszenzausbeute	93
2.5.	Ionisation	93
2.5.1.	Elektronenstoßionisation	93
2.5.2.	Ionisation bei Ion-Atom-Stößen	96
2.5.3.	Vielfach-Ionisationsprozesse	96
2.6.	Röntgenspektren und Auger-Effekt	100
2.6.1.	Auger-Elektronen und Innerschalenionisation	100
2.6.2.	Auger-Effekt und energetische Breite von Röntgenemissions- linien und Absorptionskanten	101
2.6.3.	Auger-Effekt und Intensitäten von Röntgenemissionslinien	102
2.7.	Atomstrefaktoren für Röntgenstrahlung	103
2.8.	Absorption von Röntgenstrahlung	104
3.	Energie- und Intensitätsmessungen	109
3.1.	Energetische Normale für elektromagnetische Strahlung	109
3.1.1.	Klassifikation der Eichnormale	109
3.1.2.	Röntgeneichnormale	112
3.2.	Energie- und Intensitätseichungen	114
3.2.1.	Eichung wellenlängendispersiver Spektrometer	114
3.2.2.	Eichung energiedispersiver Spektrometer	116
3.2.2.1.	Problemstellung	116
3.2.2.2.	Spektrometernichtlinearität	116
3.2.2.3.	Intensitätseichung	117
3.2.2.4.	Energieeichung	118
3.3.	Statistik in der Röntgenspektrometrie und quantitative Spektrenanalyse	121
3.3.1.	Basisterminologie	121
3.3.2.	Kurvenanpassung mit der Methode der kleinsten Quadrate	123
3.3.2.1.	Quantitative Röntgenspektrometrie	123
3.3.2.2.	Quantitative Spektrenanalyse	125

3.4.	Eigenschaften von Analysatorkristallen	131
3.4.1.	Zusammenstellung von gebräuchlichen Analysatorkristallen	131
3.4.2.	Diffractionslinienbreite	133
3.4.3.	Energieauflösung	133
3.4.4.	Lichtstärke von Kristall-Diffraktionsspektrometern	135
3.4.4.1.	Grundlegende Beziehungen	135
3.4.4.2.	Reflektivitäten für ausgewählte Kristalle und Gitterebenen	135
3.4.4.3.	Lichtstärke von Johansson-Spektrometern	138
3.4.5.	Einfluß von Instrumenteneffekten auf die Abbildungseigenschaften von Kristallen	139
4.	Datenbasis	141
4.1.	Elektronenbindungsenergien	141
4.2.	Röntgenübergangsenergien	153
4.3.	Röntgenfluoreszenzausbeuten	160
4.3.1.	K-Röntgenfluoreszenzausbeuten	160
4.3.2.	L-Röntgenfluoreszenzausbeuten	162
4.3.3.	M-Röntgenfluoreszenzausbeuten	163
4.4.	Natürliche Breiten von atomaren Energieniveaus und Linien der charakteristischen Röntgenstrahlung	164
4.5.	Röntgenemissionsraten	167
4.6.	Massenschwächungskoeffizienten	170

T Tafelteil

<i>Tafel 1.</i>	Energien (E), Emissionsraten (I) und energetische Linienbreiten (I) der Linien der charakteristischen Röntgenstrahlung für alle Elemente bis $Z \leq 95$	174
<i>Tafel 2.</i>	Elektronenbindungsenergien (E_B), Fluoreszenzausbeuten (ω_{nl}) und energetische Niveaubreiten (I) für alle Elemente bis $Z \leq 95$	245
<i>Tafel 3.</i>	Numerisch geordnete Wellenlängen (λ) und Energien (E) der Emissions- linien und Absorptionskanten für alle Elemente bis Americium ($Z = 95$)	330
<i>Tafel 4.</i>	Berechnete totale K-Vakanz-Zerfallsraten und Koppelfaktoren für die K-Serie	389
<i>Tafel 5.</i>	Mittlere Atomstreu Faktoren (in Elektronen) für freie Atome und chemisch signifikante Ionen	391
<i>Tafel 6.</i>	Koeffizienten für eine analytische Approximation der in Tafel 5 aufgeführten Atomstreu Faktoren	419

<i>Tafel 7.</i> Massenschwächungskoeffizienten für ausgewählte Röntgenlinien der Elemente bis Plutonium ($Z = 94$)	428
<i>Tafel 8.</i> Fitparameter für eine schnelle Berechnung der Massenschwächungs- koeffizienten (μ) für alle Elemente bis Plutonium ($Z = 94$) im Energiebereich $1 \text{ keV} \leq E \leq 150 \text{ keV}$	552
<i>Tafel 9.</i> Parameter stabiler Isotope	567
<i>Tafel 10.</i> Atommassen (A) und Isotopenmassen der meistverbreiteten Isotope	571
<i>Tafel 11.</i> Parameter langlebiger radioaktiver Isotope	577
<i>Tafel 12.</i> Mittlere Röntgenübergangsenergien (\bar{E}) auf der Basis der Linienenergien (E) und der entsprechenden Emissionsstärken (I)	585
Literaturverzeichnis	594
Sachwörterverzeichnis	604