

TECHNISCHE UNIVERSITÄT MÜNCHEN

FAKULTÄT FÜR PHYSIK

Die spektrale Antwort von Silizium-Röntgendetektoren

TOBIAS EGGERT

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Physik der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Naturwissenschaften genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr. M. Kleber
Prüfer der Dissertation: 1. Univ.-Prof. F. Koch, Ph.D.
2. Univ.-Prof. Dr. R. Krücken

Die Dissertation wurde am 30. Juni 2004 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Physik am 5. Oktober 2004 angenommen.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Halbleiterdetektoren	1
1.2	Ziel dieser Arbeit	3
2	Funktionsweise von Halbleiterdetektoren	5
2.1	Grundlagen	5
2.1.1	Die Bandstruktur von Halbleitern	6
2.1.2	Dotierte Halbleiter	7
2.1.3	Der p-n-Übergang	7
2.1.4	Die Raumladungszone des abrupten p-n-Übergangs	8
2.1.5	Die Potentialverteilung	10
2.1.6	Nachweis von Strahlung mit Halbleiterdetektoren	10
2.1.7	Pin-Dioden	12
2.1.8	Erzeugung der Elektronen	14
2.1.9	Breite der Verteilung	16
2.1.10	Typisches ^{55}Mn -Spektrum	18
2.1.11	Das Prinzip der Seitwärtsdepletion	20
2.2	Der Siliziumdriftdetektor	21
2.2.1	Definition des Koordinatensystems	23
2.2.2	Das Driftfeld des SDD	24
2.2.3	Das Eintrittsfenster	24
2.2.4	Die Auslesestruktur	30
2.2.5	Mehrkanalstrukturen	32
2.3	Die Signalverarbeitung	33
2.3.1	Der Pulsformer	33
2.3.2	Pile-up	34
2.3.3	Totzeit	34
2.4	Andere Detektoren zur Strahlungsmessung	37
2.4.1	Lithium-gedriftete Siliziumdetektoren	37
2.4.2	Gasdetektoren	39
3	Elektronisches Rauschen	41
3.1	Grundlagen	41
3.2	Thermisches Rauschen	43
3.3	Niederfrequentes Rauschen	45
3.4	Schrotrauschen und Leckströme	46
3.5	Einfluß von RC -Netzwerken auf das Gesamtrauschen	49

3.6	Separation der Rauschbeiträge	50
3.7	Folgerungen	53
4	Berechnung der spektralen Antwort	55
4.1	Überblick	55
4.2	Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie	58
4.2.1	Schwächung von Röntgenstrahlung	58
4.2.2	Kohärente Streuung	59
4.2.3	Compton-Streuung	59
4.2.4	Der Photoeffekt	60
4.3	Wechselwirkungen im SDD	61
4.3.1	Absorption von Röntgenstrahlung und Quanteneffizienz	61
4.3.2	Reflexion	66
4.3.3	Wechselwirkungswahrscheinlichkeit der primären Photonen	66
4.4	Erzeugung der Elektron-Loch-Paare	68
4.4.1	Röntgenfluoreszenz	69
4.4.2	Auger-Effekt	71
4.4.3	Fluoreszenzausbeute	73
4.4.4	Relaxation des ionisierten Atoms	74
4.4.5	Schalenabhängige Photoabsorption	76
4.4.6	Verlust von Fluoreszenzphotonen	78
4.5	Streuprozesse und Reichweite der Elektronen	79
4.5.1	Primärelektronen	79
4.5.2	Sekundärelektronen	81
4.6	Berechnung der Energiedeposition im Detektor	83
4.6.1	Intensität der Hauptlinie und ICC-Schichtdicke	84
4.6.2	Aluminiumfluoreszenz	86
4.6.3	Escape-Linie	86
4.6.4	Unvollständige Ladungssammlung im Eintrittsfenster	87
4.6.5	Diskussion	93
4.6.6	Berechnete Spektren	99
4.7	Analytische Fit-Funktion	102
5	Messung der spektralen Antwort	105
5.1	Aufbau	105
5.1.1	Das Plangittermonochromatorstrahlrohr	105
5.1.2	Filter	106
5.1.3	Lochblenden	107
5.2	Kalibrierung	107
5.3	Zählratenabhängigkeit der Linienposition und Energieauflösung	109
5.4	Qualitative Beurteilung der Niederenergiespektren	110
5.5	Auswertung mit der analytischen Fit-Funktion	114
5.6	Dicke der Metallisierungsschicht	120

6	Ergebnisse	123
6.1	Die Fit-Prozedur	123
6.2	Vergleich zwischen Modell und Messung	126
6.3	Einflüsse oberflächennaher Rekombinationszentren	131
6.4	Schlußfolgerungen	131
6.4.1	Quanteneffizienzberechnung	131
6.4.2	Verringerung des Untergrunds	133
6.5	Ausblick	135
7	Zusammenfassung	137
A	Röntgenfluoreszenzanalyse	139
B	Einfluß der Filterglieder auf das elektronische Rauschen	141
B.1	Grundlagen	141
B.2	Thermisches Rauschen	142
B.3	Schrotrauschen	143
B.4	Niederfrequentes Rauschen	143
C	Röntgenstrahlungsquellen	145
C.1	Radioaktive Präparate	145
C.2	Röntgenröhren	146
C.2.1	Kontinuumstrahlung	146
C.2.2	Charakteristische Strahlung	147
C.3	Synchrotronstrahlung	147
	Literaturverzeichnis	151
	Index	161
	Danksagung	165

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

2.1	Diffusionsspannungen für verschiedene Dotierungen	9
2.2	Potentialverteilung eines abrupten p-n-Übergangs	9
2.3	Aufbau einer pin-Diode	13
2.4	Energieauflösung bei 5.9 keV in Abhängigkeit von n_{ENC}	17
2.5	Typisches Mn-55-Spektrum	19
2.6	Prinzip der Seitwärtsdepletion	20
2.7	Schematische Darstellung des SDD	21
2.8	Aufbau der SDD-Module	22
2.9	Potentialverteilung im SDD	25
2.10	Partielle Ladungssammlung im Eintrittsfenster	27
2.11	Ausleseknoten des SDD	30
2.12	Source-Follower-Konfiguration des Transistors	31
2.13	Ringförmiger Mehrkanal-SDD	32
2.14	Maximale Ausgangs- für verschiedene Eingangszählraten	36
2.15	Schema eines Si(Li)-Detektors	38
3.1	RFA-Spektren mit verschiedenen n_{ENC}	42
3.2	Ersatzschaltbild der Rauschquellen im SDD	48
3.3	Gemessenes Rauschen für verschiedene τ und T	51
3.4	Vergleich zwischen Rauschmessung und Fits	52
3.5	Separation einzelner Rauschbeiträge	53
3.6	Berechnete Energieauflösungen großflächiger SDDs	54
4.1	Potentialverteilung der SDD-Auslesestruktur	57
4.2	Eindringtiefe von Photonen in Si und Al	60
4.3	Transmission von MOXTEK-Gehäusefenstern	63
4.4	Totale Quanteneffizienz von SDDs und Si(Li)s	65
4.5	Reflexion und Transmission der Al-Schicht auf Si-Substrat	67
4.6	Absorptionswahrscheinlichkeitsdichten für $E_0 = 282$ eV bis 523 eV	69
4.7	Energieübergänge im Schalenmodell	70
4.8	Elektronenerzeugung	74
4.9	Photoionisationswirkungsquerschnitte der Silizium-Unterschalen	76
4.10	Photoionisationswirkungsquerschnitte der Aluminium-Unterschalen	77
4.11	Escape-Wahrscheinlichkeit	79
4.12	Berechnete Elektronenreichweiten	80
4.13	Bremsvermögen von Elektronen	81
4.14	Wahrscheinlichkeit für Ionisationsstreuung	82

4.15	Dicke der Schicht unvollständiger Ladungssammlung	85
4.16	Einteilung der Primärelektronenreichweite in einzelne Abschnitte	88
4.17	Ladungssammlung der Sekundärelektronenwolken	90
4.18	Energiedeposition von Elektronen entlang ihres Weges	91
4.19	Schichten unvollständiger Ladungssammlung	94
4.20	Spektrum für Absorption in der ICC-Schicht mit $r_{\text{sek}} = 200 \text{ nm}$	95
4.21	Spektrum für Absorption in der ICC-Schicht mit $r_{\text{sek}} = 1 \text{ nm}$	95
4.22	Spektrum für Absorption in der Al-Schicht mit $r_{\text{sek}} = 200 \text{ nm}$	97
4.23	Spektren für dünne und dicke Al-Schichten mit $r_{\text{sek}} = 1 \text{ nm}$	98
4.24	Berechnete Spektralverteilungen für verschiedene Röntgenenergien	100
4.25	Einzelanteile der berechneten Spektren	101
4.26	Variation der Antwortfunktion	103
5.1	Plangittermonochromatorstrahlrohr	106
5.2	Selektion von Harmonischen am Plangitter	107
5.3	Experimenteller Aufbau	108
5.4	Gemessenes Spektrum bei $E_0 = 1.82 \text{ keV}$	109
5.5	Genauigkeit der Kalibrierung	109
5.6	Variation der Linienposition mit der Zählrate	110
5.7	Zählratenabhängige Energieauflösung	110
5.8	Gemessenes Spektrum bei $E_0 = 1.11 \text{ keV}$	111
5.9	Gemessenes Spektrum bei $E_0 = 532 \text{ eV}$	111
5.10	Gemessenes Spektrum bei $E_0 = 379 \text{ eV}$	112
5.11	Gemessenes Spektrum bei $E_0 = 248 \text{ eV}$	112
5.12	Spektren des Energie-Scans von 1534 eV bis 1854 eV	113
5.13	Spektren nahe den Absorptionskanten	114
5.14	Absorptionswahrscheinlichkeitsdichten an den Kanten	115
5.15	Spektrum bei 1.84 keV mit Fit-Funktion $P + \text{Esc} + F$	116
5.16	Ergebnisse der Fit-Parameter I_G , I_S , σ und I_{D_2}	117
5.17	Ergebnisse der Fit-Parameter k_t , I_M , k_M und I_F	119
5.18	Verhältnis Al-Linie/Hauptlinie und Al-Schichtdickenmessung	120
6.1	χ^2 -Parabel	125
6.2	Gemessene und modellierte Spektren unterhalb 1 keV	126
6.3	Gemessene und modellierte Spektren unterhalb 1.56 keV	127
6.4	Gemessene und modellierte Spektren von 1.57 keV bis 1.83 keV	128
6.5	Gemessene und modellierte Spektren oberhalb 1.84 keV	129
6.6	Gemessene Sekundärelektronenreichweiten	130
6.7	Modellierte totale und Full-Peak-Quanteneffizienz	132
6.8	Spektren für alternative Eintrittsfensterkonfigurationen	134
6.9	Gemessene und modellierte Spektren im SDD-Randbereich	136
C.1	Erzeugung von Synchrotronstrahlung	148
C.2	Räumliche Verteilung der Undulator-Harmonischen	149

1 Einführung

In vielen Forschungs- und Anwendungsgebieten werden zur Messung ionisierender Strahlung in der Planartechnologie gefertigte Halbleiterdetektoren eingesetzt. Im Gegensatz zur Einzelfertigung werden dabei zahlreiche Bauelemente gemeinsam auf einem Wafer produziert. Die Planartechnologie für Halbleiterdetektoren [Kem80] wurde zunächst vor allem für die speziellen Anforderungen der Grundlagenforschung entwickelt, z. B. Streifen-zähler für die Kern- und Hochenergiephysik [Bel83a, Bel83b, Hya83, Cac87] oder vollständig verarmte Sperrschicht-CCDs für die Röntgenastronomie [Ric96, Lum97]. Wegen den hohen Stückzahlen und komplexen Strukturierungen ist eine Einzelfertigung dieser Bauelemente nicht sinnvoll oder möglich.

Auch andere, nur in der Planartechnologie herstellbare Strukturen wie Silizium-drift-detektoren (SDDs) wurden zunächst primär zu Forschungszwecken produziert und analysiert. Mittlerweile sind SDDs etablierte Serienprodukte, die für Röntgenanalytikanwendungen in der Grundlagenforschung und Industrie eingesetzt werden. Aufgrund ihrer guten Eigenschaften lösen sie vermehrt sowohl einfachere Detektortypen wie Proportionalzähler und pin-Dioden, als auch hochwertige Lithiumgedriftete Siliziumdetektoren ab.

1.1 Halbleiterdetektoren

Röntgenstrahlung hoher Energie wird am effektivsten von Materialien mit hoher Ordnungszahl Z und hoher Dichte ρ absorbiert, denn der Absorptionskoeffizient μ ist proportional zu ρZ^5 [Tai80]. Im Vergleich zu anderen Halbleitern wie Ge oder GaAs ist das Absorptionsvermögen von Silizium gering, deshalb werden Siliziumdetektoren vor allem zur Messung weicher Röntgenstrahlung eingesetzt, d. h. für Energien $E_0 < 30$ keV. Die wichtigste Anwendung ist die Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA, siehe Anhang A). Die charakteristische K-Schalen-Fluoreszenzstrahlung (K-Linien) von Elementen mit $Z > 54$ ist zwar > 30 keV, diese Elemente lassen sich aber über ihre L- und M-Linien identifizieren, die stets im Bereich weicher Röntgenstrahlung liegen. Falls die Oberfläche der Probe analysiert werden soll, darf ohnehin keine zu hochenergetische Röntgenprimärstrahlung verwendet werden, da μ stark mit der Energie abnimmt.

Die wichtigsten Eigenschaften von Halbleiterdetektoren für den Nachweis von Röntgenstrahlung in der RFA und anderen Gebieten sind:

1. eine *gute Energieauflösung*, damit die Linien der einzelnen Elemente sauber getrennt werden können,
2. eine *hohe Effizienz* (Nachweiswahrscheinlichkeit der einfallenden Strahlung)

1 Einführung

über einen *weiten Energiebereich*, um Fluoreszenzstrahlung von Elementen mit sehr kleiner und sehr großer Ordnungszahl messen zu können,

3. ein *geringer Untergrund*, so daß schwache Linien nicht überdeckt werden.

Die Energieauflösung wird vom elektronischen Rauschen von Detektor und Elektronik bestimmt. Die Effizienz wird bei niedrigen Energien vom Aufbau der Detektor-Strahleneintrittsseite (dem Eintrittsfenster) limitiert, bei hohen Energien von der Tiefe der Raumladungszone. Der Untergrund entsteht, wenn die im Detektor generierten Ladungsträger nicht vollständig gesammelt werden. Im Spektrum entstehen dann Ereignisse mit zu geringer Energie.

Für spezielle Anwendungen sind darüber hinaus weitere Eigenschaften nützlich oder erforderlich:

4. eine *große Fläche*, um eine kurze Meßdauer zu erreichen,
5. eine *hohe Zählratenfähigkeit*, um Strahlung hoher Intensität zu messen,
6. *Strahlenhärte*, so daß sich die Eigenschaften des Detektors auch nach langer, intensiver Bestrahlung kaum verschlechtern.
7. Für den mobilen Einsatz sollte das System klein, leicht und handlich sein.

Heutige Detektorsysteme erfüllen weitgehend die unter Punkt 1 sowie 4 bis 7 genannten Eigenschaften. Ihr elektronisches Rauschen ist bereits sehr gering, die Strahlungs- und Ladungssammeleffizienzen können jedoch noch deutlich verbessert werden. Die mit den Punkten 4 bis 7 zusammenhängenden Probleme werden deshalb nur kurz behandelt und es wird gegebenenfalls auf weiterführende Literatur verwiesen.

Es gibt drei wichtige Typen von Siliziumdetektoren zur energieauflösenden Messung weicher Röntgenstrahlung: pin-Dioden, SDDs und Lithium-gedriftete Siliziumdetektoren, sogenannte Si(Li)s. Falls nicht nur energie-, sondern auch orts aufgelöst gemessen werden muß (z. B. in der Hochenergiephysik und Röntgenastronomie), verwendet man spezielle Bauelemente, wie vollständig verarmte Sperrschicht-CCDs (p-n-CCDs) und Streifenzähler. Diese basieren auf ähnlichen Prinzipien wie pin-Dioden und SDDs, deshalb ist zu erwarten, daß die Resultate dieser Arbeit auch auf diese Strukturen angewandt werden können.

Pin-Dioden sind sehr einfach strukturiert und deshalb kostengünstig herzustellen. Sie dienen hier als einfaches Modellsystem, um die Funktionsweise von Halbleiterdetektoren zu erklären (Abschnitt 2.1.7). Bei den in der RFA benötigten aktiven Flächen von 5 bis 10 mm² haben sie eine sehr hohe Kapazität, deshalb ist ihre Energieauflösung mit > 180 eV (bei $E_0 = 5.9$ keV) relativ schlecht. Um Leckströme zu verringern, werden pin-Dioden stets gekühlt betrieben (bei ca. -20 °C).

Die in der energiedispersiven RFA am weitesten verbreiteten Detektoren sind Lithium-gedriftete Siliziumdetektoren. Li-Ionen, die in den p⁻-dotierten Si-Einkristall diffundiert werden, kompensieren die Akzeptoren und erzeugen somit einen quasi intrinsischen Halbleiter mit einer extrem geringen Störstellendichte. Si(Li)s wurden bereits in den 1960'er Jahren erfunden und kontinuierlich weiterentwickelt.

Sie verfügen über eine ausgezeichnete Energieauflösung (≥ 125 eV), einen geringen Untergrund und eine hohe Effizienz über einen weiten Energiebereich (0.1 bis 50 keV). Diese guten Eigenschaften bleiben auch bei großflächigen Si(Li)-Detektoren (bis zu 80 mm^2) erhalten. Wegen der langen Signalanstiegszeit ist ihre Eingangszählratenfähigkeit auf $< 10^5/\text{s}$ begrenzt. Bei der Messung sehr niederenergetischer Röntgenstrahlung sind Si(Li)s anderen Halbleiterdetektoren bislang überlegen.

Sie müssen einzeln gefertigt werden, es lassen sich also nicht – wie in der Plantechnologie – zahlreiche Detektoren zugleich herstellen. Die individuelle Herstellung ist zeitaufwendig und deshalb teuer. Zudem müssen Si(Li)s mit flüssigem Stickstoff gekühlt werden, damit sich die Lithium-Ionen nicht umverteilen und die Kompensation aufheben. Der zur Kühlung benötigte Kryostat macht das Gesamtsystem größer und wiederum teurer. Die Konfiguration und Funktionsweise von Si(Li)s wird in dieser Arbeit (Abschnitt 2.4.1) kurz dargestellt, da viele Modelle der Spektralantwort von Halbleiterdetektoren auf diesem Detektortyp basieren.

Im Vergleich zu pin-Dioden und Si(Li)s sind SDDs zwar relativ neu, haben sich aber bereits in vielen Gebieten durchgesetzt. Bei ihnen ist das Driftfeld nicht nur senkrecht zur Chip-Oberfläche gerichtet, sondern auch parallel (die genaue Funktionsweise wird in Abschnitt 2.2 behandelt). Die von der einfallenden Strahlung erzeugte Ladung wird auf einer sehr kleinen Fläche gesammelt, woraus eine geringe Detektorkapazität und somit eine gute Energieauflösung resultiert. SDDs erreichen deshalb bei einer Temperatur von -20°C annähernd so gute Energieauflösungen wie Si(Li)s bei -196°C . Sogar bei Raumtemperatur ist ihre Auflösung für weniger anspruchsvolle Anwendungen noch ausreichend. Sie können deshalb selbst dann eingesetzt werden, wenn der experimentelle Aufbau keine Kühlung erlaubt. Ein wichtiger Vorteil von SDDs gegenüber Si(Li)s ist zudem die Fähigkeit, bei Eingangszählraten bis $10^6/\text{s}$ messen zu können. Ein Nachteil gegenüber Si(Li)-Detektoren ist ihre geringere Nachweeffizienz bei hohen (> 15 keV) und vor allem bei niedrigen Energien (< 1 keV). Dort erschwert der hohe Untergrund eine exakte quantitative Analyse der Elementzusammensetzung der Probe.

1.2 Ziel dieser Arbeit

Bei vielen Analyseverfahren wird es immer wichtiger, auch die niederenergetische Fluoreszenzstrahlung leichter Elemente nachweisen zu können. Dies gilt insbesondere für die elementspezifische Analyse in der Elektronenmikroskopie, der Mikro-RFA und der Totalreflexions-RFA. Dort ist es erforderlich, organische und nicht-metallische Kontaminationen noch genauer und mit kleineren Nachweisgrenzen zu bestimmen, z. B. auf Si-Wafern [Bec01]. Deshalb befaßt sich diese Arbeit vorrangig mit der Erweiterung des Energiebereichs des SDD hin zu niedrigeren Röntgenenergien. Es werden die physikalischen Prozesse analysiert, welche die Intensitäts- und Energieverteilung des Spektrums (Spektralverteilung) und insbesondere seines Untergrunds bestimmen.

Dazu wird die spektrale Antwort eines offenen Siliziumdriftdetektors (d. h. ohne Beryllium-Gehäusefenster und Stickstofffüllung) im niederenergetischen Röntgenbereich < 2 keV gemessen und modelliert. Die spektrale Antwort eines Detektorsy-

stems ist die Verteilung der gemessenen Ladung bei gegebener Energie der einfallenden Strahlung. Ein idealer Detektor liefert bei monoenergetischer einfallender Strahlung stets ein gleich hohes Signal, während bei realen Detektoren stets geringe statistische Schwankungen sowie Signale mit deutlich kleinerer oder größerer Signalthöhe auftreten. Die spektrale Antwort ist in der Regel stark energieabhängig. Je kleiner die Energie der einfallenden Strahlung wird, desto häufiger treten Ereignisse mit unvollständiger Ladungssammlung auf.

Die Messung und Modellierung des Antwortverhaltens und die Wechselwirkung weicher Röntgenstrahlung mit Halbleiterdetektoren ist für das Verständnis der Detektoren und Meßergebnisse sehr wichtig und Gegenstand zahlreicher Forschungsarbeiten, z. B. [Ina87, Cam85, Kru89, Cam90, Kru90, Bar91, Wen93, Cam01, Pap03]. Die Ergebnisse dieser Arbeiten sind sowohl für Detektorhersteller als auch für Anwender interessant. Kennt man die Ursachen für die Ladungsverluste, so können diese Erkenntnisse beim Design künftiger Detektoren berücksichtigt werden. Anwender können die Meßgenauigkeit und die Nachweisgrenzen verbessern, da die sonst „verlorenen“ Untergründereignisse der Strahlenergie E_0 zugewiesen werden können, wenn das Antwortverhalten genau bekannt ist.

Die Spektralantwort von SDDs wird mit keinem bisherigen Modell korrekt wiedergegeben. Dies liegt zum einen daran, daß diese Modelle für Detektoren mit anderen Eintrittsfensterkonfigurationen entwickelt wurden (Schottky-Kontakt bei Si(Li)s, oxidbeschichteter p-n-Übergang bei p-n-CCDs). Selbst wenn man diese Modelle an das [Eintrittsfenster](#) SDDs (aluminiumbeschichteter, Ohmscher p-n-Übergang) anpaßt, enthalten sie noch zu viele Näherungen, so daß gemessene und berechnete Spektralverteilungen nicht übereinstimmen (Abschnitt [2.2.3](#)).

Den Schwerpunkt dieser Arbeit bilden Untersuchungen zum Eintrittsfenster und zur Entstehung der Ladungswolke. Es sollen die vielfältigen Formen von Ladungsverlusten, die das Untergrundspektrum verursachen, erklärt werden. Mit Hilfe des erarbeiteten Modells sollen darüber hinaus die Eigenschaften neuartiger Halbleiterdetektorstrukturen vorhergesagt werden können, um somit bereits vor deren Herstellung sicherstellen zu können, daß sich diese Detektoren zum präzisen Nachweis niederenergetischer Röntgenstrahlung eignen.

In Kapitel [2](#) wird die Funktionsweise von SDDs und der Ausselelektronik erklärt. Die Entstehung des Rauschens und die daraus resultierenden Einschränkungen für den Nachweis niederenergetischer Röntgenstrahlung werden in Kapitel [3](#) behandelt. In Kapitel [4](#) wird eine neue Methode zur Berechnung der spektralen Antwort des SDD entwickelt. Die Messung der Niederenergiespektren und ihre Auswertung mit herkömmlichen, analytischen Fit-Gleichungen werden in Kapitel [5](#) beschrieben. In Kapitel [6](#) werden die Meßergebnisse mit den Resultaten des Modells verglichen, Schlußfolgerungen für die Entstehung von Ladungsverlusten gezogen und Verbesserungsvorschläge für den Aufbau des Eintrittsfensters erarbeitet.

2 Funktionsweise von Halbleiterdetektoren

Im einfachsten Fall bestehen Halbleiterdetektoren für Teilchen- und Strahlungsspektroskopie aus einer in Sperrichtung gepolten Grenzschicht. Diese ist in der Regel als ionenimplantierter p-n-Übergang realisiert. Legt man an diesen Übergang eine Sperrspannung an, so bildet sich eine von freien Ladungsträgern verarmte Zone aus. Diese ist strahlungsempfindliche („aktive“) Volumen des Detektors.

Das folgende Kapitel gibt einen Überblick über die grundlegende Funktionsweise von Halbleiterdetektoren. Insbesondere werden der Aufbau und die wichtigsten Eigenschaften des Siliziumdriftdetektors erklärt, mit dem die Messungen in dieser Arbeit durchgeführt werden. In Abschnitt 2.1 werden die allgemeinen physikalischen Prinzipien erklärt, auf denen Halbleiterdetektoren beruhen. Die speziellen Eigenschaften von Siliziumdriftdetektoren werden in Abschnitt 2.2 erläutert, die Signalverarbeitung von Siliziumdetektoren in Abschnitt 2.3. Auch die Funktionsweise von anderen Detektoren wird kurz erklärt, soweit es für das Verständnis dieser Arbeit nötig ist (Abschnitt 2.4).

2.1 Grundlagen

In den 1970'er Jahren fertigte JOSEF KEMMER an der **Physik-Fakultät** der **Technischen Universität München** erstmals Halbleiterdetektoren in der aus der Mikroelektronik bekannten Planartechnologie [Kem80]. In der Planartechnologie werden auf einer Siliziumscheibe (Wafer) mehrere Bauelemente in zahlreichen Passivierungs-, Belichtungs- und Implantationsschritten simultan prozessiert [Sze83]. Die Einführung der Planartechnologie vereinfachte die Produktion von Halbleiterdetektoren beträchtlich. Die Belichtung mit Hilfe von Masken ermöglichte überdies komplexe Strukturen. Unter anderem wurden damit die Voraussetzungen geschaffen, Halbleiterdetektoren in größerer Stückzahl und mit an die jeweilige Anwendung angepaßten Eigenschaften herzustellen.

Vor allem Anforderungen der Hochenergiephysik trieben diese Entwicklung voran, denn zur Teilchen- und Spurenidentifikation (*tracking*) benötigten die an Teilchenbeschleunigern eingesetzten Detektoren Ortsauflösungen von $10\ \mu\text{m}$ und eine hohe Zählratenfähigkeit. So ermöglichten Streifen-zähler, die mit der Planartechnologie hergestellt wurden, die mit Lebensdauern zwischen 10^{-13} und 10^{-12} s relativ langlebigen *charmed particles* (Teilchen mit nichtverschwindenden Charm-Quantenzahlen) eindeutig nachzuweisen und erstmals direkt deren Zerfälle zu beobachten [Hya83].

Um ionisierende Strahlung mit Halbleitern zu messen, müssen die erzeugten¹ Ladungsträger eine lange Lebensdauer und eine hohe Mobilität besitzen [Kem88]. Diese Anforderungen waren eine besondere Herausforderung bei der Übertragung der Planartechnologie auf die Herstellung von Halbleiterdetektoren, denn die notwendigen Hochtemperaturbehandlungen galten lange als „Lebensdauer-Killer“. Während der zahlreichen Prozessierungsschritte muß deshalb sehr viel mehr als bei der Herstellung von Bauelementen für die Mikroelektronik darauf geachtet werden, hochreine Grundmaterialien zu verwenden und möglichst keine Verunreinigungen und Kristalldefekte in die Wafer zu bringen bzw. zu aktivieren.

Ein weiterer wichtiger Unterschied im Vergleich zur herkömmlichen Planartechnologie ist die beidseitige Prozessierung und Strukturierung der Wafer, denn um die Chips über ihre gesamten Dicke zu depletieren, müssen sich Kontakte und Implantationen auf der Vorder- und Rückseite befinden.

Neben den bereits erwähnten Streifenzählern [Bel83a, Bel83b, Cac87] und Drift-detektoren werden in der Planartechnologie weitere wichtige Detektortypen hergestellt: von einfachen, sperrgepolten Dioden, über großflächige, voll depletierte p-n-CCDs [Brä90, Brä93, Brä97] für Röntgenteleskope [Ric96, Lum97] bis hin zu aktiven, DEPFET-basierten [Kem90] Pixelsensoren, bei denen das Signal mehrfach ausgelesen wird [Fis00, Hol00].

2.1.1 Die Bandstruktur von Halbleitern

Die bei Halbleiterdetektoren am häufigsten verwendeten Materialien Silizium und Germanium gehören der IV. Gruppe des Periodensystems an; sie sind also vierwertig, d. h. sie besitzen pro Atom vier Valenzelektronen. Diese Elektronen ermöglichen über eine kovalente Bindung mit jedem der vier nächsten Nachbaratome die Bildung des Kristallgitters.

Bei einem ungebundenem Atom (z. B. bei einem Gas) bestimmen die diskreten Energieniveaus der Hüllenelektronen die Energie, die notwendig ist, um ein Elektron-Ion-Paar zu erzeugen. Diese Energie liegt typischerweise zwischen 20 und 30 eV. In einem Festkörper mit n Atomen sind dagegen die Atome gebunden und haben kurze interatomare Abstände, so daß sich diese n -fach entarteten Zustände in n nahe beieinanderliegende Energieniveaus (Bänder) aufteilen.

Das Band, welches von den Valenzelektronen besetzt ist, ist das Valenzband. Das energetisch niedrigste Band, in dem im Grundzustand ($T = 0$ K) noch unbesetzte Zustände vorhanden sind, ist das Leitungsband. Die Energieniveaus des Leitungsbandes befinden sich oberhalb derer des Valenzbandes. Zwischen den beiden Bändern befindet sich bei Halbleitern und Isolatoren eine Energielücke, so daß in einem idealen Halbleiter (d. h. ohne Defekte und Fremdatome) keine Zustände innerhalb dieser Lücke von Elektronen besetzt werden können. Bei $T = 0$ ist in solch einem Kristall das Valenzband vollständig gefüllt, wohingegen im Leitungsband alle Zustände unbesetzt sind. Die Bandlücke von Silizium beträgt bei

¹In der Literatur und auch in dieser Arbeit ist in diesem Zusammenhang häufig von der „Entstehung“ oder „Erzeugung“ von Elektronen (bzw. Elektron-Loch-Paaren) die Rede. Gemeint ist damit, daß gebundene Elektronen von Valenz- sehr hoch in das Leitungsband gehoben werden und somit frei driften, diffundieren und weitere Ionisationsprozesse auslösen können.

Raumtemperatur 1.13 eV [Thu75], die von Germanium 0.67 eV [Bea84].

Ein Isolator unterscheidet sich nur insofern von einem Halbleiter, als daß die Bandlücke so groß ist, daß die Besetzungswahrscheinlichkeit von Zuständen im Leitungsband praktisch null ist, da auch bei Raumtemperatur keine Elektronen aus dem Valenzband in das Leitungsband angeregt werden können. Die Bandlückenenergie des Isolators Siliziumdioxid beträgt 8.8 eV [Die96].

Man unterscheidet zwischen intrinsischen und extrinsischen (dotierten) Halbleitern. Ein idealer intrinsischer Halbleiter besitzt keine Störstellen oder Verunreinigungen. Ein realer intrinsischer Halbleiter besitzt nur sehr wenige Störstellen verglichen mit der Anzahl der thermisch generierten Elektronen und Löcher. Intrinsische Halbleiter werden nur selten benutzt, da es schwierig ist, die Materialien mit einer genügend großen Reinheit herzustellen. Stattdessen verändert man absichtlich die Eigenschaften des Materials, indem man Verunreinigungen hinzufügt und damit gezielt Energieniveaus in der Bandlücke erzeugt (siehe nächster Abschnitt). Ausnahmen sind quasi-intrinsische Si(Li)-Detektoren, in welchen Lithiumionen die Verunreinigungen kompensieren (siehe Abschnitt 2.4.1) sowie hochreine Germaniumdetektoren (HPGe), die häufig in der Gammaskopie eingesetzt werden.

2.1.2 Dotierte Halbleiter

Reale Halbleiter besitzen Energieniveaus in der Bandlücke (Donator- und Akzeptorniveaus). Ihre Eigenschaften können durch Dotierung gezielt beeinflußt werden. Bei einem dotierten Halbleiter (Störstellenhalbleiter) wird der Grundsubstanz ein geringer Anteil bestimmter Fremdatome zugesetzt. Dotiert man (das vierwertige) Silizium mit einem fünfwertigen Element (beim SDD wird Phosphor verwendet), so ersetzt dieses Element an einigen Gitterplätzen Siliziumatome. Vier der fünf Valenzelektronen nehmen an den kovalenten Bindungen zu den vier benachbarten Si-Atomen teil. Das fünfte Valenzelektron ist indessen nur sehr schwach gebunden, und es entstehen dicht unterhalb des Leitungsbandes diskrete Energieniveaus (Donator-Niveaus). Die Elektronen aus diesen Niveaus können leicht in das Leitungsband angeregt werden und tragen so zur elektrischen Leitfähigkeit bei. Diesen Halbleitertyp nennt man n-Halbleiter, da nahezu alle Ladungsträger negativ sind.

Dotiert man Silizium mit dreiwertigen Atomen (bei SDDs mit Bor), so bilden sich dementsprechend Akzeptorniveaus oberhalb der Valenzbandkante. Die Akzeptoren nehmen Elektronen aus dem gefüllten Valenzband auf, wenn diese thermisch angeregt werden. Es entsteht ein p-Halbleiter, da sich die im Valenzband entstehenden Löcher wie positive Ladungsträger verhalten. Erst durch die Dotierung von Halbleitern und die Kombination verschieden dotierter Gebiete lassen sich Bauelemente wie Dioden und Transistoren herstellen. P-n-Übergänge bilden die Hauptbestandteile unzähliger Bauelemente wie Halbleiterdetektoren, Gleichrichter, Verstärker und Solarzellen.

2.1.3 Der p-n-Übergang

Die wichtigste Eigenschaft des p-n-Übergangs ist seine gleichrichtende Funktion: Je nachdem, welche Polarität die am p-n-Übergang anliegende Spannung hat, leitet

oder sperrt diese Struktur den Strom. Die meisten p-n-Übergänge im SDD werden in Sperrichtung betrieben.

Bringt man zwei Gebiete entgegengesetzter Dotierung zusammen, so beginnt ein Diffusionsstrom zu fließen. Die Ursache dieses Stromes ist der Gradient in der Elektronen- und Löcherkonzentration der dotierten Gebiete. Elektronen fließen aus dem n- in das p-Gebiet und hinterlassen positiv geladene Ionenrümpfe. Entsprechendes gilt für Löcher aus dem p-Gebiet. Die unbeweglichen, zurückgebliebenen Ionenrümpfe erzeugen ein elektrisches Feld (bzw. ein Potential), das der Diffusion der Elektronen und Löcher entgegenwirkt (Potentialbarriere, s. u.). Im thermischen Gleichgewicht stellt sich ein Zustand ein, bei dem das Gebiet um den p-n-Übergang frei von beweglichen Ladungsträgern ist. Dieses Gebiet ist die Verarmungs- oder Depletionszone. Wegen der dort vorhandenen ionisierten Dotierungsatome wird sie auch Raumladungszone genannt. Das Potential, welches der Diffusion entgegenwirkt, heißt Diffusionspotential und hängt von den Dotierungen und der Temperatur ab (siehe nächster Abschnitt).

Im Gleichgewichtszustand fließt wegen der Potentialbarriere in der Raumladungszone kein Nettostrom. Das Potential stellt für die Diffusion der Majoritätsladungsträger eine Barriere dar. Hochenergetische Majoritätsladungsträger können zwar dennoch durch die Barriere diffundieren (Löcher zur n-Region und Elektronen zur p-Region), die Driftströme der Minoritätsladungsträger in der Raumladungszone gleichen aber diese Ströme aus.

2.1.4 Die Raumladungszone des abrupten p-n-Übergangs

Betrachten wir zunächst einen abrupten p-n-Übergang, an dem keine externe Spannung anliegt. Dort diffundieren Elektronen in das p-Gebiet und Löcher in das n-Gebiet. Im p-Gebiet entsteht deshalb ein Überschuß negativer Ladung und im n-Gebiet ein Überschuß positiver Ladung. Alle Ladungsträger werden also im Grenzgebiet zwischen der p- und n-dotierten Schicht getrennt. Aus dieser Ladungsträgertrennung ergibt sich eine Potentialdifferenz U_D , die man Diffusionsspannung oder *built-in voltage* nennt.

$$U_D = \frac{k_B T}{e} \ln \frac{N_A N_D}{n_i^2} \quad (2.1)$$

$k_B = 1.381 \cdot 10^{-23}$ J/K ist die Boltzmannkonstante, T die Temperatur, $e = 1.602 \cdot 10^{-19}$ C die Elementarladung, N_A die Akzeptor-, N_D die Donator- und n_i die intrinsische Elektronenkonzentration ($= 1.45 \cdot 10^{10}$ cm⁻³ für Si).

Für $T = 273$ K und eine hoch dotierte p-Implantation ($N_A \approx 10^{19}$ cm⁻³) im niedrig dotierten Siliziumsubstrat ($N_D = 10^{12}$ cm⁻³) ergibt sich somit eine Diffusionsspannung von 0.63 V. Für typische Konzentrationen ist U_D in Abbildung 2.1 dargestellt. Das maximale elektrische Feld \mathcal{E}_{\max} beträgt im Grenzfall des abrupten p-n-Übergangs

$$\mathcal{E}_{\max} = \frac{e N_D z_d}{\epsilon_r \epsilon_0} = \sqrt{\frac{2e}{\epsilon_r \epsilon_0} \frac{N_A N_D}{N_A + N_D} U_D}. \quad (2.2)$$

z_d ist die Dicke der Raumladungszone (Gleichung 2.9), $\epsilon_0 = 8.8542 \cdot 10^{-12}$ F/m ist elektrische Feldkonstante und ϵ_r die Dielektrizitätszahl (für Silizium = 11.9).

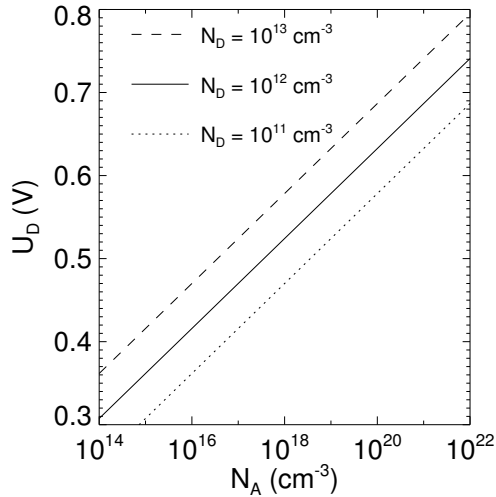


Abbildung 2.1: Diffusionsspannung U_D des abrupten p-n-Übergangs für verschiedene Akzeptor- und Donatorkonzentrationen nach Gleichung 2.1.

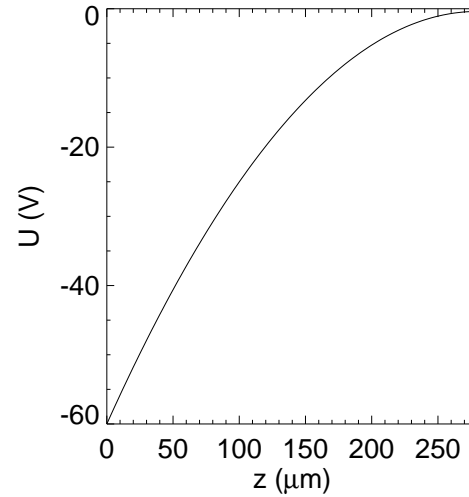


Abbildung 2.2: Potentialverteilung am abrupten p-n-Übergang (Gleichung 2.3) bei vollständiger Verarmung und einer Grunddotierung von $10^{12}/\text{cm}^3$.

Legt man eine der Diffusionsspannung gleichgerichtete Spannung am p-n-Übergang an, so vergrößert sich die Raumladungszone. Um z. B. einen $280\ \mu\text{m}$ dicken, hochreinen n-Silizium-Wafer mit einer Dotierung von $N_D = 10^{12}\ \text{cm}^{-3}$ (das entspricht einem spezifischen Widerstand von ca. $4\ \text{k}\Omega\ \text{cm}$) zu verarmen, benötigt man am $\text{p}^+\text{-n}^-$ -Übergang² eine Spannung von ca. $-70\ \text{V}$ (Gleichung 2.9). Das Prinzip der Seitwärtsdepletion bietet die Möglichkeit, den gesamten Wafer mit einer wesentlich niedrigeren Spannung zu verarmen (siehe Abschnitt 2.1.11).

Für die oben genannten Konzentrationen und vollständige Verarmung ($z_d = 280\ \mu\text{m}$) ist $\mathcal{E}_{\text{max}} = 4.26\ \text{kV}/\text{cm}$. Die Potentialverteilung des abrupten p-n-Übergangs beträgt dann

$$U(z) = \mathcal{E}_{\text{max}} \left(z - \frac{z^2}{2z_d} \right), \quad (2.3)$$

mit der Tiefe der Raumladungszone z_d aus Gleichung 2.9. Abbildung 2.2 zeigt die Potentialverteilung in z -Richtung bei vollständiger Verarmung und einer Grunddotierung von $10^{12}/\text{cm}^3$ für eine typische Detektorkonfiguration. Die Elektronen driften zur Detektorvorderseite bei $z = 280\ \mu\text{m}$, die Löcher zur Rückseite (Strahleneintrittsseite) bei $z = 0\ \mu\text{m}$.

Erst aufgrund der Raumladungszone ist es möglich, die von der Strahlung angeregten Elektronen zu messen, da in einem nicht-verarmten Halbleiter der Strom der thermisch generierten Elektronen denjenigen Elektronenstrom überdeckt, der durch die Ionisierung entsteht. Weiterhin driften die angeregten Elektronen erst aufgrund des elektrischen Feldes vom Erzeugungsort zur Anode.

²Die hochgestellten + und - Zeichen kennzeichnen starke bzw. schwache Dotierungen.

2.1.5 Die Potentialverteilung

Die Ausgangspunkte für die Berechnung der Verteilung der elektrischen Potentiale U und Felder \mathcal{E} sind die Poisson-Gleichung [Max91, Jac75]

$$\nabla^2 U = \nabla \mathcal{E} = \frac{\rho}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (2.4)$$

und die Kontinuitätsgleichungen für Elektronen und Löcher

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \mu_n n \nabla \mathcal{E} + D_n \nabla^2 n + G_n - R_n, \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\mu_p p \nabla \mathcal{E} + D_p \nabla^2 p + G_p - R_p. \quad (2.6)$$

n und p sind die Elektronen- und Löcherkonzentrationen, $\mu_{n,p}$ die Mobilitäten, $D_{n,p}$ die Diffusionskonstanten, $G_{n,p}$ die Generations- und $R_{n,p}$ die Rekombinationsraten für Elektronen (n) und Löcher (p). Die Ladungsträgerdichte ρ ist durch e , n und p sowie die Akzeptor- und Donatorkonzentrationen N_A und N_D gegeben (unter Vernachlässigung eventueller geladener Defekte).

$$\rho = e(p - n + N_D - N_A) \quad (2.7)$$

Für die Berechnung der Felder und Potentiale in Abhängigkeit von der Tiefe des Detektors z genügt es oft, die Poisson-Gleichung in einer Dimension zu lösen. Aus den Gleichungen 2.4 und 2.7 ergibt sich dann

$$\frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial z} = \frac{e}{\epsilon_r \epsilon_0} (p(z) - n(z) + N_D(z) - N_A(z)). \quad (2.8)$$

Zur Berechnung der zweidimensionalen Potentialverteilung und des Ladungstransports müssen die Gleichungen 2.4 bis 2.6 numerisch gelöst werden. Seit den erstmaligen numerischen Behandlungen der ein- [Gum64] und zweidimensionalen [Slo69] Drift-Diffusionsgleichungen existieren zahlreiche Methoden und Programme zur Bauelementesimulation [Eng77, Sel84]. Zur numerischen Lösung der Poisson- und Kontinuitätsgleichungen wird in dieser Arbeit der Bauelementesimulator TeSCA (Two-Dimensional Semiconductor Analysis Package) verwendet [Gaj99]. Er basiert auf dem grundlegenden Modell für Ladungstransport in Halbleitern von VAN ROOSBROECK [Roo50, Moc74, Moc83]. Dieses Modell beschreibt die Drift- und Diffusionsvorgänge von Elektronen und Löchern durch die Kontinuitätsgleichung in selbstkonsistenten elektrostatischen Potentialen, welche durch die Poisson-Gleichung gegeben sind [Gaj93].

2.1.6 Nachweis von Strahlung und Teilchen mit Halbleiterdetektoren

Der Einsatz von Halbleiterdetektoren bestimmt sich nach ihrer Sensitivität für die verschiedenen Formen von Strahlung und Teilchen. Deshalb werden im folgenden kurz die verschiedenen Strahlungsformen diskutiert, die Halbleiterdetektoren nachweisen können, sowie ihre Auswirkungen auf die Art der dabei erzeugten Ionisationen [Lut99]. Ob und wie viele Elektron-Loch-Paare von einfallender Strahlung generiert werden, hängt maßgeblich von der Bandlückenenergie E_G ab (siehe

Abschnitt 2.1.1). Je nach Art der ionisierenden Strahlung entstehen die im Detektor erzeugten Ladungswolken auf unterschiedliche Weise und mit unterschiedlicher Charakteristik. Geladene Teilchen erzeugen entlang ihrer Bahn stets eine Ionisationsspur, während Photonen nur an einem einzigen Punkt wechselwirken.

Sichtbares und ultraviolettes Licht. Ist die Energie E_0 von Licht im sichtbaren bzw. nahen UV-Bereich ausreichend, um ein Elektron-Loch-Paar zu erzeugen (d. h. $E_0 \geq E_G$, für Silizium also für $\lambda < 1.1 \mu\text{m}$), hebt ein einfallendes Photon ein Elektron vom Valenz- in das Leitungsband. Elektronen und Löcher bewegen sich dann zu den jeweiligen Bandlückenkanten hin, wobei Gitterschwingungen und niederenergetische Photonen entstehen. Das Photon wird nahe der Oberfläche erzeugt, d. h. typischerweise innerhalb eines Bruchteils eines Mikrometers.

VUV-, Röntgen- und Gammastrahlung. Auch bei VUV-³, Röntgen- und Gammastrahlung wird zunächst ein primäres Elektron vom Valenz- in das Leitungsband gehoben. Seine kinetische Energie ist sehr hoch, weshalb in Folge zahlreiche sekundären Elektronen und Phononen entstehen. Die Erzeugung von Sekundärteilchen ist ein statistischer Prozeß. Bei gleicher Anfangsenergie entsteht deshalb nicht stets die gleiche Zahl von Ladungsträgern. Die Reichweite der Sekundärteilchen ist relativ kurz. Verglichen mit den Ionisationsprozessen, die durch geladene Teilchen hervorgerufen werden, werden die Ladungsträger in einem sehr kleinen Raumbereich generiert. Der Nachweis von Röntgenstrahlung ist das wichtigste Anwendungsgebiet des SDD, und die genauen Erzeugungsmechanismen sind in dieser Arbeit von zentraler Bedeutung. Deshalb wird in Kapitel 4.1 auf die Entstehung der Ladungswolke im Detail eingegangen. Wegen der sehr viel höheren Energie von Gammastrahlung (und damit verringerter Absorptionswahrscheinlichkeit) müssen für deren Nachweis möglichst dicke Detektoren und/oder Halbleiter mit hoher Kernladungszahl (z. B. Ge oder GaAs) verwendet werden.

Alpha-Strahlung. Die Eindringtiefe von α -Teilchen ist mit ca. $25 \mu\text{m}$ relativ gering, da ihre Ionisationsfähigkeit sehr hoch ist. Nach der Bethe-Bloch-Formel [Leo94] hängt der Ionisationsverlust geladener Teilchen von Z/v^2 ab, nimmt also mit bei höherer Kernladungszahl Z und kleinerer Geschwindigkeit v zu. Die Dichte der Elektron-Loch-Paare nimmt deshalb mit der Tiefe zu, denn beim Eindringen nimmt die Geschwindigkeit des α -Teilchens ab. Sie hat ein deutliches Maximum am Endpunkt (Bragg-Kurve).

³Hochenergetische UV-Strahlung nennt man Vakuum-UV (VUV), da ihre Reichweite unter Atmosphärendruck so gering ist, daß entsprechende Experimente im Vakuum durchgeführt werden müssen. Der VUV-Wellenlängen- und Energiebereich ist nicht scharf gegenüber kurzwelliger UV-Strahlung und weicher Röntgenstrahlung abgegrenzt. In der klassischen Optik liegt der VUV-Bereich bei Wellenlängen zwischen 300 und 100 nm, die Energien also zwischen 4 und 12 eV. In den letzten Jahren wurde der Energiebereich von Freie-Elektronen-Lasern erheblich erweitert. Deshalb ist in diesem Anwendungsumfeld noch bei Energien bis 200 eV von VUV- oder extremem UV und nicht von Röntgenstrahlung die Rede.

Beta-Strahlung. Elektronen haben im Vergleich zu α -Teilchen eine um Größenordnungen geringere Masse und eine halb so große Ladung. Ihre Ionisationsfähigkeit ist also sehr viel geringer als die von α -Strahlen. Relativistische Beta-Strahlung dringt deshalb deutlich tiefer in den Detektor ein oder durchdringt ihn vollständig und erzeugt entlang ihrer Bahn eine gleichmäßige Dichte von Elektron-Loch-Paaren. Ist ihre Energie größtenteils abgegeben, so entsteht – ähnlich wie bei α -Teilchen – eine höhere Ionisierung am Endpunkt ihrer Bahn.

Hochenergetische geladene Teilchen. Diese Teilchen (z. B. π^\pm , K^\pm) durchdringen den Detektor mit annähernd konstanter Geschwindigkeit und erzeugen Elektron-Loch-Paare mit einer gleichmäßigen Dichte entlang ihrer Bahn. Diese Dichte ist annähernd unabhängig von der Energie der Teilchen und proportional zum Quadrat ihrer elektrischen Ladung.

Nichtrelativistische geladene Teilchen. Protonen und Kerne erzeugen eine Ionisationsdichte, die umgekehrt proportional zu ihrer Energie ist und proportional zum Quadrat ihrer Ladung.

Andere Arten von Teilchen. Neutronen oder sehr hochenergetische Protonen können ebenfalls in Halbleiterdetektoren Signale erzeugen, indem sie z. B. an einem Kern ruckstoßen oder e^+e^- -Paare bilden, die wiederum Elektron-Loch-Paare erzeugen können. Allerdings ist die Wahrscheinlichkeit dafür gering. Aus diesem Grund sind Halbleiterdetektoren zum Nachweis dieser Teilchen weniger geeignet.

2.1.7 Pin-Dioden

Die einfachste Struktur für Halbleiterdetektoren ist die in Sperrichtung betriebene pin-Diode (*p*-Kontakt – *i*ntrinsisch – *n*-Kontakt). Der Aufbau einer pin-Diode ist schematisch in Abbildung 2.3 dargestellt. Sie besteht in diesem Fall aus n^- -Grundmaterial, das auf der einen Seite mit einer p^+ - auf der anderen Seite mit einer n^+ -Implantation versehen ist (es ist genauso möglich, p^- -Substrate zu verwenden, n^- -Material ist jedoch in höherer Reinheit erhältlich). Zur Kontaktierung sind beide Implantationen mit Aluminiumbeschichtungen versehen. Eine Sperrspannung am p^+ -Kontakt erzeugt die Raumladungszone. Das verarmte n^- -Substrat verhält sich dann wie intrinsisches Silizium. In der Regel wählt man die Spannung so, daß der Wafer über seine gesamte Tiefe verarmt ist. Dadurch wird die Kapazität minimal und man erhält ein großes strahlungsempfindliches Volumen. Die Tiefe z_d der Raumladungszone bei gegebener Sperrspannung U_{bias} ist durch folgende Gleichung gegeben [Lut99].

$$z_d = \sqrt{\frac{2 \epsilon_0 \epsilon_r U_{\text{bias}}}{e} \left(\frac{N_A + N_D}{N_A N_D} \right)} \approx \sqrt{\frac{2 \epsilon_0 \epsilon_r U_{\text{bias}}}{e N_D}} \quad (2.9)$$

Dabei ist $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$ F/m die elektrische Feldkonstante, ϵ_r die Dielektrizitätszahl ($\epsilon_r = 11.9$ für Si) und e die Elementarladung. Die Näherung auf der rechten Seite gilt für den Fall, daß die Akzeptorkonzentration N_A in der *p*-Dotierung sehr

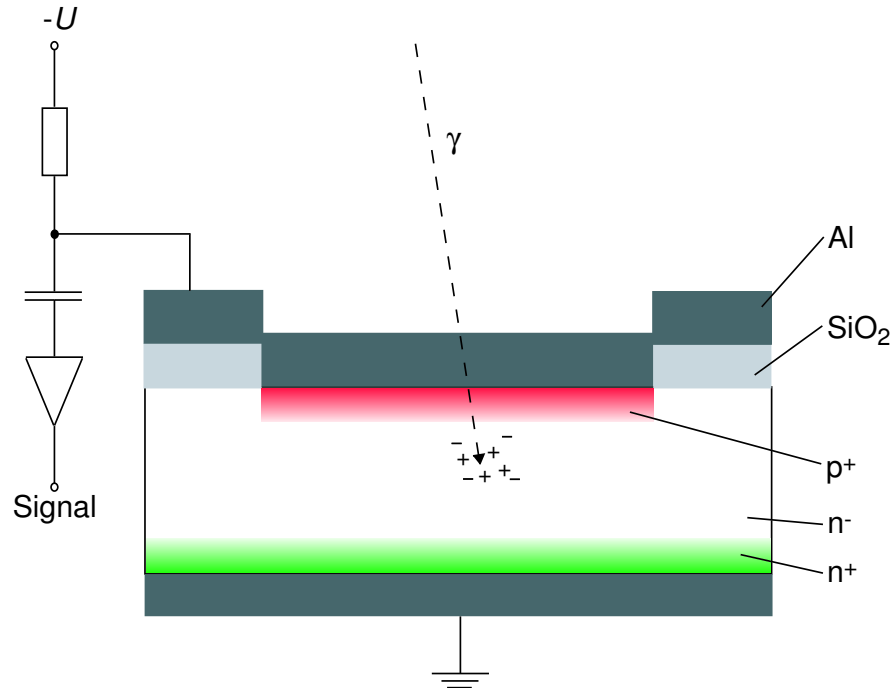


Abbildung 2.3: Schema einer pin-Diode: Das n^- -Substrat ist auf der einen Seite p^+ -, auf der anderen Seite n^+ -dotiert. Beide Kontakte sind metallisiert. Die negative Depletionsspannung wird auf der Strahleneintrittsseite angelegt und die generierten Löcher von dieser Seite aus ausgelesen.

viel größer als die Donatorkonzentration N_D in der n -Dotierung ist, was auf typische Halbleiterdetektoren zutrifft. Die Donatorkonzentration N_D des Substrats liegt typischerweise bei 10^{12} cm^{-3} , die Wafer-Dicke beträgt $280 \mu\text{m}$. Zur vollständigen Verarmung von einer Seite aus benötigt man demnach -70 V .

Die von der Strahlung erzeugten Elektron-Loch-Paare werden vom elektrischen Feld getrennt. Die Elektronen driften zum positivsten Potential, die Löcher zum negativsten. Bei der in Abbildung 2.3 gezeigten Konfiguration werden also die Signale der Löcher nachgewiesen.

Die Kapazität von pin-Dioden und vielen anderen Halbleiterdetektoren hat eine vergleichbare funktionelle Abhängigkeit vom Volumen wie die Kapazität von Plattenkondensatoren. Sie hängt von der Fläche A und vom Plattenabstand d ab.

$$C = \epsilon_r \epsilon_0 \frac{A}{d} \quad (2.10)$$

Die Fläche entspricht der aktiven Fläche des Detektors, und der Plattenabstand entspricht der Tiefe der Raumladungszone, bei vollständig verarmten Detektoren also der Chip-Dicke. Eine typische pin-Diode mit einer Fläche von 5 mm^2 und einer Dicke von 0.5 mm hat nach Gleichung 2.10 eine Kapazität von 1 pF .

Die an der Auslesestruktur meßbare Spannungsänderung beträgt

$$\Delta U = \frac{\Delta q}{C}, \quad (2.11)$$

wobei Δq die Ladung der Elektronen bzw. Löcher ist und C die Detektorkapazität. Die Spannungsdifferenz ΔU sollte möglichst groß sein, damit das Signal-Rausch-Verhältnis groß ist. Die Kapazität C sollte deshalb sehr klein sein. Deshalb miniert man bei konventionell aufgebauten Halbleiterdetektoren (z. B. Si(Li)s und pin-Dioden) entweder die sensitive Fläche oder erhöht die sensitive Dicke, um das Rauschen klein zu halten.

2.1.8 Erzeugung der Elektronen

Die Erzeugung der Ladungsträger wird detailliert in Kapitel 4.1 behandelt. Zum besseren Verständnis der folgenden Abschnitte wird im folgenden lediglich ein kurzer Überblick gegeben.

Ein Röntgenquant, das in das Halbleitermaterial eindringt, kann mit seiner Energie aufgrund des Photoeffektes ein Elektron vom Valenz- in einen unbesetzten Zustand des Leitungsbandes heben. Bei Röntgenstrahlung ist die Energie stets hoch genug, um die Bandlücke zu überwinden. Im Valenzband bleibt ein Loch zurück. Das elektrische Feld trennt daraufhin die Elektronen von den Löchern, so daß diese nicht rekombinieren. Im Vergleich zur Bandlücke ist die Energie des Elektrons so hoch, daß es wie ein Elektron behandelt werden kann, das – ähnlich wie in einem Gas – durch Ionisierung erzeugt wurde. Dieses primäre Photoelektron regt über Stoßprozesse weitere sekundäre Elektronen an. Es entstehen zahlreiche Elektron-Loch-Paare, welche wiederum in verschiedenen Prozessen Energie übertragen. Man spricht deshalb von einem Kaskadenprozeß, und die primären Elektronen werden auch „Kaskaden-Elektronen“ genannt [Dia91, San91].

Die Anzahl und Energieverteilung der von hochenergetischen Elektronen erzeugten Ladungsträger wird von der Theorie der Ionisationsstatistik beschrieben. FANO stellte als erster eine solche Theorie für Gase auf [Fan46, Fan47]. SHOCKLEY übertrug FANOs Theorie auf die Verhältnisse in Halbleitern und machte somit die Ionisationsstatistik in Halbleiterdetektoren analytisch darstellbar [Sho61]. Sie ist der Ausgangspunkt zahlreicher theoretischer Arbeiten zur Theorie der Ionisationsstatistik [Alk67, Kle68a, Kle68b, Zul70, Zul71, Dru71]. Eine übersichtliche Zusammenfassung der von SHOCKLEY modifizierten FANO-Theorie der Ionisationsstatistik und ihrer Erweiterungen [Ali75, Ali80, Ali83] findet sich in [Lec98].

Die Absorption ionisierender Strahlung im Detektormedium führt zu freien Ladungsträgern mit hoher kinetischer Energie, also einem thermischen Nichtgleichgewichtszustand. Diese „heißen“ Ladungsträger geben ihre kinetische Energie in unterschiedlichen Stoßprozessen ab. Jeder Stoß erzeugt entweder weitere Ladungsträgerpaare oder es wird Energie durch nicht-ionisierende Prozesse übertragen (Anregung von Phononen).

Bei einem Ionisationsstoß wird die anfängliche kinetische Energie des Ladungsträgers E auf das Elektron-Loch-Paar übertragen, wobei die Bandlückenenergie E_G überwunden werden muß.

$$E - E_G = E' + E_e + E_h \quad (2.12)$$

E' ist die kinetische Energie der Ladungsträger nach dem Stoß, und $E_{e,h}$ sind die Energien, die zur Erzeugung des Elektron-Loch-Paares aufgebracht werden müs-

sen. Unterhalb einer Schwellenenergie E_{thr} reicht die Energie nicht mehr aus, um ein Elektron-Loch-Paar zu erzeugen, und die Elektronen und Löcher können ihre Energie ausschließlich in nicht-ionisierenden Stößen abgeben. Diesen Prozeß nennt man Thermalisierung.

Im *simple-two-band-Modell*⁴ und unter der Annahme, daß die thermalisierten Elektronen jedes energetisch erlaubte Niveau im k -Raum mit gleicher Wahrscheinlichkeit besetzen [Ali80, Lec98], läßt sich die Schwellenenergie *eines* Teilchens aus der Energie- und Impulserhaltung berechnen [Ali75] und ist

$$E_{\text{thr}} = \frac{3}{2}E_G .$$

Die Schwellenenergie E_{thr} darf jedoch nicht mit der Thermalisierungsenergie $\langle E_t \rangle$ verwechselt werden: Die Thermalisierungsenergie ist die mittlere kinetische Gesamtrestenergie eines Ladungsträgerpaars, welches durch Stoßprozesse unter die Schwellenenergie E_{thr} gestreut wurde. Sie ist mit der Schwellenenergie und der Bandlückenenergie wie folgt verknüpft:

$$\langle E_t \rangle = \frac{6}{5}E_{\text{thr}} = \frac{9}{5}E_G \quad (2.13)$$

Da $\langle E_t \rangle$ die Gesamtenergie eines Paares ist, kann sie größer als E_{thr} sein.

Bei einem nicht-ionisierenden Stoß wird ein Phonon angeregt. Die Phononenenergie $\hbar\omega_0$ liegt in der Größenordnung der thermischen Energie $k_B T$, also 25 meV bei Raumtemperatur. Deshalb wird eine sehr kleine Energie übertragen.

$$E' = E - \hbar\omega_0 \quad (2.14)$$

Wie in den Kapiteln 4 und 6 gezeigt wird, haben die thermalisierten Elektronen einen bedeutenden Anteil an der Erzeugung des Untergrunds.

Die Elektron-Loch-Paar-Erzeugungsenergie w ist die Energie, die im Durchschnitt notwendig ist, um mit Röntgenstrahlung ein Elektron-Loch-Paar zu erzeugen. Sie hängt von der Größe der Bandlücke E_G ab, die wiederum schwach von der Temperatur abhängt [Thu75].

$$E_G(T) = 1.17 \text{ eV} - \frac{4.73 \cdot 10^{-4} \text{ eV K}^{-1} T^2}{636 \text{ K} + T} \quad (2.15)$$

Im Temperaturbereich zwischen -20°C und $+20^\circ\text{C}$ ändert sich die Bandlückenenergie um lediglich 0.9%, kann also für den in dieser Arbeit relevanten Temperaturbereich als konstant betrachtet werden.

Die Elektron-Loch-Paar-Erzeugungsenergie von Silizium wurde experimentell zu 3.65 eV bei $T = 300 \text{ K}$ bestimmt [Peh68, Key71]. Sie ist größer als die Bandlücke, da bei der Abregung der angeregten Elektronen nicht nur weitere Atome ionisiert werden (und dadurch wiederum energetische Elektronen frei werden), sondern auch mittels Phononenstreuung Energie auf das Kristallgitter übertragen wird.

⁴Im *simple-two-band-Modell* werden Leitungs- und Valenzband durch parabolische Bänder gleicher Krümmung beschrieben. Elektronen und Löcher verhalten sich wie freie Teilchen mit gleicher Masse [Lec98].

Die mittlere Anzahl $\langle n \rangle$ der im Halbleiter erzeugten Elektron-Loch-Paare ist proportional zur Energie E_0 und umgekehrt proportional zur Elektron-Loch-Paar-Erzeugungsenergie w [Fan46].

$$\langle n \rangle = \frac{E_0}{w} \quad (2.16)$$

Da w im Röntgenbereich nicht von der Energie abhängt [Sch97, Sch98], ist die Anzahl der im Mittel erzeugten Ladungsträger $\langle n \rangle$ linear proportional zur ursprünglichen Energie des Röntgenquants.

Die mittlere quadratische Abweichung der Anzahl der erzeugten Ladungsträgerpaare geteilt durch die mittlere Anzahl der erzeugten Ladungsträgerpaare $\langle n \rangle$ ist der sogenannte Fano-Faktor.

$$F = \frac{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2}{\langle n \rangle} \quad (2.17)$$

Die experimentell ermittelten Werte des Fano-Faktors von Silizium schwanken sehr stark und liegen zwischen 0.084 [Ebe70, Zul70] und 0.16 [Mey65, Yam79, Zul68]. In dieser Arbeit wird mit $F = 0.115$ ein Mittelwert neuerer Publikationen [Ali80, Ali83, Lec98] verwendet. Verschiedene theoretisch und experimentell ermittelten Werte für w und F sind in [Lec98, Kapitel 3] und [Kno89, Tabelle 11-1] sowie [Sch00] zusammengestellt. Detaillierte theoretische und experimentelle Untersuchungen zum Fano-Faktor und zur Paar-Erzeugungsenergie wurden von SCHOLZE durchgeführt [Sch97].

Die Bedeutung der Größen w und F für die Spektroskopie wird im folgenden Abschnitt erläutert.

2.1.9 Breite der Verteilung

Abgesehen vom in der Regel kleinen Untergrund erzeugt die einfallende Strahlung mit der Energie E_0 in der Pulshöhenverteilung (Spektrum) eine Gaußverteilung G mit der Höhe I und der Breite σ .

$$G(E) = I \exp\left(-\frac{(E - E_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2.18)$$

Diese Breite σ (die Energieauflösung) ist die wichtigste Kenngröße bei der Charakterisierung von Detektoren. Damit nahe beieinanderliegende Linien noch getrennt werden können, muß die Breite der Verteilung möglichst klein sein (man spricht auch von „hoher“ Energieauflösung, meint aber ein hohes Auflösungsvermögen, also ein kleines σ).

Die Gesamtbreite σ dieser Gaußverteilung setzt sich aus elektronischem Rauschen σ_{el} und den statistischen Fluktuationen σ_{Fano} der Ladungsträgeranzahl zusammen, die sich aus der Ionisationsstatistik ergeben (Abschnitt 2.1.8). Die Varianz σ^2 der gesamten Breite ist die Summe aus der Varianz des elektronischen Rauschens und der statistischen Fluktuationen bei der Ladungsträgererzeugung.

$$\sigma^2 = \sigma_{\text{el}}^2 + \sigma_{\text{Fano}}^2 \quad (2.19)$$

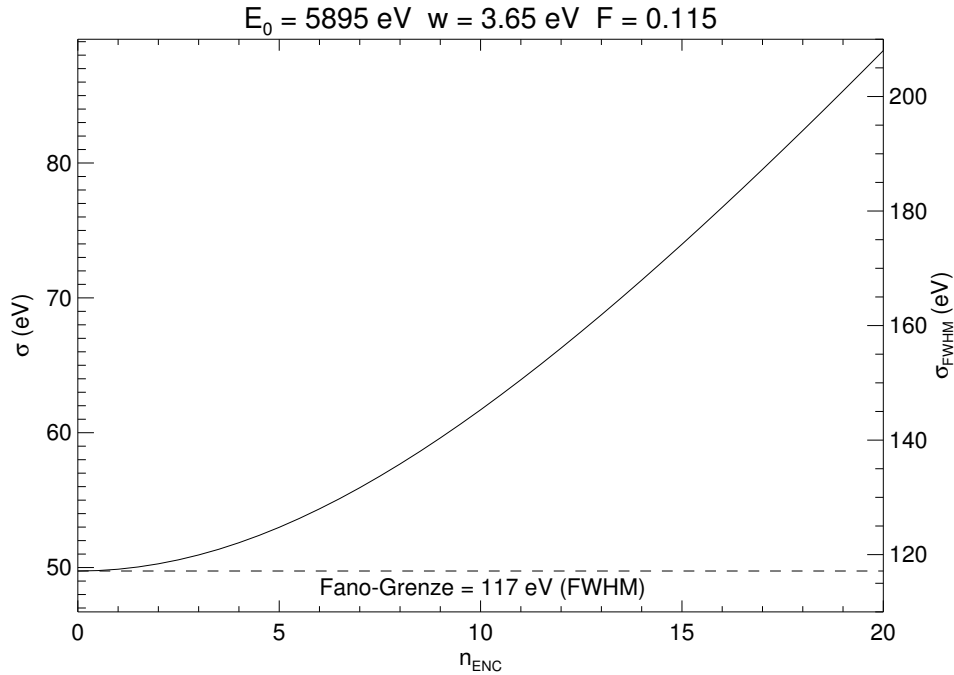


Abbildung 2.4: Energieauflösung (linke Achse σ , rechte Achse σ_{FWHM}) in Abhängigkeit von der äquivalenten Rauschladung n_{ENC} bei $E_0 = 5.898 \text{ keV}$. Die Fano-Statistik bildet die untere Grenze für die Energieauflösung. Sehr gute Detektorensysteme haben eine Auflösung $\leq 125 \text{ eV}$ (FWHM).

Das elektronische Rauschen wird in Kapitel 3 untersucht. Statt der Breite des elektronischen Rauschens (in eV) wird häufig die dimensionslose äquivalente Rauschladung n_{ENC} angegeben, die wie folgt mit dem Rauschen zusammenhängt

$$n_{\text{ENC}} = \frac{\sigma_{\text{el}}}{w} \quad (2.20)$$

Eine exakte Definition von n_{ENC} wird in Abschnitt 3.1 gegeben.

Die Peak-Breite, die sich aus der Fano-Statistik ergibt, hängt von der Energie E_0 des Röntgenquants, der Elektron-Loch-Paar-Erzeugungenergie w und dem Fano-Faktor F ab.

$$\sigma_{\text{Fano}} = \sqrt{FwE_0} \quad (2.21)$$

Diese sogenannte Fano-Grenze wird erreicht, wenn das elektronische Rauschen n_{ENC} null ist, also $\sigma = \sigma_{\text{Fano}}$. Die Energieauflösung σ von Halbleiterdetektoren beträgt nach den Gleichungen 2.19 bis 2.21

$$\sigma = w \sqrt{n_{\text{ENC}}^2 + \frac{FE_0}{w}}. \quad (2.22)$$

Daraus wird deutlich, daß für eine gute (d. h. kleine) Energieauflösung, die Elektron-Loch-Paar-Erzeugungenergie w , das Rauschen n_{ENC} und der Fano-Faktor F klein sein müssen.

Da nach Gleichung 2.16 E_0 proportional zu $\langle n \rangle$ ist und nach Gleichung 2.22 σ proportional zu $\sqrt{\langle n \rangle}$, erhält man eine um so kleinere relative Breite

$$\frac{\sigma}{E_0} \propto \frac{1}{\sqrt{\langle n \rangle}},$$

je höher die Anzahl der erzeugten Ladungsträger ist. Wegen der deutlich niedrigeren Paar-Erzeugungsenergie ist die Anzahl der generierten Ladungsträger größer und somit die Energieauflösung von Halbleiterdetektoren wesentlich besser als bei Gasdetektoren (vgl. Abschnitt 2.4.2). Bei Halbleiterdetektoren ist $F \approx 0.1$, während bei Gaszählern $F \approx 1$ ist. Da zudem die Paar-Erzeugungsenergie um etwa eine Größenordnung kleiner als die Ionisierungsenergie von ungebundenen Atomen im Gas ist, ergibt sich nach Gleichung 2.21 für Halbleiterdetektoren eine um den Faktor $\sqrt{0.1 \cdot 0.1} = 0.1$ verringerte Breite σ im Vergleich zu Gasdetektoren.

In der Regel gibt man bei Detektoren nicht die Breite σ der Gaußfunktion, sondern ihre volle Halbwertsbreite σ_{FWHM} (Full Width at Half Maximum) an.

$$\sigma_{\text{FWHM}} = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma \approx 2.355 \sigma \quad (2.23)$$

Die Energieauflösungen σ und σ_{FWHM} in Abhängigkeit vom elektronischen Rauschen sind für 5.898 keV (Mn- K_α) und $T = 273$ K in Abbildung 2.4 dargestellt.

2.1.10 Typisches ^{55}Mn -Spektrum

Anhand eines ^{55}Mn -Spektrums wird im folgenden die typische Spektralverteilung von Halbleiterdetektoren diskutiert. Mit diesem Spektrum, welches von ^{55}Fe -Präparaten emittiert wird, kalibriert man den Detektor und bestimmt seine Energieauflösung. Die Details der Zerfallskanäle sind in Anhang C.1 angegeben. Abbildung 2.5 zeigt das typische ^{55}Mn -Spektrum einer Eisenquelle. Dabei sind folgende Strukturen erkennbar:

- Die Mn- K_α -Hauptlinie bei 5 898 eV,
- die weniger intensive Mn- K_β -Linie bei 6 490 eV,
- die Escape-Linie bei 4 158 eV,
- ein Untergrund, welcher zu höheren Energien hin ansteigt und fließend in die asymmetrische Verbreiterung der Hauptlinie (Tail) übergeht.

Das Spektrum besteht im wesentlichen aus den Mn- K_α - und K_β -Linien, ist also relativ rein. Die Höhe des Ausgangssignals des Detektors ist direkt proportional zur detektierten Energie der Röntgenquanten⁵, und man ordnet den Kanalnummern die entsprechende Energie E zu.

Der Escape-Peak bei 4.16 keV kommt folgendermaßen zustande (siehe auch Abschnitt 4.4.6): Wenn ein (primäres) Röntgenquant ein Elektron aus der K-Schale eines Siliziumatoms heraus schlägt, füllen Elektronen aus höheren Schalen das Loch

⁵Manchmal ist es erforderlich, bei der Kalibrierung einen zusätzlichen quadratischen Term zu verwenden, um Nichtlinearitäten des ADC auszugleichen.

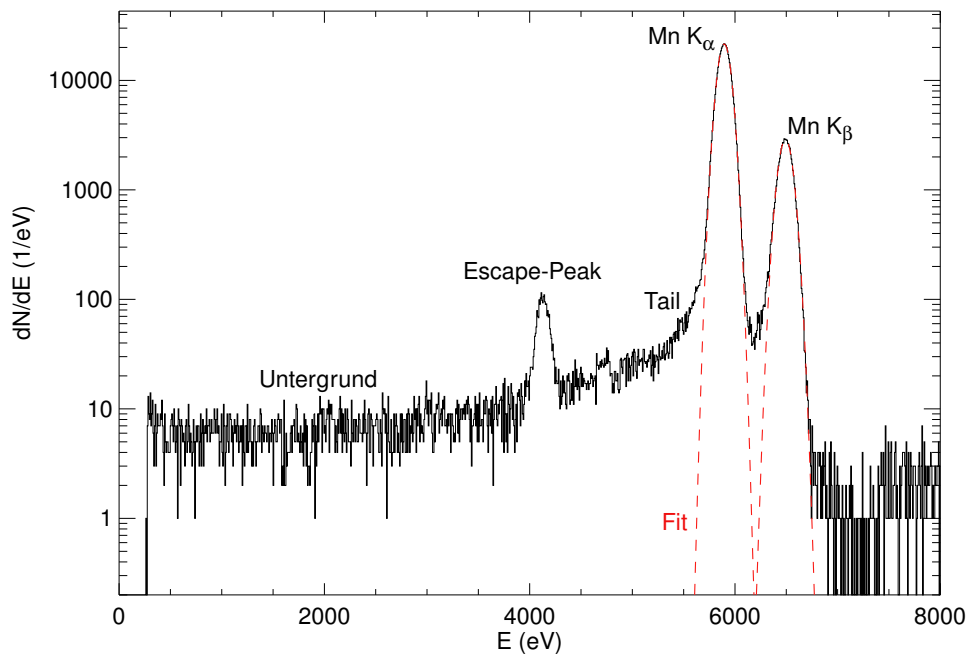


Abbildung 2.5: Ein typisches, mit einem SDD und einer ^{55}Fe -Quelle aufgenommenes Mn-Spektrum in halblogarithmischer Darstellung. Die Mn-K-Linien liegen bei 5.9 keV und 6.5 keV, der Escape-Peak bei 4.16 keV. Im Untergrund sind – bis auf den Anstieg bei höheren Energien (Tail) – kaum charakteristische Strukturen zu erkennen.

in der K-Schale auf. Die Energiedifferenz ΔE wird in Form eines weiteren Röntgenquants freigesetzt. Falls dieses Röntgenquant das sensitive Detektorvolumen verläßt, kann nicht die volle Energie E_0 des primären Röntgenquants detektiert werden, sondern lediglich $E_0 - \Delta E$. Die Si-K $_{\alpha}$ -Linie liegt bei 1.74 keV [Bea67], der Escape-Peak hat deshalb eine Energie von $5.9 \text{ keV} - 1.74 \text{ keV} = 4.16 \text{ keV}$.

Neben K $_{\alpha}$ -, K $_{\beta}$ - und Escape-Linien des Mn-Spektrums tritt in den Spektren auch ein Untergrund auf, der sich über den gesamten Energiebereich erstreckt (Abbildung 2.5). Der Untergrund entsteht im Detektor und wird von Ereignissen mit lediglich partieller Ladungssammlung (*partial events*) verursacht. Diese treten überall dort auf, wo ein lokales Extremum des elektrischen Potentials die erzeugte Ladungswolke teilen kann. Ein Teil der Ladung driftet in das aktive Volumen, der andere Teil driftet zur Oberfläche oder dem Rand. Im Eintrittsfenster (und auch auf der Strahlenaustrittsseite) kann ein Teil der Ladungsträger auch ohne den Einfluß eines Extremums im elektrischen Potential verloren gehen. Diese Ladungsverluste werden in Abschnitt 2.2.3 besprochen.

Häufig wird bei der Charakterisierung von Röntgendetektoren neben der Energieauflösung und der Effizienz auch das *peak to background ratio* (p/b) spezifiziert. Dabei ist die Peak-Höhe p die Höhe der Mn-K $_{\alpha}$ -Linie (entspricht I in Gleichung 2.18) und b die mittlere Höhe des Untergrunds in einem gegebenen Energiebereich (z. B. 0.8 bis 1.2 keV). Diese Größe ist jedoch zur Charakterisierung des Untergrunds we-

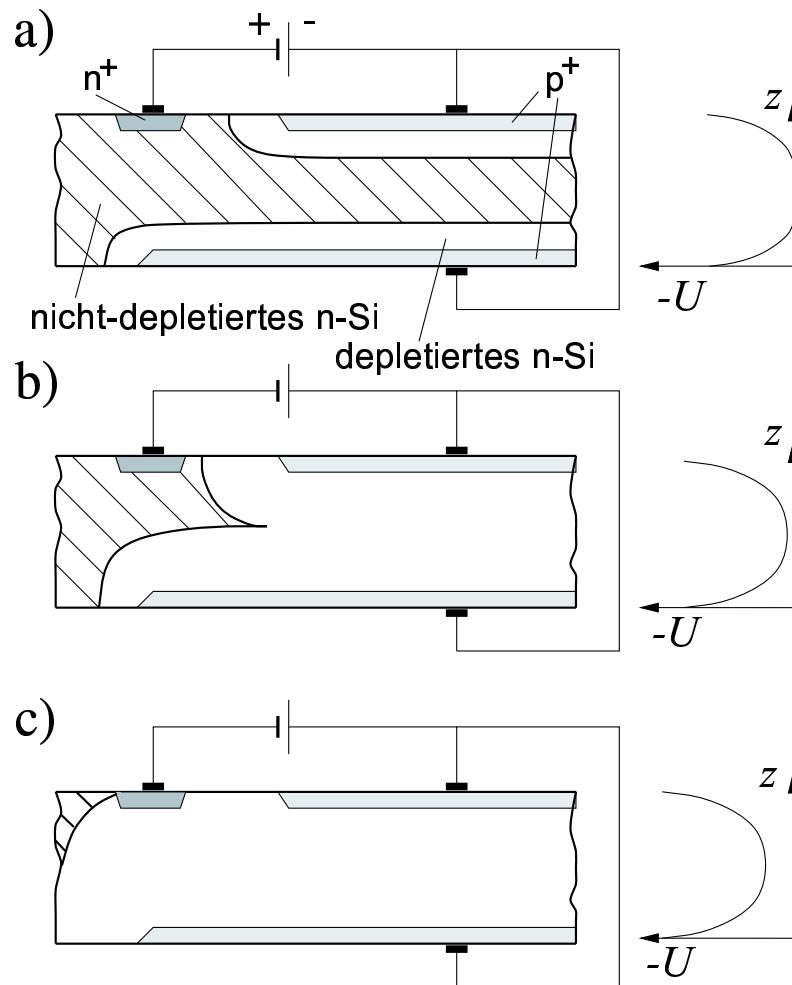


Abbildung 2.6: Das Prinzip der Seitwärtsdepletion. Der nicht-verarmte Bereich ist gestreift dargestellt. a) An den p⁺-Implantationen liegt keine äußere Spannung an. Es bilden sich lediglich die schmalen, intrinsischen Raumladungszonen aus. b) Die Raumladungszonen erstrecken sich über die gesamte Wafer-Tiefe. c) zeigt die Überdepletion – in dieser Konfiguration wird der SDD betrieben, damit der Driftkanal an der Anode endet.

nig aussagekräftig, da die Peak-Höhe p auch von Faktoren beeinflusst wird, die nicht mit dem Untergrund zusammenhängen. Ein geeignetes Maß für die Hauptlinienintensität im Vergleich zum Untergrund ist die Quanteneffizienz (Abschnitt 4.3.1).

2.1.11 Das Prinzip der Seitwärtsdepletion

1984 schlugen EMILIO GATTI und PAVEL REHAK eine neuartige, auf dem Prinzip der Seitwärtsdepletion beruhende Halbleiterdetektorstruktur vor [Gat84a, Gat84b]. Dabei wird eine große Fläche, z. B. aus hochohmigem n-Silizium, vollständig von einem (meist kleinen) n⁺-Kontakt aus verarmt, indem an zwei großflächigen p⁺-Kontakten an der Vorder- und Rückseite des Wafers eine Sperrspannung angelegt wird (Abbildung 2.6 a). Je negativer die Spannung ist, die an den beiden p⁺-

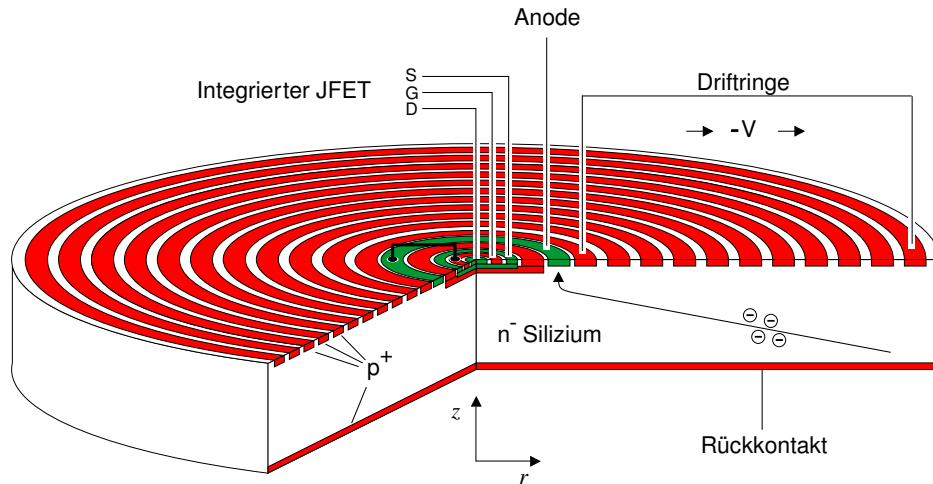


Abbildung 2.7: Schematische Darstellung des SDD. Auf der Vorderseite befinden sich die Ringe, die das Driftfeld definieren. Am p^+ -Kontakt auf der Rückseite, der sich homogen über die gesamte empfindliche Fläche erstreckt, wird die Depletionsspannung angelegt. Die Strahlung trifft von unten ein. Das Gebiet außerhalb des äußersten Driftrings, in dem sich die Guard-Ringe und die Temperaturdiode befinden, ist nicht dargestellt.

Kontakten anliegt, desto größer ist die Raumladungszone, die von ihnen ausgeht. Bei einer bestimmten Spannung berühren sich die beiden Verarmungszonen. Das nicht-verarmte Gebiet (d. h. mit höherer Leitfähigkeit) in der Mitte des Wafers verschwindet (Abbildung 2.6 b).

Bei der Seitwärtsdepletion wird von beiden Seiten aus verarmt, die Depletionstiefe z_d (Gleichung 2.9) ist deshalb lediglich halb so groß. Da U_{bias} proportional zu z_d^2 ist, ist die zur vollständigen Depletion benötigte Spannung viermal kleiner als bei einer Depletion von einer Seite. Ist die Spannung am n^+ -Kontakt 0 V, so liegt das Minimum des Betrages des elektrischen Potentials in der Mitte des Wafers. Zur Oberfläche steigt der Betrag des Potentials an, woraus sich eine parabolische Form ergibt (Abbildung 2.6 rechts).

Sowohl SDDs (nächster Abschnitt) als auch vollständig depletierte Sperrschicht-CCDs [Brä90, Brä93, Brä97] basieren auf dem Prinzip der Seitwärtsdepletion.

2.2 Der Siliziumdrift-detektor

Der Siliziumdrift-detektor [Gat85, Reh85, Reh86, Kem87a, Kem87b] beruht auf dem Driftprinzip und dem Prinzip der Seitwärtsdepletion [Gat84a, Gat84b]. Hergestellt wurden die ersten Drift-detektoren von J. KEMMER an der **TU München** [Reh85, Reh86]. Bei diesen Drift-detektoren befanden sich die Implantationen zur Erzeugung des lateralen Driftfeldes noch auf der Vorder- und Rückseite der Struktur. Das Eintrittsfenster war also inhomogen, was bei der Erzeugung von Ladungswolken in diesem Gebiet Ladungsverluste zur Folge hatte. KEMMER und LUTZ entwickelten daraufhin Drift-detektoren mit homogenem Strahleneintrittsfenster und potentialdefinierenden, konzentrischen Ringen (Driftringen) auf lediglich einer Sei-

2 Funktionsweise von Halbleiterdetektoren

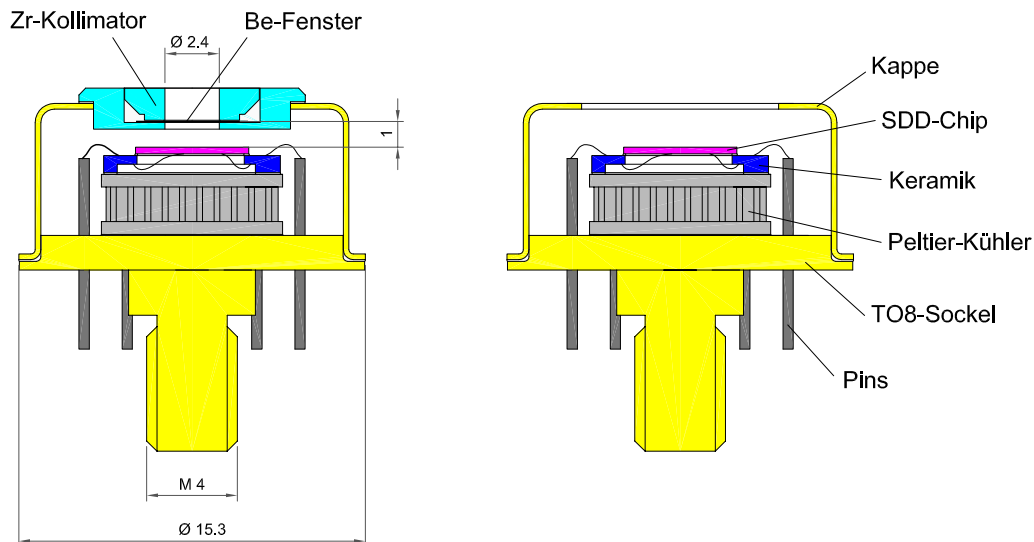


Abbildung 2.8: Module für 5 mm^2 -SDDs in herkömmlicher, geschlossener Variante (links) mit Kollimator und Beryllium-Gehäusefenster und in offener Variante (rechts), mit der die Messungen in dieser Arbeit durchgeführt wurden.

te [Kem87a, Kem87b].

Der Siliziumdriftdetektor ist in Abbildung 2.7 schematisch dargestellt. Gegenüber anderen Halbleiterdetektoren weist der SDD eine Reihe von Besonderheiten auf: das laterale Driftfeld, die kleine Anodenfläche und den integrierten Transistor.

Im SDD driften die Elektronen in einem elektrischen Feld zur Anode in der Mitte des Detektors (siehe Abschnitt 2.2.2). Dort wird die elektrische Ladung gesammelt und ausgelesen (Abschnitt 2.2.4). Auf diese Weise kann die Anodenfläche klein gehalten werden. Eine kleine Anodenfläche hat eine kleine Kapazität zur Folge, wodurch wiederum das elektronische Rauschen gering bleibt (Abschnitt 3.5).

Deshalb hängt die Kapazität des SDD nicht von der Größe des strahlungsempfindlichen Fläche, sondern in erster Linie von der Anodenfläche ab. Das Driftprinzip ermöglicht also großflächige Detektoren mit geringer Kapazität und sehr guter Energieauflösung. Der in dieser Arbeit untersuchte SDD hat eine aktive Fläche von 5 mm^2 , und die Raumladungszone erstreckt sich mit $280\text{ }\mu\text{m}$ über seine gesamte Dicke. Innerhalb des Anodenrings befindet sich ein JFET (*Junction Field Effect Transistor*, Sperrschichtfeldeffekttransistor), der das Signal nicht verstärkt, sondern als Impedanzwandler fungiert und die Detektorkapazität an die Eingangskapazität der ersten Verstärkerstufe anpaßt [Rad89, Har94].

Der Aufbau der SDD-Module ist in Abbildung 2.8 gezeigt. Der Chip befindet sich auf einer Keramik. Die Rückkontaktseite ist die Strahleneintrittsseite. Die Seite mit den Driftringen („Vorderseite“) zeigt hier also nach unten. Alle benötigten Spannungen werden über die Pins und Bonddrähte auf eine Keramik und dann wiederum über Bonddrähte auf die Bondpads des Chips geführt.

Die Herstellung von SDDs wurde in der Vergangenheit so optimiert, daß nur kleine Leckströme auftreten. Deshalb müssen Siliziumdriftdetektoren kaum gekühlt werden und können sogar bei Raumtemperatur eingesetzt werden. Gute Energieauf-

lösungen (< 150 eV) erzielt man bei bereits vergleichsweise hohen Temperaturen von -25 bis 0°C . Die dazu erforderlichen Temperaturdifferenzen von bis zu 50°C gegenüber Raumtemperatur erreicht man mit einem thermoelektrischen Peltier-Element. Es kühlt auf der dem Chip zugewandten Seite und erzeugt auf der anderen Seite Wärme, welche über den Kupfersockel und das in einen Kupferfinger geschraubte Gewinde nach außen abgegeben wird.

Der Zirkoniumkollimator verhindert, daß Strahlung auf die äußeren Gebiete des SDD gelangt, wo Untergrundereignisse entstehen können. Der Kollimatordurchmesser beträgt bei 5 mm^2 -SDDs 2.4 mm , was einer Fläche von 4.5 mm^2 entspricht. Bei schräg einfallender Strahlung ist die beleuchtete Fläche etwas größer.

Im Kollimator ist ein $8\text{ }\mu\text{m}$ dickes, speziell versiegeltes Berylliumfenster (**Mox-TEK DuraBeTM**) eingefast. Das Modul ist dadurch gasdicht verschlossen und vor Lichteinfall und äußeren Einflüssen geschützt (z. B. Kondensation von Luftfeuchtigkeit auf dem gekühlten Chip). Für Röntgenenergien $\leq 1.2\text{ keV}$ reduziert das Beryllium die Strahlungsintensität auf weniger als die Hälfte (siehe Abbildung 4.3). Oberhalb 3 keV wird mehr als 95% der Röntgenstrahlung transmittiert. Als Schutzgas befindet sich im Modul Stickstoff mit einem Druck von 1 bar . Dadurch wird vermieden, daß der in der Luft enthaltene Wasserdampf auf der kalten Detektoroberfläche kondensieren kann.

Da in dieser Arbeit das Niederenergieverhalten von SDDs untersucht wird, muß Röntgenstrahlung mit Energien $< 2\text{ keV}$ den SDD ohne Abschwächung erreichen. Deshalb werden die Messungen mit einem speziellen, offenen 5 mm^2 -SDD-Modul durchgeführt (Abbildung 2.8 rechts). An diesem Modul ist kein Kollimator und kein Be-Fenster montiert. Da Luft niederenergetische Röntgenstrahlung stark absorbiert, finden die Messungen im Vakuum statt.

Der verwendete SDD-Chip (ID 3/1-5-6.11) hat eine Energieauflösung von 139 eV (FWHM) bei 6 keV und -15°C . Seine Aluminiumbeschichtung ist etwa 100 nm dick (diese Dicke wird in Abschnitt 5.6 gemessen und verifiziert). Das Substrat besteht aus $\langle 100 \rangle$ -orientiertem, $280\text{ }\mu\text{m}$ dickem Silizium. Bei einer $\langle 100 \rangle$ -Kristallorientierung gibt es gegenüber einer $\langle 111 \rangle$ -Orientierung weniger Generationszentren an der Grenzfläche Si-SiO₂, da mehr offene Bindungen abgesättigt sind und die Oxidladungsdichte geringer ist.

2.2.1 Definition des Koordinatensystems

Für die Koordinatenangaben innerhalb des SDD werden im folgenden meist Zylinderkoordinaten verwendet (siehe Koordinatensysteme in den Abbildungen 2.7 und 2.8). Der Radius r gibt den Abstand vom Mittelpunkt (Mittelpunkt des Drain-Kontaktes am JFET) entlang der Oberfläche des SDD an, θ den Winkel in der r -Ebene und z die Tiefe. Der Koordinatennullpunkt in z -Richtung liegt an der Grenzfläche zwischen Aluminium und Silizium auf der Strahleneintrittsseite (Rückseite), wobei positive z -Werte in Richtung Siliziumsubstrat zeigen.

2.2.2 Das Driftfeld des SDD

Der SDD beruht auf dem Prinzip der Seitwärtsdepletion, jedoch wird zusätzlich ein elektrisches Feld parallel zur Wafer-Oberfläche angelegt, welches die Elektronen zur n^+ -Anode transportiert. Die Feldverteilung wird von Driftringen auf der Wafer-Vorderseite (Strahlenaustrittsseite) definiert. Eine negative Rückseitenspannung verarmt den SDD und transportiert die Elektronen zur Vorderseite.

Das positivste Potential ($\approx -5\text{ V}$) liegt am innersten Ring an, der in unmittelbarer Nähe der Anode liegt. Das Potential der Anode nicht fixiert (*floating*). Das negativste Potential ($\approx -100\text{ V}$) liegt am äußersten Ring an. Spannungsteiler auf der SDD-Vorderseite definieren das Potential der dazwischenliegenden Ringe. Sie sind als implantierte Widerstände oder MOS-Transistoren zwischen den Ringen realisiert. Der hier verwendete SDD hat einen resistiven Spannungsteiler.

Die Elektronen driften an die Stelle des positivsten Potentials, also in Richtung Anode. Die Driftgeschwindigkeit liegt zwischen 10^3 und 10^4 m/s . Die Potentialverteilung des SDD ist in Abbildung 2.9 dargestellt. Am Rückseitenkontakt liegen -55 V und am äußersten Driftring liegen -80 V an. Im unteren Konturplot kennzeichnen kurze Linien (senkrecht zu den Isopotentiallinien) die Driftrichtungen der Elektronen. Die Elektronen driften entlang eines „Driftkanals“, der von den überlagernden Driftfeldern in r - und z -Richtung gebildet wird.

Im Zentrum ist die an den Ringen angelegte Spannung gering, d. h. die Verarmungszone, die von diesem Kontakt ausgeht, ist klein. Der Betrag der Spannung, die am äußeren Driftring anliegt, ist deutlich höher als zur vollständigen Verarmung notwendig (Überdepletion). Der Betrag der Rückkontaktspannung muß deshalb so hoch sein, daß zum einen der Detektor auf der gesamten Dicke verarmt wird und zum anderen der von Ring- und Rückkontaktspannung definierte Driftkanal an der Anode endet. Deshalb reagiert der Detektor sehr empfindlich auf Änderungen der Rückkontaktspannung, und sie muß sehr genau justiert werden.

Auf der Vorderseite des Detektors befinden sich Substratkontakte, an denen Oberflächenleckströme abfließen. Sie sind liegen im innersten Driftring und hinter dem äußersten Guard-Ring.

2.2.3 Das Eintrittsfenster

Niederenergetische Röntgenstrahlung wird innerhalb der ersten Mikrometer des Detektors absorbiert. Deshalb ist dieses Gebiet – das Eintrittsfenster⁶ – für die Fähigkeit des Detektors, niederenergetische Röntgenstrahlung präzise zu messen, außerordentlich wichtig. Das Eintrittsfenster des in dieser Arbeit untersuchten SDD (und vieler Photodioden) besteht aus einer großflächigen, homogenen p^+ -Implantation auf hochohmigem Siliziumsubstrat sowie einer darüberliegenden Aluminiumschicht.

SDDs werden mit speziell optimierten Technologieprozessen hergestellt [Mai90, Har96]. Vor dem Implantieren wird eine ca. 0.1 bis $0.2\text{ }\mu\text{m}$ dicke Oxidschicht aufge-

⁶Zum Teil werden auch Gehäusefenster, die den Detektor vor äußeren Einflüssen schützen, als Eintrittsfenster bezeichnet. Diese bestehen meist aus dünnem Beryllium oder Polyimid. Im folgenden ist mit dem Eintrittsfenster jedoch immer die Detektor-Strahleneintrittsseite gemeint.

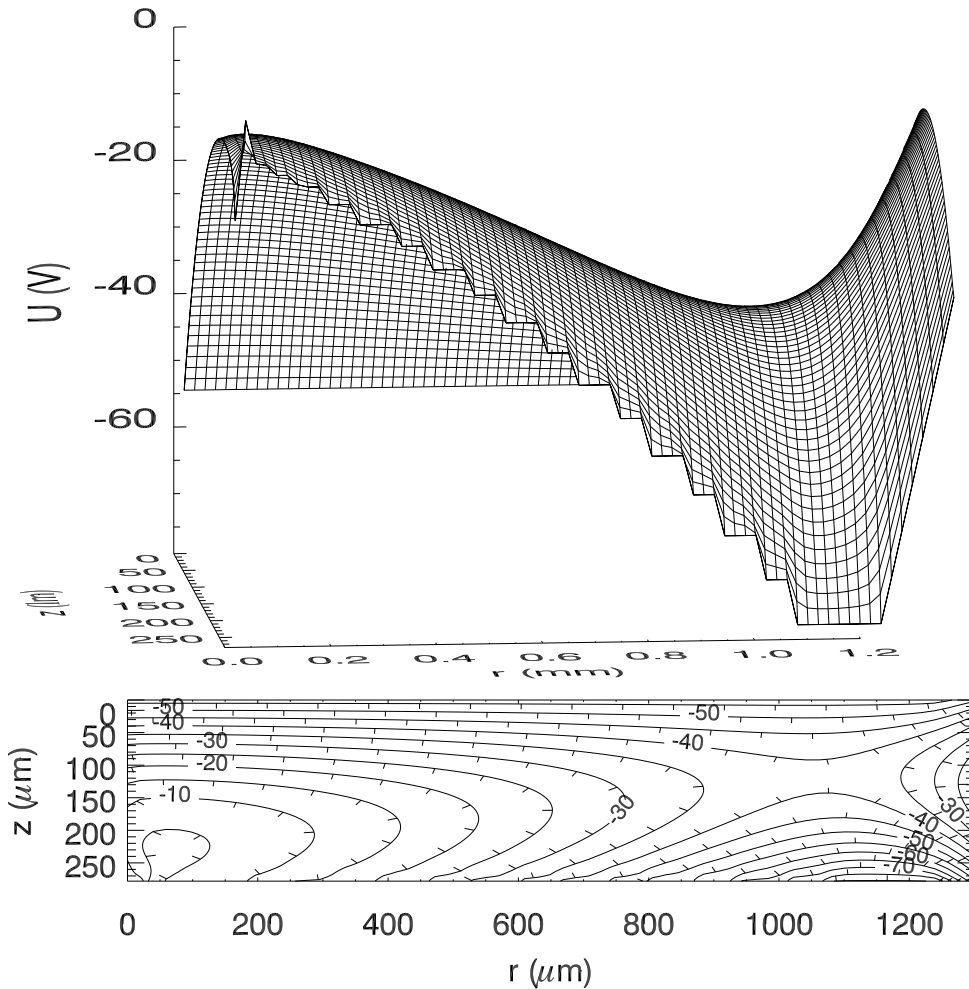


Abbildung 2.9: Potentialverteilung im SDD. Oben: dreidimensionale Darstellung, unten: maßstabsgetreuer Konturplot (Isopotentiallinien). Am Rückkontakt ($z = 0$) liegen -55 V an, am letzten Driftring ($1.1 \text{ mm} \leq r \leq 1.2 \text{ mm}$) -80 V. Die Elektronen driften zum positivsten Potential, also zur Anode, die Löcher zum negativsten, also zur strukturierten Vorder- bzw. unstrukturierten Rückseite.

bracht, welche nach der Implantation wieder entfernt wird. Dies hat drei Gründe: Zum einen verhindert sie, daß beim Implantieren ungewollte Verunreinigungen in den Detektor gelangen. Weiterhin werden Channeling-Effekte effektiv unterdrückt, da das Oxid eine andere Struktur als das Substratmaterial hat. Überdies liegt bei geeigneter Oxiddicke das Maximum der p^+ -Konzentration an der Grenzfläche oder im Oxid, also nach dem Entfernen des Oxids direkt an der Oberfläche [Har96, Har99]. Das Maximum der p^+ -Konzentration bildet auch ein Extremum in der Potentialverteilung, d. h. Ladungswolken werden an dieser Stelle aufgeteilt und ein Teil der Ladung driftet nicht in das aktive Volumen. Liegt hingegen die maximale Akzeptorkonzentration an der Grenzfläche zwischen dem Substrat (Bulk) und der folgenden Metallisierung, so gibt es keine Totschicht⁷ im Silizium.

⁷Der Begriff Totschicht wird mit unterschiedlichen Bedeutungen verwendet. Gelegentlich wird

Auf der Oberfläche wird nun durch Katodenzerstäubung (Sputtern) eine Aluminiumschicht aufgetragen. Diese Metallisierung hat mehrere Funktionen. Sie passiviert das Bauelement und sättigt freie Siliziumbindungen an der Oberfläche ab. Aluminium ist ein Leiter, deshalb stellt es darüber hinaus zuverlässig sicher, daß die p^+ -Implantation überall kontaktiert wird. Seine nominale Dicke beträgt 30 oder 100 nm (je nach Prozeßführung und Technologievariante).

Bei einer 30 nm dünnen Al-Schicht wird sichtbares⁸ und Röntgenlicht weniger stark geschwächt als bei einer Dicke von 100 nm. Bei letzterem wird deutlich mehr sichtbares Licht reflektiert, und die Transmission beträgt lediglich 10^{-5} . Jedoch wird auch niederenergetische Röntgenstrahlung stärker absorbiert.

In dieser Arbeit wird ein SDD mit einer dicken Metallisierungsschicht untersucht, da bei Wafern mit 100 nm Aluminium von einer homogeneren Schichtdicke ausgegangen werden kann und ihr Einfluß auf Niederenergiespektren größer ist. Für die Messungen am Synchrotron mit Modul ohne Be-Fenster ist es zudem von Vorteil, daß sichtbares Licht weniger stark transmittiert wird und etwaige Streulichtanteile nicht das elektronische Rauschen erhöhen. Bei verschlossenen Modulen mit Berylliumfenster hat sichtbares Licht keinen störenden Einfluß, da das 8 μm dicke Beryllium lichtundurchlässig ist.

In den früher hergestellten SDDs wurde eine Siliziumdioxid- statt einer Aluminiumschicht auf der Strahleneintrittsseite verwendet. Diese Strukturen sind jedoch weniger strahlenhart [Pah04, Boe84, Lut96, Con97], denn die von Strahlenschäden generierten Grenzflächenzustände wirken als Generationszentren und generieren einen zusätzlichen Oberflächenleckstrom. Positive Oxidladungen, die ebenfalls bei der Bestrahlung entstehen, erzeugen überdies so hohe elektrische Feldstärken, daß ein Avalanche-Effekt ausgelöst wird, welcher den Oberflächenleckstrom wiederum erhöht. Der Oberflächenleckstrom auf der Strahleneintrittsseite kann nicht – wie auf der Vorderseite – von Substratkontakten abgezogen werden. Er fließt deshalb in den Bulk und erhöhen den Gesamtleckstrom.

Das Eintrittsfenster ist stark vereinfacht in Abbildung 2.10 (Mitte) dargestellt (nach [Pop00a]). Oben ist der physikalische Ursprung der Partial Events im Eintrittsfenster und ihre spektrale Verteilung veranschaulicht. Es können fünf Fälle unterschieden werden:

- a) Röntgenphotonen können in der dünnen Aluminiumschicht absorbiert werden und energiereiche Elektronen daraufhin in das strahlungsempfindliche Volumen driften („Al-Elektronen“). Die dort maximal deponierte Energie $E_e^{\text{max}}(\text{Al})$ ist die Summe aus der Energie des primären Al-Photo- und der

die Schicht, in der partielle Ladungssammlung auftritt, als Totschicht bezeichnet [Ela73, Mus73, Ros91]. In diesem Fall wird kann aber noch ein Teil der Ladung nachgewiesen werden und zum Spektrum beitragen. Deshalb ist in diesem Zusammenhang dieser Ausdruck irreführend. Eindeutiger ist es, die Schicht, in der zwar Photonen absorbiert werden, aber keine Ladung gesammelt wird, als Totschicht zu bezeichnen (z. B. [Ger87, Sch97, Lec98]). In dieser Bedeutung wird der Begriff Totschicht im folgenden verwendet.

⁸Messungen an 30 nm dickem Al auf transparentem, extrem dünnen Polyimid ergaben eine maximale Transmission von $2.3 \cdot 10^{-2}$ bei den Wellenlängen 415 nm und 520 nm (C. ROBERTS, Fa. MOXTEK, persönliche Mitteilung). Das Minimum im Sichtbaren liegt mit $5 \cdot 10^{-3}$ zwischen 610 und 660 nm. Grünes und blaues Licht wird also weniger stark geschwächt als rotes.

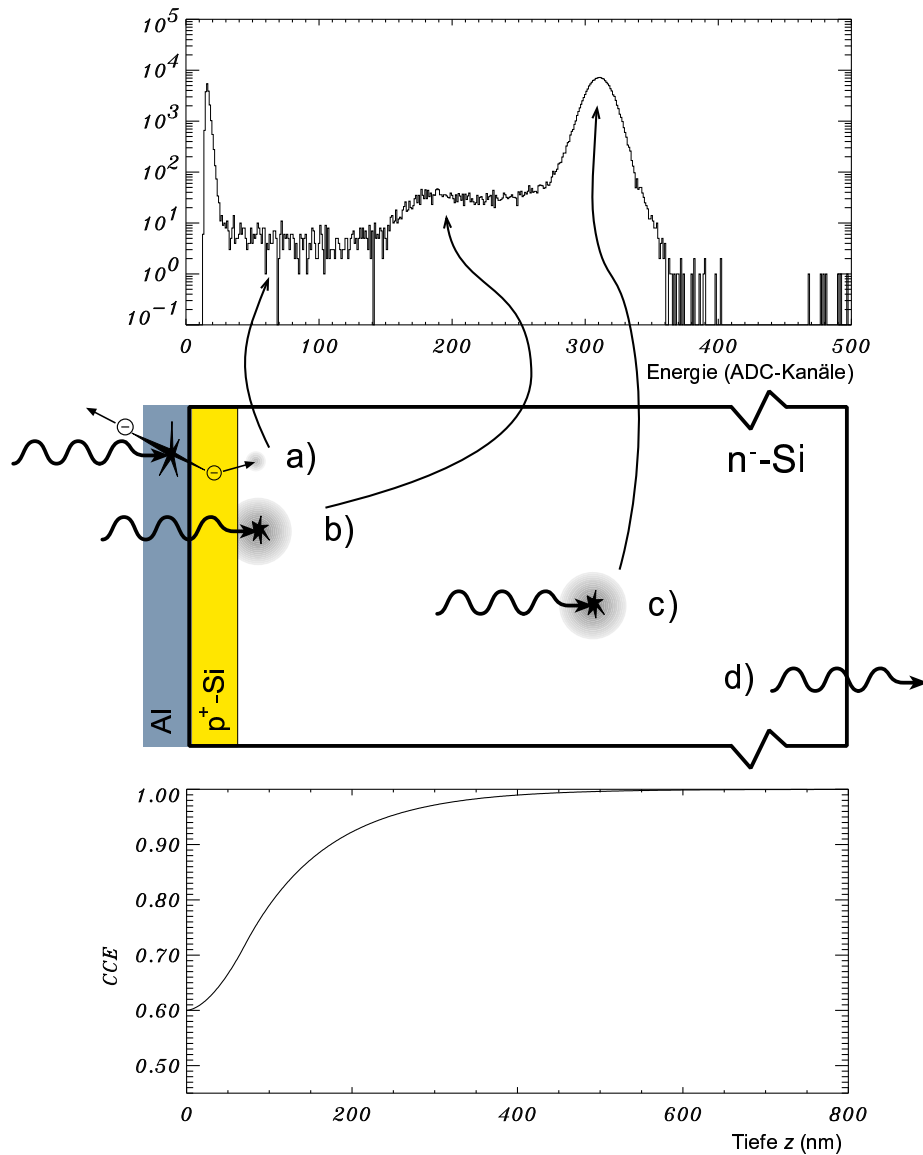


Abbildung 2.10: Ladungssammlung in Detektoren nach [Pop00a]. a) Ladungserzeugung an der Grenzfläche zwischen Aluminium und Si. b) Rekombination und Diffusion der Signalladungen in der Nähe der Grenzfläche zwischen Aluminium/ p^+ -Implantation und dem n^- -Si-Bulk (anders als hier dargestellt ist wegen des Implantationsprofils der Übergang zwischen dem p^+ - und dem n^- -Gebiet fließend). c) Vollständige Ladungssammlung. d) Hochenergetische Röntgenstrahlung verläßt den Detektor, ohne mit ihm wechselzuwirken. Der obere Plot zeigt ein typisches, monoenergetisches Energiespektrum, der mittlere einen schematischen Schnitt durch den Detektor. Unten ist eine modellierte Ladungssammeleffizienz CCE dargestellt (siehe Erklärung auf Seite 29). Das in dieser Arbeit verwendete Koordinatensystem besitzt seinen Nullpunkt an der Grenzfläche Al-Si, das Siliziumsubstrat hat positive z -Werte, die Al-Schicht negative.

primären Al-Auger-Elektronen, ist also geringfügig kleiner als die Photonenenergie. Im Spektrum sind deshalb diese Ereignisse bis hin zur Gesamtenergie dieser Primärelektronen verteilt. Dieser Anteil wird *shelf* genannt.

Auch der umgekehrte Vorgang, also der Verlust energiereicher Elektronen, die im Silizium erzeugt wurden („Si-Elektronen“), erzeugt im Spektrum einen Shelf, da hier beliebig hohe Ladungsverluste bis zu einer Untergrenze $E_0 - E_e^{\max}(\text{Si})$ auftreten können. Selbst der Verlust lediglich *eines* energetischen Elektrons wirkt sich auf das Spektrum aus, da dieses keine weiteren Sekundärelektronen im aktiven Volumen generieren kann, und es wird ein Ereignis mit deutlich weniger Ladung registriert.

- b) Wird das Röntgenquant an der Grenzschicht zwischen dem Aluminium bzw. der p^+ -Implantation und dem n^- -Substrat absorbiert, kann ebenfalls ein Teil der Ladung verloren gehen, da die Ladungswolke thermalisierter Elektronen einen nicht zu vernachlässigenden Durchmesser hat (*incomplete charge collection*, ICC) [Gou77, Lla77]. Elektronen können entweder in das Aluminium diffundieren oder von den in der p^+ -Implantation befindlichen Löchern oder Kristalldefekten eingefangen werden. Unter der Annahme, daß die Ladung in der Elektronenwolke symmetrisch um seinen Ursprung verteilt ist, wird immer zumindest die Hälfte der Ladung registriert, und im Spektrum erscheint eine Schulter, die bei der halben Röntgenenergie beginnt.

Der Unterschied zu Fall a) besteht also darin, daß nicht wenige Ladungsträger mit hoher Restenergie verloren gehen, sondern viele Ladungsträger mit vernachlässigbarer Restenergie.

Die niederenergetische Linie im Spektrum in Abbildung 2.10 oben (ADC-Kanäle $\lesssim 25$) rührt vom Rauschen der Verstärkerelektronik her. Bei einer höheren Diskriminatorschwelle wird diese Linie unterdrückt.

- c) Werden Röntgenphotonen unterhalb des Eintrittsfensters (im Bulk) absorbiert, wird die gesamte Ladung gesammelt.
- d) Findet keine Wechselwirkung statt, so gibt es kein Ereignis im Spektrum.

Bei entsprechend hoher Energie (ab ca. 8 keV bei einer Detektordicke von 280 μm , siehe Abbildung 4.4) ist es auch möglich, daß Ladungswolken in der Nähe der Strahlenaustrittsseite entstehen (an den Driftringen) und es dort zu Ladungsverlusten kommt. Da in diesem Energiebereich jedoch der überwiegende Teil der Photonen im Bulk und nicht im Eintritts- oder Austrittsfensterbereich absorbiert wird, spielt dieser Untergrund keine große Rolle. Bei der Entstehung von Strahlenschäden hingegen ist dieses Gebiet von zentraler Bedeutung [Pah04].

Unabhängig von seiner Ursache sowie seiner minimalen bzw. maximalen Energie wird der Anteil a) im folgenden immer Shelf genannt, da in der Regel nicht unterschieden werden kann, welcher Shelf-Anteil von Primärelektronen aus dem Aluminium bzw. dem Silizium generiert wird. Strukturen im Shelf, die durch die Minimal- und Maximalenergien der Elektronen bedingt sind, sind ohnehin erst bei sehr hohen Röntgenenergien erkennbar, da bei niedrigen Röntgenenergien der

Anteil b) überwiegt und die Schulter – ebenso wie die Verbreiterung durch die Energieauflösung – diese Strukturen überdecken (siehe Abschnitt 4.6.6).

Ein Modell zur Berechnung der Ladungsverluste im Eintrittsfenster wird in Kapitel 4 aufgestellt. Mit dem Modell soll diese „klassische“ Zuordnung der Spektralbeiträge zu den einzelnen Verlustprozessen überprüft und die exakten Ursachen für den Untergrund in SDD-Spektren analysiert werden, denn die unter a) und b) aufgeführten Ursachen für den Untergrund lassen noch einige Fragen offen:

- Häufig wird angenommen, daß die Energieverteilung der Al-Shelf-Elektronen von 0 eV bis zur Maximalenergie $E_e^{\max}(\text{Al})$ flach verläuft (*flat shelf*), ebenso wie die Verteilung der Si-Shelf-Elektronen von $E_0 - E_e^{\max}(\text{Si})$ bis E_0 (oft werden die Maximal- und Minimalenergien nicht berechnet, sondern eine Shelf-Verteilung von 0 eV bis E_0 angenommen, siehe Abschnitt 4.7). Dies liegt daran, daß die wahre Struktur des Shelves aus der Analyse der Spektralverteilung schwierig zu bestimmen ist, da sein hochenergetischer Anteil von der deutlich höheren Schulter verdeckt wird. Die primären Photo- und Auger-Elektronen haben jedoch definierte Energien und unterschiedliche Reichweiten. Deshalb ist zu erwarten, daß im Spektrum Strukturen auftreten. Die von LOWE [Low00] analytisch berechnete Spektralverteilung mit relativ scharfen „Kanten“ an den Maximalenergien der Shelf-Elektronen ist in SDD-Spektren jedoch nicht zu beobachten (siehe Kapitel 5).
- Im Niederenergiebereich ist die Schulter deutlich erkennbar, bei höheren Energien tritt sie jedoch nicht auf (vgl. Abbildung 2.5). Statt dessen steigt die Intensität des Untergrunds kontinuierlich bis zur Hauptlinie hin an (Tail).
- Um die Ladungsverluste an der Grenzfläche Al-Si zu erklären, werden zum Teil Ladungssammeleffizienzfunktionen (*charge collection efficiency, CCE*) eingeführt (z. B. [Har95, Lec95, Lec98, Pop00a, Pop00b]). Ein Beispiel für eine CCE-Funktion ist in der Abbildung 2.10 unten gezeigt. Die Form dieser orts- und energieabhängigen Funktion wird so gewählt, daß die (unter Berücksichtigung der z -abhängigen Absorptionswahrscheinlichkeit des Röntgenphotons) berechneten Spektren mit den Messungen möglichst gut übereinstimmen. Aus der Form dieser Funktion kann jedoch nur bedingt auf die Ursachen der Ladungsverluste geschlossen werden, denn die CCE-Funktion erfaßt sowohl die Verluste der Sekundärelektronen als auch die Rekombinationen an Akzeptoren (p^+ -Gebiet und Kristalldefekte) und Splitting der Ladungswolke an Potentialminima (falls z. B. die maximale p -Konzentration nicht direkt an der Grenzfläche bei $z = 0$ liegt). Weiterhin können die aus Messungen bei verschiedenen Röntgenenergien bestimmten CCE-Funktionen nicht auf niedrigere oder höhere Energien extrapoliert werden, und überdies können die Ladungsverluste modifizierter Eintrittsfensterstrukturen nicht vorhergesagt werden.

Häufig werden parametrisierte CCE-Funktionen auch eingesetzt, um ausschließlich den Verlustterm durch Rekombinationen im oberflächennahen Grenzgebiet zu quantifizieren [Sch98]. Alle anderen Verluste werden nicht in

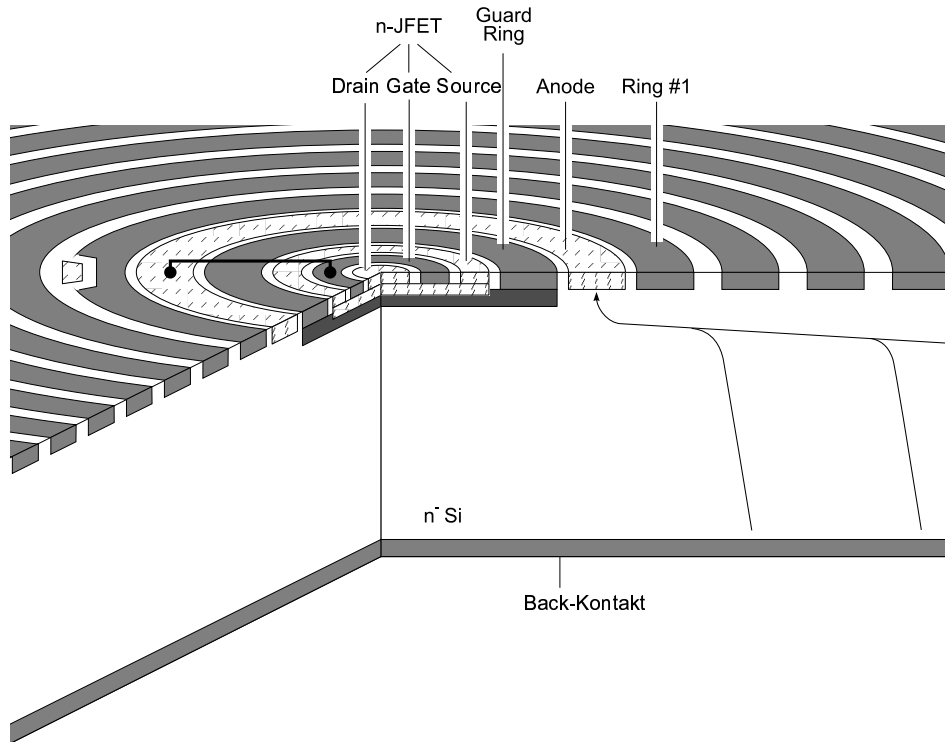


Abbildung 2.11: Detailausschnitt des Ausleseknottens. In der Mitte befindet sich der ringförmige Feldeffekttransistor, dann folgen der abschirmende Guard-Ring-Kontakt, die Anode und die ersten Driftringe. Die p^+ -Implantationen sind hellgrau gezeichnet, die p -Implantation unterhalb des Guard-Rings und Transistors dunkelgrau (*deep guard*) und die n -Implantationen gestrichelt. Links außen liegt der innere Substratkontakt. Die Aluminiumlagen sind nicht eingezeichnet.

diese CCE einbezogen, sondern durch andere Funktionen beschrieben. Dieser Ansatz ist durchaus legitim, denn hier ist die CCE nicht energieabhängig.

2.2.4 Die Auslesestruktur

Die Auslesestruktur des SDD besteht aus der n^+ -Anode und dem integrierten unipolaren Transistor in der Mitte des Detektors (siehe Abbildung 2.11). Ein p^+ -Guard-Ring separiert die Anode vom Transistor. Seine Sperrspannung beträgt etwa -25 bis -10 V und kontaktiert den Deep Guard, welcher sich unterhalb der gesamten Struktur befindet. Auf diese Weise wird der Transistor von der Anode separiert. Die Trennung gegenüber dem Substrat ist jedoch nicht vollständig (siehe Abbildung 4.1)), es tritt deshalb unvollständige Ladungssammlung auf, wenn ein Röntgenphoton unterhalb des Transistors absorbiert wird.

Der einseitige n -Kanal-Sperrschicht-FET (*single sided n-JFET*) wurde speziell für die Integration auf niedrig dotiertem Siliziumgrundmaterial entwickelt [Rad88, Lec93]. Er befindet sich innerhalb des Guard-Rings. Das Gate des JFET ist über eine kurze Aluminiumbrücke mit der Anode verbunden. Eine Potentialänderung an

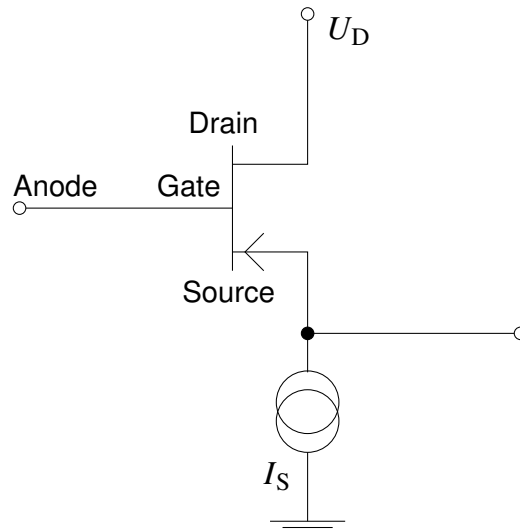


Abbildung 2.12: Die Source-Follower-Konfiguration des auf dem SDD integrierten JFET. Die Source ist mit einer Konstantstromquelle verbunden.

der Anode ändert das Potential am Gate, verengt den Kanal, dessen Widerstand dadurch größer wird. Der Source-Kontakt ist an einer externen Konstantstromquelle angeschlossen. Bei einer Änderung des Gate-Potentials ändert sich die an der Source anliegende Spannung (Source-Follower-Konfiguration), da sich wegen der Verengung des Kanals der Widerstand erhöht und der Strom konstant gehalten wird. Abbildung 2.12 zeigt das Schaltbild dieser Source-Follower-Konfiguration. Ausgelesen wird also nicht die Ladung an der Anode, sondern die Änderung der Source-Spannung des JFET. Die Gleichungen für das Strom- und Spannungsverhalten von n-JFETs wird in [Lec98, Anhang 1] hergeleitet. Statt eines Source-Followers kann auch ein ladungsempfindlicher Vorverstärker eingesetzt werden.

Der n-JFET dient nicht als Verstärker, sondern als Impedanzwandler, der die hohe Impedanz der Anode in eine niedrige Ausgangsimpedanz umwandelt. Der Schaltkreis besteht aus einem Transistor und einer Last im Source-Anschluß. Im Falle des SDD ist diese Last eine (externe) Stromquelle. Die Verstärkung eines Source-Followers ist ungefähr eins, da er im Sättigungsbereich betrieben wird.

Die Anode wird nicht über einen gepulsten Rücksetzstrom (Reset) entladen, sondern über einen kontinuierlichen Entladestrom, der auf dem *weak avalanche effect* beruht [Gou70, Ela72, Ber96, Fio99]. Dabei macht man sich zu Nutze, daß die Kanalelektronen, die von der Source zum Drain fließen, durch Stoßionisation Elektron-Loch-Paare erzeugen. Die Elektronen fließen zum Drain, und die Löcher fließen zu den benachbarten p-Kontakten, also dem Gate und dem Deep Guard unterhalb des Transistors. Am Gate rekombinieren die Löcher mit den gesammelten Elektronen des Signals und des Leckstroms. Dadurch wird die Anode entladen. Ändert sich der Anodenstrom z. B. wegen einer höheren Zählrate, so erhöht sich die Potentialdifferenz zwischen Drain und Gate sowie zwischen Source und Gate, und der Strom zum Gate vergrößert sich. Es bildet sich also ein Gleichgewichtszustand, bei dem die Anode stets von einem entsprechend angepaßten Löcherstrom entladen wird.

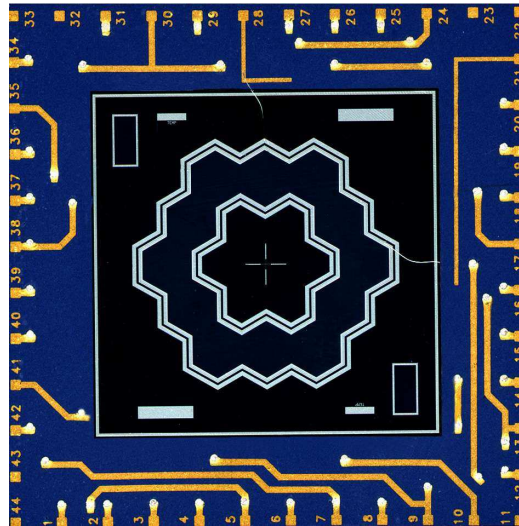


Abbildung 2.13: Ein ringförmiger 12-Kanal-SDD auf einer Keramik.

Dieser Rückkoppelmechanismus wird Drain Reset oder Drain Feedback genannt. Das Abfließen der Ladung ist ein zusätzlicher Leckstrom (Schrotrauschen, siehe Abschnitt 3.4).

Direkt auf dem Chip integrierte FETs haben zahlreiche Vorteile. Die Kapazität der Anode und die Eingangskapazität des Transistors lassen sich optimal aufeinander abstimmen. Ein externer Transistor wäre über einen Bond-Draht mit der Anode verbunden, der eine zusätzliche Streukapazität darstellt. In diesem Fall können mechanische Vibrationen zusätzliche Störungen verursachen (Mikrophonie).

Ein Nachteil integrierter Transistoren ist ihre aufwendigere Herstellung, da zusätzliche Masken- und Implantationsschritte benötigt werden. Die Transistor-Prozess-technologie muß kompatibel zur SDD-Technologie sein und kann nicht unabhängig davon optimiert werden. Deshalb haben integrierte Transistoren meist eine geringere Steilheit und höheres thermisches und $1/f$ -Rauschen (Abschnitte 3.2 und 3.3). Zudem können Ladungswolken, welche direkt unterhalb der Transistorregion erzeugt werden, direkt zum Transistor statt zur Anode driften und dadurch Untergrundereignisse verursachen (siehe Abbildung 4.1).

2.2.5 Mehrkanalstrukturen

Wenn eine sehr hohe Zählrate und eine große sensitive Fläche benötigt werden, können SDD-Mehrkanalstrukturen eingesetzt werden, welche entweder aus einzelnen SDD-Chips aufgebaut sind, oder aus einem monolithischen Chip bestehen, der z. B. aus sieben oder neunzehn sechseckigen Einzel-SDD-Elementen besteht [Lec00]. Mit Mehrkanal-SDDs sind spezielle Geometrien möglich (linear, flächig, ringförmig), die an die experimentellen Erfordernisse angepaßt sind, und es ist überdies möglich, mit einer groben Ortsauflösung zu messen.

Auf der anderen Seite ist es mit monolithischen Strukturen schwierig, die erforderlichen Spannungen individuell für die einzelnen Driftstrukturen anzupassen.

Dies bewirkt wiederum meist eine verringerte Energieauflösung, denn jede Struktur benötigt eine individuell justierte Rückkontaktspannung. Zudem benötigt man für jeden Kanal separate Spektroskopieverstärker, Analog-Digital-Wandler und Mehrkanalanalysatoren. Die Probleme großflächiger Ein- und Mehrkanalstrukturen werden in [Egg04] detailliert behandelt.

2.3 Die Signalverarbeitung

Im folgenden wird die Funktionsweise der elektronischen Signalverarbeitung und ihr Einfluß auf die Aufnahme von Spektren behandelt. So hat die Pulsformung (Abschnitt 2.3.1) einen bedeutenden Einfluß auf das elektronische Rauschen (Kapitel 3). Pile-up- und Totzeiteffekte (Abschnitte 2.3.2 und 2.3.3) müssen insbesondere bei der Messung bei hohen Zählraten $> 10^5/s$ berücksichtigt werden.

Das Ausgangssignal des SDD wird zunächst in einen Vorverstärker geführt. Dieser befindet sich auf einer Platine, welche auch die Versorgungsspannungen für den SDD bereitstellt. Damit möglichst wenige Störungen in die Signalleitung streuen können, befindet sich diese Platine in unmittelbarer Nähe des SDD (ca. 10 cm Abstand).

Das Ausgangssignal der ersten Verstärkerstufe wird danach in einen Spektroskopieverstärker geführt. Dieser besteht aus einem Verstärker und einem Pulsformungsschaltkreis (*amplifier/shaper*). Das Signal wird dort wiederum verstärkt und das stufenförmige Ausgangssignal in einen Puls mit annähernd Gaußscher Pulsform umgewandelt (der Grund dafür wird im nächsten Abschnitt behandelt). Das Signal wird anschließend in eine Diskriminator-/ADC-Einheit geführt. Der Diskriminator läßt nur Signale oberhalb einer gewissen Signalthöhe (*threshold*) passieren. Auf diese Weise wird störendes Rauschen entfernt. Der ADC (Analog-Digital-Wandler) wandelt die analogen Signale in digitale um. Ein Mehrkanalanalysator (MCA) sammelt die gemessenen Signalthöhen in verschiedenen Kanälen (meist 1 024 bis 8 192). Man erhält also zunächst ein Pulshöhenspektrum, welches nicht nach der Energie, sondern nach Kanalnummern geordnet ist. Um den Kanalnummern die entsprechenden Energien zuzuordnen, muß eine Kalibrierung vorgenommen werden. Das vom MCA gespeicherte Spektrum wird zur Weiterverarbeitung in einen Rechner eingelesen.

2.3.1 Der Pulsformer

Eine Pulsformung wird erreicht, indem man Differenzier- (CR) und Integrierglieder (RC) hintereinanderschaltet. Differenzierglieder schwächen Signale mit niedriger Frequenz ab (Hochpaßfilter), während RC -Glieder als Tiefpaßfilter arbeiten. Man erreicht dadurch effektiv ein höheres Signal-zu-Untergrund-Verhältnis, da der Pulsformer die Signalverarbeitung auf denjenigen Frequenzbereich beschränkt, in dem die sinnvollen Detektorsignale liegen. Differenzier- und Integrierglieder werden über die Zeitkonstante

$$\tau = RC, \quad (2.24)$$

also dem Produkt aus Widerstand R und Kapazität C , charakterisiert. Ein CR -Glied wandelt ein stufenförmiges Eingangssignal

$$U_{\text{in}}(t) = \begin{cases} U_0 & (t \geq 0) \\ 0 & (t < 0) \end{cases}$$

in ein exponentiell abfallendes Ausgangssignal

$$U_{\text{out}}(t) = U_0 e^{-t/\tau}$$

um. Ein RC -Integrierglied wandelt das Eingangssignal in ein exponentiell ansteigendes Ausgangssignal um.

$$U_{\text{out}}(t) = U_0 \left(1 - e^{-t/\tau}\right)$$

Eine (annähernd) Gaußsche Pulsform erreicht man in der Praxis durch ein einfaches CR -Differentiationsglied, dem mehrere RC -Integratoren folgen. Die einzelnen Glieder sind über Operationsverstärker voneinander abgetrennt, damit sie sich nicht gegenseitig beeinflussen. Bei diesen semi-Gaußschen Pulsformen ist die Anstiegszeit des Ausgangssignals ($\approx 2\tau$) kürzer als die abfallende Flanke ($\approx 5\tau$). Die gesamte Pulsdauer beträgt also etwa 7τ . Anstiegs- und Abfallzeiten werden vom Maximum des Signals bis zur zehnpromtigen Signalthöhe gemessen, denn wegen der Gaußschen Pulsform ist der exakte Beginn und das Ende des Gesamtsignals nicht präzise meßbar.

2.3.2 Pile-up

Pile-up tritt auf, wenn innerhalb der Pulsdauer nicht nur ein Signal, sondern zwei oder mehr Signale aufsummiert werden und somit das Spektrum verfälschen. Ein Spektrum, bei dem Pile-up auftritt, ist z. B. in Abbildung 5.10 gezeigt. Die Pile-up-Wahrscheinlichkeit ist um so größer, je höher die Zählrate und je länger die Pulsdauer ist.

Spezielle elektronische Schaltungen können Pile-up deutlich reduzieren. Solche Pile-up-Rejecter bestehen aus einem schnellen Vorverstärker in einem Zweig des Pulsformers. Falls zwei oder mehr Signale innerhalb der Pulsdauer eintreffen, sendet der Pile-up-Rejecter ein Blockiersignal (*inhibit*) an den ADC. Beide Signale werden daraufhin verworfen, also nicht vom ADC an den MCA weitergeleitet. Dies funktioniert jedoch nur bis zu einer bestimmten Zeitdifferenz von $\gtrsim 50$ ns. Liegen die Signale zu eng beisammen, ist keine Unterscheidung mehr möglich und die gesamte Ladung beider Pulse wird gemessen, d. h. es tritt dennoch Pile-up auf.

Grundlegende theoretische Betrachtungen zu Pile-up- und Totzeit-Effekten finden sich in [Mül73, Wie76, Gar76]. Eine Untersuchung des Pile-up-Effektes mit Siliziumdriftdetektoren wurde z. B. in [Kar98] durchgeführt.

2.3.3 Totzeit

Als Totzeit bezeichnet man die Zeit, während der das Detektor-/Auslesesystem keine Eingangspulse aufnehmen und verarbeiten kann. Die Totzeit ist die Summe

τ (μs)	t_{dead} (μs)	$f_{\text{in}}^{\text{max}}$ (1/s)	$f_{\text{out}}^{\text{max}}$ (1/s)
0.15	0.8	$1.25 \cdot 10^6$	460 000
0.25	1.0	$1.00 \cdot 10^6$	370 000
0.50	1.5	$6.66 \cdot 10^5$	250 000
1.00	2.5	$4.00 \cdot 10^5$	150 000
2.00	4.5	$2.22 \cdot 10^5$	82 000

Tabelle 2.1: Maximale Ein- und Ausgangszählraten (gerundet) im paralysierten Modell für verschiedene Shaping-Zeiten τ bei fester Signalumwandlungszeit $t_{\text{conv}} = 500$ ns.

aus Anstiegszeit des Signals (*peaking time*) und der Zeit t_{conv} , die der ADC zum Umwandeln der Signale benötigt (*conversion time*).

Die Peaking Time entspricht wie oben beschrieben der doppelten Zeitkonstante des Pulsformers, also 2τ . Die Umwandlungszeit beträgt bei den verwendeten⁹ ADC 500 ns. Es gilt also

$$t_{\text{dead}} = 2\tau + t_{\text{conv}}. \quad (2.25)$$

Der Pile-up-Rejecter erhöht jedoch die effektive Totzeit, da bei einem erkannten Pile-up-Ereignis kein Signal weitergegeben wird und die Ausleseelektronik während dieser Zeit „tot“ ist.

Bei der Berechnung der maximalen Ausgangszählrate muß zwischen einem „paralysiertem“ (lähmenden) und „nicht-paralysiertem“ Verhalten der Systems unterschieden werden [Kno89, Abschnitt 4.7]. Im paralysierten Fall akkumuliert sich die Totzeit zweier Ereignisse, wenn das zweite Ereignis innerhalb der Totzeit des ersten auftritt. Die Totzeit des zweiten Ereignisses wird also der Totzeit des ersten Ereignisses hinzugerechnet. Im nicht-paralysierten Fall verlängert das zweite Signal nicht die Totzeit.

Die maximale Ausgangszählrate f_{out} im Vergleich zur Eingangszählrate f_{in} läßt sich im nicht-paralysiertem Modell wie folgt ableiten: Das Produkt $f_{\text{out}}t_{\text{dead}}$ ist der Anteil der Totzeitergebnisse. Die Rate verlorengangener Ereignisse ist deshalb $f_{\text{in}}f_{\text{out}}t_{\text{dead}}$. Auf der anderen Seite ist die Verlustrate auch durch $f_{\text{in}} - f_{\text{out}}$ gegeben. Setzt man beide Verlustraten gleich,

$$f_{\text{in}} - f_{\text{out}} = f_{\text{in}}f_{\text{out}}t_{\text{dead}},$$

so erhält man die Ausgangszählrate

$$f_{\text{out}} = \frac{f_{\text{in}}}{1 + f_{\text{in}}t_{\text{dead}}}. \quad (2.26)$$

Wird ein Pile-up-Rejecter verwendet, so muß jedoch das paralysierte Modell angewandt werden, denn jedes Ereignis, das während der Totzeit des vorherigen Ereignisses auftritt, verlängert die gesamte Totzeit. In diesem Fall gilt [Kno89]

$$f_{\text{out}} = f_{\text{in}} \exp(-f_{\text{in}}t_{\text{dead}}). \quad (2.27)$$

⁹Bei den Messungen dieser Arbeit kommen folgende Shaper/ADCs zum Einsatz: **SILENA** ADC 7423 UHS, **SILENA** Shaper 7614, **RÖNTEC** XFlash[®] D410/D411.

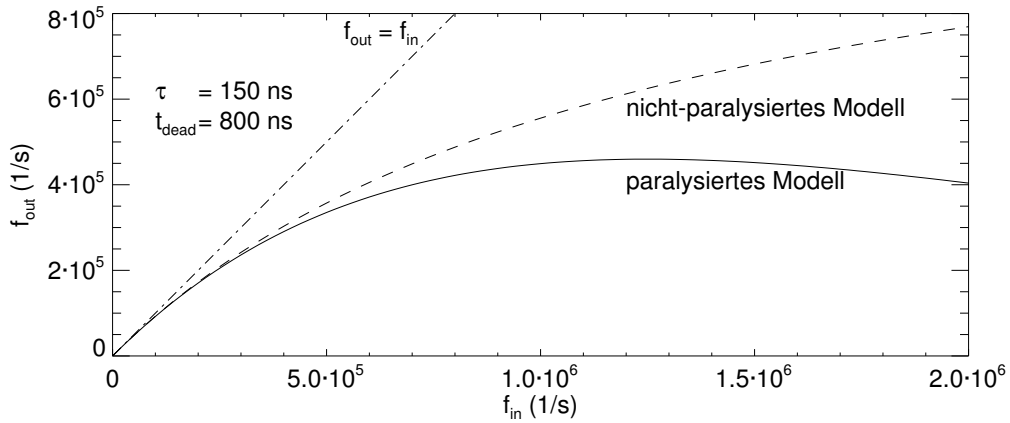


Abbildung 2.14: Maximale Ausgangs- im Vergleich zur Eingangszählrate für verschiedene Totzeitmodelle. Die maximalen Ausgangszählraten wurden für eine Pulsformungszeit τ von 150 ns und eine daraus resultierende Totzeit von 800 ns berechnet (Gleichung 2.25). Für die SDD-Elektronik ist das paralysierte Modell anzuwenden, man erhält also die maximale Ausgangszählrate bei einer Eingangszählrate von $1.25 \cdot 10^6$ /s. Noch höhere Eingangszählraten führen zu geringeren Ausgangszählraten.

Die maximale Ausgangszählrate beträgt dann

$$f_{\text{out}}^{\text{max}} = \frac{1}{e t_{\text{dead}}} \quad (2.28)$$

und nimmt diesen Wert bei der Eingangszählrate

$$f_{\text{in}}^{\text{max}} = \frac{1}{t_{\text{dead}}} \quad (2.29)$$

an. Höhere Eingangszählraten als $f_{\text{in}}^{\text{max}}$ führen zu niedrigeren Ausgangszählraten, sind also nicht mehr sinnvoll. Für einige bei SDDs übliche Pulsformungszeiten τ sind die maximalen Ein- und Ausgangszählraten in Tabelle 2.1 aufgeführt. Um eine möglichst hohe Ausgangszählrate zu erhalten, muß die Totzeit, also die Summe aus Peaking Time und ADC-Konversionszeit, möglichst klein sein. Da das Rauschen des SDD sehr klein ist, kann man sehr kurze Pulsformungszeiten verwenden, deshalb begrenzt vor allem die ADC-Konversionszeit die Zählratenfähigkeit. Bei den meisten anderen Halbleiterdetektoren müssen Pulsformungszeiten von ca. 20 μs gewählt werden, und die Konversionszeit kann gegenüber der Pulsformungszeit vernachlässigt werden. Die maximale sinnvolle Zählrate solcher Detektoren liegt dann nach Gleichung 2.29 bei $\leq 25\,000$ /s, ist also deutlich kleiner als die von Silizium-drift-detektoren. Bei Eingangszählraten $\gg 10^6$ /s werden Photodioden verwendet, die im Strom- und nicht im Pulshöhenmodus betrieben werden.

Abbildung 2.14 zeigt die Ausgangs- in Abhängigkeit von den Eingangszählraten bei $\tau = 150$ ns für das paralysierte Modell und das nicht-paralysierte Modell. Typische Zählraten in der RFA liegen jedoch zwischen 10^3 /s und 10^5 /s. In diesem Bereich tritt keine Beeinträchtigung aufgrund der Totzeit auf.

2.4 Andere Detektoren zur Strahlungsmessung

2.4.1 Lithium-gedriftete Siliziumdetektoren

Die meisten Modelle zum Eintrittsfenster und zur Antwortfunktion von Silizium-Röntgendetektoren basieren auf Untersuchungen zu Lithium-gedrifteten Siliziumdetektoren [Cam01]. Deshalb ist es für die in dieser Arbeit durchgeführte Modellierung wichtig, die Unterschiede zwischen diesen Si(Li)-Detektoren und SDDs aufzuzeigen. Details zur Herstellung und Funktionsweise werden ausführlich in der Literatur behandelt, z. B. in [Bük71, Kno89].

Si(Li)s sind zur Zeit in der hochauflösenden Röntgenspektroskopie die am weitesten verbreiteten Detektoren. Sie werden insbesondere dann eingesetzt, wenn sehr weite Raumladungszonen benötigt werden, um höherenergetische Röntgenstrahlung nachweisen zu können (vgl. Abbildung 4.4). Selbst mit konventionellen, hochreinen Halbleiterdetektoren (sehr schwacher Dotierung) lassen sich Verarmungszonen von maximal 1 bis 2 mm erzeugen, während das sensitive Volumen von Si(Li)s mit Flächen $\leq 80 \text{ mm}^2$ und Tiefen bis zu 10 mm sehr groß sein kann. Zudem lassen sich mit ihnen ausgezeichnete Energieauflösungen erreichen, und sie können selbst sehr niederenergetische Fluoreszenzlinien (bis Bor, also 185 eV) mit einem geringen Untergrundanteil auflösen [Mus74, Sch01].

Si(Li)s bestehen aus extrem schwach dotiertem, einkristallinem p^{--} -Silizium-Grundmaterial (spezifischer Widerstand von $3 \Omega \text{ cm}$ bis $2 \text{ k}\Omega \text{ cm}$). Bei ihrer Herstellung bringt man zunächst eine dünne Lithiumschicht auf den Halbleiter auf [Bla62, Man62, Lan89]. Ein elektrisches Feld läßt dann die Lithiumionen in das Material driften, so daß sich die Akzeptor- und Donator-Konzentrationen exakt im Gleichgewicht befinden [Pel60]. Da die Lithiumatome Zwischengitterplätze einnehmen, diffundieren sie deutlich besser durch Silizium als andere Störstoffe wie Bor oder Phosphor [Ful54], denn ihr Diffusionskoeffizient ist um den Faktor 10^7 größer. Am Ende dieses Driftprozesses sind die Li-Ionen so verteilt, daß die gesamte Raumladung null ist und eine annähernd vollständige Kompensation stattfindet. Der Halbleiter ist also praktisch intrinsisch, denn die Anzahl der nicht-kompensierten Verunreinigungen ist dann kleiner als $10^9/\text{cm}^3$. Die Lithium-Donator-Niveaus liegen 0.03 eV unter der Si-Leitungsbandkante. Sie können also leicht Elektronen an das Leitungsband abgeben. Die Lithium-Atome liegen deshalb im Halbleitergitter praktisch ausschließlich als positive Ionen vor.

Aus diesem Lithium-kompensierten Material lassen sich keine komplexeren Strukturen prozessieren, da damit keine Hochtemperaturbehandlungen möglich sind. Bereits bei Raumtemperatur kann sich das Lithium so umverteilen, daß die Kompensation wieder aufgehoben wird. Sobald es höheren Temperaturen ausgesetzt ist, können zudem thermische Spannungen auftreten. Deshalb müssen Si(Li)s stets gekühlt werden.

Si(Li)s sind in einer p-i-n-Konfiguration aufgebaut (siehe Abbildung 2.15). Das verbleibende Lithium auf der einen Seite bildet eine n^+ -Schicht, die als elektrischer Kontakt dient und von der aus das Signal ausgelesen wird. Die intrinsische Schicht bildet das empfindliche Detektorvolumen. Die wenige Atomlagen dicke, natürliche Oxidschicht auf der gegenüberliegenden Seite wird mit einer Metallisierung verse-

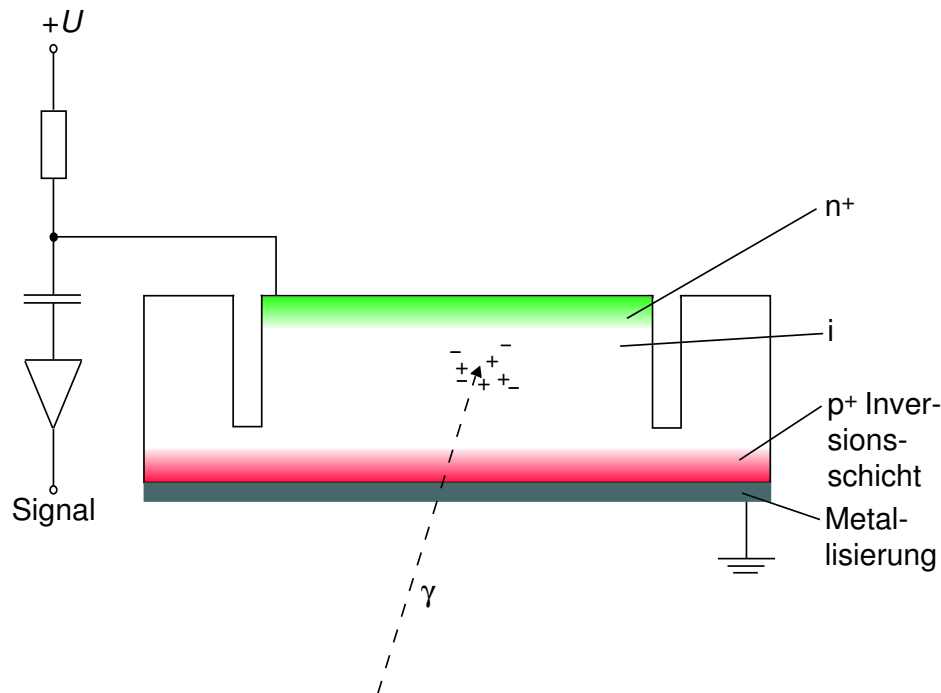


Abbildung 2.15: Si(Li)-Detektoren sind ähnlich wie pin-Dioden aufgebaut (vgl. Abbildung 2.3). Die Li-Ionen kompensieren die positive Ladung im p^- -Substrat, und es entsteht ein praktisch intrinsisches Gebiet.

hen (10^{-8} bis 10^{-7} m Dicke), welche einen elektrischen (Schottky-) Kontakt bildet. Diese Seite ist die Strahleneintrittsseite.

Als Sperrspannung wird an der n^+ -Schicht eine Hochspannung von $U = 500$ bis 4000 V angelegt (für Verarmungszonen von 5 bis 10 mm Dicke). Da sich praktisch keine Nettoladung in der intrinsischen Zone (mit der Dicke d) befindet, ist dort das elektrische Feld $\mathcal{E} = U/d$ konstant, und das elektrische Potential fällt mit der Tiefe linear ab. Ähnlich wie beim SDD wird die Energieauflösung von die drei Rauschtermen limitiert [Hol70]: die Ionisationsstatistik (Fano-Rauschen), den Leckstrom und das elektronische Rauschen in der Signalverarbeitung. Auch mechanische Vibrationen (Mikrophonie) können zusätzliches Rauschen verursachen [Kha79]. Sehr gute Si(Li)s erreichen bei der Temperatur von flüssigem Stickstoff (-196°C) Energieauflösungen, die mit 128 eV (FWHM) bei 5.9 keV etwas besser als die der besten Standard-SDDs bei -20°C sind. SDDs mit sehr kleiner Anodenfläche erreichen aber mittlerweile ebenso gute Werte [Pah04].

Si(Li)-Eintrittsfenster und die Erzeugung der Untergrundereignisse wurden eingehend untersucht [Shi83, Yac86, Ger87, Ina87, He88, Wan91, Sch94, Tik97, Low00]. Zum Teil lassen sich aus diesen Ergebnissen auch Rückschlüsse auf die Niederenergieeigenschaften von SDDs ziehen, denn die Erzeugung der Ladungswolke im Silizium ist bei allen Siliziumdetektoren gleich.

Im Gegensatz zu SDDs und pin-Dioden ist die Metallisierungsschicht im Eintrittsfenster kein Ohmscher, sondern ein Schottky-Kontakt (d. h. mit nicht-verschwindendem Kontaktwiderstand). Die Bandverbiegung an Schottky-Kontakten ist für freie

Elektronen mit geringer Restenergie eine Barriere, und sie können das empfindliche Volumen nicht verlassen oder werden zumindest teilweise „reflektiert“ [Sch94]. Deshalb gehen bei Si(Li)-Detektoren in der Nähe des Eintrittsfensters weniger Ladungsträger verloren, und ihr Untergrund ist geringer.

Si(Li)s haben mehrere bedeutende Nachteile: Sie müssen stets gekühlt betrieben und gelagert werden. Zur Kühlung wird flüssiger Stickstoff verwendet, was die Verwendung von Kryostaten erfordert und somit das Detektorsystem groß und unhandlich macht. Überdies sind sie nicht zur Messung bei hohen Zählraten geeignet, da sie ihre optimale Energieauflösung erst bei relativ langen Pulsformungszeiten τ erreichen (20 bis 80 μ s). Dies liegt an der großen Kapazität (Fläche) der Ausleseanode, da das thermische Rauschen proportional zu $C/\sqrt{\tau}$ ist (Gleichung 3.11), d. h. eine lange Pulsformungszeit verringert das Rauschen.

2.4.2 Gasdetektoren

Zur Messung ionisierender Strahlung werden neben Halbleiterdetektoren auch Gasdetektoren verwendet. Als Gase kommen dabei meist Gemische aus Edelgasen (Helium, Argon, Xenon) und Löschgasen (Methan, Isobutan, Kohlendioxid) zum Einsatz, wobei ihr Verhältnis ungefähr 9:1 bis maximal 1:1 beträgt.

Aufgrund des höheren Fano-Faktors und der hohen Elektron-Ion-Paar-Erzeugungsenergie ist in Gasen die statistische Fluktuation in der Anzahl der erzeugten Ladungsträger deutlich höher als in Halbleitern. Demzufolge ist die Energieauflösung von Proportionalzählern erheblich schlechter (vgl. Abschnitt 2.1.9). Deshalb wird in der RFA bei Gasdurchflußzählern meist ein spezielles dispergierendes Element eingesetzt (siehe Anhang A). Die spektrale Verteilung der Fluoreszenzstrahlung wird dann durch Beugung an einem Analysatorkristall ermittelt. Dies erhöht die Meßdauer erheblich. Der Detektor wird in diesem Fall ausschließlich als Zähler verwendet.

Im Vergleich zu Halbleitern sind selbst hochreine Gase relativ preiswert, und es treten keine Leckströme auf. Das empfindliche Volumen kann daher praktisch beliebig groß gemacht werden. Ein wichtiges Anwendungsgebiet von großen, ortsempfindlichen Gasdetektoren ist deshalb die Hochenergiephysik, in der Spuren relativistischer Teilchen verfolgt werden, die in hochenergetischen Kernreaktionen entstehen [Sau77]. Dazu benutzt man Spurendriftkammern (*time projection chambers*, TPCs [Nyg81]), die im Vergleich zu Halbleiterdetektoren jeweils um den Faktor 10 schlechtere Orts- ($\gtrsim 150 \mu$ m) und Energieauflösungen (≈ 1 keV FWHM bei 6 keV) haben. Ihre Energieauflösung reicht jedoch aus, um anhand des Ionisierungsgrades verschiedene Teilchensorten zu unterscheiden (zusammen mit der unterschiedlichen Bahnkrümmung im Magnetfeld). Zudem können sie Spurlängen von mehreren Metern Länge dreidimensional aufzeichnen und einzelnen Spuren trennen, da sie mit einem Abstand von einigen 10 cm relativ weit vom Vertex aufgebaut sind. Das Driftprinzip zylindersymmetrischer TPCs ähnelt dem des SDD, nur daß die Elektronen nicht nach innen, sondern nach außen driften, wo die Gasverstärkungsdrähte und Ausleseelektroden angebracht sind [Sch99, Egg00, Eck01, Ack03].

3 Elektronisches Rauschen

Die Energieauflösung σ ist die wichtigste Kenngröße von energiedispersiven Detektoren. Die Energieauflösung von Halbleiterdetektoren ist durch das elektronische und das Fano-Rauschen gegeben (siehe Abschnitt 2.1.9).

$$\sigma = \sqrt{\sigma_{\text{el}}^2 + FwE_0}$$

Der Fano-Faktor F und die Elektron-Loch-Paar-Erzeugungenergie w sind Materialkonstanten. Die Fano-Statistik begrenzt also prinzipiell die erreichbare Energieauflösung (siehe Abbildung 2.4). Das elektronische Rauschen σ_{el} ist nicht nur durch das Rauschen der Ausleseelektronik bedingt, sondern entsteht bereits im Detektor. Während das Fano-Rauschen nicht verringert werden kann, ist es eine technologische und physikalische Herausforderung, Detektoren mit möglichst kleinem elektronischen Rauschen herzustellen. Dazu müssen beim Design, bei den einzelnen Technologieprozessen und auch im Gesamtaufbau des Systems (SDD, Modul und Elektronik) zahlreiche Parameter berücksichtigt werden.

Abbildung 3.1 veranschaulicht, weshalb man in der RFA ein möglichst kleines elektronisches Rauschen benötigt. Es zeigt Röntgenfluoreszenzspektren der gleichen Probe mit unterschiedlichen Energieauflösungen. Das mittlere Spektrum zeigt die Elementverteilung des Marsbodens im Krater „Gusev“. Es wurde am 18. Januar 2004 vom NASA-Mars-Rover „Spirit“ mit einem SDD aufgenommen. Der obere Bildteil zeigt ein simuliertes Spektrum mit gleicher Elementverteilung für den hypothetischen Fall, daß kein elektronisches Rauschen auftritt. Unten ist das Spektrum mit relativ hohem elektronischen Rauschen gezeigt, wie es die pin-Diode der Pathfinder-Marsmission von 1997 gemessen hätte. Je geringer das Rauschen ist, desto mehr Details sind zu erkennen und desto genauer können die Elementkonzentrationen bestimmt werden.

3.1 Grundlagen

Rauschen ist eine unvorhersehbare zeitliche Variation einer Spannung bzw. eines Stromes. Der Mittelwert des Rauschbeitrags eines gegebenen Stroms I_0 ist null. Als Maß für die Rauschleistung wird deshalb die Varianz

$$\sigma_{\text{el}}^2 = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t (I(t') - \langle I \rangle)^2 dt' \tag{3.1}$$

oder ihre Wurzel, der Effektivwert σ_{el} verwendet [Wer02]. Die Fourier-Transformierte des zeitabhängigen Rauschens gibt das Rauschen als Funktion der Frequenz f an. Diese spektrale Rauschleistungsdichte $W(f)$ beschreibt die Rauschleistung in

3 Elektronisches Rauschen

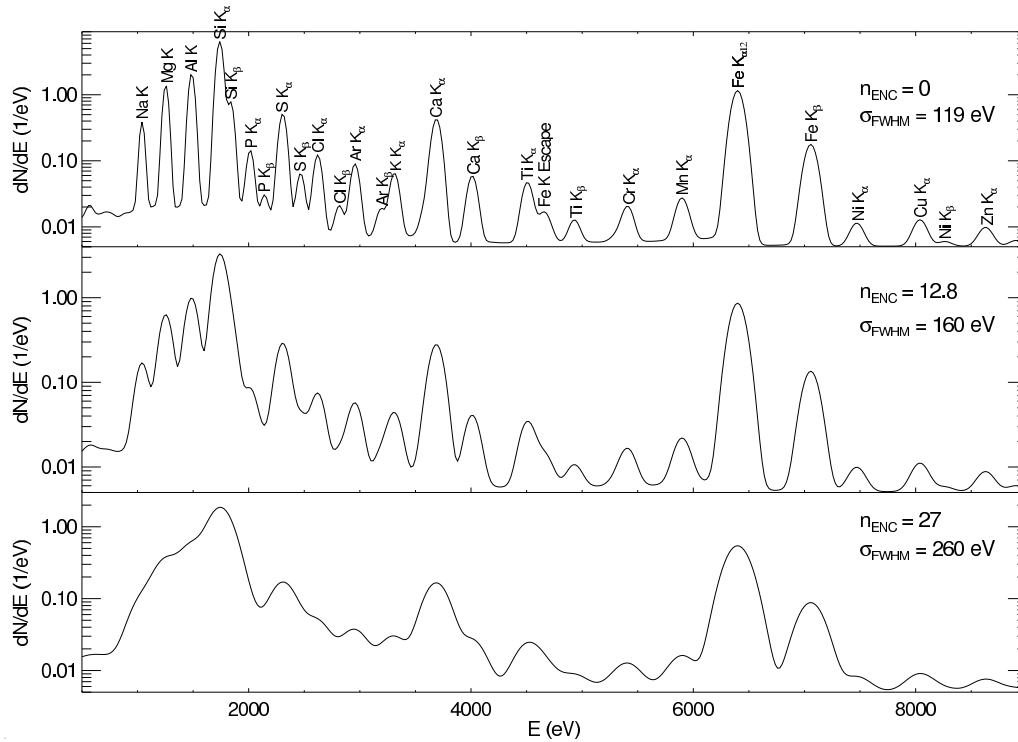


Abbildung 3.1: Mitte: RFA-Spektrum des Marsbodens im Krater „Gusev“, aufgenommen mit einem SDD, der ein elektronisches Rauschen $n_{\text{ENC}} = 12.8$ hat (R. RIEDER, MPI für Chemie, persönliche Mitteilung). Oben: Simulation ohne elektronisches Rauschen, was einem σ_{FWHM} von 117 eV bei 5.9 keV entspricht. Unten: Simulation mit einem deutlich höheren elektronischen Rauschen von 27 Elektronen, wie es die AMPTEK-pin-Diode XR-100 T besaß, die 1997 auf der Pathfinder-Mars-Mission eingesetzt wurde. In die Berechnungen sind nicht nur die Hauptlinien, sondern auch der Untergrund sowie die detektorbedingten Al-Fluoreszenz- und Escape-Linien einbezogen. Diese werden mit der in Kapitel 4 vorgestellten Methode berechnet.

einem definierten Frequenzband df , z. B. $df = 1$ Hz. Die gesamte Rauschleistung ist dann durch $\int_0^\infty W(f)df$ gegeben.

Die Rauschleistungen und die spektralen Rauschleistungsdichten werden im folgenden in physikalischer (unilateral) Schreibweise angegeben, d. h. mit ausschließlich positiven Frequenzen. In der mathematischen (bilateralen) Formulierung gehen die Frequenzen hingegen von $-\infty$ bis $+\infty$.

Bei frequenzunabhängiger Rauschleistung spricht man von weißem Rauschen. Nimmt das Rauschen mit zunehmender Frequenz ab, so spricht man von rosa oder $1/f$ -Rauschen, auch wenn diese Abnahme nicht immer ein strenges $1/f$ -Verhalten zeigt. Einstreuungen (*pick-up*) äußerer elektromagnetischer Felder erzeugen Störungen bei fester Frequenz, z. B. bei 50 Hz durch das Stromnetz. Sie gehören jedoch streng genommen nicht zum Rauschen, denn Rauschen wird ausschließlich von Fluktuationen der Geschwindigkeit (thermisches Rauschen) oder Anzahldichte der Ladungsträger (Schrot- und $1/f$ -Rauschen) verursacht.

Das Rauschen wird oft nicht als spektrale Rauschleistungsdichte, sondern als

äquivalente Rauschladung n_{ENC} angegeben. Diese Größe besagt, daß dieser Rauschbeitrag die Bestimmung einer im Detektor generierten Ladungsmenge auf n_{ENC} Elektronen (R.M.S) genau erlaubt. Es ist also das Verhältnis der Rauschamplitude am Ausgang zu dem Signal *eines* Elektrons am Eingang. Der von einer Elementarladung e verursachte Spannungspuls ist e/C (Gleichung 2.11). Die äquivalente Rauschladung n_{ENC} ist also definiert als

$$n_{\text{ENC}} = \frac{\text{Rauschamplitude}}{\text{Signal eines Elektrons}} = \frac{C}{e} \sqrt{\langle U^2 \rangle}. \quad (3.2)$$

Obwohl die äquivalente Rauschladung eine dimensionslose Größe ist, findet man häufig die Angabe von n_{ENC} in „Elektronen“.

In den letzten Jahren ist es gelungen, das Rauschen von SDDs erheblich zu verringern: Das elektronische Rauschen n_{ENC} der ersten Driftdetektoren lag bei 300 Elektronen ($\sigma_{\text{FWHM}} = 2.6 \text{ keV}$ bei 13.9 keV) [Reh85]. Die Entwicklung eines speziellen, einseitigen Sperrschichtfeldeffekttransistors für die Integration auf schwach dotierten Substraten [Rad89] ermöglichte die ersten vollständig verarmten Sperrschicht-CCDs [Pin93] und Driftdetektoren [Har94] mit integrierter Elektronik. Bei dem ersten SDD mit integriertem Transistor betrug das elektronische Rauschen $n_{\text{ENC}} = 42$ Elektronen ($\sigma_{\text{FWHM}} = 400 \text{ eV}$ bei 13.9 keV). Wenig später wurde ein n_{ENC} von 34 Elektronen bei Raumtemperatur und 27 Elektronen bei -20°C erreicht [Pin95]. Der in dieser Arbeit untersuchte SDD hat eine äquivalente Rauschladung von 8.5 Elektronen, während an speziellen SDD-Tropfenstrukturen mit sehr kleiner Anode bereits n_{ENC} -Werte von 5.7 gemessen wurden [Pah04].

Um das Rauschen soweit wie möglich zu reduzieren, müssen die einzelnen Rauschbeiträge genau identifiziert werden. Grundsätzlich gibt es drei verschiedene Rauschquellen [Mül90]: Thermisches Rauschen, niederfrequentes Rauschen und Schrotrauschen, welche in den Abschnitten 3.2 bis 3.4 behandelt werden.

Im folgenden werden nur die Anteile des Detektors am elektronischen Rauschen angegeben und keine Rauschanteile der Ausleseelektronik, denn ihr zusätzliches Rauschen kann bei geeignet konstruierten Spektroskopieverstärkerschaltungen vernachlässigt werden [Ber93]. Die Zeitkonstanten der Filterglieder des Pulsformers haben jedoch Auswirkungen auf das Gesamtrauschen und somit auf die Energieauflösungen, weshalb dieser Zusammenhang in Abschnitt 3.5 diskutiert wird.

Rauschen verursacht im Spektrum nicht nur eine Verbreiterung der Hauptlinie, sondern auch einen „Rausch-Peak“ bei 0 eV , der zur Kalibrierung und Rauschbestimmung verwendet werden kann. Je nach Größe des Rauschens beeinflusst er auch den niederenergetischsten Teil des Spektrums knapp oberhalb der Diskriminatorschwelle, die meist zwischen 0.1 und 1 keV liegt. Deshalb schränkt das elektronische Rauschen auch die Messung niederenergetischer Röntgenstrahlung ein. Dieser Einfluß wird in Abschnitt 3.6 behandelt.

3.2 Thermisches Rauschen

Thermisches Rauschen entsteht durch thermale Fluktuationen der Elektronenverteilung in elektrischen Leitern (Brownsche Molekularbewegung). Es tritt in allen

Leitern auf, unabhängig davon, ob Strom fließt oder nicht. Es wird von Schwankungen in der räumlichen Ladungsträgerverteilung verursacht, die aus der thermischen Geschwindigkeitsverteilung der Ladungsträger resultieren [Nyq28, Bük71].

Zur Herleitung der Rauschleistungsdichten betrachtet man zwei Systeme, die aus je einer Spannungsquelle und einem Widerstand bestehen und über eine verlustlose Leitung verbunden sind. Rauschen, das in einem Widerstand entsteht, wird im Widerstand des jeweils anderen Systems in Wärme umgewandelt. Wenn man beide Systeme an beiden Enden kurzschließt, erzeugt das thermische Rauschen stehende Wellen, da die Schwingungen reflektiert werden.

Zur Berechnung des thermischen Rauschens werden alle möglichen Zustände stehender Wellen in einem Frequenzintervall abgezählt. Diese Anzahl wird schließlich mit der Besetzungswahrscheinlichkeit nach der Boltzmann-Statistik multipliziert. Die spektrale Rauschleistungsdichte $d\langle U^2 \rangle/df$ in quantenmechanisch exakter Rechnung bzw. klassischer Näherung ($h \rightarrow 0$) beträgt dann [Lut99, Abschnitt 7.2.1]

$$\frac{d\langle U^2 \rangle}{df} = 4Rhf \coth \frac{hf}{k_B T} \approx 4k_B T R. \quad (3.3)$$

$\langle U^2 \rangle$ ist das mittlere Rauschspannungsquadrat, f die Frequenz, k_B die Boltzmannkonstante, T die Temperatur, R der Widerstand und h die Plancksche Konstante.

Ein realer Widerstand verhält sich wie ein idealisierter (rauschloser) Widerstand, mit einer zusätzlichen seriellen Rauschquelle U , beschrieben durch Gleichung 3.3. Im Ersatzschaltbild liegt die Spannungsquelle des thermischen Rauschens in Reihe mit dem Widerstand, weshalb man es auch *seriellen Rauschen* nennt.

Das Rauschen kann alternativ über eine parallele Rauschstromquelle I beschrieben werden. Die spektrale Rauschleistungsdichte ist dann

$$\frac{d\langle I^2 \rangle}{df} = \frac{4k_B T}{R}.$$

Thermisches Rauschen tritt in allen Bauelementen wie Widerständen und Dioden auf. Im SDD entsteht das thermische Rauschen vor allem im Transistor. Dort hängt das Rauschen vom Gegenwärtigkeitwert g_m (Steilheit, *transconductance*) des Transistors ab. Dieser ist definiert als

$$g_m = \frac{\partial I_{\text{Drain}}}{\partial U_{\text{Gate}}}, \quad (3.4)$$

wobei I_{Drain} der Drain-Strom und U_{Gate} die Gate-Spannung (bezogen auf das Source-Potential) ist. Näherungsweise kann die Steilheit auch aus dem absoluten Drain-Strom und der thermischen Spannung $U_{\text{th}} = kT/e$ berechnet werden [Lut99, Gleichung 7.1.80].

$$g_m \approx \frac{|I_{\text{Drain}}|}{U_{\text{th}}} = \frac{e|I_{\text{Drain}}|}{k_B T} \quad (3.5)$$

Das thermische Rauschen ist dann wie folgt gegeben [Lut99, Abschnitt 7.2.4].

$$\frac{d\langle U^2 \rangle}{df} = \frac{8}{3} \frac{k_B T}{g_m} \quad (3.6)$$

Die Steilheit des Transistors im SDD beträgt $375 \mu\text{A}/\text{V}$, während kommerzielle JFETs mit niedrigen Kapazitäten deutlich höhere Steilheiten von mehr als $5 \text{ mA}/\text{V}$ erreichen (z. B. INTERFET 2N4416 oder MOXTEK MX40). Eine höhere Transistorsteilheit bewirkt also ein geringeres Rauschen im Gesamtsystem.

3.3 Niederfrequentes Rauschen

Das niederfrequente Rauschen (*flicker noise*) entsteht durch vielfältige Mechanismen [Li04] und ist unter anderem eine Folge von statistischen Schwankungen in der Teilchenzahl und der Mobilität der Ladungsträger [Jän71, Jin81]. Die spektrale Rauschleistungsdichte des Niederfrequenzrauschens ist proportional zu

$$\frac{d\langle U^2 \rangle}{df} \propto \frac{1}{f^a}, \quad (3.7)$$

wobei $a \approx 1$ ist [Hoo69, Hoo81]. Deshalb wird das niederfrequente Rauschen auch $1/f$ -Rauschen genannt.

In unipolaren Transistoren wird das $1/f$ -Rauschen im wesentlichen von Kristalldefekten im Kanal erzeugt, welche Ladungsträger einfangen und reemittieren – sogenannte elektrisch aktive Einfangzentren (*traps*) [McW57, Chr68]. Diese temporär fixierten Ladungen induzieren eine Ladung im Kanal und modulieren den Transistorstrom. Betrachtet man eine einzelne Störstelle im n-Kanal eines JFET, so ist die Amplitude dieser Modulation konstant, da sie lediglich von der Position des Defekts im Kanal abhängt. Die Einfangzeitkonstante hängt vom Elektroneneinfangquerschnitt und der Elektronenkonzentration in Defektnähe ab. Die Emissionszeitkonstante hängt wiederum von der Energie der Störstelle und der Temperatur ab. Der Rauschbeitrag ist darüber hinaus auch von der Dichte der Einfangzentren abhängig. Die in unregelmäßigen Abständen auftretende Absorption und Emission von Elektronen in der Störstelle erzeugt einen zufälligen, zeitabhängigen Wechsel des Drain-Stromes (*random telegraph signal* [Kan81, Kan89]). In diesem Fall wird das $1/f$ -Rauschen auch RTS-Rauschen genannt.

Eine Analyse des Niederfrequenzrauschens in Sperrschichtfeldeffekttransistoren – insbesondere der Einfluß einzelner Störstellen – findet sich in [Hör01]. Demnach haben Störstellen im Transistorkanal einen besonders großen Einfluß auf das Rauschen, wenn sie dort lokalisiert sind, wo die Elektronenkonzentration $\approx 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ beträgt. Zudem haben sie einen größeren Einfluß, wenn sie sich in der Nähe der Drain befinden als in der Nähe des Source-Kontaktes.

Das $1/f$ -Rauschen spielt vor allem in *inversion type* MOSFETs eine Rolle, da dort der Transistorkanal nahe der Oberfläche verläuft, wo sich viele Störstellen befinden. In JFETs und *depletion type* MOSFETs ist es in der Regel weniger bedeutend [Hör01]. Da das Gesamtrauschen von SDDs sehr klein ist, kommt es dort dennoch zum Tragen.

3.4 Schrotrauschen und Leckströme

Schrotrauschen entsteht durch die statistischen Fluktuationen der Anzahl N der Ladungsträger mit der Ladung $q = Ne$. Es tritt dann auf, wenn – wie in JFETs der Fall – von einer externen Stromquelle ein Stromfluß generiert wird.

Das Schrotrauschen ist unabhängig von der Frequenz [Mül90].

$$\frac{d\langle I^2 \rangle}{df} = 2Ie \quad (3.8)$$

Es wird auch als paralleles Rauschen bezeichnet. Das Schrotrauschen im SDD wird im wesentlichen von den Leckströmen I_L erzeugt. Als Leck- oder Dunkelströme bezeichnet man alle Ströme, die – abgesehen von den durch Strahlung generierten Signalladungen – zur Anode bzw. zum Gate des Transistors fließen.

Leckströme sind proportional zur intrinsischen Ladungsträgerdichte n_i , welche folgende Temperaturabhängigkeit aufweist [Sze81, Abschnitt 1.4]:

$$I_L \propto n_i \propto T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_G}{2k_B T}\right) \quad (3.9)$$

Sind bei einem Halbleiterdetektor die Leckströme klein, so muß er kaum oder gar nicht gekühlt werden. Sind hingegen die Leckströme höher, so kann man unter Umständen die Leckströme „wegkühlen“ und dennoch gute Detektoreigenschaften erreichen. Auf die Temperaturabhängigkeit der Leckströme wird genauer in Abschnitt 3.6 eingegangen.

Man unterscheidet zwischen Diffusions-, Oberflächen-, Generations- und Tunnelleckströmen [Win86, Abschnitt 3.1.1].

Diffusionsleckstrom

Der Diffusionsleckstrom entsteht durch Diffusion der Minoritätsladungsträger in feldfreien p- und n-Gebieten zu den Rändern der Raumladungszone hin. An den relativ abrupten p^+n^- -Übergängen im SDD ist er sehr klein und hat am Substratleckstrom deshalb keinen Anteil. Im JFET des SDD gibt es hingegen nahe den p^+ -Kontakten stark dotierte n-Gebiete – dort treten Diffusionsleckströme durchaus auf.

Oberflächenleckstrom

Der Oberflächenleckstrom rührt von defektbedingten, mobilen Ladungsträgern an der Oberfläche her. Der Oberflächenleckstrom auf der SDD-Vorderseite verschlechtert nicht die Energieauflösung und trägt nicht zum Rauschen bei, da er von speziellen Substratkontakten abgezogen wird (siehe Seite 24).

Generationsleckströme

Generationsleckströme entstehen durch thermische und Störstellengeneration.

Bei der *thermischen Generation* können Elektronen durch ihre thermische Energie vom Valenz- in das Leitungsband gehoben werden. Geschieht diese Generation in einem nicht-verarmten Gebiet, so können Elektron-Loch-Paare mit den dort vorhandenen freien Ladungsträgern rekombinieren. Im elektrischen Feld der Raumladungszone werden die thermisch generierten Ladungen jedoch voneinander getrennt und driften zur Anode bzw. zu den Rückseiten- und Randkontakten.

In ähnlicher Weise können freie Ladungsträger in Störstellen thermisch generiert werden. Bei dieser *Störstellengeneration* werden die Elektronen nicht vom Valenzband, sondern von Störstellenniveaus innerhalb der Bandlücke in das Leitungsband angehoben. Befindet sich eine Störstelle in der Raumladungszone, kann sie zum effektiven Leckstrom beitragen. Generationszentren für Störstellen sind in erster Linie Kristalldefekte (verursacht von Verunreinigungen, Gitterfehlstellen und Strahlenschäden) sowie Oberflächenzustände an Grenzschichten. Liegen die Energieniveaus der Einfangzentren in der Mitte der Bandlücke, kann man näherungsweise davon ausgehen, daß sich der Leckstrom jeweils bei einer Temperaturverringern um 7 K halbiert. Über Energiezustände in der Mitte der Bandlücke können besonders effektiv thermische Elektron-Loch-Paare generiert werden. Ein Elektron geht deutlich wahrscheinlicher über die Störstelle vom Valenz- in das Leitungsband, als direkt, da die Besetzungswahrscheinlichkeit $\propto \exp(-\Delta E/(k_B T))$ ist, also exponentiell von der Energiedifferenz ΔE abhängt [Sze81].

Bei hohen Feldstärken können zudem Ladungsträger der Diffusions- und Generationsleckströme in der Raumladungszone durch Stoßionisation eine Ladungsträgerlawine auslösen (Avalanche-Durchbruch). Die elektrischen Feldstärken in SDDs (welche z. B. von den angelegten Sperrspannungen erzeugt werden) sind jedoch nicht hoch genug, um diesen Effekt auszulösen.

Tunnelleckstrom

Auch bei niedrigeren Schwellenfeldstärken können Ladungsträger aufgrund des Tunneleffekts vom p- in das n-Gebiet gelangen (Zener-Durchbruch). Dieser Tunneleffekt tritt jedoch vorwiegend dann auf, wenn sowohl das p- als auch das n-Gebiet hoch dotiert sind (p⁺n⁺-Übergang im Transistor), da dort die Raumladungszone entsprechend kurz ist. Tunnelleckströme spielen deshalb im aktiven Volumen des SDD keine Rolle.

Leckströme im SDD

Für den SDD sind vor allem Diffusions- und Generationsleckströme von Bedeutung. Deshalb muß bei der Herstellung darauf geachtet werden, möglichst keine Fremdatome, Stör- und Fehlstellen in den Detektor zu bringen. Der volumenabhängige Generationsleckstrom macht sich insbesondere bei großflächigen Detektoren bemerkbar. Diese müssen deshalb stärker gekühlt werden, um ebenso gute Energieauflösungen wie kleinere Detektoren zu erreichen. Dieser Zusammenhang wird in Abschnitt 3.6 berechnet (siehe Abbildung 3.6).

Ein weiterer Leckstromanteil entsteht durch den zählratenabhängigen Entladestrom vom Gate zum Drain-Kontakt des Transistors. Dieser Effekt ist auf den

3.5 Einfluß von RC-Netzwerken auf das Gesamtrauschen

Die Widerstände und Kapazitäten im Detektor und Pulsformer geben untere und obere Grenzfrequenzen für das System vor (siehe Abschnitt 2.3.1). Sie verringern also nieder- und hochfrequente Rauschanteile.

Jeder Detektor hat einen charakteristischen seriellen Widerstand R und eine parallele Kapazität C , stellt also von sich aus bereits einen Tiefpaß mit der Zeitkonstante $\tau = RC$ dar (Gleichung 2.24). Die Filterglieder im Pulsformer, deren Zeitkonstanten variabel sind, beeinflussen ebenfalls die einzelnen Anteile des elektronischen Rauschens. Der Einfluß der Filterglieder auf die Komponenten des elektronischen Rauschens wird in Anhang B hergeleitet.

Das Quadrat der gesamten äquivalenten Rauschladung ist die Summe der einzelnen, quadrierten äquivalenten Rauschladungen für alle drei Rauschbeiträge aus den Gleichungen B.1, B.2 und B.4.

$$n_{\text{ENC}}^2 = A_1 \frac{2k_{\text{B}}TC^2}{3g_{\text{m}}\tau} + \text{thermisches Rauschen} \quad (3.11)$$

$$A_2 \frac{C^2}{e^2} + \text{1/f-Rauschen} \quad (3.12)$$

$$A_3 \frac{I_{\text{L}}\tau}{e} \text{Schrotrauschen} \quad (3.13)$$

A_1, A_2, A_3 sind Konstanten, die den jeweiligen Rauschanteil parametrisieren, und I_{L} enthält alle Leckströme (Abschnitt 3.4). Das elektronische Rauschen kann durch eine kleine Detektorkapazität deutlich reduziert werden, da n_{ENC} proportional zu C ist. Da der SDD eine sehr kleine Anodenfläche A besitzt, ist sein Rauschen auch bei kurzen Pulsformungszeiten τ gering (vgl. Gleichungen 2.10 und 3.11).

Berücksichtigt man zudem das Kanaltrauschen nach Gleichung B.3 und die Temperaturabhängigkeit der Leckströme nach Gleichung 3.9, erhält man folgende Gesamtabhängigkeit von Temperatur und Pulsformungszeit:

$$n_{\text{ENC}}^2 = a_0 \frac{T}{\tau} + a_1 + \left(a_2 T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_{\text{G}}}{2k_{\text{B}}T}\right) + a_3 T \right) \tau \quad (3.14)$$

Der erste Term $\propto 1/\tau$ parametrisiert das thermische Rauschen (a_0), der zweite, von τ unabhängige Term das Niederfrequenzrauschen (a_1) und der Term $\propto \tau$ das Schrotrauschen. Dabei wird die Proportionalität zur Temperaturabhängigkeit der Bandlücke (a_2) bzw. des Rauschens im Transistorkanals (a_3) getrennt betrachtet.

Nach den Gleichungen 3.11 bis 3.14 müssen also die Kapazität C , die Temperatur T sowie der Leckstrom klein sein, um das Rauschen zu minimieren. Werden Temperatur und Shaping-Zeit variiert, so lassen sich die einzelnen Rauschterme separieren. Eine detaillierte Analyse der Rauschbeiträge des SDD wird im folgenden Abschnitt durchgeführt (vgl. [Egg04]).

Rauschen	Fit-Parameter	Wert	Beitrag zu n_{ENC}^2 bei $\tau = 1 \mu\text{s}$, $T = 253 \text{ K}$
thermisch	a_0	$(0.076 \pm 0.005) \mu\text{s/K}$	19.2
$1/f$	a_1	37.2 ± 4.0	37.2
Leckstrom	a_2	$(4.78 \pm 0.27) \cdot 10^{18} \text{ K}^{2/3}$	0.95
FET-Kanal	a_3	$(0.059 \pm 0.005)/\text{K}$	14.9

Tabelle 3.1: Fit-Parameter der Rauschmessungen. Bei der Berechnung des individuellen Rauschbeitrages i zum Gesamtrauschen werden alle anderen Fit-Parameter $a_{j \neq i}$ null gesetzt. Das berechnete Gesamtrauschen, also die Wurzel der Summe der n_{ENC}^2 -Einzelbeiträge, beträgt hier 8.5 bei $\tau = 1 \mu\text{s}$ und $T = 253 \text{ K}$.

3.6 Separation der Rauschbeiträge

Um die einzelnen Rauschbeiträge zu separieren, wird die Energieauflösung des SDD mit Pulsformungszeiten zwischen 0.25 und 6 μs jeweils bei Temperaturen von -65 , -40 , -25 , -20 , -15 und 0°C gemessen. Mit dem im SDD-Modul eingebauten Peltier-Kühler lassen sich gegenüber Raumtemperatur nur Temperaturdifferenzen bis 50 K erzielen. Deshalb werden alle Messungen in einer Klimakammer durchgeführt. Die Temperatur wird sowohl mit dem Regelthermometer der Klimakammer als auch mit der Temperaturdiode bestimmt, welche auf dem SDD-Chip integriert ist. Beide Temperaturen stimmen jeweils innerhalb 2 K überein.

Als Strahlenquelle dient Mn- $K_{\alpha,\beta}$ -Strahlung aus einer ^{55}Fe -Quelle. Das elektronische Rauschen n_{ENC}^2 wird aus der Energieauflösung der K_{α} - und K_{β} -Linien mit Hilfe von Gleichung 2.22 bestimmt. Von den resultierenden äquivalenten Rauschladungen der K_{α} - und K_{β} -Linien wird der Mittelwert gebildet.

Die Ergebnisse dieser Messungen sind in Abbildung 3.3 dargestellt. Der besseren Übersicht halber ist lediglich der n_{ENC}^2 -Bereich bis 160 gezeigt. Die Messungen bei -40°C fehlen, da sie den Messungen bei -60°C ähneln. In die Fit-Prozedur werden diese Werte jedoch einbezogen. Im Gegensatz zu vorherigen, vergleichbaren Rauschuntersuchungen [Pin95, Ber96, Fas96] werden nicht die Rauschbeiträge der einzelnen, pulsformungszeitabhängigen n_{ENC}^2 -Kurven bei jeweils konstanter Temperatur berechnet, sondern aus einem zweidimensionalen Fit nach Gleichung 3.14, der die Temperatur- und Pulsformungszeitabhängigkeit berücksichtigt. Dadurch kann man noch präziser die Einzelbeiträge des Rauschens (insbesondere seine Temperaturabhängigkeit) separieren und das Verhalten zukünftiger Detektoren vorhersehen (s. u.). Die resultierenden Fit-Parameter sind in Tabelle 3.1 gezeigt.

Graphisch ist das Ergebnis des Fits rechts in Abbildung 3.4 dargestellt, oben dreidimensional und unten als Konturplot. Links sind zum Vergleich die Meßwerte gezeigt. Die unterschiedlichen Farben stehen für die Flächen gleichen Rauschens (siehe Legende). Entlang der T -Achse liegt das Minimum stets bei der niedrigsten Temperatur. Entlang der τ -Achse gibt es jeweils eine optimale Pulsformungszeit, die bei niedrigen Temperaturen bei 2 μs liegt und bei 273 K bei 0.5 μs .

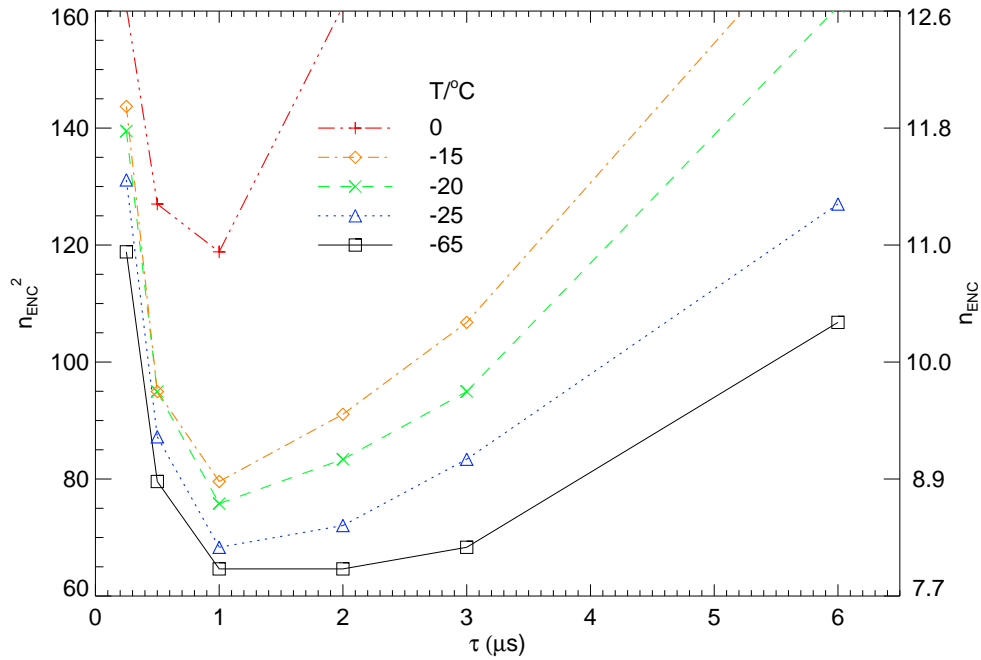


Abbildung 3.3: Das gemessene Rauschen in Abhängigkeit von der Pulsformungszeit τ für verschiedene Chip-Temperaturen T . Bei niedrigerer Temperatur wird das Rauschen kleiner und eine längere Pulsformungszeit günstiger.

Ein Maß für die Güte des Fits ist das reduzierte χ^2 [Bro89, Kno89].

$$\chi^2_{\text{red}} = \frac{\chi^2}{\nu}, \quad (3.15)$$

wobei χ^2 die mittlere quadratische Abweichung der Meßwerte von den Erwartungswerten ist (Gleichung 6.1) und ν die Anzahl der Freiheitsgrade. Die Anzahl der Freiheitsgrade ist die Anzahl der Meßwerte minus der Anzahl der Fit-Parameter, also $36 - 4 = 32$. Das χ^2 des Fits ist 31.37, χ^2_{red} ist demnach 0.98. Das bedeutet, daß Gleichung 3.14 mit den Parametern aus Tabelle 3.1 die Meßwerte sehr gut wiedergibt und weder zu hohe Fluktuationen aufweist, noch die Abweichung zwischen Fit- und Meßwerten unwahrscheinlich klein sind. Die Funktion enthält also weder zu wenige ($\chi^2_{\text{red}} \gg 1$) noch zu viele Anpassungsparameter ($0 < \chi^2_{\text{red}} \ll 1$).

Mit Hilfe der Fit-Parameter a_i lassen sich die Einzelbeiträge des Rauschens aufschlüsseln. Für $T = -20^\circ\text{C}$ und $\tau = 1\ \mu\text{s}$ sind die jeweiligen n_{ENC}^2 -Beiträge in der letzten Spalte in Tabelle 3.1 angegeben. Für variierende Temperaturen und Pulsformungszeiten sind die Einzelbeiträge und das Gesamtrauschen in Abbildung 3.5 gezeigt. Betrachtet man die einzelnen Rauschbeiträge, so lassen sich zahlreiche Schlußfolgerungen ziehen:

Das thermische Rauschen ($\propto a_0$) läßt sich durch längere Pulsformungszeiten unterdrücken, während das Rauschen des Transistorkanals ($\propto a_3$) mit längeren Pulsformungszeiten ansteigt. Es ist nur schwach von der Temperatur abhängig, so daß diese Rauschbeiträge durch tiefere Detektortemperaturen nicht deutlich

3 Elektronisches Rauschen

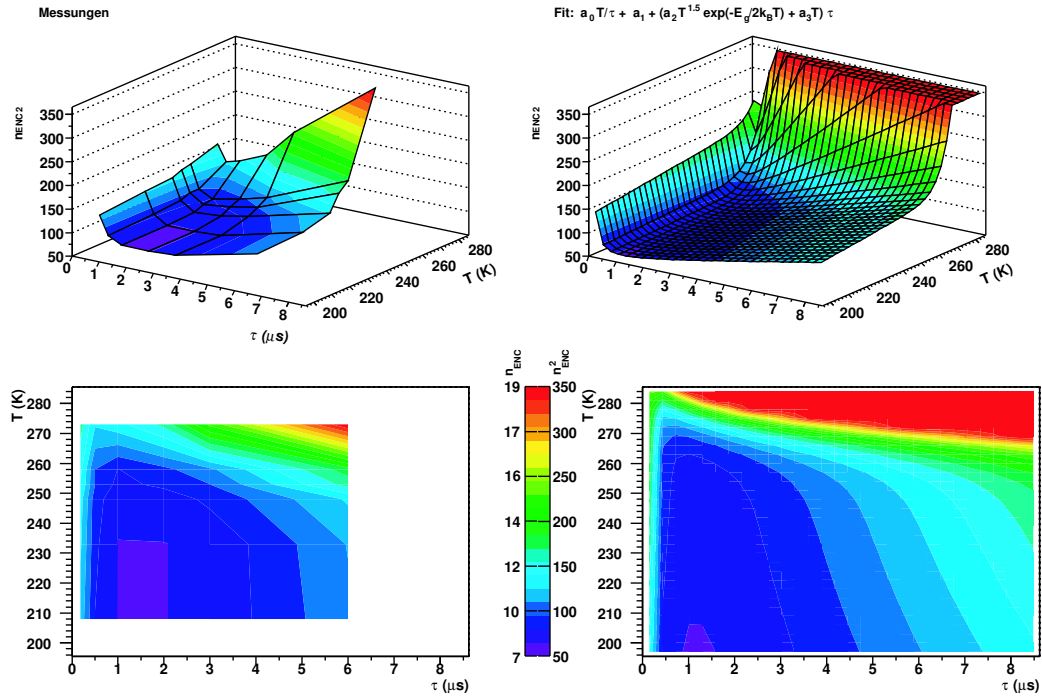


Abbildung 3.4: Das gemessene Rauschen (links) und die Fit-Funktion nach Gleichung 3.14. Oben: 3D-Darstellung, unten: Konturplot. Bei niedriger Temperatur sind Pulsformungszeiten von $2 \mu\text{s}$ optimal, bei höheren Temperaturen liegt das Minimum des Rauschens bei kürzeren Pulsformungszeiten.

verringert werden können. Um das thermische Rauschen zu verringern, muß die Steilheit des Transistors erhöht werden (siehe Gleichungen 3.5 und 3.6).

Das niederfrequente Rauschen ($\propto a_1$) kann durch eine Änderung der Temperatur oder Pulsformungszeit nicht verringert werden. Bei gekühlten Detektoren liefert es den größten Rauschbeitrag. Um das Rauschen zu minimieren, muß bei der Herstellung künftiger SDDs darauf geachtet werden, daß sich im Transistorkanal möglichst wenige Kristalldefekte und Störstellen befinden. Entsprechende Optimierungen der Technologieschritte sind jedoch aufwendig und langwierig. Es ist deshalb sinnvoll, in Zukunft hochwertige externe Transistoren mit höherer Steilheit und kleinerem Niederfrequenzrauschen einzusetzen. Dadurch fallen zudem diejenigen Implantationsschritte bei der Prozessierung der SDD-Wafer weg, welche ausschließlich für den Transistor benötigt werden, und die Herstellung der SDDs vereinfacht sich. Erste ^{55}Fe -Messungen an SDDs mit externem Transistor zeigen mit 135 eV (FWHM) bei -35°C vielversprechende Resultate.

Ein deutlicher temperaturabhängiger Einfluß zeigt sich beim Leckstrom ($\propto a_2$). Dieser kann bei Temperaturen unterhalb -15°C vernachlässigt werden und steigt ab dieser Temperatur stark an. Ab 0°C ist er der dominierende Rauschbeitrag.

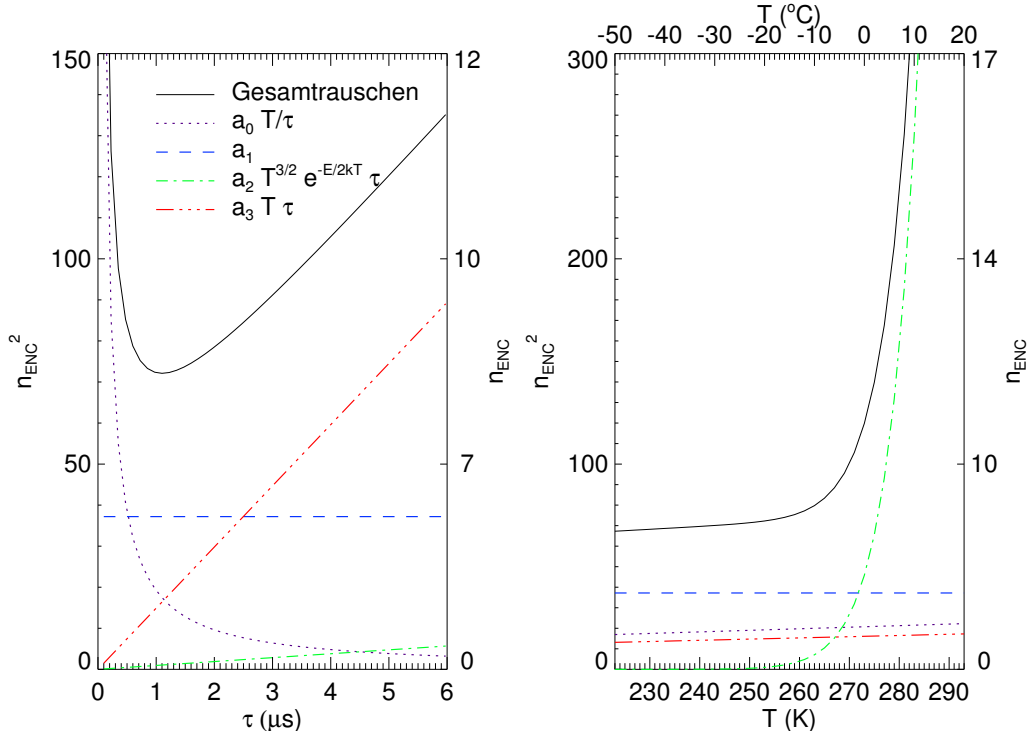


Abbildung 3.5: Die einzelnen Rauschbeiträge in Abhängigkeit von der Shaping-Zeit bei der Betriebstemperatur von $T = -20^\circ\text{C}$ (links) und in Abhängigkeit von der Temperatur bei konstanter Shaping-Zeit von $\tau = 1 \mu\text{s}$ (rechts). Das thermische Rauschen a_0 wird bei längeren Pulsformungszeiten kleiner, der Leckstrom a_2 und das Kanalrauschen a_3 größer. Das $1/f$ -Rauschen a_1 ist unabhängig von τ . Bei Temperaturen über 0°C ist der Leckstrom der dominante Rauschbeitrag.

3.7 Folgerungen

Da der Leckstrom proportional zum strahlungsempfindlichen Volumen steigt, ist es möglich, das Rauschverhalten künftiger, größerer Detektoren über eine entsprechende Skalierung des Leckstromanteils zu berechnen. Die zu erwartenden Energieauflösungen bei 5.9 keV sind in Abbildung 3.6 in Abhängigkeit von der Temperatur gezeigt. Größere Detektoren müssen demnach stärker gekühlt werden, um eine vergleichbare Energieauflösung zu erreichen.

Abbildung 3.6 zeigt, daß die berechnete Energieauflösung von 5 mm^2 -SSDs bei -15°C gleich der Auflösung von 10 mm^2 -SSDs bei -20°C ist. Dieses Ergebnis wird durch den Vergleich von Messungen an 5 mm^2 - und 10 mm^2 -SSDs bestätigt.

Das Gesamtrauschen n_{ENC} für typische Betriebsbedingungen, d. h. $\tau = 1 \mu\text{s}$, $T = 253 \text{ K}$, liegt bei 8.5 (siehe Tabelle 3.1). Ein elektronisches Rauschen dieser Größe schränkt die Messung niederenergetischer Röntgenstrahlung nicht ein, wie folgende Abschätzung zeigt:

Die Breite σ_{el} des Rausch-Peaks bei 0 eV beträgt nach Gleichung 2.20

$$\sigma_{\text{el}} = n_{\text{ENC}} w ,$$

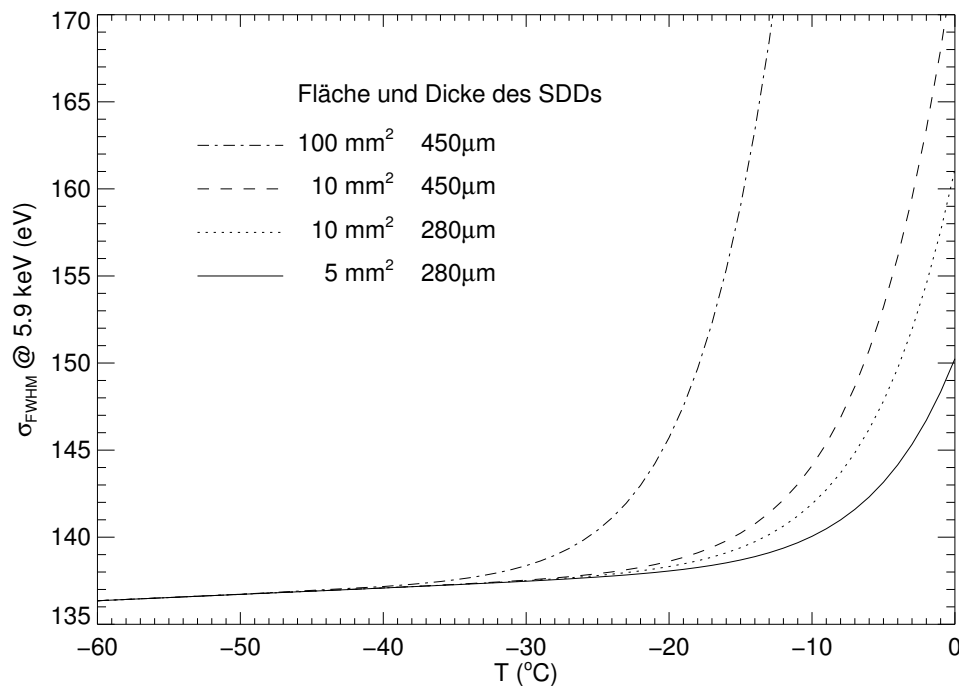


Abbildung 3.6: Die zu erwartende Energieauflösung für SDDs mit größerem empfindlichen Volumen im Vergleich zu den herkömmlichen SDDs mit einer Fläche von 5 mm² und einer Dicke von 280 μm. Wegen der höheren Leckströme müssen größere Detektoren stärker gekühlt werden.

mit $n_{\text{ENC}} = 8.7$ und $w = 3.65$ also 31.8 eV (dies ist *nicht* die volle Halbwertsbreite). Der 3σ -Bereich (99.73 % Wahrscheinlichkeit) dieser Normalverteilung geht bis 95 eV, d. h. lediglich 0.27 % aller Rauschereignisse liegen außerhalb dieses Bereichs. Diese sind unter- und oberhalb des 3σ -Bereichs gleichverteilt. Deshalb liegen oberhalb von 95 eV nur die Hälfte dieser Rauschereignisse, d. h. 0.135 %.

Demnach kann man die Diskriminatorschwelle auf 95 eV legen, ohne nennenswert Meßzeit (live-time) durch Rauschereignisse zu verlieren und ohne den relevanten Niederenergiebereich ≥ 150 eV einzuschränken. Dennoch ist ein niedriges Rauschen besonders für die Messung niederenergetischer Röntgenstrahlung wichtig, denn nur dann lassen sich einzelne Linien gut vom Untergrund und anderen Linien trennen.

Die heutige Generation von SDDs ist schon sehr rauscharm, da die Leckströme sehr klein sind. Verbesserungen lassen sich allenfalls noch durch eine kleinere Anodenkapazität und einen (externen) Transistor mit höherer Steilheit erzielen.

4 Berechnung der spektralen Antwort

4.1 Überblick

Im folgenden wird ein Modell zur Berechnung der spektralen Antwort (*response*) von Siliziumdetektoren entwickelt. Die spektrale Antwort eines Detektorsystems ist die Verteilung der im Detektor generierten und nachgewiesenen Ladung in Abhängigkeit von der Energie der einfallenden Strahlung. Ein Detektor liefert im Idealfall bei monoenergetischer Strahlung stets ein gleich hohes elektrisches Ausgangssignal, während bei realen Detektoren statistische Schwankungen sowie Signale mit deutlich niedrigerer bzw. höherer Signalthöhe auftreten (Untergrund und Pile-up). Grundsätzlich kann zwischen statistischen und systematischen Schwankungen unterschieden werden.

Die statistischen Schwankungen der Ladungsmenge sind durch die Ionisationsstatistik bzw. das elektronische Rauschen bedingt (siehe Abschnitt 2.1.8 und Kapitel 3). Ersteres ist eine unveränderliche Eigenschaft des Halbleitermaterials. Das elektronische Rauschen heutiger SDDs ist bereits sehr gering und schränkt mittlerweile den Nachweis niederenergetischer Röntgenstrahlung kaum ein.

Pile-up- und die damit zusammenhängenden Totzeiteffekte treten erst bei hohen Zählraten auf und sind ebenfalls statistische Phänomene (vgl. Abschnitte 2.3.2 und 2.3.3). Pile-up kann durch geringere Zählraten verhindert werden. Jedoch haben SDDs ohnehin im Vergleich zu pin-Dioden und Si(Li)s sehr kurze Ladungssammelzeiten, weshalb deutlich weniger Pile-up-Ereignisse auftreten. Zudem können bei sehr hohen Zählraten Mehrkanalstrukturen eingesetzt werden (Abschnitt 2.2.5). Eine Verringerung der Totzeit kann mit schnelleren ADCs/MCAs erreicht werden.

Daß außerhalb der statistischen Schwankungen zu wenig Ladung registriert wird, ist ein systematischer Effekt, der bei jedem Halbleiterdetektor auftritt. Die Höhe dieses Untergrunds ist neben der Energieauflösung ein sehr wichtiges Kriterium für die Qualität des Detektors. Insbesondere der Nachweis niederenergetischer Röntgenstrahlung wird vom im Detektor generierten Untergrund begrenzt.

Die Untergrundverteilung von SDDs konnte bisher quantitativ noch nicht erklärt werden (vgl. Abschnitte 1.2 und 2.2.3). Deshalb wird im folgenden ein Modell erstellt, das die Intensität und spektrale Verteilung des Untergrunds berechnet. Mit diesem Modell sollen die Ursachen für die Entstehung des Untergrunds gefunden werden. Sind diese Ursachen bekannt, so können bei Entwurf und Entwicklung künftiger Detektoren diese Erkenntnisse berücksichtigt werden. Um solch ein Modell aufstellen zu können, müssen folgende Fragen beantwortet werden:

- Welche Prozesse führen zur Absorption von Photonen in Materie?
- Wie sind Absorptionswahrscheinlichkeiten dieser Prozesse räumlich verteilt?

- Wie viele Elektron-Loch-Paare welcher Energie werden bei der Absorption von Röntgenstrahlung generiert?
- Wo und wie können diese Elektronen verloren gehen?
- Wie läßt sich aus diesen Informationen der Untergrund berechnen?

Das Kapitel ist deshalb in verschiedene Abschnitte untergliedert, welche sich mit diesen Fragen befassen.

In Abschnitt 4.2 werden die grundlegenden Prozesse erläutert, welche zur Absorption von Photonen in Materie führen. Davon ausgehend wird in Abschnitt 4.3 die Röntgenabsorptionswahrscheinlichkeit und die Quanteneffizienz von Detektoren berechnet. In Abschnitt 4.4 werden die atomaren Prozesse beschrieben, welche der Absorption unmittelbar folgen und hochenergetische Elektronen erzeugen. Diese primären Elektronen können wiederum sekundäre Elektronen generieren, welche die Ladungswolke bilden. In Abschnitt 4.6 wird die räumliche Verteilung der Primär- und Sekundärelektronen berechnet. Schließlich wird in Abschnitt 4.7 die herkömmliche mathematische Beschreibung der Spektralverteilung vorgestellt. Die wichtigsten in diesem Kapitel verwendeten Formelzeichen sind der besseren Übersicht halber zu Beginn des Index aufgeführt.

Die räumliche Verteilung der generierten Ladungsträger kann entweder über eine Monte-Carlo-Simulation oder analytisch berechnet werden. Bei der analytischen Rechnung müssen in der Regel zahlreiche vereinfachende Annahmen gemacht werden, während bei Monte-Carlo-Simulationen alle auftretenden Primärprozesse und Ladungsverluste modelliert werden können. Obwohl nicht für jeden Prozeß die Wahrscheinlichkeit seines Auftretens exakt bekannt ist, kann die Anzahl der erzeugten primären und sekundären Ladungsträger mit Monte-Carlo-Methoden sehr zuverlässig bestimmt werden. Problematisch ist jedoch die Berechnung der Reichweiten der niederenergetischen Elektronen, da sowohl die theoretischen als auch die gemessenen Werte hohe Unsicherheiten aufweisen. Während also bisherige Monte-Carlo-Modelle zur Ionisationsstatistik (also zur mittleren Ladungsträgeranzahl) mit den Meßwerten übereinstimmen [Ali80, Ali83, Sch97], konnten Monte-Carlo-Simulationen die Verteilung des spektralen Untergrunds nur teilweise befriedigend erklären [Ger87, He88, Wan91, Cam98].

In dieser Arbeit wird ein neuer Ansatz zur Berechnung des Untergrunds vorgestellt. Dabei wird ausgenutzt, daß die mittlere Anzahl $\langle n \rangle$ der erzeugten Ladungsträger und ihre statistische Schwankung σ bekannt sind. Auf eine erneute Berechnung dieser Größen wird deshalb verzichtet. Der Schwerpunkt liegt stattdessen auf der Berechnung der räumlichen Verteilung der Ladungsträger, um daraus die Ursachen für Ladungsverluste zu identifizieren.

Die im Detektor durch Strahlung generierte Ladung kann verloren gehen, wenn die Ladungswolke an der Grenze zwischen dem ladungsempfindlichen („aktiven“) mit langer Ladungsträgerlebensdauer und dem ladungsunempfindlichen („toten“) Volumen mit sehr kurzer Lebensdauer erzeugt wird. Findet die Absorption des primären Photons/Teilchens im aktiven Volumen statt, so kann ein Teil der erzeugten Ladung in die Totschicht diffundieren. Umgekehrt kann auch ein Teil der in der Totschicht erzeugten Ladung in das aktive Volumen driften. Diese Vorgänge können

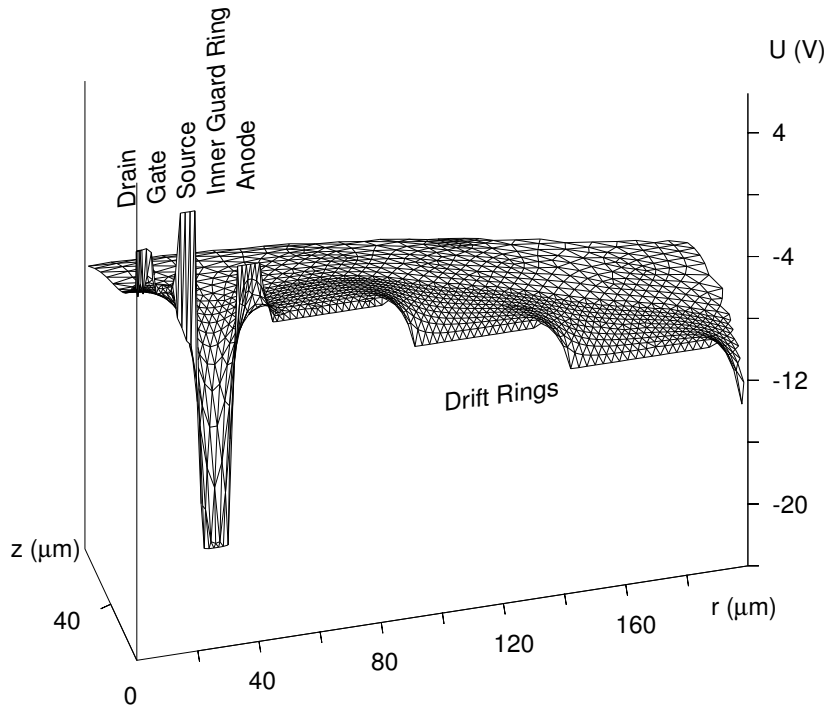


Abbildung 4.1: Potentialverteilung im SDD in der Nähe der Auslesestruktur [Egg03]. Elektronenwolken, die im Bereich außerhalb des Anodenrings generiert werden, driften vollständig in die Anode, da dort das Potentialmaximum liegt. Elektronenwolken, die im Bereich innerhalb des Guard-Rings generiert werden, können direkt in den Transistor driften und ein verfälschtes Signal erzeugen.

jedoch nicht nur am Eintrittsfenster stattfinden (vgl. Abbildung 2.10)), sondern überall, wo das elektrische Potential Extremwerte annimmt [Egg03].

Bei SDDs finden deshalb Ladungsverluste vorwiegend an folgenden Orten statt:

- *Äußerer Driftring.* Wird die Fläche unterhalb des äußeren Driftrings des SDD bestrahlt (siehe Sattelpunkt in Abbildung 2.9 bei $r = 1.1$ mm.), so kann sich die Ladungswolke aufteilen. Ein Teil wandert in Richtung Anode, der andere Teil driftet nach außen und geht verloren.
- *Auslesestruktur.* Auch unterhalb der Auslesestruktur, die sich in der Mitte des SDD befindet, kann Ladung verloren gehen (siehe Abbildung 4.1).
- *Eintrittsfenster.* Die Ladungsverlustprozesse im Eintrittsfenster sind in Abschnitt 2.2.3 beschrieben.

Ladungsverluste unterhalb des äußeren Driftrings werden vermieden, wenn man durch kleinere Blenden verhindert, daß dieser Bereich bestrahlt wird.

Die Ladungsverluste unterhalb der Auslesestruktur lassen sich verhindern, wenn der Transistor – wie bei Tropfenstrukturen – außerhalb der beleuchteten Fläche liegt [Pah04]. Auch bei SDDs mit herkömmlichen, kreisförmigen Driftstrukturen

aber externem Transistor geht dort keine Ladung verloren. Da die Fläche der Auslesestruktur gegenüber der Gesamtfläche um drei Größenordnungen kleiner ist, sind die Auswirkungen auf die Untergrundintensität aber ohnehin gering.

Die Absorption im Eintrittsfenster kann nicht verhindert werden. Vor allem niederenergetische Röntgenstrahlung wird mit hoher Wahrscheinlichkeit in den obersten Schichten des SDD absorbiert. Auch bei höheren Energien gibt es stets eine gewisse Wahrscheinlichkeit für eine oberflächennahe Absorption. Das Eintrittsfenster ist deshalb für die unvollständige Ladungssammlung von entscheidender Bedeutung und bildet den Schwerpunkt der hier vorgestellten Modellrechnung. Aus der Form des Spektrums, den Linienbreiten und der Verteilung der im Detektor generierten Untergrundsignale lassen sich Rückschlüsse über die Ladungsverluste ziehen. Darüber hinaus wird untersucht, inwieweit die p^+ -Implantation eine Totschicht ist bzw. die Empfindlichkeit für niederenergetischer Strahlung reduziert.

4.2 Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie

Die Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie ist von zentraler Bedeutung für die Untersuchung der Niederenergieeigenschaften des SDD. Röntgenstrahlung liegt im Energiebereich zwischen etwa 0.1 und 100 keV. Sie entsteht durch Wechselwirkung von einfallender Strahlung oder Teilchen mit Elektronen innerer Schalen. Gammastrahlen hingegen entstehen im Atomkern, sichtbares sowie UV-Licht in den äußeren Elektronenhüllen. Die Abgrenzung erfolgt also nicht über die Energie der Strahlung, sondern über ihre Entstehungsweise.

Bei Energien unterhalb von etwa 30 keV spricht man von *weichen* Röntgenstrahlen. In dieser Arbeit werden sie darüber hinaus *niederenergetisch* genannt, wenn sie unterhalb von 2 keV liegen. Der darunter angrenzende Energiebereich ($\lesssim 10$ eV) ist das Vakuum-UV (vgl. Fußnote 3 auf Seite 11).

Die Erzeugungsmechanismen für Röntgenstrahlung und deren Anwendungsgebiete in Bezug auf den SDD sind in Anhang C zusammengestellt. Dort wird auch gezeigt, warum eine Niederenergiecharakterisierung am besten mit Hilfe von Synchrotronstrahlung durchgeführt werden kann.

4.2.1 Schwächung von Röntgenstrahlung

Wenn Röntgenstrahlen Materie durchdringen, wird ihre Intensität geschwächt. Alle Streu- und Absorptionsprozesse sind auf Wechselwirkungen der Röntgenstrahlen mit Elektronen der Atomhülle zurückzuführen. Bei der Streuung unterscheidet man zwischen kohärenter (Abschnitt 4.2.2) und inkohärenter (*Compton-*) Streuung (Abschnitt 4.2.3). Absorption von Röntgenstrahlung findet grundsätzlich durch den *Photoeffekt* statt (Abschnitt 4.2.4). Hierbei werden Elektronen aus der Atomhülle herausgeschlagen. Der Schwächungskoeffizient (Absorptionskoeffizient) setzt sich deshalb aus je einem Koeffizienten für kohärente Streuung μ_{koh} , Compton-Streuung μ_{com} und photoelektrische Absorption μ_{pho} zusammen.

$$\mu = \mu_{\text{koh}} + \mu_{\text{com}} + \mu_{\text{pho}} \quad (4.1)$$

4.2 Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie

Paarbildung (Erzeugung von e^-e^+ -Paaren) kann nicht von Röntgenstrahlung hervorgerufen werden, da hierzu eine Energie von mindestens 1.02 MeV nötig ist.

Die Abschwächung von Röntgenstrahlung erfolgt exponentiell mit der Dicke und wird durch das Lambert-Beersche Gesetz beschrieben [Kle86, Kno89].

$$\Phi(E) = \Phi_0 e^{-\mu(E)d} = \Phi_0 e^{-d/\lambda(E)} \quad (4.2)$$

Φ_0 ist die Strahlungsintensität vor dem Durchgang durch die Materie, Φ die Strahlungsintensität nach dem Durchgang durch die Materie, d die Schichtdicke des Absorbers und $\lambda = 1/\mu$ die Eindringtiefe (Absorptionslänge). Die Schwächungskoeffizienten hängen von der Energie der Röntgenstrahlen sowie der Kernladungszahl Z und der Dichte ρ des Absorbermaterials [Tai80] ab.

$$\mu \propto \rho Z^5$$

Da sich die Dichte ρ mit der Temperatur ändert, ist für die einzelnen Elemente meist der Massenschwächungskoeffizient

$$\mu_M = \frac{\mu}{\rho}$$

tabelliert (z. B. in [Hen93]). In dieser Arbeit werden alle Absorptionskoeffizienten bei Normalbedingungen ($T = 273$ K) berechnet. Die Absorptionslängen für Silizium und Aluminium sind in Abbildung 4.2 gezeigt.

4.2.2 Kohärente Streuung

Bei der kohärenten Streuung gibt das einfallende Photon keine Energie ab, sondern ändert lediglich seine Richtung. Unterhalb von 10 keV ist im Silizium der Anteil der kohärent gestreuten Photonen extrem gering (z. B. 0.3 % bei 4.5 keV [Zha81]). Die Streuung findet vorwiegend in Vorwärtsrichtung des einfallenden Photons statt. Die Rückstreuung des Photons ist deshalb äußerst unwahrscheinlich. Die kohärente Streuung ist deshalb für die Wechselwirkungsprozesse in Detektoren nicht von Belang und wird lediglich durch einen entsprechenden Anteil am Gesamtabsorptionskoeffizienten (Gleichung 4.1) berücksichtigt.

4.2.3 Compton-Streuung

Bei der Compton-Streuung wechselwirkt ein Röntgenphoton mit einem schwach gebundenen Elektron in einer äußeren Schale des Atoms [Com23]. Dabei verringert sich die Energie des Photons in Abhängigkeit vom Streuwinkel. Auch gebundene Elektronen können als frei angesehen werden, da ihre Bindungsenergien von einigen eV typischerweise um vier oder mehr Größenordnungen kleiner als die Energien der stoßenden Photonen sind (≥ 10 keV).

Die Summe der Energie des gestreuten Photons und des Elektrons ist gleich der Energie des einfallenden Photons. Für die Energie des gestreuten Photons E' gilt folgende Gleichung, die aus den Gesetzen der Energie- und Impulserhaltung abgeleitet werden kann [Com23, Hän95]:

$$E' = \frac{E_0}{1 + E_0 (1 - \cos \phi) / (m_e c^2)} \quad (4.3)$$

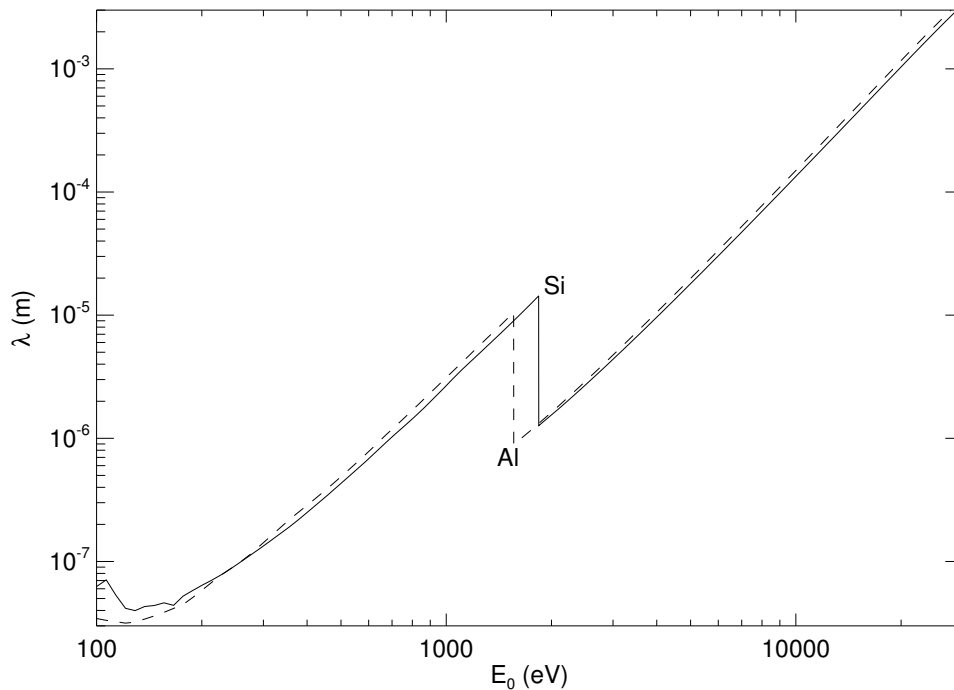


Abbildung 4.2: Eindringtiefe λ (Absorptionslänge) von Photonen in Silizium und Aluminium in Abhängigkeit von der ihrer Energie. Die Kantenstruktur hängt mit den Bindungsenergien der einzelnen Schalen zusammen. Bei niedrigen Energien sind die Absorptionslängen besonders klein, so daß die meisten Wechselwirkungen in Siliziumdetektoren innerhalb der ersten 10^{-7} m stattfinden.

E_0 ist die Energie des einfallenden Photons, m_e die Elektronenmasse, c die Lichtgeschwindigkeit und ϕ der Winkel zwischen einfallendem und gestreutem Photon.

Der Anteil der Compton-gestreuten Photonen erhöht sich mit der Energie der Röntgenstrahlen, abnehmender Ordnungszahl Z des streuenden Atoms und größerem Winkel ϕ [Dav52]. Compton-Streuung ist daher insbesondere bei der Auswertung von RFA-Spektren von Belang, z. B. wenn eine Probe mit Röntgenstrahlung ≥ 20 keV angeregt wird. Für Wechselwirkungen im niederenergetischen Röntgenbereich kann sie vernachlässigt werden, da der Wirkungsquerschnitt dort zu gering ist. In Silizium beträgt die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Compton gegenüber dem des Photoeffektes erst oberhalb von 10 keV mehr als 0.01 % [He88, Tabelle 1]. Ab 50 keV ist der Wirkungsquerschnitt für Compton-Streuung größer als für den Photoeffekt [Eva55].

4.2.4 Der Photoeffekt

Beim photoelektrischen Effekt werden Elektronen aus dem Atomverbund herausgeschlagen, wenn die zugeführte Energie E_0 größer als die Bindungsenergie E_B des betreffenden Elektrons ist [Ein05]. Die Restenergie wird als kinetische Energie

E_{Photo} auf das herausgeschlagene Elektron übertragen.

$$E_0 = E_B + E_{\text{Photo}} \quad (4.4)$$

Bei Valenzelektronen ist die Bindungsenergie E_B gleich der Bandlückenenergie. Der Photoeffekt ist in dem für Siliziumdetektoren relevanten Energiebereich bis 30 keV stets der dominante Prozeß. Er ist der Ausgangspunkt für alle Prozesse, welche Elektronenwolken im Detektor erzeugen.

Photoelektronen werden nicht isotrop emittiert. Der raumwinkelabhängige Wirkungsquerschnitt für niederenergetische Photoelektronen ist proportional zu [Dav52, Dav80, He88]

$$\frac{d\sigma(\phi, \theta)}{d\Omega} \propto \sin^2\phi \sin^2\theta. \quad (4.5)$$

ϕ und θ sind die Winkel in Polarkoordinaten zwischen der Einfallrichtung des Photons und der Emissionsrichtung des Elektrons.

Das Atom mit dem fehlenden inneren Elektron befindet sich nach der Abgabe des Photoelektrons in einem angeregten Zustand. Nach etwa 10^{-8} Sekunden geht es unter Energieabstrahlung wieder in den Grundzustand über. Hierbei sind zwei Mechanismen möglich: Röntgenfluoreszenz und Auger-Effekt, welche in Abschnitt 4.4 erklärt werden.

4.3 Wechselwirkungen im SDD

4.3.1 Absorption von Röntgenstrahlung und Quanteneffizienz

Die Absorptionslängen von Silizium im Niederenergiebereich sind mit 40 nm im Bereich der L-Kante bis 10 μm knapp unterhalb der K-Kante sehr kurz (vgl. Abbildung 4.2). Deshalb müssen insbesondere im Niederenergiebereich die Absorptionen aller Schichten berücksichtigt werden, die zwischen der Quelle der Röntgenstrahlung und dem empfindlichen Detektorvolumen liegen. Dabei sind insbesondere die Schichtdicken und -dichten sowie ihre elementaren Zusammensetzungen von Belang. Je schwerer und dichter ein Element und je dicker die Schicht ist, desto mehr Photonen werden absorbiert.

Zwischen dem Ausgangspunkt der Röntgenstrahlung und dem strahlungsempfindlichen Bereich des SDD liegen bei typischen RFA-Aufbauten folgende absorbierende Schichten:

1. Luft oder Restgas im Vakuum zwischen der Strahlenquelle und dem Gehäusefenster,
2. Eis und andere Kondensationen auf dem Gehäuse- oder Eintrittsfenster,
3. Gehäusefenster (aus beschichtetem Beryllium oder Polyimid),
4. Stickstoff im Gehäuse bei 1 bar für reguläre SDDs und bei 0.1 bar für Niederenergie-SDD-Module mit dünnem Polyimid-Gehäusefenster (der Abstand zwischen Fenster und SDD-Oberfläche beträgt ca. 1 mm),

5. die Totschicht der Passivierung/Metallisierung auf der Detektoroberfläche (Siliziumdioxid oder Aluminium).

Bei offenen Modulen ist kein Gehäusefenster montiert (Punkt 3, siehe Abbildung 2.8), deshalb entfällt hier zudem die Stickstofffüllung (Punkt 4).

Absorptionen durch Gase und Kondensationen auf dem Gehäusefenster lassen sich vermindern bzw. ausschließen, wenn unter verringertem Druck, unter Heliumatmosphäre oder im Vakuum gemessen wird. Damit man niederenergetische Röntgenstrahlung messen kann, muß der Druck innerhalb des Gehäuses auf etwa 0.1 bar verringert werden. Bei höherem Druck ist die Absorption zu stark, bei niedrigerem Druck kann es hingegen im ungünstigsten Fall zu elektrischen Durchschlägen (Funkenentladungen) an den Hochspannungs-Bonddrähten kommen.

Im Bereich unterhalb 2 keV begrenzen insbesondere das 8 µm dicke Be-Fenster sowie die Gasschichten die Transmission der Röntgenstrahlung. Die Transmission τ läßt sich aus dem Absorptionsgesetz (Gleichung 4.2) berechnen.

$$\tau(E) = \frac{\Phi(E)}{\Phi_0} = e^{-\mu(E)d} = e^{-d/\lambda(E)} \quad (4.6)$$

Falls die Strahlung nicht senkrecht einfällt, muß die effektive Schichtdicke

$$d_{\text{eff}} = \frac{d}{\cos \theta} \quad (4.7)$$

satt der tatsächlichen Schichtdicke d eingesetzt werden (θ ist der Winkel zur Normalen, wobei $-\pi/2 < \theta < \pi/2$ ist).

In Abbildung 4.3 sind die Transmissionskoeffizienten von Gehäusefenstern gezeigt, die bei Röntgendetektoren häufig eingesetzt werden. Berylliumfenster absorbieren so stark, daß sie für die Messung niederenergetischer Röntgenstrahlung ungeeignet sind. Bei Niederenergieanwendungen werden deshalb dünne Polyimidfenster der Firma **MOXTEK** eingesetzt (Dicke 300 nm bei AP 1.3 und 700 nm bei AP 1.7), die es auch in temperaturbeständigen (HT 2.2) und/oder aluminiumbeschichteten Varianten gibt. Die dünne Polyimidfolie wird von einem 300 µm dicken, linienförmigen Siliziumgitter gestützt, welches die mechanische Stabilität gewährleistet, aber die strahlungsdurchlässige Fläche auf 70 bis 80 % reduziert.

Bei den in dieser Arbeit durchgeführten Experimenten mit niederenergetischer Röntgenstrahlung wird ein offener SDD ohne Gehäusefenster verwendet (Abbildung 2.8 rechts), so daß als absorbierende Schicht ausschließlich die Totschicht der Al-Metallisierung berücksichtigt werden muß.

Die totale Absorption kann aus der Messung der Quanteneffizienz bestimmt werden. Bei der Messung von infrarotem und sichtbarem Licht versteht man unter (interner) Quanteneffizienz die Zahl der freigesetzten Elektronen pro einfallendem Photon, also $\langle n \rangle$. Für Röntgenspektrometer wird die Quanteneffizienz anders definiert: Sie ist das Verhältnis der Zahl nachgewiesener Ereignisse zu der Anzahl einfallender Photonen. In der quantitativen Analyse ist es wichtig, die energieabhängige Quanteneffizienz des Detektorsystems genau zu kennen, so daß die Anzahl der Photonen bestimmt werden kann, die den Detektor tatsächlich getroffen haben.

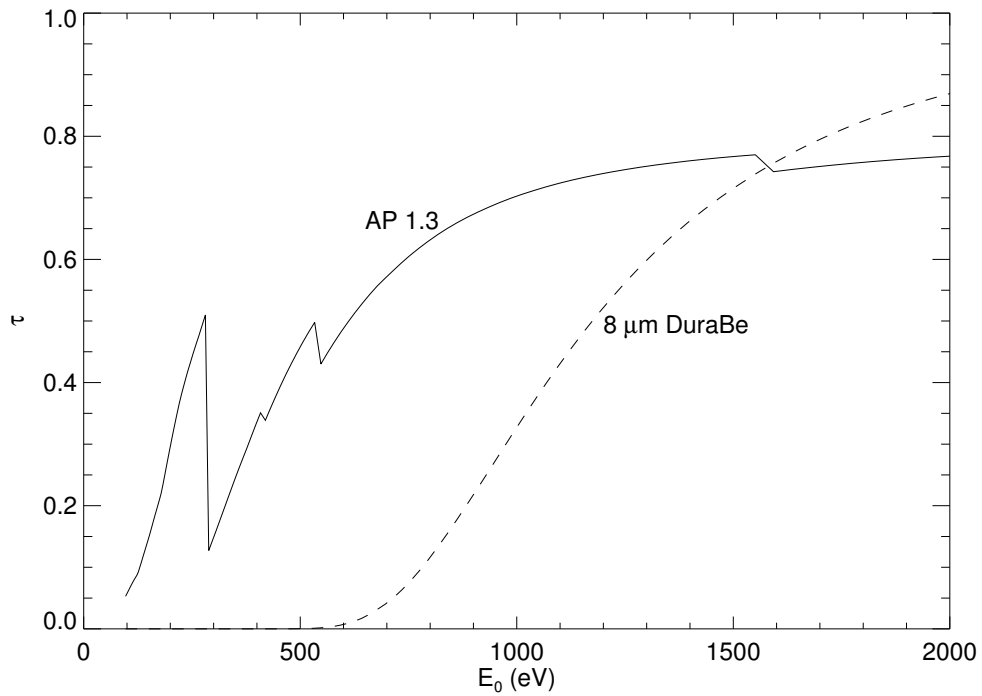


Abbildung 4.3: Transmissionskoeffizienten τ von Gehäusefenstern der Fa. **MOXTEK** (C. ROBERTS, persönliche Mitteilung). Im Gegensatz zum $8\ \mu\text{m}$ Be-Fenster kann mit dem Leichtelementfenster AP1.3 auch niederenergetische Röntgenstrahlung gemessen werden. Die Absorptionskanten des Al-beschichteten AP 1.3-Fensters liegen bei C, N, O und Al.

Die gemessenen Linienintensitäten werden dann korrigiert, indem man sie durch die Quanteneffizienz dividiert.

Die Anzahl N der im Detektor registrierten Ereignisse ist das Produkt aus Ausgangszählrate f und live-time t_{live} (die tatsächlich vergangene Zeit minus der Totzeit, also die effektive Meßzeit).

$$N = f t_{\text{live}} \quad (4.8)$$

Die Anzahl der Photonen, die während der live-time t_{live} auf den Detektor treffen, ist durch den Fluß Φ und die aktive Detektorfläche A gegeben (bzw. die Fläche des Strahls, falls dieser kleiner als die Detektorfläche ist), also $\Phi A t_{\text{live}}$. Die Quanteneffizienz ε ist deshalb

$$\varepsilon = \frac{\text{nachgewiesene Ereignisse}}{\text{einfallende Photonen}} = \frac{N}{\Phi A t_{\text{live}}} = \frac{f}{\Phi A} \quad (4.9)$$

Je nachdem, ob man unter einem „nachgewiesenen Ereignis“ einen Eintrag an beliebiger Stelle des Spektrums oder nur Ereignisse bei voller Strahlenergie versteht, unterscheidet man zwischen der „totalen“ Quanteneffizienz $\varepsilon_{\text{total}}$ und der „Full-Peak“-Quanteneffizienz $\varepsilon_{\text{Gauß}}$.

Bei der totalen Quanteneffizienz werden alle Ereignisse im Spektrum berücksichtigt, auch wenn sie eintrittsfenster- bzw. elektronikbedingt bei niedrigerer (Partial

Events) oder höherer (Pile-up) Energie liegen. Deshalb kann die totale Quanteneffizienz nur gemessen werden, wenn das Produkt ΦA bekannt ist. Ereignisse, deren Ladung unterhalb der Diskriminatorschwelle liegt, können nicht gemessen werden.

Jedes Photon, das im Silizium absorbiert wird und eine Ladung oberhalb der Diskriminatorschwelle deponiert, trägt zur totalen Effizienz bei. Die totale Quanteneffizienz ist deshalb durch die Wahrscheinlichkeiten gegeben, daß

- das Photon die vorhergehenden absorbierenden Schichten i (Atmosphäre, Gehäusefenster, Füllgas, Metallisierung) durchdringt, $\prod_i \tau_i$,
- und daß das Photon in der Raumladungszone mit der Tiefe d absorbiert wird, $1 - \exp(-\mu_{\text{Si}}d)$. Die meisten Röntgendetektoren werden über ihre gesamte Tiefe verarmt; d ist dann die Substratdicke.

Die totale Quanteneffizienz ist das Produkt dieser Wahrscheinlichkeiten.

$$\varepsilon_{\text{total}} = (1 - \exp(-\mu_{\text{Si}}d)) \prod_i \tau_i \quad (4.10)$$

In Abbildung 4.4 sind totale Quanteneffizienzen für unterschiedlich dicke Siliziumdetektoren gezeigt. SDDs, die auf 4-Zoll-Wafern hergestellt werden, haben eine Dicke von 280 μm , bei 6-Zoll-Wafern beträgt sie 450 μm . Si(Li)-Detektoren sind typischerweise 5 mm dick. Deshalb haben sie im Energiebereich bis 30 keV noch eine Effizienz ≥ 0.8 , während sich die Effizienz von SDDs schon ab ca. 10 keV deutlich verringert. Die Niederenergieeffizienz von Si(Li)s ist nicht dargestellt, da diese stark variiert, denn es werden zahlreiche Elemente verschiedener Dicken zur Metallisierung/Kontaktierung verwendet (z. B. Ni, Au, Pd) [Ros91].

Für den Niederenergiebereich vereinfacht sich Gleichung 4.10, denn die Absorptionslängen sind hier so kurz, daß $e^{-\mu_{\text{Si}}d} \leq 10^{-11}$ ist. Es durchdringen also praktisch keine Photonen den Detektor. Bei Messungen im Vakuum mit offenem Modul muß deshalb lediglich die Transmission der Metallisierung τ_{M} einbezogen werden.

$$\varepsilon_{\text{total}} = \tau_{\text{M}} \quad (4.11)$$

Die Gleichungen 4.10 und 4.11 sind nur dann gültig, wenn die in der Metallisierungsschicht absorbierten Photonen keine Ladung im aktiven Detektorvolumen deponieren. Für niederenergetische Photonen und relativ dicke Schichten ($\gtrsim 100$ nm) ist diese Annahme gerechtfertigt, denn die Energien der primären Elektronen sind sehr gering. Sie haben deshalb eine kurze Reichweite, und es ist unwahrscheinlich, daß sie das empfindliche Volumen erreichen. Bei dünnen Metallisierungslagen und/oder hohen Primärelektronenreichweiten sowie hoher Absorptionswahrscheinlichkeit in der Metallisierung (z. B. knapp oberhalb der Al-K-Kante) sind diese Bedingungen jedoch nicht mehr erfüllt. Die hochenergetischen Primärelektronen aus der Metallisierungsschicht können dennoch eine nennenswerte Ladungsmenge im sensitiven Volumen deponieren.

In den Gleichungen 4.10 und 4.11 wird also vernachlässigt, daß eine Absorption in der Aluminiumschicht dennoch zu einem Ereignis im Spektrum führen kann, wenn solche energiereichen „Al-Elektronen“ in das sensitive Volumen des Detektors gelangen. Dieser Fall wird jedoch bei der Berechnung des Untergrunds in Abschnitt 4.6

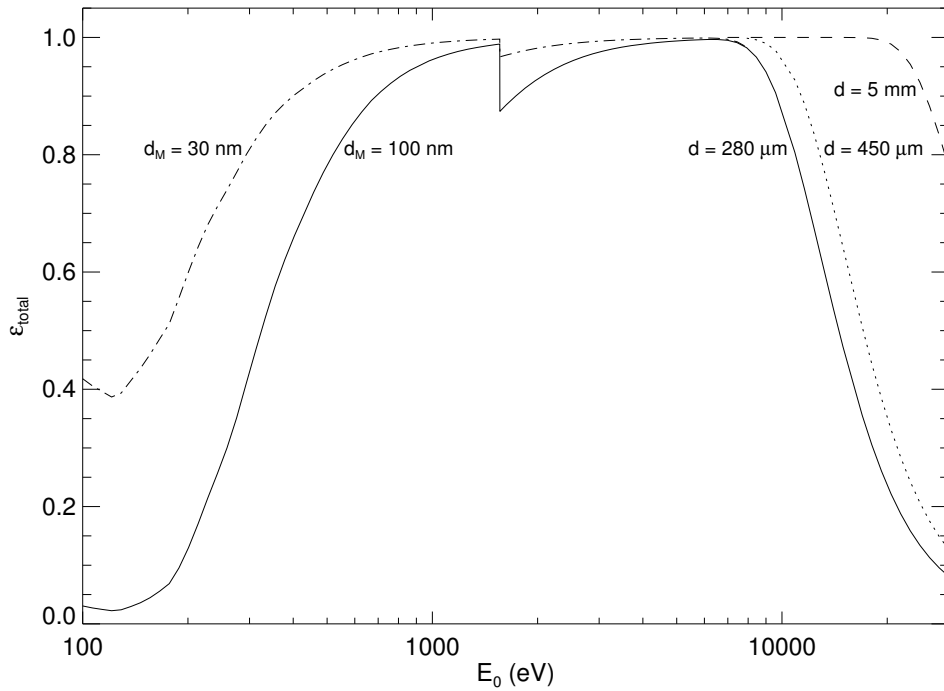


Abbildung 4.4: Totale Quanteneffizienz $\varepsilon_{\text{total}}$ nach Gleichung 4.11 für Siliziumdetektoren mit Aluminiumschichtdicken $d_M = 30$ nm und 100 nm und Substratdicken von 280 μm , 450 μm oder 5 mm.

berücksichtigt. Diese Berechnung ermöglicht es, die Quanteneffizienz genauer als mit Gleichung 4.10 anzugeben (siehe Abschnitt 6.4).

Bei der Full-Peak-Quanteneffizienz werden ausschließlich Ereignisse unterhalb der Gaußverteilung der Hauptlinie gezählt. Zusätzlich zu Gleichung 4.10 müssen also die Wahrscheinlichkeiten berechnet werden, daß

- das Photon die Schicht partieller Ladungssammlung durchdringt, τ_p ,
- und keine Escape-Verluste (Abschnitt 4.4.6) stattfinden, $1 - p_{\text{esc}}$, wobei p_{esc} die Wahrscheinlichkeit für ein Escape-Ereignis ist.

Die Full-Peak-Quanteneffizienz ist also das Produkt dieser Wahrscheinlichkeiten.

$$\varepsilon_{\text{Gauß}} = (1 - p_{\text{esc}})(1 - \exp(-\mu_{\text{Si}}d)) \tau_p \prod_i \tau_i \quad (4.12)$$

Auch diese Gleichung vereinfacht sich für die Niederenergiemessungen im Vakuum, denn hier muß – neben dem Escape-Effekt – lediglich die Transmission der Metallisierungsschicht τ_M und die der Schicht unvollständiger Ladungssammlung τ_p einbezogen werden.

$$\varepsilon_{\text{Gauß}} = (1 - p_{\text{esc}})\tau_M \tau_p \quad (4.13)$$

Der Escape-Effekt tritt bei Energien unterhalb der Si-K-Kante nicht auf, in diesem Fall ist $p_{\text{esc}} = 0$. Die Dicke der Schicht unvollständiger Ladungssammlung ist jedoch meistens nicht bekannt und zudem energieabhängig, da sie von der Reichweite der Primärelektronen abhängt (siehe Abschnitt 4.6). Weiterhin muß unterschieden werden, ob in dieser Schicht *immer* ein Teil der deponierten Ladung verloren geht, oder ob nur (mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit) ein Teil der Ladung verloren gehen *kann*. Die existierenden Modelle zur Berechnung der Ladungsverluste enthalten lediglich den ersten Fall, während das in Abschnitt 4.6 vorgestellte Modell beide Möglichkeiten berücksichtigt. Die hiermit berechnete Full-Peak-Quanteneffizienz ist in Abschnitt 6.4 gezeigt.

4.3.2 Reflexion

Die einfallende Röntgenstrahlung kann an der Aluminiumoberfläche und an der Grenzfläche Aluminium-Silizium reflektiert werden. Im folgenden wird berechnet, inwieweit diese Reflexion das Niederenergieverhalten des SDD beeinflusst. Abbildung 4.5 (links) zeigt die Berechnung des Anteils reflektierter Photonen an 30 nm (oben) bzw. 100 nm (unten) dicken Aluminiumschichten auf Siliziumsubstrat bei Normalbedingungen. Die rechte Seite von Abbildung 4.5 zeigt die Anteile der transmittierten Photonen durch diese Schichten nach Gleichung 4.6, wobei die Reflexion und die winkelabhängige effektive Schichtdicke (Gleichung 4.7) berücksichtigt sind.

Die Einzelheiten der Berechnung der Reflexion sind hier nicht aufgeführt und können anhand von [Und81, Spi94, Sku95] nachvollzogen werden. Die Rechnung wird für unpolarisierte Photonen ausgeführt und die Oberflächen- und Substratrauheit vernachlässigt. Die in der Realität vorhandene Rauheit führt bei Winkeln $> 10^\circ$ zu einer weiteren, deutlichen Verringerung der Reflektivität um einige Größenordnungen. Auch unterscheidet sich bei größeren Einfallswinkeln die Reflektivität s- oder p-polarisierter Röntgenstrahlung (d. h. der Vektor des elektrischen Feldes ist senkrecht bzw. parallel zum Einfallswinkel) deutlich von derjenigen unpolarisierter Strahlung. Bei größeren Einfallswinkeln ist jedoch der Reflexionsgrad ohnehin extrem gering, so daß diese Abweichungen keine Rolle spielen. Bei allen in dieser Arbeit durchgeführten Messungen und in typischen RFA-Anordnungen liegen die Einfallswinkel stets bei $(90 \pm 15)^\circ$. Selbst im ungünstigsten Fall (d. h. bei sehr niedrigen Energien von z. B. Bor-K-Fluoreszenz mit 185 eV) ist der Anteil der reflektierten Photonen kleiner als $6 \cdot 10^{-5}$. Verluste durch Reflexion können also vollständig vernachlässigt werden.

4.3.3 Wechselwirkungswahrscheinlichkeit der primären Photonen

Um die Röntgenabsorptionswahrscheinlichkeit ortsabhängig zu berechnen, werden im folgenden die Wahrscheinlichkeitsdichten dp/dz für Absorption der Primärstrahlung in der Al-Schicht (Metallisierung M) und im aktiven Detektorvolumen (Si) hergeleitet. Grundlage dafür ist das Lambert-Beersche Gesetz (Gleichung 4.6), welches die Absorption von Strahlung in Materie in Abhängigkeit von Energie und Schichtdicke beschreibt. Zunächst wird die Transmission der Metallisierungsschicht mit der Dicke d_M berechnet. Ihre relative Transmission ist τ_M . Die Wahrscheinlich-

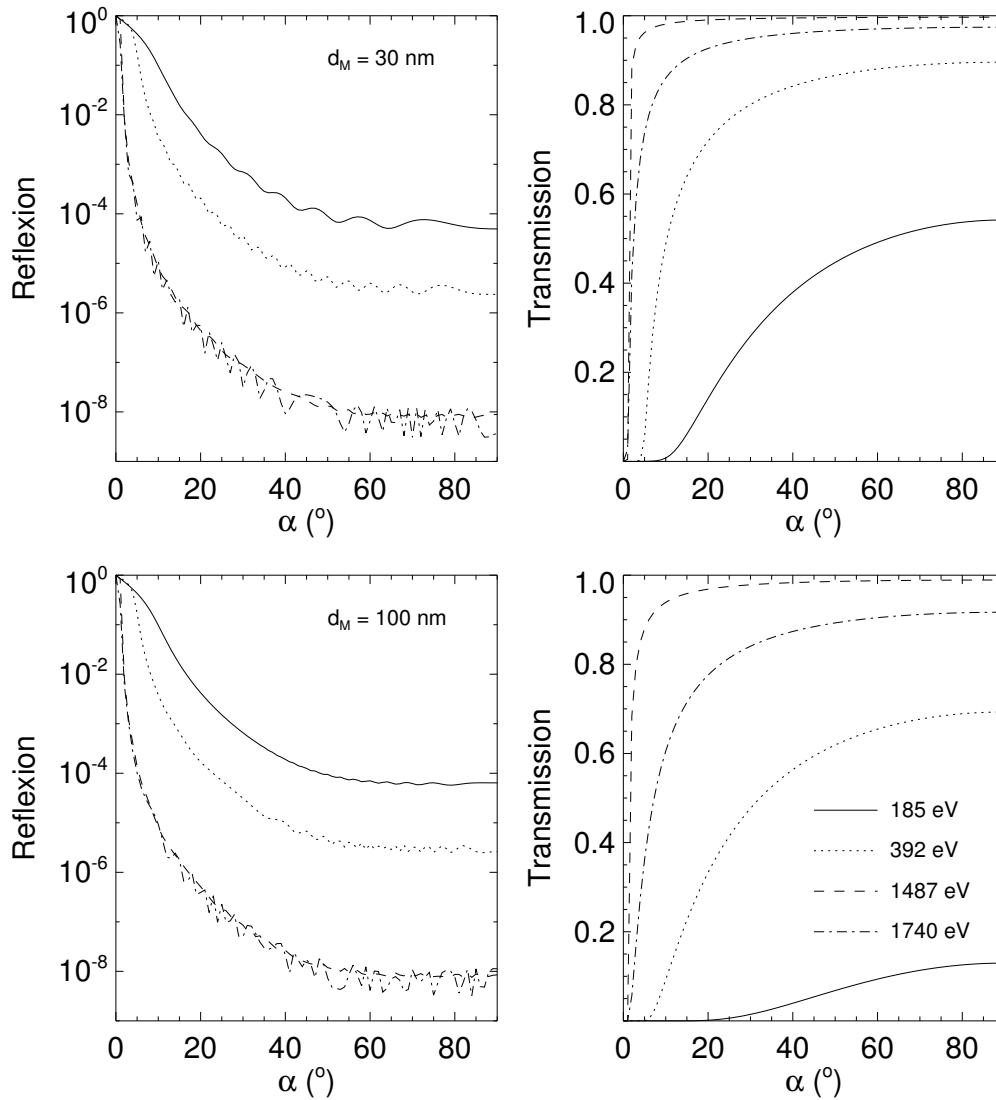


Abbildung 4.5: Reflexions- (links) und Transmissionsgrade (rechts) der Al-Schicht auf Siliziumsubstrat für unterschiedliche Einfallswinkel α (90° entspricht senkrechtem Einfall). Oben: 30 nm Al-Dicke, unten 100 nm Al-Dicke. Die einzelnen Linien geben den Verlauf für Energien bei 185 eV (Bor-Fluoreszenzstrahlung), 392 eV (Stickstoff), 1487 eV (Aluminium) und 1740 eV (Silizium) wieder. Selbst bei geringer Röntgenenergie ist die Reflexionswahrscheinlichkeit so klein, daß sie vernachlässigt werden kann. Die Transmission ist bei flachen Einfallswinkeln kleiner, weil eine längere Schicht durchquert werden muß.

keit p_M für die Absorption in der Metallisierungsschicht beträgt nach Gleichung 4.6

$$p_M = 1 - \tau_M = 1 - e^{-d_M/\lambda_M}. \quad (4.14)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte dp_M/dz gibt dann die Ortsabhängigkeit der Absorptionswahrscheinlichkeit an. Sie ist die Ableitung von Gleichung 4.14 nach der Tiefe

z , wobei $d_M = z$ gesetzt wird.

$$\frac{dp_M}{dz} = \frac{e^{-z/\lambda_M}}{\lambda_M}$$

Der Koordinatennullpunkt ist bei dieser Gleichung die Oberfläche der Metallisierungsschicht. Laut Definition in Abschnitt 2.2.1 liegt der Nullpunkt in z -Richtung jedoch an der Grenzfläche zwischen Aluminium und Silizium. Die Wahrscheinlichkeitsdichte muß deshalb um die Dicke d_M der Metallisierungslage zu negativen z -Koordinaten hin verschoben werden.

$$\frac{dp_M}{dz} = \frac{e^{-(z+d_M)/\lambda_M}}{\lambda_M} \quad (4.15)$$

Die Wahrscheinlichkeit für die Absorption in der Schicht partieller Ladungssammlung (ICC-Schicht) mit der Dicke d_p beträgt entsprechend

$$p_p = \tau_M(1 - \tau_p) = e^{-d_M/\lambda_M} \left(1 - e^{-d_p/\lambda_{Si}}\right). \quad (4.16)$$

Nach der Substitution $z = d_p$ wird auch hier die Ableitung gebildet, der Koordinatennullpunkt liegt hier bereits korrekterweise an der Grenzfläche zwischen Metallisierung und Silizium.

$$\frac{dp_p}{dz} = \frac{1}{\lambda_{Si}} \exp\left(-\frac{d_M}{\lambda_M} - \frac{z}{\lambda_{Si}}\right) \quad (4.17)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte dp/dz für die Absorption in der Totschicht bzw. ICC-Schicht ist dann durch die Gleichungen 4.15 und 4.17 gegeben.

$$\frac{dp}{dz} = \begin{cases} dp_M/dz & (-d_M < z < 0) \\ dp_p/dz & (0 \leq z < d_p) \end{cases} \quad (4.18)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichten nach Gleichung 4.18 sind in Abbildung 4.6 für wichtige niederenergetische Fluoreszenzenergien dargestellt. Das Integral über die Dichte ist dann die Wahrscheinlichkeit für die Absorption in dem entsprechenden z -Intervall. Bei der Kohlenstofffluoreszenzenergie (282 eV) ist die Wahrscheinlichkeit für die Absorption im Al ($z \leq 0$) aufgrund der kleinen Absorptionslänge sehr hoch. Bei höheren Energien steigt die Absorptionslänge (siehe Abbildung 4.2), und die Wahrscheinlichkeit für die Absorption in den oberflächennahen Schichten wird deutlich geringer.

4.4 Erzeugung der Elektron-Loch-Paare

In diesem Abschnitt werden die Erzeugungsmechanismen für Elektron-Loch-Paare in Festkörpern behandelt. Dabei wird grundsätzlich zunächst ein einfallendes Röntgenphoton aufgrund des Photoeffekts absorbiert. Es entsteht ein Photoelektron und ein ionisiertes Atom. Das Photoelektron kann wiederum Atome ionisieren und dadurch Sekundärelektronen erzeugen, und/oder an Phononen streuen und auf diese Weise Energie abgeben. Das ionisierte Atom emittiert neben dem Photoelektron entweder ein Fluoreszenzphoton oder Auger-Elektronen [Kou71, Bam72].

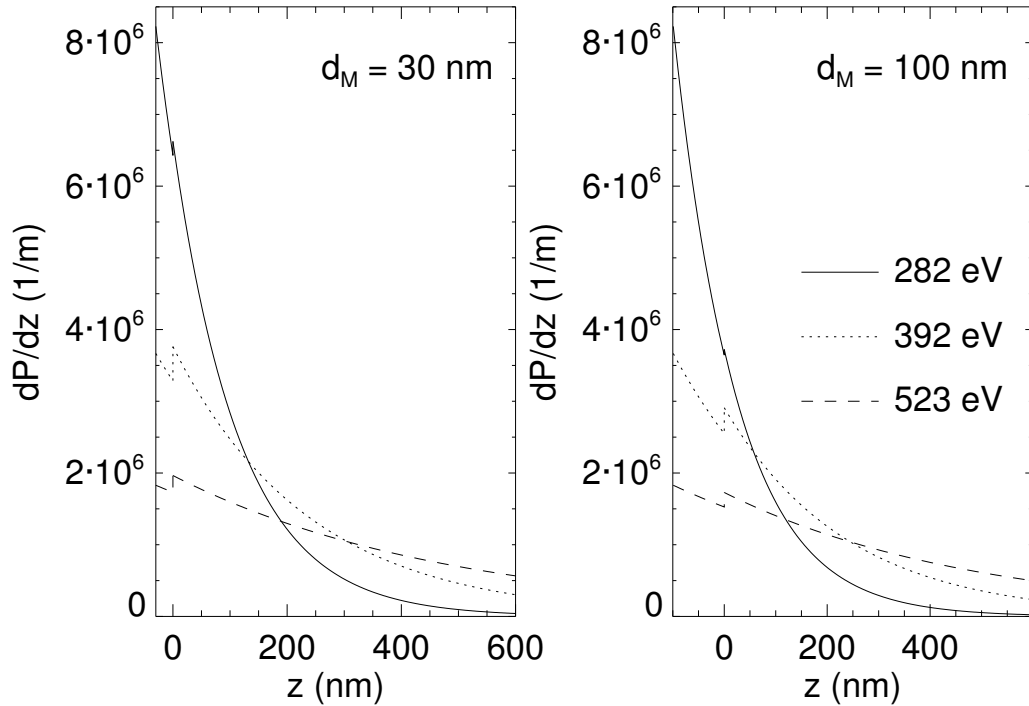


Abbildung 4.6: Wahrscheinlichkeitsdichte für Absorption in der Aluminiumschicht ($z < 0$) bzw. im aktiven Detektorvolumen ($z \geq 0$) nach Gleichung 4.18 für die Absorptionskoeffizienten der Fluoreszenzenergien von Kohlenstoff (282 eV), Stickstoff (392 eV) und Sauerstoff (523 eV). Links: 30 nm Al, rechts: 100 nm Al. Bei niedriger Energie wird die Röntgenstrahlung nahe der Oberfläche absorbiert, bei höherer Energie tiefer im Substrat.

4.4.1 Röntgenfluoreszenz

Befindet sich die durch Photoionisation entstandene Leerstelle in einer inneren Schale, so füllt ein Elektron aus einer höheren Schale diese Lücke auf. Die Energie des daraufhin emittierten Photons liegt im Röntgenbereich, da die Energiedifferenzen ΔE der Bindungsenergien von Elektronen innerer Schalen sehr hoch sind. Die emittierte Fluoreszenzstrahlung ist charakteristisch für das jeweilige Element sowie für den entsprechenden Energieübergang innerhalb der Elektronenhülle. Das Gesetz von HENRY MOSELEY beschreibt den Zusammenhang zwischen der Energie der emittierten Strahlung E_F und der Ordnungszahl des Elements sowie den Hauptquantenzahlen der beteiligten Schalen der Elektronenhülle [Mos13].

$$E_F = R h c (Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n_1} - \frac{1}{n_2} \right) \quad (n_2 - n_1 = 1, 2, 3, \dots) \quad (4.19)$$

R ist die Rydberg-Konstante, Z die Ordnungszahl des Atoms, σ die Abschirmkonstante (die wiederum von der Kernladungszahl und n_1 abhängt) und n_1, n_2 sind Hauptquantenzahlen, wobei $n_2 > n_1$. Den Term $Z - \sigma$ bezeichnet man als effektive Ordnungszahl. Die Abschirmkonstante drückt aus, daß die restlichen Elektronen die Kernladung abschirmen und sie dadurch effektiv verringert wird.

	K_{α_1}	K_{α_2}	K_{β}
Al	1 486.80	1 486.27	1 557.45
Si	1 739.98	1 739.38	1 835.94

Tabelle 4.1: K-Schalen-Floreszenzenergien von Aluminium und Silizium (in eV).

	K 1s	L ₁ 2s	L ₂ 2p _{1/2}	L ₃ 2p _{3/2}
Al	1 559.6	117.8	72.95	72.55
Si	1 839.0	149.7	99.82	99.42

Tabelle 4.2: Bindungsenergien E_B von Aluminium und Silizium (in eV).

Die Energie der abgestrahlten Röntgenstrahlung ist praktisch unabhängig vom Bindungszustand der Elemente, da im wesentlichen Übergänge zwischen inneren Schalen vorkommen. Wenn jedoch ein Elektron nahe des Valenzbandes am Emissionsprozeß beteiligt ist, kann die Energie vom chemischen Bindungszustand des Atoms beeinflusst werden. Die charakteristische Linie kann dann für gleiche Elemente in unterschiedlichen Verbindungen geringfügig verschoben sein (≈ 1 eV). Diese Verschiebungen können nur bei leichten Elementen beobachtet werden.

4.4.2 Auger-Effekt

Beim Übergang in den Grundzustand kann die frei werdende Energie ΔE auch auf ein anderes Elektron übertragen werden. Dieses Elektron aus einer höheren Schale nimmt Energie auf, überwindet die Bindungsenergie E_B und verläßt die Atomhülle. Dieser Prozeß wird Auger-Effekt oder strahlungsloser Übergang genannt [Aug25]. Die kinetische Energie des Auger-Elektrons ist gegeben durch

$$E_{\text{Auger}} = \Delta E - E_B, \quad (4.20)$$

wobei ΔE die frei werdende Energie beim Übergang in den Grundzustand ist. Die kinetische Energie des Auger-Elektrons ist charakteristisch für den jeweiligen Übergang und das Element. Die Bindungsenergien von Al und Si sind in Tabelle 4.2 angegeben. Der Auger-Effekt tritt besonders bei Elementen mit niedriger Ordnungszahl auf, da deren innere Elektronen weniger stark gebunden sind.

Als Folge des Auger-Effektes werden die Atome zweifach ionisiert. Beispielsweise entsteht bei der Wechselwirkung eines Photons mit einem K-Elektron eine Leerstelle in der K-Schale. Daraufhin „fällt“ ein L-Schalen-Elektron unter Aussendung eines (virtuellen) Photons in die K-Schale. Das Photon wird noch innerhalb des Atoms reabsorbiert (interne Konversion), und es entsteht eine weitere Leerstelle, z. B. in der L-Schale. Das Atom liegt nun im LL-Zustand vor. Die frei gewordene Energie ΔE ist in diesem Fall gleich der Bindungsenergie der beiden L-Elektronen.

In solchen zweifach ionisierten Atomen führt der Übergang von Elektronen von einer Schale zu einer anderen zu geringfügig anderen Energien als in einfach ionisierten Atomen. Diese Linien werden Satelliten-Linien genannt. Vor allem bei Elementen mit niedrigen Ordnungszahlen können diese Linien relativ intensiv sein,

4 Berechnung der spektralen Antwort

Wahrscheinlichkeit	Auger-Elektron	E_{Auger} (eV)
0.1833	KL ₁ L ₁	1 542
0.3715	KL ₁ L _{2,3}	1 591
0.2227	KL _{2,3} L _{2,3}	1 641
0.0684	KL ₁ M ₁	1 679
0.0031	KL ₁ M _{2,3}	1 685
0.0957	KL _{2,3} M ₁	1 728
0.0040	KL _{2,3} M _{2,3}	1 735
0.0063	KM ₁ M ₁	1 816
0.0009	KM ₁ M _{2,3}	1 822
Wahrscheinlichkeit	Fluoreszenzphoton	E_{F} (eV)
0.0261	K _{α1}	1 740
0.0130	K _{α2}	1 739
0.0049	K _{β1}	1 836

Tabelle 4.3: Auger-Elektronen- und Fluoreszenzwahrscheinlichkeiten und -energien von Silizium bei Absorption des Primärphotons $E_0 > 1839$ eV in der K-Schale [Kou71, Bam72]. Die Gesamtwahrscheinlichkeit für Fluoreszenz beträgt 0.044, die Gesamtwahrscheinlichkeit der Auger-Prozesse ist deshalb 0.956. Neben den hier aufgeführten Elektronen bzw. Photonen entsteht bei der K-Schalen-Absorption stets ein Photoelektron mit der Energie $E_0 - E_{\text{K}} = E_0 - 1839$ eV.

Wahrscheinlichkeit	Auger-Elektron(en)	E_{Auger} (eV)
0.025	L ₁ MM	132
0.975	{ L ₁ L _{2,3} M (Coster-Kronig)	49.5
		L _{2,3} MM

Tabelle 4.4: Auger-Elektronenwahrscheinlichkeiten und -energien von Silizium bei Absorption des Primärphotons in der L₁-Schale [Fra94]. Neben dem Auger-Elektron entsteht bei der L₁-Schalen-Absorption stets ein Photoelektron mit der Energie $E_0 - E_{\text{L}_1} = E_0 - 149.7$ eV. Der häufigste Prozeß ist der Coster-Kronig-Übergang, bei dem ein 49.5 eV-Elektron frei wird und eine L_{2,3}- und eine M-Leerstelle entstehen. Deshalb entsteht bei diesem Prozeß stets auch ein L_{2,3}MM-Auger-Elektron.

z. B. beträgt bei Aluminium die Intensität der Linie Al-K _{α 3} (LK-LL-Übergang) ungefähr 10 % der Intensität von Al-K _{α 1,2}.

Die Nomenklatur der Auger-Elektronen ist wie folgt festgelegt: Bei der Emission z. B. eines KL₁L₂-Auger-Elektrons wird ein K-Elektron herausgeschlagen, die Lücke von einem L₁-Elektron aufgefüllt und die Energiedifferenz dazu verwendet, ein L₂-Elektron zu emittieren. L₁ und L₂ bezeichnen also die Leerstellen des Atoms.

Eine Zusammenstellung von Auger-Energien findet man z. B. in [Lar77, Bri90]. Für Silizium sind diese in den Tabellen 4.3 bis 4.5 angegeben.

Wahrscheinlichkeit	Auger-Elektron	E_{Auger} (eV)
1	L _{2,3} MM	83

Tabelle 4.5: Auger-Elektronenwahrscheinlichkeiten und -energien von Silizium bei Absorption des Primärphotons in der L_{2,3}-Schale [Fra94]. Neben dem Auger-Elektron entsteht bei der L_{2,3}-Schalen-Absorption stets ein Photoelektron mit der Energie $E_0 - E_{L23} = E_0 - 99.2$ eV.

Konstante	Schale i		
	K	L	M
A	$-3.795 \cdot 10^{-2}$	$-1.111 \cdot 10^{-1}$	$-3.60 \cdot 10^{-4}$
B	$3.426 \cdot 10^{-2}$	$1.368 \cdot 10^{-2}$	$3.86 \cdot 10^{-3}$
C	$-1.163 \cdot 10^{-6}$	$-2.177 \cdot 10^{-7}$	$-2.01 \cdot 10^{-7}$

Tabelle 4.6: Werte der in Gleichung 4.22 aufgeführten Konstanten A , B und C zur Berechnung der Fluoreszenzausbeute.

4.4.3 Fluoreszenzausbeute

Aufgrund des Auger-Effektes sind die Linien einer bestimmten Serie nicht so intensiv zu beobachten, wie man aus der Anzahl der Leerstellen im entsprechenden Orbital schließen könnte. Zur Fluoreszenz kommt es deshalb mit einer verringerten Wahrscheinlichkeit. Die Fluoreszenzausbeute ω_j^i der Schale i und des Elements j ist als das Verhältnis der Anzahl emittierter Röntgenquanten n_γ der Schalen-Serie zu den gleichzeitig geschaffenen Leerstellen n_i in der Schale i definiert.

$$\omega_j^i = \frac{n_\gamma}{n_i} \quad i = \text{K, L, M, } \dots \quad (4.21)$$

Die Fluoreszenzausbeuten sind für die einzelnen Elektronenschalen eines Atoms unterschiedlich. Im allgemeinen steigt die Fluoreszenzausbeute mit höherer Ordnungszahl. Deshalb ist die Fluoreszenzausbeute für den Nachweis von leichten Elementen der limitierende Faktor. Die Fluoreszenzausbeute kann näherungsweise durch

$$\sqrt[4]{\frac{\omega_j^i}{1 - \omega_j^i}} = A + BZ + CZ^3 \quad (4.22)$$

berechnet werden [Ber75], wobei $Z(j)$ die Ordnungszahl angibt, und A , B und C Konstanten für die jeweilige Schale sind (siehe Tabelle 4.6). Für Silizium ergibt sich damit beispielweise $\omega_{\text{Si}}^{\text{K}} = 3.57\%$. Dies liegt sehr nahe dem in [Ree72] tabellierten Wert von 3.8%. In anderen, z. T. neueren Zusammenstellungen werden jedoch etwas höhere Werte von 4.3% [Bam72, Hub94], 4.8% [Bru87] oder 5% [Kra79a] angegeben. Hier wird – wie in zahlreichen anderen, aktuellen Arbeiten – der Wert von 4.4% verwendet [Fra94].

Für Aluminium und Silizium sind die L- und M-Schalen-Fluoreszenzausbeuten so gering, daß sie vollständig vernachlässigt werden können. Im folgenden beziehen sich die Fluoreszenzausbeuten deshalb stets auf die K-Schale.

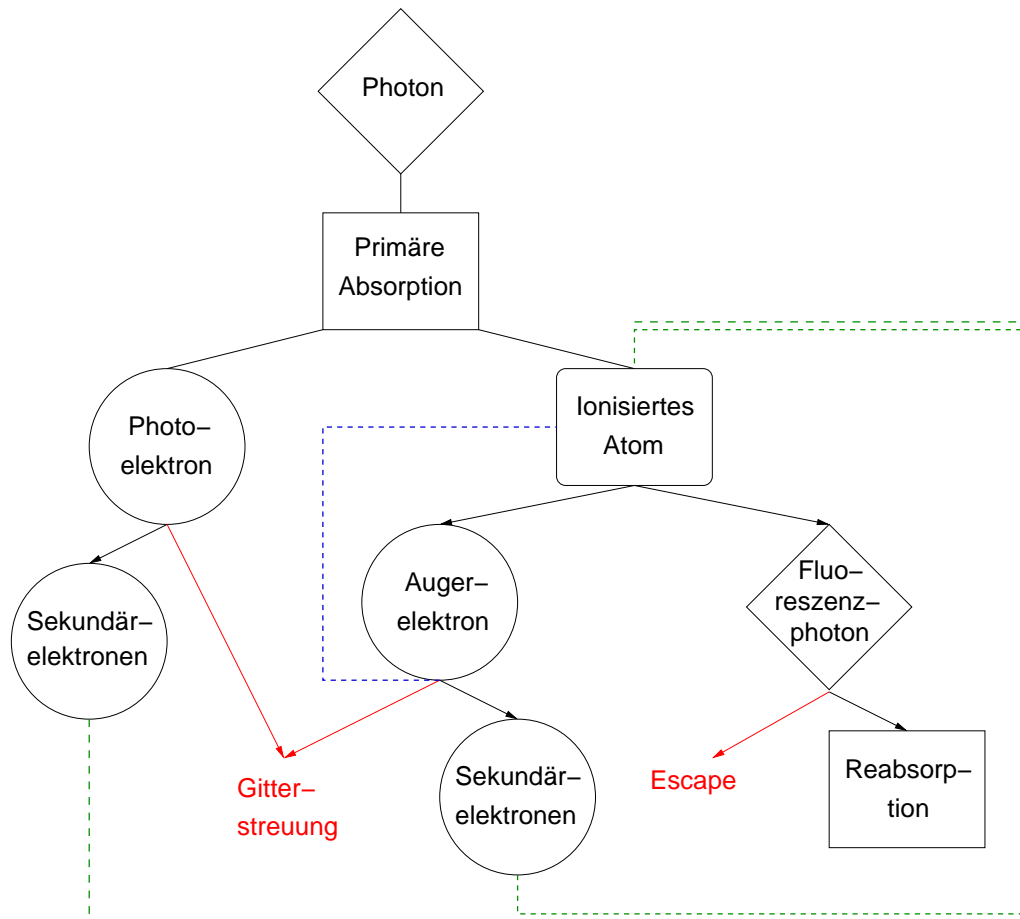


Abbildung 4.8: Die Erzeugung von Primär- und Sekundärelektronen. Alternative Zweige sind durch Pfeile dargestellt. Die gestrichelten Linien zeigen an, daß die erzeugten Sekundärelektronen zu weiteren, ionisierten Atomen führen können bzw. daß die Erzeugung von Auger-Elektronen stets ein mehrfach ionisiertes Atom hinterläßt. Der ebenfalls mögliche Verlust der Photo- und Auger-Elektronen sowie die Folgeprozesse der Sekundärelektronen sind nicht gezeigt.

4.4.4 Relaxation des ionisierten Atoms

Grundsätzlich führt die Photoabsorption zunächst zu einem Photoelektron und einem ionisierten Atom. Darüber hinaus können zahlreiche weitere Elektronen generiert werden. Die einzelnen Folgeprozesse sind schematisch in [Abbildung 4.8](#) gezeigt. Die wichtigsten Prozesse der Erzeugung von Fluoreszenzphotonen, Photo-, Auger- und Sekundärelektronen im Silizium werden im folgenden zusammengefaßt.

Die kinetische Energie der Photoelektronen verringert sich in der Folge durch Gitter- oder Ionisationsstreuung. Bei der Gitterstreuung verliert das Elektron Energie durch Anregung eines Phonons. Die Phononenenergie liegt dabei in der Größe der thermischen Energie $k_B T$, bei Raumtemperatur also etwa bei 25 meV. Bei der Ionisationsstreuung entstehen sekundäre Elektron-Loch-Paare.

Die Abregung des ionisierten Atoms (Relaxation) geschieht über Fluoreszenz-

photonen oder Auger-Elektronen. Die bevorzugten Relaxationsprozesse sind strahlungslos (95.6 % Wahrscheinlichkeit¹ für K-Leerstellen, 100 % für L- und M-Leerstellen) und erfolgen über Auger-Elektronen. Die Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten der jeweiligen Leerstellen sind in Abschnitt 4.4.5 angegeben.

1s² K-Schalen-Leerstelle. Neben dem Photoelektron mit der kinetischen Energie

$$E_{\text{Photo}} = E_0 - E_{\text{K}} = E_0 - 1\,839\text{ eV} \quad (4.23)$$

ist der wahrscheinlichste Prozeß die Emission von Auger-Elektronen. Die vier wahrscheinlichsten Auger-Prozesse sind wiederum die Erzeugung von KL₁L₁-, KL₁L_{2,3}-, KL_{2,3}L_{2,3}- und KL_{2,3}M-Elektronen mit Energien von 1 542, 1 591, 1 641 und 1 728 eV (Gesamtwahrscheinlichkeit 87.4 %). Die L_{2,3}-Schale ist entartet, deshalb unterscheiden sich die Energien der L₂- und L₃-Elektronen nicht.

2s² L₁-Schalen-Leerstelle. Auch hier entsteht stets ein Photoelektron mit der Energie

$$E_{\text{Photo}} = E_0 - E_{\text{L1}} = E_0 - 149.7\text{ eV} . \quad (4.24)$$

Der wichtigste Prozeß (97.5 %) ist der Coster-Kronig-Übergang, bei dem statt der L₁-Schalen-Leerstelle eine L_{2,3}- und eine M-Schalen-Leerstelle sowie ein Elektron mit einer Energie von 49.5 eV entstehen. Der einzig weitere wichtige Prozeß ist die L₁MM-Auger-Elektron-Emission (2.5 %, 132 eV). Die L₁-Schalen-Fluoreszenz kann vollkommen vernachlässigt werden (10⁻³ %).

2p⁶ L_{2,3}-Schalen-Leerstelle. Ähnlich wie im vorangegangenen Fall entsteht ein Photoelektron mit der Energie

$$E_{\text{Photo}} = E_0 - E_{\text{L23}} = E_0 - 99.2\text{ eV} \quad (4.25)$$

sowie ein L_{2,3}MM-Auger-Elektron (99.9 %, 83 eV). Die L₃-Schalen-Fluoreszenz kann in guter Näherung vernachlässigt werden (0.108 %), L₂-Schalen-Fluoreszenz wurde bisher noch nicht beobachtet (0 %).

Shakeoff. Die oben aufgeführten Emissionsprozesse von Photo- und Auger-Elektronen verursachen eine abrupte Änderung im atomaren Zentralpotential. Dadurch wird ein sogenannter Shakeoff induziert, bei dem wiederum Elektronen entstehen. Die Wahrscheinlichkeit für Shakeoff in Siliziumatomen ist nicht genau bekannt, läßt sich aber über die Mittelung der Wahrscheinlichkeiten von Neon und Argon annähern [Car73]. Die hierbei erzeugten Elektronen haben Energien von 2.2 eV (M-Schale) bis 19.2 eV (K-Schale). Die Anzahl- und Energieverteilung der Shakeoff-Elektronen ist vor allem bei Modellrechnungen zur Paarerzeugungsenergie und zum Fano-Faktor relevant (z. B. in [Fra94]). Im folgenden werden die Shakeoff-Prozesse deshalb nicht separat behandelt, da sie bereits durch das Fano-Rauschen (Gleichung 2.21) berücksichtigt werden.

¹Im folgenden geben die Prozentangaben in Klammern die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des jeweiligen Prozesses an.

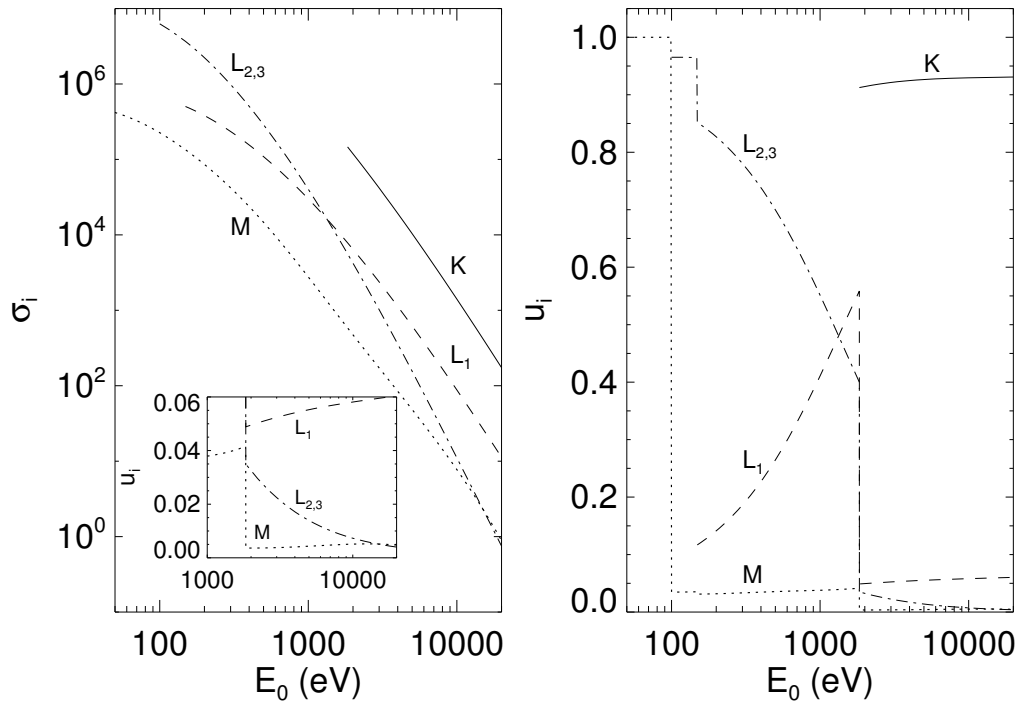


Abbildung 4.9: Photoionisationswirkungsquerschnitte σ_i der einzelnen Unterschalen von Silizium (links) und die daraus berechneten Wahrscheinlichkeiten u_i (rechts) für die Absorption in den entsprechenden (Unter-) Schalen $i = K, L_1, L_{2,3}, M$.

4.4.5 Schalenabhängige Photoabsorption

Der spektrale Untergrund wird von hochenergetischen Photo- und Auger-Elektronen sowie thermalisierten Elektronen mit hohen Reichweiten erzeugt. Um die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten der verschiedenen Elektronenenergien zu berechnen, muß bekannt sein, mit welcher Wahrscheinlichkeit die Photonen mit den Elektronen der einzelnen Schalen wechselwirken. Für nicht-gebundene Atome werden die Photoionisationswirkungsquerschnitte der einzelnen Unterschalen häufig mit Hilfe des *one-electron central-field frozen-core*-Modells und Störungstheorie erster Ordnung berechnet [Yeh85, Yeh93].

Für kristallines Silizium kann die Wahrscheinlichkeit für photoelektrische Absorption in den jeweiligen Elektronenschalen aus atomaren Wirkungsquerschnitten σ_i [Cro70] oder aus den Diskontinuitäten der Absorptionskoeffizienten an den Kanten bestimmt werden [Ger87, Lec98]. Bei Anwendung der ersten Methode erhält man für jede *Unterschale* energieabhängige Wechselwirkungswahrscheinlichkeiten, während die zweite Methode lediglich die Gesamtwahrscheinlichkeiten für die einzelnen *Schalen* in den jeweiligen *Energiebereichen* angibt. Da die Energien der Photo- und Auger-Elektronen aus den einzelnen Unterschalen unterschiedlich sind und davon die räumliche Verteilung der im Detektor generierten Ladung abhängt, wird hier die erste, genauere Methode verwendet.

Die energieabhängigen Ionisationswirkungsquerschnitte σ_i der einzelnen Scha-

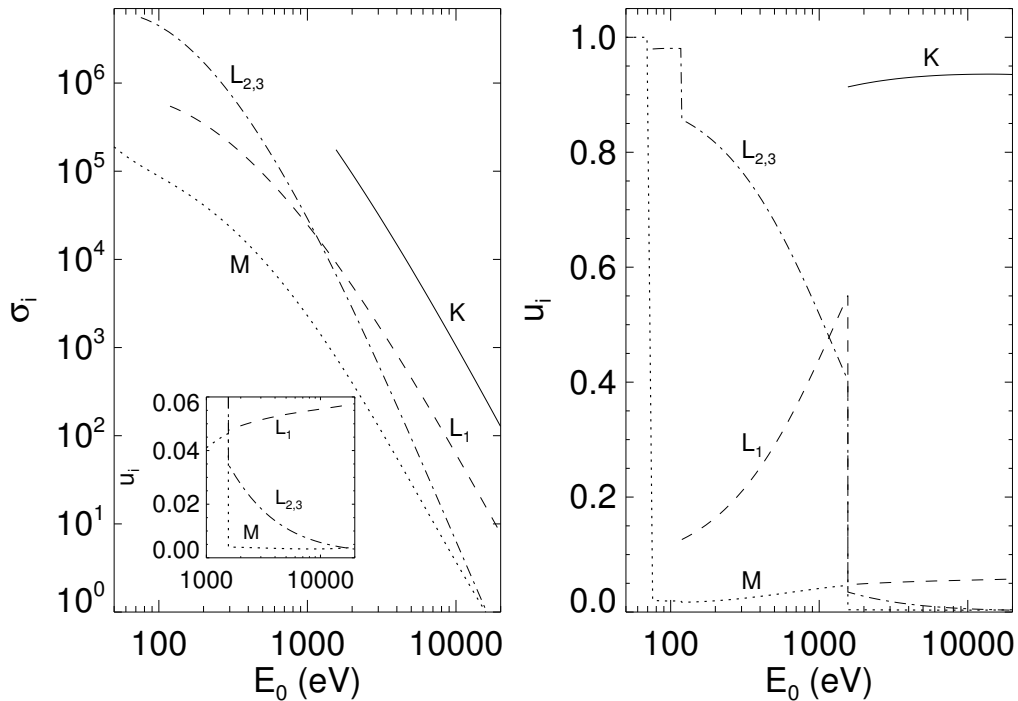


Abbildung 4.10: Photoionisationswirkungsquerschnitte σ_i der einzelnen Unterschalen von Aluminium (links) und die daraus berechneten Wahrscheinlichkeiten u_i (rechts) für die Absorption in den jeweiligen (Unter-) Schalen $i = K, L_1, L_{2,3}, M$.

len/Unterschalen von Silizium nach sind links in Abbildung 4.9 dargestellt. Die Werte für σ_i wurden [Cro70] entnommen und für dort nicht aufgeführte Energien interpoliert. Bei der Interpolation wurde ausgenutzt, daß sich die energieabhängigen Ionisationswirkungsquerschnitte in einer doppellogarithmischen Darstellung mit Polynomen dritter (für die K- und L-Schalen) bzw. vierter (für die M-Schalen) Ordnung wiedergeben lassen.

Die L_{2,3}-Schale ist entartet, deshalb ist hier die Summe $\sigma_{L2} + \sigma_{L3}$ angegeben. Die Absorptionswahrscheinlichkeit u_i in der (Unter-)Schale i ist dann

$$u_i = \frac{\sigma_i}{\sum_i \sigma_i}. \quad (4.26)$$

Die Absorptionswahrscheinlichkeiten u_i sind rechts in Abbildung 4.9 dargestellt. Oberhalb der Si-K-Kante (1.84 keV) dominiert die Photoabsorption durch K-Schalen-Elektronen ($\approx 92\%$ Wahrscheinlichkeit, durchgezogene Linien). Der zweitwahrscheinlichste Prozeß ($\approx 5\%$, gestrichelte Linien) ist die Absorption in der L₁-Schale. Zwischen 1.1 und 1.8 keV dominiert die Absorption in der L₁-Schale (149.7 eV), während unterhalb 1.1 keV bis zu den L-Kanten die L_{2,3}-Absorptionen vorwiegen (entartete Niveaus bei 99.2 keV). Die Absorptionswahrscheinlichkeit für die M₁-Schale (11.4 eV) ist mit $\lesssim 4\%$ relativ gering (punktierter Linien).

In Abbildung 4.10 sind die Photoionisationswirkungsquerschnitte und Absorptionswahrscheinlichkeiten für Aluminium gezeigt. Die Wahrscheinlichkeiten verlau-

fen ähnlich wie bei Silizium. Oberhalb der Al-K-Kante (1.56 keV) kommt es überwiegend zur Absorption in der K-Schale, zwischen 1 und 1.56 keV überwiegt die L₁-Schalen-Absorption, und unterhalb 1 keV wechselwirken die Röntgenquanten vorwiegend mit L_{2,3}-Elektronen.

4.4.6 Verlust von Fluoreszenzphotonen

Da das empfindliche Volumen von Detektoren endlich ist und Röntgenphotonen deutlich höhere Reichweiten als Elektronen gleicher Energie haben (vgl. Abbildungen 4.2 und 4.12), können Fluoreszenzphotonen entweichen anstatt reabsorbiert zu werden. Diesen Verlust intern generierter Fluoreszenzphotonen nennt man Escape-Effekt [Dys74]. Im Spektrum entsteht dabei eine sekundäre Linie (Escape-Peak), deren Energie gegenüber der Ursprungsenergie E_0 um die Energie des Fluoreszenzphotons verschoben ist (siehe die Linie bei $5\,898\text{ eV} - 1\,740\text{ eV} = 4\,158\text{ eV}$ in Abbildung 2.5).

Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Fluoreszenzphoton erzeugt wird, ist durch das Produkt von drei Wahrscheinlichkeiten gegeben: der totalen Quanteneffizienz $\varepsilon_{\text{total}}$ (der Wahrscheinlichkeit, daß das primäre Photon die Aluminiumschicht durchdringt und es innerhalb des Siliziums absorbiert wird), der Wahrscheinlichkeit u_{K} für eine K-Schalen-Absorption und der Wahrscheinlichkeit für einen Fluoreszenz- statt eines Auger-Prozesses, also die Fluoreszenzausbeute ω_{Si} (siehe Abschnitt 4.4.5).

Die Wahrscheinlichkeit ϵ , daß ein im aktiven Volumen erzeugtes Fluoreszenzphoton einen Detektor mit unendlich großer Fläche und sehr tiefer Raumladungszone in Richtung Strahleneintrittsseite verläßt, hängt von den Si-Absorptionskoeffizienten der Fluoreszenz- und der einfallenden Strahlung $\mu_{\text{fl}} = \mu(1\,740\text{ eV})$ und $\mu_0 = \mu(E_0)$ ab [Ree72].

$$\epsilon = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\mu_{\text{fl}}}{\mu_0} \ln \left(1 + \frac{\mu_0}{\mu_{\text{fl}}} \right) \right) \quad (4.27)$$

Der Verlust des Escape-Photons über die Strahlenaustrittsseite wird hier vernachlässigt. So lange die Tiefe der Raumladungszone größer als die Absorptionslänge $\lambda_0 = 1/\mu_0$ ist ($E_0 < 13\text{ keV}$), ist deshalb diese Gleichung in guter Näherung gültig.

Die Wahrscheinlichkeit für ein Escape-Ereignis ist dann das Produkt dieser vier Wahrscheinlichkeiten.

$$p_{\text{esc}} = \varepsilon_{\text{total}} \omega_{\text{Si}} u_{\text{K}} \epsilon \quad (4.28)$$

p_{esc} gibt nicht die Höhe der Escape-Linie, sondern die Anzahl der Ereignisse relativ zum gesamten Spektrum an, also die Fläche unterhalb der Linie.

Die Escape-Wahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Energie E_0 des einfallenden Photons ist in Abbildung 4.11 dargestellt. Ist die Energie des einfallenden Photons kleiner als die Energie der Si-K-Kante, werden keine internen Fluoreszenzphotonen generiert und es tritt kein Escape-Effekt auf.

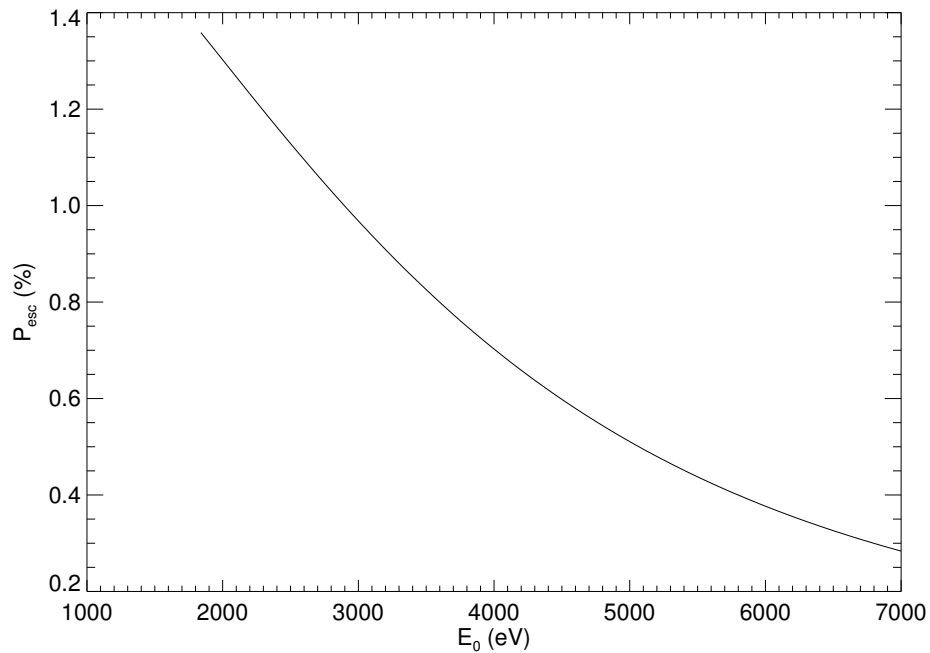


Abbildung 4.11: Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Escape-Effektes nach Gleichung 4.28 (Intensität der Escape-Linie).

4.5 Streuprozesse und Reichweite der Elektronen

4.5.1 Primärelektronen

Energiereiche Elektronen geben ihre Energie entlang ihres gesamten Weges kontinuierlich ab. Die Energieverluste können daher einen beliebigen Wert zwischen null und der Anfangsenergie des Elektrons annehmen. Zwischen den energiereichen Elektronen und den einzelnen Gitteratomen kann es zu elastischen und inelastischen Stößen mit Hüllenelektronen und Kernen kommen.

Bei elastischer Streuung kommt es zu keinem Energieübertrag auf den Streupartner, sondern lediglich zu einer Richtungsänderung. Deshalb ist die elastische Streuung im folgenden nicht von Belang. Sie wird lediglich in die allgemeine Reichweitenbetrachtung einbezogen (s. u.). Der Wirkungsquerschnitt für elastische Streuung beträgt $4 \cdot 10^6$ b bei 1 keV [Eva55].

Die inelastische Streuung an Hüllenelektronen ist mit einem Wirkungsquerschnitt von $3 \cdot 10^6$ b bei 1 keV fast ebenso wahrscheinlich wie die elastische Streuung.

Der Wirkungsquerschnitt für inelastische Kernstreuung (also die Erzeugung von Bremsstrahlung) beträgt lediglich 315 b bei 1 keV [He88]. Die Wahrscheinlichkeit ist durch das Verhältnis der Wirkungsquerschnitte dieser drei Streuprozesse gegeben und ist gleich $4.3 \cdot 10^{-3}$ %. Sie wird deshalb im weiteren vernachlässigt.

Da das Entkommen und Eindringen primärer Elektronen einen entscheidenden Anteil am Untergrund hat, müssen deren Reichweiten R und Energiedepositionen dE/dR berechnet werden. Im folgenden wird die projizierte Reichweite der Elek-

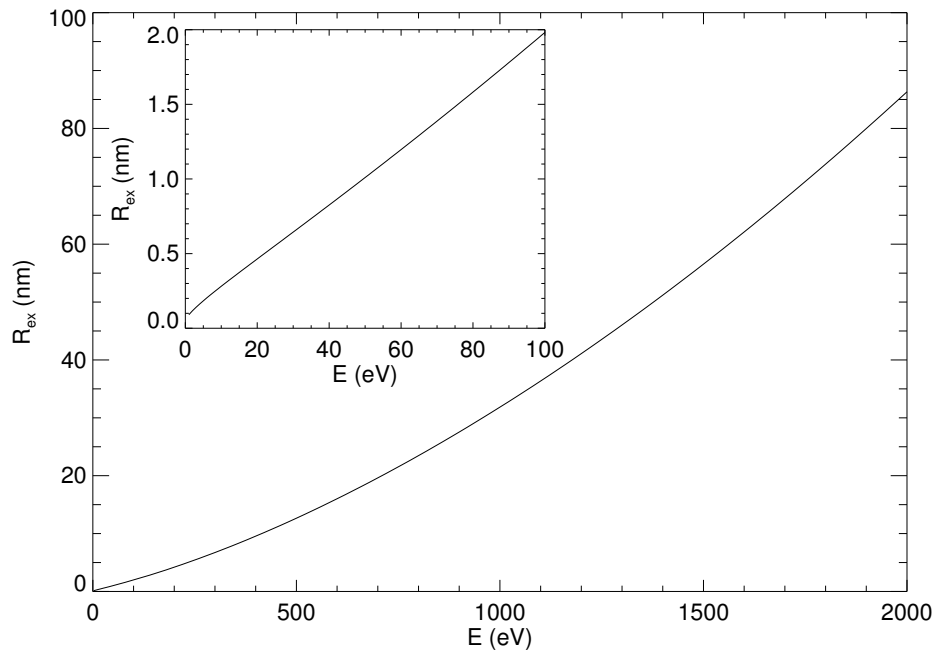


Abbildung 4.12: Elektronenreichweite R_{ex} in Silizium in Abhängigkeit von der Elektronenenergie (Gleichung 4.29) [Isk83].

tronen angegeben, also die Strecke zwischen Anfangs- und Endpunkt des Elektrons und nicht der tatsächliche Weg, welche das Elektron zurücklegt (das Wegintegral).

Elektronenreichweiten werden gemessen, indem man den Bruchteil η der ursprünglich vorhandenen Elektronen mit der Energie E hinter einem Absorber der Dicke x bestimmt [Isk83]. Man erhält dann Reichweiten R_q , wobei q den prozentualen Anteil der transmittierten Elektronen angibt, z. B. $q = 50, 10, 5$ oder 1 . Die extrapolierte Reichweite R_{ex} ergibt sich dann aus der Extrapolation des linearen Teils dieser Meßwerte für $q = 0$. Da Elektronen mit verschwindender Restenergie praktisch nicht mehr detektiert werden können, ist es schwierig, die tatsächliche maximale Reichweite anzugeben.

Für Elektronenreichweiten für Energien unterhalb von 10 keV wird häufig die Reichweitenformel von FITTING [Fit74] benutzt.

$$R = 90 \text{ nm} \left(\frac{\rho}{\text{g cm}^{-3}} \right)^{-0.8} \left(\frac{E}{\text{keV}} \right)^{1.3}$$

Dabei ist R die lineare Elektronenreichweite, ρ die Dichte des Festkörpers (für Silizium ist $\rho = 2.33 \text{ g/cm}^3$ und für Aluminium 2.7 g/cm^3) und E die Elektronenenergie. Hier wird stattdessen die genauere Gleichung von ISKEF [Isk83] verwendet.

$$\frac{R_{\text{ex}}}{\text{nm}} = \frac{10A}{Z\rho/(\text{g cm}^{-3})} \exp \left(a_0 + a_1 \ln \frac{E}{\text{eV}} + a_2 \left(\ln \frac{E}{\text{eV}} \right)^2 \right) \quad (4.29)$$

Dabei ist A die Massenzahl, Z die Kernladungszahl, ρ die Dichte, $a_0 =$

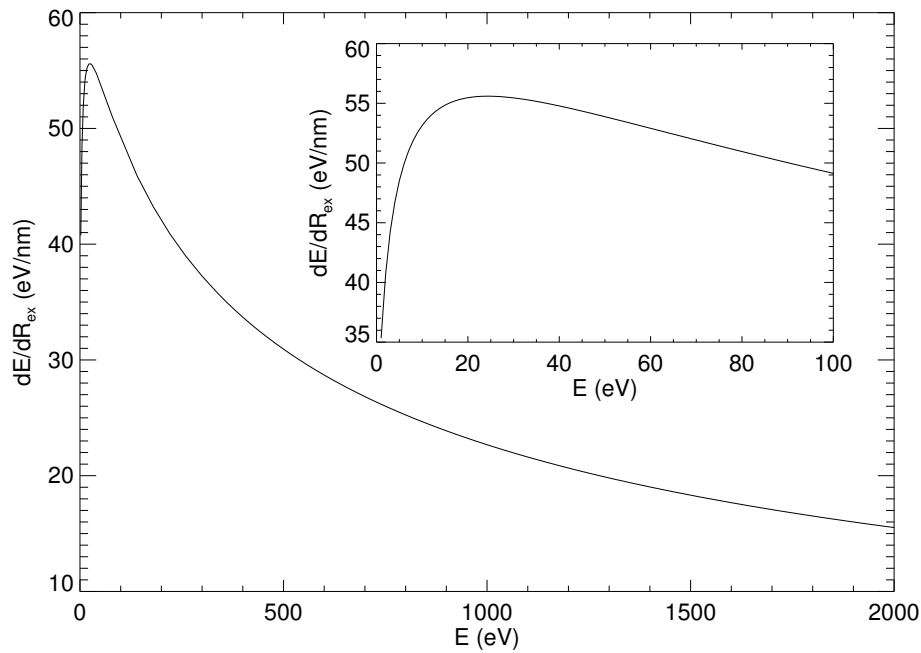


Abbildung 4.13: Effektives Bremsvermögen dE/dR_{ex} von Elektronen in Abhängigkeit von der Elektronenenergie (Gleichung 4.30) [Isk83].

-4.5467 , $a_1 = 0.31104$ und $a_2 = 0.07773$. Die Elektronenreichweiten in Silizium sind in Abbildung 4.12 gezeigt.

Bei der Messung der extrapolierten Reichweite wird über eine große Anzahl von Elektronen gemittelt, in der folgenden Rechnung werden diese jedoch als Reichweite einzelner Elektronen betrachtet. In der Realität fluktuieren die individuellen Elektronenreichweiten natürlich. Die möglichen Fluktuationen der Primärelektronenreichweiten werden im folgenden vernachlässigt, was jedoch gegenüber den relativ hohen Sekundärelektronenreichweiten nicht ins Gewicht fällt.

Das effektive Bremsvermögen (*stopping power*) ist der Kehrwert der Ableitung von Gleichung 4.29 nach E .

$$\frac{dE}{dR_{\text{ex}}} = \frac{E}{R_{\text{ex}} \left(a_1 + 2a_2 \ln \frac{E}{\text{eV}} \right)} \quad (4.30)$$

Dieses Brems- oder Ionisationsvermögen gibt an, wieviel Energie das Primärelektron entlang einer gegebenen Länge dR abgibt (Abbildung 4.13). Die Gleichungen 4.29 und 4.30 werden im weiteren verwendet, um die räumliche und energetische Verteilung der Elektronen zu berechnen.

4.5.2 Sekundärelektronen

Bei den Sekundärprozessen muß unterschieden werden, ob die Elektronen noch genug Energie haben, um weitere Ionisierungen zu verursachen oder nicht (vgl. Abschnitt 2.1.8).

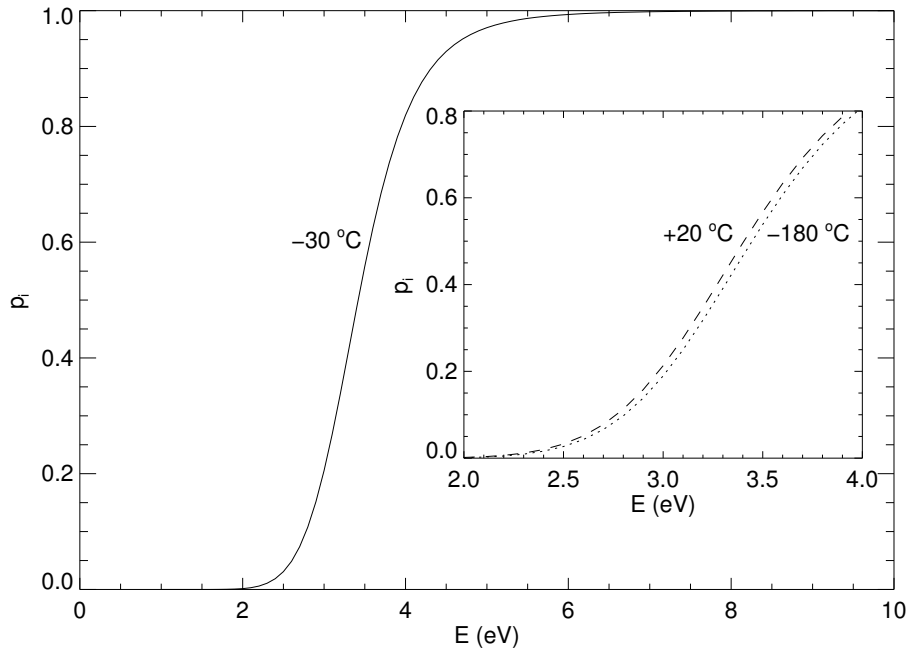


Abbildung 4.14: Wahrscheinlichkeit p_i für Ionisationsstreuung der Elektronen nach Gleichung 4.31. Die Wahrscheinlichkeit für Gitterstreuung ist $1 - p_i$.

Oberhalb der Schwellenenergie E_{thr} für Ionisationsprozesse treten – wie bei den Primärelektronen – in erster Linie elastische und inelastische Streuprozessen an anderen Elektronen auf. Vergleichen mit den Energien der Primärelektronen ($\sim \text{keV}$) sind die Sekundärelektronenenergien ein bis zwei Größenordnungen kleiner und ihrer Reichweiten deutlich kürzer (siehe Ausschnittsvergrößerung in Abbildung 4.12).

Aus dem Verhältnis der Streuraten für Ionisations- und Gitterstreuung können die Wahrscheinlichkeiten für Ionisationsstreuung p_i und Gitterstreuung $1 - p_i$ berechnet werden [Ali80, Ali83].

$$p_i(E, T) = \frac{(E - E_G(T))^{7/2}}{(E - E_G(T))^{7/2} + \frac{105}{2\pi} A \sqrt{E - \hbar\omega_0(T)}} \quad (4.31)$$

E ist die Elektronenenergie, E_G die Bandlückenenergie (Gleichung 2.15), $\hbar\omega_0$ die Phononenenergie, und A ist ein freier Parameter, der durch Vergleich mit experimentellen Werten zu $5.2 (\text{eV})^3$ bestimmt wurde. Abbildung 4.14 zeigt p_i für Phononen mit thermischer Energie $\hbar\omega_0 = k_B T$ und verschiedene Temperaturen.

Sowohl die Bandlückenenergie als auch die Energien der thermischen Phononen hängen von der Temperatur ab. Die Temperaturabhängigkeit der Bandlückenenergie ist jedoch sehr gering. Zudem sind die Phononenenergien sehr viel kleiner als die Elektronenenergien, d. h. die Rechnungen für Phononen mit thermischer Energie oder z. B. optischen Phononen mit 67 meV liefern praktisch das gleiche Ergebnis.

Bei der Betriebstemperatur des Detektors von -30°C ist bei Elektronenenergie oberhalb 5.7 eV die Wahrscheinlichkeit für Ionisationsstreuung größer als 99% .

Wenn die Elektronenenergie kleiner als 3.42 eV ist, so ist $p_i < 0.5$, d. h. die Wahrscheinlichkeit für Gitterstreuung ist unterhalb dieser Energie größer als die für Ionisationsstreuung. Für $E < 2.2$ eV ist die Wahrscheinlichkeit für Gitterstreuung bereits größer als 99 %. Liegt die kinetische Energie der Elektronen unterhalb der Schwellenenergie E_{thr} , so geben die Elektronen Energie ausschließlich durch Phononenstreuung ab. Die mittlere freie Weglänge für Streuung von Elektronen an Phononen ist mit 7.6 nm vergleichsweise groß [Sze81], und die Elektronen geben bei Phononenstreuung nur eine sehr geringe Energie ab (Gleichung 2.14), deshalb ist die Gesamtreichweite thermalisierter Elektronen sehr hoch.

Die Ausbreitung der thermalisierten Elektronen kann über eine Diffusions- oder Thermalisierungsreichweite l_t beschrieben werden [Sch00, Cam01]. Bisherige Meßwerte für l_t in Silizium liegen bei 210 nm für $T = 90$ K [Sch94], 170 nm für 140 K und 120 nm für 300 K [Har95] (leider ohne Angabe der Meß- und Modellfehler).

Die gesamte Größe der Sekundärelektronen-Ladungswolke hängt sowohl von der Reichweite der ionisierenden Sekundärelektronen als auch der Thermalisierungslänge ab. Beide Reichweiten können jedoch nicht unabhängig voneinander bestimmt werden. Deshalb wird für die folgende Berechnung der Ladungsverluste eine totale Sekundärelektronenreichweite r_{sek} eingeführt. Es wird angenommen, daß diese Ladungsträgerdichte in der Sekundärelektronenwolke gaußförmig verteilt ist. Die Sekundärelektronenreichweite r_{sek} ist als 4σ -Bereich dieser Gaußverteilung definiert, d. h. weniger als 0.007 % der Ladungsträger sind weiter als r_{sek} vom Mittelpunkt entfernt.

$$r_{\text{sek}} = 4 \sigma_{\text{sek}} \quad (4.32)$$

Die Sekundärelektronenreichweite r_{sek} ist unbekannt und deshalb der einzige freie Parameter des folgenden Modells.

4.6 Berechnung der Energiedeposition im Detektor

Das Modell² zur Berechnung der Energiedeposition im aktiven Volumen beruht auf den in den vorigen Abschnitten berechneten Absorptionswahrscheinlichkeiten, Prozessen zur Primär- und Sekundärelektronenerzeugung und deren Reichweiten.

Bei der Absorption der Photonen und der anschließenden Generation der Ladungswolken treten im Aluminium und Silizium die gleichen, grundlegenden Prozesse auf. Deshalb wird die Absorption in beiden Schichten nach der gleichen Methode berechnet. Das Modell basiert auf der Annahme, daß die Ladungssammelfizienz von Sekundärelektronen im Aluminium gleich null ist (Totenschicht) und im Silizium überall gleich eins. Das heißt aber nicht, daß bei einer Röntgenabsorption im Silizium grundsätzlich die gesamte Ladung nachgewiesen wird. Wenn ein Photon im Silizium absorbiert wird, sich die Ladungswolke aber derart ausbreitet, daß sich ein Teil der Ladung in das Aluminium bewegt, so geht dennoch Ladung verloren. Dies ist ein wichtiger Unterschied gegenüber anderen Modellen (z. B. [Har95, Lec95, Lec98, Pop00a, Pop00b], vgl. auch Abschnitt 2.2.3), bei denen eine Übergangsschicht mit einem parametrisierten Ladungssammelprofil angenommen wird und die Parameter so angepaßt werden, daß eine möglichst gute

²Die IDL-Routinen der folgenden Berechnungen befinden sich auf der Website www.ketek.net.

Übereinstimmung zwischen Messung und Modellrechnung erzielt wird. Eine solche Vorgehensweise ist jedoch nur dann gerechtfertigt, wenn bei einer Absorption in einer bestimmten Tiefe immer der gleiche Teil der Gesamtladung verloren geht. In diesen Modellen wird also vernachlässigt, daß – je nach Ausbreitungsrichtung der primären Elektronen – im gleichen Absorptionsgebiet sowohl vollständige als auch unvollständige Ladungssammlung auftreten kann.

Im folgenden werden zunächst die (leicht zu berechnenden) Intensitäten der gaußförmigen Anteile der Antwortfunktion angegeben. Die Methode zur Berechnung des nicht-gaußförmigen Untergrunds wird in Abschnitt 4.6.4 vorgestellt.

4.6.1 Intensität der Hauptlinie und ICC-Schichtdicke

Die Intensität der Hauptlinie ist zunächst durch die Full-Peak-Quanteneffizienz $\varepsilon_{\text{Gauß}}$ gegeben (Gleichung 4.12), also dem Produkt aus den Wahrscheinlichkeiten, daß keine Escape-Verluste auftreten sowie daß die Photonen die Metallisierung und die Schicht unvollständiger Ladungssammlung (ICC-Schicht) mit der Dicke d_p durchdringen. Zur Berechnung der Full-Peak-Quanteneffizienz muß d_p bekannt sein. Sie ist durch die Summe aus maximaler Primärelektronenreichweite

$$r_{\text{pri}}^{\text{max}}(E_0) = \max\left(r_{\text{pri}}(E_{\text{Photo}}(E_0)), r_{\text{pri}}(E_{\text{Auger}}^{\text{max}}(E_0))\right) \quad (4.33)$$

und Sekundärelektronenreichweite r_{sek} gegeben.

$$d_p(E_0) = r_{\text{pri}}^{\text{max}}(E_0) + r_{\text{sek}}(E_0) \quad (4.34)$$

Wird das Röntgenphoton im Bereich $z > d_p$ absorbiert, treten keine Elektronenverlustprozesse auf. Die Reichweiten der primären Photo- und Auger-Elektronen werden nach Gleichung 4.29 berechnet. Die von E_0 abhängigen Photo- und Auger-Elektronenenergien sind in Abschnitt 4.4 angegeben.

Abbildung 4.15 zeigt die mit Gleichung 4.34 berechnete Dicke der ICC-Schicht. Vernachlässigt man die Reichweite der Sekundärelektronen und oberhalb der Si-K-Kante die relativ unwahrscheinliche Absorption in der L-Schale (punktirierte Linie, die zum Teil von der durchgezogenen Linie verdeckt wird), so ist d_p im Energiebereich unterhalb der K-Kante durch die Reichweite der L-Photoelektronen (PE) gegeben und oberhalb der K-Kante zunächst durch die der Auger-Elektronen, welche eine konstante Energie haben. Die ICC-Schichtdicke steigt erst wieder an, wenn die Reichweite der K-Photoelektronen die der Auger-Elektronen übersteigt.

Bezieht man hingegen die L-Photoelektronen auch oberhalb der K-Kante in die Rechnung ein (durchgezogene Linie), so definieren die L-Photoelektronen die ICC-Schichtdicke d_p unter- und oberhalb der K-Kante, denn ihre Energie ist stets höher als die der Auger- oder K-Photoelektronen (Gleichungen 4.23 bis 4.25).

Berücksichtigt man überdies die Sekundärelektronenreichweite (strichpunktirierte Linie), so wird deutlich, daß bei dem hier gewählten, konstanten $r_{\text{sek}} = 180 \text{ nm}$ die ICC-Schichtdicke von r_{sek} dominiert wird, denn bei niedrigen Röntgenenergien haben die Primärelektronen sehr kurze Reichweiten. Da hier zudem die Absorptionswahrscheinlichkeit in der ICC-Schicht sehr hoch ist, beeinflußt r_{sek} spürbar die Höhe der Hauptlinie. Im Energiebereich $E_0 \gtrsim 1 \text{ keV}$ wirkt sich die Variation

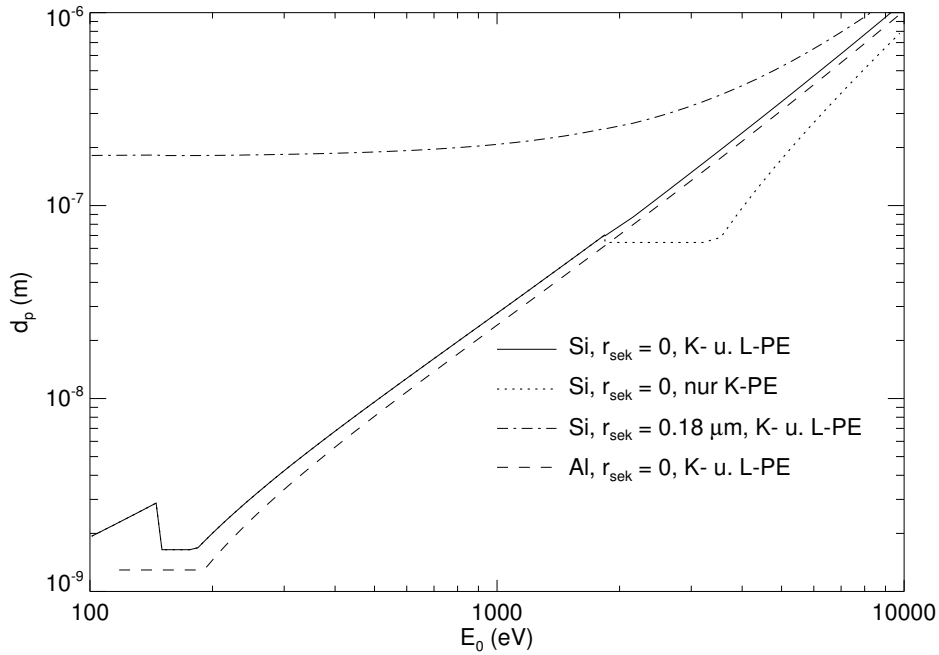


Abbildung 4.15: Dicke d_p der Schicht partieller Ladungssammlung nach Gleichung 4.34 in Abhängigkeit von der Röntgenenergie E_0 . Diese ICC-Schichtdicke hängt nicht nur von der gewählten Sekundärelektronenreichweite ab, sondern auch davon, ob in die Rechnung die höhere Reichweite der L-Photoelektronen (PE) einbezogen wird.

der Sekundärelektronenreichweite bei der Berechnung der Intensität der Hauptlinie kaum aus, da die Röntgenabsorption in der ICC-Schicht ohnehin relativ unwahrscheinlich ist ($< 7\%$). Für die Berechnung der Höhe und Form des Untergrunds ist jedoch r_{sek} auch in diesem Energiebereich sehr wichtig (Abschnitt 4.6.4)

Zum Vergleich ist die maximale Primärelektronenreichweite auch für Al-Elektronen gezeigt (gestrichelte Linie). Diese definiert nicht die ICC-Schichtdicke, sondern die Tiefe, aus der Al-Elektronen in das Si-Volumen driften können.

Bei der Berechnung der Intensität der Escape-Linie in Abschnitt 4.4.6 wird nicht zwischen der Absorption in der ICC-Schicht und dem restlichen Substrat unterschieden. Die Ladungssammlung in dieser Schicht wird im folgenden jedoch ausschließlich für das gleichzeitige Auftreten von Auger- und Photoelektronen berechnet. Es wird also bei der Rechnung in Abschnitt 4.6.4 nicht berücksichtigt, daß in der ICC-Schicht auch Fluoreszenzphotonen generiert werden können, welche reabsorbiert werden und nicht das aktive Detektorvolumen verlassen. Solche Fluoreszenzphotonen tragen auch zur Intensität der Hauptlinie bei. Die Wahrscheinlichkeit für diesen Vorgang $\varepsilon_p^{\text{reab}}$ ist das Produkt aus den Wahrscheinlichkeiten für Absorption in diesem Gebiet $\tau_M(1 - \tau_p)$, für die Absorption in der K-Schale u_K , für K-Fluoreszenz ω_{Si} und für die Reabsorption $1 - \epsilon$.

$$\varepsilon_p^{\text{reab}} = \tau_M(1 - \tau_p)u_K\omega_{\text{Si}}(1 - \epsilon) \quad (4.35)$$

Die Spektralverteilung (Anzahl der Ereignisse dN im Energiebereich dE) der

Hauptlinie ist dann

$$\frac{dN}{dE}(E) = (\varepsilon_{\text{Gauß}} + \varepsilon_{\text{p}}^{\text{reab}}) \frac{dE}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(E - E_0)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (4.36)$$

Der Normierungsfaktor $dE/(\sigma\sqrt{2\pi})$ bewirkt, daß das Integral über dN/dE die Intensität $\varepsilon_{\text{Gauß}} + \varepsilon_{\text{p}}^{\text{reab}}$ ergibt und nicht von der Histogrammbreite dE oder der Auflösung σ abhängt.

4.6.2 Aluminiumfluoreszenz

Bei Röntgenenergien oberhalb der Al-K-Kante kann in der Aluminiumbeschichtung des SDD Fluoreszenzstrahlung angeregt werden, die im Spektrum als schwache Linie erscheint. Deren Intensität wird im folgenden hergeleitet.

Da die Fluoreszenzphotonen isotrop emittiert werden, wird die Hälfte der in der Metallisierung erzeugten Fluoreszenzstrahlung im Detektor registriert. Eine Reabsorption im Aluminium kann vernachlässigt werden, da die Absorptionslänge von Al-K-Fluoreszenzstrahlung mit $9.2\mu\text{m}$ um zwei Größenordnungen höher als die Al-Schichtdicke ist (Abbildung 4.2). Auch innerhalb des Siliziums ist die Absorptionslänge mit $7.9\mu\text{m}$ noch deutlich größer als die Schicht unvollständiger Ladungssammlung. Unvollständige Ladungssammlung der Al-Fluoreszenzstrahlung kann deshalb vernachlässigt werden. Der Escape-Effekt kann ebenfalls nicht auftreten, da die Fluoreszenzenergie kleiner als die Bindungsenergie der Si-K-Elektronen ist.

Die Intensität der Fluoreszenzstrahlung I_{F} ist deshalb proportional zur Absorptionswahrscheinlichkeit in der K-Schale u_{K} , zur Aluminiumfluoreszenzausbeute $\omega_{\text{Al}} = 0.039$ [Kra79a] und zur Absorptionswahrscheinlichkeit p_{M} in der Metallisierungsschicht mit der Dicke d_{M} . Die nachgewiesene Fluoreszenzintensität ist dann mit Gleichung 4.14

$$\begin{aligned} I_{\text{F}}(E_0) &= \frac{1}{2}\omega_{\text{Al}}u_{\text{K}}p_{\text{M}}(E_0) \\ &= \frac{1}{2}\omega_{\text{Al}}u_{\text{K}}(1 - \tau_{\text{M}}(E_0)) \\ &= \frac{1}{2}\omega_{\text{Al}}u_{\text{K}}\left(1 - \exp(-d_{\text{M}}/\lambda_{\text{M}}(E_0))\right). \end{aligned} \quad (4.37)$$

Der Beitrag der Aluminiumfluoreszenz zum Pulshöhenspektrum ist somit

$$\frac{dN}{dE}(E) = I_{\text{F}} \frac{dE}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(E - E_{\text{F}})^2}{2\sigma^2}\right). \quad (4.38)$$

Umgekehrt kann aus einer beobachteten Peak-Höhe die Dicke der Aluminiumschicht bestimmt werden (Abschnitt 5.6).

4.6.3 Escape-Linie

Bei Röntgenenergien oberhalb der Si-K-Kantenenergie ist die Escape-Linie der dominante Untergrundbeitrag. Ihre Intensität ist durch die Escape-Wahrscheinlich-

keit p_{esc} (Gleichung 4.28) gegeben.

$$\frac{dN}{dE}(E) = p_{\text{esc}} \frac{dE}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(E - (E_0 - 1740 \text{ eV}))^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4.39)$$

4.6.4 Unvollständige Ladungssammlung im Eintrittsfenster

In der Metallisierungsschicht ($-d_M < z < 0$) können Photonen absorbiert werden. Die dadurch freigesetzten Elektronen generieren ausschließlich Untergrundereignisse im Spektrum, da alle Primärelektronen noch innerhalb der Metallisierung Energie abgeben und Sekundärelektronen generieren, welche nicht nachgewiesen werden, da sie hier sehr schnell rekombinieren. Im Silizium kann nur die Absorption innerhalb der ICC-Schicht zu Ladungsverlusten führen, d. h. wenn die Möglichkeit besteht, daß Elektronen in die Metallisierung driften. Die Dicke dieser Schicht ist deshalb durch die Summe aus maximaler Primärelektronenreichweite und Sekundärelektronenreichweite gegeben (Gleichung 4.34, Abbildung 4.15).

Die Metallisierungsschicht wird zur Berechnung der Absorptionswahrscheinlichkeitsdichte nach Gleichung 4.15 in z_s Intervalle unterteilt. Die Differenz dz_0 zwischen diesen Intervallen ist d_M/z_s . Es wird angenommen, daß die Absorption stets in der Mitte dieses Intervalls stattfindet. Die Intervalle dürfen deshalb nicht zu groß gewählt werden. Die einzelnen Intervallpositionen in der Metallisierungsschicht sind dann³

$$z_n = \frac{d_M}{z_s} \left(\frac{1}{2} + n\right) - d_M. \quad (4.40)$$

mit den Absorptionsorten z_n , der Metallisierungsdicke d_M und $n = 0, 1, \dots, z_s - 1$. Für die Schicht unvollständiger Ladungssammlung d_p im Silizium ist $dz_0 = d_p/z_s$, und es gilt entsprechend

$$z_n = \frac{d_p}{z_s} \left(\frac{1}{2} + n\right). \quad (4.41)$$

Für die Einteilung der Metallierungs- und Siliziumschicht muß nicht die gleiche Anzahl von Intervallen z_s gewählt werden. Da in den meisten Fällen d_p größer als d_M ist, wird z_s für die Berechnung im Silizium doppelt so hoch gewählt wie für die Metallisierung. Es hat sich herausgestellt, daß für eine genaue Berechnung $z_s \geq 30$ bzw. ≥ 60 sein sollte.

Die Absorptionswahrscheinlichkeiten in den einzelnen Schichten lassen sich berechnen, indem man über die Absorptionswahrscheinlichkeitsdichten dP/dz (Gleichungen 4.15 und 4.17) integriert.

$$p_M^n = \int_{z_n - dz_0/2}^{z_n + dz_0/2} \frac{dp_M}{dz} dz \quad (4.42)$$

für die Metallisierung und

$$p_p^n = \int_{z_n - dz_0/2}^{z_n + dz_0/2} \frac{dp_p}{dz} dz \quad (4.43)$$

³Indizes in aufrechter Schriftart werden zur näheren Bezeichnung der Größe verwendet (z. B. k_B, d_M), *kursive* Indizes stehen für Variable (z. B. z_n mit $n = 0, 1, 2, \dots$). Zum Teil sind Indizes auch hochgestellt und geben in diesem Fall keine Potenz an.

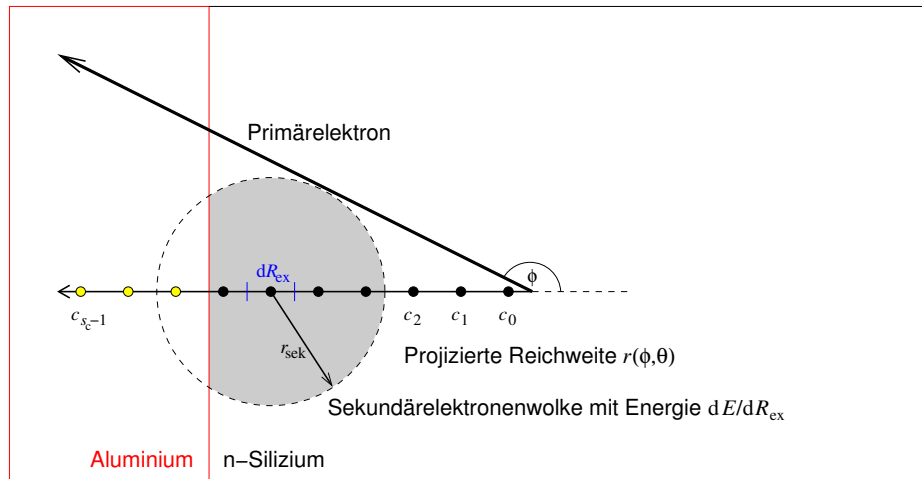


Abbildung 4.16: In dem Modell wird angenommen, daß sich die Primärelektronen geradlinig ausbreiten (dicke Linie). Die auf die z -Koordinate projizierte Primärelektronenreichweite wird in einzelne Abschnitte der Länge dR_{ex} eingeteilt. Hier ist lediglich *ein* Primärelektron gezeichnet, die Reichweite wird jedoch für je ein primäres Photo- und ein primäres Auger-Elektron berechnet und alle möglichen Konstellationen kombiniert. Das Gaußsche Dichteprofil der Sekundärelektronenverteilung ist nicht dargestellt.

für die Siliziumschicht des Eintrittsfensters.

Nun wird die Ladung berechnet, die von Primär- und Sekundärelektronen im aktiven Volumen deponiert wird. Diese Rechnung wird getrennt für Absorption im Al und Si und jeweils für ein primäres Photo- und Auger-Elektron durchgeführt.

Als grobe Näherung kann man annehmen, daß Primärelektronen in der Nähe der Grenzfläche im Mittel die Hälfte der Ladung im aktiven Volumen deponieren und die andere Hälfte verloren geht [Sch98, Gleichung A6]. Wird – wie bei Photodioden im Strommodus – über viele Ereignisse gemittelt, ist diese Näherung sicherlich gerechtfertigt. Betreibt man den Detektor jedoch – wie bei SDDs und Si(Li)s – im Einzelzählmodus, so muß man zur Berechnung der Pulshöhenverteilung die genauen Ladungsverluste jedes denkbaren Ladungsverlusts berechnen, denn in der Pulshöhenverteilung ergibt es einen Unterschied, ob ein Primärelektron jeweils einen großen oder kleinen Teil seiner Ladung im aktiven Volumen deponiert.

Im folgenden wird deshalb der Ladungsverlust für individuelle Ereignisse berechnet und mit der Wahrscheinlichkeit für das Auftreten dieses Prozesses gewichtet. Die einzigen Näherungen ergeben sich durch die Diskretisierungen der Röntgenabsorptionsorte, Ausbreitungsrichtungen und Ladungswolkenmittelpunkte.

Zunächst wird für diskrete Winkel ϕ und θ die auf die z -Achse projizierte Länge der Elektronenreichweiten berechnet (siehe Abbildung 4.16 zur Definition von ϕ . Der Winkel θ liegt senkrecht dazu). Es wird angenommen, daß sich die Primärelektronen geradlinig ausbreiten. Dies ist gerechtfertigt, da bei der Berechnung die extrapolierten Elektronenreichweiten verwendet werden. Dadurch wird jedoch der Fall vernachlässigt, daß das primäre Elektron in die Metallisierungsschicht driftet und daraufhin wieder in das aktive Volumen des Detektors zurückkehrt. Dieser Vorgang ließe sich ausschließlich mit einer Monte-Carlo-Rechnung simulieren.

4.6 Berechnung der Energiedeposition im Detektor

In ähnlicher Weise wie oben für z_i werden die Emissionswinkel der Auger-Elektronen $\phi = 0, \dots, \pi$, $\theta = 0, \dots, \pi/2$ in diskrete Intervalle unterteilt, wobei s_p die Anzahl der Intervalle angibt.

$$\phi_i = \frac{i + 1/2}{s_p} \pi$$

$$\theta_j = \frac{j + 1/2}{s_p} \frac{\pi}{2}$$

mit $i, j = 0, 1, \dots, s_p - 1$. Je größer man s_p wählt, desto genauer wird die Rechnung. Aus Symmetriegründen braucht der Winkel ϕ lediglich bis π und der Winkel θ bis $\pi/2$ berechnet zu werden.

Photoelektronen werden nicht isotrop emittiert, sondern mit einer $\sin^2\phi \sin^2\theta$ Winkelabhängigkeit (siehe Gleichung 4.5), d. h. die Emission erfolgt vorzugsweise senkrecht zur Einfallrichtung. Dies wird in dieser Modellrechnung dadurch berücksichtigt, daß die diskreten Emissionswinkel in diesen Richtungen entsprechend häufiger auftreten.

Die Ladungssammeleffizienz hängt ausschließlich von der z -Koordinate ab und nicht von der Verteilung in x - oder y -Richtung. Deshalb werden die Elektronenreichweiten auf die z -Achse projiziert (siehe Abbildung 4.16). Diese projizierte Länge $r_z^{i,j}$ ist dann

$$r_z^{i,j} = r_{\text{pri}}(E) \cos(\phi_i) \cos(\theta_j). \quad (4.44)$$

mit der Primärelektronenreichweite $r_{\text{pri}} = R_{\text{ex}}$ (Gleichung 4.29), die von der Elektronenenergie E abhängt. Es werden also s_p^2 Reichweiten für die unterschiedlichen Emissionswinkel berechnet.

Diese Strecke wird in s_c diskrete Abschnitte unterteilt und um ihren eigentlichen Ursprung, also den Ort der primären Photonenabsorption z_n , verschoben:

$$c_k = \frac{k + 1/2}{s_c} r_z^{i,j} + z_n,$$

wobei $i, j = 0, 1, \dots, s_p - 1$ und $k = 0, 1, \dots, s_c - 1$. Der Mittelpunkt c_k jedes dieser Abschnitte mit der Länge dR_{ex} ist das Zentrum der einzelnen Sekundärelektronenwolken (siehe Abbildung 4.17). Man kann nun die vom Primärelektron auf der Länge r_{pri} deponierte Energie E gleichmäßig auf diese s_c Abschnitte aufteilen, also $f_c = E/s_c$. Für $s_c = 30$ und Elektronenenergien unterhalb 130 eV ist diese einfache Berechnung zweckmäßig und genau genug, da die Sekundärelektronenreichweite hier ohnehin deutlich größer als r_{pri} ist. Bei höheren Energien muß jedoch berücksichtigt werden, daß Elektronen nicht gleichförmig ionisieren, sondern um so stärker, je kleiner ihre Energie ist (Abbildung 4.13). Die auf der Länge dR_{ex} deponierte Energie wird deshalb mit einem iterativen Verfahren berechnet:

Die (Rest-)Energie des primären Elektrons ist f_r . Bei der ersten Iteration ($i = 0$) hat das Elektron noch seine Anfangsenergie.

$$f_r^0 = E \quad (4.45)$$

Die Energie f_c^i , die bei der i -ten Iteration entlang der Länge dR_{ex} deponiert wird, ist mit Gleichung 4.30 und $E = f_r^i$

$$f_c^i = \frac{df_r^i}{dR_{\text{ex}}} dR_{\text{ex}} = \frac{f_r^i dR_{\text{ex}}}{R_{\text{ex}}(f_r^i) (a_1 + 2a_2 \ln(f_r^i/eV))}. \quad (4.46)$$

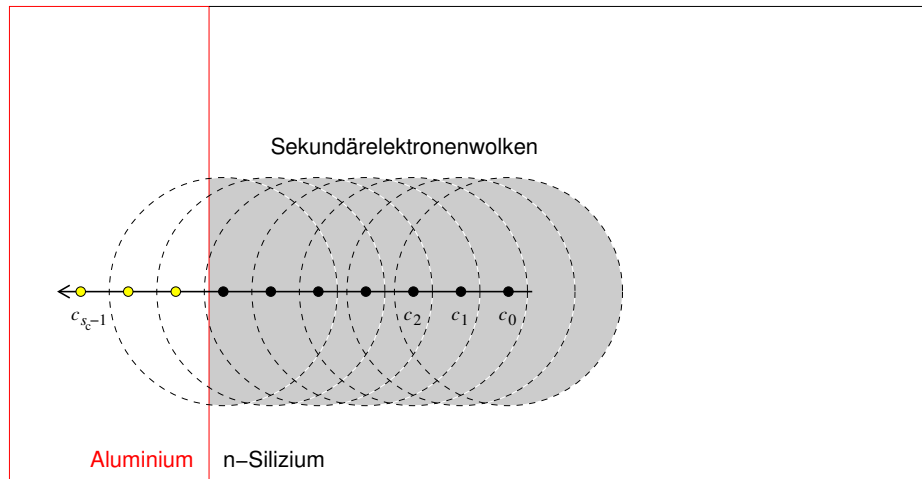


Abbildung 4.17: Von den Mittelpunkten c_i der Abschnitte mit $c_i > 0$ geht jeweils eine Sekundärelektronen-Ladungswolke mit der Reichweite r_{sek} (gestrichelte Linie) aus, d. h. so lange sich der Mittelpunkt der Ladungswolke im Silizium befindet (schwarze Punkte). Im Aluminium entstehen zwar auch Sekundärelektronen, diese rekombinieren jedoch deutlich schneller und werden nicht nachgewiesen. Der Anteil nachgewiesener Sekundärelektronen ist grau unterlegt.

$R_{\text{ex}}(f_r^i)$ wird aus Gleichung 4.29 bestimmt, und da die Strecke in s_c gleichmäßig große Abschnitte aufgeteilt wird, ist

$$dR_{\text{ex}} = \frac{R_{\text{ex}}}{s_c}.$$

Die Restenergie des Elektrons bei der nächsten Iteration $i + 1$ ist dann die die Differenz zwischen der Energie der Iteration f_r^i und dem Energieverlust f_c^i .

$$f_r^{i+1} = f_r^i - f_c^i \quad (4.47)$$

Daraufhin wird wiederum der Energieverlust nach Gleichung 4.46 berechnet, die nächste Anfangsenergie nach Gleichung 4.47 bestimmt, usw. Diese Iterationen erfolgen s_c mal. Bei diesem iterativen Verfahren wird jedoch nur dann die Anfangsenergie E vollständig auf alle Anteile f_r^i aufgeteilt, wenn eine extrem hohe Zahl an Iterationen durchgeführt wird. Da bei der hier gewählten Anzahl von 30 Iterationen stets ein geringer Teil der Anfangsenergie übrig bleibt, wird ein entsprechender Bruchteil der verbleibenden Energie gleichmäßig zu allen bisher bereits berechneten Energieanteilen addiert.

$$f_c^i := f_c^i + \frac{1}{s_c} \left(f_r^0 - \sum_j f_c^j \right) \quad (4.48)$$

$\sum_j f_c^j$ ist die etwas zu geringe, mit dem iterativen Verfahren berechnete Energie und $f_r^0 = E$ die Anfangsenergie.

Die Energie f_c , die pro Schritt zur Erzeugung von Sekundärelektronen aufgewendet wird, ist für einige Anfangsenergien in Abbildung 4.18 dargestellt. Der

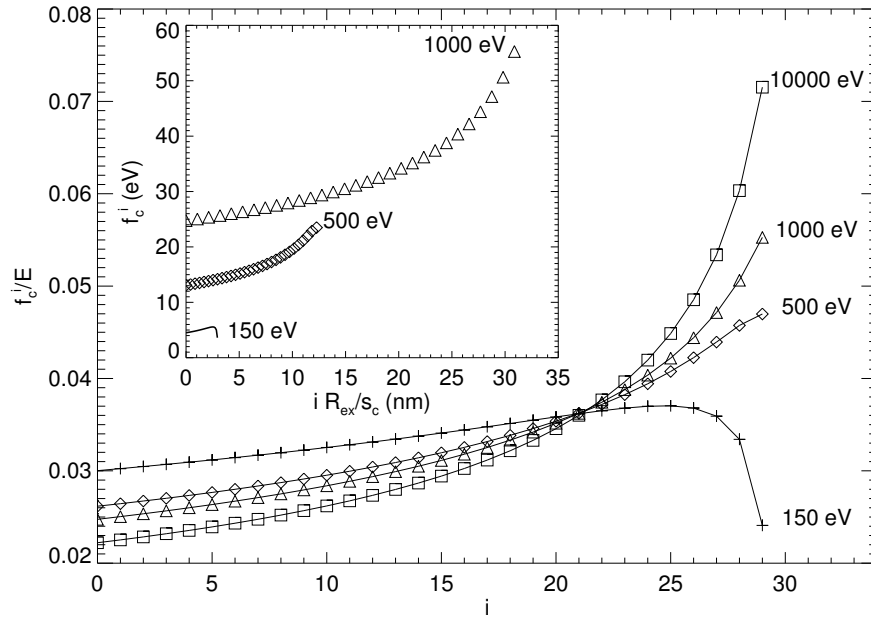


Abbildung 4.18: Relative (großes Bild) und absolute (kleines Bild) Energiedeposition von Elektronen, berechnet nach dem iterativen Verfahren der Gleichungen 4.45 bis 4.48.

große Plot zeigt die relative Energiedeposition f_c/E pro Iteration, der kleine Plot die absolute Energieabgabe in eV für die vom Elektron zurückgelegte Strecke in nm.

Sekundärelektronen, die in die Metallisierungsschicht driften, rekombinieren dort praktisch sofort und können nicht nachgewiesen werden. Bei der Berechnung der äquivalenten Gesamtenergie $\sum_i f_d^i$ der Anzahl der Sekundärelektronen, die sich am Ende des Thermalisierungsprozesses im Silizium befinden, wird deshalb zwischen zwei Fällen unterschieden (vgl. Abbildung 4.17):

1. Der Mittelpunkt der Sekundärelektronenwolke liegt in der Metallisierungsschicht, d. h. $c_i < 0$. Alle erzeugten Sekundärelektronen rekombinieren sehr schnell und haben eine vernachlässigbare Reichweite. Die nachweisbare Energie f_d^i ist deshalb null, die Energie f_c^i also verloren.

$$f_d^i = 0 \quad (4.49)$$

2. Der Mittelpunkt der Sekundärelektronenwolke befindet sich in der Nähe der Metallisierungsschicht, d. h. $c_i < r_{\text{sek}}$. Ein Teil der Ladung geht deshalb verloren. Das Integral einer dreidimensionalen Gaußverteilung mit dem Mittelpunkt c_i von $z = 0$ (der Al-Si-Grenzfläche) bis $z = \infty$ ist dann die nachgewiesene Ladungsmenge.

$$f_d^i = \frac{f_c^i}{2} \left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{c_i}{\sqrt{2} \sigma_{\text{sek}}} \right) \right) = \frac{f_c^i}{2} \left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{2\sqrt{2} c_i}{r_{\text{sek}}} \right) \right) \quad (4.50)$$

4 Berechnung der spektralen Antwort

In diesem Fall geht also die Ladungsmenge $f_c^i - f_d^i$ verloren.⁴ Die Gaußverteilung hat zwar keine scharfe Begrenzung, jedoch werden bei $c_i \geq r_{\text{sek}}$ praktisch alle generierten Ladungsträger im Silizium deponiert und vollständig nachgewiesen.

Die gesamte Energie, die von *einem* ionisierenden Photo- oder Auger-Elektron im aktiven Volumen deponiert wird, ist dann die Summe

$$E_m(\phi_i, \theta_j) = \sum_{k=0}^{s_c-1} f_d^k(\phi_i, \theta_j) \quad m = \text{Photo, Auger} \quad (4.51)$$

unter Berücksichtigung der drei oben genannten Fälle und der Gleichungen 4.49 und 4.50 (bei f_d wird der Index i durch k ersetzt). Diese Rechnung ab Gleichung 4.44 wird für das Photo- und für ein primäres Auger-Elektron durchgeführt. Wenn nicht ausschließlich der jeweils nach den Tabellen 4.3 bis 4.5 wahrscheinlichste Prozeß berücksichtigt werden soll, wird die Rechnung von Gleichung 4.44 bis 4.53 jeweils für die einzelnen Photoelektron–Auger-Elektron-Paare durchgeführt und später mit der Wahrscheinlichkeit $u_{g,h}$ für diesen Prozeß gewichtet.

Die verbleibende Energie

$$E_{\text{Rest}} = E_0 - E_{\text{Photo}} - E_{\text{Auger}}$$

wird am Ort der primären Absorption z_n deponiert, da die Reichweiten dieser niederenergetischen Elektronen sehr gering, d. h. deutlich kleiner als r_{sek} sind. Zur Berechnung der nachweisbaren Restenergie f_d^{Rest} muß die gleiche Fallunterscheidung wie oben (Gleichungen 4.49 und 4.50) durchgeführt werden, wobei $c_i = z_n$ und $f_c^i = f_c = E_{\text{Rest}}$ ist. Der Index i wird nicht benötigt, da c_i konstant ist.

Jede im aktiven Volumen deponierte Photoelektronenenergie $E_{\text{Photo}}(\phi_i, \theta_j)$ muß nun mit jeder im aktiven Volumen deponierten Auger-Elektronenenergie $E_{\text{Auger}}(\phi_k, \theta_l)$ sowie mit der Restenergie f_d^{Rest} addiert werden. Letztere hängt nicht vom Winkel, sondern ausschließlich von z_n ab.

$$E_{\text{total}}(i, j, k, l) = E_{\text{Photo}}(\phi_i, \theta_j) + E_{\text{Auger}}(\phi_k, \theta_l) + f_d^{\text{Rest}} \quad (4.52)$$

Nun kann unter Berücksichtigung der Wahrscheinlichkeit für die Absorption des Röntgenquants in dieser Schicht ein entsprechend hoher Eintrag in das Pulshöhenspektrum dN/dE vorgenommen werden.

$$\frac{dN}{dE}(E, g, h, i, j, k, l, m, n) = p_m^n u_{g,h} \frac{dE}{s_p^4 \sigma \sqrt{2\pi}} e^{-(E - E_{\text{total}}(i,j,k,l))^2 / (2\sigma^2)} \quad (4.53)$$

⁴Hat die Metallisierungsschicht des Detektors keinen Ohmschem, sondern einem Schottky-Kontakt (wie z. B. bei Si(Li)s), so kann durch die hohen elektrischen Feldstärken an der Grenzfläche ein Teil ($f_c^i - f_d^i$) der Ladung aus dem Si „reflektiert“, also dennoch nachgewiesen werden. Nur Ladungsträger, welche diese Potentialschwelle durchtunneln oder deren kinetische Energie hoch genug ist, gelangen in die Metallisierungsschicht. Um dieses Verhalten in der Rechnung zu berücksichtigen, kann man einen Reflexionskoeffizienten ζ einführen, welcher den Anteil reflektierter Elektronen angibt. Die Ladung $\zeta(f_c^i - f_d^i)$ wird dann ebenfalls nachgewiesen und $(1 - \zeta)(f_c^i - f_d^i)$ geht verloren.

E ist die Energie des Kanals mit der Breite dE , σ die Breite des Gesamttrauschens (Gleichung 2.19), p_m^n (mit $m = \text{M, Si}$) die Absorptionswahrscheinlichkeit in der Schicht n (Gleichungen 4.42 bzw. 4.43) und $u_{g,h}$ die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des jeweiligen Photo- bzw. Auger-Prozesses, also das Produkt aus der Wahrscheinlichkeit für die Absorption in der Schale g (Abbildungen 4.9 und 4.10 rechts, Gleichung 4.26, wobei der Index i durch g zu ersetzen ist) mit der Wahrscheinlichkeit für den jeweiligen Auger-Prozeß h (Tabellen 4.3 bis 4.5). Die Indizes i, j, k und l gehen jeweils von 0 bis $s_p - 1$, deshalb ist der Normierungsquotient gleich s_p^4 . Da

$$\sum_{g,h} u_{g,h} = 1$$

ist, benötigt man keinen weiteren Normierungsquotienten.

4.6.5 Diskussion

Da dieses Modell zwischen den Primärelektronenreichweiten der hochenergetischen Photo- und Auger-Elektronen sowie der Reichweiten der Sekundärelektronen unterscheidet, lassen sich die Spektralverteilungen der beiden möglichen Extremfälle (sehr niedrige oder sehr hohe Primärelektronenenergien) korrekt beschreiben. Ist $r_{\text{pri}} \ll r_{\text{sek}}$, wie z. B. für LMM-Auger-Elektronen oder Photoelektronen mit Energien $\lesssim 500$ eV, so geht bei der Absorption in der Schicht unvollständiger Ladungssammlung stets ein Teil der Ladung verloren (siehe Abbildung 4.19 oben). Haben beide Si-Primärelektronen eine geringe Reichweite, so entsteht im Spektrum eine Schulter, die bei halber Photonenenergie beginnt, denn bei der Absorption im Bereich $0 < z < r_{\text{sek}}$ kann nicht weniger als die Hälfte der Ladung verloren gehen.

Ist jedoch r_{pri} nur um einen Faktor zwei bis drei kleiner als r_{sek} oder größer als r_{sek} , wie bei KLL- oder KLM-Auger-Elektronen und hochenergetischen Photoelektronen, so gibt es zudem einen Bereich, in dem sowohl vollständige als auch unvollständige Ladungssammlung möglich ist. Bewegt sich das Primärelektron in Richtung Metallisierung (Abbildung 4.19 unten), so kann Ladung verloren gehen. Bewegt es sich in die entgegengesetzte Richtung, so wird die gesamte erzeugte Ladung nachgewiesen. Falls bei beiden Primärelektronen keine Ladung verloren geht und der Absorptionsort $z > r_{\text{sek}}$ ist, so daß auch die restliche Ladung vollständig gesammelt wird, werden alle generierten Ladungsträger nachgewiesen. Es entsteht ein Ereignis bei voller Energie und nicht im Untergrund, obwohl das Photon in der ICC-Schicht absorbiert wurde.

Auch die Möglichkeit des *coincident escape*, also das gleichzeitige Auftreten von unvollständiger Ladungssammlung bei Photo- und Auger-Primärelektronen, wird in diesem Modell „automatisch“ berücksichtigt, es muß also – z. B. im Gegensatz zur analytischen Rechnung von LOWE [Low00] – keine spezielle Berechnung für diesen Fall durchgeführt werden.

Im folgenden werden Beispiele für berechnete Spektralverteilungen gezeigt, die sich für die Röntgenabsorption in der ICC-Schicht sowie bei der Absorption in der Aluminiumschicht ergeben. Es werden ausschließlich die mit dem Modell aus Abschnitt 4.6.4 berechneten Spektralbeiträge diskutiert.

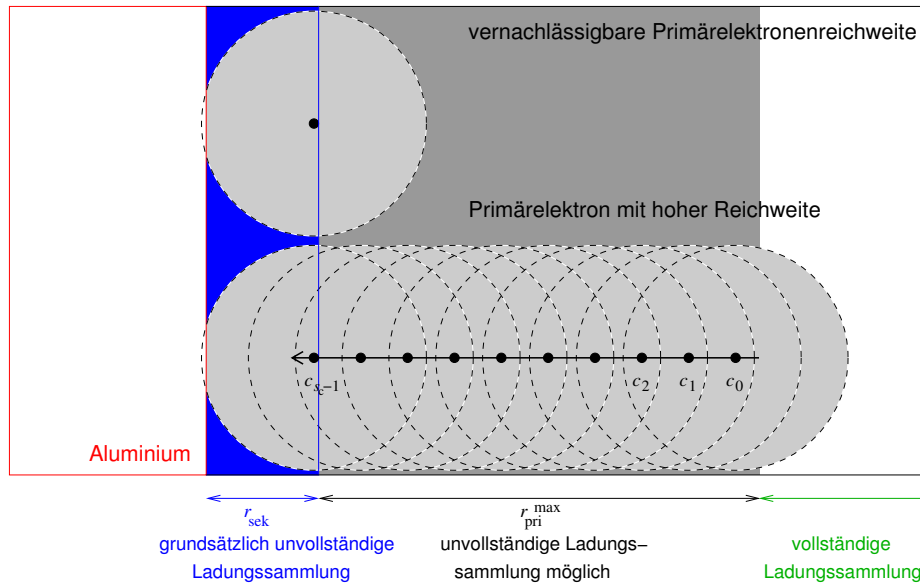


Abbildung 4.19: Die verschiedenen Schichten unvollständiger Ladungssammlung. Im Bereich $z < r_{\text{sek}}$ geht immer ein Teil der Ladung verloren (blau). Im grau unterlegten Bereich $r_{\text{sek}} \leq z < r_{\text{pri}}^{\text{max}} + r_{\text{sek}} = d_p$ kann Ladung verloren gehen, wenn sich das Primärelektron in Richtung Aluminiumschicht bewegt. In vielen Fällen wird aber die Ladung vollständig gesammelt. Ab $z \geq d_p$ geht keine Ladung mehr verloren. Oben ist der Fall eines minimalen Ladungsverlustes für ein niederenergetisches Primärelektron dargestellt, unten der für ein hochenergetisches.

Absorption im Silizium

Die einzelnen Spektralbeiträge für die Absorption eines primären Photons in unterschiedlichen Tiefen ($z_n = 1 \text{ nm} \dots 240 \text{ nm}$) sind in Abbildung 4.20 gezeigt. Berechnet wird also die Ladungssammlung dieser **Si-Elektronen** in der ICC-Schicht mit der Dicke d_p (Gleichung 4.34). Als Sekundärelektronenreichweite wurde $r_{\text{sek}} = 200 \text{ nm}$ gewählt, als Energie des Photons $E_0 = 1487 \text{ eV}$ und als elektronisches Rauschen $n_{\text{ENC}} = 7$. Die einzelnen Absorptionstiefen sind durch unterschiedliche Farben gekennzeichnet, das resultierende Summenspektrum durch die dickere schwarze Linie. Der besseren Übersicht halber wurde die Berechnung für $z_s = 15$ Intervalle und lediglich je *eine* Photo- und Auger-Elektronenenergie durchgeführt ($E_{\text{Photo}} = 1387 \text{ eV}$, $E_{\text{Auger}} = 83 \text{ eV}$). Weiterhin wurde hier ignoriert, daß sich die Absorptionswahrscheinlichkeit p_p mit der Tiefe verringert. Die späteren Berechnungen der Gesamtspektren werden für mehr Intervalle, die genauen Absorptionswahrscheinlichkeiten (Gleichungen 4.42 und 4.43) und alle auftretenden Photo- und Auger-Elektronenenergien (Tabellen 4.3 bis 4.5) durchgeführt.

Das auffälligste Merkmal im Gesamtspektrum ist die Schulterstruktur. Der Grund dafür wurde bereits oben angegeben: Die maximale Primärelektronenreichweite ist mit 50 nm deutlich kleiner als r_{sek} (vgl. Abbildung 4.19 oben).

Bei der Absorption direkt unterhalb der Al-Si-Grenzfläche ($z_n = 1 \text{ nm}$, dünne schwarze Linie) kann höchstens die Hälfte der Gesamtladung verloren gehen, deshalb entsteht hier ein Peak bei $E = 740 \text{ eV}$, welcher den Beginn der Schulter

4.6 Berechnung der Energiedeposition im Detektor

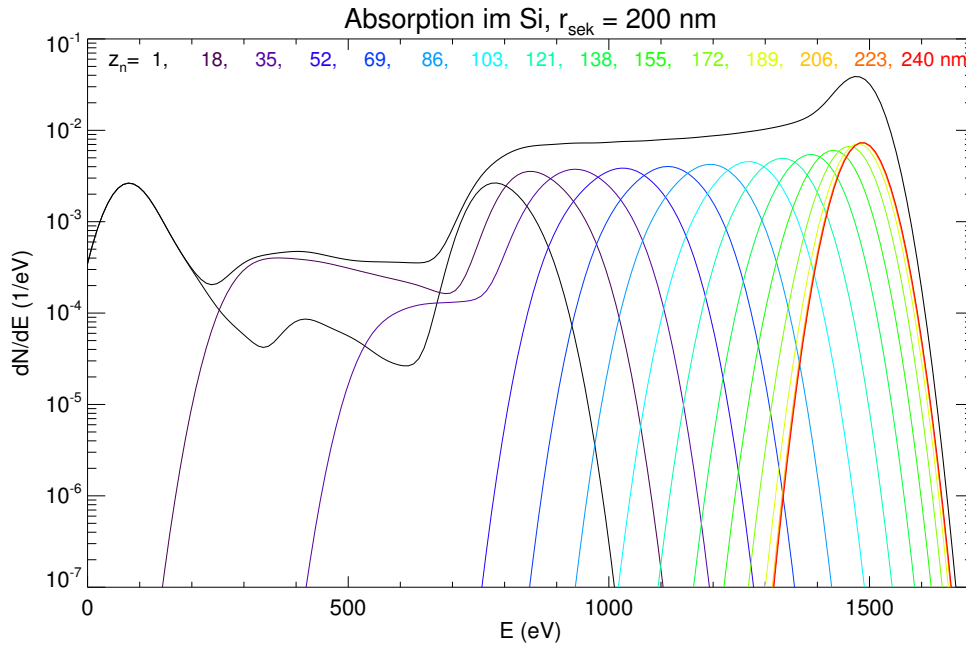


Abbildung 4.20: Spektrum für die Absorption eines Photons mit $E_0 = 1487 \text{ eV}$ in der ICC-Schicht. $r_{\text{sek}} = 200 \text{ nm}$, $n_{\text{ENC}} = 7$. Die Absorptionen in den einzelnen Tiefen sind durch unterschiedliche Farben gekennzeichnet, das resultierende Gesamtschalterspektrum durch die dicke schwarze Linie.

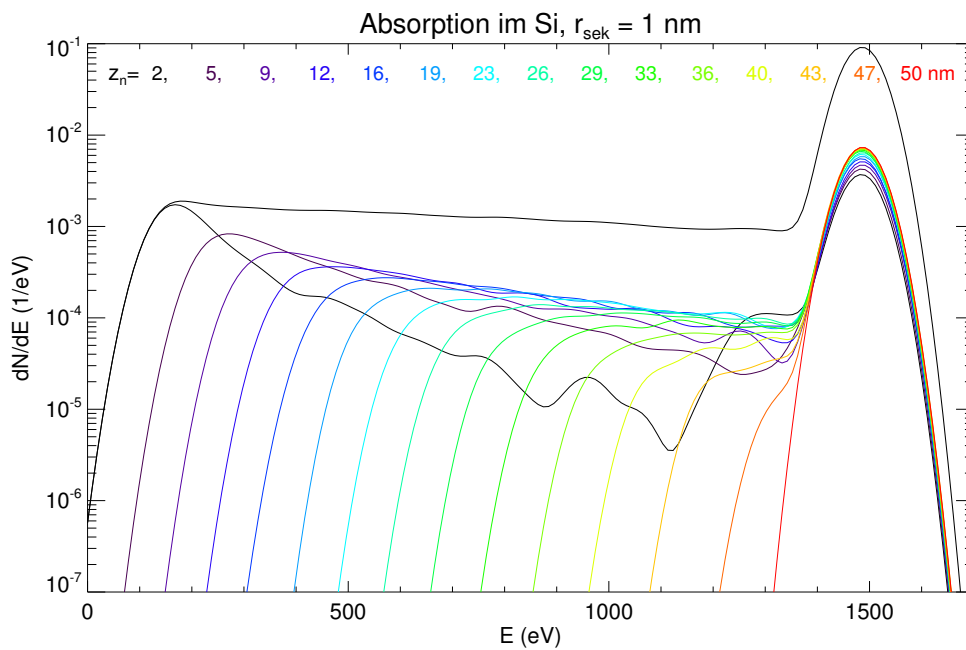


Abbildung 4.21: Spektrum für die Absorption eines Photons mit $E_0 = 1487 \text{ eV}$ in der ICC-Schicht. $r_{\text{sek}} = 1 \text{ nm}$, $n_{\text{ENC}} = 7$.

markiert. Bewegt sich das primäre Photoelektron in das Aluminium, so kann es im aktiven Detektorvolumen nur sehr wenige Elektronen generieren, und in der Metallisierung breiten sich wegen der kurzen Elektronenlebensdauer keine thermalisierten Elektronen aus. Die nachgewiesene Ladungsmenge ist deshalb in erster Linie durch die Gesamtenergie der primären Si-K-, L- und M-Auger-Elektronen bestimmt, welche sehr kurze Reichweiten haben. Ihre Gesamtenergie ist etwa $E_0 - E_{\text{Photo}} = 100 \text{ eV}$. Wegen dem hohen r_{sek} wird davon wiederum meist die Hälfte nachgewiesen – daher der Peak bei ca. 50 eV. Führt man die Rechnung mit mehr Iterationen durch, so entstehen im Shelf keine Peaks, sondern er verläuft flach und steigt zu niedrigen Energien hin leicht an, da hohe Ladungsverluste etwas wahrscheinlicher sind als geringe (siehe z. B. gestrichelte Linien in Abbildung 6.3). Wird das Photon in einer größeren Tiefe absorbiert, so kann höchstens ein sehr kleiner Teil der Ladung verloren gehen, und es entsteht ein ansteigender Übergang zur Hauptlinie (Tail, grüne und gelbe Linien).

Zum Vergleich ist in Abbildung 4.21 das Ergebnis der Modellrechnung für den Fall dargestellt, daß die Sekundär- deutlich kleiner als die Primärelektronenreichweite ist. Hier wurde ein (unrealistisch kleiner) Wert von $r_{\text{sek}} = 1 \text{ nm}$ angenommen. Das Untergrundspektrum besitzt nun keine Schulterstruktur, sondern einen Shelf, der – wie auf Seite 26, Punkt a erklärt – bei $E_0 - E_{\text{pri}}^{\text{max}} = 100 \text{ eV}$ (Halbwertshöhe) beginnt. Bewegen sich die primären Elektronen jedoch nicht in Richtung Al, sondern in die entgegengesetzte Richtung, so wird ihre Ladung vollständig nachgewiesen und ein Ereignis bei voller Energie (Hauptlinie) entsteht. Für $E_0 = 1487 \text{ eV}$ sind derartige Spektren zwar nicht zu beobachten, bei sehr hohen Röntgenenergien ist jedoch $r_{\text{pri}} \gg r_{\text{sek}}$, und die hier dargestellte Untergrundverteilung entsteht.

Der Vergleich der in Abbildung 4.19 oben/unten sowie den Abbildungen 4.20 und 4.21 dargestellten Extremfälle $r_{\text{pri}} \ll r_{\text{sek}}$ und $r_{\text{pri}} \gg r_{\text{sek}}$ verdeutlicht, warum zwischen dem Gebiet mit *grundsätzlich* unvollständiger Ladungssammlung ($z < r_{\text{sek}}$) und lediglich *möglicher* unvollständiger Ladungssammlung ($r_{\text{sek}} \leq z < r_{\text{sek}} + r_{\text{pri}}^{\text{max}}$) unterschieden werden muß. Im ersten Fall besteht die Untergrundverteilung aus einem schwachen Shelf und einer deutlichen Schulter-/Tail-Struktur. Im zweiten Fall entstehen meist gar keine Verluste (Hauptlinie), und die möglichen Ladungsverluste sind sehr gleichförmig verteilt (Shelf).

Während bisherige analytische Modellrechnungen nicht explizit zwischen diesen beiden Schichten unterscheiden und die Fälle $r_{\text{pri}} \ll r_{\text{sek}}$ und $r_{\text{pri}} \gg r_{\text{sek}}$ getrennt berechnen (oder nur einen von beiden), kann mit der hier vorgestellten Methode die Pulshöhenverteilung für jede beliebige Reichweite, also auch $r_{\text{pri}} \approx r_{\text{sek}}$, berechnet werden (siehe Abschnitt 4.6.6)

Absorption im Aluminium

Ein Spektrum, das von Elektronen aus dem Aluminium erzeugt wird (Al-Elektronen), ist in Abbildung 4.22 für $E_0 = 1.49 \text{ keV}$, $r_{\text{sek}} = 200 \text{ nm}$ und eine Al-Schicht mit einer Dicke $\geq 50 \text{ nm}$ gezeigt. Auch hier ist die Reichweite des hochenergetischsten 1.37 keV-Primärelektrons mit 44 nm (Gleichung 4.29) deutlich kleiner als die Sekundärelektronenreichweite. In diesem Fall entsteht eine umgekehrte Schulterstruktur, denn bei einer Röntgenabsorption im Al kann ein energiereiches Elektron

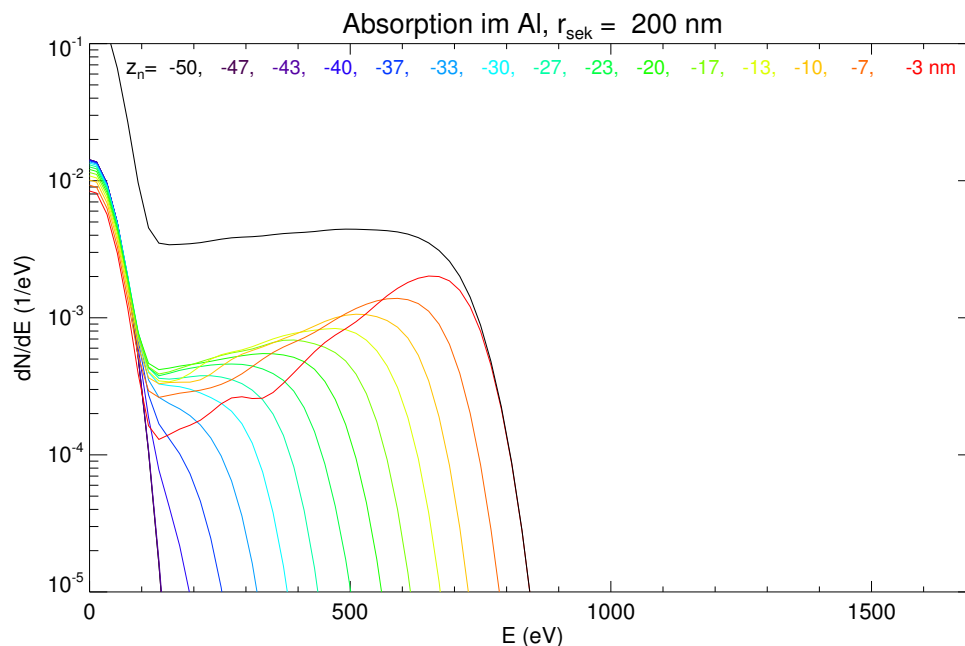


Abbildung 4.22: Spektrum bei Absorption eines Photons mit $E_0 = 1487$ eV in einer dicken Al-Totschicht (≥ 50 nm) und $r_{\text{sek}} = 200$ nm.

in das Silizium gelangen, dort eine große Sekundärelektronenwolke ausbilden, bei der wiederum die etwa Hälfte der Ladungsträger zurück in das Aluminium driften, dort rekombiniert und nicht nachgewiesen wird. Legen die Primärelektronen einen weiteren Weg durch das Aluminium zurück, so verliert es Energie, und die Gesamtladung der Sekundärelektronenwolke, die sich erst im Silizium ausbildet, ist deutlich kleiner.

Die Linie bei 0 eV enthält alle Ereignisse, bei denen keine Ladung nachgewiesen wird, das Photon jedoch innerhalb des Bereichs $-r_{\text{pri}}^{\text{max}} < z \leq d_p$ absorbiert wurde, d. h. zu einem Ereignis mit nichtverschwindender Ladung führen kann. Sie tritt in realen Spektren nicht auf, da diese Ereignisse den ADC/MCA nicht auslösen. Dennoch ist bei den aufgenommenen Spektren oberhalb der Diskriminatorschwelle ein Ausläufer der Nulllinie erkennbar, der sowohl von Ereignissen mit sehr geringer Ladungssammlung als auch vom elektronischen Rauschen stammt.

Die hier berechnete Spektralform unterscheidet sich deutlich von der für Al-Elektronen bisher angenommenen Flat-Shelf-Struktur, da hier nicht nur die Ausbreitung der Primär-, sondern auch die der Sekundärelektronen betrachtet wird.

Zum Vergleich ist in [Abbildung 4.23](#) oben ein Spektrum für $r_{\text{sek}} = 1$ nm gezeigt, d. h. für eine um zwei Größenordnungen verringerte Sekundärelektronenreichweite. Sie kann also gegenüber der Primärelektronenreichweite vernachlässigt werden. Hier bildet sich eine Flat-Shelf-Struktur aus, welche bis zur Energie des Photoelektrons (1.37 keV) reicht. Das primäre Auger-Elektron hat eine derart geringe Reichweite, daß es praktisch keine Ladung im Silizium deponiert. Bei Röntgenenergien weit oberhalb der Al-K-Kante haben jedoch sowohl Photo- als auch Auger-

4 Berechnung der spektralen Antwort

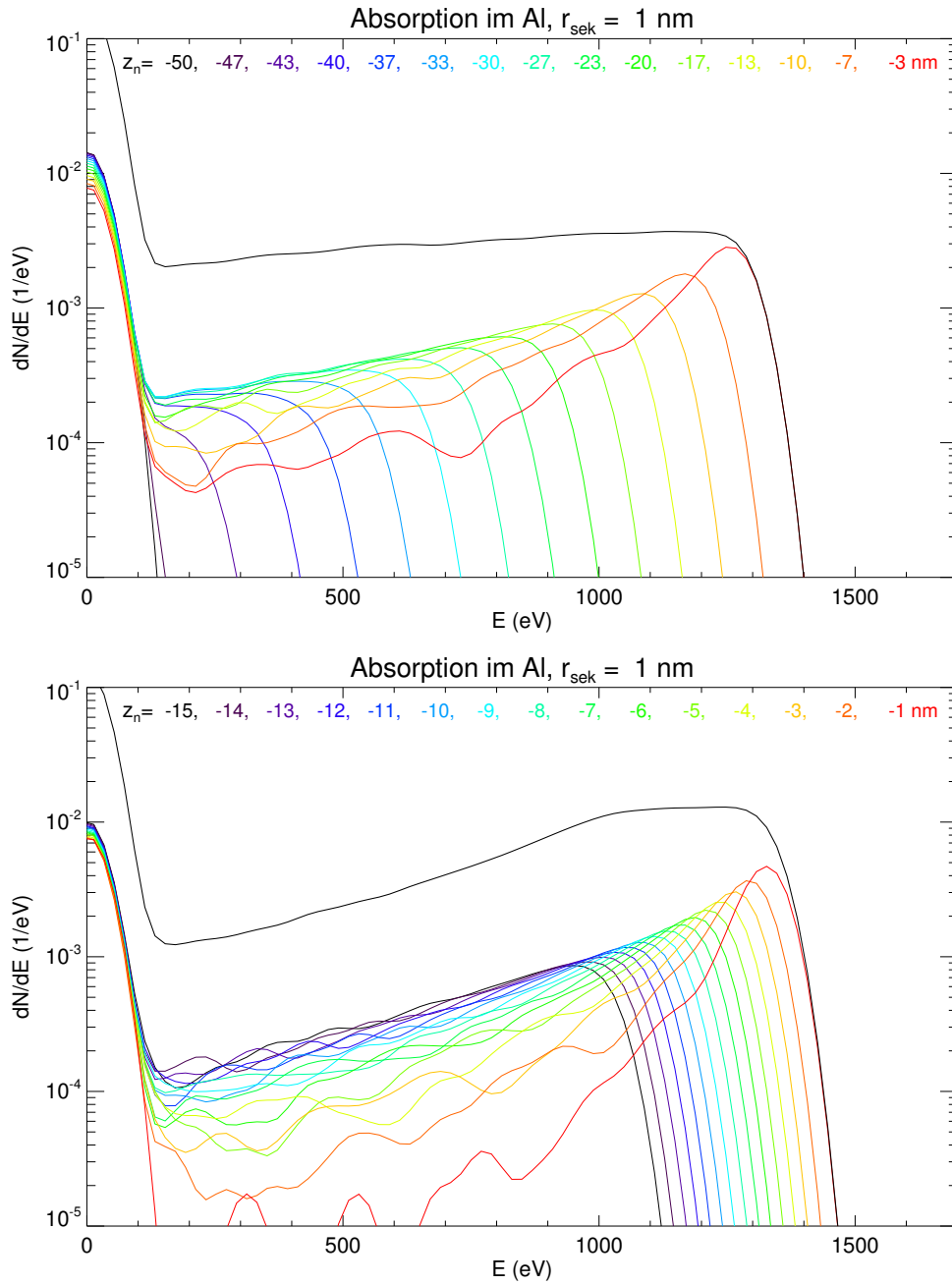


Abbildung 4.23: Spektren bei Absorption eines Photons mit $E_0 = 1487 \text{ eV}$ in der Al-Totschicht. $r_{\text{sek}} = 1 \text{ nm}$, $n_{\text{ENC}} = 7$. Oben: (beliebig) dicke Al-Schicht. Unten: 15 nm Al-Schicht. Hier entsteht eine trapezförmige Spektralverteilung, da die Al-Schicht so dünn ist, daß die Al-Elektronen entweder gar keine oder fast ihre gesamte Ladung im aktiven Volumen deponieren.

Elektronen hohe Reichweiten, und das hochenergetische Ende des Shelves ist durch die Summe dieser beiden Primärelektronen gegeben.

Falls die Al-Schicht mit $d_M = 15$ nm extrem dünn ist (Abbildung 4.23 unten), so fehlen diejenigen Primärelektronen, welche nur eine kleine Ladung im Si deponieren. Dadurch entsteht eine trapezförmige Spektralverteilung, welche auch bereits von LOWE analytisch berechnet wurde [Low00, Abbildung 6]. Auch die Monte-Carlo-Simulation von CAMPBELL et al. [Cam01] ergibt solche trapezförmigen Spektralverteilungen. Si(Li)-Detektoren können derart dünne Metallisierungsschichten besitzen, SDDs hingegen haben (zumindest bisher) dickere Metallisierungen ($d_M > 30$ nm).

Die Form des Untergrunds hängt also nicht nur von der Dicke der Metallisierungsschicht, sondern vor allem von der Reichweite der sekundären Elektronen ab. Sie wird in Kapitel 6 aus dem Vergleich modellierter und gemessener monochromatischer Röntgenspektren bestimmt.

4.6.6 Berechnete Spektren

Das in den oberen Abschnitten erklärte Modell wird nun – einschließlich der tiefenabhängigen Absorptionswahrscheinlichkeiten und verschiedenen Photoionisationswahrscheinlichkeiten der Unterschalen – für einzelne Röntgenenergien angewandt. Die Anzahl der Iterationen z_s ist 50 für die Absorption im Al und 100 für die Si-Schicht unvollständiger Ladungssammlung.

Für diese Berechnung wird eine Kanalbreite dE von 20 eV angesetzt, ein elektronisches Rauschen n_{ENC} von 8 und eine Sekundärelektronenreichweite r_{sek} von 200 nm. Für jede Energie werden zunächst die Wahrscheinlichkeiten für die Absorption in den einzelnen Unterschalen g berechnet (Abbildung 4.9). Diese werden dann mit den Wahrscheinlichkeiten h für die einzelnen Auger-Prozesse multipliziert (Tabellen 4.3 bis 4.5). Für jeden dieser Prozesse kann nun mit Gleichung 4.53 die Untergrundspektralverteilung berechnet werden. Die Höhe und Breite der Hauptlinie ist durch Gleichung 4.36 gegeben, die Fluoreszenz- und Escape-Linien durch die Gleichungen 4.38 und 4.39 (falls die Energie dafür hoch genug ist). Das Ergebnis ist ein Gesamtspektrum, bei dem die Summe aller Einträge gleich der totalen Quanteneffizienz ist (einschließlich der Ereignisse unterhalb der Diskriminatorschwelle).

$$\sum_E \frac{dN}{dE}(E) = \varepsilon_{total} \quad (4.54)$$

Da hier auch die zusätzlichen Ereignisse von Al-Elektronen berücksichtigt werden, ist dieses ε_{total} nicht identisch mit der totalen Quanteneffizienz aus Gleichung 4.10.

Für die K_α -Fluoreszenzenergien von N, Al und Mn, deren Spektren unterschiedliche Charakteristika aufweisen, sind berechnete Spektren in Abbildung 4.24 gezeigt. Bei den einzelnen Energien sind jeweils andere Strukturen auffällig:

Bei der Stickstofffluoreszenzlinie (392 eV) ist der gesamte Untergrund sehr intensiv und schulterförmig, d. h. durch Gleichung 4.50 dominiert, denn die Reichweite der Sekundärelektronen ist mit 200 nm deutlich größer als die der Primärelektronen (die Energie des hochenergetischsten Photoelektrons ist 293 eV, seine Reichweite also 6.5 nm, Gleichung 4.29). Dieser Fall wird in Abbildung 4.19 oben illustriert.

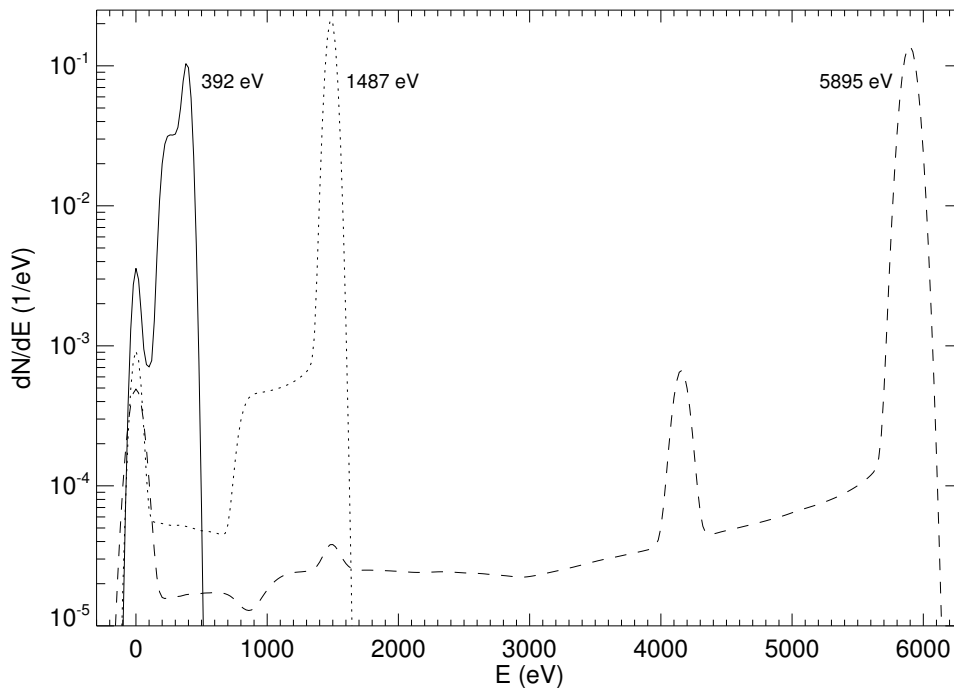


Abbildung 4.24: Berechnete Spektralverteilungen mit der Kanalbreite $dE = 20$ eV, dem elektronischen Rauschen $n_{\text{ENC}} = 7$ und der Sekundärelektronenreichweite $r_{\text{sek}} = 200$ nm. Der Untergrund ist bei der Energie der Stickstofffluoreszenzlinie (392 eV) am höchsten, die Hauptlinie deshalb am kleinsten. Bei der Energie der Aluminiumfluoreszenzlinie (1487 eV) hat der Untergrund noch eine Schultercharakteristik, ist aber bereits kleiner. Der Untergrund der Mn-Fluoreszenzlinie (5898 eV) ist wiederum kleiner und hat einen ausgeprägten Tail statt einer Schulter, da $r_{\text{pri}} \gg r_{\text{sek}}$ ist. Im Vergleich zu 1487 eV ist auch die Hauptlinie kleiner, da das Fano-Rauschen hier größer ist und dadurch der Peak breiter wird.

Die Linie bei 0 eV entsteht durch Ereignisse, deren Gesamtladung vollständig im Al deponiert wird und kein Ladungsträger nachgewiesen wird (siehe voriger Abschnitt).

Auch bei der Aluminiumfluoreszenzlinie (1487 eV) hat der Untergrund noch eine ausgeprägte Schultercharakteristik, seine Intensität ist aber deutlich kleiner. Zwar beträgt die maximale Primärelektronenreichweiten nun 50 nm und das Eintrittsfenster ist deshalb dicker (Gleichung 4.34), allerdings ist auch die Absorptionswahrscheinlichkeit im Eintrittsfenster deutlich kleiner (Gleichungen 4.14 und 4.16), denn die Absorptionslänge λ ist um zwei Größenordnungen größer (Abbildung 4.2). Die Höhe der Schulter ist deshalb im Vergleich zum Spektrum mit $E_0 = 392$ eV um zwei Größenordnungen kleiner.

Der Untergrund der Mn-Fluoreszenzlinie (5898 eV) ist wiederum deutlich schwächer und überdies anders strukturiert. Bei dieser Energie werden die Photonen zu über 92% in der K-Schale absorbiert. Die Energie der K-Photoelektronen ist 4056 eV (Gleichung 4.23), ihre Reichweite 260 nm. Die maximale L-Photoelektronenenergie ist 5796 eV (Gleichung 4.25), deren maximale Reichweite deshalb so

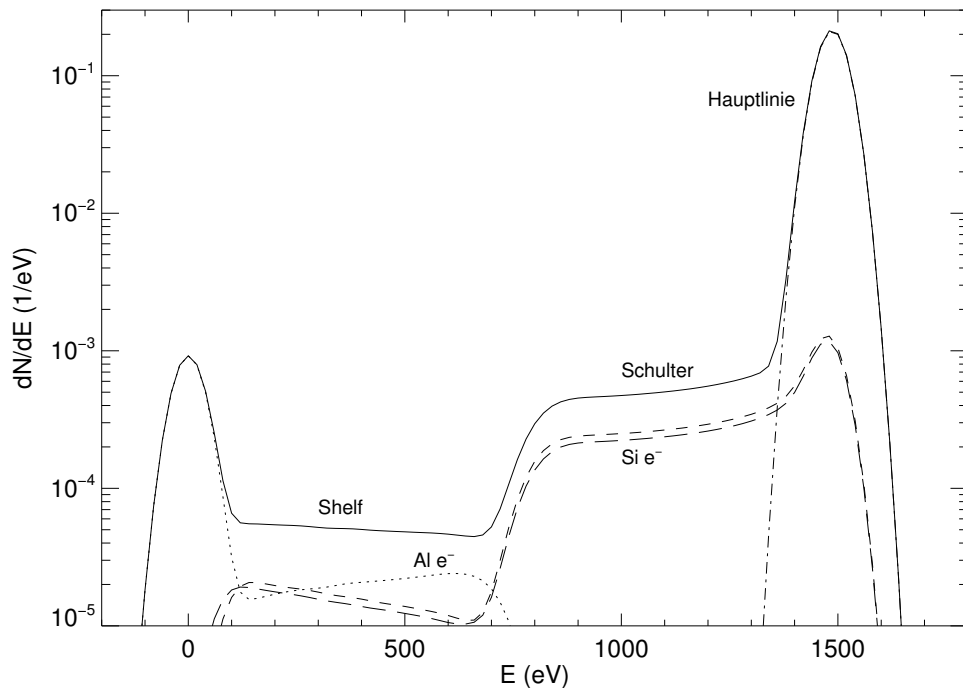


Abbildung 4.25: Einzelne Spektralanteile eines Spektrums mit der Hauptenergie von 1487 eV (Aluminium) und deren Summe (durchgezogene Linie). Ereignisse, welche in der Schicht hervorgerufen werden, in der unvollständige Ladungssammlung auftreten kann, sind durch die gestrichelten Linien gekennzeichnet (jeweils für die Absorption in der L_1 - oder $L_{2,3}$ -Schale). Da die dort generierte Ladung auch vollständig gesammelt werden kann, tragen diese Ereignisse auch zur Hauptlinie bei. Die Energieverteilung von Elektronen aus dem Aluminium ist durch die punktierte Linie gezeigt. Bei dieser Energie ist die Wahrscheinlichkeit für eine Wechselwirkung in der Al-Schicht sehr gering.

gar 460 nm. Die Absorption in der L-Schale ist jedoch unwahrscheinlich ($< 7\%$). Dennoch sind die Primär- größer als die Sekundärelektronenreichweiten. Der Untergrund hat deshalb keine ausgeprägte Schultercharakteristik, denn der größte mögliche Ladungsverlust liegt nicht mehr bei der Hälfte der Elektronenenergien. Stattdessen tritt ein ausgeprägter Tail auf, der durch lediglich kleine Ladungsverluste verursacht wird (Abbildung 4.19 unten). Im Vergleich zu 1487 eV ist die Hauptlinie kleiner, da das Fano-Rauschen hier größer ist und dadurch der Peak breiter wird. Zudem tritt der Escape-Peak und der schwache Al-Fluoreszenz-Peak auf.

Abbildung 4.25 zeigt die einzelnen Anteile des Untergrunds für die Al-Linie (1487 eV). Bei dieser Energie wechselwirken die Photonen mit ungefähr gleicher Wahrscheinlichkeit mit Elektronen der Si- L_1 - oder - $L_{2,3}$ -Unterschale (kurze und lange gestrichelte Linien). Die Absorption im Aluminium (punktiertere Linie) ist relativ unwahrscheinlich und führt in den meisten Fällen zu vollständigem Ladungsverlust (Nulllinie). Der Shelf wird also sowohl von Elektronen aus dem Aluminium verursacht, als auch von entkommenden Elektronen aus dem Silizium.

4.7 Analytische Fit-Funktion

Der konventionelle Ansatz zur Auswertung von Röntgenspektren besteht darin, die Struktur der spektralen Pulshöhenverteilung (siehe z. B. Abbildung 2.10) mit einer analytischen Funktion $P(E)$ zu beschreiben.

Der Vorteil dieser Methode ist, daß für analytische Funktionen sehr schnelle und leistungsfähige Fit-Routinen existieren und sich mit einer hinreichend hohen Anzahl freier Parameter praktisch jede Spektralverteilung mit hoher Genauigkeit beschreiben läßt.

Die Nachteile sind, daß die Ursache für die Form der Spektralverteilung unbekannt bleibt und die Antwortfunktionen für andere als die gemessenen Röntgenenergien bzw. modifizierte Detektorkonfigurationen nicht vorhergesagt werden können. Deshalb werden analytische Fit-Funktionen hier ausschließlich für eine grobe Analyse der gemessenen monochromatischen Röntgenspektren verwendet (Kapitel 5).

Mit diesen Fit-Funktionen können jedoch nicht nur die gemessenen, sondern auch die berechneten Spektren in eine analytisch beschreibbare Form gebracht werden. Diese Vorgehensweise ist z. B. dann erforderlich, wenn die Fit-Routine eine analytische Gleichung für die spektrale Antwort des Detektors benötigt.

Der Ausgangspunkt für solch eine Funktion ist stets eine Ergänzung des gaußförmig verteilten Haupt-Peaks [Phi76, Esp77, Yac86]. Die Ergänzungen (*features*) werden benötigt, um die Untergrundverteilungen und -linien wiederzugeben. Die einzelnen Untergrundbeiträge unterscheiden sich jedoch nicht zwangsläufig durch ihre physikalischen Ursprünge, sondern alleine durch ihre Form.

Die Hauptlinie wird durch eine Gaußverteilung mit der Breite σ beschrieben (vgl. Gleichung 2.18).

$$G(E) = I_G \exp\left(-\frac{(E - E_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4.55)$$

E_0 ist die Energie der einfallenden Röntgenstrahlung, und E ist die Energie, die dem jeweiligen ADC-Kanal zugeordnet wird. Hier und in den folgenden Gleichungen 4.56 bis 4.61 geben I_j die maximale Höhen der jeweiligen Funktion ($j = G, S, D_1, D_2, F$ und Esc) an – eine Normierung auf die Fläche statt auf die Linienhöhe läßt sich durch den Faktor $dE/(\sigma\sqrt{2\pi})$ erreichen, wobei dE die Kanalbreite ist. Da sich jedoch in den folgenden Gleichungen die Kanal- und Linienbreiten nicht unterscheiden, wird dieser konstante Faktor weggelassen.

Der Shelf-Anteil des Untergrunds ist in erster Näherung⁵ konstant von 0 bis E_0 und fällt unterhalb der Gaußverteilung auf null ab. Deshalb wird eine Gaußsche Fehlerfunktion (eine „verschmierte“ Stufenfunktion) angesetzt, die bei E_0 auf halbe Höhe abfällt und bei höheren Energien null wird. Ihre „Stufenbreite“ ist durch die Breite der Gaußverteilung σ gegeben.

$$S(E) = I_S \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{E - E_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)\right) \quad (4.56)$$

⁵Wie in den vorigen Abschnitten dargelegt wurde, liegt das tatsächliche Maximum des Shelves bei der maximalen Primärelektronenenergie $E_{\text{pri}}^{\text{max}}$ und nicht bei E_0 . Eine detaillierte Berechnung von $E_{\text{pri}}^{\text{max}}$ ist jedoch innerhalb einer analytischen Fit-Funktion nicht zweckmäßig, und bei höheren Röntgenenergien ist die Näherung $E_{\text{pri}}^{\text{max}} \approx E_0$ zulässig.

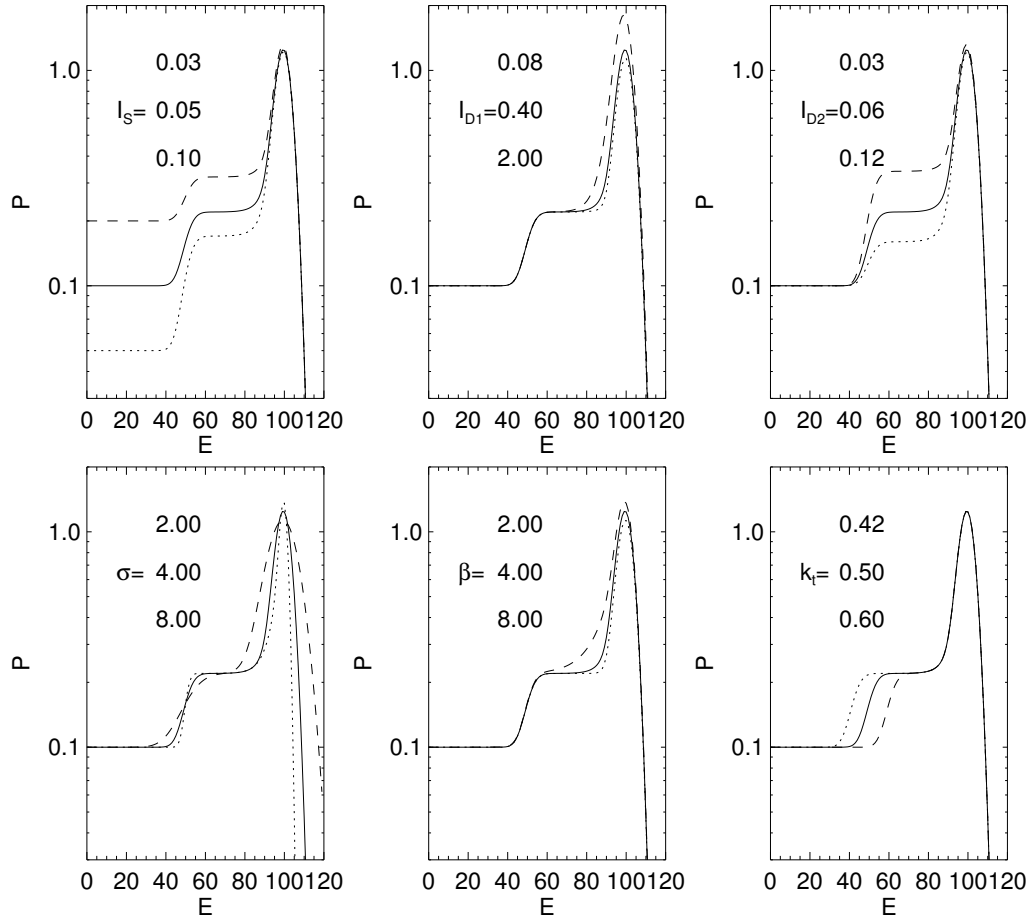


Abbildung 4.26: Darstellung der Antwortfunktion P (Energie in beliebigen Einheiten). Die Parameter I_S , I_{D1} , I_{D2} , σ , β , und k_t werden um jeweils einige Prozent ($+x\%$ = gestrichelt, $-x\%$ = punktiert) variiert. Die Variation der Parameter $E_0 = 100$ und $I_G = 1$ ist nicht gezeigt.

Mit dieser Shelf-Verteilung werden sowohl die Verluste primärer Elektronen vom Silizium in das Aluminium (vgl. Shelf in Abbildung 4.20 für $z_n = 1$ nm und 18 nm) als auch das Eindringen primärer, hochenergetischer Al-Elektronen in das Silizium wiedergegeben.

Die durch Diffusion der Sekundärelektronen generierte Schulter-/Tail-Verteilung wird durch die beiden Terme $D_1 + D_2$ wiedergegeben. Die Form des exponentiellen Ausläufers, d. h. des Tails, wird durch folgende Gleichung mit dem Parameter β bestimmt:

$$D_1(E) = I_{D1} \exp\left(\frac{E - E_0}{\beta}\right) \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{E - E_0}{\sqrt{2}\sigma} + \frac{\sigma}{\sqrt{2}\beta}\right)\right) \quad (4.57)$$

Die stufenähnliche Verteilung von $k_t E_0$ bis E_0 beschreibt die Schulter mit der Breite σ . Die Position der Schulter (Halbwertshöhe) ist durch $k_t E_0$ gegeben.

$$D_2(E) = I_{D2} \left(\operatorname{erf}\left(\frac{E - k_t E_0}{\sqrt{2}\sigma}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{E - E_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)\right) \quad (4.58)$$

Energiebereich/keV	< 1.56	1.56 ... 1.62	1.62 ... 1.84	> 1.84
Funktion	P	$P + M$	$P + M + F$	$P + \text{Esc} + F$

Tabelle 4.7: Fit-Funktionen.

Die Summe der Gleichungen 4.55 bis 4.58 ergibt dann folgende Funktion, auf der alle Fit-Funktionen aufbauen:

$$P(E) = G(E) + S(E) + D_1(E) + D_2(E) \quad (4.59)$$

In Abbildung 4.26 ist die Auswirkung der Variation der einzelnen Parameter gezeigt. Die Shelf-Intensität I_S ändert die gesamte Höhe des Untergrunds. Die Höhe des exponentiellen Tails wird durch I_{D_1} beschrieben, die Höhe der Schulter durch I_{D_2} . Die Breite σ ändert sowohl die Breite der Gaußkurve, als auch die der Stufenfunktion. Der Parameter β bestimmt die Ausprägung des niederenergetischen Ausläufers der Gaußverteilung und k_t die Position der Stufe als Vielfaches der Position E_0 der Hauptlinie.

Bei höheren Energien gibt es zusätzliche spektrale Anteile: Die Al-Fluoreszenzlinie tritt erst ab der Al-K-Kante auf und der Escape-Peak erst ab der Si-K-Kante.

$$F(E) = I_F \exp\left(-\frac{(E - E_F)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4.60)$$

$$\text{Esc}(E) = I_{\text{Esc}} \exp\left(-\frac{(E - (E_0 - E_B))^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4.61)$$

E_F ist die konstante Aluminium- K_α -Fluoreszenzenergie von 1487 eV und $E_B = 1740$ eV ist die Bindungsenergie der Si-K-Elektronen. Streng genommen sollten in diesen beiden Gleichungen entsprechend der niedrigeren Energie verringerte Breiten σ verwendet werden (Gleichung 2.22). Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Messungen im Energiebereich $E_0 < 1.9$ keV, ist der Fehler durch die Verwendung der gleichen Breite σ jedoch klein.

Die zusätzliche niederenergetische Schulter der Al-Elektronen (Abbildung 4.22) ist ausschließlich bei Strahlenergien oberhalb der Al-K-Kante bis unterhalb der Si-K-Kante von der Shelf-Verteilung zu trennen, da hier die Absorptionswahrscheinlichkeit im Al etwa gleich groß oder größer als in der ICC-Schicht ist. Die Form dieser Stufe wird durch eine Gaußsche Fehlerfunktion (siehe Gleichung 4.58) beschrieben.

$$M(E) = I_M \left(1 - \text{erf}\left(\frac{E - k_M E_0}{\sqrt{2}\sigma}\right)\right) \quad (4.62)$$

In Tabelle 4.7 sind die verwendeten Fit-Funktionen für die unterschiedlichen Energiebereiche gezeigt. Sie setzen sich stets aus der Grundfunktion (4.59) und den Zusatzanteilen (4.60) bis (4.62) zusammen. Bei der Auswertung von RFA-Spektren kann jedoch in der Regel auch bei Energien > 2 keV der Aluminiumfluoreszenzanteil F vernachlässigt werden, da die Al-Fluoreszenzlinie stets sehr schwach ist.

5 Messung der spektralen Antwort

Nachdem im vorigen Kapitel ein Modell zur Berechnung der spektralen Antwort von Siliziumdetektoren für Röntgenstrahlung entwickelt wurde, werden im folgenden die Messungen der spektralen Antwort vorgestellt. Dazu wird ein SDD mit monochromatischer Röntgenstrahlung im Energiebereich von 0.2 bis 2 keV charakterisiert. Das heißt, die spektrale Antwort des Detektors wird in Abhängigkeit von der Strahlungsenergie E_0 und vom Ort der Bestrahlung gemessen.

5.1 Aufbau

Synchrotronspeicherringe sind für Niederenergiecharakterisierungen von Röntgendetektoren besonders geeignet, da sie im Vergleich zu Röntgenröhren selbst bei der Verwendung von Monochromatoren noch sehr hohe Flüsse liefern. Die Messungen wurden am Radiometrielabor [Ulm98] der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt am Berliner Elektronensynchrotronspeicherring BESSY II durchgeführt. BESSY II dient als primäres Strahlungsnormal für elektromagnetische Strahlung im Energiebereich bis 10.5 keV. Die Unsicherheit in der Bestimmung des Photonenflusses ist $\geq 0.2\%$, wenn keine Blenden verwendet werden.

In Anhang C.3 ist die grundlegende Funktionsweise von Beschleunigerringen für Synchrotronstrahlung beschrieben. Undulatorstrahlung an Synchrotrons besitzt, verglichen mit Strahlung, die an Wiggler oder Ablenkmagneten erzeugt wird, bereits eine hohe Monochromasie (vgl. Abbildung C.1). Dennoch müssen zur Verringerung von Strahlung mit Wellenlängen höherer Ordnung (Harmonische) Monochromatoren verwendet werden.

5.1.1 Das Plangittermonochromatorstrahlrohr

Das Plangittermonochromatorstrahlrohr (PGM) [Pet82] am U180- [Kle98] bzw. U49-Undulator [Bah96] des BESSY II liefert Röntgenstrahlung im Niederenergiebereich, d. h. zwischen 20 und 1900 eV [Bec00]. Die erzielbaren Zählraten liegen zwischen $6 \cdot 10^9/s$ bei 1.7 keV und $6 \cdot 10^{11}/s$ bei 400 eV bei einem typischen Elektronenstrom im Speicherring von 200 mA [Sen98, Bec01]. Durch seine hohe spektrale Reinheit eignet sich die Undulatorstrahlung am PGM sehr gut für die Charakterisierung von Röntgendetektoren. Die Strahlungsleistung beträgt bis zu 1 mW.

Dieser hohe Fluß und die optimale Unterdrückung höherer Ordnungen wird durch den Einsatz eines Torroidspiegels vor dem Plangittermonochromator erreicht (Abbildung 5.1). Auf diese Weise ist die Fokussierung unabhängig vom Einfallswinkel auf dem Gitter. Die Einfallswinkel können deshalb so gewählt werden, daß ungewollte höhere Ordnungen optimal unterdrückt werden. Da zudem die einzelnen

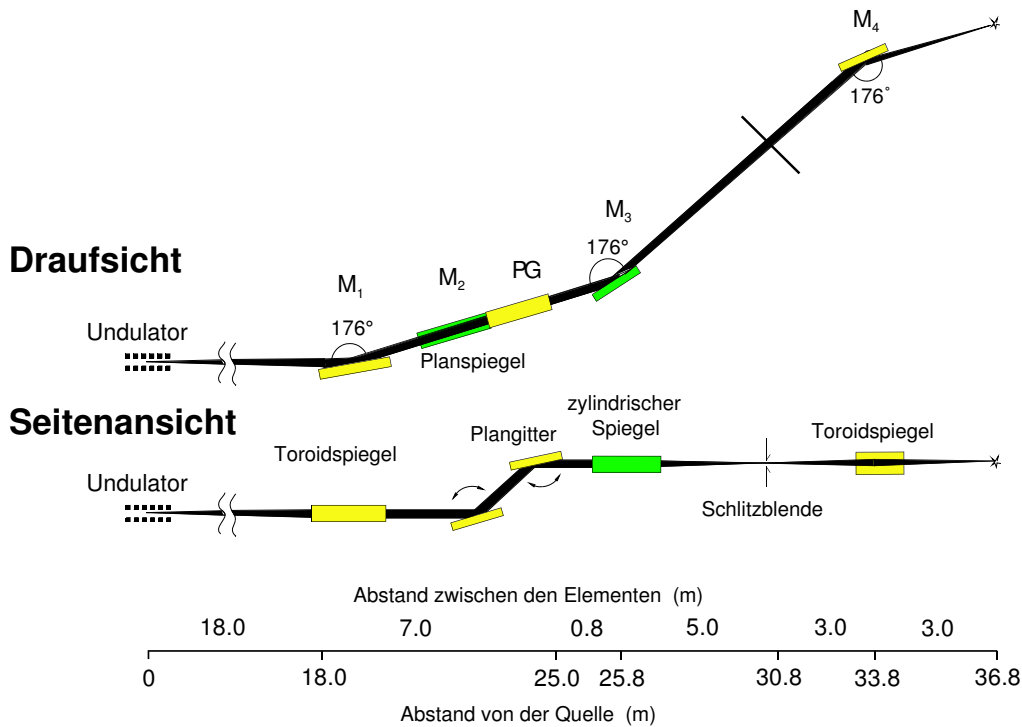


Abbildung 5.1: Das Plangittermonochromatorstrahlrohr.

Harmonischen räumlich unterschiedlich verteilt sind (in Abbildung 5.2 durch unterschiedliche Farben gekennzeichnet), können mit motorgesteuerten Schlitzblenden die Beiträge ungewollter Harmonischer weiter verringert werden.

Der Versuchsaufbau am PGM ist schematisch in Abbildung 5.3 gezeigt. Der SDD ist an einem Kühlfingers montiert. Dessen Ende befindet sich innerhalb der Vakuumkammer, welche über Manipulatoren gegenüber der Strahlachse in x - und y -Richtung verschoben werden kann. Um den SDD an einer festgelegten Position zu bestrahlen, wird die gesamte Vakuumkammer in die eine Richtung und die Lochblende gegenläufig in die andere Richtung bewegt. Auf diese Weise trifft stets der gleiche Strahlanschnitt auf den Detektor. Der Abstand zwischen Lochblende und Detektor beträgt 3 mm. Der Druck in der Vakuumkammer beträgt während den Messungen $9 \cdot 10^{-8}$ mbar, im Strahlrohr ist er etwas geringer. Die Absorption von Röntgenstrahlung durch Gase und die Anregung von sekundärer Fluoreszenzstrahlung kann deshalb vollständig vernachlässigt werden.

5.1.2 Filter

Um den gesamten Strahlungsfluß und die Intensität höherer Harmonischer zu verringern, werden unterschiedliche Filter eingesetzt, deren Absorptionskante jeweils knapp unterhalb der zu verringernden Energie liegt. Die Filter liegen im Strahlgang hinter dem Monochromator und den Schlitzblenden, aber vor den Lochblenden. Bei den Messungen werden Al-, Au- und Si-Filter verwendet.

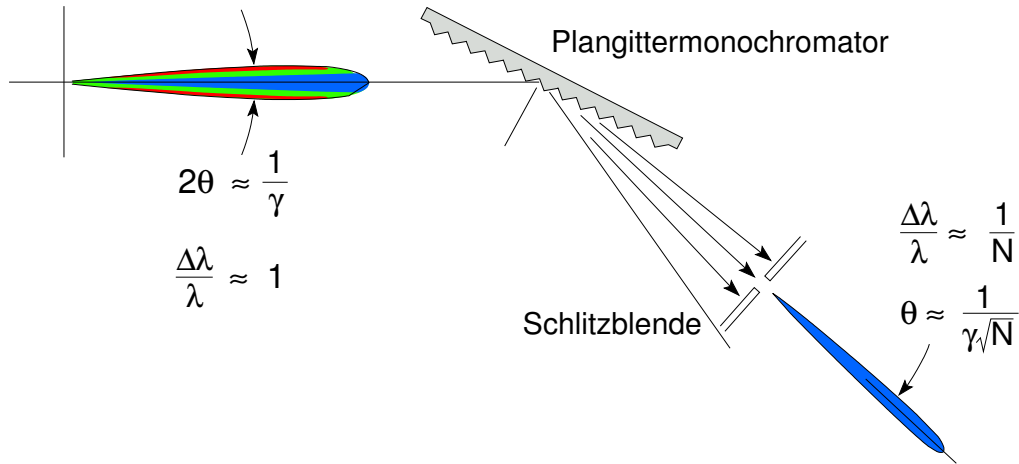


Abbildung 5.2: Undulatorstrahlung hat einen Öffnungswinkel von ungefähr γ^{-1} , wobei γ der Lorentz-Faktor ist (siehe Gleichung C.5). Am Plangittermonochromator werden die einzelnen Harmonischen der Undulatorstrahlung mit unterschiedlichen Winkeln reflektiert. Durch eine geeignete Positionierung der Schlitzeblenden hinter dem Plangitter kann dann die gewünschte Harmonische ausgewählt werden (nach [Att99]).

5.1.3 Lochblenden

Um den hohen Fluß auf Zählraten $\leq 2 \cdot 10^5/\text{s}$ zu reduzieren, werden für die Messungen bewegliche Zirkonium-Lochblenden verwendet. Dabei kommt meist eine Blende mit einem Durchmesser von $140 \mu\text{m}$ zum Einsatz. Bei den ortsabhängigen Mapping-Messungen beträgt der Blendendurchmesser $50 \mu\text{m}$.

5.2 Kalibrierung

Die Voraussetzung für eine exakte Deutung der Meßergebnisse ist eine genaue Kalibrierung des Spektroskopiesystems, das aus SDD, Verstärkern, Pulsformer, ADC und Mehrkanalanalysator besteht (Abschnitt 2.3). Zunächst wird mit einem Puls-generator die Linearität des ADC untersucht. Im Rahmen der Meßgenauigkeit sind keine Nichtlinearitäten nachzuweisen. Es besteht also ein linearer Zusammenhang zwischen der Kanalnummer und der nachgewiesenen Ladungsmenge, und es sind keine quadratischen Terme in den Kalibrierungsgleichungen notwendig.

Die Kalibrierung wird mit Strahlenergien E_{beam} zwischen 1.12 und 1.84 keV durchgeführt. Höhere Energien kann der Undulator nicht liefern, und niedrigere Energien werden nicht in die Kalibrierung einbezogen, um durch unvollständige Ladungssammlung verschobene Linienpositionen erkennen zu können. In den Spektren wird die gemessene Linienposition E_{fit} durch einen Fit an die Normalverteilung (2.18) plus Polynom erster Ordnung (zur Berücksichtigung des asymmetrischen Untergrunds) berechnet.

$$P(E) = I_G \exp\left(-\frac{(E - E_0)^2}{2\sigma^2}\right) + a_0 + a_1 E \quad (5.1)$$

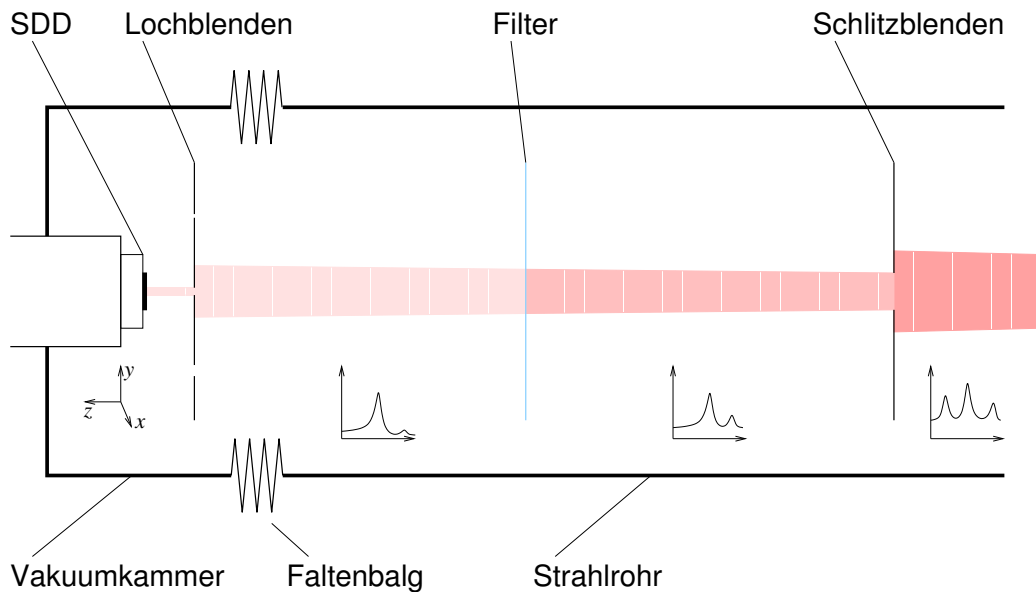


Abbildung 5.3: Skizze des experimentellen Aufbaus. Die Schlitzblenden verringern die Strahlintensität und Anteile ungewollter Harmonischer. Der Filter unterdrückt höherenergetische Falschlichtanteile. Durch Lochblenden unterschiedlicher Größe wird wiederum der Fluß und Strahldurchmesser reduziert. Durch gegenläufiges Verfahren der Vakuummutter und Lochblenden wird die relative Position zwischen SDD und Strahl geändert. Der Undulator und die Plangitterspiegel sind nicht eingezeichnet.

Der Fit-Bereich liegt stets zwischen $0.87 \cdot E_{\text{beam}}$ und $1.15 \cdot E_{\text{beam}}$, es wird also stets die gesamte Hauptlinie und der benachbarte Untergrund erfaßt. Abbildung 5.4 zeigt ein typisches Spektrum (Histogramm) mit Fit-Kurve (gestrichelte Linie). Der Fit gibt die gemessene Verteilung sehr genau wieder. Der Fit-Bereich von $\pm 15\%$ ist groß genug, um die Form des Untergrund ausreichend zu berücksichtigen und die dadurch verursachte geringfügige Verschiebung der Linienposition auszugleichen. Der Bereich ist jedoch nicht so groß, daß der Fit durch weitere benachbarte Linien, z. B. der in Abbildung 5.4 sichtbaren Al-Fluoreszenzlinie, verfälscht würde.

Die Kalibrierpunkte werden zum einen durch Mittelwerte zahlreicher Messungen bei 1.12 und 1.82 keV gebildet, zum anderen durch zwei Energie-Scans von 1.5 und 1.84 keV (im Abstand von 10 eV), wobei einmal ein Si- und einmal ein Au-Filter verwendet wird, um Streulicht andere Undulatorharmonische zu unterdrücken.

Die Kalibrierfunktion wird durch lineare Regression aller Meßpunkte berechnet, wobei die einzelnen Meßwerte mit ihrem reziproken statistischen Fehler gewichtet werden (statistische oder Poisson-Gewichtung mit $1/\sigma$).

Bei manchen SDDs wird eine anfängliche, geringe Verschiebung der Linienposition beobachtet ($< 0.3\%$). Um diesen Effekt zu verhindern, werden die Betriebsspannungen etwa eine Stunde vor Meßbeginn angelegt. Da die Messungen über mehrere Tage andauern, wird gelegentlich die Kalibrierung überprüft. Die Änderungen betragen jedoch weniger als 0.08%, weshalb stets dieselben Parameter verwendet werden können. Lediglich bei Änderungen an den Sperrspannungen wird neu kalibriert. Das Gesamtsystem Detektor, Spektroskopieverstärker, ADC und MCA

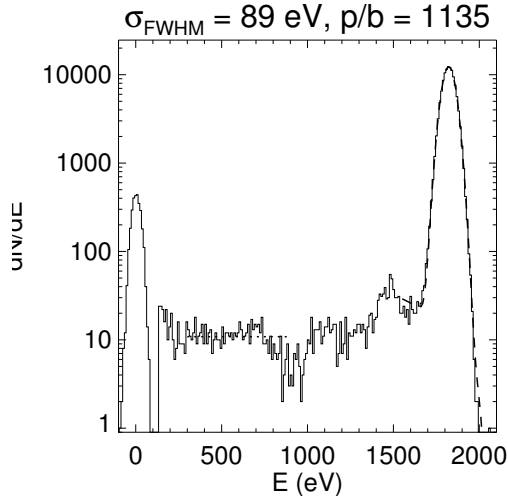


Abbildung 5.4: Spektrum bei $E_0 = 1.82 \text{ keV}$. Die gestrichelte Linie zeigt den Fit der Hauptlinie an, die punktierte den mittleren Untergrund. Bei 1.49 keV gibt es eine schwache Al-Fluoreszenz vom aluminiumbeschichteten Eintrittsfenster. Bei 0 eV liegt das Rauschspektrum.

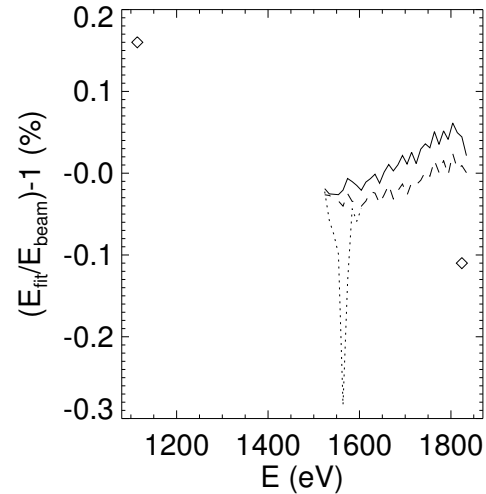


Abbildung 5.5: Genauigkeit der Kalibrierung $(E_{fit}/E_{beam}) - 1$ in Prozent. Die Kalibrierung wurde mit den Mittelwerten zahlreicher Meßwerte bei festen Energien von 1.12 und 1.82 keV (\diamond) sowie den je 36 Punkten zweier Energie-Scans (durchgezogene und gestrichelte Linie) durchgeführt.

verhält sich sehr stabil.

Abbildung 5.5 zeigt die relative Genauigkeit der Kalibrierung $(E_{fit}/E_{beam}) - 1$ in Prozent. Die beiden Punkte bei 1.12 und 1.82 keV sind durch \diamond dargestellt, die durchgezogene Linie zeigt den Energie-Scan mit Siliziumfilter, die gestrichelte den mit Goldfilter. Man sieht, daß die Abweichung vom Ideal (0%) stets geringer als 0.2% ist und damit im Genauigkeitsbereich des Monochromators liegt. Die Unsicherheiten in Bezug auf die Linienposition sind vermutlich auf die motorgesteuerte Justage der Plangitterspiegel und nicht auf das Detektorsystem zurückzuführen. Die punktierte Linie zeigt Messungen mit einem Al-Filter im Strahlengang. Diese Werte werden nicht in die Kalibrierung einbezogen. Dort tritt eine etwas höhere Abweichung auf, da die Zählrate knapp oberhalb der Al-K-Kante deutlich kleiner und somit der statistische Fehler dieser Messung größer ist.

5.3 Zählratenabhängigkeit der Linienposition und Energieauflösung

Linienposition und -breite können sich bei Zählraten $\gtrsim 10^4/\text{s}$ ändern. Obwohl sich bei einer veränderten Linienposition scheinbar die nachgewiesene Ladungsmenge ändert, ist diese Veränderung ausschließlich auf Effekte im integrierten Transistor sowie in der Verstärkerelektronik zurückzuführen (Abschnitt 3.4 und [Egg04]). Es muß also sorgsam zwischen diesen und anderen Prozessen unterschieden werden, welche tatsächlich eine verringerte Ladung erzeugen bzw. die Linienbreite beeinflussen.

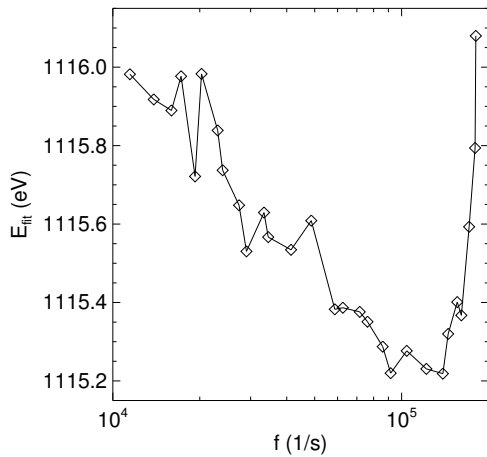


Abbildung 5.6: Variation der Linienposition bei nominal 1116 eV mit der Zählrate f . Gezeigt ist die gefittete Linienposition minus 1110 eV. Unterhalb von $f = 10^4$ ist die Linienposition konstant.

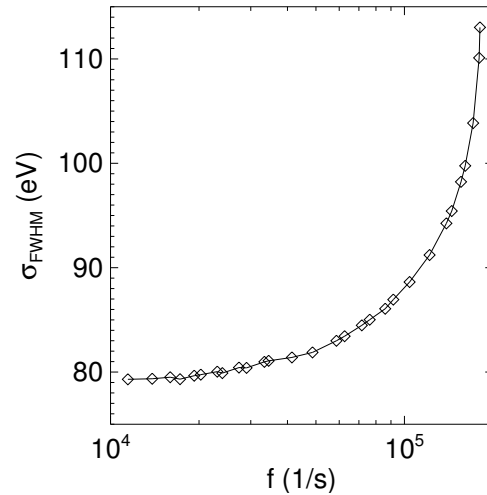


Abbildung 5.7: Energieauflösung σ_{FWHM} bei 1110 eV in Abhängigkeit von der Zählrate f . Unterhalb von 10^4 /s verringert sich die Energieauflösung nicht und bleibt bei knapp 80 eV.

In Abbildung 5.6 ist die Abhängigkeit der gemessenen Linienposition E_{fit} von der Zählrate f dargestellt. Die Strahlenergie E_{beam} beträgt bei dieser Messung 1116 eV. Die Variation der gemessenen Linienposition ist geringer als 0.1%. Bei anderen Strahlenergien wurden ebenfalls die Veränderung der gemessenen Linienposition mit der Zählrate untersucht. Auch dort blieben die Lageänderungen stets unterhalb 0.1%. Damit kann ausgeschlossen werden, daß beobachtete Linienverschiebungen zählratenbedingt sind.

Abbildung 5.7 zeigt die Veränderung der Energieauflösung mit höherer Zählrate für die gleiche Strahlenergie. Die Verbreiterung der Hauptlinie wird von dem zählratenabhängigen Entladestrom vom Gate zum Drain-Kontakt im Transistor (Gleichung 3.10) verursacht. Zählratenvariationen bei anderen Strahlenergien zeigen eine vergleichbare Verschlechterung der Energieauflösung mit höherer Zählrate.

5.4 Qualitative Beurteilung der Niederenergiespektren

Die Eignung des SDD für niederenergetische Röntgenstrahlung läßt sich anhand der Spektren in den Abbildungen 5.4 sowie 5.8 bis 5.11 beurteilen. Bei diesen Messungen wird weder der Randbereich noch die Mitte des Detektors bestrahlt. Es ist also ausschließlich der Einfluß des Eintrittsfensters zu beobachten. In den Abbildungen ist auch die Energieauflösung und das *peak to background ratio* p/b angegeben. Die punktierte Linie gibt den Energiebereich und die mittlere Höhe des Untergrunds an, der zur Bestimmung des p/b -Verhältnisses gewählt wurde. Das p/b -Verhältnis ist hier angegeben, um die Höhe des Untergrund grob vergleichen zu können (vgl. Abschnitt 2.1.10). Eine exakte Bestimmung der Untergrundintensität wird in Abschnitt 5.5 und Kapitel 6 durchgeführt.

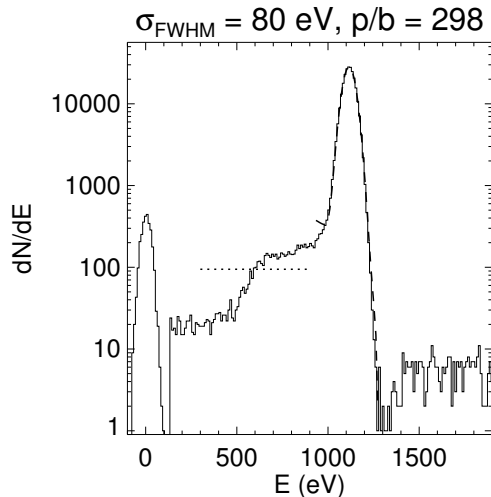


Abbildung 5.8: Messung bei $E_0 = 1.11$ keV. Die Schulter im Untergrund beginnt bei 0.55 keV.

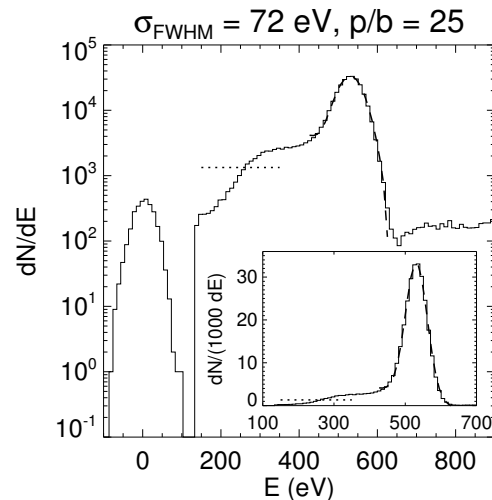


Abbildung 5.9: Messung bei $E_0 = 532$ eV. Der gesamte Untergrund ist deutlich erhöht.

Knapp unterhalb der Si-K-Absorptionskante (Abbildung 5.4) ist der Untergrund sehr gering, und die Hauptlinie kann deutlich vom Untergrund separiert werden. Störend wirkt sich allenfalls die schwache Aluminiumfluoreszenzlinie aus.

Bei 1.11 keV (Abbildung 5.8) tritt im Untergrund bereits eine deutliche Schulter auf, die bei halber Energie der Hauptlinie beginnt. Der Mittelwert des Untergrunds (punktierter Linie) ist jedoch etwa 300-mal geringer als die Hauptlinie.

Bei $E_0 = 532$ eV nimmt der Untergrund bereits um etwa einen Faktor 15 zu (Abbildung 5.9). Anhand der linearen Darstellung in Abbildung 5.9 wird deutlich, daß der Untergrund noch nicht so hoch ist, daß er schwächere, niederenergetischere Linien erheblich überdecken würde. Für die quantitative Auswertung von Spektren ist die Genauigkeit, mit der die Fläche unterhalb der Gaußverteilung bestimmt werden kann, noch ausreichend.

Ähnliches gilt für die Strahlenergie von 380 eV (Abbildung 5.10), also bei einer Energie nahe der Stickstofffluoreszenzlinie. Der mittlere Untergrund ist hier lediglich viermal kleiner als die Höhe der Hauptlinie. Hier können schwache niederenergetischere Linien im Untergrund unerkant bleiben, zumal der Untergrund nicht homogen ist, sondern einen breiten Anstieg aufweist.

Bei einer Strahlenergie, die mit 248 eV etwas unterhalb der Fluoreszenzlinie von Kohlenstoff liegt, kann die Hauptlinie praktisch nicht mehr vom Untergrund getrennt werden. Sie ist lediglich 10% höher als der Untergrund. Eine exakte Bestimmung der Fläche unterhalb der Linie ist nicht möglich, da mit herkömmlichen Fit-Routinen (Abschnitt 4.7) keine eindeutige Trennung zwischen Hauptlinie und Untergrund möglich ist.

Genaue Aussagen über die Ursachen der Erzeugung von Ereignissen mit partieller Ladungssammlung lassen sich am besten anhand der Spektren bei Energien unterhalb der Al-K- (1534 eV) bis oberhalb der Si-K-Absorptionskante (1854 eV) treffen, da sich an den Al- und Si-K-Kanten die Absorptionslängen – und somit

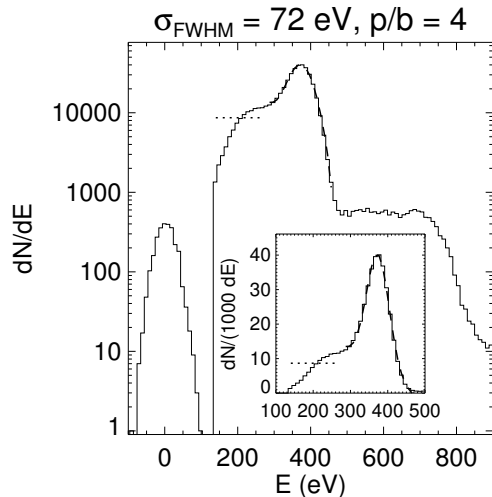


Abbildung 5.10: Messung bei $E_0 = 379$ eV. Wegen der sehr hohen Zählrate tritt der Pile-up-Effekt deutlich auf.

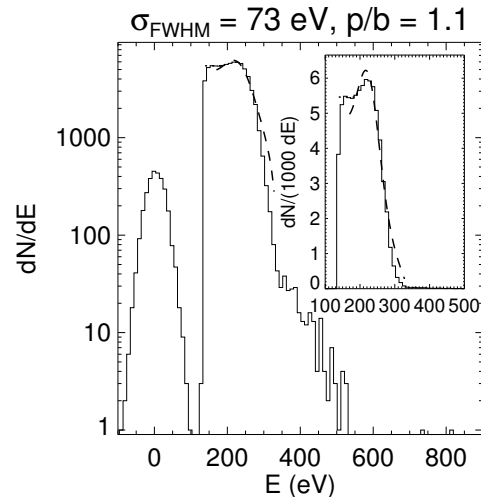


Abbildung 5.11: Messung bei $E_0 = 248$ eV. Die Hauptlinie ist nicht mehr sauber vom Untergrund zu trennen.

auch die Untergrundanteile – abrupt ändern. Die geglätteten Spektren einiger dieser Messungen sind in [Abbildung 5.12](#) dargestellt. Die Rausch-Peaks¹ befinden sich bei 0 eV. Die Anstiege unterhalb von 200 eV sind auf die unvollständige Ladungssammlung (vgl. [Abbildung 4.25](#)) und auf nicht-diskriminierte Ausläufer der Rausch-Peaks zurückzuführen. Die Meßzeit (*live-time*) der Spektren ist identisch. Die Intensität der niederenergetischeren Spektren ist höher, da der Fluß hinter dem Plangittermonochromator mit niedrigerer Energie steigt. Um ihre Untergrundintensität vergleichen zu können, sind die vier Spektren ober- und unterhalb der beiden Kanten in normierter² Darstellung in [Abbildung 5.13](#) gezeigt.

Zum Verständnis der wahrscheinlichsten Wechselwirkungsorte in der Metallisierung bzw. in der oberen Siliziumschicht ist in [Abbildung 5.14](#) die Wechselwirkungswahrscheinlichkeitsdichte dp/dz nach Gleichung [4.18](#) für die Energien direkt ober- und unterhalb der Kanten gezeigt. Die rechte Seite der Abbildung zeigt die relevante Rechnung für eine Aluminiumdicke von 100 nm, links ist zum Vergleich die Rechnung für SDDs mit einer Aluminiumdicke von 30 nm dargestellt.

Die sprunghafte Änderung der Untergrundverteilung ist durch die Kantenstruktur der Absorptionslängen begründet (vgl. [Abbildungen 2.10](#) und [4.2](#)).

Knapp unterhalb der Al-K-Kante ist die Absorptionslänge mit $\approx 10^{-5}$ m für Silizium und Aluminium ungefähr gleich groß (violette Linien in den [Abbildungen 5.12](#) und [5.13](#)). Die Wahrscheinlichkeit ist also hoch, daß die Röntgenstrahlung im Bulk und nicht im Eintrittsfenster absorbiert wird, weshalb nur wenige Partial Events entstehen. Ereignisse direkt unterhalb der Grenzfläche lassen sich anhand ihrer

¹Die Rausch-Peaks bei 0 eV werden aufgezeichnet, indem der ADC mit einer festen Frequenz „blind“ auslöst, obwohl kein Signal oberhalb der Diskriminatorschwelle anliegt. Die Position des Rausch-Peaks kann zur Kalibrierung eingesetzt werden, und aus seiner Breite kann das elektronische Rauschen berechnet werden ([Abschnitt 6.1](#)).

²Bei der Normierung wird die Summe $\sum dN/dE$ der Ereignisse gleich eins gesetzt.

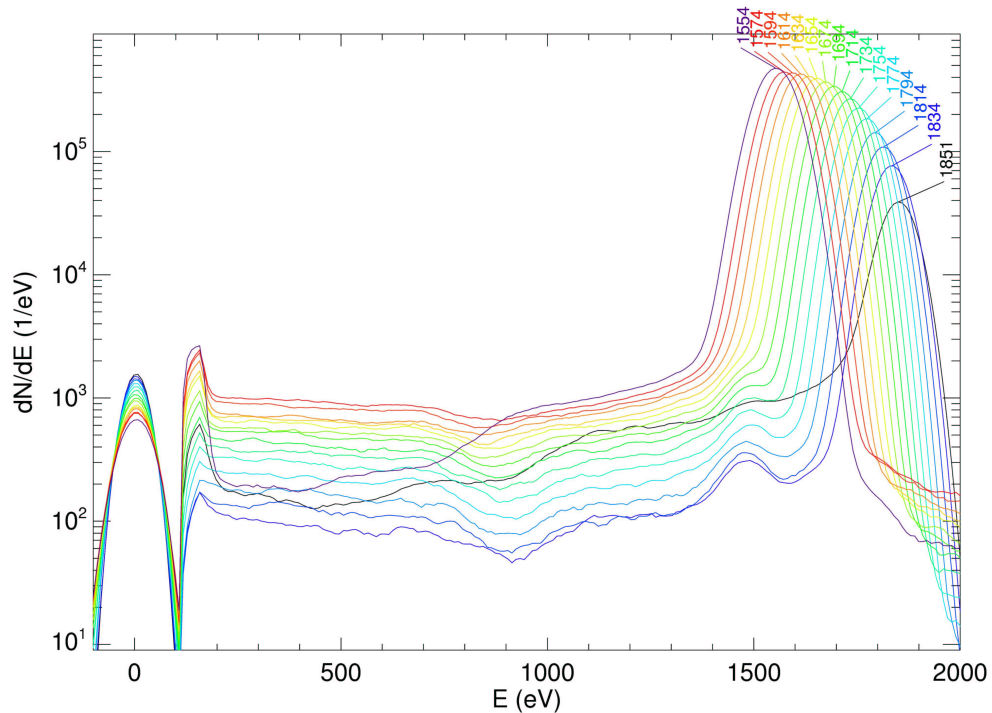


Abbildung 5.12: Geglättete Spektren des Energie-Scans von 1534 bis 1854 eV. Die Beschriftungen im Spektrum geben als Peak-Position die Ergebnisse der Gauß-Fits an, das 1854 eV-Spektrum erscheint deshalb wegen des hohen Untergrunds zu geringfügig niedrigeren Energien hin verschoben.

Schultercharakteristik identifizieren. Der Shelf-Anteil ist klein, da die Wahrscheinlichkeit für Absorption in Aluminium klein ist.

Unmittelbar oberhalb der Al-Kante ist die Absorptionslänge für Aluminium um mehr als eine Größenordnung verringert, während sie für Silizium immer noch sehr groß ist (rote Linien). Die Wahrscheinlichkeit für Absorption im Aluminium ist also sehr hoch. Dementsprechend ist der Shelf-Anteil deutlich erhöht. Photonen, welche die Al-Schicht durchdringen, werden allerdings meist tief im Si-Bulk absorbiert, weshalb die Schulteranteile nicht größer als unterhalb der Al-Kante sind. In diesem Extremfall ist eine durch Shelf-Elektronen verursachte, niederenergetische Schulter erkennbar. Dies weist darauf hin, daß die Spektralverteilung der Al-Elektronen durch das Modell mit *hoher* Sekundärelektronenreichweite zutreffend beschrieben wird (Abbildung 4.22) und nicht durch das mit kurzer (Abbildung 4.23), denn in diesem Fall wäre der gesamte Shelf (bis E_0) gleichmäßig erhöht.

Mit steigender Energie (gelbe und grüne Linien in Abbildung 5.12) nehmen sowohl die Al- als auch die Si-Absorptionslängen um den Faktor zwei zu. Der Untergrund wird mit steigender Energie geringer, da die Wahrscheinlichkeit für die Absorption im gesamten Eintrittsfenster sinkt. Ab etwa 1.74 keV läßt sich die Al-Fluoreszenzlinie deutlich von der Hauptlinie trennen (türkise Linien).

Direkt unterhalb der Si-K-Absorptionskante (blaue Linien) ist die Absorptions-

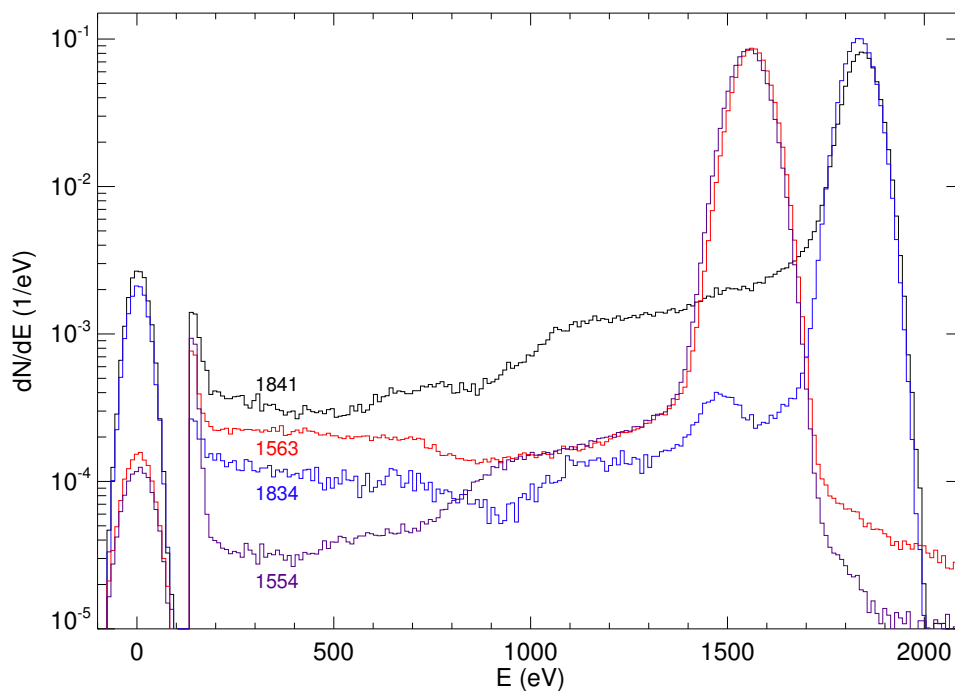


Abbildung 5.13: Normierte Spektren direkt unter- und oberhalb der Al- und Si-Absorptionskanten. Vergleicht man die Untergrundverteilungen, so lassen sich zahlreiche Aussagen über die Entstehung von Partial Events ableiten.

wahrscheinlichkeit tief im Silizium hoch, in den oberflächennahen Schichten dagegen gering. Der Untergrund ist deshalb minimal. Die nieder- und hochenergetischen Schultern sind kaum ausgeprägt.

Unmittelbar oberhalb der Si-Absorptionskante (schwarze Linien) wird der Untergrund sprunghaft höher, denn es werden relativ viele Photonen im Eintrittsfenster absorbiert. Die Schulter ist ebenso ausgeprägt wie unterhalb der Al-Kante, jedoch ist der gesamte Untergrund um etwa eine Größenordnung höher. Im Vergleich zum Spektrum unterhalb der Si-Kante ist hier auch der Shelf-Anteil erhöht, obwohl sich die Al-Absorptionslänge nur unwesentlich ändert. Das zeigt, daß der Shelf nicht vorwiegend von Elektronen aus dem Aluminium erzeugt wird, sondern auch ein bedeutender Anteil von Si-Elektronen.

5.5 Auswertung mit der analytischen Fit-Funktion

Im folgenden werden die Ergebnisse der Fits der Spektren mit der analytischen Funktion aus Abschnitt 4.7 vorgestellt. Abbildung 5.15 zeigt ein gemessenes Spektrum bei 1.84 keV (Histogramm) und den Fit (durchgezogene Linie). Die Shelf- und Schulter-Untergrundanteile sind durch die punktierten und gestrichelten Linien dargestellt. Der Anstieg unterhalb von 200 eV, der vor allem durch das elektronische Rauschen verursacht wird, wird durch eine Gaußverteilung mit dem Mittelpunkt

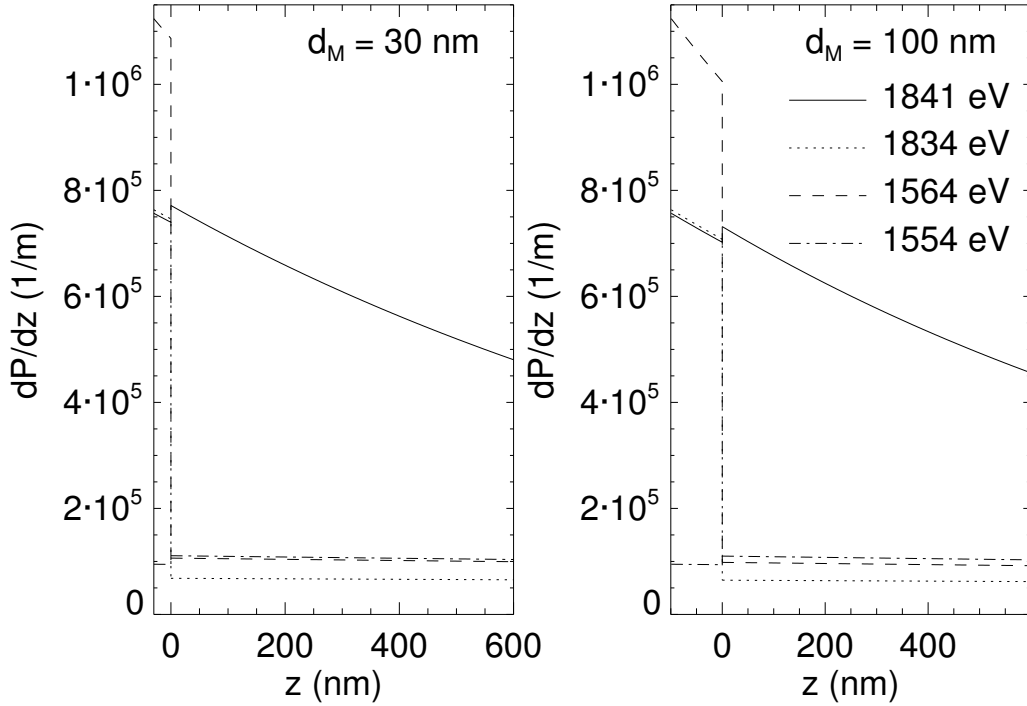


Abbildung 5.14: Wahrscheinlichkeitsdichte für Absorption in der Aluminiumschicht ($z < 0$) bzw. im aktiven Detektorvolumen ($z \geq 0$) nach Gleichung 4.18 für die Absorptionskoeffizienten bei unterschiedlichen Strahlenergien ober- und unterhalb der Al- und Si-Kanten. Links: 30 nm Al, rechts: 100 nm Al.

bei 0 eV wiedergegeben und in der folgenden Auswertung vernachlässigt, d. h. bei der Berechnung der Gesamtereignisse im Spektrum abgezogen. Die Shelf-, Schulter- und Haupt-Peak-Anteile lassen sich gut separieren.

Bei den Spektren ≤ 1.2 keV wurden zahlreiche Messungen durchgeführt, bei denen der SDD an unterschiedlichen Positionen bestrahlt wurde. Die Messungen am Rand und im Zentrum des SDD werden nicht für diese Auswertung herangezogen, da in den Randbereichen zusätzliche Untergrundereignisse entstehen, welche nicht mit dem Eintrittsfenster zusammenhängen. Alle Spektren werden individuell gefittet und für jeden Fit-Parameter x der Mittelwert \bar{x} aus dem mit dem reziproken Fehlerquadrat σ^{-2} gewichtete Mittelwert berechnet [Kno89, Kapitel 3].

$$\bar{x} = \frac{\sum_j a_j x_j}{\sum_j a_j} \pm \sqrt{\frac{1}{\sum_i \sigma_i^{-2}}} \quad (5.2)$$

mit $a_j = \frac{\sigma_j^{-2}}{\sum_i \sigma_i^{-2}}$

Die Messungen im Bereich der Al- und Si-Kanten ($E_0 \geq 1.5$ keV) wurden an der gleichen Position durchgeführt, und es wurde in einem Meßdurchlauf ausschließlich die Strahlenergie geändert. Der Detektor wurde so justiert, daß weder sein Mittelpunkt noch der Rand beleuchtet wurden. Der gemessene Untergrund ist deshalb

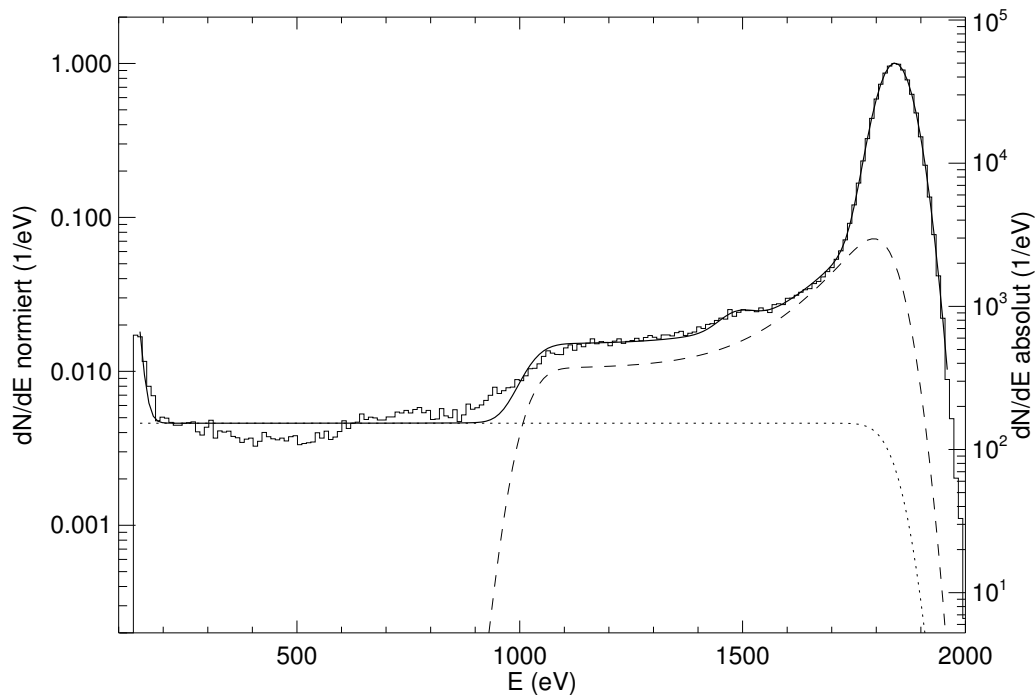


Abbildung 5.15: Ein mit der Funktion $P + Esc + F$ gefittetes Spektrum bei 1.84 keV (durchgezogene Linie). Die Shelf- und Schulter-Untergrundanteile sind durch die punktierte und gestrichelte Linien dargestellt. Der Anstieg unterhalb von 200 eV wird durch die Escape-Linie wiedergegeben.

ausschließlich auf Ereignisse im Eintrittsfenster oder Falschlicht zurückzuführen.

Zur Unterdrückung des Falschlichts wurden unterschiedliche Filter eingesetzt (Al, Si, Au), von denen sich je einer im Strahlengang befand. Bei Verwendung von Al- und Si-Filtern wurden zwar manche Falschlichtanteile effektiv unterdrückt, durch ihre Absorption und Fluoreszenz wurden die Spektren jedoch verfälscht, und insbesondere im Bereich der Al- und Si-K-Kanten läßt sich nicht mehr unterscheiden, ob die beobachteten Effekte durch den Filter oder den Detektor verursacht werden. Aus diesem Grund werden ausschließlich die Messungen mit Gold-Filter für die folgenden Auswertungen herangezogen, denn die Au-M-Kanten liegen im Bereich oberhalb 2.2 keV, und die Au- M_{α} -Fluoreszenzlinie bei 2 123 eV. Dennoch muß damit gerechnet werden, daß manche spektralen Anteile nicht durch Erzeugung vom Partial Events im SDD, sondern durch Falschlichtanteile der Undulatorstrahlung hervorgerufen werden. Da hier lediglich *ein* Spektrum je Strahlenergie zur Verfügung steht, sind die Fehlerbalken der Parameter ≥ 1.5 keV größer als bei den Spektren ≤ 1.2 keV. Die Spektren werden so normiert, daß Höhe der Hauptlinie gleich eins ist.

Die energieabhängige Änderung der Antwortfunktion ist für die Parameter I_G , I_S , σ und I_{D_2} in Abbildung 5.16 gezeigt. Die Parameter k_t , I_M , k_M und I_F sind in Abbildung 5.17 angegeben. Die Höhe der Schulter und die Form des exponentiellen

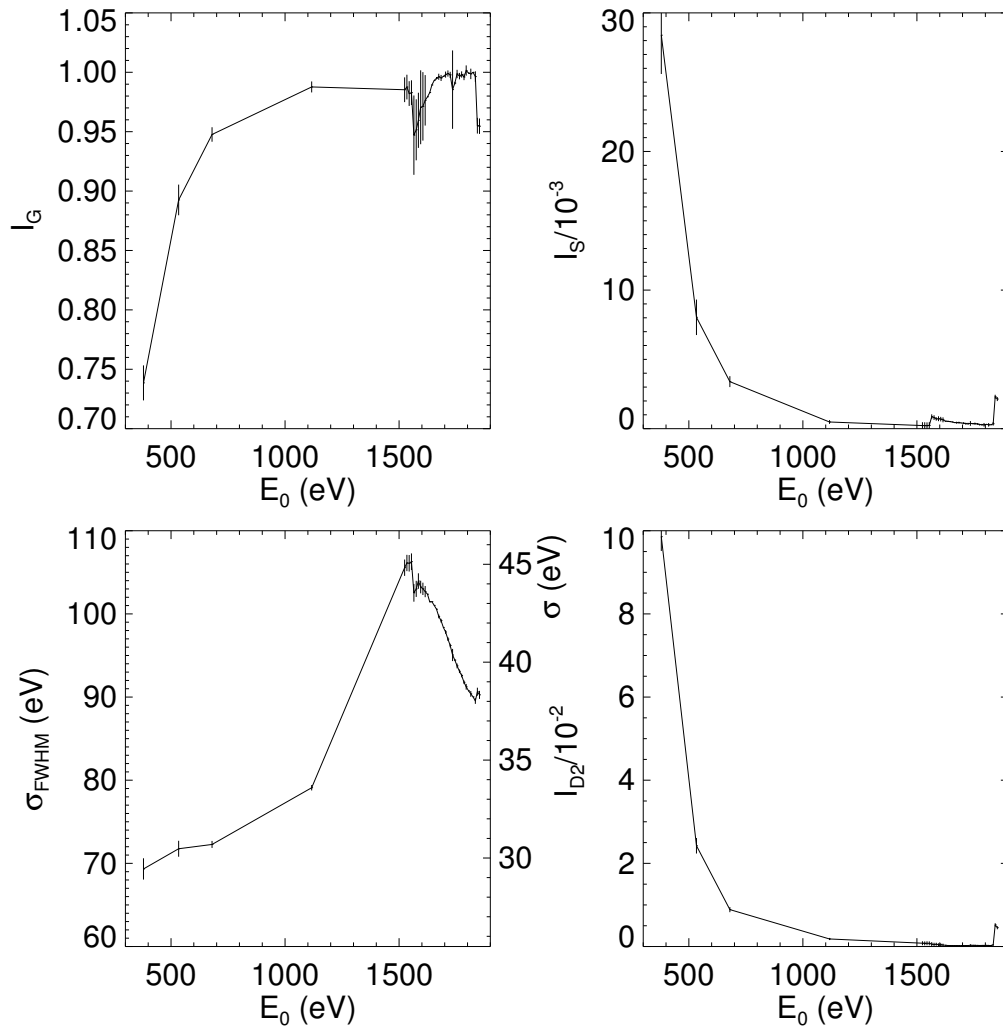


Abbildung 5.16: I_G , I_S , σ und I_{D_2} für die Messungen zwischen 380 und 1852 eV. Die Energieauflösung ist auf der linken Ordinatenachse als volle Halbwertsbreite und auf der rechten als σ der Gaußverteilung angegeben.

Tails (I_{D_1} und β) sind nicht gezeigt, weil sich aus diesen Parametern alleine keine Aussagen treffen lassen. Relevant ist in diesem Zusammenhang primär die Fläche unterhalb des Tails und der Schulter. Zur Bestimmung der Fit-Parameter der Antwortfunktion wird zwischen den Spektren ≤ 1.2 keV und ≥ 1.5 keV unterschieden.

Aus den Fit-Parametern, die in den Abbildungen 5.16 und 5.17 dargestellt sind, lassen sich bereits einige erste Schlüsse ziehen. Die relative Intensität I_G der reinen Gaußverteilung der Hauptlinie geht mit höherer Energie gegen 1 an. Der Untergrundanteil $1 - I_G$ nimmt also erwartungsgemäß mit niedrigerer Energie zu. Oberhalb der Kanten nimmt I_G sprunghaft ab. Dort werden mehr Ereignisse im Untergrund produziert, denn die Absorptionswahrscheinlichkeit nahe der Grenzfläche ist größer.

Der Shelf-Anteil I_S (Abbildung 5.16 rechts oben) sinkt rasch mit steigender En-

ergie von knapp 3 % bei 379 eV bis deutlich unter 0.1 % ab 1 100 eV. Die Sprünge an den Al- und Si-Kanten wurden bereits im vorigen Abschnitt erklärt.

Ein auf den ersten Blick eigentümliches Verhalten zeigt die Energieauflösung σ_{FWHM} (auf der linken Ordinatenachse in Abbildung 5.16 links unten ist σ_{FWHM} angegeben, auf der rechten die Breite σ der Normalverteilung). Sie steigt zunächst erwartungsgemäß mit zunehmender Energie (Gleichung 2.22), fällt dann jedoch wiederum von 1 534 eV bis 1 852 eV deutlich ab. Der überproportionale Anstieg bei 1.5 keV kann auf den stark energieabhängigen Fluß der Undulatorstrahlung zurückgeführt werden. Bei 1 534 eV ist er mehr als einen Faktor 10 höher als bei 1 852 eV. Selbst der Goldfilter, der bei höheren Energien mehr Strahlung durchläßt, gleicht dies nicht aus. Der höhere Fluß verursacht eine schlechtere Energieauflösung (Gleichungen 3.10 und 3.13).

Die Höhe des Schulteranteils I_{D_2} (Abbildung 5.16 rechts unten) verhält sich wieder erwartungsgemäß: Sie sinkt kontinuierlich mit steigender Energie von 10 % bis unter 1 % und steigt nicht bei der Al-, sondern bei der Si-Kante, da die Schulterereignisse durch Ladungsverluste in der ICC-Schicht verursacht werden.

Die Position der Schulter k_t (Abbildung 5.17 links oben) ist stärkeren und unregelmäßigeren Schwankungen unterlegen. Innerhalb der Fehlergrenzen liegt sie zunächst bis 1 116 eV konstant bei halber Strahlenergie ($k_t = 0.5$). An der Al-Kante steigt sie dann sprunghaft auf 0.68 bis 0.75 und fällt dann ebenso sprunghaft zurück auf ca. 0.55. Die erhöhten Werte um 0.7 sind durch Fit-Fehler begründet, denn bei diesen Messungen ist der Shelf so hoch, daß sich die Position der Schulter nicht bestimmen läßt (siehe rote Spektren in den Abbildungen 5.12 und 5.13). Erwartet wird ein konstanter Wert von 0.5, da bei einer Absorption im Silizium und (im Mittel) isotroper räumlicher Verteilung der Ladungswolke stets zumindest die Hälfte der Ladung registriert werden muß, so lange der Einfluß p^+ -Implantation (mit niedrigerer Lebensdauer der Ladungsträger) vernachlässigt werden kann. Die p^+ -Implantation ist etwa eine Größenordnung dünner und die p-Konzentration nur direkt an der Grenzfläche hoch, weshalb diese Annahme sicherlich gerechtfertigt ist (siehe Abschnitt 6.3).

Die Fit-Werte im Bereich der Al- und Si-Kanten sind relativ ungenau, da sich wegen des erhöhten Shelf-Anteils die Schultern nur schlecht vom restlichen Untergrund separieren lassen. Vergleicht man die Spektren in den Abbildungen 5.12 und 5.13, so wird klar, daß der Shelf-Anteil nur ober- und unterhalb der Al-Kante eindeutig von der Schulter separiert werden kann.

Die weiteren Diagramme in Abbildung 5.17 zeigen ausschließlich die Ergebnisse der Messungen des Energie-Scans > 1.5 keV, da diese Parameter nur bei diesen Fit-Funktionen auftreten (siehe Tabelle 4.7). Die Intensität I_M der niederenergetischen Stufe schwankt zunächst recht stark und hat große Meßfehler. Bei höheren Energien ist die Schulterhöhe konstant und liegt im Mittel bei $2.5 \cdot 10^{-4}$ (Mittelwert der Messungen von 1 634 bis 1 834 eV).

Der Maximalwert k_M dieser niederenergetischen Schulter läßt sich genauer bestimmen und liegt zwischen 0.46 (1 564 eV) und 0.4 (1 834 eV). Offenbar bestimmt die Reichweite der Sekundärelektronen auch die Form des Al-Untergrunds (vgl. Abbildung 4.22), und die hierbei entstehende niederenergetische Schulter hat nicht eine minimale, sondern maximale Energie.

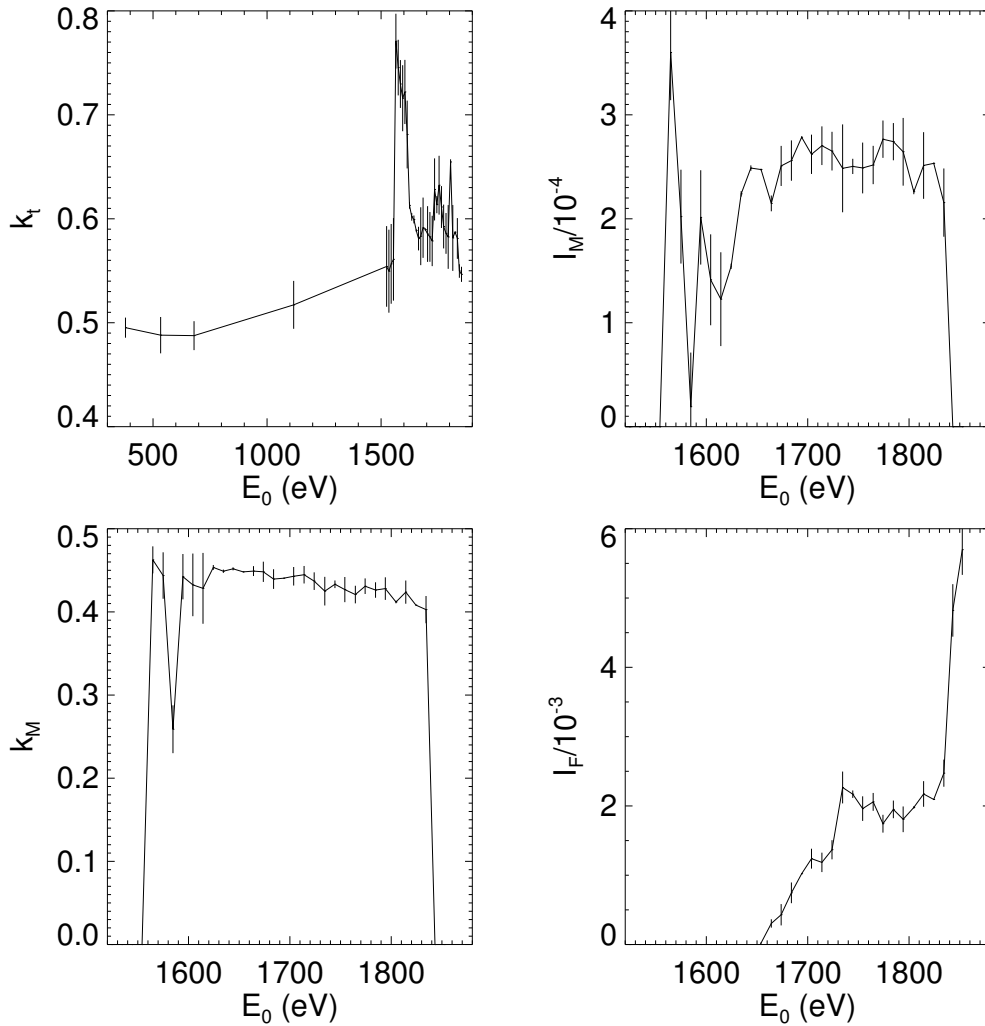


Abbildung 5.17: k_t , I_M , k_M und I_F für die Messungen zwischen 380 und 1852 eV. Unterhalb von 1.55 keV sind die zusätzlichen Untergrundanteile I_M , k_M aus der Metallisierungsschicht null. Die Al-Fluoreszenzlinie mit der Höhe I_F kann erst ab 1.67 keV vom Tail separiert werden.

Der Anteil der Aluminiumfluoreszenzstrahlung I_F steigt zunächst kontinuierlich ab der Energie an, bei der die Fluoreszenzlinie von der Hauptlinie getrennt werden kann. Deutlich separiert werden kann sie jedoch erst ab 1720 eV. Bei der Siliziumkante tritt ein Sprung auf, der auf eine ungenaue Bestimmung der Linienhöhe durch die Fit-Routine zurückzuführen ist, denn gegenüber der hohen Schulter hebt sich die relativ breite und schwache Fluoreszenzlinie kaum ab (vgl. Abbildung 5.15). Unterhalb der Si-K-Kante sind die Al-Fluoreszenzlinien besser separierbar (Spektrum bei 1834 eV in Abbildung 5.13).

Zwar werden häufig aus den Untergrundintensitäten I_j quantitative Schlußfolgerungen über die Entstehung der Ladungsverluste gezogen [Ina87, Cam90, Sch94], die Berechnung der Spektralanteile in Kapitel 4 hat jedoch gezeigt, daß insbeson-

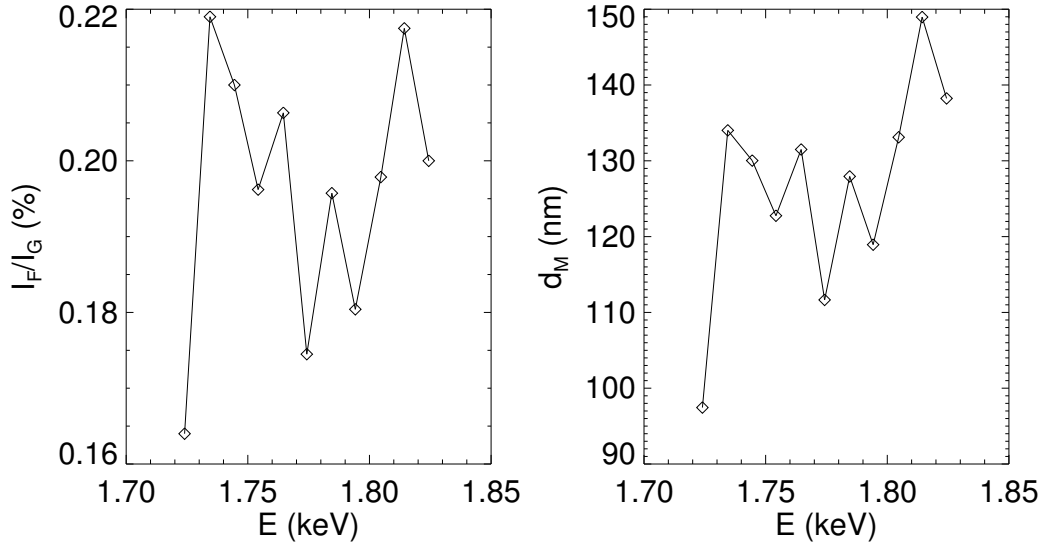


Abbildung 5.18: Links: Messung des Verhältnisses Al-Fluoreszenzintensität zur Intensität der Hauptlinie. Rechts: Berechnung der Metallisierungsschichtdicke durch die Gleichungen 5.3. Der Mittelwert der Berechnung liegt bei (125 ± 10) nm.

dere Shelf und Tail nicht eindeutig einzelnen physikalischen Prozessen zugeordnet werden können. Deshalb wird auf solch eine Interpretation der Fitwerte verzichtet und stattdessen das Modell direkt mit den Messungen verglichen (Kapitel 6).

5.6 Dicke der Metallisierungsschicht

Im folgenden wird überprüft, ob die bei der Herstellung angestrebte Dicke der Metallisierungsschicht d_M von 100 nm korrekt ist, denn diese Dicke ist für die nachfolgende Auswertung eine wichtige Größe. Bei der Herleitung wird ausgenutzt, daß die Intensität der Aluminiumfluoreszenzstrahlung gemessen und berechnet sowie zur Intensität der Hauptlinie I_G in Bezug gesetzt werden kann (vgl. Abschnitt 4.6.2).

Die gemessenen Verhältnisse zwischen Aluminiumfluoreszenz- und Hauptlinie I_F/I_G aus den Fits im vorigen Abschnitt (Abbildung 5.16 links oben und Abbildung 5.17 rechts unten) sind in Abbildung 5.18 links gezeigt. Da sich erst ab 1.73 keV die Aluminiumlinie von der Hauptlinie trennen läßt, werden nur Spektren ab dieser Strahlenergie berücksichtigt. Ab der Si-Kante ist jedoch der Untergrund so hoch, daß die Fluoreszenzlinie kaum vom Untergrund getrennt werden kann. Diese Werte haben hohe Meßfehler und werden nicht in die Rechnung einbezogen.

Die theoretische Intensität I_F der Aluminiumfluoreszenzstrahlung ist durch Gleichung 4.37 gegeben und die Intensität der Hauptlinie I_G durch die Full-Peak-Quanteneffizienz $\varepsilon_{\text{Gauß}}$ (Gleichung 4.13).

$$\frac{I_F}{I_G} = \frac{\omega_{\text{Al}} u_K \left(1 - \exp(-\mu_M(E_0) d_M)\right)}{2(1 - p_{\text{esc}}) \tau_M \tau_p} \quad (5.3)$$

ω_{Al} ist die Al-Fluoreszenzausbeute, u_{K} die K-Schalen-Absorptionswahrscheinlichkeit, die Escape-Wahrscheinlichkeit p_{esc} ist durch Gleichung 4.28 gegeben (und in dem hier betrachteten Energiebereich ohnehin gleich null) und die Transmissionen $\tau_{\text{M}}, \tau_{\text{p}}$ durch Gleichung 4.6.

$$\tau_{\text{M}} = \exp(-\mu_{\text{Si}}(E_0)d_{\text{M}}) \quad (5.4)$$

$$\tau_{\text{p}} = \exp(-\mu_{\text{Si}}(E_0)r_{\text{sek}}) \quad (5.5)$$

Als Dicke der Schicht mit unvollständiger Ladungssammlung wurde hier r_{sek} gewählt, da in diesem Bereich stets ein Teil der Ladung verloren geht, während im Bereich $r_{\text{sek}} \leq z < r_{\text{pri}}^{\text{max}} + r_{\text{sek}}$ vollständige *und* unvollständige Ladungssammlung auftreten kann (vgl. Abbildung 4.19). Die unvollständige Ladungssammlung wird hier ignoriert, da sie unwahrscheinlicher als die vollständige Ladungssammlung ist.

Mit den Gleichungen 5.4 und 5.5 wird aus Gleichung 5.3:

$$\frac{I_{\text{F}}}{I_{\text{G}}} = \frac{\omega_{\text{Al}}u_{\text{K}}\left(1 - \exp(-\mu_{\text{M}}(E_0)d_{\text{M}})\right)}{2(1 - p_{\text{esc}})\exp(-\mu_{\text{Si}}(E_0)d_{\text{M}})\exp(-\mu_{\text{Si}}(E_0)r_{\text{sek}})} \quad (5.6)$$

Da Gleichung 5.6 nicht analytisch nach d_{M} aufgelöst werden kann, muß sie für die gemessenen $I_{\text{F}}/I_{\text{G}}$ numerisch gelöst werden. Die hiermit berechneten Metallisierungsschichtdicken sind auf der rechten Seite von Abbildung 5.18 gezeigt (durchgezogene Linie). Der Mittelwert dieser Werte ist (125 ± 10) nm, die Al-Dicke ist also etwas größer als vorgesehen.

Mit der Näherung $\tau_{\text{M}} = 1$ ist es möglich, Gleichung 5.6 analytisch zu lösen, denn in dem hier betrachteten Energiebereich ist τ_{M} sehr nahe eins, und ohnehin sind die Meßfehler der Quotienten $I_{\text{F}}/I_{\text{G}}$ relativ hoch. Dann gilt:

$$d_{\text{M}} = \frac{1}{\mu_{\text{M}}} \left(\mu_{\text{Si}}r_{\text{sek}} - \ln \left(\exp(\mu_{\text{Si}}r_{\text{sek}}) - \frac{2I_{\text{F}}}{I_{\text{G}}\omega_{\text{Al}}u_{\text{K}}} \right) \right) \quad (5.7)$$

6 Ergebnisse

6.1 Die Fit-Prozedur

Bei der Berechnung des Spektrums nach der in Kapitel 4 beschriebenen Methode werden die gleichen Kanalnummern und -breiten (Energie-Bins) wie bei den Messungen verwendet, damit die Anzahl der Einträge dN/dE zwischen berechneten und gemessenen Spektren verglichen werden kann. Da das Modell keine Pile-Up-Ereignisse berechnet, wird ausschließlich die Spektralverteilung von der Diskriminatorschwelle bis zur Hauptlinie verglichen. Das Spektrum oberhalb der Hauptlinie, d. h. $E > E_0 + 3\sigma$, wird bei der Fit-Prozedur ignoriert.

Beim Fitten von reinen Gaußverteilungen (Gleichung 2.18) benötigt man normalerweise drei Anpassungsparameter: den Mittelpunkt E_0 der Verteilung, ihre Höhe I und Breite σ . Bei dem folgenden Vergleich der berechneten mit den gemessenen Spektren müssen jedoch diese drei Parameter nicht variiert werden:

- Da das PGM kalibriert wurde, ist die Strahlenergie E_0 bei jeder Messung mit hoher Genauigkeit bekannt. Die Abweichungen betragen weniger als 0.2%.
- Das elektronische Rauschen σ_{el} wird bei jedem Spektrum individuell durch die Breite des Rausch-Peaks bei 0 eV bestimmt. Das Fano-Rauschen σ_{Fano} ist durch die bekannten Größen E_0 , F und w gegeben (Gleichung 2.21). Die gesamte Breite σ ist dann durch Gleichung 2.19 gegeben.
- Bei den berechneten Spektrum wird nicht auf die Höhe der Hauptlinie I normiert, sondern die Anzahl der Gesamtereignisse. Das bedeutet, daß die Abweichung zwischen Fit und Messung genau dann besonders gering werden, wenn das Modell nicht nur die Verteilung der Untergrundereignisse, sondern insbesondere die Anzahl der Untergrundereignisse im Verhältnis zur Anzahl der Hauptlinienereignisse richtig vorhersagt.

Das Integral über die modellierten Spektren ist die totale Quanteneffizienz (Gleichung 4.54). Die modellierten Spektren enthalten deshalb auch Ereignisse bei ≈ 0 eV. Bei den Messungen wird jedoch ein Diskriminator eingesetzt, so daß nur Ereignisse oberhalb von ca. 130 eV aufgezeichnet werden können. Die modellierten Spektren werden deshalb bei der gleichen Energie diskriminiert, also im Nachhinein die Anzahl der Ereignisse unterhalb der Diskriminatorschwelle auf null gesetzt. Alle Spektraleinträge werden dann mit dem Normierungsfaktor $f = \sum dN_{Mes}/dE / \sum dN_{Mod}/dE$ multipliziert.

Die Sekundärelektronenreichweite r_{sek} ist die einzig unbekannte Größe des Modells aus Kapitel 4, deshalb ist r_{sek} der einzige Fit-Parameter. Sie wird beim Fit in einem potentiell sinnvollen Bereich mit einer vorgegebenen Anzahl von Schritten

variiert. Dann wird das gewichtete χ^2 des Fits bestimmt, also die mittlere quadratische Abweichung zwischen Modellrechnung und Meßwerten geteilt durch den Meßfehler $\sqrt{dN_{\text{Mes}}/dE}$.

$$\chi^2 = \sum_{i=a}^b \left(\frac{dN_{\text{Mes}}/dE(i) - dN_{\text{Mod}}/dE(i)}{\sqrt{dN_{\text{Mes}}/dE(i)}} \right)^2 \quad (6.1)$$

a ist die Kanalnummer der Diskriminatorschwelle und b die des Ende des Fit-Bereichs, also $E_0 + 3\sigma$.

Aus dieser Definition wird klar, warum diejenigen Fits ein geringes χ^2 ergeben, bei denen die Berechnung der Anzahl der Ereignisse unterhalb Hauptlinie im Vergleich zur Anzahl der Gesamtereignisse besonders gut mit der Messung übereinstimmen: Wegen der hohen Absolutwerte von dN/dE in der Hauptlinie ergeben sich selbst dann sehr hohe χ^2 -Werte, wenn die Intensität der Hauptlinie im Vergleich zur Gesamtereignisanzahl nur geringfügig falsch vom Modell vorhergesagt wird. Eine Variation der Spektralverteilung des Untergrunds hat wegen der niedrigen Pulshöhen im Untergrund einen geringeren Einfluß auf das χ^2 des Fits. Das minimale χ^2 wird dann erreicht, wenn die Spektralverteilungen über den gesamten Energiebereich (zumindest innerhalb der Fehlertoleranzen¹) übereinstimmen.

Nach einem ersten, groben Fit wird der r_{sek} -Wertbereich automatisch von der Fit-Routine verkleinert, und es werden weitere Fits mit feineren Schrittweiten durchgeführt. Der exakte Fit-Wert, bei dem das minimale χ^2 erreicht wird, wird nach folgender Methode bestimmt: Trägt man die χ^2 -Werte in Abhängigkeit des Fit-Parameters r_{sek} auf, so steigen die χ^2 -Werte ober- und unterhalb des Minimums parabelförmig an. Diese $\chi^2(r_{\text{sek}})$ -Verteilung wird dann durch eine Parabel angepaßt, und das Minimum der Parabel ist die Sekundärelektronenreichweite r_{sek} mit dem geringsten χ^2 (vertikale gestrichelte Linie in Abbildung 6.1). Der optimale Fit-Wert ist dann $r_{\text{sek}}(\chi^2_{\text{min}})$.

Fehlerrechnung

Aus der $\chi^2(r_{\text{sek}})$ -Parabel wird für jeden Fit der Fehler σ der Fit-Parameter berechnet (nach [Pre92, Abschnitt 15.6]). Dazu muß zunächst die Anzahl der Freiheitsgrade ν berechnet werden. Diese ist gleich der Anzahl der Energie-Bins E_i in dem betrachteten Energiebereich ($b - a + 1$) minus der Anzahl der Fit-Parameter ($= 1$).

$$\nu = b - a \quad (6.2)$$

Draufhin wird die gewünschte Konfidenzwahrscheinlichkeit p gewählt, also z. B. $p = 0.683$ für den 1σ -Vertrauensbereich oder $p = 0.954$ für den 2σ -Bereich. Nun wird das $\Delta\chi^2$ berechnet, dessen Fit-Wert $r_{\text{sek}}(\chi^2_{\text{min}} + \Delta\chi^2)$ dem gewünschten Konfidenzintervall entspricht. Dazu muß (numerisch) ein $\Delta\chi^2$ gefunden werden, so daß

¹Wegen der Meßfehler ist der Fit dann vertrauenswürdig, wenn $\chi^2 \approx \nu$ ist (ν ist die Anzahl der Freiheitsgrade). Eine außergewöhnlich geringe Abweichung ($\chi^2/\nu \ll 1$) deutet darauf hin, daß das Modell zu viele (d. h. korrelierte) Anpassungsparameter enthält (vgl. Seite 51).

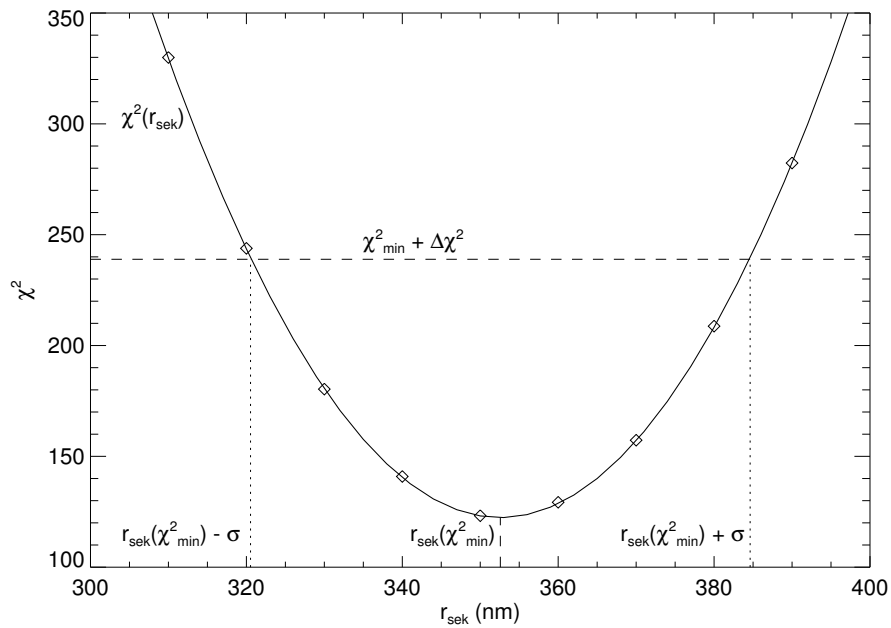


Abbildung 6.1: χ^2 -Werte des Fits für ein gemessenes Spektrum bei 1.1 keV (\diamond) und die daraus berechnete χ^2 -Parabel (durchgezogene Linie). Das Minimum der Parabel bei $\chi^2_{\min} = 122.4$ ist der optimale Fit-Wert $r_{\text{sek}}(\chi^2_{\min})$, welcher somit auch mit relativ wenigen Fits sehr präzise bestimmt werden kann. Aus den Schnittpunkten der Parabel mit der Geraden $\chi^2_{\min} + \Delta\chi^2$ erhält man den Fit-Fehler σ , der hier 32 nm beträgt. Bei dieser Messung ist die Anzahl der Freiheitsgrade $\nu = 110$ und damit nach den Gleichungen 6.3 bis 6.7 $\Delta\chi^2 = 116.5$. Hier und bei allen anderen Fits ist $\chi^2_{\min} \approx \nu$, d. h. die Abweichungen zwischen Messung und bestem Fit sind klein und lediglich auf statistische Fluktuationen zurückzuführen (vgl. Abbildung 6.3 links oben).

folgende Gleichung 6.3 erfüllt ist:

$$P(a, x) = 1 - p, \quad (6.3)$$

$$\text{wobei } P(a, x) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^x e^{-t} t^{a-1} dt, \quad (6.4)$$

$$a = \nu/2, \quad (6.5)$$

$$x = \Delta\chi^2/2, \quad (6.6)$$

$$\Gamma(a) = \int_0^\infty e^{-t} t^{a-1} da \quad (6.7)$$

$\Gamma(a)$ ist die Gammafunktion und $P(a, x)$ die unvollständige Gammafunktion. Hier wird als Fehler der 1σ -Vertrauensbereich angegeben, d. h. $p = 0.683$.

Die Fehlergrenzen $r_{\text{sek}} \pm \sigma$ sind dann durch die beiden Schnittpunkte der Geraden $\chi^2 = \chi^2_{\min} + \Delta\chi^2$ mit der $\chi^2(r_{\text{sek}})$ -Parabel gegeben (siehe Abbildung 6.1).²

²In [Lec98] wurde bei der Anwendung dieser Methode auf zwei „repräsentative Spektren“ nicht χ^2 (Gleichung 6.1), sondern das deutlich kleinere χ^2_{red} (Gleichung 3.15) verwendet. Zudem wurde $\Delta\chi^2$ nicht über die Gleichungen 6.3 bis 6.7 bestimmt, sondern gleich 1 gesetzt, was nur

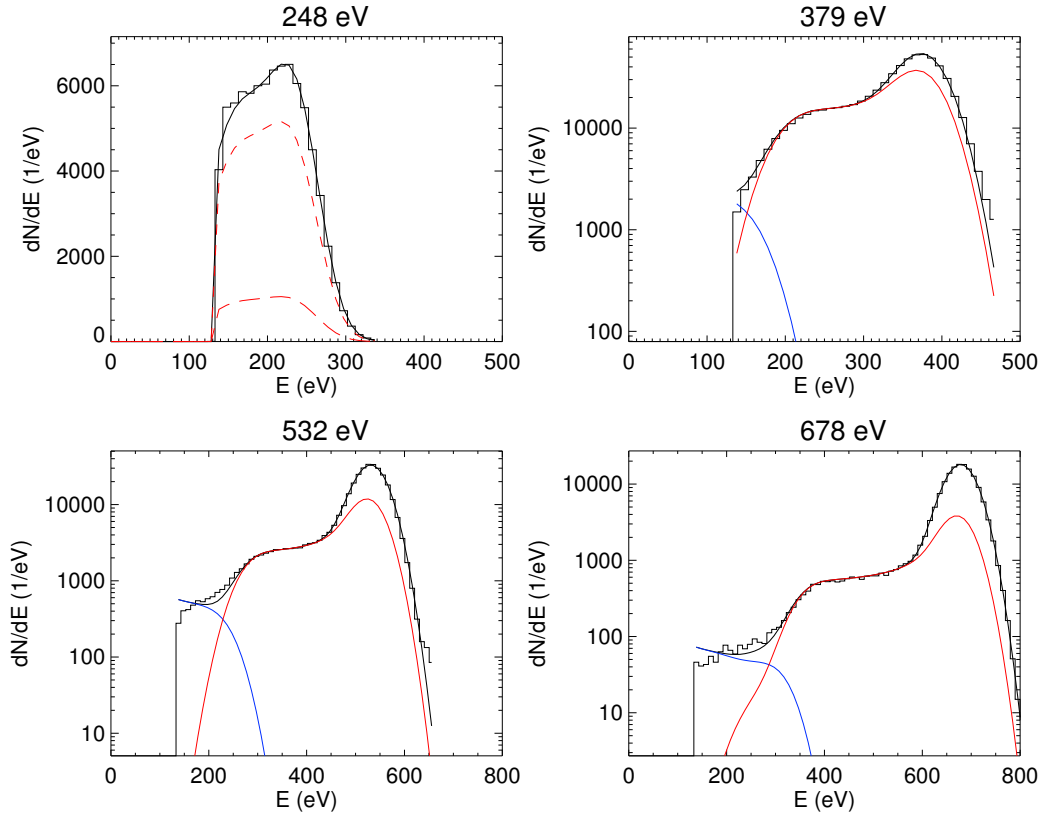


Abbildung 6.2: Spektren im Energiebereich unterhalb 1 keV. Histogramm: Gemessene Spektren. Durchgezogene schwarze Linien: modellierte Gesamtspektren. Blaue Linien: Primärelektronen mit dem Ursprung $z < 0$ (Al-Elektronen). Rote Linien: Primärelektronen mit dem Ursprung $0 \leq z < d_p$ (Si-Elektronen). Die Anteile der Si- L_1 - (lange Striche) und Si- $L_{2,3}$ -Unterschale (kurze Striche) sind nur im 249 eV-Spektrum getrennt dargestellt.

6.2 Vergleich zwischen Modell und Messung

Im folgenden werden die gemessenen mit den modellierten Pulshöhenverteilungen verglichen. Dieser Vergleich wird nur mit Spektren durchgeführt, bei denen kein zusätzlicher Untergrund wegen Ladungsverlusten unterhalb des Randbereichs (äußerster Driftring) oder des Transistors auftritt. Es wurden also die gleichen Spektren wie in Abschnitt 5.5 zur Auswertung herangezogen, d. h. für jede Energie ≤ 1.2 keV jeweils zahlreiche Messungen, für höhere Energien je eine Messung.

Abbildung 6.2 zeigt Spektren bei Strahlenergien unterhalb 1 keV. Die Meßwerte sind durch Histogramme wiedergegeben und die Modellrechnung als durchgezogene

für $\nu = 1$, also den Fit des Meßwerts eines einzelnen ADC-Kanals zulässig ist. Deshalb wurden die Modellfehler stark unterschätzt, und die dort postulierten, deutlichen Energieabhängigkeiten der Elektron-Loch-Paar-Erzeugungenergie und des Fano-Faktors sind nicht glaubwürdig. SCHOLZE, RABUS und ULM konnten diese Ergebnisse anhand präziser Messungen widerlegen und fanden eine energieunabhängige Elektron-Loch-Paar-Erzeugungenergie [Sch97, Sch98]. Sie führen die Diskrepanzen zu den Ergebnissen in [Lec98] vor allem auf eine unzureichende Berücksichtigung der unvollständigen Ladungssammlung im Eintrittsfenster in zurück.

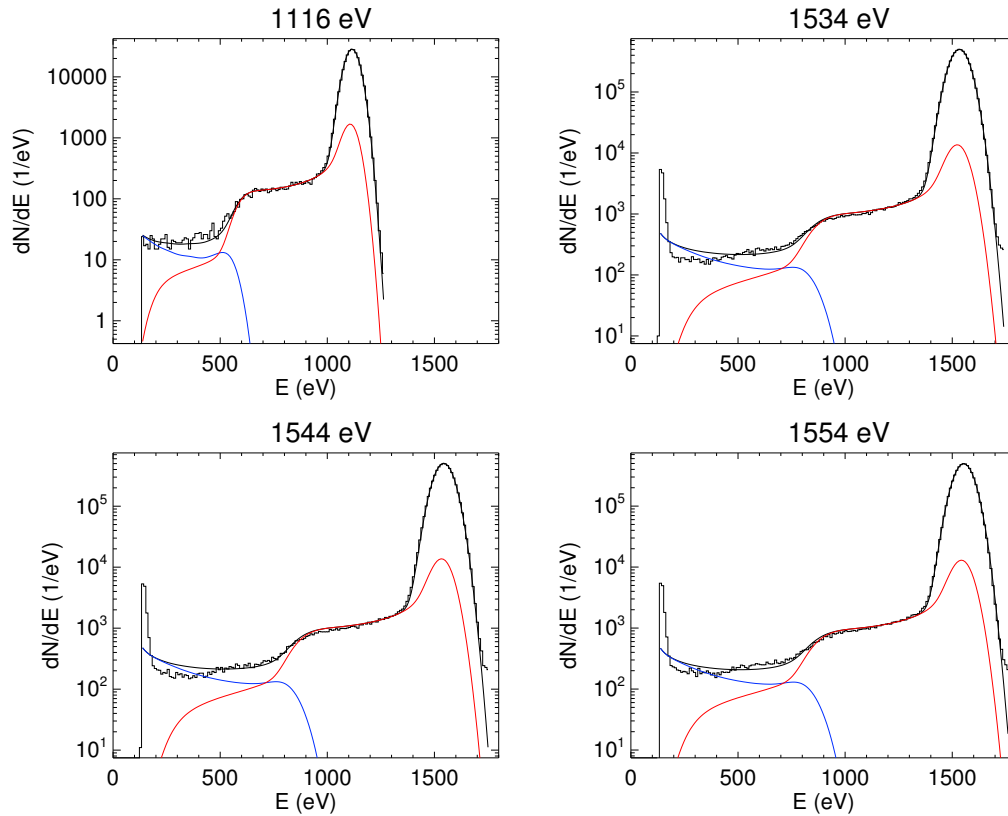


Abbildung 6.3: Spektren im Energiebereich unterhalb der Al-Kante. Die meisten Ladungsverluste sind durch Si-Elektronen bedingt (rote Linie).

ne Linie. Der Spektralanteil, der im Aluminium erzeugt wird und in das sensitive Volumen driftet, ist durch die blaue Linie gekennzeichnet („Al-Elektronen“) und der Anteil der in der ICC-Schicht generierten Elektronen durch die rote Linie („Si-Elektronen“). Da in der ICC-Schicht die Wahrscheinlichkeit für vollständige Ladungssammlung dann hoch ist, wenn keines der beiden Primärelektronen unter dem Winkel $\phi \approx \pi$ emittiert wird, trägt dieser Teil der Spektrums auch zur Hauptlinie bei (Abbildung 4.16 zeigt den Fall $\phi \approx \pi$).

Die Übereinstimmung zwischen Modell Meßwerten ist sehr gut. Während mit der analytischen Fit-Funktion aus Abschnitt 4.7 im Bereich sehr niedriger Energien kein sinnvoller Fit durchgeführt werden kann, ist ein Fit mit der Modellrechnung hier durchaus möglich. Die besten Fits ergeben sich nach Gleichung 5.2 im Mittel für $r_{\text{sek}} = (308 \pm 3)$ nm für $E_0 = 248$ eV und (340 ± 4) nm für die anderen Spektren.

Der Untergrund wird durch die Schulter dominiert, ist also auf Verluste thermalisierter Si-Elektronen zurückzuführen. Um einen deutlich verringerten Untergrund bei sehr niedrigen Röntgenenergien zu erhalten, müssen also in erster Linie diese Verluste verringert werden (siehe Abschnitt 6.4).

Die Absorptionswahrscheinlichkeit im Aluminium ist bei diesen Energien zwar hoch, dies führt aber – anders als erwartet – zu keinem hohen Untergrundbeitrag von Al-Elektronen. Dies liegt an den sehr geringen Primärelektronenreichweiten

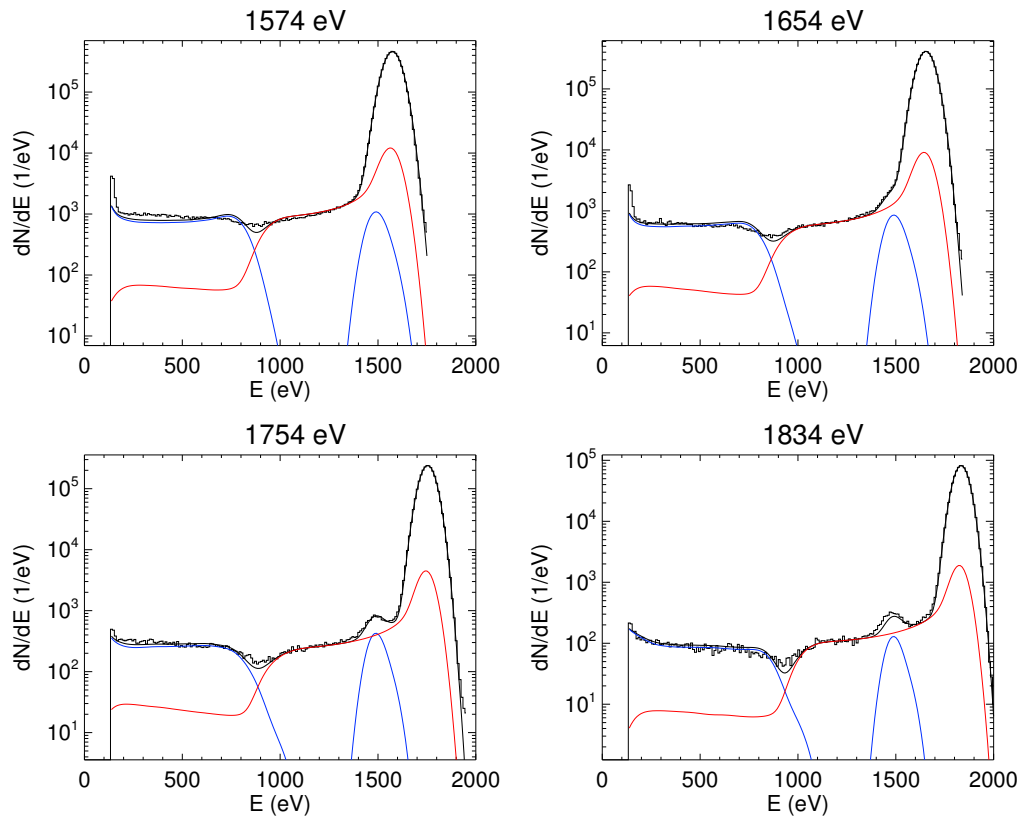


Abbildung 6.4: Spektren oberhalb der Al-, aber unterhalb der Si-Kante. Die Intensität des Shells ist höher als unterhalb der Al-Kante, da nun die Absorptionswahrscheinlichkeit in der Al-Schicht deutlich größer ist.

(z. B. 6 nm bei $E_0 = 379$ eV für die maximale Photoelektronenenergie von 280 eV). Bei einer derart niedrigen Reichweite haben die Primärelektronen bereits die meiste Energie im Aluminium abgegeben, bevor sie in das Silizium eindringen und eine Sekundärelektronenwolke ausbilden. Da r_{sek} sehr groß ist, können wiederum viele Sekundärelektronen zurück in das Aluminium driften, und es geht mindestens die Hälfte der Ladungsträger verloren. Deshalb endet die Shelf-Verteilung (d. h. der niederenergetische Untergrund links von der Schulter) bei $E_0/2$.

Spektren im Energiebereich unterhalb der Al-Kante sind in [Abbildung 6.3](#) dargestellt. Je höher die Energie der einfallenden Strahlung ist, desto geringer ist die Untergrundintensität. Die Form und Höhe der Schulter wird von dem Modell über den gesamten Energiebereich sehr präzise wiedergegeben. Im Shelf gibt es Abweichungen, jedoch sind hier die Pulshöhen ohnehin deutlich niedriger und die Abweichungen fallen weniger ins Gewicht. Die Gesamtintensität des Shells (das Integral über die Pulshöhenverteilung) stimmt jedoch mit der Messung überein.

Die Modellrechnung zeigt, daß der Shelf im Energiebereich bis 1.55 keV zu etwa gleichen Anteilen von Si-Elektronen mit hohen Ladungsverlusten (rote Linie links von der Schulter) und von Al-Elektronen (blaue Linie) gebildet wird. Summiert man diese Anteile (durchgezogene Linie), so entstehen jedoch keine charakteri-

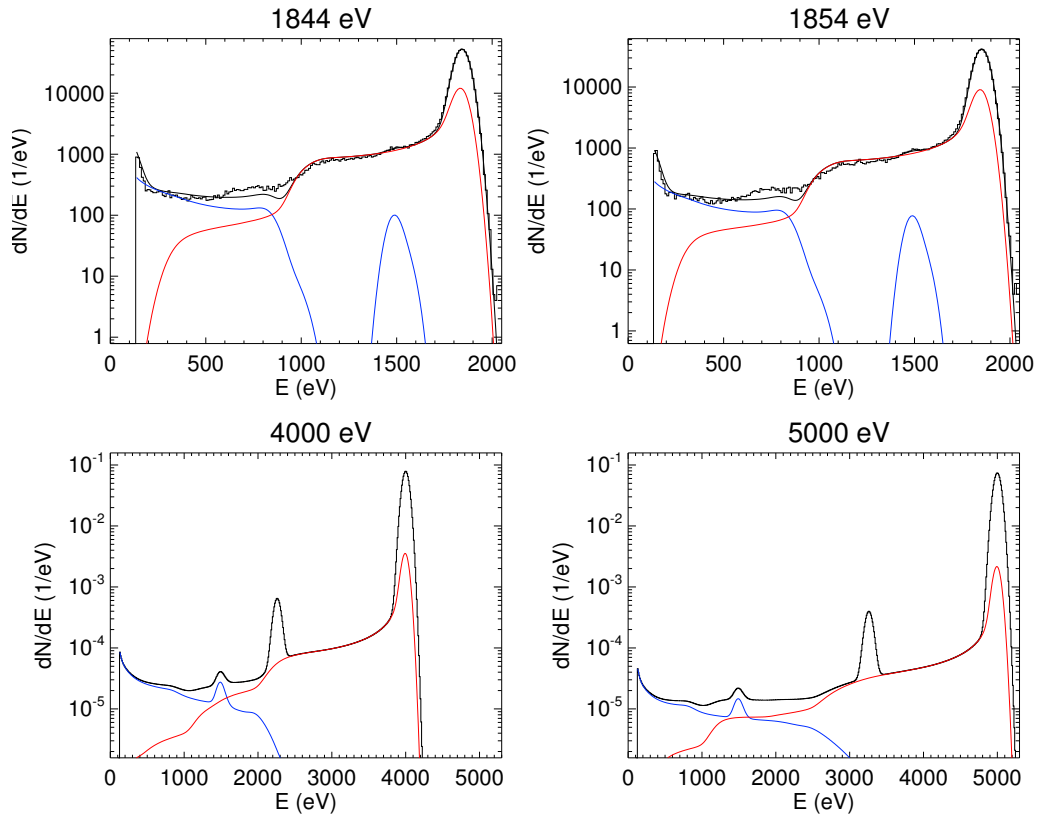


Abbildung 6.5: Spektren oberhalb der Si-Kante. Für $E_0 = 4$ und 5 keV gibt es keine Messungen. Diese Spektren demonstrieren die Untergrundverteilung bei höheren Energien.

stischen Strukturen, welche eine korrekte Berechnung der jeweiligen Intensitäten belegen könnten. Ein Anhaltspunkt dafür geben aber die Modellrechnungen oberhalb der Al-Kante, wo der Anteil der Al-Elektronen abrupt ansteigt, da hier die Röntgenabsorptionswahrscheinlichkeit im Al sehr groß wird.

Die gemessenen und modellierten Spektren für E_0 oberhalb der Al-, aber unterhalb der Si-K-Kante sind in Abbildung 6.4 gezeigt. Der im Vergleich zu den Spektren in Abbildung 6.3 deutlich erhöhte Al-Elektronen-Untergrund im Bereich unterhalb der Schulter ($E < E_0/2$) wird von dem Modell bemerkenswert gut wiedergegeben – sowohl seine Gesamtintensität als auch seine Energieverteilung dN/dE . Auch die mit Gleichung 4.37 berechnete Höhe der Aluminiumfluoreszenzlinie bei 1.49 keV stimmt sehr präzise mit den Messungen überein. Lediglich bei $E_0 = 1.83$ keV ist der Meßwert etwas höher als die Rechnung.

Zwei Spektren, die oberhalb der Si-Kante aufgenommen wurden, sind in Abbildung 6.5 oben gezeigt. Hier wird der Schulteranteil deutlich größer, da oberhalb der Si-Kante die Absorptionswahrscheinlichkeit in der ICC-Schicht abrupt ansteigt (Abbildung 5.14). Dies wird zutreffend vom Modell wiedergegeben.

Im unteren Bildteil sind zum Vergleich modellierte Spektren für $E_0 = 4$ keV und 5 keV gezeigt. Der Untergrund der Si-Elektronen (rote Linien) ist hier noch schulterförmig, hat aber bereits eine erkennbare Struktur, welche durch die unter-

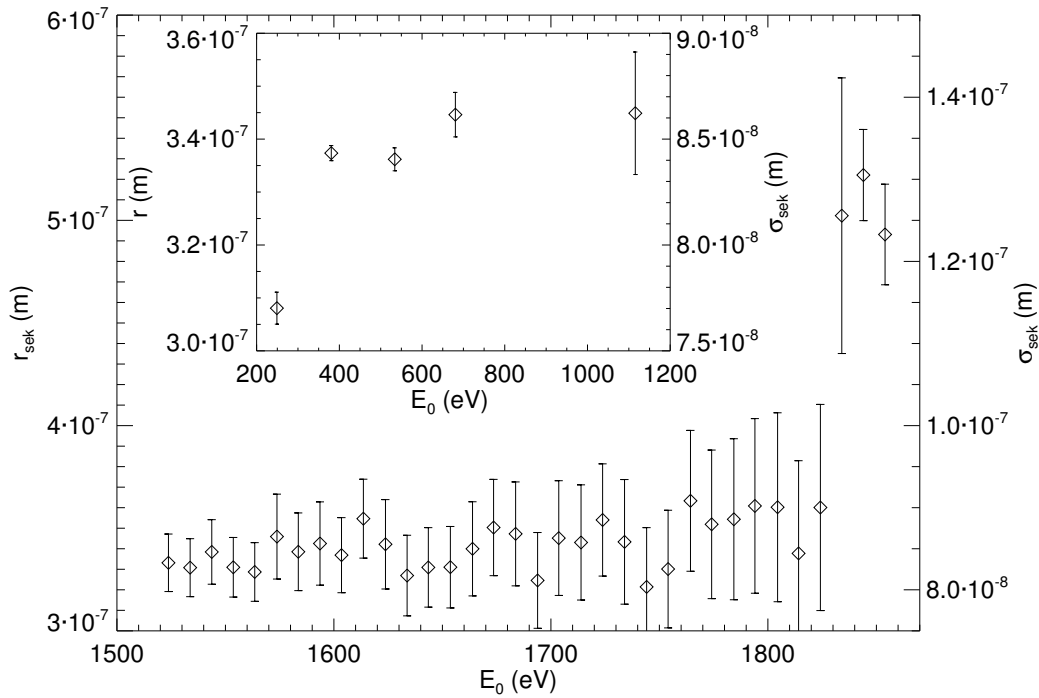


Abbildung 6.6: Ergebnisse der Fits für die Sekundärelektronenreichweiten $r_{\text{sek}} = 4\sigma_{\text{sek}}$. Der Mittelwert der Fit-Werte bei Energien zwischen 350 eV und 1.8 keV ist (345 ± 8) nm.

schiedlichen Auger-Elektronenenergien bedingt ist.

In Abbildung 6.6 sind die Fit-Ergebnisse für die Sekundärelektronenreichweiten aller Fits dargestellt. Der Mittelwert der Fit-Werte bei Energien zwischen 350 eV und 1.8 keV ist (345 ± 8) nm. Der mittlere Fit-Wert oberhalb von 1.83 keV liegt bei (506 ± 15) nm. Für diesen Anstieg sind zwei Gründe denkbar: Zum einen könnte die Energie nicht-thermalisierter (ionisierender) Sekundärelektronen höher sein, was zu einer größeren Gesamtsekundärelektronenreichweite führt. Der Anstieg setzt jedoch bereits *vor* der Si-K-Kante ein. Deshalb könnte die Vernachlässigung der Fluktuationen der Absorptionskoeffizienten in unmittelbarer Nähe der Kanten zu falschen Fit-Parametern führen, d. h. die höhere Sekundärelektronenreichweite kompensiert die zu niedrige Absorptionswahrscheinlichkeit, da eine höhere Reichweite ebenfalls die Untergrundintensität vergrößert.

In vorherigen Publikationen werden meist keine gaußförmigen, sondern kugelförmig-homogene Ladungsdichten der Sekundärelektronenwolken mit scharfem Rand angenommen, was jedoch physikalisch nicht begründet ist. Deren Radius l_t entspricht eher der Größe $2\sigma_{\text{sek}} = r_{\text{sek}}/2$, da sich außerhalb des 2σ -Bereichs der Gaußverteilung weniger als 5% der Ladungsträger befinden. Unter dieser Voraussetzung stimmt das hier erzielte Resultat von $r_{\text{sek}}/2 = 170$ nm mit anderen veröffentlichten Werten von $\sim 10^{-7}$ m [Lla77] und den aus [Har95, Sch98] für $T = -30$ °C interpolierten Wert von 140 nm überein. In der vorliegenden Arbeit wurde jedoch zum ersten Mal detailliert die Energieabhängigkeit untersucht und Fit-Fehler angegeben.

6.3 Einflüsse oberflächennaher Rekombinationszentren

Zusätzlich zu den Fits der Sekundärelektronenreichweite wird ebenfalls untersucht, ob eine Variation der Ladungssammeleffizienz (CCE) im Eintrittsfenster genauere Fits ermöglicht, d. h. geringere χ^2 -Werte ergibt. Bei den bisherigen Berechnungen ist die Sammeleffizienz für Elektronen, die sich im Endzustand des Thermalisierungsprozesses in der Metallisierung befinden, immer gleich null und für Elektronen im Silizium immer gleich eins. Dies impliziert, daß es im Silizium keine zusätzlichen Verluste durch Rekombination der Elektronen an oberflächennahen Defekte, Fehlstellen oder der p^+ -Implantation gibt.

Da die Verteilung der Rekombinationszentren nicht bekannt ist, wird in das Modell eine tiefenabhängige Ladungssammeleffizienz $CCE(z)$ integriert, welche die nachgewiesene Ladung f_d (Gleichungen 4.49 und 4.50) abermals reduziert. Als Parametrisierung der CCE werden diverse Funktionen angesetzt, z. B. stufenförmige, exponentielle, gaußförmige und erf-Verteilungen mit verschiedenen Werten für $CCE(0)$ an der Grenzfläche Al-Si,

$$CCE(0) = 0 \dots 1,$$

und maximalen Ladungsverlustentiefen (das z_{CCE}^{\max} , bei dem $CCE \geq 0.999$)

$$z_{CCE}^{\max} = 10^{-9} \text{ m} \dots 10^{-6} \text{ m}.$$

Die ICC-Schichtdicke ist dann um die Länge z_{CCE}^{\max} erhöht, da nun bereits Ladung verloren gehen kann, wenn Elektronen den Bereich $z < z_{CCE}^{\max}$ erreichen.

$$d_p(E_0) = r_{\text{pri}}^{\max} + r_{\text{sek}}(E_0) + z_{CCE}^{\max}$$

In der Fit-Prozedur wird stets der gesamte Parameterraum r_{sek} , $CCE(0)$, z_{CCE}^{\max} abgedeckt. Wird also jeder Parameter in zehn Schritten variiert, so werden für jedes gemessene Spektrum 10^3 Modellspektren berechnet. Diese Vorgehensweise ist zwar sehr zeitaufwendig, aber nur so kann man sichergehen, das globale χ^2 -Minimum zu finden.

Die CCE-Variationen beeinflussen in erster Linie die Form des niederenergetischen Untergrunds, z. B. die Position der Schulter und Intestität des Tails. Eine zusätzliche CCE verbessert bei keiner Röntgenenergie die Fits der Spektralverteilung signifikant. Der beste Fit wird am häufigsten dann erreicht, wenn die Sammeleffizienz im Silizium nicht reduziert, sondern konstant gleich eins ist. Das deutet darauf hin, daß der Einfluß von Rekombinationszentren vernachlässigt werden kann.

6.4 Schlußfolgerungen

6.4.1 Quanteneffizienzberechnung

Die Summe aller Einträge in den modellierten Spektren (einschließlich der Ereignisse unterhalb der Diskriminatorschwelle) ist die theoretische totale Quanteneffizienz (vgl. Abschnitte 4.3.1 und 4.6.6). Wegen des elektronischen Rauschens kann die Diskriminatorschwelle nicht beliebig klein gewählt werden. Deshalb sind bei der

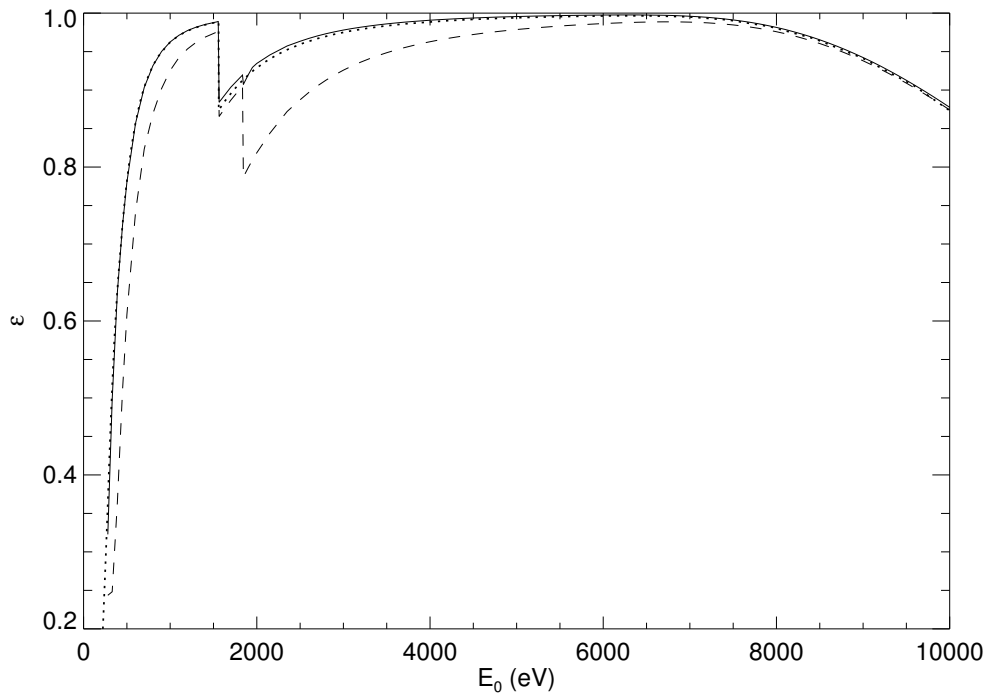


Abbildung 6.7: Die mit dem Modell berechnete totale Quanteneffizienz (durchgezogene Linie), die totale Quanteneffizienz nach Gleichung 4.10 (punktierte Linie) und die Full-Peak-Quanteneffizienz (gestrichelte Linie) für einen SDD mit $d_M = 120$ nm, $n_{ENC} = 7$ und einer Diskriminatorschwelle von 130 eV.

Berechnung der Quanteneffizienz ausschließlich die Ereignisse oberhalb der Diskriminatorschwelle relevant. Die Quanteneffizienz hängt deshalb nicht nur wie in Gleichung 4.10 von den Absorptionslängen und Schichtdicken ab, sondern auch von der Energieauflösung und der Diskriminatorschwelle.

Für die Metallisierungsdicke, die Diskriminatorschwelle und das elektronische Rauschen der im Rahmen dieser Arbeit gemessenen Spektren sind die totalen und Full-Peak-Quanteneffizienzen in Abbildung 6.7 gezeigt. Als Werte für die Sekundärelektronenreichweiten wird über den gesamten Energiebereich der Mittelwert von $r_{sek} = 345$ nm verwendet.

Im Gegensatz zur totalen Quanteneffizienz nach Gleichung 4.10, Abbildung 4.4 treten bei der hier berechneten totalen Quanteneffizienz (durchgezogene Linie) Kanten nicht nur bei der K-Elektronen-Bindungsenergie von Aluminium, sondern auch bei der von Silizium auf. Dies liegt daran, daß die Escape-Linie, die erst ab Energien oberhalb der Si-Kante auftritt, z. T. unterhalb der Diskriminatorschwelle liegt. Bei $E_0 \gtrsim 2.1$ keV wird die Escape-Linie nicht mehr diskriminiert, und ε_{total} wird wieder durch τ_M und die Absorptionswahrscheinlichkeit im Silizium dominiert.

Die Full-Peak-Quanteneffizienz (gestrichelte Linie) ist nicht ausschließlich durch die Intensität der Hauptlinie nach Gleichung 4.36 gegeben, sondern auch durch die Full-Peak-Ereignisse, die in der Schicht unvollständiger Ladungssammlung entstehen können. Deshalb wird $\varepsilon_{Gauß}$ durch einen Gauß-Fit der Hauptlinie der berech-

neten Spektren bestimmt. Wegen des Untergrunds (unvollständige Ladungssammlung und Escape-Linie) ist sie kleiner als die totale Quanteneffizienz.

Die Quanteneffizienz konnte experimentell nicht bestimmt werden, da die Anzahl der einfallenden Photonen nicht bekannt war. Dennoch ist zu erwarten, daß mit diesem Modell die Quanteneffizienz genauer als mit herkömmlichen Rechnungen berechnet werden kann, da alle Ladungsverluste quantitativ erfaßt werden. Es ist denkbar, daß dieses Modell z. B. die systematisch zu niedrigen Werte für die gemessene Quanteneffizienz in [Har00] erklären kann.

6.4.2 Verringerung des Untergrunds

Die Ursache für den sehr hohen Untergrund bei niedrigen Röntgenenergien ist in erster Linie die hohe Reichweite der Sekundärelektronen. Rekombinationen im Bereich der p⁺-Implantation, an Defekten oder Fehlstellen haben keine deutlichen Auswirkungen. Der Einfluß unterschiedlicher Metallisierungs-/Passivierungsmaterialien wird im folgenden durch modifizierte Modellrechnungen verdeutlicht.

In Abbildung 6.8 links oben sind zum Vergleich erneut das gemessene Spektrum (Histogramm) und die Modellrechnung (durchgezogene Linie) für $E_0 = 248$ eV dargestellt. Zudem sind Modellrechnungen für andere Eintrittsfensterkonstellationen im Vergleich zur jetzigen Konfiguration gezeigt.

Das Spektrum rechts oben wurde für einen SDD mit dünnerem Aluminium (30 nm) und etwas besserer Energieauflösung berechnet ($n_{\text{ENC}} = 5.5$). Derartige Spektren werden mit den neuartigen SDDs mit sehr kleiner Anodenfläche (Kapazität) beobachtet. Der schulterförmige Untergrund läßt sich hier besser von der Hauptlinie separieren. Die Summe der Untergrundereignisse (die Fläche unterhalb der gestrichelten Linie) relativ zur Summe der Hauptlinienereignisse ist jedoch genau so groß. Der wichtigste Unterschied ist die größere Effizienz (vgl. Abbildung 4.4), die in einem höheren Peak bei gleicher Meßzeit resultiert.

Der Untergrund kann jedoch nur durch eine Verringerung der ICC-Schichtdicke reduziert werden, also durch kleinere Primär- oder Sekundärelektronenreichweiten. Diese Reichweiten können natürlich nicht direkt beeinflußt werden, aber ein hohes elektrisches Feld an der Si-Grenzfläche kann Elektronen daran hindern, den Halbleiter zu verlassen.

Es ist jedoch nicht möglich, innerhalb einer Distanz von ca. 10^{-8} m derart hohe Feldstärken aufzubauen, daß die Primärelektronen mit kinetischen Energien von bis zu mehreren keV das aktive Detektorvolumen nicht verlassen können. Der Verlust hochenergetische Primärelektronen kann also nicht verhindert werden.

Beim Nachweis der niederenergetischen Röntgenstrahlung hingegen dominieren ohnehin die Verluste der Sekundärelektronen mit sehr geringer kinetischer Restenergie. Diese können bereits durch eine vergleichsweise kleine Potentialschwelle an der Grenzfläche aufgehalten werden. Die jetzigen Konfiguration der Grenzfläche (Al-p⁺-Si) ist jedoch ein Ohmscher Kontakt, stellt also auch für niederenergetische Elektronen keine Barriere dar.

Wird die Si-Oberfläche mit einer Oxidbeschichtung statt mit einer Metallisierung versehen, so können thermalisierte Elektronen das Silizium nicht mehr verlassen, da ihre Energie zu niedrig ist, um im Isolator Siliziumdioxid (mit seiner Bandlücke

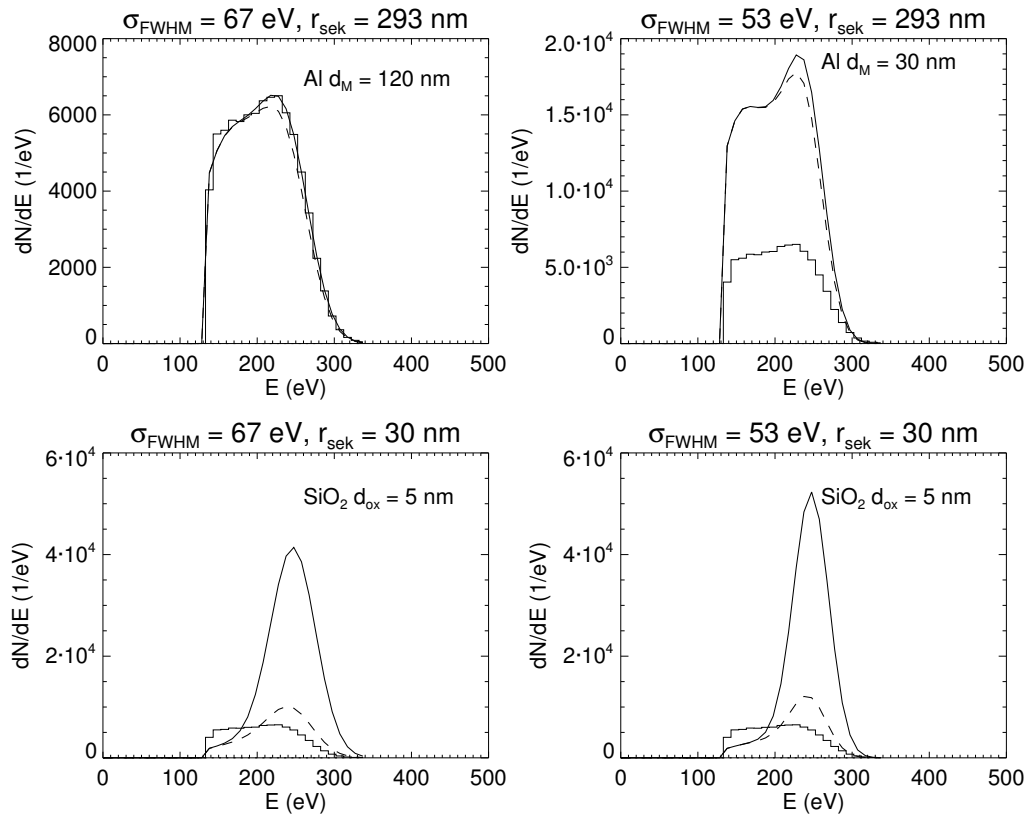


Abbildung 6.8: Spektren bei $E_0 = 248\text{ eV}$, die sich für die bisherigen (oben) bzw. alternative Eintrittsfensterkonfigurationen ergeben (unten). Eintrittsfenster mit einer Oxidstatt einer Al-Beschichtung haben ein deutlich geringeren Untergrund. Zum Vergleich ist jeweils das gemessene Spektrum gezeigt (Histogramm).

von 8.8 eV) freie Zustände im Leitungsband zu besetzen. Energieniveaus innerhalb der Bandlücke, welche z. B. durch Kristalldefekte an der Grenzfläche hervorgerufen werden, können jedoch besetzt werden (Rekombination/Trapping).

Eine Modellrechnung für ein oxidbeschichtetes Eintrittsfenster müßte zwischen den nicht-thermalisierten Sekundärelektronen (welche zunächst eine relativ hohe Energie besitzen) und den thermalisierten Sekundärelektronen unterscheiden. Die hochenergetischen Sekundärelektronen haben kurze Reichweiten und können bei entsprechend hoher Restenergie das aktive Volumen verlassen. Für die exakte Berechnung derartiger Ladungsverluste muß also die gesamte Ionisationskaskade inklusive aller Sekundärprozesse simuliert werden. Die thermalisierten Elektronen hingegen haben zwar eine hohe Reichweite, können aber das Silizium nicht verlassen und tragen nicht mehr zu den Ladungsverlusten bei.

Näherungsweise kann der Verlust energetischer Sekundärelektronen auch mit dem hier erarbeiteten Modell wiedergegeben werden. Dabei wird die Sekundärelektronenreichweite r_{sek} , welche bisher durch die Maximalreichweite der thermalisierten Elektronen dominiert ist, durch die um mindestens eine Größenordnung kleinere Reichweite der energetischen Sekundärelektronen ersetzt.

Spektren, die sich für eine derartige Eintrittsfensterkonstellation ergeben, sind in Abbildung 6.8 unten für zwei verschiedene Energieauflösungen gezeigt. Die Rechnung wird für $E_0 = 248 \text{ eV}$, eine 5 nm dünne Oxidschicht und eine eher pessimistische Schätzung für die Sekundärelektronenreichweite durchgeführt ($r_{\text{sek}} = 30 \text{ nm}$). Die Absorption in der Oxidschicht ist sehr gering, weshalb die Effizienz wiederum höher als im Fall $d_M = 30 \text{ nm}$ (Abbildung 6.8 rechts oben) ist. Bedeutender ist jedoch der verringerte Untergrund. Er ist nun ausschließlich durch den Verlust *hochenergetischer* Primär- und Sekundärelektronen bedingt, und wegen der kleineren ICC-Schichtdicke ist seine Intensität deutlich verringert.

Bei oxidbeschichteten Eintrittsfenstern können jedoch Probleme mit der Strahlhärte auftreten [Boe84, Lut96, Con97, Pah04] (vgl. Abschnitt 2.2.3). Deshalb kann alternativ die Diffusionsspannung eines dünnen, abrupten p^+n^+ -Übergangs für die thermalisierten Elektronen eine ausreichend hohe Potentialschwelle bilden. Nach Gleichung 2.1 besitzt ein p^+n^+ -Übergang mit $N_A = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, $N_D = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ eine Diffusionsspannung von 1.1 V. Wenn diese Spannung über eine kurze Distanz von wenigen 10^{-9} bis 10^{-8} m abfällt, ist dort die lokale elektrische Feldstärken hoch genug, um – ähnlich wie bei Si(Li)s – die thermalisierten Elektronen zu „reflektieren“ (vgl. Fußnote 4 auf Seite 92).

Eine modifizierte Eintrittsfensterstruktur wirkt sich also auf die Niederenergieeigenschaften von SDDs sehr viel deutlicher aus als eine dünnere Aluminiumschicht oder eine bessere Energieauflösung.

6.5 Ausblick

Bei den hier durchgeführten Experimenten war die maximale Strahlenergie auf 2 keV begrenzt. Es sollte deshalb in Zukunft monochromatische Strahlung höherer Energie gemessen werden, um für diesen Energiebereich r_{sek} zu bestimmen und das Modell zu verifizieren. Darüber hinaus ist eine experimentelle Absolutmessung der hier lediglich berechneten Quanteneffizienz interessant.

Das Modell ist prinzipiell ebenfalls dazu geeignet, nicht nur die Ladungsverluste an der Grenzfläche Al-Si im Eintrittsfenster zu erklären, sondern auch an anderen Extrema der Potentialverteilungen (z. B. zwischen Anode und IGR sowie am Randbereich unterhalb des äußeren Driftrings), denn diese Extrema trennen ebenfalls die toten von den aktiven Bereichen des Detektors. Dazu wird die Al- durch eine Si-Totschicht ersetzt, wobei dort $r_{\text{sek}} \neq 0$ ist. Entsprechende Messungen an Randpositionen und Berechnungen für diese Positionen und Blendendurchmesser sind in Abbildung 6.9 gezeigt. Für eine exakte Berechnung müßte überdies beachtet werden, daß sich die Grenze nicht an einer konstanten, sondern an einer variablen x , y - bzw. r -Position befinden, denn die Position des Potentialextremums unterhalb des äußeren Driftrings hängt von z ab (Abbildung 2.9).

Das hier vorgestellte Modell ist so allgemein gehalten, daß es nicht nur für Silizium-, sondern auch für andere Halbleiterdetektoren verwendet werden kann. Dazu müssen lediglich die Absorptionskoeffizienten, Ionisationswirkungsquerschnitte, Elektronenenergien und -reichweiten dem Detektormaterial entsprechend modifiziert werden. Wie im vorigen Abschnitt gezeigt wurde, läßt sich das Modell auch

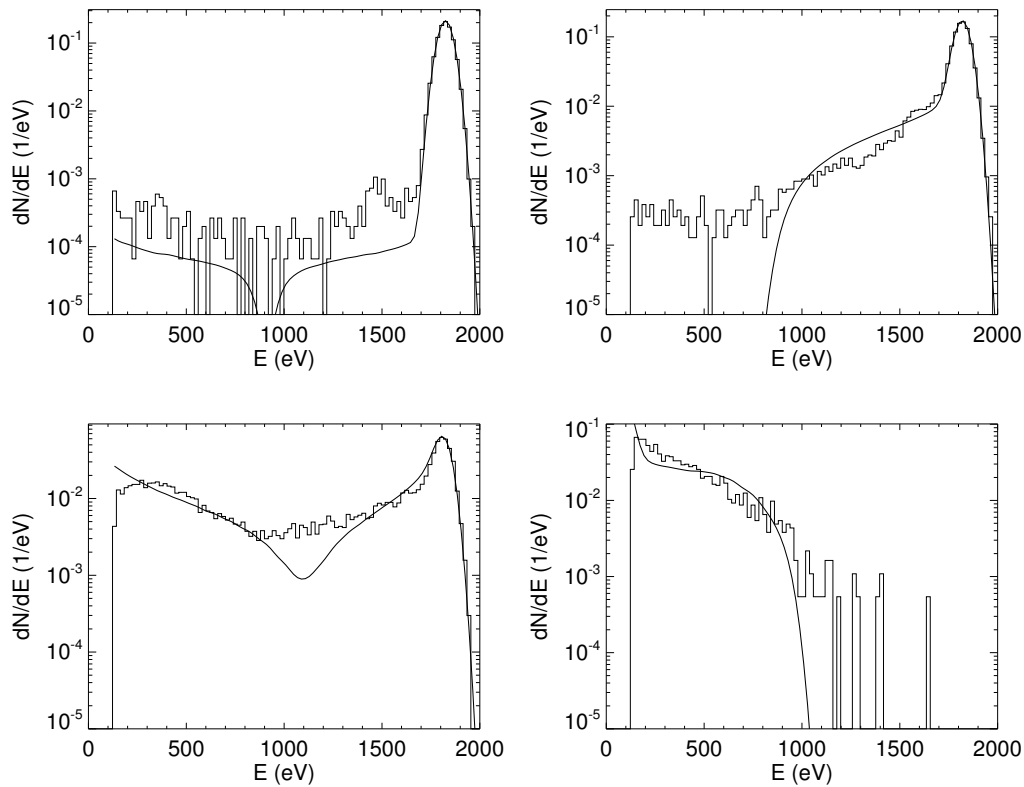


Abbildung 6.9: Spektren mit $E_0 = 1.82$ keV, bei denen der SDD-Randbereich bestrahlt wurde (von links oben nach rechts unten geht die Strahlposition weiter nach außen). Bei der Modellrechnung wurde der Einfluß des Eintrittsfensters ignoriert und stattdessen eine Si-Si-Grenzfläche mit beidseitiger ICC-Schicht angenommen, wo sich jeweils Sekundärelektronenwolken ausbreiten können.

auf andere Eintrittsfensterkonfigurationen anwenden. Deshalb ist ebenfalls die Berechnung der von Si(Li)s, Si-pin-Dioden, HPGe- und GaAs-Detektoren erzeugten Untergrundverteilung möglich.

Neben den in Kapitel 1 erwähnten Anwendungsgebieten sollte es möglich sein, mit dem Modell auch den Fano-Faktor F und die Elektron-Loch-Paar-Erzeugungenergie w experimentell präziser zu bestimmen, denn dabei ist es nötig, die Quanteneffizienz sowie die Intensitäts- und Energieverteilung des im Detektor generierten Untergrunds exakt zu kennen. So konnten SCHOLZE et al. mit präzise charakterisierten Detektoren und Synchrotronstrahlung die bisher genauesten Werte für w angeben [Sch98, Sch00]. Jedoch wurde nicht gezeigt, ob das Modell des Untergrunds für die verwendeten Photodioden gültig ist, denn es wurden keine Vergleiche zwischen gemessenen und berechneten Spektralverteilungen gezeigt (vermutlich konnten die Photodioden wegen des hohen Rauschens nicht im Pulshöhenmodus betrieben werden). Möglicherweise lassen sich mit SDDs, deren Untergrund im Pulshöhenmodus charakterisiert wird, welche jedoch die intensive Synchrotronstrahlung im Strommodus nachweisen, noch genauere Messungen durchführen.

7 Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden Messungen und Modellrechnungen der spektralen Antwort von Siliziumdriftdetektoren (SDDs) auf niederenergetische Röntgenstrahlung vorgestellt. Die Spektralverteilung soll auf der Basis der physikalischen Vorgänge im Detektor vollständig erklärt werden, um die Ursachen für Ladungsverluste zu ermitteln und diese in Zukunft verringern zu können. Auch für Anwender ist ein Modell der SDD-Spektralantwort nützlich, da hiermit das Untergrundspektrum des Detektors von dem der Probe und dem Bremsspektrum separiert werden kann. Falls die Spektralantwort nicht oder nur näherungsweise bekannt ist, ist eine solche Separation nicht möglich. Kann hingegen ein Teil des gemessenen Untergrunds eindeutig den detektorbedingten Ladungsverlusten zugewiesen werden, so erhöht sich die Meßgenauigkeit für die Bestimmung der Intensitäten der Spektrallinien.

Der dominante Anteil der spektralen Antwort von Siliziumdetektoren ist stets die Hauptlinie bei voller Energie E_0 . Die Varianz der Linie (das Quadrat ihrer Breite) ist die Summe der Varianzen des Fano- und des elektronischen Rauschens. Das Fano-Rauschen ist eine unveränderliche intrinsische Eigenschaft des Halbleitermaterials. Die Ursachen des elektronischen Rauschens des SDD-Systems wurden detailliert untersucht. Da die Leckströme des Detektors bereits sehr gering sind, wird es vom thermischen Rauschen, dem Kanalrauschen und dem $1/f$ -Rauschen des Transistors dominiert. Ein geringeres elektronisches Rauschen läßt sich in Zukunft erreichen, wenn ein optimierter Transistor mit einer Kapazität ≤ 200 fF und einer möglichst hohen Steilheit g_m eingesetzt wird.

Zur Erklärung der im Detektor generierten Untergrundverteilung wurde ein Modell erstellt, welches die Ladungsverluste in Abhängigkeit von der Röntgenenergie quantifiziert. Es berechnet die geometrische Verteilung der Ladungsträger im Eintrittsfensterbereich unter der Annahme der geradlinigen Ausbreitung der Primärelektronen mit der Reichweite $r_{\text{pri}}(E_0)$ und einer von den Primärelektronenspuren ausgehenden gaußförmigen Verteilung der (thermalisierten) Sekundärelektronen mit der Breite σ_{sek} . Deren Reichweite $r_{\text{sek}}(E_0) = 4\sigma_{\text{sek}}$ ist der einzige freie Parameter des Modells. Alle Wahrscheinlichkeits- und Energieverteilungen der primären Photoelektronen-, Auger-Elektronen- und internen Fluoreszenzprozesse werden exakt berücksichtigt.

Die Berechnung der Ladungsverluste im Eintrittsfensterbereich erfolgt stets nach der gleichen Methode, dennoch muß zwischen vier Absorptionsbereichen unterschieden werden, in denen unterschiedliche Spektralbeiträge entstehen. Die Bereichsgrenzen hängen von den Elektronenreichweiten und damit von der primären Röntgenenergie E_0 ab. Bei der Absorption des primären Röntgenquants in der Tiefe $0 \leq z < r_{\text{sek}}$ finden grundsätzlich Ladungsverluste statt (z ist die Absorptionstiefe, der Nullpunkt liegt an der Al-Si-Grenzfläche), während bei der Absorption im Bereich $r_{\text{sek}} \leq z < r_{\text{sek}} + r_{\text{pri}}^{\text{max}}$ zwar Ladungsverluste auftreten können, die

Ladungswolke jedoch dann vollständig nachgewiesen wird, wenn sich beide Primärelektronen in positive z -Richtung bewegen. Bei einer Absorption in der Tiefe $r_{\text{sek}} + r_{\text{pri}}^{\text{max}} \leq z$ wird die generierte Ladung stets vollständig gesammelt. Das Modell berücksichtigt ebenfalls die zusätzlichen Effizienzverluste und das Eindringen von Elektronen, welche durch die Bestrahlung des Al-Kontakts entstehen ($z < 0$). Wegen der geringen Wahrscheinlichkeit für eine Wechselwirkung im Al und der kurzen Reichweite der Al-Elektronen ist deren Einfluß jedoch gering.

Zur Messung und Charakterisierung seiner spektralen Antwort wurde ein SDD mit Röntgenstrahlung im Energiebereich bis 2 keV bestrahlt. Als Strahlungsquelle diente Röntgenstrahlung hoher Reinheit, die an einem Undulator des Berliner Elektronensynchrotrons BESSY II generiert und mit Hilfe von Spiegeln, Plangittern, Blenden und Filtern fokussiert und monochromatisiert wurde. Bei den Messungen wurden Strahlenergie, -intensität und Bestrahlungsort variiert, die spektrale Antwort also orts- und energieaufgelöst (und deutlich präziser als mit Röntgenröhren oder Fluoreszenzstrahlung möglich) bestimmt.

Oberhalb von 300 eV kann der Untergrund eindeutig von der Hauptlinie separiert werden. Bei Röntgenenergien $\lesssim 250$ eV treten Ladungsverluste jedoch so häufig auf, daß die Untergrundverteilung mit herkömmlichen Methoden nicht mehr von der Hauptlinie getrennt werden kann. Um in der Röntgenfluoreszenzanalyse quantitative Ergebnisse auch für leichte Elemente zu erhalten, müssen künftige SDDs höhere Ladungssammeleffizienzen im Niederenergiebereich erreichen.

Die Ursachen für die Ladungsverluste wurden durch Vergleiche der Modellrechnungen mit den gemessenen Spektren ermittelt, bei denen r_{sek} variiert wurde. Die besten Übereinstimmungen wurden für $r_{\text{sek}} = (345 \pm 8)$ nm erreicht, wobei r_{sek} für höhere Röntgenenergien ansteigt, da die kinetische Energie der Sekundärelektronen größer wird. Berücksichtigt man, daß r_{sek} z. T anders definiert ist, stimmt dies mit Werten anderer Veröffentlichungen [Lla77, Har95, Sch98] überein.

Die Energie- und Intensitätsverteilungen der gemessenen Spektren werden von den Modellrechnungen sehr präzise wiedergegeben. Als Ursache für den hohen Untergrund bei niedrigen Röntgenenergien wurden thermalisierte Elektronen identifiziert, welche über den Ohmschen Aluminiumkontakt das aktive Detektorvolumen verlassen. Der Verlust und das Eindringen hochenergetischer Elektronen haben lediglich einen geringen Anteil am Untergrund. Oberflächennahe Defekte und Störstellen der p^+ -Implantation verursachen hingegen keine weiteren Ladungsverluste.

Bei zukünftigen SDDs kann eine modifizierte Eintrittsfensterkonfiguration die thermalisierten Elektronen daran hindern, das aktive Volumen zu verlassen. Dies kann durch eine hochdotierte p^+ -Implantation mit dünnem Oxid oder hohe Feldstärken eines abrupten p-n-Übergangs erreicht werden.

Anhang A

Röntgenfluoreszenzanalyse

Energiedispersive Halbleiterdetektoren werden am häufigsten in der Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA, auf Englisch XRF) eingesetzt. In der RFA untersucht man Proben zerstörungsfrei auf ihre atomare Zusammensetzung [Jen74, Ber75, Jen95, Tsu04]. Dabei werden die Atome der Probe von Röntgenstrahlung, Protonen oder Ionen (*Particle Induced X-ray Emission*, PIXE) oder Elektronen (Elektronenmikroskopie und β *Induced X-ray Emission*, BIXE) angeregt. Die angeregten Atome emittieren wiederum Fluoreszenzstrahlung im Röntgenbereich, deren Energie charakteristisch für das jeweilige Element ist (siehe Abschnitt 4.4.1). Je schwerer ein Element ist, desto hochenergetischer ist seine charakteristische Strahlung („Linien“). Die von der Probe ausgesandte Fluoreszenzstrahlung wird dann von einem Detektor registriert. Da die Fluoreszenzwahrscheinlichkeiten bekannt sind, lassen sich daraus sehr präzise die einzelnen Elementkonzentrationen bestimmen.

Die **Anwendungsgebiete** der RFA sind sehr vielfältig, denn es können bis auf Wasserstoff und Helium alle Elemente nachgewiesen werden.

In den Geowissenschaften werden mit Hilfe der RFA Zusammensetzungen von Gesteinen und Mineralien bestimmt. Archäologische Fundstücke (z. B. Schmuck- und Metallteile) lassen sich anhand ihrer Elementverteilung Zeitaltern und Regionen zuordnen. Ebenso kann aus der elementaren Zusammensetzung von Edelsteinen ihre Herkunft genau bestimmt werden, wodurch sich wiederum zahlreiche Rückschlüsse auf Völkerwanderungen und damalige Handelsrouten ziehen lassen. Anhand der Elementverteilung von Farbpigmenten lassen sich Gemälde Epochen und Künstlern zuordnen oder Fälschungen aufdecken. In der Umweltanalytik werden mit Hilfe der RFA giftige Rückstände im Abwasser, in Böden und Filtern nachgewiesen, und in der Forensik lassen sich verdächtige Spuren identifizieren und klassifizieren.

Auch die industriellen Anwendungen der RFA sind sehr zahlreich. Sie liegen vor allem in der Qualitätskontrolle: In der Metallverarbeitung wird die Zusammensetzung von Legierungen überwacht, in der Halbleiterindustrie werden Kontaminationen sowie die Dicke von Aluminium- und Kupferschichten auf Silizium-Wafern kontrolliert. In der Elektronikindustrie wird die Dicke von Polymer- und Aluminiumschichten bei der Herstellung von Kondensatoren bestimmt, in der Mineralölindustrie der Schwefel- und Schwermetallgehalt von Kraftstoffen. In der Lebensmittelindustrie wird z. B. der Salzgehalt von Lebensmitteln überwacht oder das Auftreten von Asche aus Na-, Mg-, K- und Ca-Oxiden (verbranntem Mehl) in Teigprodukten. Selbst der Nährwertgehalt (Na, Mg, P, Cl, K, Ca, Mn, Fe und Zn) von Lebensmitteln läßt sich ermitteln.

Diese Beispiele verdeutlichen, daß im routinemäßigen Einsatz der RFA nicht

nur die Genauigkeit, sondern auch die Geschwindigkeit der Messung sowie die Zuverlässigkeit und die Kosten der Meßinstrumente von großer Bedeutung sind.

Man unterscheidet zwischen wellenlängen- und energiedispersiver Röntgenfluoreszenzanalyse (WDXRF und EDXRF, oder kurz WDX und EDX).

Die „klassischen“ Instrumente in Analytiklabors sind WDXRF-Spektrometer. Hier werden die Atome der Probe von einer besonders leistungsfähigen Röntgenquelle angeregt. Die von den Atomen ausgehende, polychromatische Fluoreszenzstrahlung wird an einem Analysatorkristall mit dem Gitterabstand d gebeugt und so in ihre einzelnen spektralen Bestandteile zerlegt. Ist für eine bestimmte Wellenlänge λ der unter dem Winkel θ einfallenden Strahlung die Bragg-Bedingung

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (n = 1, 2, \dots)$$

erfüllt, so interferieren die Strahlen an den einzelnen Gitterebenen konstruktiv und verlassen den Kristall im Winkel θ (Winkel zur Gitterebene) bzw. 2θ (Winkel zur einfallenden Strahlung). Wenn man den Winkel zwischen Kristallebene und der einfallenden Strahlung um $\Delta\theta$ ändert, so dreht sich der Zähler um den Winkel $2\Delta\theta$. In den meisten Fällen kommt es jedoch zu einer destruktiven Interferenz, deshalb geht bei diesem Verfahren ein großer Teil der ursprünglichen Fluoreszenzstrahlung verloren.

Kennt man den Winkel und den Gitterabstand, so kann man daraus Wellenlänge und Energie der Röntgenstrahlung berechnen. Zum Nachweis der Röntgenstrahlung genügt ein einfacher Proportional- oder Geiger-Müller-Zähler.

Bei EDXRF-Spektrometern wird hingegen ausgenutzt, daß die Höhe des Ausgangssignals von Halbleiterdetektoren proportional zur Energie der einfallenden Röntgenstrahlung ist. Deshalb benötigt man keinen Analysatorkristall, sondern mißt die Fluoreszenzstrahlung direkt. Man verliert keine Intensität am Analysatorkristall und kann zudem den Detektor näher (ca. 1 cm) an der Probe positionieren, wodurch man deutlich höhere Zählraten, also kürzere Meßdauern erreicht.

Die wellenlängendispersive Röntgenspektroskopie ist in der Analytik nach wie vor weit verbreitet. Bei vielen modernen Verfahren, z. B. bei der ortsauflösenden Elementbestimmung in Elektronenmikroskopen (*element imaging*), werden jedoch ausschließlich Halbleiterdetektoren eingesetzt. Zwar ist die Energieauflösung von WDXRF-Systemen um eine Größenordnung besser, EDXRF-Systeme erreichen aber deutlich höhere Zählraten und sind preiswerter. WDXRF-Spektrometer benötigen leistungsstarke Röntgenquellen sowie hochwertige röntgenoptische und mechanische Komponenten (Kollimatoren, Beugungskristall, Goniometer). Bei EDXRF-Spektrometern sind hingegen vor allem die Fähigkeiten des Halbleiterdetektors entscheidend, die einzelnen Fluoreszenzlinien effizient nachzuweisen und gut zu separieren.

Anhang B

Einfluß der Filterglieder auf das elektronische Rauschen

Die im Detektor und der Spektroskopieverstärkerschaltung enthaltenen Widerstände und Kapazitäten geben untere und obere Grenzfrequenzen für das System vor (siehe Abschnitt 2.3.1). Sie verringern also nieder- und hochfrequente Rauschanteile.

Im folgenden wird der Einfluß von Widerständen und Kapazitäten auf die Rauschbeiträge (Gleichungen 3.11 bis 3.14) für dieses System hergeleitet. Die Detektorkapazität des SDD ist mit ≤ 200 fF sehr klein (Abschnitt 2.1.8), die obere Grenzfrequenz also sehr hoch. Deshalb hat die Wahl geeigneter Filterglieder des Pulsformers einen großen Einfluß auf das gemessene elektronische Rauschen. Es ist auch möglich, aus einer gegebenen Rausch- und Signalverteilung diejenigen Filterzeitkonstanten zu berechnen, welche das Rauschen minimieren [Gat96, Gat97].

B.1 Grundlagen

Der Frequenzgang des Betrages der Spannung beträgt in RC -Netzwerken [Tie85]

$$|A| = \frac{1}{\sqrt{1 + (2\pi fRC)^2}},$$

wobei das komplexe A die Übertragungsfunktion, also das Verhältnis der komplexen Ausgangs- zur komplexen Eingangsspannung ist.

$$A = \frac{U_{\text{out}}}{U_{\text{in}}}$$

Um den Einfluß eines RC -Filterglieds auf die mittlere, quadratische Rauschspannung $\langle U^2 \rangle$ zu berechnen, muß die Rauschleistung

$$|A|^2 \langle U^2 \rangle = \frac{\langle U^2 \rangle}{1 + (2\pi fRC)^2}$$

über alle Frequenzen integriert werden. Dieses Integral und die entsprechende äquivalente Rauschladung wird im folgenden für thermisches, Schrot- und $1/f$ -Rauschen berechnet.

B.2 Thermisches Rauschen

Der Einfluß eines RC -Filterglieds auf das „klassische“ thermische Rauschen nach Gleichung 3.3 läßt sich berechnen, indem man über das mittlere Rauschspannungsquadrat integriert [Bük71].

$$\langle U^2 \rangle = \int_0^\infty \frac{4k_B T R}{1 + (2\pi f RC)^2} df$$

Die Lösung des unbestimmten Integrals ist [Bro89]

$$\int \frac{4k_B T R}{1 + (2\pi f RC)^2} df = \frac{2k_B T}{\pi C} \arctan 2\pi f RC.$$

Mit

$$\lim_{f \rightarrow \infty} \frac{2k_B T}{\pi C} \arctan 2\pi f RC = \frac{k_B T}{C}$$

beträgt das mittlere Rauschspannungsquadrat dann

$$\langle U^2 \rangle = \frac{k_B T}{C}.$$

Mit Gleichung 3.2 ergibt sich also folgende Abhängigkeit von der Temperatur und der Kapazität:

$$n_{\text{ENC}} = \sqrt{4k_B T C}$$

Verwendet man für die Berechnung des thermischen Rauschen nicht die allgemeine Gleichung 3.3, sondern Gleichung 3.6, die für Transistoren gilt, so erhält man nach einer vergleichbaren Rechnung:

$$\begin{aligned} \langle U^2 \rangle &= \int_0^\infty \frac{8k_B T}{3g_m (1 + (2\pi f RC)^2)} df \\ \int \frac{8k_B T}{3g_m (1 + (2\pi f RC)^2)} df &= \frac{4k_B T}{3\pi C g_m R} \arctan 2\pi f RC \\ \lim_{f \rightarrow \infty} \frac{4k_B T}{3\pi g_m RC} \arctan 2\pi RC f &= \frac{2k_B T}{3g_m CR} \end{aligned}$$

Mit den Gleichungen 2.24 und 3.2 ist dann die äquivalente Rauschladung

$$n_{\text{ENC}} = \frac{C}{e} \sqrt{\frac{2k_B T}{3g_m \tau}}. \quad (\text{B.1})$$

B.3 Schrotrauschen

In ähnlicher Weise läßt sich der Einfluß des Schrotrauschens (Gleichung 3.8) berechnen.

$$\begin{aligned}
 \langle U^2 \rangle &= \int_0^\infty \frac{2IeR^2}{1 + (2\pi fRC)^2} df \\
 \int \frac{2IeR^2}{1 + (2\pi fRC)^2} df &= \frac{IeR}{\pi C} \arctan 2\pi fRC \\
 \lim_{f \rightarrow \infty} \frac{IeR}{\pi C} \arctan 2\pi fRC &= \frac{IeR}{C} \\
 n_{\text{ENC}} &= \frac{C}{e} \sqrt{\langle U^2 \rangle} = \sqrt{\frac{ICR}{e}} = \sqrt{\frac{I\tau}{e}}
 \end{aligned} \tag{B.2}$$

Berücksichtigt man zudem das Rauschen des Transistorkanals mit dem Widerstand R_{ch} , erhält man einen zusätzlichen Rauschterm [Pin95, Egg04], so daß

$$n_{\text{ENC}}^2 = \left(\frac{I}{e} + a \frac{T}{R_{\text{ch}}} \right) \tau \tag{B.3}$$

ist.

B.4 Niederfrequentes Rauschen

Zur Berechnung des Beitrags des $1/f^a$ -Rauschens wurde das entsprechende Integral mit Hilfe eines Programms zur analytischen Integration bestimmt [Wol01]. Das Ergebnis ist ausschließlich für

$$-1 < a < 1$$

definiert und lautet

$$\langle U^2 \rangle = \int_0^\infty \frac{1}{f^a (1 + (2\pi fRC)^2)} df = 2^{a-2} \pi^a \tau^{(a-1)/2} \sec \frac{a\pi}{2}.$$

Wenn a nahe 1 ist, so geht $\tau^{(a-1)/2}$ gegen eins, das Rauschen ist also nahezu unabhängig von der Pulsformungszeit, aber der Grenzwert $\lim_{a \rightarrow 1} \sec(a\pi/2)$ divergiert. Als Ergebnis soll deshalb lediglich festgehalten werden, daß der Einfluß der Zeitkonstante vernachlässigt werden kann, und damit der Rauschbeitrag ausschließlich proportional zur Kapazität ist.

$$n_{\text{ENC}} = \frac{C}{e} \sqrt{\langle U^2 \rangle} \propto \frac{C}{e} \tag{B.4}$$

Anhang C

Röntgenstrahlungsquellen

Im folgenden wird gezeigt, welche Röntgenstrahlungsquellen sich für welches Anwendungsgebiet eignen und warum die genauesten Untersuchungen im Niederenergiebereich mit Synchrotronstrahlung möglich sind.

Röntgenstrahlung wird in der Regel entweder mit Hilfe radioaktiver Präparate (siehe nächster Abschnitt), Röntgenröhren (Abschnitt C.2) oder Synchrotronanlagen (Abschnitt C.3) erzeugt. Jedes Verfahren ist mit unterschiedlichen Vor- und Nachteilen verbunden. Die für die Messungen in dieser Arbeit maßgeblichen Unterschiede werden im folgenden zusammengefaßt.

C.1 Radioaktive Präparate

Messungen mit Radionukliden lassen sich im Labor mit wenig Aufwand durchführen. Als Standardverfahren (ANSI/IEEE) zur Charakterisierung von Detektoren für weiche Röntgenstrahlung hat sich die Verwendung einer radioaktiven ^{55}Fe -Quelle etabliert [IEE84]. Man benötigt weder Vakuum noch eine aufwendige Abschirmung, da die Mn-K $_{\alpha,\beta}$ -Strahlung problemlos einige cm Luft durchdringt, sich jedoch durch dünne Metallplatten oder -folien abschirmen läßt.

^{55}Fe hat eine Halbwertszeit von 2.73 Jahren und zerfällt durch Elektroneneinfang zu einem angeregten Zustand von ^{55}Mn . Beim Übergang zum Grundzustand werden u. a. Röntgenphotonen mit Energien von 5.898 keV (Mn-K $_{\alpha}$, 24 % Wahrscheinlichkeit) und 6.492 keV (Mn-K $_{\beta}$, 2.9 % Wahrscheinlichkeit) emittiert [Bea67]. Das Spektrum einer ^{55}Fe -Quelle ist also relativ rein und durch die Mn-K $_{\alpha}$ -Linie dominiert.

Mit Mn-Strahlung kann man einfache Detektorcharakterisierungen vornehmen, wie z. B. Kalibrierung und Optimierung der Betriebsspannungen und Bestimmung der Größe der empfindlichen Fläche. Hier und in vorbereitenden Arbeiten [Egg03, Egg04] wurden Fe-Quellen für genau diese Zwecke eingesetzt. Wegen ihrer Energie von etwa 6 keV sind ^{55}Fe -Quellen für Niederenergiecharakterisierungen ungeeignet. Zudem ist ihre Aktivität (d. h. Intensität) in der Regel zu gering, um die Anregung charakteristischer Röntgenstrahlung (Fluoreszenz) leichter Elemente zu nutzen.

Die Aktivität starker Quellen ist jedoch ausreichend, um Zählratenabhängigkeiten zu bestimmen, da sich bei geringem Abstand zwischen Quelle und Detektor Zählraten von bis zu $10^6/\text{s}$ erreichen lassen.

Bei tragbaren XRF-Spektrometern verwendet man zur Anregung der Proben auch Radionuklidquellen wie ^{109}Cd oder ^{241}Am .

C.2 Röntgenröhren

Röntgenstrahlung wird am häufigsten mit Röntgenröhren erzeugt. Auch in der RFA werden die Proben häufig mit Röntgenstrahlung aus Röntgenröhren angeregt. Deshalb werden im folgenden kurz die Entstehungsmechanismen erklärt und gezeigt, warum Röntgenröhren für Detektorcharakterisierungen ungeeignet sind.

In Röntgenröhren entsteht zum einen die Brems- oder Kontinuumstrahlung, zum anderen die charakteristische Strahlung.

C.2.1 Kontinuumstrahlung

Im Hochvakuum einer Röntgenröhre werden freie Elektronen erzeugt, indem ein Filament (Glühkatode) hochoverhitzt wird, und Elektronen durch thermische Emission austreten. Diese Elektronen werden in einem starken elektrischen Feld beschleunigt und treffen dann auf die als Antikatode oder Target bezeichnete Elektrode, die typischerweise aus Mo, Cr oder Cu besteht. Beim Auftreffen auf die Antikatode werden die Elektronen abgebremst und geben ihre kinetische Energie in Form von kurzwelliger elektromagnetischer Strahlung ab – daher der Ausdruck Bremsstrahlung. Nach der Beschleunigung im elektrischen Feld der Röntgenröhre besitzen die Elektronen die Energie

$$E = eU \quad (\text{C.1})$$

Hierbei ist e die elektrische Ladung des Elektrons und U die Potentialdifferenz, die das Elektron auf seinem Weg vom Filament bis zur Antikatode durchlaufen hat. Die Energie E des Elektrons und die Wellenlänge λ der Röntgenstrahlung stehen in einem Zusammenhang, der von der Planckschen Gleichung beschrieben wird.

$$E = \frac{hc}{\lambda} \approx \frac{1.2398 \text{ nm eV}}{\lambda} \quad (\text{C.2})$$

Aus den Gleichungen C.1 und C.2 ergibt sich die kleinst mögliche Wellenlänge der erzeugten Röntgenstrahlung. Diese tritt dann auf, wenn Elektronen in lediglich *einem* Schritt abgebremst werden.

$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{eU} \quad (\text{C.3})$$

Die meisten Elektronen geben ihre Energie nicht in einem Schritt, sondern in einer großen Anzahl unterschiedlicher Schritte ab. Aus diesem Grund ist das Spektrum der Röntgenphotonen kontinuierlich.

Die Intensitätsverteilung des kontinuierlichen Spektrums wird durch die Kramersche Regel beschrieben.

$$\Phi(\lambda) \propto IZ \left(\frac{\lambda}{\lambda_{\min}} - 1 \right) \left(\frac{1}{\lambda^2} \right) \quad (\text{C.4})$$

Φ ist der Fluß, I der Röhrenstrom und Z die Ordnungszahl des Elements des Röhrentargets. Aus Gleichung C.3 und der Kramerschen Regel lassen sich drei wichtige Aussagen ableiten:

1. Eine Erhöhung der an der Röntgenröhre anliegenden Spannung U bei konstanter Stromstärke I führt zu einer linearen Erhöhung der maximalen Energie, also zu einer Verringerung der minimalen Wellenlänge λ_{\min} .
2. Es besteht eine lineare Abhängigkeit zwischen der Ordnungszahl des Target-Materials und der Intensität der erzeugten Kontinuumstrahlung.
3. Es besteht ebenfalls eine lineare Abhängigkeit zwischen der Stromstärke I , mit der die Röntgenröhre betrieben wird, und der Intensität der Kontinuumstrahlung. Mit zunehmender Stromstärke werden mehr Elektronen vom Filament freigesetzt, so daß mehr Elektronen ihre Energie in Form von Bremsstrahlung abgeben.

C.2.2 Charakteristische Strahlung

Charakteristische Strahlung entsteht, wenn durch energiereiche Strahlung oder energiereiche Elektronen innere Elektronen eines Atoms herausgeschlagen werden. Die entstandenen Leerstellen werden dann wieder durch Elektronen höherer Bahn-niveaus besetzt (siehe Abschnitt 4.4.1). Die Energiedifferenz zwischen diesen beiden Besetzungsniveaus wird dann in Form von charakteristischer Röntgenstrahlung diskreter Wellenlänge frei. Das charakteristische Linienspektrum besteht deshalb aus einer Reihe von diskreten Energielinien.

Für Detektorcharakterisierungen benötigt man monochromatische Strahlung, die mit Röntgenröhren z. B. durch Verwendung von Filtern oder Monochromatoren zu erreichen ist.

Um beispielsweise den hochenergetischen Teil des Bremsspektrums sowie eine charakteristische K_{β} -Linie zu unterdrücken, kann man Filter einsetzen, deren Ordnungszahl etwas geringer ist als die des Antikatodenmaterials. Für eine Kupferantikatode läßt sich dies mit einem Nickelfilter erreichen, da durch die Kantenstruktur (vgl. Abbildung 4.2) die Intensität der K_{β} -Linie sehr viel mehr geschwächt wird als die der K_{α} -Linie. Der niederenergetische Teil des Bremsspektrums wird durch solch eine Anordnung jedoch nicht unterdrückt, sondern im Vergleich zur Intensität der K_{α} -Linie sogar verstärkt.

Denkbar ist auch der Einsatz von Kristallmonochromatoren. Jedoch verringern diese die Strahlintensität beträchtlich, so daß ihre Anwendung sehr eingeschränkt ist. Für exakte Detektorcharakterisierungen mit hohem Fluß und hoher Strahlreinheit eignen sich stattdessen Elektronensynchrotrons.

C.3 Synchrotronstrahlung

Synchrotronstrahlung entsteht, wenn Elektronen durch ein senkrecht zu ihrer Bewegungsrichtung ausgerichtetes Magnetfeld radial beschleunigt werden [Jac75, Hän95, Att99, Tho01]. Im Ruhesystem der Elektronen erfolgt die Abstrahlung senkrecht zur Beschleunigungsrichtung mit der für Dipolstrahlung charakteristischen $\sin^2\theta$ -Winkelverteilung. Durch eine Lorentztransformation in das Laborsystem ergibt sich

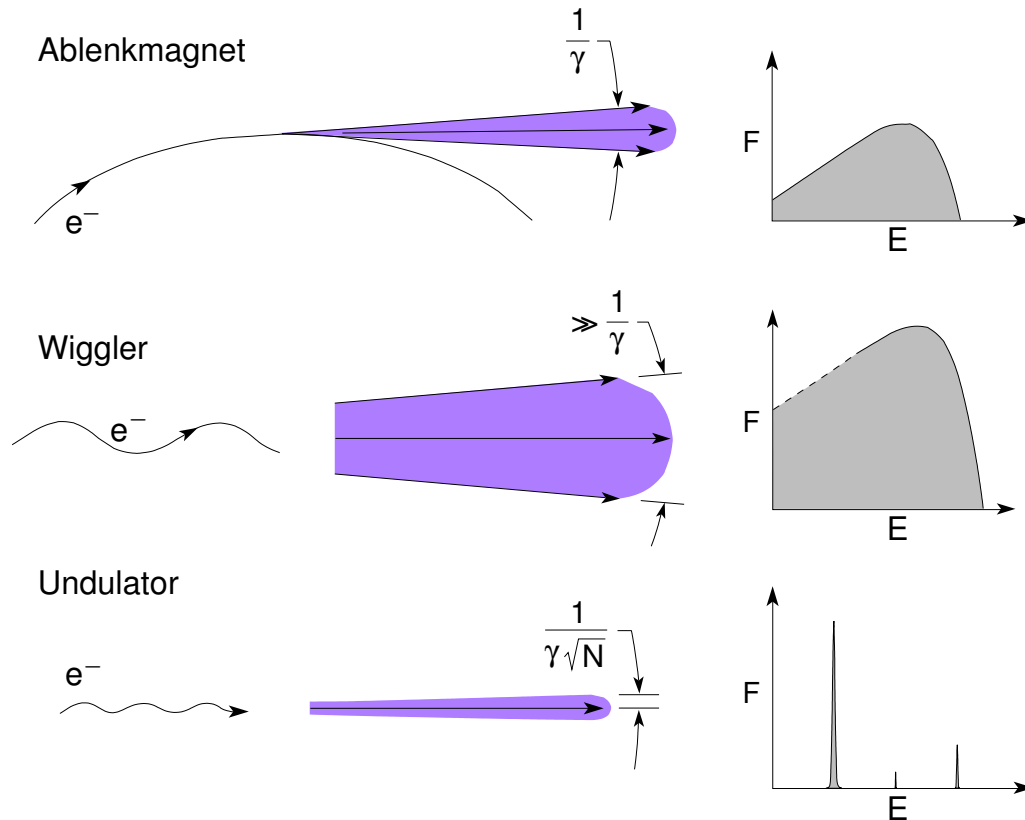


Abbildung C.1: Öffnungswinkel und spektrale Verteilung von Synchrotronstrahlung, die in Ablenkmagneten, Wiggler und Undulatoren erzeugt wird (nach [Att99]).

eine sehr enge Bündelung in Vorwärtsrichtung mit einem Öffnungswinkel θ (typischerweise im mrad-Bereich), da die Elektronengeschwindigkeit v sehr nahe an der Vakuumlichtgeschwindigkeit liegt.

$$\theta \approx \frac{1}{\gamma},$$

mit dem Lorentz-Faktor

$$\gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2}. \quad (\text{C.5})$$

In Abbildung C.1 oben ist der Öffnungswinkel und die Energieverteilung von Synchrotronstrahlung gezeigt, die in Ablenkmagneten erzeugt wird.

Synchrotronstrahlung wurde zuerst als Verlustprozeß in Elektronspeicherringen von Hochenergiephysikexperimenten beobachtet [Att99]. Dort wurde sie auch als erstes wissenschaftlich nutzbar gemacht. Daraufhin wurden Anlagen (der sogenannten zweiten Generation) gebaut, die vorwiegend oder ausschließlich der Erzeugung von Synchrotronstrahlung dienen. Dazu werden Elektronenpakete in einem Teilchenbeschleuniger beschleunigt und dann in den Speicherring eingeschossen. Mit Hilfe von Ablenk- (Dipole) und Fokussiermagneten (Quadrupole und Sextupole) hält man die Elektronen auf einer nicht kreisförmigen Umlaufbahn. Die im Ring

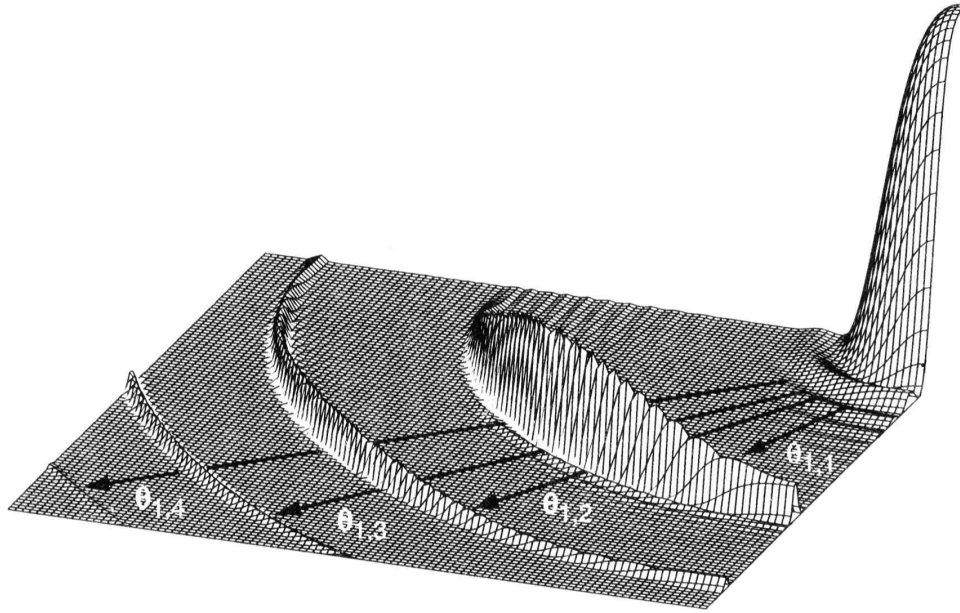


Abbildung C.2: Räumliche Verteilung der verschiedenen Ordnungen von Undulatorstrahlung (nach [Tho01, Abb. 2.5]).

befindlichen Hochfrequenzbeschleunigungsstrecken (Resonatoren) gleichen die entstehenden Strahlungsverluste wieder aus. Synchrotronstrahlung wird in diesen Elektronenspeicherringen ausschließlich in den Ablenkmagneten erzeugt.

An modernen Elektronensynchrotron-speicherringen (der dritten Generation) wird nicht nur die an den Ablenkmagneten erzeugte Synchrotronstrahlung genutzt, denn diese ist vergleichsweise schwach und über einen weiten Spektralbereich verteilt. In der Regel benutzt man spezielle *insertion devices* (Einschübe) wie Undulatoren und Wiggler, die in den geraden Bahnstrecken zwischen den Ablenkmagneten installiert sind. Dort oszillieren die relativistischen Elektronen in einem periodischen Magnetfeld. Die Abstrahlung erfolgt in Richtung ihrer Achse.

In Undulatoren ist das Magnetfeld relativ schwach und die Ausdehnung der Oszillationen relativ klein. Der Strahlungskegel ist deshalb sehr schmal. Die resultierende Strahlung hat eine geringe Divergenz, hohe Kohärenz und eine geringe spektrale Breite (Abbildung C.1 unten). Die Energie der in Undulatoren erzeugten Photonen hängt von der Elektronengeschwindigkeit v und der Periodizitätslänge l des Magnetfelds ab.

$$E = \frac{2hc}{l \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)}$$

Durch Interferenzeffekte entstehen jedoch in Undulatoren stets auch Wellenlängen anderer Ordnung (Harmonische). Diese sind räumlich um den Strahl erster Ordnung angeordnet (Abbildung C.2). Die Breite des Öffnungswinkels θ des Strahls erster Ordnung ist $2/(\gamma\sqrt{N})$, wobei N die Anzahl der Perioden ist.

Auch in Wigglern oszillieren Elektronen in einem periodischen Magnetfeld, welches jedoch sehr viel stärker als das von Undulatoren ist. Dabei wird Strahlung unter einem größeren Abstrahlwinkel ($\theta \gg 1/\gamma$) und mit einer höheren spektralen Breite und Energie abgegeben (Abbildung C.1 Mitte). Die spektrale Verteilung ist deshalb ähnlich der von Ablenkmagneten, hat aber einen höheren Fluß und eine höhere mittlere Energie.

Neben ihrer außerordentlich hohen Intensität ist eine herausragende Eigenschaft der Synchrotronstrahlung, daß ihre Intensität exakt anhand des Elektronenstromes berechnet werden kann. Diese Strommessung erfolgt sehr präzise, weshalb die Strahlleistung mit hoher Genauigkeit bekannt ist. Dies ist z. B. bei der Charakterisierung von Detektoren und Bestimmung ihrer Quanteneffizienz von Nutzen, da die Zahl der einfallenden Photonen bekannt ist (siehe Gleichung 4.9). Falls Blenden benutzt werden, bzw. die Detektorfläche kleiner als der Strahldurchmesser ist, ist die größte Fehlerquelle bei der Messung der Quanteneffizienz meist die Unsicherheit in der Bestimmung der Blenden- bzw. Detektorfläche.

Literaturverzeichnis

- [Ack03] K. H. ACKERMANN et al., Nucl. Instr. Meth. A 499 (2003) 713 39
- [Ali75] R. C. ALIG, S. BLOOM, Phys. Rev. Lett. 35, 22 (1975) 1522 14, 15
- [Ali80] R. C. ALIG et al., Phys. Rev. B 22, 12, (1980) 5565 14, 15, 16, 56, 82
- [Ali83] R. C. ALIG, Phys. Rev. B 27, 2, (1983) 968 14, 16, 56, 82
- [Aug25] P. AUGER, J. Phys. Radium 6 (1925) 205 71
- [Alk67] G. D. ALKHAZOV et al., Nucl. Instr. Meth. 48 (1967) 1 14
- [Att99] D. ATTWOOD, *Soft X-rays and Extreme Ultraviolet Radiation*, Cambridge University Press, Cambridge (1999) 107, 147, 148
- [Bah96] J. BAHRDT et al., Proceedings of the 5th European Particle Accelerator Conference 3 (1996) 2535 105
- [Bam72] W. BAMBYNEK et al., Rev. Mod. Phys. 44 (1972) 716 68, 72, 73
- [Bar91] T. BARBEE et al., Opt. Eng. 30 (1991) 1067 4
- [Bea67] J. A. BEARDEN, Rev. Mod. Phys. 39 (1967) 78 19, 70, 145
- [Bea84] W. E. BEADLE, J. C. C. TSAI, R. D. PLUMMER, *Quick Reference Manual for Silicon Integrated Circuit Technology*, John Wiley & Sons, New York (1984) 7
- [Bec00] B. BECKHOFF et al., Nucl. Instr. Meth. A 444 (2000) 480 105
- [Bec01] B. BECKHOFF et al., Spectrochimica Acta B 56 (2001) 2073 3, 105
- [Bel83a] E. BELAU, R. KLANNER, Nucl. Instr. Meth. 214 (1983) 253 1, 6
- [Bel83b] E. BELAU, J. KEMMER, Nucl. Instr. Meth. 217 (1983) 224 1, 6
- [Ber75] E. BERTIN, *Principles and Practice of X-Ray Spectrometric Analysis*, 2. Edition, Plenum Press (1975) 73, 139
- [Ber93] G. BERTUCCIO, A. PULLIA, Rev. Sci. Instr. 64 (1993) 3294 43
- [Ber96] G. BERTUCCIO et al., Nucl. Instr. Meth. A 377 (1996) 352 31, 50
- [Bla62] J. L. BLANKENSHIP, C. J. BORKOWSKY, IRE Trans. Nucl. Sci. 9-3 (1962) 181 37

- [Boe84] H. E. BOESCH, T. L. TAYLOR, IEEE Trans. Nucl. Sci. 31-6 (1984) 1 273 [26](#), [135](#)
- [Brä90] H. BRÄUNINGER et al., Nucl. Instr. Meth. A 288 (1990) 227 [6](#), [21](#)
- [Brä93] H. BRÄUNINGER et al., Nucl. Instr. Meth. A 326 (1993) 129 [6](#), [21](#)
- [Brä97] H. BRÄUNINGER et al., Rev. Sci. Instrum. 68 (1997) 4 271 [6](#), [21](#)
- [Bri90] D. BRIGGS, M. P. SEAH, *Practical Surface Analysis*, 2. Edition, John Wiley & Sons, Chichester (1990) [72](#)
- [Bro89] I. N. BRONSTEIN, K. A. SEMENDJAJEV, *Taschenbuch der Mathematik*, Harri Deutsch, Frankfurt (1989) [51](#), [142](#)
- [Bru87] G. BRUNNER, J. Phys. B 20 (1987) 4 983 [73](#)
- [Bük71] H. BÜKER, *Theorie und Praxis der Halbleiterdetektoren für Kernstrahlung*, Springer, Berlin (1971) [37](#), [44](#), [142](#)
- [Cac87] M. CACCIA, Nucl. Instr. Meth. A 260 (1987) 124 [1](#), [6](#)
- [Cam85] J. L. CAMPBELL et al., Nucl. Instr. Meth. B 49 (1985) 71 [4](#)
- [Cam90] J. L. CAMPBELL, Nucl. Instr. Meth. B 49 (1990) 115 [4](#), [119](#)
- [Cam98] J. L. CAMPBELL et al., Nucl. Instr. Meth. A 418 (1998) 394 [56](#)
- [Cam01] J. L. CAMPBELL et al., X-Ray Spectrometry 30 (2001) 230 [4](#), [37](#), [83](#), [99](#)
- [Car73] T. A. CARLSON, C. W. NESTOR, Phys. Rev. A 8 (1973) 2 887 [75](#)
- [Chr68] S. CHRISTENSSON, I. LUNDSTRÖM, C. SVENSSON, Solid-State Electron. 11 (1968) 797 [45](#)
- [Com23] A. H. COMPTON, Phys. Rev. 21, 5 (1923) 483 [59](#)
- [Con97] J. F. CONLEY et al., IEEE Trans. Nucl. Sci. 44-6 (1997) 1 804 [26](#), [135](#)
- [Cro70] D. T. CROMER, D. A. LIBERMAN, *Relativistic calculation of anomalous scattering factors for x-rays*, Los Alamos Scientific Laboratory (LASL) report LA-4403, Los Alamos, New Mexico (1970) 163 [76](#), [77](#)
- [Dav52] C. M. DAVISSON, R. D. EVANS, Rev. Mod. Phys. 24 (1952) 79 [60](#), [61](#)
- [Dav80] R. F. DAVIS, Chem. Phys. Lett. 71 (1980) 448 [61](#)
- [Dia91] T. H. V. T. DIAS et al., Nucl. Instr. Meth. A 307 (1991) 347 [14](#)
- [Die96] W. DIETZE (Hrsg.) *Landolt-Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology – New Series GG 3, Vol. 17 PT c, Technology of Si, Ge, and SiC*, Springer, Berlin (1996) [7](#)

- [Dru71] W. E. DRUMMOND, J. L. MOLL, J. Appl. Phys. 42, 13 (1971) 5 556 14
- [Dys74] N. A. DYSON, Nucl. Instr. Meth. 114 (1974) 131 78
- [Ebe70] J. E. EBERHARDT, Nucl. Instr. Meth. 80 (1970) 291 16
- [Eck01] V. ECKARDT et al., *Calibration of the STAR Forward Time Projection Chamber with Krypton-83m*, [nucl-ex/0101013](#) (2001) 39
- [Egg00] T. EGGERT, *Kalibration einer Spurendriftkammer mit Krypton-83 und Vergleich mit anderen Kalibrationsmethoden*, [Diplomarbeit](#) am Max-Planck-Institut für Physik/Fakultät für Physik der TU-München (2000) 39
- [Egg03] T. EGGERT et al., Nucl. Instr. Meth. A 512 (2003) 257 57, 145
- [Egg04] T. EGGERT et al., X-Ray Spectrometry 33-4 (2004) 246 33, 48, 49, 109, 143, 145
- [Ein05] A. EINSTEIN, Annalen der Physik 17 (1905) 132 60
- [Ela72] E. ELAD, IEEE Trans. Nucl. Sci. 19 (1972) 403 31
- [Ela73] E. ELAD et al., IEEE Trans. Nucl. Sci. 20 (1973) 534 26
- [Eng77] W. L. ENGL et al. (Hrsg.), *Process and Device Modelling for Integrated Circuit Design*, Sijthoff & Noordhoff Int. Pub., Amsterdam (1977) 10
- [Esp77] P. VAN ESPEN et al., Nucl. Instr. Meth. 145 (1977) 579 102
- [Eva55] R. D. EVANS, *The Atomic Nucleus*, Ed. 1. Schiff, Maple Press, New York, PA (1955) 60, 79
- [Fan46] U. FANO, Phys. Rev. 70, 1 and 2 (1946) 44 14, 16
- [Fan47] U. FANO, Phys. Rev. 72, 1 (1947) 26 14
- [Fas96] L. FASOLI et al., *Front-end electronics integrated on high resistivity semiconductor radiation detectors*, Proceedings of the First IEEE-CAS Region 8 Workshop on Analog and Mixed IC Design, Pavia (1996) 50
- [Fio99] C. FIORINI, P. LECHNER, IEEE Trans. Nucl. Sci. 46-3 (1999) 761 31
- [Fis00] P. FISCHER et al., Nucl. Instr. Meth. A 451 (2000) 651 6
- [Fit74] H.-J. FITTING, Phys. Status Solidi (a) 26 (1974) 525 80
- [Fra94] G. W. FRASER et al., Nucl. Instr. Meth. A 350 (1994) 368 72, 73, 75
- [Ful54] C. S. FULLER, J. C. SEVERIENS, Phys. Rev. 96 (1954) 21 37
- [Gaj93] H. GAJEWSKI, *Analysis und Numerik von Ladungstransport in Halbleitern*, Report Nr. 6 des Instituts für Anwandte Analysis und Stochastik im Forschungsverbund Berlin e. V., Berlin (1993) 10

- [Gaj99] H. GAJEWSKI et al., *WIAS-TeSCA Two-dimensional semiconductor analysis package*, Handbuch, Berlin (1999) 10
- [Gar76] R. P. GARDNER, L. WIELOPOLSKI, Nucl. Instr. Meth. 140 (1977) 289 34
- [Gat84a] E. GATTI, P. REHAK, Nucl. Instr. Meth. A 225 (1984) 608 20, 21
- [Gat84b] E. GATTI, P. REHAK, Nucl. Instr. Meth. A 226 (1984) 129 20, 21
- [Gat85] E. GATTI et al., IEEE Trans. Nucl. Sci. 32 (1985) 1 204 21
- [Gat88] E. GATTI et al., Solid State Devices (1988) 497
- [Gat96] E. GATTI, A. GERACI, G. RIPAMONTI, Nucl. Instr. Meth. A 381 (1996) 117 141
- [Gat97] E. GATTI, A. GERACI, G. RIPAMONTI, Nucl. Instr. Meth. A 395 (1997) 226 141
- [Ger87] M. GERETSCHLÄGER, Nucl. Instr. Meth. B 28 (1987) 289 26, 38, 56, 76
- [Gou70] F. S. GOULDING et al., IEEE Trans. Nucl. Sci. 17, 1 (1970) 218 31
- [Gou77] F. S. GOULDING, Nucl. Instr. Meth. 142 (1977) 213 28
- [Gum64] H. K. GUMMEL, IEEE Trans. Electron Devices 11 (1964) 455 10
- [Hän95] H. HÄNSEL, W. NEUMANN, *Physik Bd. 3. Atome – Atomkerne – Elementarteilchen*, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg (1995) 59, 147
- [Har94] R. HARTMANN et al., IEDM Technical Digest (1994) 535 22, 43
- [Har95] R. HARTMANN et al., Metrologia 32 (1995/96) 491 29, 83, 130, 138
- [Har96] R. HARTMANN et al., Nucl. Instr. Meth. A 377 (1996) 191 24, 25
- [Har99] R. HARTMANN et al., Proceedings of SPIE Vol. 3 765 (1999) 703 25
- [Har00] R. HARTMANN et al., Nucl. Instr. Meth. A 439 (2000) 216 133
- [He88] H. HE et al., Nucl. Instr. Meth. A 272 (1988) 847 38, 56, 60, 61, 79
- [Hen93] B. L. HENKE et al., Atomic Data and Nuclear Data Tables 54 (1993) 181 59
- [Hör01] N. HÖRNEL, *Physikalische Ursachen und Wirkung von Rauschquellen in Sperrschicht-Feldeffekttransistoren*, Dissertation an der Ludwig-Maximilians-Universität München (2001) 45
- [Hol70] M. HOLLSTEIN, Nucl. Instr. Meth. 82 (1970) 249 38

- [Hol00] P. HOLL et al., *Active Pixel Matrix for X-ray Satellite Missions*, IEEE Trans. Nucl. Sci. 47-4 (2000) 6
- [Hoo69] F. N. HOOGE, Phys. Lett. 29 A (1969) 139 45
- [Hoo81] F. N. HOOGE, T. G. M. KLEINPENNING, L. K. J. VANDAMME, Rep. Prog. Phys. 44 (1981) 479 45
- [Hub94] J. H. HUBBEL et al., J. Phys. Chem. Ref. Data 23 (1994) 339 73
- [Hya83] B. HYAMS et al., Nucl. Instr. Meth. 205 (1983) 99 1, 5
- [IEE84] IEEE Std. 759-1984, *Standard Test Procedures for Semiconductor X-Ray Energy Spectrometers* (1984) 145
- [Ina87] Y. INAGAKI et al., Nucl. Instr. Meth. B 27 (1987) 353 4, 38, 119
- [Isk83] H. ISKEF, J. W. CUNNINGHAM, D. E. WATT, Phys. Med. Biol. 28-5 (1983) 535 80, 81
- [Jac75] J. D. JACKSON, *Classical Electrodynamics*, John Wiley & Sons, Chichester (1974) 10, 147
- [Jän71] O. JÄNTSCH, I. FEIGT, Solid-State Electron. 14 (1971) 391 45
- [Jen74] R. JENKINS, *An Introduction to X-Ray Spectrometry*, Heyden (1974) 139
- [Jen95] R. JENKINS, *Quantitative X-ray Spectrometry*, Dekker (1995) 139
- [Jin81] R. P. JINDAL, A. VAN DER ZIEL, J. Appl. Phys. 52 (1981) 2884 45
- [Kan81] K. KANDIAH et al., *Low frequency noise mechanisms in field effect transistors*, Proc. 6th conference on noise in physical systems, NBS Publication 641, U.S. Department of Commerce (1981) 45
- [Kan89] K. KANDIAH, M. O. DEIGHTON, J. Appl. Phys. 66 (1989) 937 45
- [Kar98] K. KARVELAS et al., Nucl. Instr. Meth. A 406 (1998) 59 34
- [Kem80] J. KEMMER, Nucl. Instr. Meth. 169 (1980) 499 1, 5
- [Kem87a] J. KEMMER, G. LUTZ, Nucl. Instr. Meth. A 253 (1987) 365 21, 22
- [Kem87b] J. KEMMER et al., Nucl. Instr. Meth. A 253 (1987) 378 21, 22
- [Kem88] J. KEMMER, Physik in unserer Zeit 19-5 (1988) 150 6
- [Kem90] J. KEMMER et al., Nucl. Instr. Meth. A 288 (1990) 92 6
- [Key71] J. R. KEY, T. A. RABSON, IEEE Trans. Nucl. Sci. 18, 1 (1971) 184 15
- [Kha79] M. R. KHAN et al., Nucl. Instr. Meth. 160 (1979) 127 38

- [Kle68a] C. A. KLEIN, J. Appl. Phys. 39, 4 (1968) 2029 14
- [Kle68b] C. A. KLEIN, IEEE Trans. Nucl. Sci 15, 3 (1968) 214 14
- [Kle86] K. KLEINKNECHT, *Detectors for particle radiation*, Cambridge University Press, Cambridge (1986) 59
- [Kle98] R. KLEIN et al., J. Synchrotron Radiation 5 (1998) 451 105
- [Kno89] G. F. KNOLL, *Radiation Detection and Measurement*, 2. Edition, John Wiley & Sons, New York (1989) 16, 35, 37, 51, 59, 115
- [Kou71] V. O. KOSTROUN, M. H. CHEN, B. CRASEMANN, Phys. Rev. A 3 (1971) 553 68, 72
- [Kra79a] M. O. KRAUSE, J. Phys. Chem. Ref. Data 8 (1979) 307 73, 86
- [Kra79b] M. O. KRAUSE, J. H. OLIVER, J. Phys. Chem. Ref. Data 8 (1979) 329 70
- [Kru89] M. KRUMREY, E. TEGELER, G. ULM, Rev. Sci. Instr. 60 (1989) 2287 4
- [Kru90] M. KRUMREY, E. TEGELER, Nucl. Instr. Meth. A 288 (1990) 114 4
- [Lan89] D. A. LANDIS et al., IEEE Trans. Nucl. Sci 36 (1989) 185 37
- [Lar77] F. P. LARKINS, Atomic Data and Nuclear Tables 20 (1977) 311 72
- [Lec93] P. LECHNER et al., Nucl. Instr. Meth. A 377 (1993) 346 30
- [Lec95] P. LECHNER, L. STRÜDER, Nucl. Instr. Meth. A 354 (1995) 464 29, 83
- [Lec98] P. LECHNER, *Zur Ionisationsstatistik in Silicium*, Dissertation an der Technischen Universität München (1998) 14, 15, 16, 26, 29, 31, 76, 83, 125, 126
- [Lec00] P. LECHNER et al., *Multichannel silicon drift detectors for X-ray spectroscopy*, Proceedings of SPIE Vol. 4013, Conference on UV, optical and IR space telescopes and instruments, München (2000) 32
- [Leo94] W. R. LEO, *Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments*, Springer, Berlin (1994) 11
- [Li04] W. LI, *A Bibliography on 1/f Noise*, <http://www.nslj-genetics.org/wli/1fnoise/> (2004) 45
- [Lla77] J. LLACER, E. E. HALLER, R. C. CORDI, IEEE Trans. Nucl. Sci. 24 (1977) 53 28, 130, 138
- [Low00] B. G. LOWE, Nucl. Instr. Meth. A 439 (2000) 247 29, 38, 93, 99

- [Lum97] D. LUMB, SPIE 2 808 (1997) 326 1, 6
- [Lut96] G. LUTZ, Nucl. Instr. Meth. A 377 (1996) 234 26, 135
- [Lut99] G. LUTZ, *Semiconductor Radiation Detectors*, Springer (1999) 10, 12, 44
- [Mai90] T. MAISCH et al., Nucl. Instr. Meth. A 288 (1990) 19 24
- [Man62] H. M. MANN, IRE Trans. Nucl. Sci. 9-4 (1962) 43 37
- [Max91] J. C. MAXWELL, *Treatise on Electricity and Magnetism*, 3. Edition (1891), Nachdruck von Dover, New York (1954) 10
- [McW57] A. L. MCWHORTER, *1/f noise and germanium surface properties*, Semiconductor Surface Physics, Univ. Pennsylvania Press, Philadelphia (1957) 207 45
- [Mey65] O. MEYER, Nucl. Instr. Meth. 33 (1965) 164 16
- [Moc74] M. S. MOCK, SIAM J. Math. Anal. 5, 4 (1974) 597 10
- [Moc83] M. S. MOCK, *Analysis of mathematical models of semiconductor devices*, Boole Press, Dublin (1983) 10
- [Mos13] H. G. J. MOSELEY, *The High Frequency Spectra of the Elements*, Phil. Mag. (1913) 1024 69
- [Mül73] J. W. MÜLLER, Nucl. Instr. Meth. 112 (1973) 47 34
- [Mül90] R. MÜLLER, *Rauschen*, Halbleiter-Elektronik 15, Springer, Berlin (1990) 43, 46
- [Mus73] R. G. MUSKET, W. BAUER, Nucl. Instr. Meth. 109 (1973) 593 26
- [Mus74] R. G. MUSKET, Nucl. Instr. Meth. 117 (1974) 385 37
- [Nyg81] D. R. NYGREN, Phys. Scripta 23 (1981) 584 39
- [Nyq28] H. NYQUIST, Phys. Rev. 32 (1928) 110 44
- [Owe96] A. OWENS et al., Nucl. Instr. Meth. A 382 (1996) 503
- [Pah04] A. PAHLKE, *Einfluß der Oxidqualität auf die Stabilität von Halbleiterdetektoren bei Röntgenbestrahlung*, **Dissertation** an der Technischen Universität München (2003) 26, 28, 38, 43, 57, 135
- [Pap03] T. PAPP, X-Ray Spectrometry 32 (2003) 458 4
- [Peh68] R. H. PEHL et al., Nucl. Instr. Meth. 59 (1968) 45 15
- [Pel60] E. M. PELL, J. Appl. Phys. 31 (1960) 291 37
- [Pet82] H. PETERSEN, Optics Communications 40 (1982) 402 105

- [Pin93] E. PINOTTI et al., Nucl. Instr. Meth. A 326 (1993) 85 [43](#)
- [Pin95] E. PINOTTI et al., IEEE Trans. Nucl. Sci. 42-1 (1995) 12 [43](#), [50](#), [143](#)
- [Phi76] G. W. PHILLIPS, K. W. MARLOW, Nucl. Instr. Meth. 137 (1976) 525 [102](#)
- [Pop00a] M. POPP, *Untersuchung und analytische Modellierung der Systemantwort von p-n-CCD Detektoren*, **Dissertation** an der Ludwig-Maximilians-Universität München (2000) [26](#), [27](#), [29](#), [83](#)
- [Pop00b] M. POPP et al., Nucl. Instr. Meth. A 439 (2000) 567 [29](#), [83](#)
- [Pre92] W. H. PRESS, S. A. TEUKOLSKY, W. T. VETTERLING, B. P. FLANERNEY, *Numerical Recipes in C*, 2. Edition, Cambridge University Press, Cambridge (1992) [124](#)
- [Rad88] V. RADEKA et al., IEEE Trans. Nucl. Sci. 35, 1 (1988) 155 [30](#)
- [Rad89] V. RADEKA, *Implanted Silicon JFET on Completely Depleted High-Resistivity Devices*, IEEE Electron Device Letters 10, 2 (1989) [22](#), [43](#)
- [Ree72] S. J. B. REED, N. G. WARE, J. Phys. E 5 (1972) 582 [73](#), [78](#)
- [Reh85] P. REHAK et al., Nucl. Instr. Meth. A 235 (1985) 224 [21](#), [43](#)
- [Reh86] P. REHAK et al., Nucl. Instr. Meth. A 248 (1986) 367 [21](#)
- [Ric96] G. RICHTER et al., *ABRIXAS, A Broadband Imaging X-ray All-Sky Survey* in: L. BASSANI, G. DI COCCO (Hrsg.), *Imaging in High Energy Astronomy*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (1996) 159, Nachdruck aus Experimental Astronomy 6-4 [1](#), [6](#)
- [Roo50] W. VAN ROOSBROECK, Bell System Tech. J. 29 (1950) 560 [10](#)
- [Ros91] C. S. ROSSINGTON, J. T. WALTON, J. M. JAKLEVIC, IEEE Trans. Nucl. Sci. 38-2 (1991) 239 [26](#), [64](#)
- [San91] F. P. SANTOS et al., Nucl. Instr. Meth. A 307 (1991) 347 [14](#)
- [Sau77] F. SAULI, *Principles of Operation of Multiwire Proportional and Drift Chambers*, CERN Report 77-09 (1977) [39](#)
- [Sch94] F. SCHOLZE, G. ULM, Nucl. Instr. Meth. A 339 (1994) 49 [38](#), [39](#), [83](#), [119](#)
- [Sch97] F. SCHOLZE, *Quantenausbeute von Silicium für Photonen im Energiebereich von 50 eV bis 1 500 eV*, Verlag Oberhofer, Berlin (1997) [16](#), [26](#), [56](#), [126](#)
- [Sch98] F. SCHOLZE, H. RABUS, G. ULM, J. Appl. Phys. 84, 5 (1998) 2926 [16](#), [29](#), [88](#), [126](#), [130](#), [136](#), [138](#)

- [Sch99] A. SCHÜTTAUF et al., Nucl. Phys. A 661 (1999) 677c 39
- [Sch00] F. SCHOLZE et al., Nucl. Instr. Meth. A 439 (2000) 208 16, 83, 136
- [Sch01] F. SCHOLZE, M. PROCOP, X-Ray Spectrometry, 30 (2001) 69 37
- [Sel84] S. SELBERHERR, *Analysis and simulation of semiconductor devices*, Springer, Wien (1984) 10
- [Sen98] F. SENF et al., J. Synchrotron Radiation 5 (1998) 780 105
- [Shi83] K. SHIMA et al., Nucl. Instr. Meth. A 217 (1983) 515 38
- [Sho61] W. B. SHOCKLEY, Solid State Electr. 2 (1961) 35 14
- [Sku95] K. M. SKULINA et al., Appl. Opt. 34 (1995) 3727 66
- [Slo69] J. W. SLOTBOOM, Electr. Lett. 5 (1969) 677 10
- [Spi94] E. SPILLER, *Soft X-ray Optics*, SPIE, Bellingham, Washington (1994) 66
- [Sze81] S. M. SZE, *Physics of Semiconductor Devices*, Wiley, New York (1981) 46, 47, 83
- [Sze83] S. M. SZE, *VLSI Technology*, McGraw-Hill, New York (1983) 5
- [Tai80] W. H. TAIT, *Radiation Detection*, Butterworth-Heinemann, London (1980) 1, 59
- [Tie85] U. TIETZE, C. SCHENK, *Halbleiter-Schaltungstechnik*, Springer, Berlin (1985) 141
- [Tik97] T. TIKKANEN et al., Nucl. Instr. Meth. A 390 (1997) 329 38
- [Tho01] A. C. THOMPSON, D. VAUGHAN (Hrsg.), *X-Ray Data Booklet*, Center for X-Ray Optics and Advanced Light Source, LBNL/PUB-490 Rev. 2, Berkeley (2001) 147, 149
- [Thu75] C. D. THURMOND J. Electrochem. Soc. 122 (1975) 1133 7, 15
- [Tsu04] K. TSUJI, J. INJUK, R. VAN GRIEKEN *X-Ray Spectrometry: Recent Technological Advances*, John Wiley & Sons, New York (2004) 139
- [Ulm98] G. ULM et al., Proc. SPIE 3444 (1998) 610 105
- [Und81] J. H. UNDERWOOD, T. W. BARBEE, J. Applied Optics 20 (1981) 3027 66
- [Wan91] J. X. WANG, J. L. CAMPBELL, Nucl. Instr. Meth. B 54 (1991) 499 38, 56
- [Wen93] K. W. WENZEL et al., Rev. Sci. Instr. 64 (1993) 1723 4

- [Wer02] N. WERMES, *Detektorphysik*, Kursskript zur Vorlesung *Detektoren für Teilchen und Strahlung* an der [Universität Bonn](http://www.uni-bonn.de) im WS 2002/2003, <http://ltphys2k.physik.uni-bonn.de/Halbleiter/p2000/> 41
- [Wie76] L. WIELOPOLSKI, R. P. GARDNER, Nucl. Instr. Meth. 133 (1976) 303 34
- [Win86] G. WINSTEL, C. WEYRICH, *Optoelektronik II*, Halbleiter-Elektronik 11, Springer, Berlin (1986) 46
- [Wol01] WOLFRAM RESEARCH, *Mathematica 4.1*, <http://www.wolfram.com/> 143
- [Yac86] A. M. YACOUT, R. P. GARDNER, K. VERGHESE, Nucl. Instr. Meth. A 243 (1986) 121 38, 102
- [Yam79] T. YAMAYA et al., Nucl. Instr. Meth. 159 (1979) 181 16
- [Yeh85] J.-J. YEH, I. LINDAU, At. Data Nucl. Data Tables 32 (1985) 1 76
- [Yeh93] J.-J. YEH, *Atomic Calculations of Photoionization Cross Sections and Asymmetry Parameters*, Gordon and Breach, Langhorne, Pennsylvania (1993) 76
- [Zha81] J. H. ZHANG et al., *X-ray Fluorescence Analysis for Radioactive Isotopes*, Atomic Energy Publisher of China, 1981 59
- [Zul68] H. R. ZULLIGER, L. M. MIDDLEMAN, D. W. AITKEN, IEEE Trans. Nucl. Sci. 16 (1968) 47 16
- [Zul70] H. R. ZULLIGER, D. W. AITKEN, IEEE Trans. Nucl. Sci. 17 (1970) 187 14, 16
- [Zul71] H. R. ZULLIGER, J. Appl. Phys. 42, 13 (1971) 5 570 14

Index

- ϵ (Escape-Wahrscheinlichkeit), 78
 ϵ_{Gaus} (Full-Peak-Quanteneffizienz), 65
 ϵ_{total} (totale Quanteneffizienz), 64
 ζ (Grenzflächenreflexionskoeffizient), 92
 θ_j (diskreter Primärelektronenemissionswinkel), 89
 λ (Absorptionslänge), 59
 μ (Absorptionskoeffizient), 58, 59
 ρ (Dichte), 80
 σ (Energieauflösung), 17
 σ_i (Ionisationswirkungsquerschnitt), 76
 σ_{sek} (Breite der Sekundärelektronenverteilung), 83
 τ (Transmission), 62
 ϕ_i (diskreter Primärelektronenemissionswinkel), 89
 ω_j (Fluoreszenzausbeute des Elements j), 73
 c_k (diskreter Sekundärelektronenwolkenmittelpunkt), 89
 dN/dE (Spektralverteilung), 85
 d_p (Dicke der Schicht partieller Ladungssammlung), 84
 dR_{ex} (diskreter Elektronenreichweitenabschnitt), 90
 E (Elektronenenergie), 80
 E (Energieäquivalent eines ADC-Kanals), 86
 E_0 (Energie des Primärphotons), 60
 E_{Auger} (Auger-Elektronenenergie), 71
 E_{B} (Bindungsenergie), 60
 E_{F} (Fluoreszenzenergie), 69
 E_{Photo} (Photoelektronenenergie), 61
 E_{Rest} (Restenergie des angeregten Primäratoms), 92
 f_c (Anteil der entlang dR_{ex} deponierten Energie), 89
 f_d (energieäquivalenter Anteil der nachgewiesenen Sekundärelektronen), 91
 f_r (Primärelektronenrestenergie), 89
 g (Schalen-/Unterschalenindex), 93
 p_{esc} (Escape-Peak-Intensität), 78
 p_i (Wahrscheinlichkeit für Ionisationsstreuung), 82
 p_M (Absorptionswahrscheinlichkeit in der Metallisierung), 67
 p_p (Absorptionswahrscheinlichkeit in der Schicht partieller Ladungssammlung), 68
 R_{ex} (extrapolierte Elektronenreichweite), 80
 r_{pri} (Primärelektronenreichweite), siehe R_{ex}
 r_{sek} (Sekundärelektronenreichweite), 83
 $r_z^{i,j}$ (projizierte Elektronenreichweite), 89
 s_c (Anzahl der Sekundärelektronenwolkenmittelpunkte), 89
 s_p (Anzahl der diskreten Primärelektronenemissionswinkel), 89
 u_i (Unterschalenabsorptionswahrscheinlichkeit), 77
 Z (Kernladungszahl), 59
 z_n (diskreter Absorptionsort im Eintrittsfenster), 87
 z_n (Anzahl der diskreten Absorptionsorte), 87

- ADC, 33, 35
 Konversionszeit, 35, 36
 Linearität, 107
 Nichtlinearität, 18
 Pile-up-Rejecter, 34
- Alpha-Strahlung, 11
- Aluminiumschicht, 23–26, 65, 68, 96–98, 135, 139
 Fluoreszenz, 86
 Nutzen, 26
 Photonenabsorption, 26, 64, 66, 69, 93, 101, 115
 pin-Diode, 12
 Reflexion, winkelabhängig, 66, 67
- Anode, 9, 20–25, 30–32, 39, 43, 46, 47, 57, 135
- Atom
 äußere Schale, 58, 59
 Bindungszustand, 71
 -hülle, 58
 innere Elektronen, 61, 147
 ionisiert, 8, 15, 68, 71, 74
 ungebunden, 6, 18
- Auger-Effekt, 61, 71–75, 93, 99
- Auger-Elektron, 28, 29, 71–76, 88, 93
 Emissionswinkel, 89
 Energie, 71, 72, 92–96, 130, 137
 Nomenklatur, 72
 Reichweite, 84, 88, 93, 97
- Auslese
 -elektronik, 33, 35, 41
 -struktur, 13, 30, 32, 57
- Bandlücke, 6, 7, 14, 15, 47, 49
 Energie, 6, 7, 10, 14, 15, 61, 82, 133
- Bandstruktur v. Halbleitern, 6
- BESSY II, 105, 138, 165
- Beta-Strahlung, 11
- Bremsspektrum, 137, 147
- Bremsstrahlung, 79, 146, 147
- CCD, 1, 2, 4, 6, 21, 43, 158
 coincident escape, 93
 Compton-Streuung, 58–60
 Coster-Kronig-Übergang, 72, 75
- Depletionszone, *siehe* Raumladungszone
- Dotierung, 7–9, 12, 13, 37
- Driftfeld, 3, 21–24
- Eintrittsfenster, 2, 24
 CCDs, 4
 Dicke, 84
 inhomogenes, 21
 Kondensation, 61
 Ladungsverluste, 26–28, 87, 88
 SDD, 4, 19, 24
 Si(Li)s, 4, 37–39, 92, 99, 135, 136
 Strahlenhärte, 135
- Elektron-Positron-Paar, 12
- Elektronen
 Al-, 26, 64, 85, 96–99, 103, 104, 113, 126–129, 138
 Ionisationsvermögen, 81
 Primär-, *siehe* Primärelektron
 Sekundär-, *siehe* Sekundärelektronen
 Si-, 28, 114, 126–129
- Elektronik
 Auslese-, 33, 35, 41
 Rauschen, 2, 43
- Energieauflösung, 1, 2
 Definition, 16
 elektronisches Rauschen, 17, 41–45
 Fano-Grenze, 17
 FWHM, 18
 Gasdetektor, 18, 39
 großflächige SDDs, 53, 54
 Kalibrierung, 18
 Mehrkanal-SDD, 33
 pin-Diode, 2, 41
 Quanteneffizienz, 132
 SDD, 3, 22
 Si(Li), 3, 37, 38
 WDXRS, 140
 Zählratenabhängigkeit, 109
- Escape-Effekt, 18, 19, 65, 66, 78, 86, 87, 132
- Fluoreszenzausbeute, 73, 78, 86, 121

- GaAs, 1, 11, 136
 Gaußsche Fehlerfunktion, 102, 104
 Gaußverteilung, 16, 65, 102, 104, 114, 117, 123
 Halbwertsbreite, 18
 Gehäusefenster, 24, 61
 Be-, 22, 24, 63
 Polyimid-, 24, 62
 Transmission, 62, 63
 Germanium, 1, 6, 7, 11, 136

 ICC (incomplete charge collection), *siehe* Ladungssammlung, unvollständige, Eintrittsfenster
 Ionisationsstatistik, 14–16, 38, 55, 56, 156
 Ionisationswirkungsquerschnitt, 76, 77, 135

 Kalibrierung, 18, 33, 43, 107–109, 112, 145
 Kaonen, 12
 Kapazität
 Halbleiterdetektor, 12–14, 22, 32, 39, 49, 133, 141
 Streu-, 32, 48
 Transistor, 22, 32, 137
 Kaskadenelektronen, *siehe* Primärelektronen
 Kollimator, 22, 23, 140
 Kontinuumstrahlung, 146, 147

 Ladungssammeleffizienz, 2, 27, 29, 83, 89, 131
 Ladungssammelzeit, 55
 Ladungssammlung
 unvollständige, 96
 abhängig von der Elektronenreichweite, 93, 94
 Auslesestruktur, 30
 coincident escape, 93
 Eintrittsfenster, 58, 65, 68, 84, 87, 93
 Energieabhängigkeit, 4
 Schichtdicke, 85, 121
 Spektralanteile, 101, 111, 112
 Untergrunderzeugung, 19
 Veranschaulichung, 27
 Verringerung von $\varepsilon_{\text{Gaus}}$, 133
 vollständige, 27, 84, 93, 121, 127
 Lambert-Beer-Gesetz, 59
 Leckstrom, 2, 22, 31, 32, 38, 46–50, 52–54, 137
 Leitungsband, 6, 7, 11, 14, 15, 37, 47, 134
 Licht, sichtbares, 11

 Mars-Rover, 41
 Monte-Carlo-Simulation, 56, 88, 99

 Neutronen, 12
 Normalverteilung, *siehe* Gaußverteilung

 p-n-Übergang, 4–9, 138
 peak-to-background-ratio, 19, 110
 Photoeffekt, 14, 58, 60, 61, 68
 pin-Diode, 1–3, 12–14, 136
 Kapazität, 13
 simuliertes Spektrum, 41, 42
 Pionen, 12
 Plangittermonochromator, 105–107, 112
 Plangittermonochromatorstrahlrohr, 105, 106, 123, 165
 Primärelektron, 14, 27–29, 79, 88, 138
 Al-, 26, 64, 85
 Ausbreitung, 84, 88, 93–97, 137
 Berechnung der Anzahl, 56
 Energie, 26, 28, 64, 96, 102, 133
 Energiedeposition, 79, 81, 89, 128
 Erzeugung, 11, 74, 83
 Generation von Sekundärelektronen, 56
 hochenergetisches, 64, 93, 94, 96, 103, 135
 niederenergetisches, 64, 93, 94
 Reichweite, 66, 80, 84, 85, 88, 93–96, 133
 Restenergie, 89
 Si-, 28, 93
 Verlust, 103, 133
 Verlust beider, 93
 Protonen, 12

Index

- Pulsformer, 33–35, 49, 107, 141
Pulsformungszeit, 35, 36, 39, 43, 48–53, 143
 Zusammenhang mit Rauschen, 49, *siehe* Rauschen
- Quanteneffizienz, 1–3, 20, 62–65
 Full-Peak, 65, 66, 84, 120, 132
 totale, 63–65, 99, 123, 131–133
- Raumladungszone, 8, 9, 12, 20, 21, 47
- Rauschen
 $1/f$, *siehe* niederfrequentes
 Grundlagen, 41–43
 niederfrequentes, 45, 143
 paralleles, *siehe* Schrot-physikalische Ursachen, 43
 Schrot-, 46, 143
 serielles, *siehe* thermisches
 thermisches, 43, 44, 142
 Zusammenhang mit Pulsformungszeit, 49, 141–143
- Reflexion
 Verlust von Photonen, 66, 67
- Relaxation, 74
- RFA, *siehe* Röntgenfluoreszenzanalyse
- Röntgenastronomie, 1, 2
Röntgenfluoreszenz, 41, 69
Röntgenfluoreszenzanalyse, 1, 139, 140
Röntgenphoton, *siehe* Röntgenquant
Röntgenquant, 14–19, 26, 28–30
 Energie, 18
Röntgenröhre, 146
Röntgenstrahlung, 1, 2, 11
 Absorption, 24
 Energie, 14, 23, 29
 Erzeugung, 145
 hochenergetische, 27, 37
 Kontinuumstrahlung, 146
 Nachweis, 11
 niederenergetische, 3, 4, 23–26, 28, 43
 Wechselwirkung mit Materie, 58
- Schrotrauschen, *siehe* Rauschen, Schrot-
Seitwärtsdepletion, 20
Seitwärtsdepletion, 20
Sekundärelektronen, 81–83, 88
 Berechnung der Anzahl, 56, 91
 Energie, 82, 138
 Erzeugung, 11, 14, 28, 56, 68, 74, 83, 90
 hochenergetische, 134
 Reichweite, 83–85, 87, 89, 93–101, 113, 118, 123, 124, 130–135
 Verlust, 29, 83, 91, 133
 Verteilung, 137
 -wolke, 83, 89, 90, 97, 128, 136
- Shaper, *siehe* Pulsformer
- Si(Li), 2, 3, 7, 14, 37–39
- Siliziumdriftdetektor
 Driftfeld, 24
 Eigenschaften, 3, 22
 Einsatzgebiete, 1, 11
 Funktionsweise, 21, 22
 großflächiger, 33, 54
 Kollimator, 23
 Koordinaten, 23
 Ladungsverluste, 57
 Mehrkanal, 32, 33, 55
 -modul, 22, 23, 41
 Photonenabsorption, 61, 62
 Randbereich, 135, 136
 Rauschmessung, 50, 51
 Schema, 21
 Transistorsteilheit, 45
 Tropfenstruktur, 43, 57
 Waferdicke, 64
- Strahleneintrittsfenster, *siehe* Eintrittsfenster
Strahlenhärte, 2, 135
Strahlenschäden, 26, 28, 47
Synchrotronstrahlung, 105, 136, 147–150
- Undulator, 105, 149, 150
- Valenzband, 6, 7, 14, 15, 47, 71

Danksagung

Professor Fred Koch, Ph.D. danke ich sehr herzlich für seine Unterstützung und die Betreuung dieser Arbeit.

Dr. Josef Kemmer hat es mir ermöglicht, diese Arbeit bei **Ketek** durchzuführen, mich dabei stets in jeder Hinsicht unterstützt und sehr viele hilfreiche Anregungen gegeben.

Dr. Peter Goldstraß und Dr. Oliver Boslau haben sich stets für meine Fragen zur Halbleiter- und Detektorphysik Zeit genommen und mir in unzähligen Diskussionen sehr wertvolle Hinweise gegeben.

Ralf Stötter und Dr. Andreas Pahlke haben in Diskussionen über Elektronik und Physik des SDD ebenfalls in vielfältiger Weise zu dieser Arbeit beigetragen.

Susanna Kemmer, Jörg Rumpff und Christian Unger danke ich besonders für technische Zeichnungen und die Montage der Module und spezieller Aufbauten.

Auch den anderen Kollegen bei Ketek, Melanie Demirovic, Gaokui He, Steffen Pahlke, Traute Kemmer, Dr. Paolo Leutenegger, Hana Stetinova, Silvia Wallner, Andreas Wallner, Dr. Florian Wiest und Yinxiang Yang, danke ich sehr für ihre Hilfe und das sehr gute Arbeitsklima.

Dr. Burkhard Beckhoff von der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt danke ich für die Strahlzeit am BESSY II. Er und Jan Weser haben mich bei den Messungen am PGM professionell unterstützt und stets für eine optimale Strahlqualität gesorgt.

Klaus Kromer von der Firma Röntec hat nicht nur die XFlash-Ausleseelektronik zur Verfügung gestellt, sondern auch sehr engagiert während der gesamten Strahlzeit zum Gelingen der Messungen beigetragen.

Elisabeth Gruber danke ich ganz besonders für ihr Verständnis, ihre Geduld und Unterstützung!