

BAM-BERICHT Nr. 40 DER BUNDESANSTALT FÜR
MATERIALPRÜFUNG (BAM)
BERLIN

Zum Untergrundabzug bei
energiedispersiven Spektren
nach verschiedenen Verfahren

von Dr. rer. nat. H. Hantsche

35 Seiten mit 44 Abbildungen und 4 Tabellen

Herausgegeben von der
Bundesanstalt für Materialprüfung (BAM)
Unter den Eichen 87, 1000 Berlin 45
Telefon (030) 8104-1
Telex 01-83 261 bamb d

Inhaltsverzeichnis	Seite
1. Allgemeines	1
2. Verschiedene lineare Abzugsverfahren	1
3. Beschreibung der Spektren und des Auswerteverfahrens	6
4. Ergebnisse	32
5. Bewertung der Abzugsverfahren	33
Zusammenfassung	35
Literatur	35

1. Allgemeines

Für die Genauigkeit einer quantitativen Analyse bei Spektren von energie-dispersiven Analysatorsystemen ist die Güte des Bremsstrahlungsuntergrundabzuges von entscheidender Bedeutung. Wegen des gekrümmten Verlaufes des Untergrundes, dem die auszuwertenden Peaks der charakteristischen Strahlung überlagert sind, und wegen des möglichen Auftretens von Absorptionskanten kann ein linearer Untergrundabzug, wie er bei Spektren, die aus Geräten mit Kristallspektrometern stammen, üblich ist, zu falschen Resultaten führen.

Im Rahmen der Automatisierung der Laboratorien ist es erwünscht, den Untergrund des gesamten Spektrums mit Hilfe von Rechnern zu eliminieren und alle signifikanten Peaks auszulisten. Von einigen Firmen sind dazu Programme entwickelt worden, die für relativ viel Geld gekauft werden müssen und über deren Güte nichts Zuverlässiges bekannt ist. Um die Qualität der von der Firma EDAX verwendeten Programme in bezug auf den Untergrundabzug zu prüfen, wurden verschiedene Spektren künstlich hergestellt, derart, daß Peak und Untergrund getrennt erzeugt wurden, so daß der wahrscheinlichste ("wahre") Wert bekannt ist, der sich als Resultat ergeben sollte. Die Spektren wurden auf Lochstreifen gestanzt und befreundeten Instituten* mit der Bitte übersandt, diese der EDAX-Background-Subtraction-Procedure zu unterwerfen. Anschließend wurden die Spektren auch der Firma EDAX selbst zur Verfügung gestellt. Außerdem wurden die Spektren dazu benutzt, zwei eigene Verfahren zu testen. Bei dem ersten handelt es sich um ein Korrekturverfahren nach Schwarz [1], über das demnächst berichtet werden wird. Das zweite Verfahren, das mit "Korrelation" bezeichnet ist, läßt einen gaußförmigen Korrelator über das Spektrum gleiten, nachdem zuvor der Mittelwert über die Breite des Korrelators abgezogen wurde (Methode Connelly/Black) [2].

2. Verschiedene lineare Abzugsverfahren

Die Ermittlung des "wahren" oder "Soll"-Wertes, der dann als Bezugswert gelten soll, ist nicht ganz problemlos. Das mit der radioaktiven Co_{57} -Quelle erzeugte "reine" Spektrum enthält nämlich neben den Fe-K_{α} - und Fe-K_{β} -Peaks auch einen Untergrundanteil, der nicht vernachlässigt werden kann, jedoch linear abgezogen werden darf. Hierbei kann eine gewisse Willkür nicht ganz vermieden werden. Sie bezieht sich auf den abzuziehenden Betrag, so daß sich etwas voneinander verschiedene Sollwerte ergeben können. Es handelt sich dabei um folgende Punkte:

- a) Wahl der Fensterbreite, innerhalb der der darin befindlich Peak aufsummiert wird,
- b) Auswahl der Stellen rechts und links vom Peak, an denen der Peak als beendet angesehen wird,
- c) Zahl der Kanäle, aus denen der Untergrund gemittelt wird,
- d) Wahl des linearen Abzugsverfahrens.

Zu a, b, c): Da die zu wählende Fensterbreite davon abhängt, wie weit der nächste Peak entfernt ist, wurde zur Ermittlung willkürlich folgende Festsetzung eingeführt:

*Dr. J. Ungelenk, Philips Forschungslaboratorium Aachen
Prof. Dr. P. Rhyder, Universität Bremen

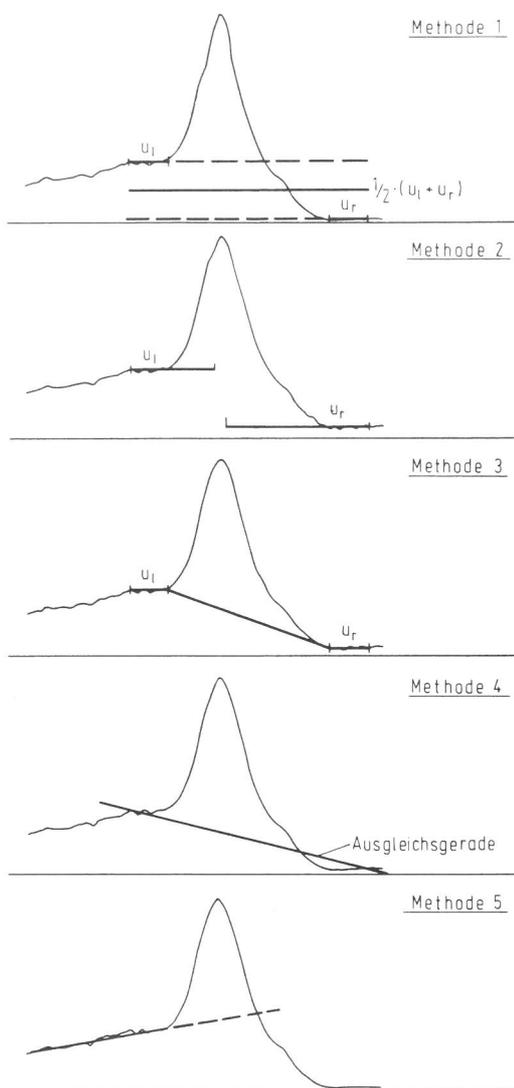


Bild 1
5 verschiedene Methoden des linearen Untergrundabzuges

Für die Fe- K_{α} - und K_{β} -Peaks wird in den Bereichen 6000 - 6180 eV und 6600 - 6780 eV bzw. 7200 - 7380 eV jeweils das absolute Minimum gesucht. Von diesem Kanal ausgehend werden dann je 3 Kanalhalte nach rechts und links fortschreitend hinzuaddiert und aus diesen 7 Werten der Mittelwert gebildet. Dieser wird dann - auf ganze Impulse gerundet - als Untergrund u auf der jeweiligen Seite des Peaks angesehen.

Zu d): Die so errechneten Werte u_l und u_r für den Untergrund links und rechts vom Peak können nun in verschiedener Weise vom (Brutto-) Peakinhalt subtrahiert werden (s. Bild 1).

1. Man kann den Mittelwert $1/2 \cdot (u_l + u_r)$ bilden, diesen dann mit der Zahl der Kanäle, über die summiert wurde, multiplizieren und diesen Wert vom gesamten Peakinhalt subtrahieren.
2. Man kann u_l auf der linken Seite des Peaks bis ausschließlich zum Maximum abziehen und danach u_r auf der rechten Seite, wobei vom Maximum der Mittelwert aus beiden abgezogen wird.
3. Am korrektesten ist es wahrscheinlich, zwischen den beiden Werten u_l und u_r über die gesamte Fensterbreite linear zu interpolieren und die interpolierten Werte vom jeweiligen Kanalinhalt zu subtrahieren, wobei negative Werte als Null gerechnet werden. Nur in Fällen, wo das Fenster symme-

trisch zum Peakmaximum liegt, kann sich eine Übereinstimmung mit dem Resultat der anderen beiden Verfahren ergeben.

4. Ein 4., hier nicht angewandtes Verfahren würde darin bestehen, durch alle als Untergrund angesehenen 14 Punkte eine Ausgleichsgerade zu legen.
5. In Fällen, wo Absorptionskanten vorliegen, wurde auch schon vorgeschlagen, nur Werte von der linken Seite des Peaks zum Untergrundabzug heranzuziehen und die daraus ermittelte Ausgleichsgerade bis auf die rechte Seite des Peaks zu extrapolieren. Nach unseren Untersuchungen führt dieses Verfahren wegen der starken Streuung der Punkte - und damit der Steigung der Ausgleichsgeraden - zu unbrauchbaren Resultaten.
6. Man könnte jedoch die Lage der Absorptionskante aus Tabellen entnehmen und in gleicher Weise wie bei Verfahren 2 den Untergrund u_l bzw. u_r getrennt abziehen.

Von allen Verfahren, die den Untergrundverlauf durch Parabeln oder Kurven noch höheren Grades annähern wollen, wurde vorerst abgesehen.

Die Tabelle 1 zeigt, daß die Ergebnisse bei Anwendung der ersten 3 Abzugsverfahren etwas voneinander abweichen können. Als Sollwert wurde der Mittelwert aus den 3 Verfahren genommen. Bei allen Peaks der vorliegenden Arbeit wurde so vorgegangen, daß versucht wurde, den gesamten Flächeninhalt der Peaks zu bestimmen. Die Firma EDAX empfiehlt jedoch, die Breite der Energiefenster für die Analyse stets so zu wählen, daß sie etwa der 1,2-fachen Halbwertsbreite (FWHM) entsprechen, um ein optimales Signal-Rauschverhältnis zu erhalten, was auch sinnvoll ist.

Bild Nr.	Lochstr. Nr.	Spektr. Nr.	Linie	Peakinh. (brutto)	Zahl der Kanäle	Untergrund		Lineare Abzugsverfahren			Statist. Fehler d. Brutto-Peakinh.	Sollwert	Rel. Fehler in %
						u_l	u_r	$(u_l+u_r):2$	u_l, u_r	$u_l \rightarrow u_r$			
4	1	2	K_α	7 878	41	6	8	7 591	7 595	7 592	+ 89	7 593	+ 1,2 %
			K_β	1 267	38	8	3	1 058	1 046	1 064	+ 36	1 056	+ 3,4 %
8	1	3	K_α	11 790	38	124	124	7 078	7 078	7 078	+ 109	7 078	+ 1,5 %
			K_β	6 103	40	124	134	943	978	1 004	+ 78	975	+ 8,0 %
14	2	3 - 1	K_α	10 665	42	9,4	7,1	10 318	10 315	10 320	+ 103	10 318	+ 1,0 %
			K_β	1 561	35	7,1	8,9	1 281	1 286	1 282	+ 40	1 283	+ 3,1 %
21	2	4 - 1	K_α	21 173	42	17	16	20 480	20 479	20 476	+ 146	20 478	+ 0,7 %
			K_β	3 142	32	18	19	2 550	2 548	2 550	+ 56	2 549	+ 2,2 %
28	2	5 - 1	K_α	52 900	43	42	44	51 051	51 049	51 056	+ 230	51 052	+ 0,5 %
			K_β	8 033	39	44	20	6 785	6 833	6 782	+ 90	6 800	+ 1,3 %

Tabelle 1 Zur Berechnung der Sollwerte

Man kann den Integrationsbereich nun auch für die korrigierten Peaks ebenfalls entsprechend einem 1,2-fachen oder 2-fachen der FWHM wählen und erfaßt dann damit 84 % bzw. 98 % der Gesamtfläche eines idealen Gaußpeaks. Die Sollwerte müssen dann vor dem Vergleich mit der entsprechenden Prozentzahl multipliziert werden. Statt dessen kann man auch die Zahl der Kanäle festlegen, die gerade etwa diesen Integrationsbreiten entsprechen; bei Fe- K_α wären das dann 11 bzw. 17 Kanäle à 20 eV. Bei Peaks, die an ihren Fußpunk-

Lochstr. Nr.	Spektr. Nr.	Bild Nr.	Bezeichnung	Sollwert und sein statist. Fehler in %	Lineare Abzugsverfahren		
					Meth. 1 (u_1+u_r):2	Meth. 2 u_1, u_r	Meth. 3 $u_1 \rightarrow u_r$
1	2	4	Fe-K $_{\alpha}$, 20 sec	7 593 \pm 1,2 %	—	—	—
			Fe-K $_{\beta}$, 20 sec	1 056 \pm 3,4 %	—	—	—
1	3	8	Fe-K $_{\alpha}$, 420sec	7 078 \pm 1,5 %	—	—	—
			Fe-K $_{\beta}$, 420sec	975 \pm 8,0 %	—	—	—
2	3	14	Fe-K $_{\alpha}$, 20 sec	10 318 \pm 1,0 %	10 568 = + 2,4%	10 892 = + 5,6%	10 819 = + 4,9%
			Fe-K $_{\beta}$, 20 sec	1 283 \pm 3,1 %	592 = -53,9%	946 = -26,3%	693 = -46,0%
2	4	21	Fe-K $_{\alpha}$, 40 sec	20 478 \pm 0,7 %	20 869 = + 1,9%	20 965 = + 2,4%	20 871 = + 1,9%
			Fe-K $_{\beta}$, 40 sec	2 549 \pm 2,2 %	2 812 = +10,3%	2 164 = -15,1%	2 826 = +10,9%
2	5	28	Fe-K $_{\alpha}$, 100sec	51 052 \pm 0,5 %	50 921 = - 0,3%	51 064 = 0 %	50 918 = - 0,3%
			Fe-K $_{\beta}$, 100sec	6 800 \pm 1,3 %	6 733 = - 1,0%	6 259 = - 8,0%	6 733 = - 1,0%
		34	Cl-Abs.kante	???	69 460	74 739	65 580
5		39	Kunstpeaks	55 364	56 998 = + 3,0%	58 636 = + 5,9%	56 962 = + 2,9%
				8 312	9 222 = +11,0%	9 524 = +14,6%	9 357 = +12,6%

Tabelle 2

Ergebnisse des nach den verschiedenen Verfahren durchgeführten Untergrundabzuges

ten stark von der Gaußform abweichen oder nach dem Untergrundabzug Ansätze zu Nebenmaxima zeigen, kann eine derartige Einengung des Integrationsbereiches zu etwas geringeren relativen Fehlern führen, als in der Tabelle 2 angegeben. Das trifft insbesondere für das Programm EDIT 7/EM zu, dessen Fehler sich dann z. T. erheblich reduzieren. Für das Programm EDIT 1/707

EDIT 1/707	EDIT 7./EM	EDAX 7./EP	Korrektur nach Schwarz	Korrelation	Max. zul. Fehler (1 σ)
6 900 = - 9,1%	7 683 = + 1,2%	_____	7 614 = + 0,3 %	7 924 = + 4,4 %	± 1,2 %
780 = -26,1%	1 029 = - 2,6%	_____	1 051 = - 0,5 %	1 058 = + 0,2 %	± 3,4 %
6 180 = -12,7%	7 727 = + 9,2%	_____	7 094 = + 0,2 %	7 511 = + 6,1 %	± 1,5 %
430 = -55,9%	952 = - 2,4%	_____	873 = -10,5 %	985 = + 0,3 %	± 8,0 %
6 418 = -37,8%	10 904 = + 5,7%	10 905 = + 5,7%	10 089 = - 2,2 %	10 221 = - 0,9 %	± 4,1 %
0 = - 100 %	785 = -38,8%	_____	1 603 = +24,9 %	1 413 = +10,1 %	± 24,3 %
15 464 = -24,5%	21 897 = + 6,9%	21 897 = + 6,9%	20 222 = - 1,2 %	20 304 = - 0,8 %	± 1,9 %
858 = -66,3%	2 108 = -17,3%	2 108 = - 17,3%	2 581 = + 1,3 %	2 720 = + 6,7 %	± 14,1 %
43 684 = -14,4%	56 817 = +11,3%	56 817 = + 11,3%	50 766 = - 0,6 %	51 027 = - 0,1 %	± 0,8 %
3 200 = -52,9%	7 012 = + 3,1%	7 012 = + 3,1%	6 621 = - 2,6 %	6 591 = - 3,1%	± 5,4 %
74 726	(141 980)	_____	78 133	66 076	_____
57 380 = + 3,6%	67 770 = +22,4%	_____	56 999 = + 3,0 %	58 999 = + 6,6 %	± 0,8 %
8 526 = + 2,6%	14 100 = +69,6%	_____	9 636 = + 15,9 %	13 763 = +65,6 %	± 3,0 %

trifft dies nicht zu, da die korrigierten Peaks ohnehin meist nicht breiter sind als 1,5 - 2,2 FWHM.

Da die Halbwertsbreite jedoch über das Spektrum nicht konstant ist und die Festlegung des Integrationsbereiches einer gewissen Willkür unterliegt, wurde hier zunächst bei allen Verfahren über die gesamte Peakfläche integriert. Um etwaigen Einwänden zu begegnen, wurden dann alle Rechnungen nochmals für einen eingegengten Integrationsbereich von 15 Kanälen durchgeführt. Die Ergebnisse zeigt Tabelle 2 a.

Lstr./ Sp.-Nr.	Bezeichnung	Sollwert und sein statist. Fehler in %	Linearer Abzug (Meth. 1)	EDIT 1/707	EDIT 7./EM/EP	Korrektur nach Schwarz	Korrelation	Max. zul. Fehler (1 σ)
1 / 2	Fe-K $_{\alpha}$, 20 s	7 291 \pm 1,2 %	—	6 778 = - 7,0 %	7 317 = + 0,4 %	7 298 = + 0,1 %	7 445 = + 2,1 %	\pm 1,2 %
	Fe-K $_{\beta}$, 20 s	1 008 \pm 3,3 %	—	776 = -23,0 %	986 = - 2,2 %	1 008 = \pm 0,0 %	995 = - 1,3 %	\pm 3,3 %
1 / 3	Fe-K $_{\alpha}$, 420 s	6 930 \pm 1,4 %	—	6 142 = -11,4 %	7 246 = + 4,6 %	6 869 = - 0,9 %	7 057 = + 1,9 %	\pm 1,4 %
	Fe-K $_{\beta}$, 420 s	957 \pm 5,6 %	—	426 = -55,5 %	904 = - 5,5 %	869 = - 9,2 %	926 = - 3,2 %	\pm 5,6 %
2/ 3	Fe-K $_{\alpha}$, 20 s	9 855 \pm 1,0 %	10 410 = + 5,6 %	6 385 = -35,2 %	10 356 = + 5,1 %	9 832 = - 0,2 %	9 604 = - 2,5 %	\pm 2,6 %
	Fe-K $_{\beta}$, 20 s	1 239 \pm 3,0 %	968 = -21,8 %	0 = -100 %	785 = -36,6 %	1 353 = + 9,2 %	1 328 = + 7,2 %	\pm 18,9 %
2 / 4	Fe-K $_{\alpha}$, 40 s	19 466 \pm 0,7 %	19 993 = + 2,7 %	15 294 = -21,4 %	20 455 = + 5,1 %	19 500 = + 0,2 %	19 078 = - 2,0 %	\pm 1,4 %
	Fe-K $_{\beta}$, 40 s	2 490 \pm 2,1 %	2 181 = -12,4 %	858 = -65,5 %	2 108 = -15,3 %	2 413 = - 3,1 %	2 555 = + 2,6 %	\pm 9,5 %
2 / 5	Fe-K $_{\alpha}$, 100 s	48 594 \pm 0,5 %	48 890 = + 0,6 %	42 954 = -11,6 %	51 267 = + 5,5 %	48 615 = \pm 0,0 %	47 944 = - 1,3 %	\pm 0,7 %
	Fe-K $_{\beta}$, 100 s	6 463 \pm 1,3 %	6 063 = - 6,2 %	3 200 = -50,5 %	6 237 = - 3,5 %	6 265 = - 3,1 %	6 192 = - 4,2 %	\pm 3,8 %
5 / 5	Kunstp. 1 :	52 372	56 081 = + 7,1 %	54 456 = + 4,0 %	59 623 = +13,9 %	55 094 = + 5,2 %	55 435 = + 5,8 %	\pm 0,6 %
	2 :	8 148	9 525 = +16,9 %	8 502 = + 4,3 %	11 562 = +41,9 %	9 570 = +17,5 %	12 932 = +58,7 %	\pm 2,3 %

Tabelle 2 a

Wie Tabelle 2, jedoch auf 15 Kanäle eingeeingter Integrationsbereich

3. Beschreibung der Spektren und des Auswertverfahrens

Lochstreifen 1:

Das 1. Spektrum enthält einen bei 30 kV Anregungsspannung an reiner Spektalkohle erzeugten Bremsstrahlungsuntergrund (s. Bild 2 a, b) im Bereich 4 - 12 keV, der ab 8 keV stark ansteigend ist. Das Korrekturprogramm EDIT 7-EM findet in diesem Untergrund 9 kleinste Peaks (s. Bild 3 a, b), die bis auf einen wohl alle als unreal anzusehen sind. Das Programm EDIT 1/707 findet darin, wie es sein muß, keine Peaks.

Das 2. Spektrum enthält die während einer Zeit von 20 sec von der radioaktiven Co $_{57}$ -Quelle erzeugten Fe-K $_{\alpha}$ - und K $_{\beta}$ -Peaks, die noch mit einem geringen Untergrund behaftet sind (Bild 4).

Dieser Untergrund wurde nach den unter 2. beschriebenen 3 Verfahren linear abgezogen und gemittelt (Sollwert). Als statistischer Fehler wurde die Wurzel der Impulszahl des (unkorrigierten) Brutto-Peakinhalts genommen (entsprechend einer Standardabweichung von 1 σ) und diese in Relation zum Sollwert (!) gesetzt. Innerhalb dieses Fehlerbereiches (letzte Spalte der Tabelle 1) sollten also auch die von den Korrekturprogrammen errechneten Werte liegen. Die Tabelle 2 gibt die Ergebnisse der einzelnen Untergrundabzugsverfahren

wieder nebst den Angaben über die prozentuale Abweichung vom Sollwert. Bereits in diesem einfachsten Fall eines gaußförmigen Peaks mit nur geringem Untergrund ergeben sich erhebliche Fehler. Auf den Bildern 5 - 7 sind die entsprechenden Ausdrücke und graphischen Darstellungen nach dem Untergrundabzug wiedergegeben.

Das 3. Spektrum (Bild 8) entstand dadurch, daß zum Spektrum Nr. 1 des reinen Bremsuntergrundes (Bild 2) 20 sec lang die Impulse der Co_{57} -Quelle hinzuakkumuliert wurden. Es hätten sich nun nach dem Abzug des Untergrundes die gleichen Nettowerte wie von Spektrum 2 (Co-Quelle allein) ergeben sollen. Wie man aus Tabelle 1, Spalte "Lineare Abzugsverfahren" entnimmt, war das nicht der Fall, sondern es ergaben sich um einige Prozente niedrigere Werte. Der Fehler ist wahrscheinlich darauf zurückzuführen, daß die tatsächlichen Analysenzeiten voneinander abwichen und nicht den voreingestellten 20 sec entsprachen. Die Ergebnisse des Untergrundabzuges von Spektrum 3 sind aus den Bildern 9 - 11 zu entnehmen. Die Gesamt-Nettointensitäten der Peaks sind mitangegeben.

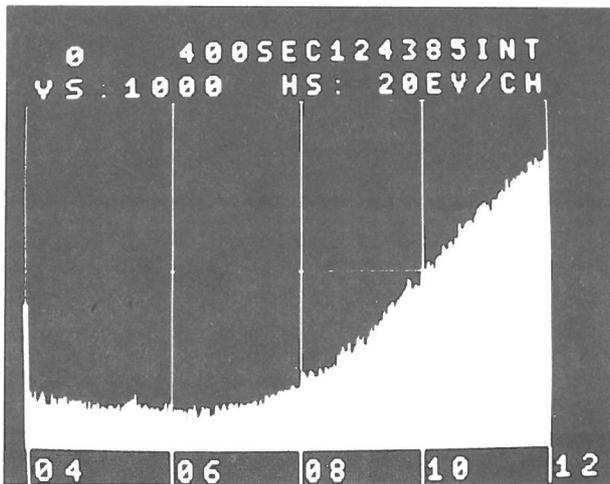


Bild 2
Verlauf des an Spektralkohle erzeugten reinen Bremsuntergrundes (Lstr. 1, Sp. 1)
a) Abbildung
b) Ausdruck (vollständig)

1. Reines Bremsspektrum, erzeugt mit Spektralkohle bei 30 KV

04000	400	157	153	167	138	166	156	127	138	153
04200	160	162	145	120	152	118	153	162	136	156
04400	119	149	138	138	142	145	155	120	139	130
04600	155	134	132	132	135	134	136	122	132	133
04800	109	150	132	108	129	124	123	131	130	108
05000	120	122	117	115	109	143	121	138	116	112
05200	114	125	153	103	120	119	138	124	140	129
05400	136	141	139	168	153	116	127	138	110	119
05600	124	130	123	115	111	120	119	112	108	117
05800	123	109	103	124	108	129	139	101	131	123
06000	116	98	128	107	120	104	120	107	116	101
06200	135	104	81	122	112	115	107	127	126	106
06400	79	92	102	126	118	91	122	112	116	93
06600	93	105	91	124	126	119	111	101	122	145
06800	124	111	105	126	128	128	125	114	127	157
07000	117	107	147	127	120	122	120	136	124	131
07200	115	131	133	134	134	110	120	141	134	118
07400	127	154	133	167	143	138	164	144	158	147

07600	147	157	167	133	164	126	161	165	165	146
07800	167	145	182	157	181	171	165	167	169	168
08000	217	186	216	208	200	180	197	215	224	209
08200	212	194	199	198	186	222	223	214	198	206
08400	242	223	215	219	226	220	222	243	226	221
08600	265	256	254	268	288	279	247	267	268	293
08800	294	243	260	266	284	275	304	323	292	303
09000	284	313	273	287	281	308	306	326	345	323
09200	320	359	338	336	338	355	354	342	375	390
09400	355	371	392	400	388	410	406	390	370	404
09600	416	408	425	393	431	442	433	450	486	471
09800	468	442	439	446	460	455	450	451	451	488
10000	449	491	494	487	523	526	501	511	523	497
10200	488	531	536	539	543	521	568	591	554	561
10400	519	582	534	591	570	559	596	587	591	635
10600	636	566	620	618	631	637	651	621	643	646
10800	627	635	660	649	679	678	690	663	697	674
11000	718	688	677	702	629	671	756	641	708	698
11200	706	727	715	731	759	700	727	769	767	738
11400	737	762	757	810	764	750	777	776	766	784
11600	833	786	781	782	831	761	816	829	806	779
11800	835	828	818	768	829	794	823	884	850	828

Bild 2 b (Fortsetzung)

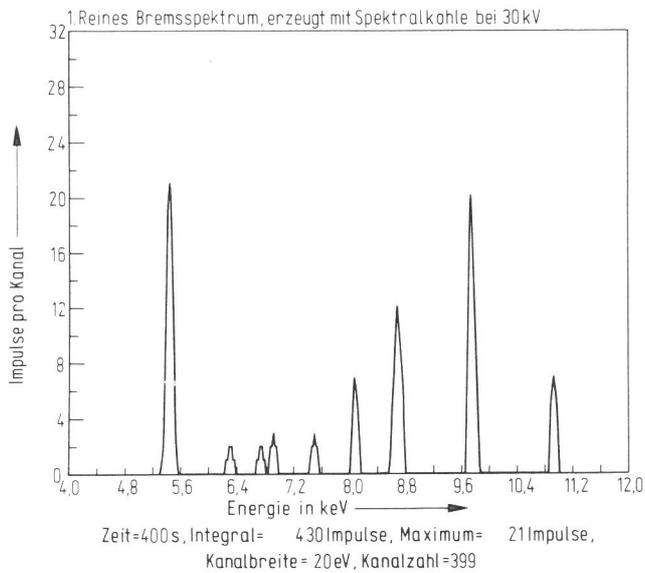


Bild 3

Reiner Bremsuntergrund von Bild 2 nach Untergrundabzug mit Programm EDIT 7/EM. Es verbleiben 9 Peaks.

- a) Abbildung
- b) Ausdruck (vollständig)

04000	400	0	0	0	0	0	0	0	0	0
04200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
04400	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
04600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
04800	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
05000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
05200	0	0	0	0	0	0	1	3	7	13
05400	18	20	21	18	13	7	3	1	0	0
05600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
05800	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
06000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
06200	0	0	1	1	2	2	2	1	1	0
06400	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
06600	0	0	0	1	1	2	2	2	1	1
06800	0	0	1	2	2	3	2	2	1	0
07000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

07200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
07400	0	1	2	2	3	2	2	1	0	0
07600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
07800	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
08000	2	4	6	7	6	5	3	1	0	0
08200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
08400	0	0	0	0	0	0	0	0	1	4
08600	6	9	11	12	12	10	9	7	4	1
08800	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
09000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
09200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
09400	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
09600	0	0	0	3	8	13	18	20	18	13
09800	8	4	1	0	0	0	0	0	0	0
10000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10400	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10800	0	0	0	2	5	6	7	6	5	2
11000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11400	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
11800	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Bild 3 b (Fortsetzung)

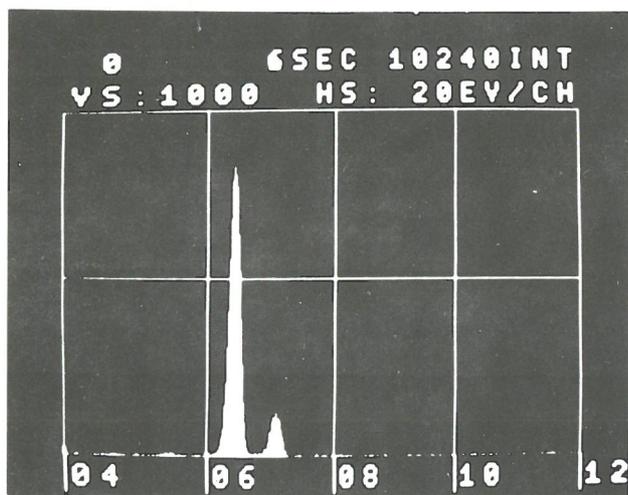


Bild 4

Von der radioaktiven Co_{57} -Quelle erzeugte Peaks $Fe-K_{\alpha}$ und K_{β} (Meßzeit: 20 sec) (Lstr. 1, Sp. 2)

a) Abbildung

b) Ausdruck (vollständig)

04000	20	10	6	5	1	7	2	7	8	8
04200	2	6	2	1	4	5	3	4	5	2
04400	8	4	5	7	2	6	8	3	9	5
04600	4	9	7	8	7	8	5	7	6	5
04800	6	5	4	4	1	3	5	4	7	9
05000	7	4	2	5	8	2	1	6	4	2
05200	5	6	3	5	7	3	9	7	7	8
05400	10	11	5	13	8	10	9	5	4	6
05600	7	5	4	5	5	7	1	5	1	5
05800	4	3	6	4	5	6	2	2	3	11
06000	5	1	12	4	5	9	8	10	13	18
06200	28	50	72	137	199	297	402	556	675	790
06400	835	808	773	628	521	379	250	146	92	47
06600	24	14	10	7	9	5	8	11	6	4
06800	12	5	11	7	20	20	19	37	64	66
07000	92	107	103	120	103	102	95	71	54	41
07200	16	16	5	4	1	5	0	3	3	5

07400	2	4	7	4	4	0	3	1	3	3
07600	0	4	5	1	5	2	9	7	3	3
07800	2	4	4	4	4	3	1	3	2	5
08000	3	3	1	5	6	1	8	5	2	2
08200	4	2	7	1	6	2	2	2	1	3
08400	2	2	2	2	3	1	7	3	3	3
08600	4	4	4	4	1	2	5	2	3	3
08800	3	0	4	8	3	2	2	2	3	1
09000	2	0	3	1	3	2	0	1	0	2
09200	1	2	5	5	5	3	1	2	2	2
09400	4	3	4	3	1	1	4	3	1	4
09600	0	6	3	4	2	0	1	2	5	3
09800	2	3	1	0	1	5	1	3	5	1
10000	2	1	1	0	3	1	1	6	2	3
10200	3	3	0	2	5	3	3	6	4	1
10400	1	2	2	2	4	2	1	3	2	2
10600	4	3	3	0	6	2	0	1	1	2
10800	2	2	4	1	3	5	3	3	1	1
11000	3	2	3	3	1	2	5	4	3	1
11200	1	3	1	4	2	0	2	3	1	2
11400	2	7	3	1	5	3	4	2	5	6
11600	7	3	3	3	4	3	4	1	0	4
11800	3	2	1	6	2	2	2	4	1	2

Bild 4 b (Fortsetzung)

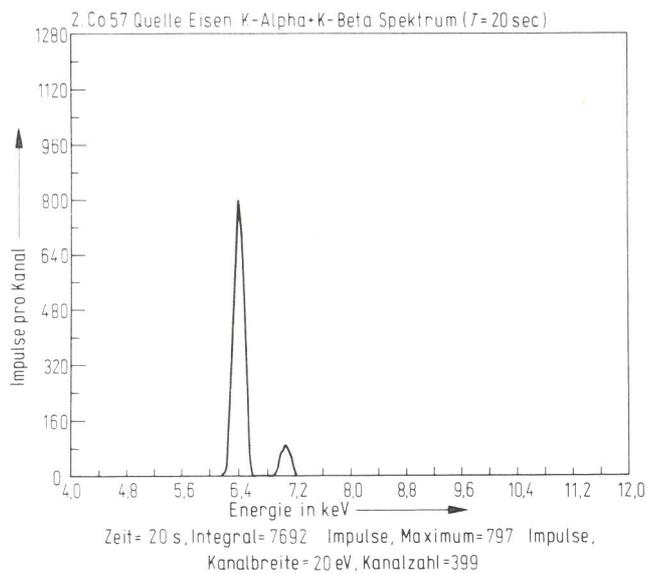


Bild 5

Fe-Peaks der Co₅₇-Quelle von Bild 4 nach Untergrundabzug mit Programm EDIT 1/707

a) Abbildung

b) Ausdruck (Ausschnitt 6000 - 7380 eV)

06000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
06200	2	13	43	97	165	252	355	508	639	733	6900
06400	797	772	703	601	480	329	225	122	49	15	
06600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
06800	0	0	0	0	1	1	8	14	38	52	780
07000	69	72	84	87	85	80	68	59	35	19	
07200	6	2	0	0	0	0	0	0	0	0	

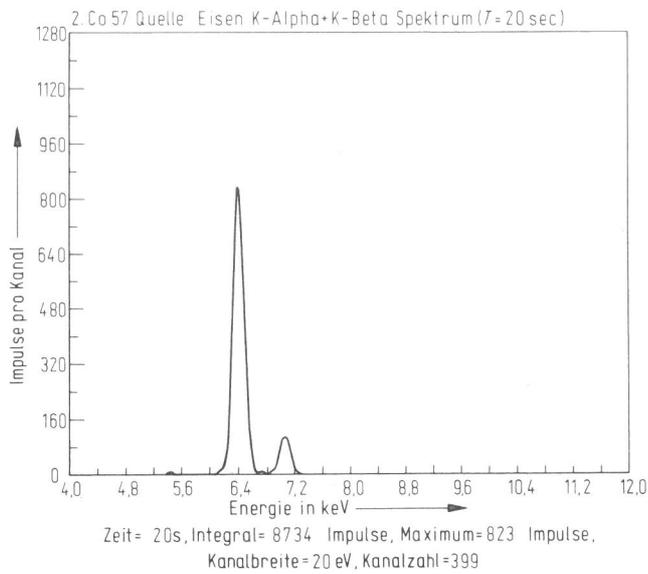


Bild 6
Fe-Peaks der Co₅₇-Quelle von Bild 4 nach Untergrundabzug mit Programm EDIT 7/EM

a) Abbildung
b) Ausdruck (Ausschnitt 5800 - 7380 eV)

05800	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
06000	1	1	0	0	0	1	4	9	12	16	
06200	29	47	71	112	190	288	412	545	682	784	7683
06400	832	811	736	636	513	381	246	149	87	47	
06600	23	12	6	2	0	3	5	2	0	0	
06800	0	0	1	7	10	12	18	31	45	63	1029
07000	83	95	103	105	105	98	82	63	48	31	
07200	16	9	4	0	0	0	0	0	0	0	

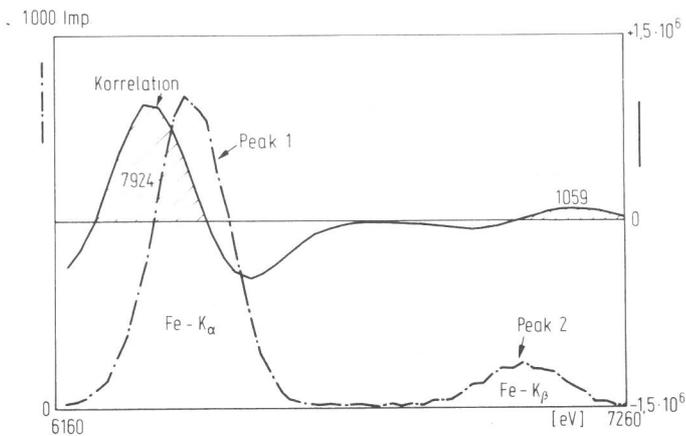


Bild 7
Fe-Peaks der Co₅₇-Quelle von Bild 4 nach Untergrundabzug durch Korrelation

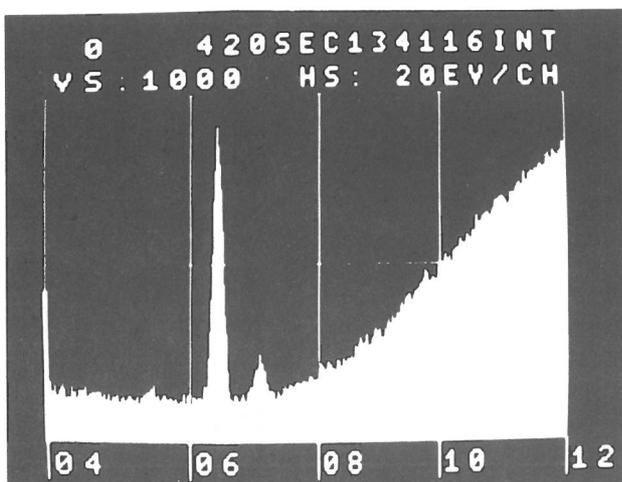


Bild 8
Bremsuntergrund von Bild 2 + Fe-Peaks aus der Co₅₇-Quelle (20 sec) hinzuakkumuliert (Lstr. 1, Sp.3)

a) Abbildung
b) Ausdruck (vollständig)
Die Bereiche, aus denen der Untergrund errechnet wurde, sind gekennzeichnet.

3. Bremsspektrum + Eisenpeaks (Addition von 1. und 2.)

04000	420	165	164	174	139	170	161	129	142	155
04200	162	168	149	123	159	124	157	165	139	161
04400	123	151	144	144	145	155	158	126	148	135
04600	162	139	139	140	140	140	141	125	135	135
04800	116	156	135	112	131	127	126	138	132	111
05000	122	131	126	115	120	145	128	140	120	119
05200	115	127	162	107	125	125	141	131	149	137
05400	141	153	147	175	156	122	130	141	113	120
05600	128	136	130	120	117	125	124	120	111	120
05800	125	111	105	130	111	135	146	103	<u>132</u>	128
06000	121	<u>103</u>	133	122	<u>126</u>	114	128	121	130	115
06200	157	154	150	231	305	396	529	684	774	904
06400	916	849	795	720	597	440	351	299	195	<u>140</u>
06600	119	121	<u>101</u>	133	131	<u>126</u>	114	104	123	152
06800	131	117	107	138	139	151	154	145	178	231
07000	191	202	256	241	215	218	194	196	162	158
07200	137	142	<u>143</u>	139	138	<u>114</u>	120	145	<u>137</u>	120
07400	129	156	135	169	147	140	168	147	160	151
07600	151	160	170	139	170	129	162	166	170	149
07800	169	149	186	159	185	176	166	170	171	172
08000	221	188	220	209	205	181	199	219	226	210
08200	215	198	202	198	188	224	227	221	201	207
08400	245	225	216	220	232	226	226	246	227	228
08600	269	258	257	270	293	282	247	271	270	295
08800	297	244	265	266	289	276	307	324	293	308
09000	285	314	275	289	283	312	306	328	349	325
09200	323	361	339	337	340	356	354	343	376	391
09400	359	374	397	406	390	414	409	391	377	407
09600	420	408	427	395	437	445	435	454	490	474
09800	470	446	442	448	462	457	452	452	452	490
10000	451	495	497	489	524	528	505	512	526	503
10200	492	534	538	542	546	523	568	597	557	561
10400	520	584	534	595	572	562	601	588	592	638
10600	641	568	620	621	635	638	653	621	648	649
10800	627	639	661	649	681	682	692	667	697	676
11000	720	691	678	704	629	673	760	642	710	700
11200	706	730	717	734	761	700	728	770	767	739
11400	741	762	761	812	768	752	777	777	766	787
11600	835	789	782	782	832	763	819	829	808	783
11800	838	831	822	769	830	796	829	886	854	833

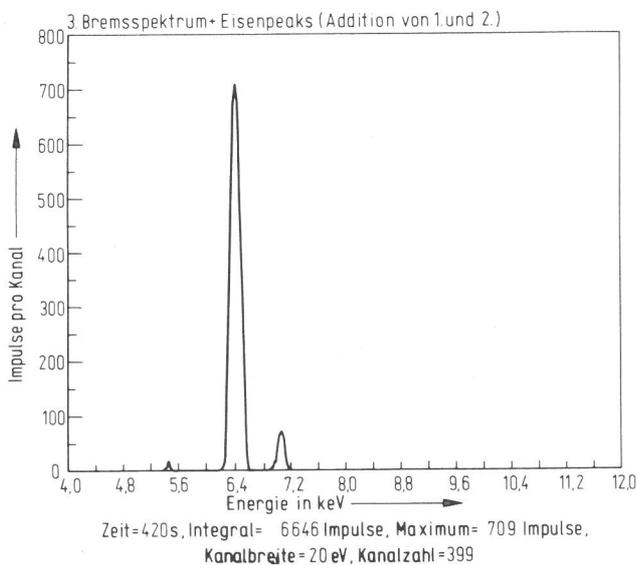


Bild 9
Spektrum von Bild 8 nach Untergrundabzug mit Programm
EDIT 1/707
a) Abbildung
b) Ausdruck (Ausschnitt 6000 - 7280 eV)

06000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
06200	0	0	15	52	123	240	340	506	635	688	0	6180
06400	709	699	624	521	405	326	192	82	23	0	0	
06600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
06800	0	0	0	0	0	4	6	16	12	21	0	430
07000	42	60	69	71	61	44	18	6	0	0	0	
07200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

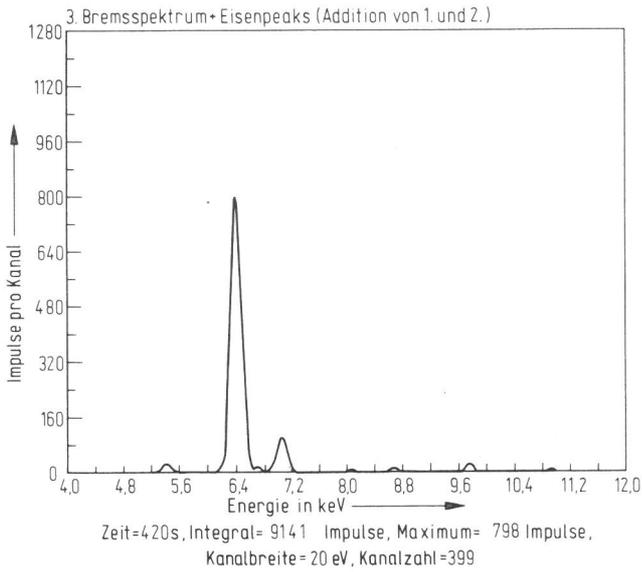
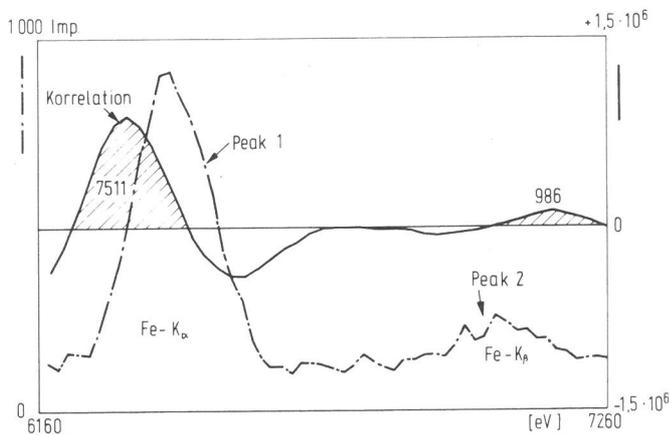


Bild 10
 Spektrum von Bild 8 nach Untergrundabzug mit Programm EDIT 7/EM
 a) Abbildung
 b) Ausdruck (Ausschnitt 5800 - 7680 eV)

05800	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
06000	0	0	0	0	0	0	2	7	14	24	0	
06200	30	37	56	100	179	294	434	576	698	775	0	7727
06400	798	771	703	604	490	374	270	180	111	63	0	
06600	32	15	9	10	14	17	16	12	7	2	0	
06800	0	0	4	10	15	20	26	35	48	64	0	952
07000	80	94	100	99	90	79	64	49	34	22	0	
07200	12	5	2	0	0	0	0	0	0	0	0	
07400	0	1	2	2	3	2	2	1	0	0	0	
07600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	



11
 Spektrum von Bild 8 nach Untergrundabzug durch Korrelation

Lochstreifen 2:

Das Spektrum 1 dieses Lochstreifens (Bild 12) enthält wieder einen an Spektalkohle erzeugten reinen Bremsuntergrund, der diesmal wesentlich höher ist als auf Bild 2, jedoch leicht fallende Tendenz aufweist. Die Spektren 2 a, b, c sind wiederum die aus der Co_{57} -Quelle stammenden Fe-Peaks, aufgelaufen während 20, 40 und 100 Sekunden (Teilausdruck für 100 sec. s. Bild 13). Es ergaben sich folgende Werte, nachdem der Untergrund linear nach Methode 1 abgezogen wurde:

	K_{α}	K_{β}	Werte (gemittelt)	
20 sec-Peak	9909 \pm 101	1319 \pm 39	10016	1339
40 sec-Peak	20016 \pm 144	2670 \pm 56	20032	2679
100 sec-Peak	50201 \pm 228	6727 \pm 89	50079	6698
160	80126	10716		

Wie der rechte Teil der Tabelle zeigt, weichen die Werte in systematischer Weise etwas von den Werten ab, die sich durch Mittelung über 160 sec und Umrechnung ergeben. Die Zunahme zwischen 20 sec und 100 sec beträgt zwar nur 1,3 %, sollte jedoch als mögliche Fehlerquelle ausgeschaltet werden. Aus diesem Grunde wurde von obiger Tabelle als Bezugswert abgesehen und die Sollwertberechnung wie folgt durchgeführt:

Von den Spektren 3 (20 sec) (Bild 14), 4 (40 sec) (Bild 21) und 5 (100 sec) (Bild 28) wurde Kanal für Kanal das hinzuaddierte Spektrum 1 (Untergrund, Bild 12) abgezogen.

Damit ist dann genau errechnet, was wirklich von der Co-Quelle während der Meßzeit hinzugefügt wurde, und Fehler in der Zeit, im Apparat und der Statistik sind eliminiert. Von diesem Differenzspektrum wurde dann nach den 3 bereits beschriebenen Verfahren der restliche Untergrund linear abgezogen. Die Resultate (Sollwerte) sind ebenfalls aus der Tabelle 1 zu entnehmen. Die in Tabelle 2 unter der Spalte "Lineare Abzugsverfahren" genannten Werte ergeben sich durch linearen Abzug von den "Brutto"-Spektren, so, wie man ihn durchführen würde, wenn man nicht wüßte, was zum Untergrund wirklich hinzuaddiert wurde.

Die von der Firma EDAX gelieferten Ausdrücke (Bild 18, 25 und 31) enthalten den reinen Bremsuntergrund, der sich ergibt, wenn die Peaks durch das EDAX-Rechenprogramm eliminiert werden. Die Netto-Peakinhalte ergeben sich somit aus der Differenz des Brutto-Spektrums und dem errechneten Bremsuntergrund. Die Aufsummierung wurde stets so vorgenommen, daß an dem Kanal begonnen bzw. aufgehört wurde, bei dem der Kanalinhalt erstmalig Null betrug. Die Flächeninhalte von auftretenden Nebenmaxima, die erst durch das Rechenverfahren entstehen, wurden also nicht mitgezählt.

1. Reines Untergrundspektrum, T=400 SEC, 4-12 KEV

04000	400	3711	3729	3741	3698	3636	3716	3699	3762	3748
04200	3736	3737	3741	3739	3781	3785	3774	3797	3674	3801
04400	3809	3716	3793	3855	3670	3761	3769	3740	3824	3808
04600	3748	3844	3779	3901	3818	3889	3862	3816	3768	3923
04800	3924	3804	3961	3804	3783	3933	3815	3803	3883	3942
05000	3791	3829	3934	3802	3760	3809	3886	3802	3954	3862
05200	4050	3749	3927	3802	3789	3846	3764	3915	3855	3771
05400	3795	3823	3842	3926	3946	3792	3834	3827	3830	3845
05600	3880	3853	3767	3835	3775	3856	3820	3788	3854	3928
05800	3874	3886	3817	3705	3745	3717	3649	3783	3830	3797
06000	3758	3815	3771	3786	3697	3686	3709	3652	3657	3761
06200	3712	3663	3692	3730	3774	3788	3825	3634	3760	3643
06400	3786	3628	3855	3646	3613	3664	3741	3687	3726	3748
06600	3628	3680	3656	3664	3634	3697	3604	3625	3714	3631
06800	3698	3670	3619	3686	3629	3603	3574	3619	3612	3613
07000	3555	3498	3587	3566	3608	3574	3454	3640	3486	3419
07200	3504	3517	3528	3530	3376	3543	3440	3482	3481	3518
07400	3479	3383	3521	3430	3453	3341	3460	3362	3432	3388
07600	3461	3472	3353	3430	3433	3283	3402	3392	3420	3327
07800	3283	3302	3363	3278	3365	3281	3365	3153	3330	3365
08000	3226	3368	3353	3289	3320	3258	3288	3234	3291	3181
08200	3179	3312	3135	3316	3267	3241	3192	3154	3153	3211
08400	3211	3068	3204	3225	3235	3179	3226	3167	3047	3107
08600	3118	3176	3227	3101	3170	3196	3159	3142	3111	3051
08800	3211	3097	3093	3111	3198	3209	3059	3143	2988	3001
09000	3127	2975	3199	3189	2988	3124	3078	3170	2961	3127
09200	3111	3070	3033	2893	2981	3055	3007	2927	3104	3020
09400	2943	2954	3014	2926	3012	3075	2794	2878	2995	3041
09600	2939	2896	2996	2930	2966	2945	2961	3015	2973	2907
09800	2932	2895	2867	2921	2915	3003	2937	2815	2792	2917
10000	2924	2900	2887	2804	2823	2860	2877	2740	2855	2784
10200	2818	2768	2941	2866	2885	2859	2930	2873	2919	2818
10400	2899	2794	2936	2811	2838	2780	2741	2839	2769	2731
10600	2808	2764	2755	2680	2828	2703	2746	2674	2765	2661
10800	2716	2687	2638	2703	2678	2748	2618	2713	2701	2758
11000	2737	2612	2530	2698	2631	2640	2585	2630	2642	2671
11200	2561	2589	2520	2589	2607	2550	2530	2667	2661	2600
11400	2578	2535	2543	2557	2578	2663	2554	2499	2561	2472
11600	2497	2634	2560	2468	2542	2533	2520	2424	2581	2518
11800	2479	2467	2490	2539	2614	2513	2391	2341	2475	2484

Bild 12

Reiner Bremsuntergrund, bei 30 kV an Spektralkohle erzeugt. Vollständiger Ausdruck. (Lstr. 2, Sp. 1)

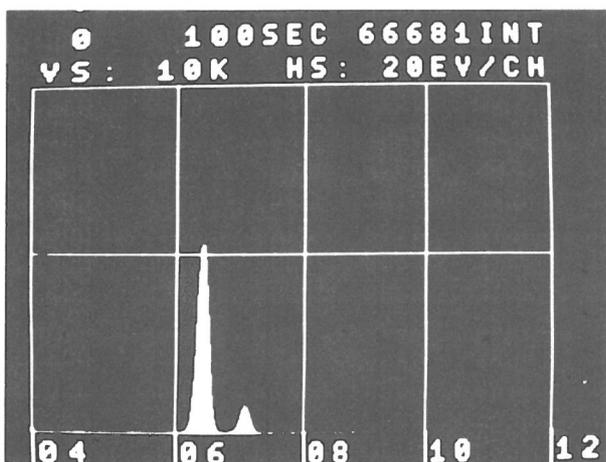


Bild 13

Von der radioaktiven Co_{57} -Quelle erzeugte Peaks $Fe-K_{\alpha}$ und K_{β} (Meßzeit 100 sec) (Lstr. 2, Sp. 2c)

a) Abbildung

b) Ausdruck (Ausschnitt 5800 - 7680 eV)

05800	33	31	32	32	37	45	38	48	34	42	
06000	46	46	43	38	34	48	61	57	83	134	
06200	213	310	579	949	1410	2090	2964	3802	4499	5189	Brutto:
06400	5292	5262	4826	4082	3220	2414	1583	1004	649	374	52005
06600	200	108	67	47	42	47	33	39	29	36	7861
06800	47	55	63	75	96	126	174	279	348	494	
07000	602	640	751	679	713	604	523	419	303	218	Netto:
07200	146	82	47	40	34	25	21	17	22	17	50201
07400	17	23	24	20	21	20	19	18	24	11	6727
07600	19	23	17	22	23	17	27	16	32	16	

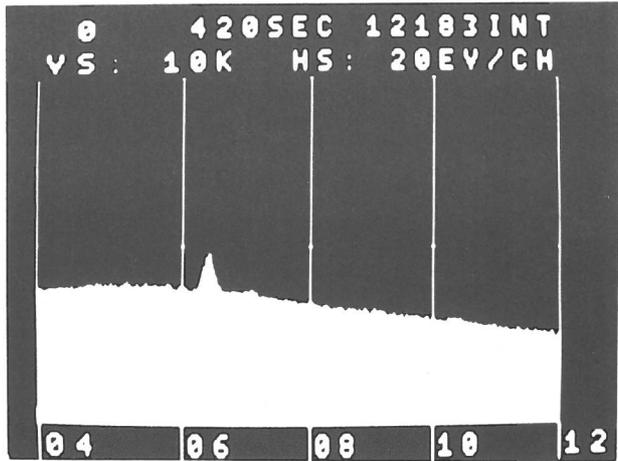


Bild 14
Bremsuntergrund von Bild 12 + Fe-Peaks aus der Co57-Quelle
20 sec hinzuakkumuliert (Lstr. 2, Sp.3)
a) Abbildung
b) Ausdruck (Ausschnitt 5800 - 7580 eV)

05800	3880	3891	3825	3712	3748	3725	3654	3792	3840	3806
06000	3771	3819	3776	3803	3705	3694	3718	3669	3670	3791
06200	3748	3717	3811	3915	4066	4252	4431	4371	4695	4678
06400	4893	4674	4832	4478	4326	4141	4119	3882	3858	3820
06600	3668	3707	3669	3676	3641	3703	3606	3635	3720	3638
06800	3707	3676	3633	3698	3649	3629	3605	3675	3689	3707
07000	3668	3616	3731	3727	3741	3673	3567	3718	3558	3465
07200	3528	3538	3540	3541	3378	3548	3444	3489	3486	3522
07400	3483	3387	3528	3433	3457	3345	3466	3367	3439	3390

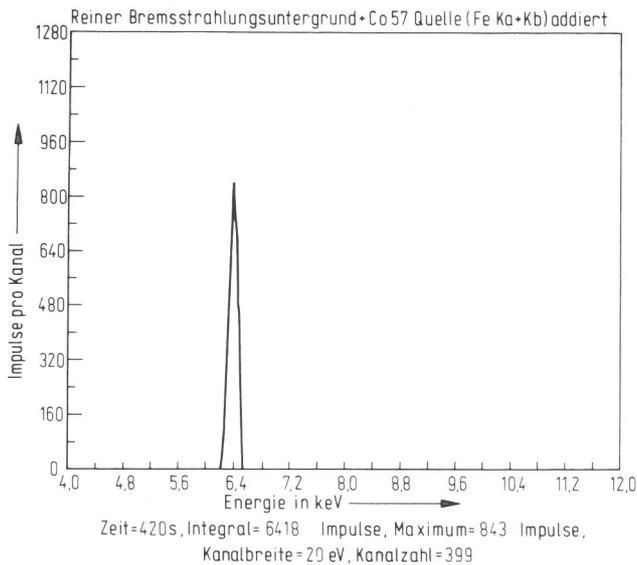


Bild 15
Spektrum von Bild 14 nach Untergrundabzug mit Programm
EDIT 1/707, korrigiert von Ungelenk
a) Abbildung
b) Ausdruck (Ausschnitt 6000 - 7380 eV)

Bild 15 a

06000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
06200	0	0	33	77	198	293	396	540	644	730	6418
06400	843	738	695	491	471	171	98	0	0	0	
06600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
06800	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
07000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
07200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

06.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
06.2	0	0	0	0	33	77	198	293	396	540	6418
06.4	644	730	843	738	695	491	471	171	98	0	6418
06.6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
06.8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
07.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
07.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

Bild 16

Wie Bild 15 b, jedoch korrigiert von Rhyder. Die Ausdrücke sind identisch bis auf eine Skalen-Verschiebung um 2 Kanäle

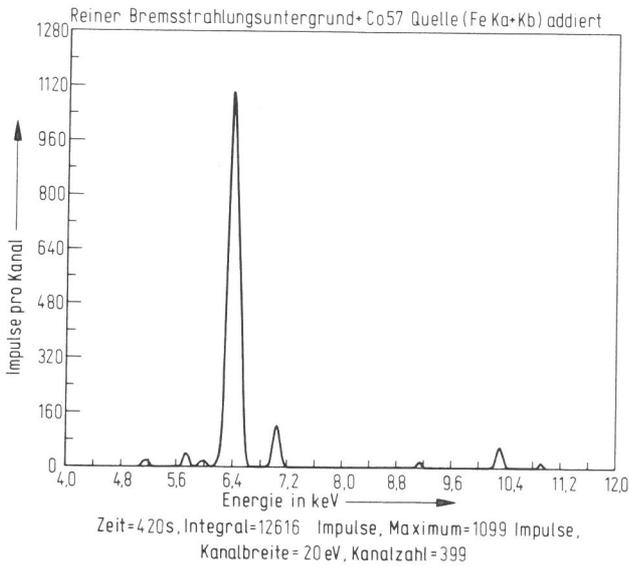


Bild 17

Spektrum von Bild 14 nach Untergrundabzug mit Programm EDIT 7/EM, korrigiert von Ungelenk

a) Abbildung

b) Ausdruck (Ausschnitt 5400 - 7380 eV)

Man erkennt vor Beginn der beiden eigentlichen Peaks noch die vom Programm erzeugten Scheinpeaks.

05400	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
05600	0	0	0	0	8	21	32	40	40	32	
05800	21	8	0	0	0	1	6	12	17	19	
06000	17	12	6	1	0	0	0	0	8	20	
06200	34	58	103	179	297	453	636	819	972	1068	10904
06400	1099	1065	978	850	704	552	406	278	174	95	10904
06600	42	13	1	0	0	0	0	0	0	0	
06800	0	0	0	0	0	0	0	10	26	49	785
07000	77	104	121	123	107	81	53	27	7	0	785
07200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

UNTERGRUND	SPEKTRUM	DIFFERENZ	3750		
3787.	6.0	3806	19	*	
3754.	:	3771	17	*	
3807.	:	3819	12	*	
3770.	:	3776	6	*	
3802.	:	3803	1	*	
3705.	:	3705	0	*	
3694.	:	3694	0	*	
3718.	:	3718	0	*	
3669.	:	3669	0	*	
3662.	:	3670	8	*	
3771.	:	3791	20	*	
3713.	:	3748	35	*	
3659.	:	3717	58	*	
3708.	:	3811	103	*	
3736.	:	3915	179	*	
3769.	:	4066	297	*	
3799.	:	4252	453	*	
3795.	:	4431	636	*	
3552.	:	4371	819	*	
3723.	:	4695	972	*	
3610.	:	4678	1068	*	
3794.	:	4893	1099	10905	*
3609.	:	4674	1065	*	
3854.	:	4832	978	*	
3628.	:	4478	850	*	
3622.	6.5	4326	704	*	
3589.	:	4141	552	*	
3713.	:	4119	406	*	
3604.	:	3882	278	*	
3684.	:	3858	174	*	
3725.	:	3820	95	*	
3626.	:	3668	42	*	
3694.	:	3707	13	*	
3668.	:	3669	1	*	
3676.	:	3676	0	*	
3641.	:	3641	0	*	
3703.	:	3703	0	*	
3606.	:	3606	0	*	
3634.	:	3635	1	*	
3720.	:	3720	0	*	
3638.	:	3638	0	*	
3707.	:	3707	0	*	
3676.	:	3676	0	*	
3633.	:	3633	0	*	
3698.	:	3698	0	*	
3649.	:	3649	0	*	
3629.	:	3629	0	*	
3605.	:	3605	0	*	
3665.	:	3675	10	*	
3663.	:	3689	26	*	
3658.	7.00	3707	49	*	

Bild 18
 Wie Bild 17 b, jedoch korrigiert von EDAX. Ge-
 liefert wurde nur der Ausdruck des Untergrundes.
 Durch Differenzbildung (Spektrum - Untergrund)
 ergeben sich die gleichen Werte wie bei Ungelenk
 (Ausschnitt 6000 - 7000 eV)

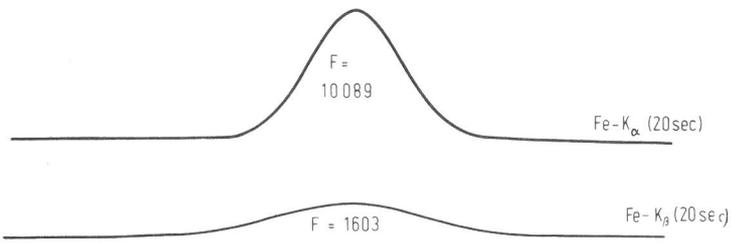


Bild 19
 Spektrum von Bild 14 nach Untergrundabzug mit Methode Schwarz
 a) Fe-K_α
 b) Fe-K_β

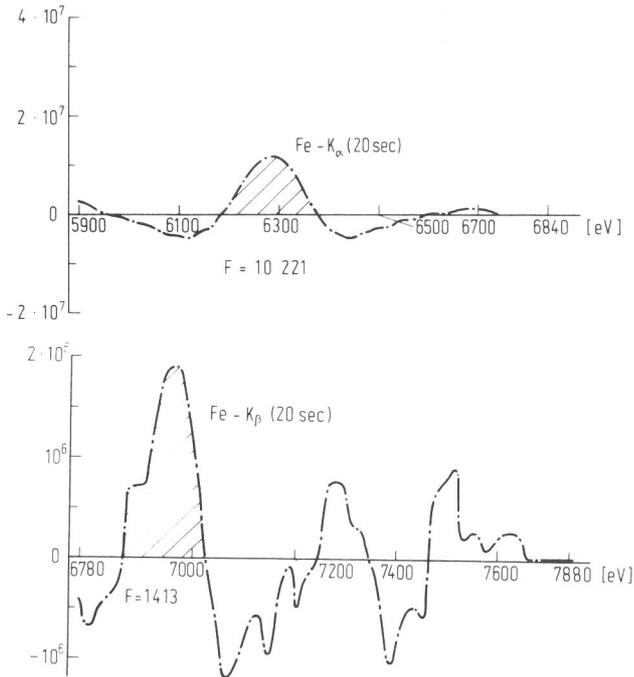


Bild 20
 Spektrum von Bild 14 nach Untergrundabzug durch Korrelation
 a) Fe-K_α
 b) Fe-K_β

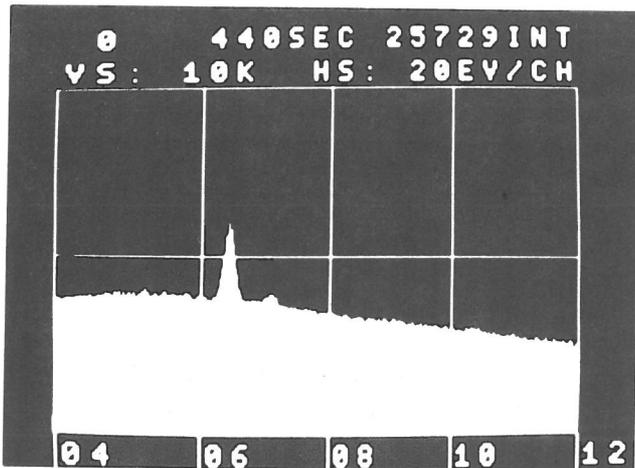


Bild 21
 Bremsuntergrund von Bild 12 + Fe-Peaks aus der Co₅₇-Quelle
 40 sec hinzuakkumuliert (Lstr. 2, Sp. 4)
 a) Abbildung
 b) Ausdruck (Ausschnitt 5800 - 7580 eV)

05800	3886	3898	3832	3718	3758	3733	3663	3795	3851	3811
06000	3783	3824	3780	3810	3717	3704	3729	3678	3699	3818
06200	3784	3802	3934	4073	4355	4656	5004	5085	5589	5635
06400	6002	5747	5816	5366	4971	4652	4465	4092	4014	3898
06600	3712	3735	3690	3687	3652	3712	3614	3644	3733	3641
06800	3716	3686	3645	3717	3667	3650	3641	3724	3763	3795
07000	3783	3753	3882	3878	3883	3806	3659	3816	3622	3508
07200	3564	3565	3553	3554	3384	3551	3449	3495	3490	3526
07400	3487	3392	3533	3435	3461	3351	3467	3368	3442	3394

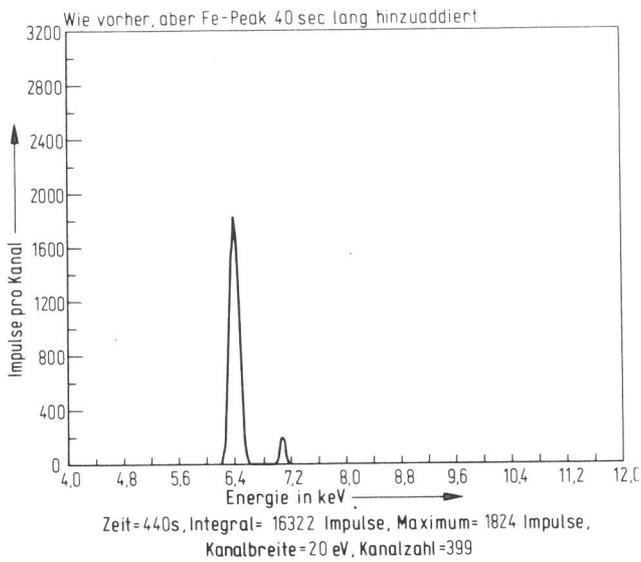


Bild 22

Spektrum von Bild 21 nach Untergrundabzug mit Programm EDIT 1/707, korrigiert von Ungelenk

a) Abbildung

b) Ausdruck (Ausschnitt 6000 - 7380 eV)

06000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
06200	0	0	71	144	431	595	972	1199	1515	1588		15464
06400	1824	1769	1651	1353	1057	621	386	189	73	26		<u>15464</u>
06600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
06800	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		858
07000	27	64	154	195	185	149	58	26	0	0		<u>858</u>
07200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
06.0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
06.2	0	0	0	71	144	431	595	972	1199	1515		15464
06.4	1588	1824	1769	1651	1353	1057	621	386	189	73		<u>15464</u>
06.6	26	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
06.8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
07.0	0	27	64	154	195	185	149	58	26	0		858
07.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		<u>858</u>

Bild 23

Wie Bild 22 b, jedoch korrigiert von Rhyder. Die Ausdrücke sind identisch bis auf eine Skalen-Verschiebung um 1 Kanal

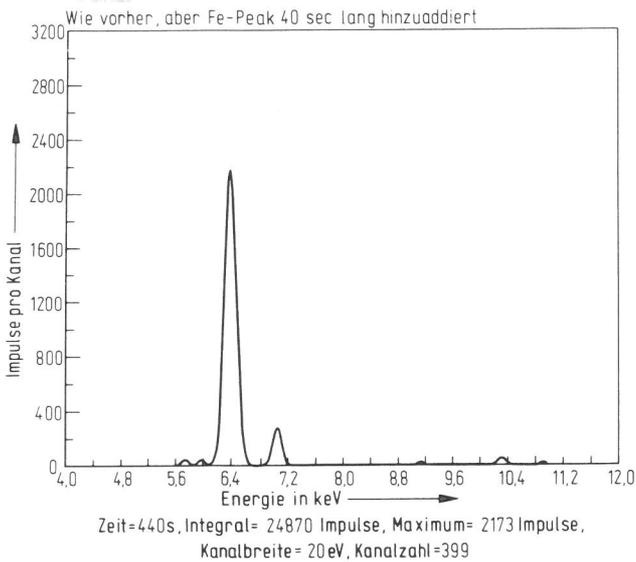


Bild 24

Spektrum von Bild 21 nach Untergrundabzug mit Programm EDIT 7/EM, korrigiert von Ungelenk

a) Abbildung

b) Ausdruck (Ausschnitt 5600 - 7380 eV)

05600	0	0	0	0	8	21	32	39	39	31		
05800	19	8	0	0	0	0	8	20	33	41		
06000	41	33	20	8	0	0	0	11	35	71		
06200	112	159	236	374	587	881	1232	1592	1901	2103		21897
06400	2173	2116	1949	1694	1396	1089	806	562	369	226		<u>21897</u>
06600	127	63	26	7	0	0	0	0	0	0		
06800	0	0	0	0	0	0	13	42	86	140		2108
07000	194	241	268	272	254	218	167	112	63	29		<u>2108</u>
07200	9	0	0	0	0	0	0	0	0	0		

UNTERGRUND SPEKTRUM DIFFERENZ

UNTERGRUND	SPEKTRUM	DIFFERENZ	
3742.	6.0 *	3783	41
3791.	: *	3824	33
3760.	: *	3780	20
3802.	: *	3810	8
3717.	: *	3717	0
3704.	: *	3704	0
3729.	: *	3729	0
3667.	: *	3678	11
3664.	: *	3699	35
3747.	: *	3818	71
3672.	: *	3784	112
3643.	: *	3802	159
3698.	: *	3934	236
3699.	: *	4073	374
3768.	: *	4355	587
3775.	: *	4656	881
3772.	: *	5004	1232
3493.	: *	5085	1592
3688.	: *	5589	1901
3532.	: *	5635	2103
3829.	: *	6002	2173
3631.	: *	5747	2116
3867.	: *	5816	1949
3672.	: *	5366	1694
3575.	: *	4971	1396
3563.	6.5 *	4652	1089
3659.	: *	4465	806
3530.	: *	4092	562
3645.	: *	4014	369
3672.	: *	3898	226
3585.	: *	3712	127
3672.	: *	3735	63
3664.	: *	3690	26
3680.	: *	3687	7
3652.	: *	3652	0
3712.	: *	3712	0
3614.	: *	3614	0
3644.	: *	3644	0
3733.	: *	3733	0
3641.	: *	3641	0
3716.	: *	3716	0
3686.	: *	3686	0
3645.	: *	3645	0
3717.	: *	3717	0
3667.	: *	3667	0
3650.	: *	3650	0
3628.	: *	3641	13
3682.	: *	3724	42
3677.	: *	3763	86
3655.	: *	3795	140
3589.	7.0 *	3783	194
3512.	: *	3753	241
3614.	: *	3882	268
3606.	: *	3878	272
3629.	: *	3883	254
3588.	: *	3806	218
3492.	: *	3659	167
3704.	: *	3816	112
3559.	: *	3622	63
3479.	: *	3508	29
3555.	: *	3564	9

Bild 25

Wie Bild 24 b, jedoch korrigiert von EDAX. Geliefert wurde nur der Ausdruck des Untergrundes. Durch Differenzbildung (Spektrum - Untergrund) ergeben sich die gleichen Werte wie bei Ungelenk (Ausschnitt 6000 - 7200 eV).

21897

2108

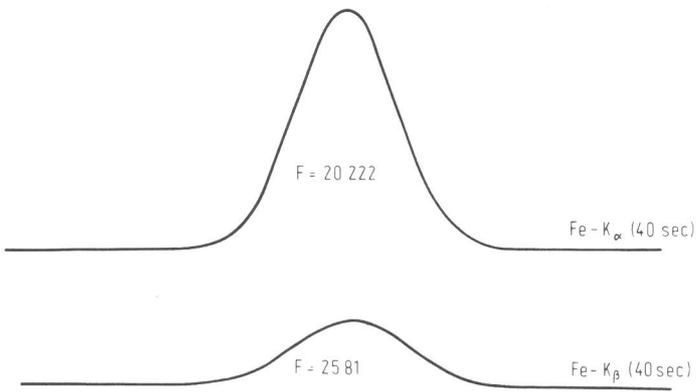


Bild 26
 Spektrum von Bild 21 nach Untergrundabzug mit Methode Schwarz
 a) Fe-K α
 b) Fe-K β

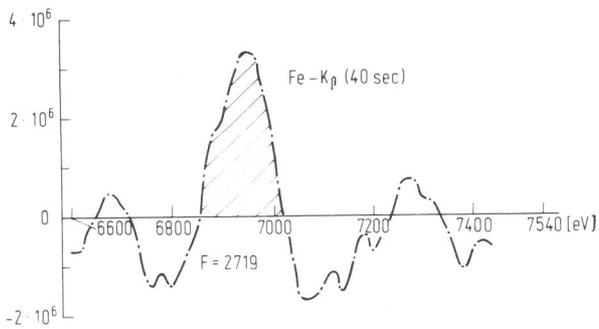
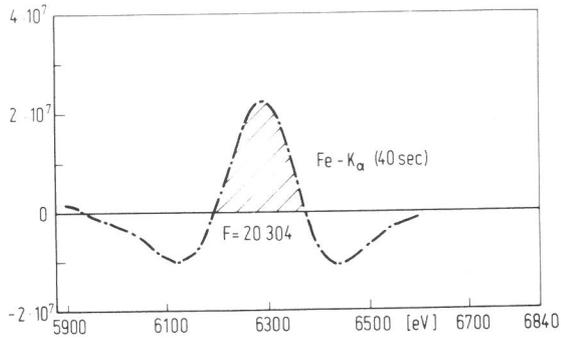


Bild 27
 Spektrum von Bild 21 nach Untergrundabzug durch Korrelation
 a) Fe-K α
 b) Fe-K β

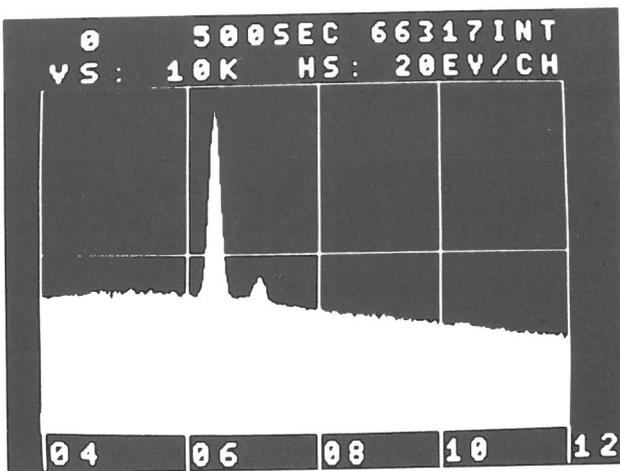


Bild 28
 Bremsuntergrund von Bild 12 + Fe-Peaks aus der Co $_{57}$ -Quelle
 100 sec hinzuakkumuliert (Lstr. 2, Sp. 5)
 a) Abbildung
 b) Ausdruck (Ausschnitt 5800 - 7580 eV)

05800	3911	3911	3855	3730	3788	3755	3679	3827	3870	3838
06000	3808	3847	3799	3829	3743	3741	3764	3725	3740	3895
06200	3916	4004	4236	4599	5174	5840	6614	7236	8270	8695
06400	9283	9029	8795	7909	7060	6186	5511	4812	4406	4165
06600	3840	3827	3740	3717	3682	3734	3636	3668	3763	3660
06800	3744	3718	3679	3761	3724	3734	3752	3897	3961	4085
07000	4123	4131	4316	4328	4280	4170	4000	4088	3833	3666
07200	3658	3629	3590	3587	3401	3573	3461	3509	3509	3539
07400	3497	3409	3543	3450	3471	3359	3478	3381	3452	3407

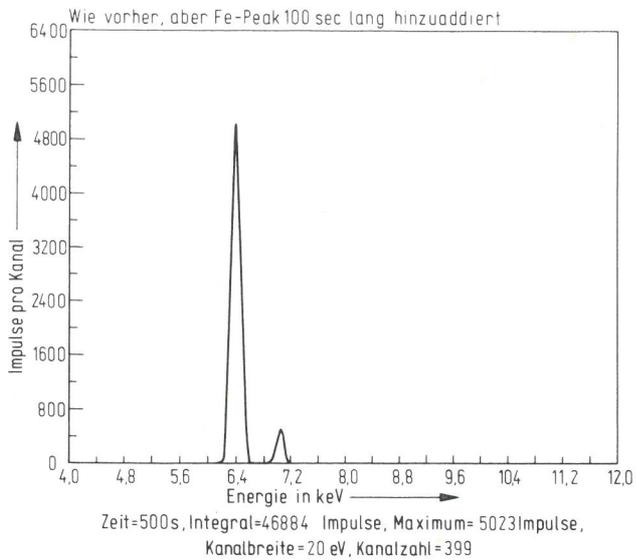


Bild 29
Spektrum von Bild 28 nach Untergrundabzug mit Programm EDIT 1/707

a) Abbildung
b) Ausdruck (Ausschnitt 6000 - 7380 eV)

06000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
06200	0	32	210	502	1122	1620	2411	3177	4045	4554	43684		
06400	5023	4893	4554	3750	2978	2006	1443	876	356	132			
06600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
06800	0	0	0	0	0	0	24	55	141	201			
07000	281	376	449	487	455	367	238	94	32	0			3200
07200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			

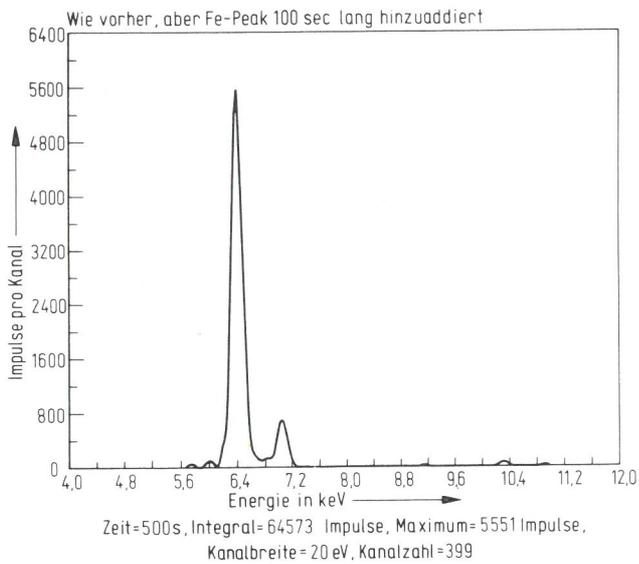


Bild 30
Spektrum von Bild 28 nach Untergrundabzug mit Programm EDIT 7/EM, korrigiert von Ungelenk

a) Abbildung
b) Ausdruck (Ausschnitt 5400 - 7380 eV)

05400	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0			
05600	0	0	0	0	8	21	32	39	39	31			
05800	19	8	0	0	0	0	10	30	57	83			
06000	97	95	79	52	25	10	18	61	143	254			
06200	356	449	593	873	1356	2074	2974	3930	4773	5339			
06400	5551	5416	4978	4315	3536	2740	2011	1401	931	593			56817
06600	376	253	195	169	150	127	104	85	75	80			
06800	95	112	126	126	121	126	149	203	290	398			
07000	514	615	674	685	653	589	499	392	283	186			7012
07200	107	51	17	1	0	0	0	0	0	0			

UNTERGRUND SPEKTRUM DIFFERENZ

3711.	6.0*	3808	97
3752.	::*	3847	95
3720.	::*	3799	79
3777.	::*	3829	52
3718.	::*	3743	25
3731.	::*	3741	10
3746.	::*	3764	18
3664.	::*	3725	61
3597.	::*	3740	143
3641.	::*	3895	254
3560.	::*	3916	356
3555.	::*	4004	449
3643.	::*	4236	593
3726.	::*	4599	873
3817.	::*	5174	1356
3766.	::*	5840	2074
3640.	::*	6614	2974
3306.	::*	7236	3930
3497.	::*	8270	4773
3356.	::*	8695	5339
3731.	::*	9283	5551
3613.	::*	9029	5416
3817.	::*	8795	4978
3594.	::*	7909	4315
3524.	::*	7060	3536
3446.	6.5*	6186	2740
3500.	::*	5511	2011
3411.	::*	4812	1401
3475.	::*	4406	931
3572.	::*	4165	593
3464.	::*	3840	376
3574.	::*	3827	253
3545.	::*	3740	195
3548.	::*	3717	169
3532.	::*	3682	150
3607.	::*	3734	127
3532.	::*	3636	104
3583.	::*	3668	85
3683.	::*	3736	75
3580.	::*	3660	80
3649.	::*	3744	95
3606.	::*	3718	112
3553.	::*	3679	126
3634.	::*	3761	126
3603.	::*	3724	121
3608.	::*	3734	126
3603.	::*	3752	149
3694.	::*	3897	203
3671.	::*	3961	290
3687.	::*	4085	398
3609.	7.0*	4123	514
3516.	::*	4131	615
3642.	::*	4316	674
3643.	::*	4328	685
3627.	::*	4280	653
3580.	::*	4170	590
3501.	::*	4000	499
3696.	::*	4088	392
3550.	::*	3833	283
3430.	::*	3666	186
3551.	::*	3658	107

Bild 31

Wie Bild 30 b, jedoch korrigiert von EDAX. Geliefert wurde nur der Ausdruck des Untergrundes. Durch Differenzbildung (Spektrum - Untergrund) ergeben sich die gleichen Werte wie bei Ungelenk (Ausschnitt 6000 - 7200 eV).

56817

7012

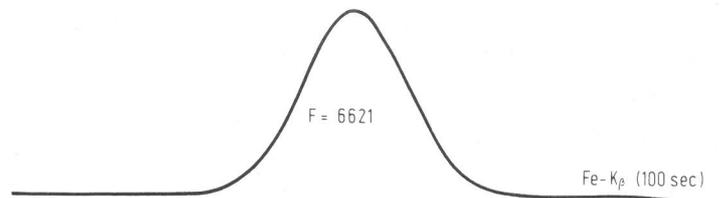
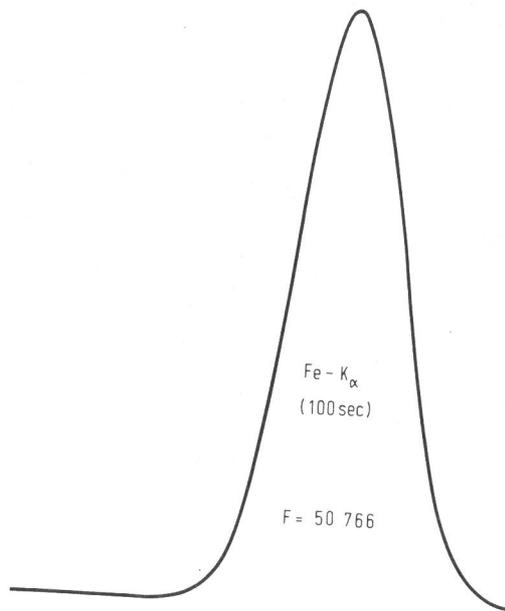


Bild 32
 Spektrum von Bild 28 nach Untergrundabzug mit Methode Schwarz
 a) Fe-K α
 b) Fe-K β

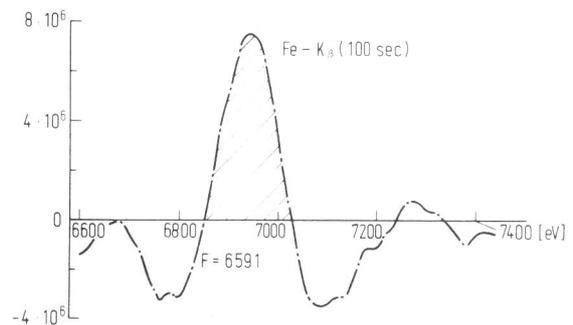
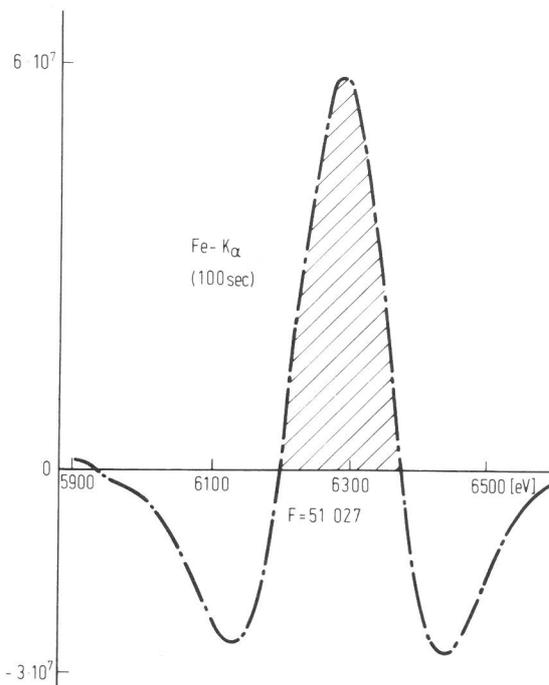


Bild 33
 Spektrum von Bild 28 nach Untergrundabzug durch Korrelation
 a) Fe-K α
 b) Fe-K β

Lochstreifen 3:

Das auf diesem Lochstreifen befindliche Spektrum (Bild 34) enthält einen Chlor-Peak mit einer sehr starken Absorptionskante bei 2820 eV. Diese wurde dadurch künstlich erzeugt, daß eine dünne PVC-Folie vor dem Eintrittsfenster des Detektors angebracht wurde. Dieses (extreme) Beispiel sollte nur dazu dienen festzustellen, was ein Untergrundabzugsprogramm in einem so schwierigen Fall tut, da von einigen Programmen behauptet wurde, daß sie Absorptionskanten mitberücksichtigen würden. Natürlich kann hier kein Sollwert angegeben werden, jedoch ist aus der Tabelle 2 zu entnehmen, wie groß die Differenzen bei den einzelnen Abzugsverfahren werden können, wenn kein so einfacher Peak mehr vorliegt, wie die zuvor behandelten. Man sieht, daß das Programm EDIT 7/EM etwa einen doppelt so hohen Wert liefert, wie als zutreffend angenommen werden kann, weil das Programm "nicht weiß", wo der Peak auf der linken Seite aufhört (vergl. Bild 34 b und 36 b). Demgegenüber identifiziert die Korrelation noch den kleinen Sattel bei 2360 eV als getrennten Peak (vgl. Pfeil Bild 34 b und 38).

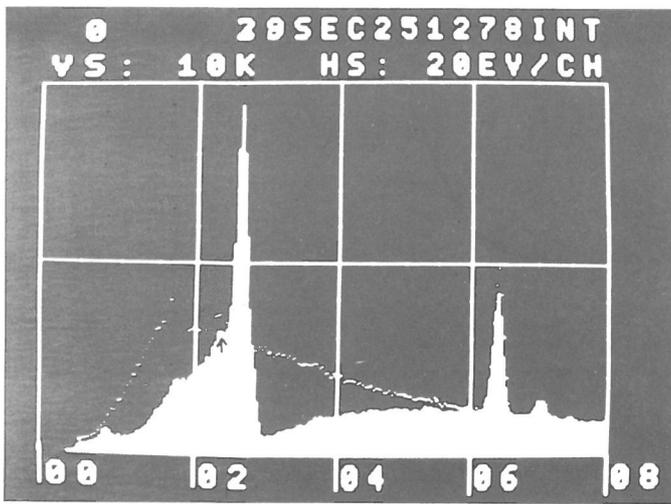
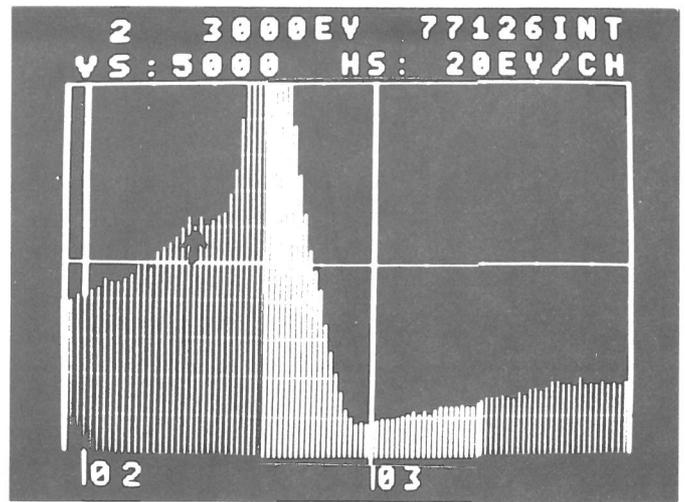


Bild 34

Spektrum mit Chlor-Absorptionskante (Lstr. 3)

a) Abbildung des gesamten Spektrums



b

b) vergrößerte Darstellung des Verlaufs der Kante

c) Ausdruck des gesamten Spektrums

Spektrum mit Chlor-Absorptionskante und Eisenstreustrahlung:

00000	150	4	0	0	2	1	0	1	0	4
00200	4	1	6	5	11	31	19	28	39	37
00400	40	40	53	175	202	240	244	245	243	228
00600	240	257	282	253	306	290	344	385	428	542
00800	593	598	629	646	579	471	478	434	400	388
01000	473	405	387	427	452	464	427	459	478	500
01200	499	554	565	579	596	597	654	710	716	757
01400	835	850	936	984	1082	999	1136	1147	1212	1257
01600	1391	1446	1476	1649	1695	1766	1847	1899	1893	1827
01800	1838	1794	1913	1838	1801	1750	1931	1973	1994	2069
02000	2037	2131	2170	2295	2240	2254	2290	2345	2462	2520
02200	2437	2660	2725	2795	2861	2994	3145	3015	3159	3035
02400	3090	3161	3200	3476	3800	4504	5510	6912	8143	8841
02600	9366	8916	8024	6874	5702	4432	3741	3214	2708	2437
02800	2173	1702	1357	1073	833	607	519	431	458	438
03000	461	467	483	488	497	501	525	541	581	541
03200	595	557	617	649	656	653	651	662	653	647
03400	696	752	755	742	770	750	725	814	776	844
03600	857	834	862	942	957	915	917	891	991	909
03800	913	913	947	916	931	907	943	950	926	993
04000	957	972	950	987	989	1023	1043	1061	1046	1039
04200	1062	1022	1095	1041	1026	1089	1005	1126	1052	1087
04400	1100	1091	1059	1062	1145	1158	1148	1167	1137	1049
04600	1149	1127	1088	1143	1102	1228	1114	1168	1139	1190
04800	1176	1143	1148	1165	1198	1193	1161	1166	1142	1187
05000	1157	1108	1165	1198	1088	1179	1112	1212	1171	1199
05200	1145	1148	1087	1166	1179	1161	1248	1156	1213	1236
05400	1226	1166	1183	1149	1182	1148	1165	1165	1103	1128
05600	1096	1083	1113	1090	1126	1115	1134	1108	1098	1108
05800	1112	1105	1111	1164	1104	1174	1118	1106	1124	1177
06000	1102	1145	1093	1147	1090	1041	1103	1078	1101	1129
06200	1182	1336	1452	1702	1957	2365	2814	3348	3735	3998
06400	4204	3801	3588	3091	2538	2181	1725	1433	1238	1175
06600	1096	1044	1011	1043	971	986	986	1001	1011	1038
06800	992	954	1015	1043	1005	1038	1056	1109	1188	1242
07000	1397	1398	1339	1401	1349	1268	1227	1147	1071	1030
07200	997	979	924	909	926	884	928	891	904	994
07400	903	906	946	956	960	962	919	899	906	867
07600	831	859	887	796	847	853	824	952	849	812
07800	887	894	787	892	848	851	853	884	880	956

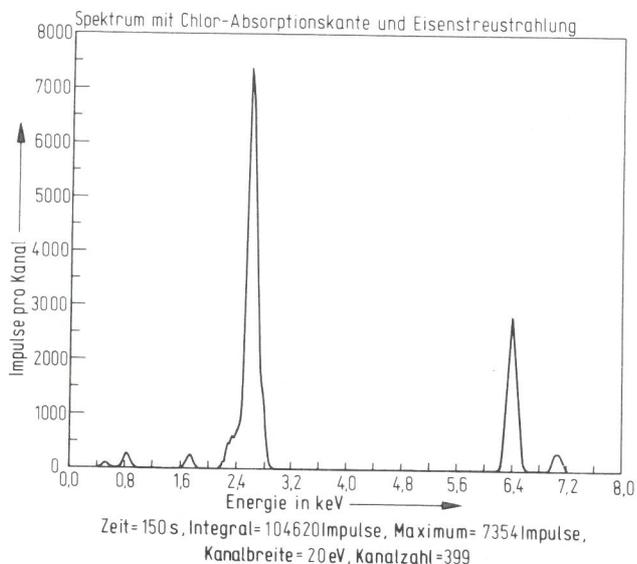


Bild 35
Spektrum von Bild 34 nach Untergrundabzug mit Programm EDIT 1/707

a) Abbildung
b) Ausdruck (Ausschnitt 0 - 3180 eV)

00000	150	0	0	0	0	0	0	0	0	0
00200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
00400	0	0	8	25	61	89	95	76	48	18
00600	6	0	0	0	0	0	7	25	74	136
00800	204	252	256	210	147	79	30	8	0	0
01000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
01200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
01400	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
01600	17	22	81	84	169	215	251	238	194	125
01800	50	16	0	0	0	0	0	0	0	0
02000	0	0	0	0	0	0	0	0	40	50
02200	136	114	209	355	474	446	527	600	543	605
02400	692	722	862	1052	1564	2510	3348	4601	6125	7041
02600	7354	6960	6620	5067	3849	3195	2248	1760	1449	1312
02800	948	682	430	164	72	0	0	0	0	0
03000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

74726

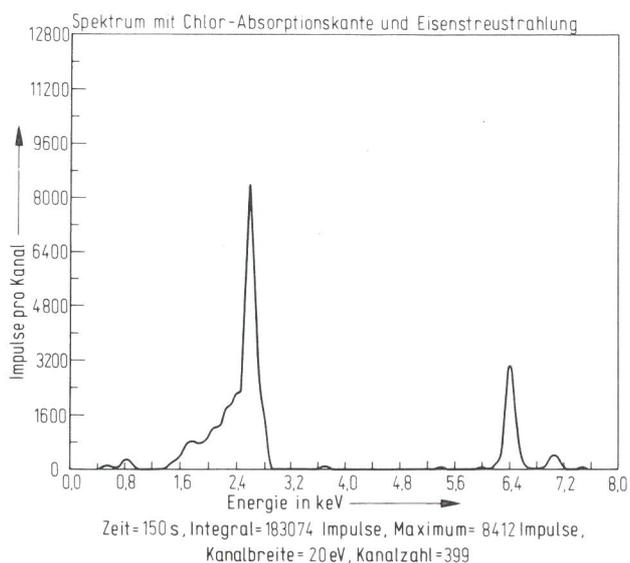


Bild 36
Spektrum von Bild 34 nach Untergrundabzug mit Programm EDIT 7/EM

a) Abbildung
b) Ausdruck (Ausschnitt 0 - 3180 eV)

00000	150	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
00200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
00400	2	10	28	53	79	100	113	114	106	93	
00600	81	69	59	51	51	63	94	141	196	250	
00800	291	307	297	265	221	171	122	79	45	22	
01000	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	
01200	0	0	0	0	0	0	0	4	13	26	
01400	50	78	118	158	197	231	264	290	318	350	
01600	400	479	582	671	747	805	846	858	843	813	
01800	793	789	791	803	816	831	845	866	893	940	
02000	1004	1088	1165	1213	1237	1245	1240	1245	1276	1356	
02200	1491	1649	1773	1846	1888	1913	1944	2005	2103	2205	
02400	2263	2247	2227	2364	2798	3601	4760	6078	7292	8137	141980
02600	8412	8061	7227	6090	4889	3828	3000	2426	2062	1768	
02800	1459	1120	765	443	203	60	6	0	0	0	
03000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

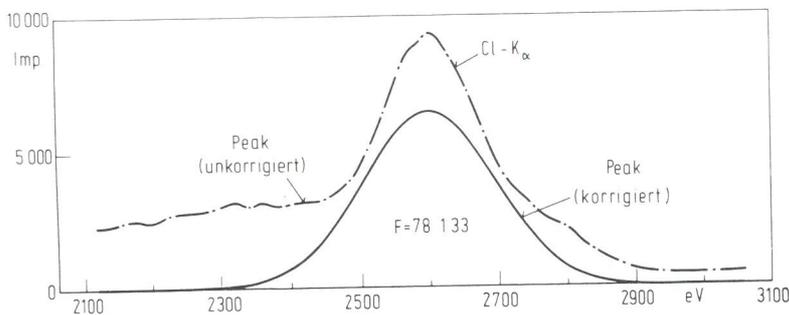


Bild 37
Spektrum von Bild 34 nach Untergrundabzug mit Methode Schwarz

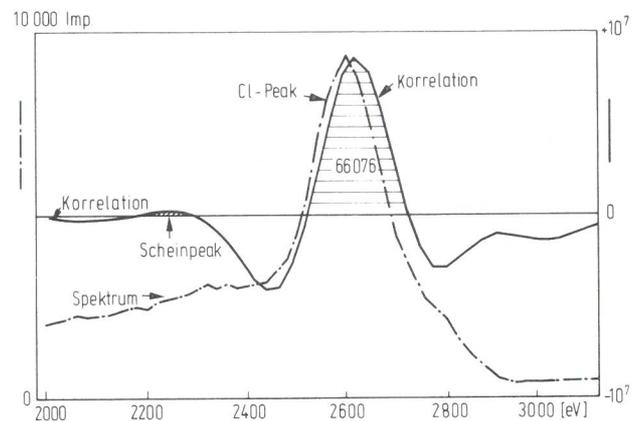


Bild 38
Spektrum von Bild 34 nach Untergrundabzug durch Korrelation

Lochstreifen 5:

Um diesen Mangel des nicht feststellbaren Sollwertes zu beheben, wurden schließlich im letzten Beispiel (Lochstreifen 5) 2 Peaks mit Absorptionskanten künstlich generiert (s. Bild 39). Dazu wurde vom Spektrum Nr. 1 des Lochstreifens 2 (Bild 12) ausgegangen, das nur reinen Bremsuntergrund enthält. Zu diesem wurden 2 theoretisch errechnete Gauß-Peaks addiert, die in ihrer Breite beide dem Fe- K_{α} -Peak entsprechen. Der erste Peak wurde mit seinem Maximum an die richtige Stelle von 6400 eV gelegt, der zweite an die Stelle 9400 eV (was seiner Breite nicht entspricht). Zusätzlich wurde eine Absorptionskante 4 Kanäle rechts vom Maximum künstlich dadurch erzeugt, daß, mit diesem Kanal beginnend, von allen folgenden je 1000 (bzw. 500) Impulse abgezogen wurden (s. Bild 40). Die Größe dieses Abfalles entspricht mit 1000 Imp./Kanal durchaus etwa den wahren möglichen Verhältnissen, wenn man einen Detektor von ca. 170 eV Auflösung benutzt und im Energiebereich 4-12 keV mit 20 eV/Kanal arbeitet. Die Ergebnisse des Untergrundabzuges sind auf den Bildern 41 - 43 dargestellt bzw. in Tabelle 2 erfaßt.

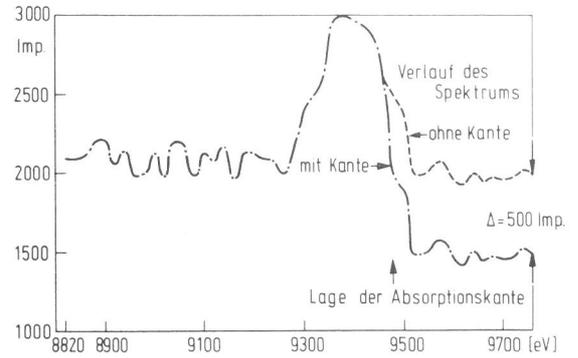
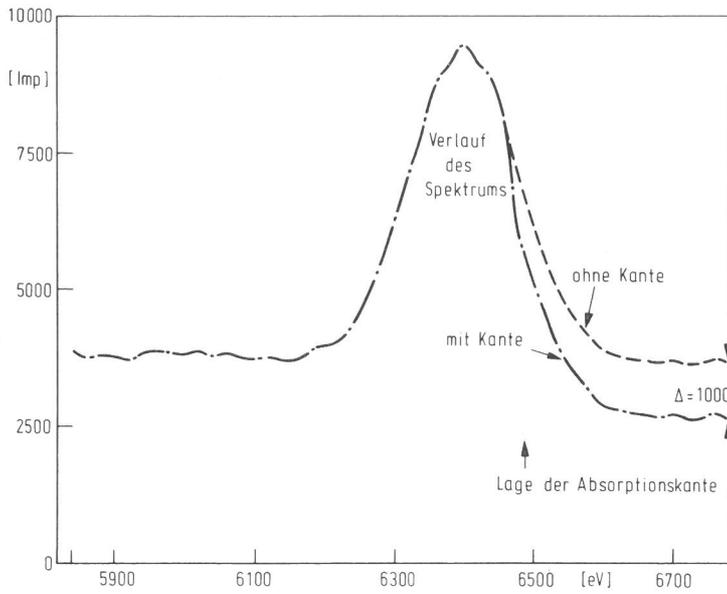


Bild 39

Kunstpeaks. Erzeugt durch Addition 2er gaußförmiger Peaks zum reinen Bremsuntergrund von Bild 12 unter Einfügung von Absorptionskanten an den Stellen 6480 und 9480 eV und den Sprunghöhen von 1000 und 500 Impulsen.

- a) *Abbildung des Bereiches des 1. Gauß-Peaks*
- b) *Abbildung des Bereiches des 2. Gauß-Peaks*
- c) *Ausdruck (vollständig)*

Spektrum Nr. 5 (Kunstpeak).

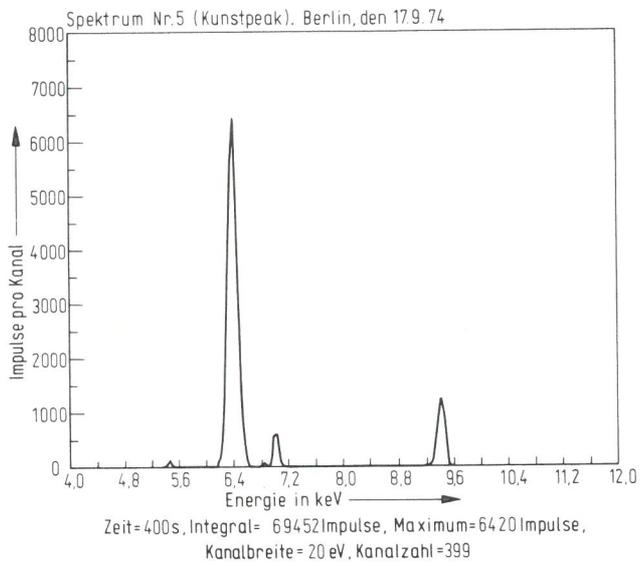
04000	400	3711	3729	3741	3698	3636	3716	3699	3762	3748
04200	3736	3737	3741	3739	3781	3785	3774	3797	3674	3801
04400	3809	3716	3793	3855	3670	3761	3769	3740	3824	3808
04600	3748	3844	3779	3901	3818	3889	3862	3816	3768	3923
04800	3924	3804	3961	3804	3783	3933	3815	3803	3883	3942
05000	3791	3829	3934	3802	3760	3809	3886	3802	3954	3862
05200	4050	3749	3927	3802	3789	3846	3764	3915	3855	3771
05400	3795	3823	3842	3926	3946	3792	3334	3827	3330	3845
05600	3880	3853	3767	3835	3775	3856	3820	3788	3854	3928
05800	3874	3886	3817	3705	3745	3717	3649	3783	3830	3797
06000	3758	3815	3771	3786	3698	3690	3718	3647	3707	3868
06200	3925	4060	4385	4864	5511	6279	7172	7845	8722	9118
06400	9444	9103	8817	7857	5960	5155	4478	3821	3419	3145
06600	2841	2787	2706	2686	2643	2701	2605	2625	2714	2631
06800	2698	2670	2619	2683	2629	2603	2574	2619	2612	2613
07000	3555	3498	2587	2566	2608	2574	2454	2640	2486	2419
07200	2504	2517	2528	2530	2376	2543	2440	2482	2481	2518
07400	2479	2383	2521	2430	2453	2341	2460	2362	2432	2388
07600	2461	2472	2353	2430	2433	2283	2402	2392	2420	2327
07800	2283	2302	2363	2278	2365	2281	2365	2153	2330	2365
08000	2226	2368	2353	2289	2320	2258	2288	2234	2291	2181
08200	2179	2312	2135	2316	2267	2241	2192	2154	2153	2211
08400	2211	2068	2204	2225	2235	2179	2226	2167	2047	2107
08600	2118	2176	2227	2101	2170	2196	2159	2142	2111	2051
08800	2211	2097	2093	2111	2198	2209	2059	2143	1988	2001
09000	2127	1975	2199	2189	1988	2124	2078	2170	1962	2130
09200	2120	2091	2081	1992	2164	2365	2484	2594	2951	2998
09400	2969	2932	2861	2593	1989	1885	1477	1477	1543	1562
09600	1448	1399	1497	1430	1466	1445	1461	1515	1473	1407
09800	1432	1395	1367	1421	1415	1503	1437	1315	1292	1417
10000	1424	1400	1387	1304	1323	1360	1377	1240	1355	1284
10200	1318	1268	1441	1366	1385	1359	1430	1373	1419	1318
10400	1399	1294	1436	1311	1338	1230	1241	1339	1269	1231
10600	1308	1264	1255	1180	1328	1203	1246	1174	1265	1161
10800	1216	1187	1138	1203	1178	1248	1118	1213	1201	1258
11000	1237	1112	1030	1198	1131	1140	1085	1130	1142	1171
11200	1061	1089	1020	1089	1107	1050	1030	1167	1161	1100
11400	1078	1035	1043	1057	1078	1162	1054	999	1061	972
11600	997	1134	1060	968	1042	1033	1020	924	1081	1018
11800	979	967	990	1039	1114	1013	891	841	975	984

1. GAUSS-PEAK 33 WERTE	2. GAUSS-PEAK 25 WERTE
1	1
4	3
9	9
22	21
50	48
107	99
213	183
397	310
693	477
1134	667
1737	847
2491	978
3347	1026
4211	978
4962	847
5475	667
5658	477 - 500 = - 23
5475	310 - 500 = -190
4962	183 - 500 = -317
4211	99 - 500 = -401
3347 - 1000 = 2347	48 - 500 = -452
2491 - 1000 = 1491	21 - 500 = -479
1737 - 1000 = 737	9 - 500 = -491
1134 - 1000 = 134	3 - 500 = -497
693 - 1000 = - 307	1 - 500 = -499
397 - 1000 = - 603	
213 - 1000 = - 787	SUMME 8312
107 - 1000 = - 893	====
50 - 1000 = - 950	9160 - 9640 EV
22 - 1000 = - 978	
9 - 1000 = - 991	
4 - 1000 = - 996	
1 - 1000 = - 999	
SUMME 55364	
====	
6080 - 6720 EV	

Bild 40
Ausdruck der Werte der beiden addierten Gauß-Peaks von Bild 39 mit Angabe der eingefügten künstlichen Absorptionskanten

Bild 41
Spektrum von Bild 39 nach Untergrundabzug mit Programm EDIT 1/707

- a) Abbildung
- b) Ausdruck (Ausschnitt 5200 - 9780 eV)



05200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
05400	27	60	125	122	60	26	0	0	0	0	0
05600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
05800	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
06000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	110
06200	140	473	672	1225	2208	2644	3611	4521	5340	5740	57380
06400	6095	6420	5379	4330	3346	2129	1305	898	490	234	234
06600	70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
06800	22	28	74	28	22	0	0	121	227	576	576
07000	580	594	468	254	109	23	0	0	0	0	0
07200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
07400	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
07600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
07800	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
08000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
08200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
08400	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
08600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
08800	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
09000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
09200	0	0	24	59	172	312	493	749	898	1119	1119
09400	1231	1226	950	769	344	158	22	0	0	0	0
09600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

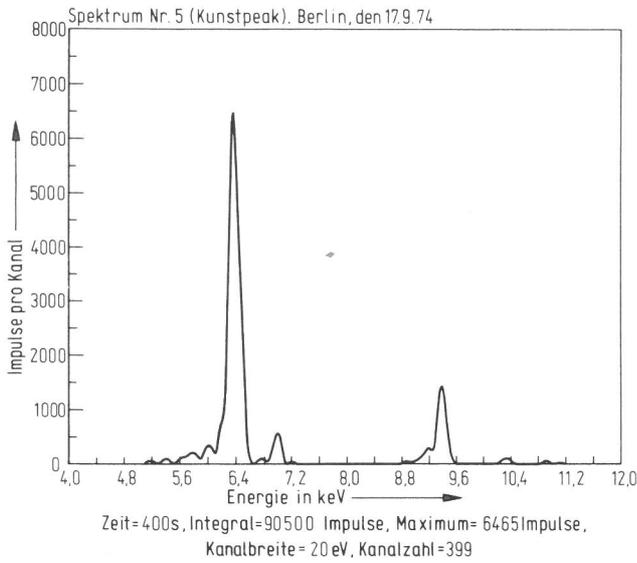


Bild 42
Spektrum von Bild 39 nach Untergrundabzug mit Programm EDIT 7/EM
a) Abbildung
b) Ausdruck (Ausschnitt 5000 - 9780 eV)

05000	0	0	0	0	1	4	14	29	44	52	
05200	51	40	26	12	1	0	9	34	67	95	
05400	109	103	79	48	17	1	0	3	25	54	
05600	79	100	112	118	120	120	132	158	183	200	
05800	208	199	171	131	92	77	90	130	189	263	
06000	323	351	338	289	226	183	193	290	458	639	
06200	794	939	1149	1521	2117	2979	4040	5102	5948	6425	
06400	6465	6100	5399	4484	3517	2602	1790	1134	657	342	<u>67770</u>
06600	157	58	12	0	7	25	48	73	90	94	
06800	84	61	35	26	49	106	187	278	382	489	
07000	556	557	499	386	250	123	30	0	10	21	
07200	29	33	29	21	10	1	0	0	0	0	
07400	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
07600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
07800	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
08000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
08200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
08400	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
08600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	5	
08800	14	21	28	33	31	30	31	35	46	59	
09000	69	80	91	103	126	157	187	226	263	284	
09200	279	251	230	258	356	537	787	1063	1291	1413	<u>14100</u>
09400	1408	1287	1073	811	550	329	169	71	18	0	
09600	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	

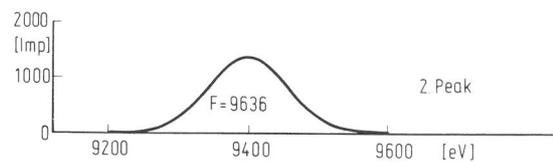
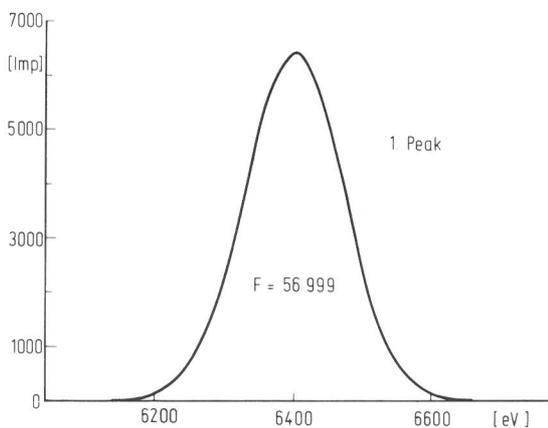


Bild 43
Spektrum von Bild 39 nach Untergrundabzug mit Methode Schwarz
a) Bereich des 1. Gauß-Peaks
b) Bereich des 2. Gauß-Peaks

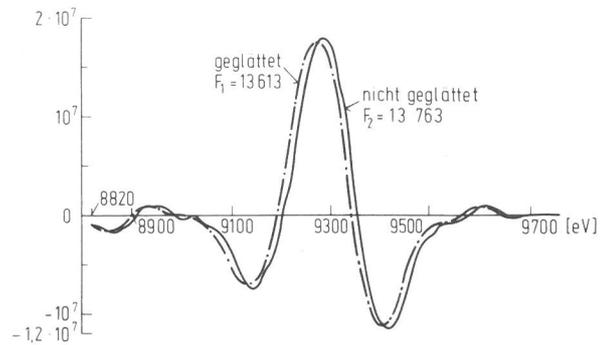
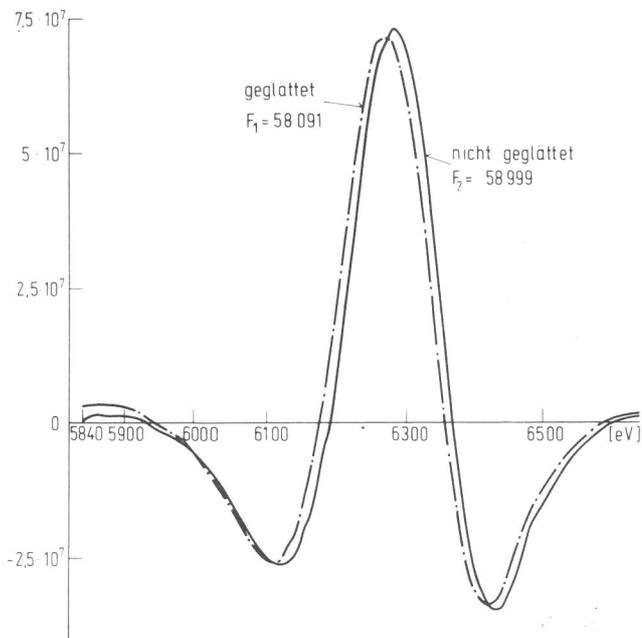


Bild 44

Spektrum von Bild 39 nach Untergrundabzug durch Korrelation
 a) Bereich des 1. Gauß-Peaks

b) Bereich des 2. Gauß-Peaks

Außerdem ist der Kurvenverlauf dargestellt, der sich ergibt, wenn das Ausgangsspektrum vor Anwendung der Korrelationsmethode leicht geglättet wird (durch Mittelwertbildung aus je 2 Punkten). Die Verbesserung ist nur geringfügig.

4. Ergebnisse

Die Ergebnisse des nach den verschiedenen Verfahren durchgeführten Untergrundabzuges sind in den Tabellen 2 und 2 a zusammengefaßt. In der letzten Spalte ist der maximal zulässige Fehler in % angegeben, der sich ergibt, wenn man die Wurzel aus dem Brutto-Peakinhalt (einschließlich Untergrund) bildet und diese auf den Sollwert bezieht (der in der Spalte des Sollwertes angegebene Fehler bezieht sich nur auf den Fehler des Sollwertes selbst). Ein optimales Untergrundabzugsprogramm sollte also Werte liefern, die alle innerhalb des angegebenen Fehlerbereiches liegen.

Aus den Ergebnissen der Tabellen 2 und 2 a können folgende Schlußfolgerungen abgeleitet werden:

1. Kein Untergrundabzugsprogramm liefert in allen Fällen ein innerhalb des maximal zulässigen Fehlers liegendes Resultat.
2. Die EDAX-Programme liefern durchweg schlechtere Ergebnisse, als man durch linearen Abzug des Untergrundes erhält.
3. Während das ältere Programm EDIT 1/707 im Mittel zu viel abzieht, d. h. wesentlich zu niedrige Werte liefert, ergibt das neuere Programm EDIT 7/EM zu hohe Werte; jedoch ist es als wesentlich besser zu betrachten.
4. Die von der Firma EDAX gelieferten Ergebnisse stimmen vollkommen mit denen überein, die von Ungelenk mit dem EDIT 7/EM-Programm erhalten wurden. Ebenso stimmen die mit dem EDIT 1/707 von Ungelenk erhaltenen Ergebnisse genau mit denen von Rhyder/Bremen überein, wie es aus den Ausdrucken ersichtlich ist (vergl. z. B. Bild 18 mit 17 b und 15 b mit 16).

Damit ist zweierlei nachgewiesen:

- a) Die beiden Programme 7/EM und 7/EP sind tatsächlich, wie von der Firma EDAX behauptet, bezüglich ihres Untergrundabzuges identisch.

- b) Die Übereinstimmung beweist, daß die Rechenanlagen, auf denen die Korrekturen vorgenommen wurden, einwandfrei arbeiteten. Die z. T. beträchtlichen Fehler können also keinesfalls auf eine etwa mangelhafte Funktion der Geräte zurückgeführt werden.
5. Die Einengung des Integrationsbereiches auf einheitlich 15 Kanäle ändert das Bild nur geringfügig.
 6. Keines der Verfahren eliminiert Absorptionskanten.
 7. Selbsterstellte Programme können durchaus mit den käuflich zu erwerbenden konkurrenzfähig sein*, wie an 2 Beispielen gezeigt wurde. Nur wer nicht die Möglichkeit dazu hat und auch keine in der Literatur veröffentlichten Programme laufen lassen kann, ist wirklich darauf angewiesen, mit Untergrundabzugsverfahren zu arbeiten, über deren Fehlergrenzen nichts bekannt ist.

5. Bewertung der Abzugsverfahren

Um die Güte der einzelnen Abzugsverfahren zu vergleichen, wurde eine Bewertung versucht, die in den Tabellen 3 und 3 a ihren Niederschlag fand. Je nach den dabei angewendeten Kriterien ergeben sich dabei unterschiedliche Reihenfolgen:

- a) Man kann die Zahl der Treffer, bei denen das Ergebnis innerhalb der Fehlergrenze liegt, als Maßstab nehmen. Das sagt dann nichts darüber aus, wie weit die Nicht-Treffer vom Sollwert entfernt sind.
- b) Die Summe aller Fehlerquadrate berücksichtigt zwar diesen Umstand, hat jedoch den Nachteil, daß bereits ein einziger Ausreißer sonst gute Ergebnisse völlig in den Hintergrund drängt und zu einer ungerechten Bewertung führt (z. B. für die Korrelation).
- c) Betrachtet man die Summe der linearen Fehler (dividiert durch die Anzahl der Peaks), so erkennt man, ob ein Verfahren dazu neigt, vorwiegend zu hohe oder zu niedrige Ergebnisse zu liefern. Ein niedriger mittlerer Fehler muß jedoch noch kein gutes Abzugsverfahren bedeuten, da sich hohe positive Fehler gerade mit hohen negativen Fehlern kompensieren können.

* Das bezieht sich nur auf das Teilprogramm zum Bremsuntergrundabzug. Viele andere Subroutinen der EDAX-Programme sind jedoch als sehr hilfreich anzusehen und bedürfen keiner Abänderung. Eigenentwicklung wäre in diesen Fällen überflüssig.

Programmbezeichnung	a) Zahl der analysierten Peaks n	Davon innerhalb des max. zul. Fehlers	%	b) Summe der Fehlerquadrate $\Sigma \Delta x^2$		c) Mittlerer Fehler			d) Mittlere Überschreitung in %
				Treffer	tatsächlich	zulässig	$\Sigma \Delta x : n$	$\Sigma \Delta x : n$	
Lin. Abzug, Meth. 1	8	5	63 %	3 152	849	- 3,3 %	10,5 %	6,8 %	56 %
Lin. Abzug, Meth. 2	8	1	13 %	1 269	849	- 2,6 %	9,7 %	6,8 %	131 %
Lin. Abzug, Meth. 3	8	4	50 %	2 431	849	- 1,8 %	10,1 %	6,8 %	66 %
EDIT 1/707	12	1	8 %	23 500	928	- 32,8 %	33,8 %	5,7 %	657 %
EDIT 7/EM (EP)	12	4	33 %	7 467	928	+ 5,7 %	15,9 %	5,7 %	583 %
Korrektur nach Schwarz	12	8	67 %	1 008	928	+ 2,3 %	5,3 %	5,7 %	20 %
Korrelation	12	8	67 %	4 562	928	+ 7,9 %	8,7 %	5,7 %	236 %

Tabelle 3
Bewertung der verschiedenen Untergrundabzugsverfahren

Programmbezeichnung	a) Treffer	b) Summe der Fehlerquadrate		c) Mittlerer Fehler			d) Mittlere Überschreitung
		tats.	zul.	$\Sigma \Delta x : n$	$\Sigma \Delta x : n$	zulässig	
Linearer Abzug	1/8 = 13 %	1042	(477)	- 0,9 %	9,2 %	(5,0 %)	253 %
EDIT 1/707	0/12 = 0 %	22495	(522)	- 31,1 %	32,5 %	(4,3 %)	819 %
EDIT 7/EM/EP	4/12 = 33 %	3673	(522)	+ 1,1 %	11,6 %	(4,3 %)	438 %
Korrektur Schwarz	9/12 = 75 %	523	(522)	+ 1,3 %	4,1 %	(4,3 %)	71 %
Korrelation	5/12 = 42 %	3587	(522)	+ 5,3 %	7,7 %	(4,3 %)	277 %

Tabelle 3 a
Wie Tabelle 3, jedoch auf 15 Kanäle eingenger Integrationsbereich

Der mittlere lineare Fehler der Absolutbeträge vermeidet diesen Nachteil, sagt jedoch nichts darüber aus, in welche Richtung die Abweichungen gehen und wie diese sich relativ zum zulässigen Fehler verhalten.

d) Deshalb scheint es gerechtfertigt, auch die prozentuale mittlere Überschreitung gegenüber dem maximal zulässigen Fehler als Maß zu benutzen, d.h. die tatsächliche Abweichung durch den maximalen Fehler (letzte Spalte der Tabelle 2) zu dividieren und aus allen Werten das Mittel zu bilden.

In allen Fällen ergibt sich, daß die Korrekturmethode nach Schwarz am besten abschneidet, gefolgt vom linearen Abzugsverfahren nach Methode 1 oder 3 und daß die beiden EDAX-Programme das Schlußlicht bilden. Das Korrelationsverfahren ist sehr empfindlich gegenüber Absorptionskanten und falschen Peakbreiten und rangiert je nach Bewertungsverfahren auf vorderen oder mittleren Plätzen.

Zusammenfassung

Die vorliegende Untersuchung zeigt, daß ein linearer Untergrundabzug auch bei energiedispersiven Röntgenspektren zu befriedigenden Resultaten führt, wogegen die käuflich zu erwerbenden Untergrundabzugsprogramme der Firma EDAX wesentlich schlechtere Werte liefern. Ferner wird gezeigt, daß es Abzugsverfahren gibt, die zu guten Ergebnissen führen, so daß eine automatische Spektrenauswertung nicht zwangsläufig schlechtere Resultate zur Folge hat. Anhand verschieden schwieriger Peaks werden die mit den einzelnen Verfahren verbundenen Fehler errechnet und eine Bewertung der Verfahren versucht.

Literatur

- [1] Schwarz, W.: Eine einfache, Fourier gestützte Methode zur Beseitigung statistischen Untergrundes in einzelnen Spektral-Peaks (in Vorbereitung)
- [2] Connelly, A.L. and W.W. Black: Automatic Location and Area Determination of Photopeaks. Nucl. Instr. and Meth. 82 (1970) 141