

V602 : Röntgenemissions- und Absorptionsspektren

Christian Geppert

Matthias Althaus

19. November 1996

1 Theorie

1.1 Das Röntgen-Emissionsspektrum

Röntgenstrahlung, also elektromagnetische Strahlung zwischen 10^{-8}m und 10^{-11}m Wellenlänge, entsteht beim Aufprall schneller Elektronen auf ein Atom. Es ist zu unterscheiden zwischen

- Röntgenbremsstrahlung
- Charakteristische Röntgenstrahlung

Zusammengefasst ergeben diese Strahlungen das *charakteristische Röntgenspektrum* für das mit schnellen Elektronen beschossene Atom (\rightarrow Material).

1.1.1 Die Röntgenbremsstrahlung

Elektronen treffen auf ein Atom und dringen in die Atomhülle ein. Hier werden sie durch das Kernfeld abgebremst, seine kinetische Energie wird in Wärme umgewandelt, für sehr viele Elektronen entsteht ein kontinuierliches Spektrum. Aus dem Energiesatz und der Einsteinschen Beziehung zwischen Energie und Frequenz eines Teilchens folgt für die Grenzfrequenz ν_{max} und die Grenzwellenlänge λ_{gr} :

$$E_{Kin} = E_{Brems} = eU = h\nu_{max}; \lambda_{gr} = \frac{ch}{eU}$$

Es sind:

eU die Beschleunigungsenergie,

h das Plancksche Wirkungsquantum,

c die Lichtgeschwindigkeit

1.1.2 Die charakteristische Röntgenstrahlung

Die charakteristische Röntgenstrahlung weist ein Linienspektrum auf, dessen Wellenlängen von dem mit Elektronen beschossenen Material abhängen (Voraussetzung hierfür ist, dass die Elektronen eine Mindestenergie besitzen). Durch die auftreffenden Elektronen werden aus vollbesetzten inneren Schalen Elektronen ausgelöst. Die so entstandenen Löcher werden durch Elektronen der äusseren Schalen aufgefüllt. Die Energie, die bei dem Sprung eines Elektrons auf eine energetisch niedrigere Schale frei wird, lässt sich folgendermassen berechnen:

$$E_n = -\frac{R_\infty z_{eff}^2}{n^2}$$

(Energie der Elektronen auf der n-ten Schale)

Daraus folgt für den Übergang von der m-ten zur n-ten Schale:

$$h\nu_{m,n} = R_\infty z_{eff}^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Hierbei sind:

R_∞ die *Rydberg-Energie*

z_{eff} die effektive Kernladungszahl

m, n die Hauptquantenzahlen

Nur die so errechneten Energien werden abgestrahlt.

1.2 Das Röntgen-Absorptionsspektrum

Durchdringen elektromagnetische Wellen Materie, kommt es im allgemeinen zu einer energie- und materialabhängigen Schwächung der Strahlungsintensität. In Abhängigkeit von der Kernladungszahl und der Energie der Strahlung ist die Absorptionswahrscheinlichkeit der Quanten zu sehen. Die Röntgenquanten werden von Elektronen der inneren Schalen (K, L) absorbiert. Durch diese Energieaufnahme können die Elektronen den Atomverband verlassen. Da das Elektron praktisch in den kontinuierlichen Energiebereich oberhalb der Ionisationsgrenze übergeht, folgt daraus, dass das Absorptionsspektrum kontinuierlich ist.

1.3 Der Bragg-Reflex

Zur Messung der Energie ist es am einfachsten, die Wellenlänge λ zu messen, denn E lässt sich aus λ berechnen: $E = \frac{hc}{\lambda}$

Für die Wellenlängenmessung benutzt man Interferenzerscheinungen, die beim Auftreffen von Röntgenstrahlen auf Kristalle entstehen. Die auf ein Kristallgitter treffende Röntgenstrahlung wird, da sie auf die regelmässig angeordneten Gitteratome trifft, reflektiert. Es werden dabei abhängig vom Einfallswinkel nur Quanten bestimmter Wellenlänge reflektiert. Damit es nicht zur destruktiven Interferenz kommt, muss die folgende *Braggsche Reflexionsbedingung* erfüllt sein:

$$2d\sin\theta = n\lambda$$

Hierbei sind:

d die Gitterkonstante (Abstand der Gitterebenen)

θ der Einfallswinkel

n eine natürliche Zahl (hier: $n=1$)

2 Durchführung und Auswertung

2.1 Messung des Bragg-Reflexes

Der Reflexionswinkel φ des Kristalls ist auf 14° eingestellt. Zur Untersuchung des *Bragg*-Reflexes wird an der Röhre eine möglichst konstante Spannung von $U = 22kV$ eingestellt. Als Meßzeit wird für alle Messungen $t = 5s$ gewählt. Gemessen wird nun die Intensität der Röntgenstrahlung in Abhängigkeit vom eingestellten Winkel θ des Zählrohres.

Die Meßwerte sind in Tabelle 1 aufgeschrieben und in den Diagrammen 1 und 2 gezeichnet. Das Diagramm 2 zeigt nur einen Ausschnitt des Winkelbereichs von $\theta = 25^\circ - 31^\circ$.

Graphisch erhält man damit für den Justierfehler $\Delta\theta$ den folgenden Wert:

$$\Delta\theta = 0,5^\circ$$

2.2 Messung des Röntgenemissionsspektrums

Das Röntgenemissionsspektrum wird aufgenommen, indem die Intensität der Röntgenstrahlung in Abhängigkeit vom Winkel $2\theta + \Delta\theta$ des Zählrohres gemessen wird.

Die Röhrenspannung wird wieder möglichst konstant bei $U = 22kV$ gehalten; die Meßzeit wird nun so gewählt, daß der relative statistische Fehler bei jeder Messung kleiner als 3% ist (d.h. Impulse $n \geq 1112$).

Die Meßwerte sind in Tabelle 2 aufgeschrieben. In den Diagrammen 3 bzw. 3A sind die Emissionsspektren aufgezeichnet (Intensität gegen Wellenlänge). Die Wellenlänge λ berechnet sich hier entsprechend der Bragg-Beziehung

$$\lambda = 2d \sin \theta$$

mit $d = 2,01 \cdot 10^{-10}m$ als Netzebenenabstand im verwendeten *LiF*-Kristall.

Aus der Kurve kann man die Peaks für die *charakteristische* Röntgenstrahlung entnehmen. Die Peaks sind bei

$$\lambda_1 = (1,545 \pm 0,030) \cdot 10^{-10}m$$

$$\lambda_2 = (1,398 \pm 0,030) \cdot 10^{-10}m$$

Der Fehler $\pm 0,030 \cdot 10^{-10}m$ in den Wellenlängen setzt sich zusammen aus dem Gaußschen Fehlerfortpflanzungsgesetz gemäß

$$\Delta\lambda = 2d \cos \theta \cdot \Delta\theta$$

mit $\Delta\theta = \sin 0,5^\circ$ und aus Diagrammablesefehlern, die man mit $\pm 0,010 \cdot 10^{-10}m$ gut abschätzen kann.

Damit ergeben sich also folgende Werte:

- CuK_α -Strahlung

$$\lambda = (1,545 \pm 0,030) \cdot 10^{-10}m$$

$$E = (1,286 \pm 0,030) \cdot 10^{-15}J = (8,023 \pm 0,187)keV$$

- CuK_β -Strahlung

$$\lambda = 1,398 \pm 0,030) \cdot 10^{-10} m$$

$$E = (1,421 \pm 0,030) \cdot 10^{-15} J = (8,869 \pm 0,187) keV$$

Durch Extrapolation auf die Intensität Null im Diagramm 3 ergibt sich die Grenzwellenlänge λ_{gr} zu

$$\lambda_{gr} = (0,52 \pm 0,03) \cdot 10^{-10} m$$

und damit

$$E_{gr} = (3,82 \pm 0,20) \cdot 10^{-15} J = (23,8 \pm 1,2) keV$$

Die theoretischen Werte für die CuK_α -Strahlung lauten gemäß

$$E = R_\infty z_{eff}^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

mit $R_\infty = 2,1798901 \cdot 10^{-18} J$, $z_{eff} = 28$, $n = 1$ und $m = 2$:

$$E = 1,28 \cdot 10^{-15} J = 8,00 keV$$

$$\lambda = 1,55 \cdot 10^{-10} m$$

Fazit: Die experimentellen Werte stimmen gut mit den theoretischen überein.

Für die K_β -Strahlung ergibt sich mit dem oben experimentell ermittelten Energiewert E folgende effektive Kernladungszahl z_{eff} ¹

$$z_{eff} = \sqrt{\frac{E}{R_\infty \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)}} = 27,08 \pm 0,28$$

Die der Grenzwellenlänge λ_{gr} zugeordnete Energie ist theoretisch berechenbar gemäß

$$E_{gr} = eU$$

mit $U = (22 \pm 0,5) kV$ als Beschleunigungsspannung der Röntgenröhre (Der Fehler setzt sich zusammen aus der Eichgenauigkeit des Meßinstrumentes und einer nicht unterdrückbaren Spannungsschwankung). Daraus berechnet sich die Grenzwellenlänge zu

$$\lambda_{gr} = (0,56 \pm 0,01) \cdot 10^{-10} m$$

was einer Abweichung vom gemessenen Wert von knapp 7% entspricht. Diese Abweichung ist wohl vor allem darauf zurückzuführen, daß sich die Beschleunigungsspannung der Röntgenröhre nicht gut auf einen konstanten Wert von $U = 22 kV$ einstellen ließ.

¹ $n = 1$, $m = 3$

2.3 Röntgen-Absorptionsspektrum für Gold und Rubidium

Gegenüber der vorangegangenen Meßreihe wird nun vor das Geiger-Müller-Zählrohr einmal eine Metallfolie aus Gold und einmal eine aus Rubidium montiert. Die aufgenommenen Meßwerte sind in den Tabellen 3 (Gold) und 4 (Rubidium) dokumentiert. Die Absorption A wurde gemäß der Formel

$$A = \frac{I_{Em} - I_{Trans}}{I_{Em}}$$

berechnet. Dabei bedeuten I_{Em} die Zählrate der Emission und I_{Trans} die Zählrate der Transmission.

In den Diagrammen 4 und 5 wurden die jeweiligen Absorptionen gegen die Energie $E = \frac{hc}{\lambda}$ aufgetragen. λ berechnet sich nach der Bragg-Beziehung aus den eingestellten Winkeln θ des Kristalls.

In Diagramm 4 (Gold) kann man gut die L-Kante erkennen. Sie liegt bei

$$E_L = (11,7 \pm 0,5) \text{ keV}$$

Aus dem Diagramm 5 (Rubidium) liest man für die K-Kante folgenden Wert ab

$$E_K = (15,1 \pm 0,8) \text{ keV}$$

Zur Berechnung der effektiven Kernladungszahlen braucht man die folgenden Formeln:

$$E_K \simeq R_\infty z_{eff}^2 \left(\frac{1}{1} - \frac{1}{\infty} \right) \Rightarrow z_{eff,K} = \sqrt{\frac{E_K}{R_\infty}}$$

und

$$E_L \simeq R_\infty z_{eff}^2 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{\infty} \right) \Rightarrow z_{eff,L} = 2 \sqrt{\frac{E_L}{R_\infty}}$$

Die effektiven Kernladungszahlen berechnen sich damit zu

- Gold

$$z_{eff} = 58,6 \pm 1,2$$

- Rubidium

$$z_{eff} = 33,3 \pm 0,9$$

Die Fehler berechnen sich durch Fehlerfortpflanzung aus dem Zeichenfehler der Kurve.