

Physikalisches Anfängerpraktikum
Universität Dortmund / Fachbereich Physik

Versuch 602
Röntgen-Emissions- und Absorptionsspektren

Max-Wilhelm Bruker & Christian Jung *

Durchführung: 16. Januar 2007

*m.bruker@digitalmedia.de, Christian.Jung@uni-dortmund.de

Inhaltsverzeichnis

1 Ziel	3
2 Theoretische Grundlagen	3
2.1 Erzeugung von Röntgenstrahlung	3
2.2 Absorption von Röntgenstrahlung in Materie	5
3 Versuchsaufbau und -durchführung	6
4 Auswertung	8
4.1 Bestimmung des Auflösungsvermögens der Apparatur	8
4.2 Bestimmung der Maximalenergie des Strahlers	9
4.3 Bestimmung der Abschirmzahlen σ_1 und σ_2 von Kupfer	9
4.4 Bestimmung der Abschirmungszahl $\sigma_{1,0}$ von Niob und Germanium	10
4.5 Bestimmung der Abschirmungszahl $s_{2,1}$ von Gold und Bismut	10
5 Diskussion	11
A Literatur	11

1 Ziel

Das Ziel dieses Versuchs ist die Untersuchung des Röntgenemissionsspektrums von Kupfer und des Röntgenabsorptionsspektrums unterschiedlicher anderer Elemente. Außerdem sollen die Maximalenergie des verwendeten Strahlers und das energetische Auflösungsvermögen der Messapparatur bestimmt werden.

2 Theoretische Grundlagen

Unter Röntgenstrahlung versteht man elektromagnetische Strahlung in einem Energiebereich von etwa 10 eV bis 100 keV.

2.1 Erzeugung von Röntgenstrahlung

Wenn ein Elektron in Materie einfällt, ist es mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit möglich, dass es so tief in die Hülle eines Atoms eindringt, dass es von dessen Kernfeld beeinflusst wird. Durch Abbremsung verbunden ist. Die dadurch entstehende Strahlung bezeichnet man als Bremsstrahlung. Da bei diesem Prozess alle Beträge der Beschleunigung bis hin zur völligen Abbremsung des Elektrons möglich sind, ist das Energiespektrum der Bremsstrahlung kontinuierlich und bricht bei dem Wert ab, der der kinetischen Energie des Elektrons entspricht.

Es besteht darüber hinaus die Möglichkeit, dass das einfallende Elektron das Atom in einer seiner inneren Schalen ionisiert, indem es eines der gebundenen Elektronen herausschlägt. Dies ist nur dann möglich, wenn das einfallende Elektron eine kinetische Energie hat, die mindestens der Bindungsenergie des herausgeschlagenen Elektrons entspricht. Nach einer solchen Ionisation kehrt das Atom von allein in den Ausgangszustand zurück, indem ein Loch auf einer Schale so oft durch ein Elektron aus einer weiter außen liegenden Schale aufgefüllt wird, bis der Ausgangszustand erreicht ist. Da die Elektronen hierbei ihren Quantenzustand wechseln, wird bei diesem Vorgang elektromagnetische Strahlung emittiert. Da die Energiedifferenzen zwischen den Quantenzuständen, zwischen denen die Elektronen wechseln, diskret verteilt sind, ist auch das Energiespektrum der dadurch entstehenden Strahlung diskret. Man bezeichnet diese Strahlung als charakteristische Röntgenstrahlung, da ihr Energiespektrum vom Material des Absorbers abhängt.

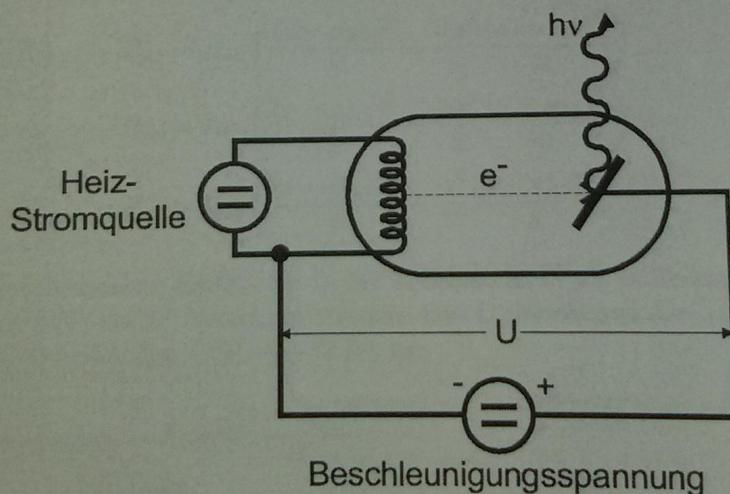


Abbildung 1: Schematische Darstellung einer Röntgenröhre

Die schnellen Elektronen, die zum Erzeugen der Röntgenstrahlung nötig sind, erhält man beispielsweise in einer Röntgenröhre, wie sie in Abbildung 1 schematisch dargestellt ist. Darin werden durch thermische Emission freie Elektronen mit einer Glühkathode erzeugt und mit einem elektrischen Feld zur Anode beschleunigt, wo sie auftreffen, was aufgrund der vorher beschriebenen Effekte zur Emission von Röntgenstrahlung führt. In diesem Fall ist die Maximalenergie E_{\max} gegeben durch

$$E_{\max} = e_0 U, \quad (2.1)$$

wobei U die Beschleunigungsspannung ist.

Zur Vereinfachung der Zusammenhänge bei der Emission der charakteristischen Röntgenstrahlung kann man annehmen, dass dasjenige Elektron, das die Energie an das entstehende Röntgenquant abgibt, sich in einem Coulomb-Feld einer einzelnen Ladung befindet, wobei man den abschirmenden Einfluss der restlichen Elektronen berücksichtigt, indem man eine effektive Größe z_{eff} statt der Kernladungszahl z verwendet, wobei $z_{\text{eff}} < z$ ist. Unter diesen Bedingungen gibt das Elektron beim Übergang von der m -ten zur n -ten Schale eine Energie vom Betrag

$$E_{m,n} = R_{\infty} z_{\text{eff},n,m}^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (2.2)$$

ab. Die sich hieraus ergebenden möglichen Energiebeträge sind in Abbildung 2 veranschaulicht.

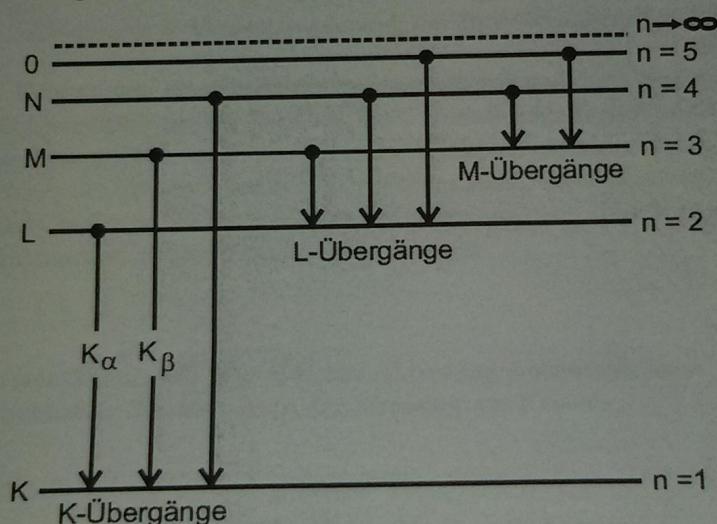


Abbildung 2: Veranschaulichung der Röntgenübergänge in einer Elektronenhülle gemäß Gleichung (2.2)

Gleichung (2.2) ist allerdings nur für kleine z gültig, da ansonsten relativistische Effekte und der Einfluss der Drehimpulse des betrachteten Elektrons zum Tragen kommen. Eine bessere Näherung stellt die Sommerfeldsche Feinstrukturformel dar, in der diese Effekte berücksichtigt sind:

$$E_{n,j} = -R_{\infty} \left(z_{\text{eff},1}^2 \frac{1}{n^2} + \alpha^2 z_{\text{eff},2}^4 \frac{1}{n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right), \quad (2.3)$$

bei j die gesamte Drehimpulsquantenzahl des betrachteten Elektrons und α die Sommerfeld-

Versuch 602 - Röntgen-Emissions- und Absorptionspektren

$$z_{\text{eff}_1} = z - \sigma, \quad (2.4)$$

$$z_{\text{eff}_2} = z - s. \quad (2.5)$$

Hierbei stellen σ die Konstante der vollständigen Abschirmung und s die Konstante der inneren Abschirmung dar. Beide Konstanten hängen von der Hauptquantenzahl n und von der Bahndrehimpulszahl l ab, weshalb zu einer gegebenen Hauptquantenzahl n mehrere Energieniveaus existieren. Diese Tatsache wird als Feinstruktur-Aufspaltung bezeichnet.

2.2 Absorption von Röntgenstrahlung in Materie

Trifft Röntgenstrahlung auf Materie, so erfährt die Strahlung durch Absorption und Streuung eine Abschwächung ihrer Intensität. Die letztergenannte, als Compton-Effekt bezeichnete Streuung spielt nur bei elektronenarmen Atomen eine Rolle und soll deshalb nicht weiter berücksichtigt werden. Die Absorption der Röntgenstrahlung kommt durch den inneren Photoeffekt zustande: Das einfallende Röntgenquant entfernt mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit ein Hüllenelektron in einem Atom des Absorbers aus seiner Bindung und wird dabei zerstört. Dieser Prozess kann nur stattfinden, wenn die Energie $h\nu$ des Quants größer als die Bindungsenergie E_B des Elektrons ist. Für den Absorptionskoeffizienten μ gilt dabei näherungsweise:

$$\mu \sim z^5 E^{-3.5}. \quad (2.6)$$

Es ergeben sich allerdings in der Energieabhängigkeit des Absorptionskoeffizienten Unstetigkeiten (sog. Absorptionskanten) an den Stellen, wo die Quanten hinreichend energiereich sind, um eine der inneren Schalen der Absorberatome zu ionisieren. Da die so aus ihrer Bindung entfernten Elektronen aufgrund der Besetzung der anderen inneren Schalen einen Zustand oberhalb der Ionisierungsgrenze oder in unmittelbarer Nähe davon annehmen müssen, muss ein einfallendes Röntgenquant, um diesen Vorgang hervorrufen zu können, mindestens eine Energie von $E(n) - E(\infty)$ haben. Die Absorptionsenergien für die K- und L-Schale ergeben sich dann mit den Gleichungen (2.3), (2.4) und (2.5) zu

$$h\nu_{K,\text{Abs}} = E_{1,\frac{1}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left((z - \sigma_{1,0})^2 + \frac{\alpha^2}{4} (z - s_{1,0})^4 \right) \quad (2.7)$$

$$h\nu_{L,\text{Abs},I} = E_{2,0,\frac{1}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left(\frac{(z - \sigma_{2,0})^2}{8} + \frac{5\alpha^2}{8} \frac{(z - s_{2,0})^4}{8} \right) \quad (2.8)$$

$$h\nu_{L,\text{Abs},II} = E_{2,1,\frac{1}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left(\frac{(z - \sigma_{2,1})^2}{4} + \frac{5\alpha^2}{8} \frac{(z - s_{2,1})^4}{8} \right) \quad (2.9)$$

$$h\nu_{L,\text{Abs},III} = E_{2,1,\frac{3}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left(\frac{(z - \sigma_{2,1})^2}{4} + \frac{\alpha^2}{8} \frac{(z - s_{2,1})^4}{8} \right) \quad (2.10)$$

Wegen der niedrigen Anzahl an Elektronen in der K-Schale ist $s_{1,0} = 0$. Es kann daher die Größe $\sigma_{1,0}$ mit Gleichung (2.7) direkt berechnet werden. Die Differenz aus $h\nu_{L,\text{Abs},II}$ und $h\nu_{L,\text{Abs},III}$ ergibt sich mit den Gleichungen (2.9) und (2.10) zu

$$h\nu_{L,\text{Abs},II} - h\nu_{L,\text{Abs},III} = R_{\infty} \alpha^2 \frac{(z - s_{2,1})^4}{16}. \quad (2.11)$$

Für $z > 70$ ist diese Näherung allerdings zu ungenau, weshalb für die Bestimmung $s_{2,1}$ mehr Terme berücksichtigt werden, was auf folgende Gleichung führt:

$$(z - s_{2,1})^2 = \left(\frac{4}{\alpha} \sqrt{\frac{\Delta E}{R_\infty}} - \frac{5\Delta E}{R_\infty} \right) \left(1 + \frac{19\alpha^2}{32} \frac{\Delta E}{R_\infty} \right), \quad \Delta E = h\nu_{L,Abs,III} - h\nu_{L,Abs,II} \quad (2.12)$$

3 Versuchsaufbau und -durchführung

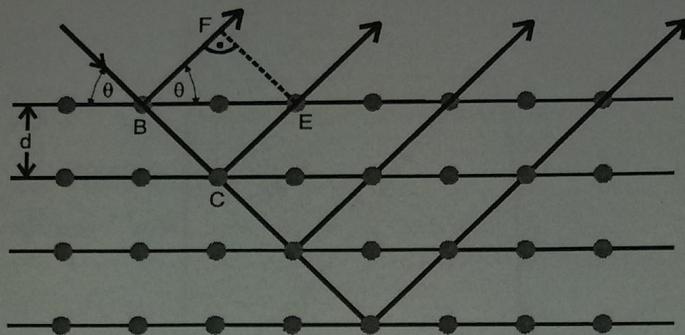


Abbildung 3: Veranschaulichung der Interferenzbedingung

Zur Messung der Energie von Röntgenstrahlung machen wir uns das Phänomen der Interferenz zunutze. Fällt Röntgenstrahlung, die ja neben ihrer Quanteneigenschaft auch als elektromagnetische Welle aufgefasst werden kann, unter einem Winkel θ auf einen Kristall, so wird sie an den Elektronenhüllen der Atome elastisch in zufällige Richtungen gestreut, so dass an einem beobachteten Punkt mehrere Wellen aufeinandertreffen und zur Interferenz gebracht werden. Bei einem Gangunterschied zweier benachbarter Strahlen von

$$\Delta = n\lambda \quad (n = 1, 2, 3 \dots) \quad (3.1)$$

tritt konstruktive Interferenz auf. Wie man aus Abbildung 3 ermitteln kann, ist der Gangunterschied zweier benachbarter Strahlen nach der Streuung am Kristall

$$\Delta = 2d \sin \theta, \quad (3.2)$$

wobei d der Netzebenenabstand des Kristalls ist. Man erhält daraus:

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad (3.3)$$

was als die Braggsche Reflexionsbedingung bezeichnet wird. Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass unter den in diesem Versuch betrachteten Bedingungen nur Interferenz der Ordnung $n = 1$ auftritt, ergibt sich mit dem Zusammenhang

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (3.4)$$

folgende Winkelabhängigkeit der Energie:

$$E = \frac{hc}{2d \sin \theta}. \quad (3.5)$$

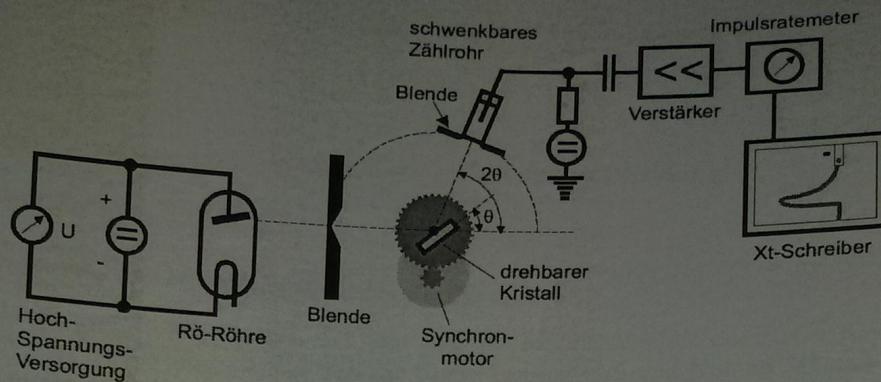


Abbildung 4: Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus

Wir verwenden für diesen Versuch einen Aufbau gemäß Abbildung 4. Eine Röntgenröhre emittiert Röntgenstrahlung, die durch eine Blende auf einen drehbaren Kristall fällt und von dort gemäß der o.g. Reflexionsbedingung zum Zählrohr reflektiert wird. Mit einem Zahnradgetriebe soll sichergestellt werden, dass das Zählrohr doppelt so weit geschwenkt wird wie der Kristall. Das Zählrohr ist mit einer elektronischen Schaltung verbunden, die die Impulse pro Zeiteinheit zählt und als Spannung auf einen X-Y-Schreiber gibt. Wir erhalten so durch elektromotorische Drehung des Kristalls und des Zählrohrs ein Diagramm, in dem die Strahlungsintensität über dem Winkel aufgetragen ist, woraus sich aufgrund der obigen Voraussetzungen die Strahlungsintensität in Abhängigkeit der Energie ermitteln lässt. Wir erhalten mit dieser Apparatur sowohl die Emissionskurve des verwendeten Anodenmaterials als auch die Absorptionskurven der zu untersuchenden Absorber, die dann jeweils vor dem Zählrohr angebracht werden. Der verwendete Reflexionskristall besitzt einen Netzzlinienabstand von

$$d = 2,01 \cdot 10^{-10} \text{ m.} \quad (3.6)$$

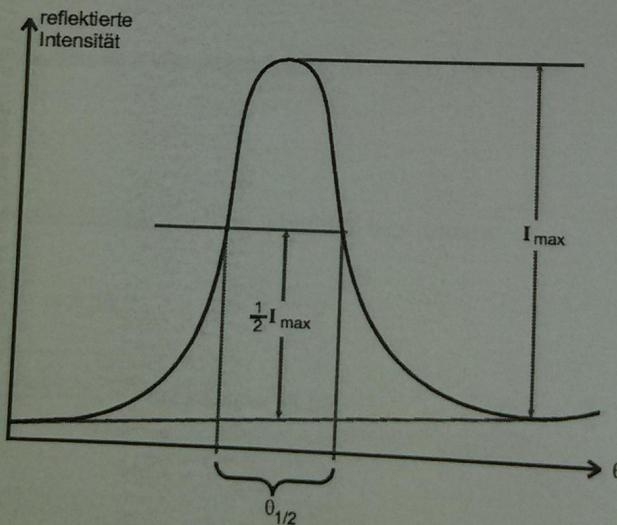


Abbildung 5: Veranschaulichung der Bedeutung des Auflösungsvermögens

Da die Apparatur nur ein endliches energetisches Auflösungsvermögen hat, ist dessen Wert von Interesse. Das Auflösungsvermögen ist definiert als die Differenz der beiden Energien um eine Emissionslinie herum, bei denen die gemessene Strahlungsintensität auf die Hälfte ihres Maximums abgesunken ist. Dieser Zusammenhang ist in Abbildung 5 veranschaulicht. Da das Auflösungsvermögen endlich ist, werden die Absorptionskanten, die gemäß den theoretischen Vorüberlegungen unstetig sein sollten, mit einer endlichen Steilheit gemessen. Dieser Umstand macht es notwendig, die wahre Stelle der Absorptionskanten durch Mitteln der niedrigsten und der höchsten Intensität zu bestimmen, wie es in Abbildung 6 dargestellt ist.

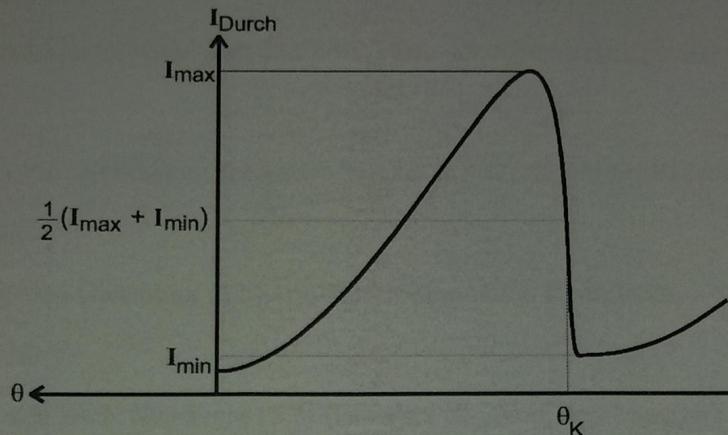


Abbildung 6: Veranschaulichung des Verfahrens zur Ermittlung der Absorptionskante aus einem endlich gut aufgelösten Diagramm

4 Auswertung

Da zahlreiche Materialkonstanten verwendet wurden, zeigt Tabelle 1 eine Übersicht dieser.

Element	z	$M [u]$
Kupfer	29	63,5
Niob	41	92,9
Germanium	32	72,61
Gold	79	197,0
Bismut	83	209,0

Tabelle 1: Übersicht über die Ordnungszahlen und Atommassen der verwendeten Elemente

4.1 Bestimmung des Auflösungsvermögens der Apparatur

Aus dem Diagramm wurden, wie es in Abbildung 5 dargestellt ist, die Winkel $\theta_{1,2}$ abgelesen, bei denen die Intensität auf die Hälfte ihres Maximums abgesunken ist:

$$\theta_1 = 19,98^\circ,$$

$$\theta_2 = 20,46^\circ.$$

Daraus errechnen sich nach Gleichung (3.5) die beiden Auflösungsenergien:

$$\begin{aligned} E_{\theta_1} &= 9,03 \text{ keV}, \\ E_{\theta_2} &= 8,82 \text{ keV}. \end{aligned}$$

Die Differenz dieser beiden Werte ist nun die gesuchte Energieauflösung:

$$\Delta E = E_{\theta_2} - E_{\theta_1} = 0,20 \text{ keV}. \quad (4.1)$$

4.2 Bestimmung der Maximalenergie des Strahlers

Aus der Messkurve zu Kupfer lässt sich nun auch die Maximalenergie des Strahlers errechnen. Dazu liest man den Winkel ab, bei dem die Kurve beginnt sich von Null zu unterscheiden. Es wurde folgender Winkel abgelesen:

$$\theta_{\max} = 8,0^\circ.$$

Es ergibt sich also mit Gleichung (3.5) eine Maximalenergie von

$$E_{\max} = 22,2 \text{ keV}. \quad (4.2)$$

Im Vergleich zum erwarteten Wert von

$$e_0 U = 24 \text{ keV} \quad (4.3)$$

ergibt sich eine relative Abweichung von $-7,5\%$, was darauf schließen lässt, dass sich die Maximalenergie mit dieser Methode nicht zuverlässig ablesen lässt.

4.3 Bestimmung der Abschirmzahlen σ_1 und σ_2 von Kupfer

Aus der Absorptionskurve wurden folgende Winkel für K_α und K_β abgesehen:

$$\theta_\alpha = 22,3^\circ,$$

$$\theta_\beta = 20,2^\circ.$$

Nach Gleichung (3.5) lassen sich die zugehörigen Energien berechnen:

$$E_\alpha = 8,12 \text{ keV}, \quad (4.4)$$

$$E_\beta = 8,95 \text{ keV}. \quad (4.5)$$

Man kann nun daraus die Abschirmzahlen wie folgt bestimmen:

$$\sigma_1 = z_{\text{Cu}} - \sqrt{\frac{E_\beta}{R_\infty}} = 3,35, \quad (4.6)$$

$$\sigma_2 = z_{\text{Cu}} - 2\sqrt{\frac{R_\infty(z_{\text{Cu}} - \sigma_1)^2 - E_\alpha}{R_\infty}} = 13,40. \quad (4.7)$$

4.4 Bestimmung der Abschirmungszahl $\sigma_{1,0}$ von Niob und Germanium

Aus der Absorptionskurve von Niob wurde unter Berücksichtigung des am Ende von Kapitel 3 dargestellten Sachverhalts folgender Winkel für die Absorptionskante bestimmt:

$$\theta_{\text{Nb},\text{K}} = 9,6^\circ$$

Unter Ausnutzung von Gleichung (3.5) ergibt sich daraus die Energie zu

$$E_{\text{Nb},\text{K}} = 18,5 \text{ keV}. \quad (4.8)$$

Daraus errechnet sich nach Gleichung (2.7) der Wert der Abschirmungszahl:

$$\sigma_{1,0}^{\text{Nb}} = 4,67. \quad (4.9)$$

Analog ergibt sich für Germanium folgender Winkel für die Absorptionskante:

$$\theta_{\text{Ge},\text{K}} = 16,25^\circ.$$

Unter Ausnutzung von Gleichung (3.5) ergibt sich daraus die Energie zu

$$E_{\text{Ge},\text{K}} = 11,0 \text{ keV}. \quad (4.10)$$

Daraus errechnet sich nach Gleichung (2.7) der Wert der Abschirmungszahl:

$$\sigma_{1,0}^{\text{Ge}} = 3,78. \quad (4.11)$$

4.5 Bestimmung der Abschirmungszahl $s_{2,1}$ von Gold und Bismut

Bei Gold wurden folgende Winkel für die Lage der L_{II} - und L_{III} -Kanten bestimmt:

$$\theta_{\text{Au},\text{L},\text{II}} = 13,4^\circ,$$

$$\theta_{\text{Au},\text{L},\text{III}} = 15,6^\circ.$$

Daraus errechnen sich folgende Energien für die beiden Absorptionskanten:

$$E_{\text{Au},\text{L},\text{II}} = 13,3 \text{ keV}, \quad (4.12)$$

$$E_{\text{Au},\text{L},\text{III}} = 11,4 \text{ keV}. \quad (4.13)$$

Nun kann man daraus unter Verwendung von Gleichung (2.12) die gesuchte Abschirmungszahl errechnen:

$$s_{2,1}^{\text{Au}} = 3,4. \quad (4.14)$$

Bei Bismut schließlich wurden folgende Winkel abgelesen:

$$\theta_{\text{Bi},\text{L},\text{II}} = 11,4^\circ,$$

$$\theta_{\text{Bi},\text{L},\text{III}} = 13,4^\circ.$$

Daraus errechnen sich folgende Energien für die beiden Absorptionskanten:

$$E_{\text{Bi},\text{L},\text{II}} = 15,6 \text{ keV}, \quad (4.15)$$

$$E_{\text{Bi},\text{L},\text{III}} = 13,3 \text{ keV}. \quad (4.16)$$

Nun kann man daraus unter Verwendung von Gleichung (2.12) die gesuchte Abschirmungszahl errechnen:

$$s_{2,1}^{\text{Bi}} = 3,6. \quad (4.17)$$

5 Diskussion

Bei dem Versuch traten einige Fehler auf, die die Messgenauigkeit beeinträchtigten: Die Messapparatur wies einige systematische Fehler auf (unter anderem musste auf jeden abgelesenen Wert ein Winkel von $2,6^\circ$ addiert werden). Weitere Fehler traten dabei auf, dass die Skaleneinteilung per Hand in die Diagramme eingezeichnet werden musste, was ein nicht zu bestimmender systematischer Fehler ist. Sehr erfreulich ist dann, wie in Tabelle 2 dargestellt ist, der Vergleich mit den Literaturwerten, wo man sieht, dass trotz dieser Vielzahl an Fehlern eine recht genaue Messung durchgeführt wurde.

Linie	E_{gemessen} [keV]	$E_{\text{Literatur}}$ [keV]	relative Abweichung [%]
$E_{\text{Nb,K}}$	18,5	19,0	2,7
$E_{\text{Ge,K}}$	11,0	11,1	0,9
$E_{\text{Au,L,II}}$	13,3	13,7	3,0
$E_{\text{Au,L,III}}$	11,4	11,9	4,3
$E_{\text{Bi,L,II}} =$	15,6	15,7	0,6
$E_{\text{Bi,L,III}}$	13,3	13,4	0,8

Tabelle 2: Vergleich der gemessenen Werte mit den Literaturwerten

A Literatur

[Skript] Versuch 602—Röntgen-Emissions- und Absorptionsspektren.

[http://berners-lee.physik.uni-dortmund.de/praktikum/AP-Anleitungen/
Atomphysik/Versuch%20Nr.602.pdf](http://berners-lee.physik.uni-dortmund.de/praktikum/AP-Anleitungen/Atomphysik/Versuch%20Nr.602.pdf), Stand: 21.01.2007

[Fischer] Tilo Fischer, Hans-Jerg Dorn, Physikalische Formeln und Daten, 1. Auflage, 1982

[Literatur] X-ray Absorption Edges
<http://skuld.bmsc.washington.edu/scatter/periodic-table.html>, Stand: 21.01.2007