

# **602 - Röntgen-Emissions- und Absorptionsspektren**

**TU Dortmund, Fakultät Physik  
Anfänger-Praktikum**

Marcel Freitag	Felix Schwietert
<a href="mailto:marcel.freitag@tu-dortmund.de">marcel.freitag@tu-dortmund.de</a>	<a href="mailto:felix.schwietert@tu-dortmund.de">felix.schwietert@tu-dortmund.de</a>

13. Juni 2013

## Inhaltsverzeichnis

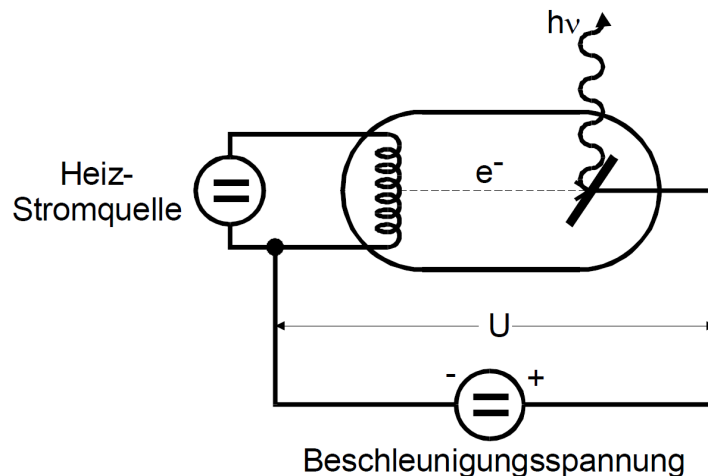
<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1	Entstehung von Röntgenstrahlung . . . . .	3
2.2	Das Emissionsspektrum . . . . .	4
2.3	Das Absorptionsspektrum . . . . .	5
2.4	Messung von Intensität und Energie der Röntgenstrahlung . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Aufbau und Durchführung</b>	<b>8</b>
<b>4</b>	<b>Auswertung</b>	<b>9</b>
4.1	Bestimmung der Abschirmungszahlen $\sigma_{1,0}$ von Zink und Brom . . . . .	9
4.2	Bestimmung der Abschirmungszahlen $s_{2,1}$ von Gold und Bismut . . . . .	9
4.3	Bestimmung der Abschirmungszahlen $\sigma_1$ und $\sigma_2$ für Kupfer . . . . .	10
4.4	Bestimmung des energetischen Auflösungsvermögens der Aparatur . . . . .	10
<b>5</b>	<b>Diskussion</b>	<b>11</b>
<b>6</b>	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>13</b>

# 1 Einleitung

Bei diesem Versuch sollen Erkenntnisse über die Erzeugung von Röntgenstrahlung und die Gestalt deren Emissionsspektrum, sowie Absorptionsspektrum unterschiedlicher Materialien gewonnen werden.

## 2 Theoretische Grundlagen

### 2.1 Entstehung von Röntgenstrahlung



**Abbildung 1:** Schematischer Aufbau einer Röntgenröhre [1]

Mit Hilfe eines Glühdrahtes werden freie Elektronen erzeugt und mit einer Anode der Spannung  $U$  beschleunigt. Die beschleunigten Elektronen treffen auf Materie, in diesem Fall Kupfer. Hierbei ist es neben Ionisationsprozessen, die keine Strahlung hervorrufen, möglich, dass ein Elektron tiefer in die Hülle eines Atoms eintritt. Bei der Ablenkung des Elektrons durch die Kernkräfte entsteht Strahlung in Form eines Photons senkrecht zur Bewegungsrichtung. Die Emissionswahrscheinlichkeit ist proportional zum Quadrat der Kernladungszahl  $Z$ . Die entstandene Strahlung hat ein kontinuierliches Spektrum und wird als Bremsstrahlung bezeichnet. Es kann auch geschehen, dass ein Elektron des Atoms aus seiner Schale herausgeschlagen wird. Die Rückkehr aus diesem instabilen Zustand in den Grundzustand geschieht mit einer Relaxationszeit von ca.  $10^{-8}$  s. Hierbei nehmen Elektronen von höheren Schalen den Platz des Herausgeschlagen ein. Bei diesen Übergängen wird die Energie ebenfalls in Form von Photonen abgegeben. Diese Strahlung hat ein diskretes Spektrum und wird als charakteristische Röntgenstrahlung bezeichnet, da sie von den Atomen der Materieschicht abhängt, mit:

$$E_{\text{photon}} = h\nu = E_n - E_m \quad (1)$$

Hierbei ist  $h$  das plancksche Wirkungsquantum,  $\nu$  die Frequenz der Strahlung und  $E_n$  und  $E_m$  die Energieniveaus der Schalen.

## 2.2 Das Emissionsspektrum

Das Spektrum der Strahlung ist die Energie in Abhängigkeit der Intensität der Röntgenquanten, wobei die Intensität die pro Zeiteinheit einfallenden Quanten beschreibt. Die Intensität der Bremsstrahlung geht asymptotisch gegen Null, wenn die Energie gegen Null geht. Anders dazu bricht das Spektrum bei einem bestimmten Wert  $E_{max}$  ab. Dieser beschreibt die kinetische Energie der Elektronen.  $E_{kin}$  wird beschrieben durch die Beschleunigungsspannung, also gilt mit der Elementarladung  $e_0$ :

$$E_{max} = h\nu_{max} = e_0 U \quad (2)$$

Über die Energieniveaus der Elektronen des emittierten Atoms kann man die Lage der Linien im Spektrum bestimmen. Sie ergeben sich als Lösung der Schrödinger-Gleichung für das jeweilige Atom. Über die Elektronenanregung kann eine Lösung des Energiewertproblems gefunden werden. Aufgrund der im Coulombfeld befindlichen Elektronen ersetzt man die Kernladungszahl durch einen Effektivwert mit  $Z_{eff} < Z$  es gilt für die potentielle Energie die Gleichung:

$$U = -\frac{Z_{eff}e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (3)$$

Mit  $\epsilon_0$  als Influenzkonstante und  $r$  als Ortskoordinate. Es gilt dann:

$$E_n = -R_\infty Z_{eff,n}^2 \frac{1}{n^2} \quad (4)$$

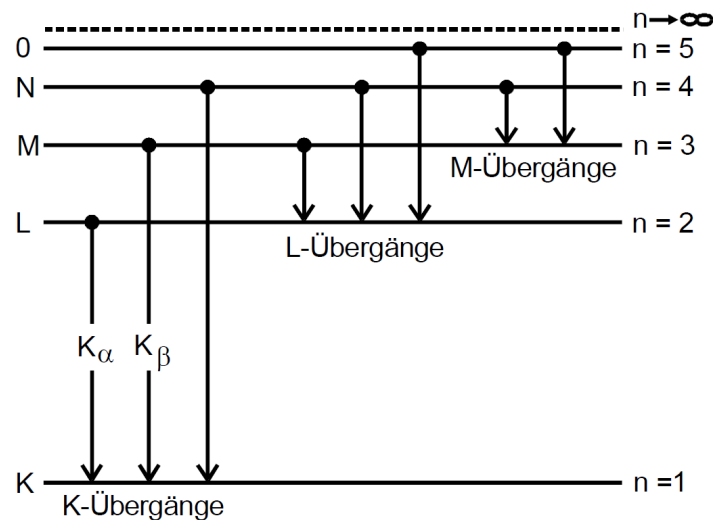
Mit  $R_\infty$  als Rydberg-Energie,  $Z_{eff}$  als effektive Kernladungszahl und  $n$  als Hauptquantenzahl. Gültig für hinreichend kleine  $Z$ . Der Übergang von der  $m$ -ten zur  $n$ -ten Schale wird dann beschrieben durch die Gleichung:

$$h\nu_{m,n} = R_\infty Z_{eff,m,n}^2 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (5)$$

Hieraus lassen sich die Positionen aller Linien des Spektrums berechnen, für  $n$  und  $m$  aus den natürlichen Zahlen und  $n < m$ . Die Abbildung 2 beschreibt die möglichen Übergänge, wobei die Länge der Pfeile äquivalent zur Energie der abgegebenen Strahlung ist. Bei mittleren Werten für  $Z$  ist die Gleichung (4) zu ungenau. Um eine höhere Genauigkeit zu erzielen müssen die relativistische Massenabhängigkeit der Elektronenmasse, und der Drehimpuls des „aktiven“ Hüllenelektrons beachtet werden. Man erhält hieraus die Sommerfeldsche Feinstrukturformel mit  $\alpha$  als Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante und  $j$  als Gesamtdrehimpulszahl.

$$E_{n,j} = -R_\infty \left( Z_{eff_1}^2 \frac{1}{n^2} + \alpha^2 Z_{eff_2}^4 \frac{1}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right) \quad (6)$$

Die Abschirmungszahlen  $Z_{eff_1}$  und  $Z_{eff_2}$  werden nun durch  $\sigma$ , die Konstante der vollständigen Abschirmung und  $s$ , die Konstante der inneren Abschirmung dargestellt. Sie beschreiben die Schwächung des Kernfeldes durch die bei der Emission unbeteiligten Elektronen.



**Abbildung 2:** Mögliche Röntgenübergänge in einer Elektronenhülle (ohne Darstellung der Feinstruktur) (nicht maßstäblich) [1]

Damit ändert sich Gleichung (6) Zu:

$$E_{n,j} = -R_\infty \left( (z - \sigma_{n,l})^2 \frac{1}{n^2} + \alpha^2 (Z - s_{n,l})^4 \frac{1}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right) \quad (7)$$

Da es zu jedem  $n$  mehrere  $l$ - und  $j$ - Werte gibt, existiert eine so genannte Feinstruktur-Aufspaltung. Man erhält schließlich die Gleichung:

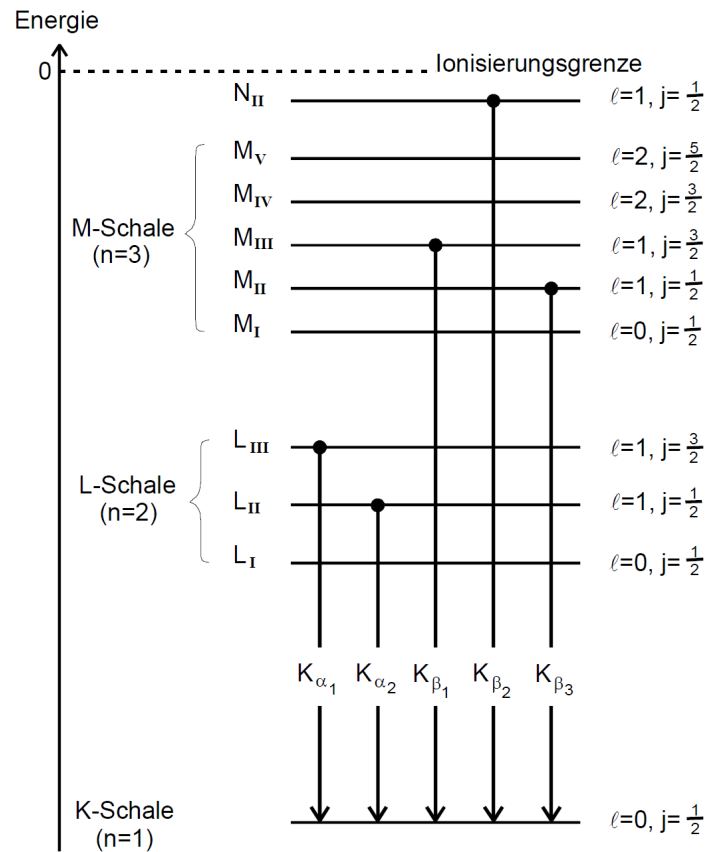
$$E = R_\infty \left( \frac{(Z - \sigma_{n,l})^2}{n^2} - \frac{(Z - \sigma_{n',l'})^2}{n'^2} + \alpha^2 \frac{(Z - s_{n,l})^4}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) - \alpha^2 \frac{(Z - s_{n',l'})^4}{n'^3} \left( \frac{1}{j' + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n'} \right) \right) \quad (8)$$

Ab einer Ordnungszahl von  $Z = 70$  müssen auch Glieder der Ordnung  $\alpha^4 z^6$  berücksichtigt werden. Im Versuch sollen Abschirmungszahlen für verschiedene Atome bestimmt werden.

### 2.3 Das Absorptionsspektrum

Wird Röntgenstrahlung auf Materie geleitet, tritt eine Schwächung der Strahlenintensität in Abhängigkeit des Stoffes auf. Diese wird durch Streuung und Absorption, dem inneren Photo-Effekt hervorgerufen. Für diesen Prozess muss die Quantenenergie größer als die Bindungsenergie sein. Das Elektron bewegt sich mit kinetischer Energie weiter. Es gilt:  $h\nu = E_B + E_{\text{kin}}$  Die Wahrscheinlichkeit des Vorgangs hängt von der Kernladungszahl  $Z$  ab. Für den Absorptionskoeffizienten gilt:

$$\mu \sim Z^5 E^{-3,5} \quad (9)$$

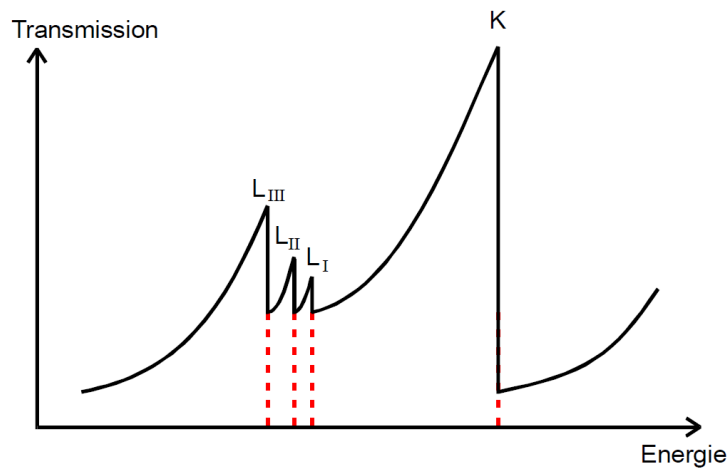


**Abbildung 3:** Feinstruktur-Aufspaltung der K-, L- und M-Schale eines Atoms sowie mögliche K-Übergänge zwischen den Niveaus (nicht maßstäblich) [1]

Für die K-Schale ergibt sich über Gleichung (8):

$$h\nu_{\text{KAbs}} = E_{1, \frac{1}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left( (z - \sigma_{1,0})^2 + \alpha^2 (z - s_{1,0})^4 \frac{1}{4} \right) \quad (10)$$

Dabei sind  $\sigma_{1,0}$  und  $s_{1,0}$  die gesuchten Abschirmungszahlen. Aufgrund der geringen Elektronenanzahl in der K-Schale, verschwindet die Konstante der Abschirmung  $s_{1,0}$  und die Abschirmzahl  $\sigma_{1,0}$  lässt sich durch eine Messung von  $h\nu_{\text{K,Abs}}$  bestimmen. Dadurch berechnet sich anhand der Energien der L-Absorption schließlich  $s_{1,0}$ . Um die Absorptionsenergie experimentell zu bestimmen wird die Intensität der Strahlung in Abhängigkeit von der Energie gemessen. Es ergibt sich eine Kurve ähnlich der in Abbildung 4. Die Absorptionsenergien können an den Absorptionskanten abgelesen werden, da diese identisch sind. Sie entstehen sobald die Energie der eingestrahlten Quanten ausreicht ein Elektron aus der Schale des Absorberatoms zu entfernen. Die K-Schale besitzt keine Feinstruktur, daher ist nur eine K-Kante festzustellen. Bei der L-Schale hingegen sind 3 Absorptionskanten zu beobachten. Die sich weiter bewegenden Elektronen werden im Compton-Effekt beteiligt und es entsteht weitere Röntgenstrahlung.

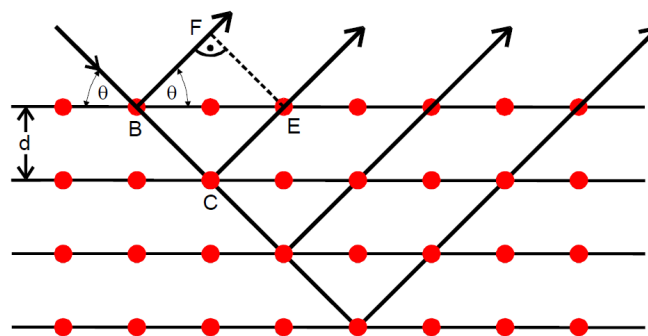


**Abbildung 4:** Ein typisches Röntgen-Absorptionsspektrum mit K- und L-Kanten (nicht maßstäblich) [1]

## 2.4 Messung von Intensität und Energie der Röntgenstrahlung

Zur Messung der Intensität wird ein Geiger-Müller-Zählrohr in Verbindung mit einem elektronischen Zählwerk und einem Zeitgeber, ein Impulsratemeter, ein Proportional-Zählrohr oder ein Szintillations-Detektor verwendet. Es besteht die Möglichkeit mit diesen Messgeräten die Energie zu bestimmen, da sie beim Nachweis eines Quants einen elektrischen Impuls generieren, der proportional zur Energie des Quants ist.

Zur Energiemessung werden die Welleneigenschaften der Strahlung betrachtet. Es treten am Kristallgitter Interferenzen nach der Bragg-Bedingung auf. Hier tritt konstruktive Interferenz immer dann auf, wenn der Gangunterschied  $\Delta$  benachbarter Strahlen ein ganzzahliges vielfaches der Wellenlänge  $\lambda$  ist.  $\Delta = n\lambda, n = 1, 2, 3, \dots$  Dies ist unter



**Abbildung 5:** Zweidimensionales Kristallgitter zur Veranschaulichung der Interferenzbedingung [1]

einem bestimmten Winkel möglich und es gilt:

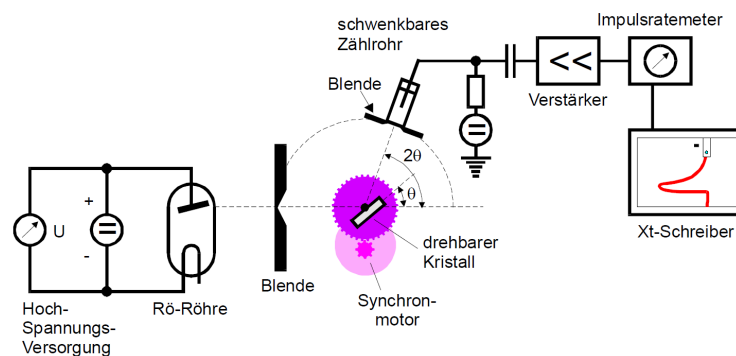
$$2d \sin \theta = n\lambda; n = 1, 2, 3, \dots (n = \text{Interferenzordnung}) \quad (11)$$

Mithilfe von  $E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$  erhält man

$$E = \frac{hcn}{2d \sin \theta} \quad (12)$$

Hierbei sind  $d$  der Nettabstand,  $n$  die Interferenzordnung und  $c$  die Vakuumlichtgeschwindigkeit. Mithilfe dieser Gleichung ist es nun möglich über den Beugungswinkel die Energie zu bestimmen. Und es ist möglich über Bestrahlung des Kristalls nahezu monoenergetische Strahlung zu erzeugen.

### 3 Aufbau und Durchführung



**Abbildung 6:** Schematische Darstellung der verwendeten Messapparatur [1]

Der Versuchsaufbau wird in Abbildung 6 dargestellt. Die Apparatur besteht aus einem Hochspannungsgenerator, der Spannungen bis zu 35 kV bei einem Strom von 1 mA generiert. Die Teilaufgaben werden mit Hochspannung ausgeführt, damit die Intensität der Strahlung möglichst hoch ist. In der Röntgen-Röhre befindet sich eine Cu-Anode. Der Strahl fällt auf einen schwenkbaren LiF-Kristall ein, dessen Netzebenenabstand  $d = 2,01 \text{ \AA}$  beträgt. Über einen Computer können die zu durchlaufenden Winkel und die Anzahl der Messungen eingegeben werden. Die Messung der Spektren läuft automatisch ab. Das Zählrohr durchfährt die Winkel und nimmt die zu messenden Werte auf. Die entstandene Kurve kann über einen Drucker ausgegeben werden.



## 4 Auswertung

### 4.1 Bestimmung der Abschirmungszahlen $\sigma_{1,0}$ von Zink und Brom

Die Lage  $\theta_K$  der K-Kanten wird wie in Abb. 7 bestimmt. Da in der K-Schale die Ab-

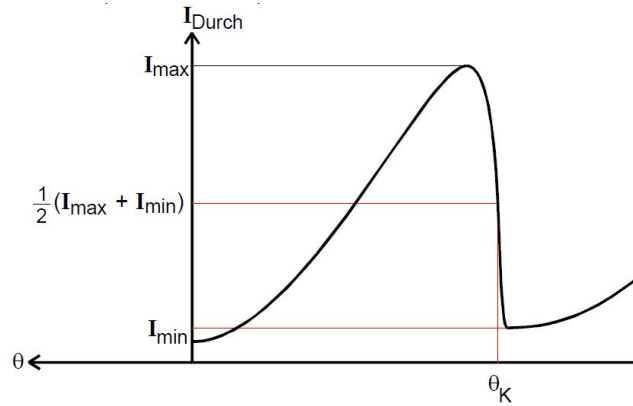


Abbildung 7: Bestimmung der Position einer Kante [1]

schirmungskonstante  $s_{0,1}$  verschwindet, folgt aus Gleichung (10):

$$h\nu_K = E_K = R_\infty \left( (Z - \sigma_{1,0})^2 + \frac{\alpha^2 Z^4}{4} \right) \quad (13)$$

$$\Leftrightarrow \sigma_{1,0} = Z - \sqrt{\frac{E_K}{R_\infty} - \frac{\alpha^2 Z^4}{4}}. \quad (14)$$

Die zu den Winkeln  $\theta_K$  gehörenden Energien lassen sich mit Gleichung (12) berechnen. Mit  $Z = 30$  für Zink und  $Z = 35$  für Brom ergeben sich die in Tabelle 1 dargestellten Werte.

	$\theta_{\min}$	$\theta_{\max}$	$\theta_K$	$E_K / \text{keV}$	$\sigma_{0,1}$
Zink	18,3°	18,9°	18,6°	9,68	3,533
Brom	12,9°	13,5°	13,2°	13,52	3,798

Tabelle 1: Berechnung für Zink und Brom

### 4.2 Bestimmung der Abschirmungszahlen $s_{2,1}$ von Gold und Bismut

Die Lage der  $L_{II}$ - und  $L_{III}$ -Kanten  $\theta_{L,II}$  und  $\theta_{L,III}$  werden wieder wie in Abb. 7 bestimmt. Die Abschirmungszahl  $s_{2,1}$  ergibt sich aus folgender Gleichung:

$$s_{2,1} = Z - \sqrt{\left( \frac{4}{\alpha} \sqrt{\frac{\Delta E}{R_\infty}} - \frac{5\Delta E}{R_\infty} \right) \left( 1 + \frac{19}{32} \alpha^2 \frac{\Delta E}{R_\infty} \right)}, \quad (15)$$

wobei  $\Delta E$  die Differenz der Energien  $E_{L,II}$  und  $E_{L,III}$ , die sich nach Gleichung (12) aus den entsprechenden Winkeln berechnen lassen. Die daraus folgenden Werte für Gold ( $Z = 79$ ) und Bismut ( $Z = 83$ ) sind in Tabelle 2 wiedergegeben.

	$\theta_{L,II}$	$\theta_{L,III}$	$E_{L,II} / \text{keV}$	$E_{L,III} / \text{keV}$	$\Delta E / \text{keV}$	$s_{2,1}$
Gold	12,6°	15,0°	14,15	11,93	2,22	0,118
Bismut	11,1°	13,3°	16,03	13,42	2,62	1,275

**Tabelle 2:** Berechnung für Gold und Bismut

### 4.3 Bestimmung der Abschirmungszahlen $\sigma_1$ und $\sigma_2$ für Kupfer

Zunächst wird die Lage der  $K_\alpha$ - und  $K_\beta$ -Linie sowie die zugehörigen Energien  $E_\alpha$  und  $E_\beta$  bestimmt (siehe Tabelle 3). Die Abschirmungszahlen können nach folgender Formel

	$\theta$	$E / \text{keV}$
$K_\alpha$	22,4°	8,100
$K_\beta$	20,2°	8,939

**Tabelle 3:** Lage der  $K_\alpha$ - und  $K_\beta$ -Linie

bestimmt werden:

$$\sigma_1 = Z - \sqrt{\frac{E_\beta}{R_\infty}}, \quad (16)$$

$$\sigma_2 = Z - 2 \sqrt{(Z - \sigma_1)^2 - \frac{E_\alpha}{R_\infty}}. \quad (17)$$

Mit  $Z = 29$  und den Werten aus Tabelle 3 folgt schließlich:

$$\sigma_1 = 3,368, \quad (18)$$

$$\sigma_2 = 13,29. \quad (19)$$

### 4.4 Bestimmung des energetischen Auflösungsvermögens der Aparatur

Wie in Abb. 8 dargestellt, werden die Winkel  $\theta_1$  und  $\theta_2$  und somit die Breite der  $K_\alpha$ -Linie bestimmt:

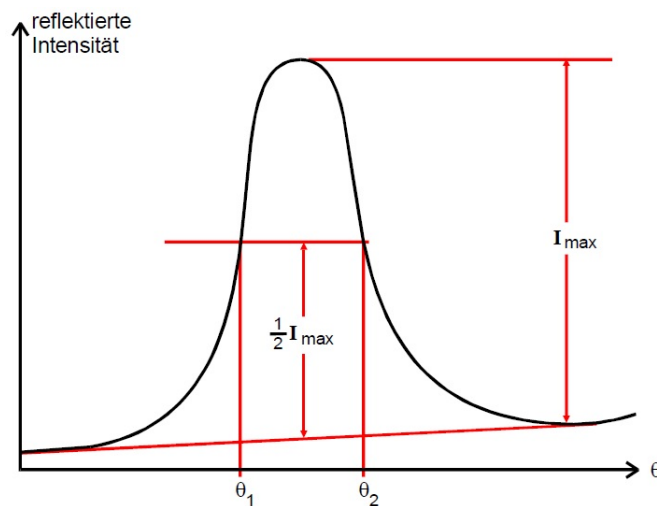
$$\theta_1 = 22,3^\circ, \quad (20)$$

$$\theta_2 = 22,8^\circ. \quad (21)$$

Aus Gleichung (12) ergeben sich folgende zugehörige Energien:

$$E_1 = 8,134 \text{ keV}, \quad (22)$$

$$E_2 = 7,965 \text{ keV}. \quad (23)$$



**Abbildung 8:** Bestimmung der Breite der  $K_{\alpha}$ -Linie [1]

Die Energieauflösung  $\Delta E$  ergibt sich aus der Differenz dieser beiden Energiewerte:

$$\Delta E = E_1 - E_2 = 169 \text{ eV}. \quad (24)$$

Die maximale Energie  $E_{\max}$  kann über den Grenzwinkel  $\theta_{\text{Gr}}$  bestimmt werden, welcher wiederum über eine Extrapolation der Messwerte berechnet wird. Dazu wird mithilfe von „gnuplot 4.6“ durch ersten drei, linear verlaufenden Messwerte eine Ausgleichsgerade gelegt und deren Schnittpunkt mit der x-Achse berechnet (vgl. Abb. 9). Für die Steigung  $m$  und den Ordinatenabschnitt  $b$  ergeben sich:

$$m = (60 \pm 2) \text{ s}^{-1}, \quad (25)$$

$$b = (-170 \pm 20) \text{ s}^{-1}. \quad (26)$$

Daraus folgt für den Grenzwinkel  $\theta_{\text{Gr}}$  und die aus Gleichung (12) berechnete Energie  $E_{\max}$

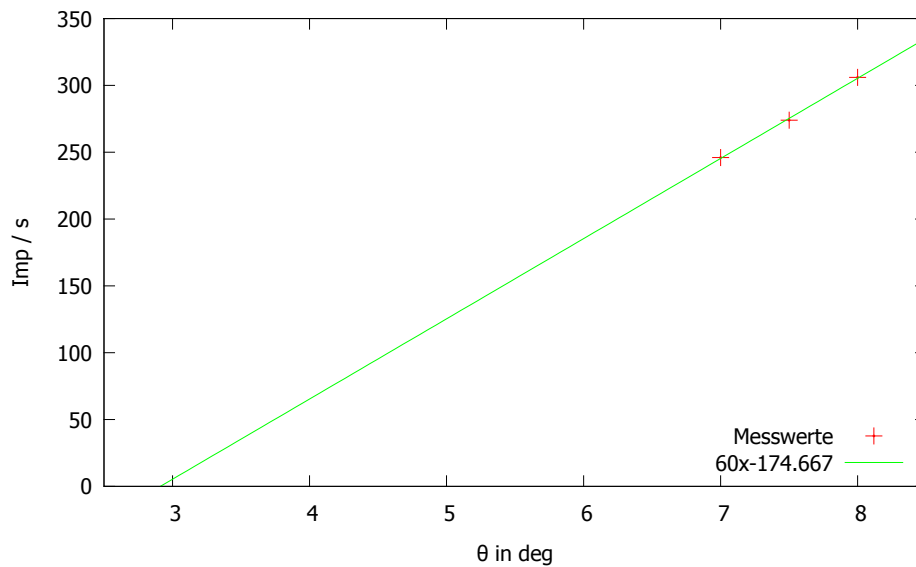
$$\theta_{\text{Gr}} = (2,9 \pm 0,3)^{\circ}, \quad (27)$$

$$E_{\max} = (61 \pm 6) \text{ keV}, \quad (28)$$

wobei die Fehler durch eine Gaußsche Fehlerfortpflanzung berechnet wurden.

## 5 Diskussion

In Tabelle 4 werden die gemessenen Energien  $E_{\text{mess}}$  mit den Literaturwerten  $E_{\text{Lit}}$  [2] verglichen. Die sehr geringen Abweichungen zeigen eine hohe Messgenauigkeit, was auch auf eine hohe Genauigkeit der aus diesen Werten bestimmten Abschimmungszahlen schließen



**Abbildung 9:** Bestimmung des Grenzwinkels  $\theta_{Gr}$

	Kante / Linie	$E_{mess}$ / keV	$E_{Lit}$ / keV	Abweichung
Zink	K	9,68	9,66	0,21 %
Brom	K	13,52	13,47	0,37 %
Gold	$L_{II}$	14,15	13,73	3,06 %
	$L_{III}$	11,93	11,92	0,08 %
Bismut	$L_{II}$	16,03	15,72	1,97 %
	$L_{III}$	13,42	13,43	-0,07 %
Kupfer	$K_{\alpha}$	8,10	8,04	0,74 %
	$K_{\beta}$	8,94	8,91	0,34 %

**Tabelle 4:** Vergleich der Messergebnisse mit den Literaturwerten

lässt. Einzig die Messung der beiden  $L_{II}$ -Kanten zeigt eine stärkere Abweichung auf, da sie zu dicht an den  $L_{I}$ -Kanten liegen, um allein aufgelöst zu werden. Die bis auf eine Ausnahme positiven Abweichungen deuten auf einen - wenn auch sehr kleinen - systematischen Fehler hin.

Die berechnete Maximalenergie stimmt bei weitem nicht mit der angelegten Spannung von 35 V überein. Dies hat wahrscheinlich zwei Gründe: Zum einen verläuft das Spektrum in dem Bereich, in den extrapoliert wurde, nicht linear sondern mit anwachsender Steigung. Zum anderen wurde eine mögliche Hintergrundstrahlung nicht betrachtet, wegen der man den Nullpunkt der Intensität weiter oben ansetzen müsste.

## 6 Literaturverzeichnis

- [1] **Versuch V602 - Röntgen-Emissions- und Absorptionsspektren**  
**Experimentelle Übungen für Physiker, Version vom 16.06.2013**  
<http://129.217.224.2/HOMEPAGE/PHYSIKER/BACHELOR/AP/SKRIPT/V602.pdf>
  
- [2] **X-ray Transition Energy Database**  
**NIST Physical Measurement Laboratory, Version vom 18.06.2013**  
<http://physics.nist.gov/PhysRefData/XrayTrans/Html/search.html>