

V602
Röntgen-Emissions- und
Absorptionsspektren
TU Dortmund, Fakultät Physik
Anfänger-Praktikum, Dienstag

Marie Schmitz
marie.schmitz@tu-dortmund.de

Marcel Gerhardt
marcel.gerhardt@tu-dortmund.de

16.April 2013

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theorie	1
2.1	Entstehung von Röntgenstrahlung	1
2.2	Das Emissionsspektrum	2
2.3	Das Absorptionsspektrum	3
2.4	Messung von Intensität und Energie der Röntgenstrahlung	5
3	Aufbau und Durchführung	6
4	Auswertung	6
4.1	Bestimmung der Abschirmungszahl $\sigma_{1,0}$ für Brom und Zink	6
4.2	Bestimmung der Abschirmungszahl $s_{2,1}$ für Gold und Quecksilber	7
4.3	Bestimmung der Abschirmungszahlen σ_1 und σ_2 für Kupfer	8
4.4	Bestimmung des energetischen Auflösungsvermögen der Apparatur	9
5	Diskussion	10

1 Einleitung

Im Versuch 601 sollen Erkenntnisse über die Erzeugung von Röntgenstrahlung und die Gestalt deren Emissionsspektrum, sowie Absorptionsspektrum unterschiedlicher Materialien gewonnen werden.

2 Theorie

2.1 Entstehung von Röntgenstrahlung

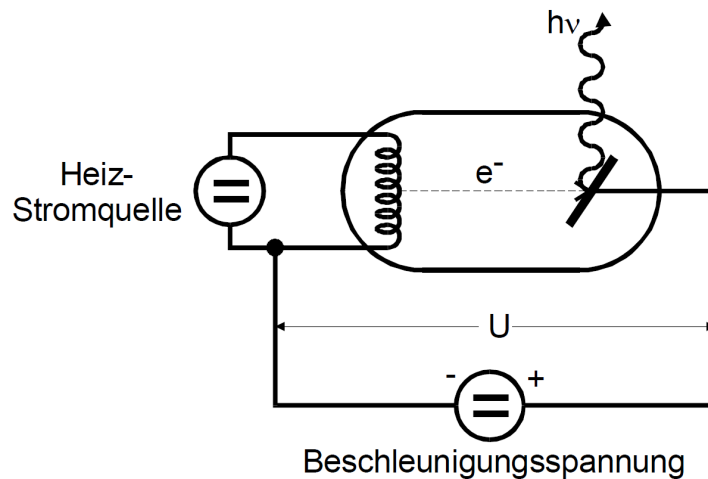


Abbildung 1: Schematischer Aufbau einer Röntgenröhre [1]

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, ν 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 ϵ_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_∞ 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:

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

Heraus 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. 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 α als Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante und j als Gesamtdrehimpulszahl.

$$E_{n,j} = -R_\infty \left(Z_{eff1}^2 \frac{1}{n^2} + \alpha^2 Z_{eff2}^4 \frac{1}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right) \quad (6)$$

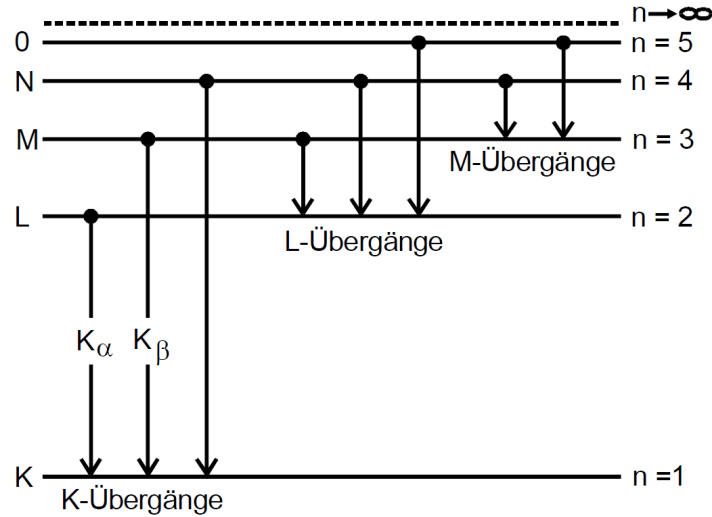


Abbildung 2: Mögliche Röntgenübergänge in einer Elektronenhülle (ohne Darstellung der Feinstruktur) (nicht maßstäblich) [2]

Die Abschirmungszahlen Z_{eff1} und Z_{eff2} werden nun durch σ , 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.

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 $\alpha^4 z^6$ 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:

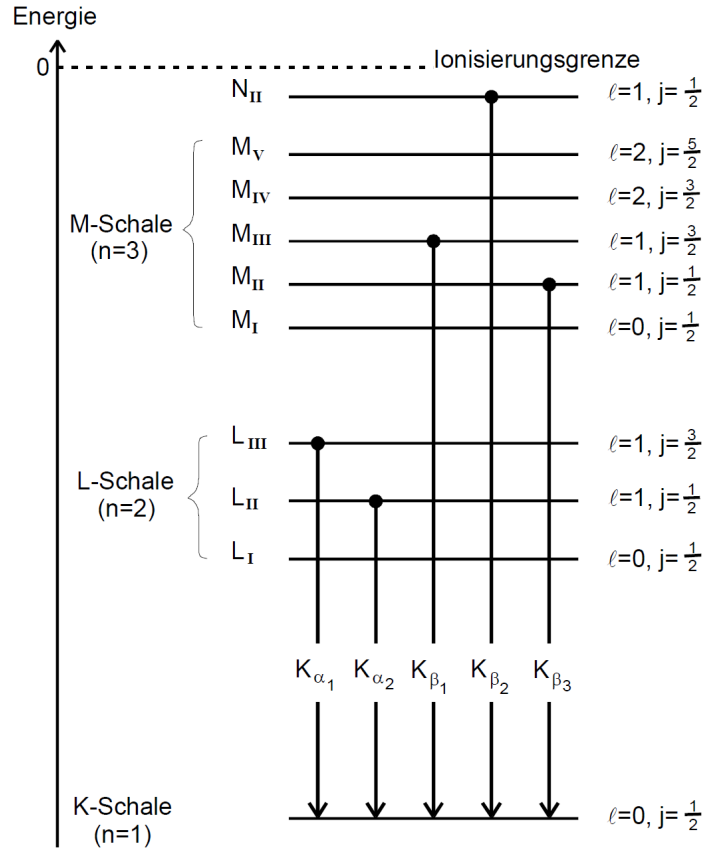


Abbildung 3: Feinstruktur-Aufspaltung der K-, L- und M-Schale eines Atoms sowie mögliche K-Übergänge zwischen den Niveaus (nicht maßstäblich) [3]

$h\nu = E_B + E_{kin}$ Die Wahrscheinlichkeit des Vorgangs hängt von der Kernladungszahl Z . Für den Absorptionskoeffizienten gilt:

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

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

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

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 eingestrahnten 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.

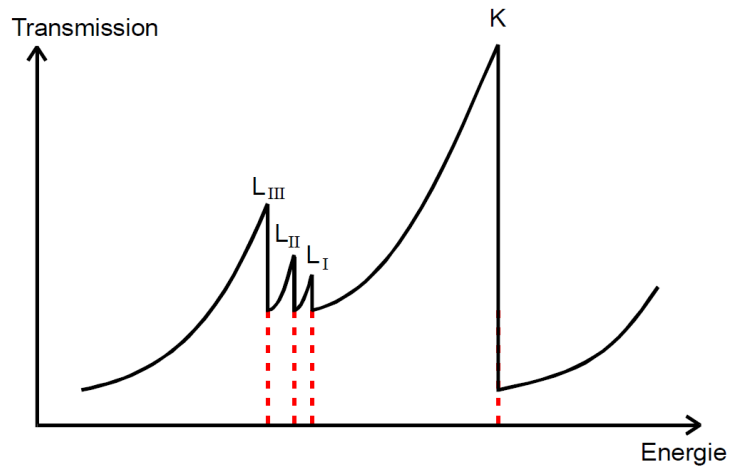


Abbildung 4: Ein typisches Röntgen-Absorptionsspektrum mit K- und L-Kanten (nicht maßstäblich) [4]

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 Δ benachbarter Strahlen ein ganzzahliges vielfaches der Wellenlänge λ ist. $\Delta = n\lambda, n = 1, 2, 3, \dots$ Dies ist unter einem bestimmten

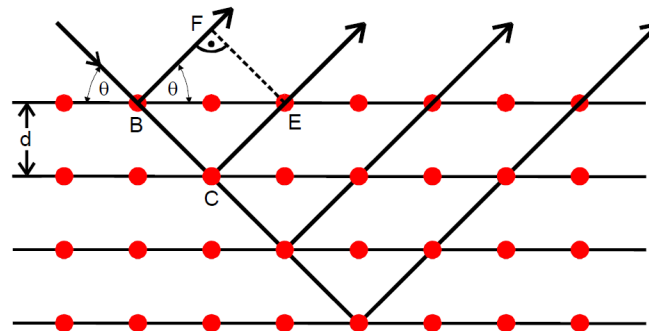


Abbildung 5: Zweidimensionales Kristallgitter zur Veranschaulichung der Interferenzbedingung [5]

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 Netzebenenabstand, 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

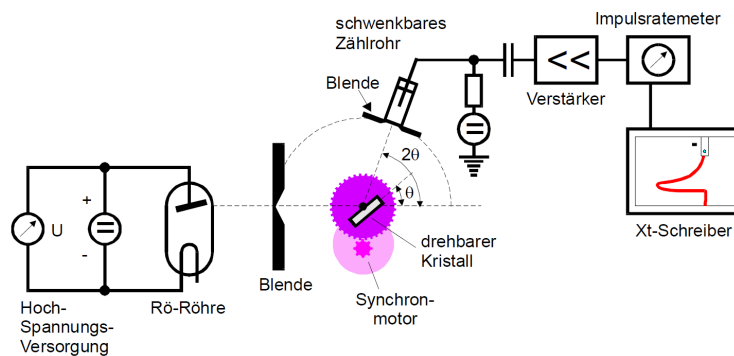


Abbildung 6: Schematische Darstellung der verwendeten Messapparatur [6]

Der Versuchsaufbau wird in Abbildung 6 dargestellt. Die Apparatur besteht aus einem Hochspannungsgenerator, der Spannungen zwischen 10 und 24 kV bei einem Strom von 1 mA generiert. Die Spannung kann mit Hilfe eines Drehknopfes variiert und über eine Anzeige abgelesen werden. Die Teilaufgaben werden mit maximaler Hochspannung ausgeführt, damit die Intensität der Strahlung möglichst hoch ist. In der Röntgen-Röhre befindet sich eine Cu-Anode. Der Strahl wird auf einen schwenkbaren LiF-Kristall fallen lassen, dessen Netzebenenabstand $d = 2,01$ 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 Abschirmungszahl $\sigma_{1,0}$ für Brom und Zink

Aus Gleichung (10) kann die Abschirmungszahl berechnet werden, nachdem die Energie E_K bestimmt worden ist.

Um die Energie zu bestimmen wird noch der Winkel θ benötigt. Da die Winkel nur abgelesen werden, wird eine Ungenauigkeit von $\pm 0,05^\circ$ angenommen. Die Winkelwerte sind in Tabelle 4.1 zu finden. Mit Hilfe der Gaußschen Fehlerfortpflanzung wurde der

$\theta_{Br} [^\circ]$	$\theta_{Zn} [^\circ]$
13,8	18,8

Tabelle 4.1: Winkel θ für Brom und Zink

Fehler der Energien bestimmt:

$$\Delta_{E_K} = \frac{hcn \cos(\theta)}{d(\cos(2\theta) - 1)} \Delta_\theta \quad (13)$$

Mit Gleichung (12) und (13) folgt für E_K :

$$E_{K_{Br}} = (12.976 \pm 6) \text{ eV} \quad (14)$$

$$E_{K_{Zn}} = (9.546 \pm 6) \text{ eV} \quad (15)$$

Durch Umformung der Gleichung (10) ergibt sich für die Abschirmungszahl $\sigma_{1,0}$:

$$\sigma_{1,0} = Z - \sqrt{\frac{E_K}{R_\infty} - \alpha^2 \frac{Z^4}{4}} \quad (16)$$

Auch hier wird der Fehler mittels Gaußscher Fehlerfortpflanzung bestimmt:

$$\Delta_{\sigma_{1,0}} = \frac{\Delta_{E_K}}{\sqrt{4E_K R_\infty - \alpha^2 Z^4 R_\infty^2}} \quad (17)$$

Mit Gleichung (16) und (17) folgt:

$$\text{Brom: } \sigma_{1,0} = (4436,60 \pm 0,01) \cdot 10^{-3} \quad (18)$$

$$\text{Zink: } \sigma_{1,0} = (3710,99 \pm 0,01) \cdot 10^{-3} \quad (19)$$

4.2 Bestimmung der Abschirmungszahl $s_{2,1}$ für Gold und Quecksilber

Zur Bestimmung der Abschirmungszahl wird die Differenz ΔE der Energien $E_{L_{II}}$ und $E_{L_{III}}$ benötigt. Die Energien werden wie im vorherigen Kapitel bestimmt. Damit ergibt

$\theta_{Au,L_{II}} [^\circ]$	$\theta_{Au,L_{III}} [^\circ]$	$\theta_{Hg,L_{II}} [^\circ]$	$\theta_{Hg,L_{III}} [^\circ]$
13,1	15,6	13,1	15,1

Tabelle 4.2: Winkel θ für Gold und Quecksilber

sich für Gold:

$$E_{L_{II}} = (13659 \pm 6) \text{ eV} \quad (20)$$

$$E_{L_{III}} = (11505 \pm 6) \text{ eV} \quad (21)$$

$$\Delta E = (2154 \pm 8) \text{ eV} \quad (22)$$

Und für Quecksilber folgt:

$$E_{L_{II}} = (13608 \pm 6) \text{ eV} \quad (23)$$

$$E_{L_{III}} = (11878 \pm 6) \text{ eV} \quad (24)$$

$$\Delta E = (1730 \pm 8) \text{ eV} \quad (25)$$

Durch Umstellen der folgenden Gleichung lässt sich die Abschirmzahl $s_{2,1}$ berechnen:

$$(Z - s_{2,1})^2 = \left(\frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{\Delta E}{R_\infty}} - \frac{5\Delta E}{R_\infty} \right) \left(1 + \frac{19}{32} \alpha^2 \frac{\Delta E}{R_\infty} \right) \quad (26)$$

$$\Leftrightarrow s_{2,1} = Z - \sqrt{\left(\frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{\Delta E}{R_\infty}} - \frac{5\Delta E}{R_\infty} \right) \left(1 + \frac{19}{32} \alpha^2 \frac{\Delta E}{R_\infty} \right)} \quad (27)$$

Damit ergibt sich für die Abschirmungszahl:

$$\text{Gold: } s_{2,1} = 0,67 \quad (28)$$

$$\text{Quecksilber: } s_{2,1} = 5,39 \quad (29)$$

4.3 Bestimmung der Abschirmungszahlen σ_1 und σ_2 für Kupfer

Die Abschirmungszahlen für Kupfer lassen sich aus den K_α und K_β Linien mit Hilfe der folgenden Formel bestimmen:

$\theta_{K_\alpha} [^\circ]$	$\theta_{K_\beta} [^\circ]$
22,8	20,5

Tabelle 4.3: Winkel θ für Kupfer

$$\sigma_1 = Z - \sqrt{\frac{E_{K_\beta}}{R_\infty}} \quad (30)$$

$$\sigma_2 = Z - \sqrt{-\frac{E_{K_\alpha} - R_\infty(Z - \sigma_1)^2}{R_\infty/4}} \quad (31)$$

Dazu wird zunächst die Energie der K_α und K_β Linien bestimmt.

$$E_{K_\alpha} = (7959 \pm 7) \text{ eV} \quad (32)$$

$$E_{K_\beta} = (8807 \pm 7) \text{ eV} \quad (33)$$

Die Fehler werden mittels Gaußscher Fehlerfortpflanzung bestimmt:

$$\Delta_{\sigma_1} = \frac{\sqrt{\frac{E_{K\beta}}{R_\infty}} \Delta_{E_{K\beta}}}{2E_{K\beta}} \quad (34)$$

$$\Delta_{\sigma_2} = \sqrt{\left(\frac{\Delta_{E_{K\alpha}}}{R_\infty \sqrt{(Z - \sigma_1)^2 - \frac{E_{K\alpha}}{R_\infty}}} \right)^2 + \left(\frac{2(Z - \sigma_1) \Delta_{\sigma_1}}{\sqrt{(Z - \sigma_1)^2 - \frac{E_{K\alpha}}{R_\infty}}} \right)^2} \quad (35)$$

Damit folgt für die Abschirmungszahlen σ_1 und σ_2 :

$$\sigma_1 = (3,55 \pm 0,01) \quad (36)$$

$$\sigma_2 = (13,21 \pm 0,09) \quad (37)$$

4.4 Bestimmung des energetischen Auflösungsvermögens der Apparatur

Um das Auflösungsvermögen $\theta_{1/2}$ zu bestimmen, werden zwei Winkel θ_1 und θ_2 bestimmt (s. Tab 4.4), an denen die Intensität der K_α -Linie halb so groß ist wie das Maximum. Aus den beiden Winkeln wird die Differenz $\Delta\theta$ bestimmt. Mit Gleichung (12) kann nun

θ_1 [°]	θ_2 [°]
22,8	23,3

Tabelle 4.4: Winkel θ für Kupfer

das energetische Auflösungsvermögen bestimmt werden:

$$E_{\theta_{1/2}} = (392,69 \pm 0,01) \text{ keV} \quad (38)$$

5 Diskussion

In Tabelle 5.1 werden die errechneten Energien mit den Literaturwerten¹ verglichen.

Element	Kante	Energie [keV]	Literaturwert [keV]
Br	K	12,98	13,47
Zn	K	9,55	9,66
Au	L_{II}	13,66	13,73
	L_{III}	11,51	11,92
Hg	L_{II}	13,61	14,21
	L_{III}	11,88	12,28
Cu	K_{α}	7,96	8,05
	K_{β}	8,81	8,90

Tabelle 5.1: Vergleich der errechneten Energien mit den Literaturwerten

Es ist zu erkennen, dass die errechneten Energien relativ nah an den Literaturwerten liegen. Die Abweichungen können durch einen systematischen Fehler des Versuchsaufbau entstanden sein. Dieser Fehler ist aber unmöglich zu finden, da der Versuchsaufbau nicht veränderbar war.

Literatur

- [1] Abb.1: Schematischer Aufbau einer Röntgenröhre; S.2
Versuchsanleitung TU Dortmund: Versuch Nr.602 ; am 21.04.2013 von:
<http://129.217.224.2/HOME/PAGE/PHYSIKER/BACHELOR/AP/SKRIPT/V602.pdf>
- [2] Abb.2: Mögliche Röntgenübergänge in einer Elektronenhülle (ohne Darstellung der Feinstruktur) (nicht maßstäblich); S.4
Versuchsanleitung TU Dortmund: Versuch Nr.602 ; am 21.04.2013 von:
<http://129.217.224.2/HOME/PAGE/PHYSIKER/BACHELOR/AP/SKRIPT/V602.pdf>
- [3] Abb.3: Feinstruktur-Aufspaltung der K-, L- und M-Schale eines Atoms sowie mögliche K-Übergänge zwischen den Niveaus (nicht maßstäblich); S.7
Versuchsanleitung TU Dortmund: Versuch Nr.602 ; am 21.04.2013 von:
<http://129.217.224.2/HOME/PAGE/PHYSIKER/BACHELOR/AP/SKRIPT/V602.pdf>
- [4] Abb.4: Ein typisches Röntgen-Absorptionsspektrum mit K- und L-Kanten (nicht maßstäblich); S.9
Versuchsanleitung TU Dortmund: Versuch Nr.602 ; am 21.04.2013 von:
<http://129.217.224.2/HOME/PAGE/PHYSIKER/BACHELOR/AP/SKRIPT/V602.pdf>
- [5] Abb.5: Zweidimensionales Kristallgitter zur Veranschaulichung der Interferenzbedingung; S.11

¹Quelle: <http://skuld.bmsc.washington.edu/scatter/periodic-table.html> und <http://physics.nist.gov/PhysRefData/XrayTrans/Html/search.html>

Versuchsanleitung TU Dortmund: Versuch Nr.602 ; am 21.04.2013 von:
<http://129.217.224.2/HOMEPAGE/PHYSIKER/BACHELOR/AP/SKRIPT/V602.pdf>

- [6] Abb.6: Schematische Darstellung der verwendeten Messapparatur; S.13
Versuchsanleitung TU Dortmund: Versuch Nr.602 ; am 21.04.2013 von:
<http://129.217.224.2/HOMEPAGE/PHYSIKER/BACHELOR/AP/SKRIPT/V602.pdf>