

Versuch Nr.602 - Röntgen-Emissions- und Absorptionsspektren

TU Dortmund, Fakultät Physik
Anfänger-Praktikum

Philipp Münzner

philipp.muenzner@tu-dortmund.de

Robin Sakrowski

robin.sakrowski@tu-dortmund.de

23. Mai 2013

Inhaltsverzeichnis

1	Theorie	3
1.1	Entstehung von Röntgenstrahlung	3
1.2	Erzeugung von Röntgenstrahlung	3
1.3	Röntgen Emissionsspektrum	4
1.4	Absorptionsspektrum	5
1.5	Zur Auswertung	7
2	Durchführung	8
3	Auswertung	9
3.1	Bestimmung verschiedener Abschirmungszahlen $\sigma_{1,0}$	9
3.2	Bestimmung verschiedener Abschirmungszahlen $s_{2,1}$	13
3.3	Abschätzung der Abschirmungszahlen $\sigma_{1,0}$ und $\sigma_{1,0}$ für Kupfer	16
3.4	Bestimmung des energetischen Auflösungsvermögens	18
4	Diskussion	19

1 Theorie

Unter dem Begriff der Röntgenstrahlung versteht man elektromagnetische Strahlung, die im Energiebereich von 10 bis 100 keV liegt. Damit liegt es im höherenergetischen Bereich der UV-Strahlung im Spektrum von EM-Wellen. Die Röntgenstrahlung wird eingesetzt um die inneren Elektronenhüllen von elektronenreichen Atomen zu untersuchen. Mit energieärmerer Strahlung wie Licht, UV- und Infrarotstrahlung können nur die äußeren Atomhüllen untersucht werden, z.B beim Photoeffekt.

1.1 Entstehung von Röntgenstrahlung

Dringt ein Elektron in Materie ein wird in den meisten Fällen in vielen aufeinanderfolgenden Ionisationsprozessen die kinetische Energie des Elektrons in Wärme umgewandelt. Nun kann es jedoch mit einer geringen Wahrscheinlichkeit passieren, dass ein Elektron tiefer in die Hülle eintritt und in das elektromagnetische Einflussgebiet des Atomkerns kommt. Das Elektron wird aufgrund der Coulombwechselwirkung beschleunigt. Dabei entstehen Photonen, die zumeist senkrecht zur Geschwindigkeitskomponente des Elektrons emittiert werden. Diese entstehende Strahlung wird als Bremsstrahlung bezeichnet. Das Energiespektrum ist kontinuierlich bis zu einem Maximalwert, der der gesamten kinetischen Energie des Elektrons entspricht.

Wenn ein Elektron tief in die Atomhülle eindringt kann es jedoch ebenso dazu kommen, dass das Elektron ionisiert. Wenn die Energie des Elektrons mindestens der Bindungsenergie des Hüllenelektrons entspricht wird dieses ausgeschlagen. Der entstehende Zustand ist instabil, so dass ein Elektron aus einem höheren Niveaus herabfällt und die Lücke auffüllt, wodurch wieder ein aufzufüllendes Loch entsteht, usw. Die so freiwerdende Energie wird ebenfalls in Form eines Photons freigesetzt. Das Energiespektrum ist diskret, da nur die Energiedifferenz der Schalen als Energie möglich ist. Folglich gilt hier

$$E_{Photon} = h\nu = E_n - E_m \quad (1.1)$$

mit h dem Plank'schen Wirkungsquantum, ν ist die Frequenz der Strahlung und $E_{m,n}$ sind die Energieniveaus. Diese Niveaus und damit die Frequenzen und Wellenlängen der Strahlung sind stoffspezifisch und heißen charakteristische Strahlung.

1.2 Erzeugung von Röntgenstrahlung

In der Praxis wird Röntgenstrahlung meist mit einer Röntgenröhre erzeugt(siehe Abb.1).

Im evakuierten Glaskolben werden über einem Glühdraht(als Kathode) freie Elektronen erzeugt, die durch ein E-Feld zur Anode(hier Kupfer) hin beschleunigt werden. Diese Elektronen treffen aufgrund der hohen verwendeten Spannung(hier 35 kV) mit großer kinetischer Energie auf die Anode. Hier entsteht durch die in Kapitel 1.2 beschriebenen Vorgänge die Röntgenstrahlung.

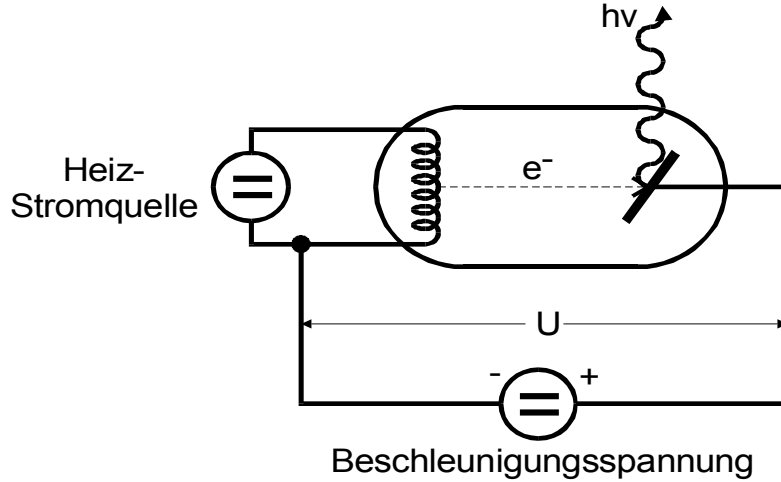


Abbildung 1: Schematischer Aufbau einer Röntgenröhre [2]

1.3 Röntgen Emissionsspektrum

Ist der genaue Aufbau eines Atoms bekannt, so können theoretisch mit Gleichung 1.1 die charakteristischen Linien berechnet werden. Die hierfür benötigten Energieniveaus erhält man aus der Schrödingergleichung. Eine Näherung ist die sogenannte *Einelektron-Anregung*, bei der davon ausgegangen wird, dass sich das emittierte Elektron im elektrischen Feld des Atoms befindet. Es muss eine effektive Kernladungszahl Z_{eff} eingeführt werden, in der berücksichtigt wird, dass die Elektronen in den unterschiedlichen Schalen das Kernfeld abschwächen. Es gilt für die potentielle Energie des emittierten Elektrons:

$$U = \frac{Z_{eff} \cdot e^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r}. \quad (1.2)$$

Mit der Schrödingergleichung kann die bei einem Schalenprung freigesetzte Energie emittiert werden (siehe Abb.2):

$$h\nu_{m,n} = R_{\infty} \cdot (Z_{eff\,m,n})^2 \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (1.3)$$

(R_{∞} =Rydbergenergie). Diese Näherung gilt jedoch nur bei kleinen Kernladungszahlen. Für $Z > 25$ muss eine genauere Näherung betrachtet werden. Mit einbezogen werden hier der Drehimpuls und die relativistische Abhängigkeit der Elektronenmasse:

$$E_{nj} = -R_{\infty} \cdot \left(\frac{Z_{eff1}^2}{n^2} + \alpha^2 \cdot \frac{Z_{eff2}^4}{n^3} \cdot \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right) \quad (1.4)$$

α ist die Sommerfeld'sche Feinstrukturkonstante, j die Gesamtdrehimpulszahl des Elektrons. Die beiden Z_{eff} ergeben sich folgendermaßen:

$$Z_{eff1} = Z - \sigma_{nl} \quad (1.5)$$

$$Z_{eff2} = Z - s_{nl} \quad (1.6)$$

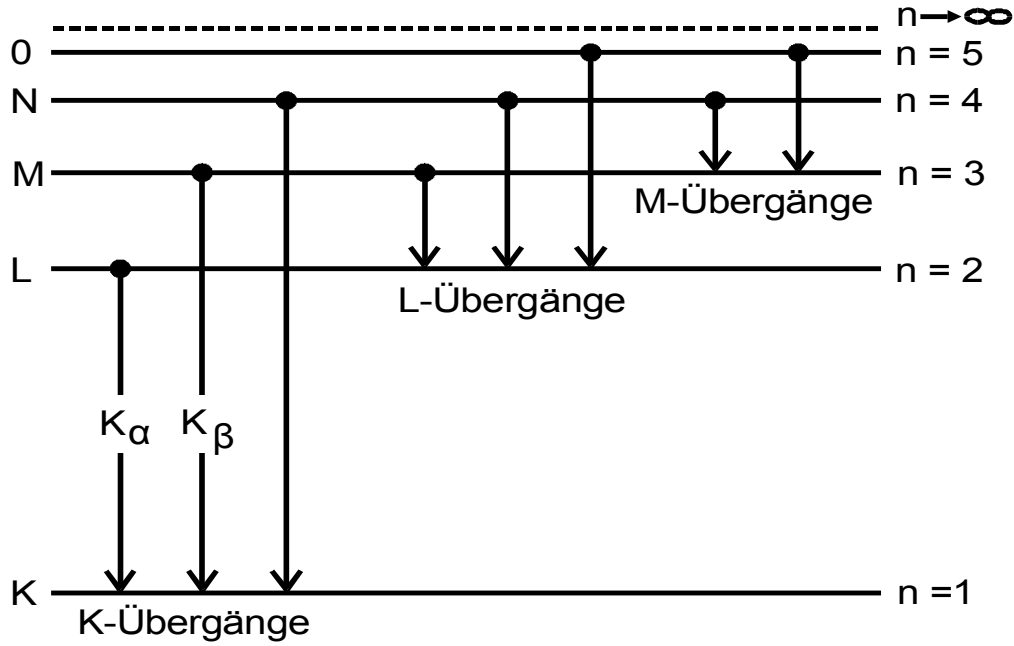


Abbildung 2: Mögliche Röntgenübergänge in einer Elektronenhülle [2]

σ heißt Konstante der vollständigen Abschirmung und ist stark von der Hauptquantenzahl, dem Bahndrehimpuls und Z abhängig, wohingegen s die Konstante der inneren Abschirmung heißt. Sie hängt kaum von Z ab, da sie sich auf Elektronen der n -ten Schale bezieht. Es ergibt sich so die Feinstrukturaufspaltung. Das sind Unterniveaus in den verschiedenen Schalen (siehe Abb.3). Die Elektronenübergänge sind nur möglich, wenn sich der Bahndrehimpuls der beiden Niveaus um ± 1 unterscheiden. Damit ergibt sich:

$$E = -R_{\infty} \left(\frac{(Z_{eff1})^2}{n^2} - \frac{(Z'_{eff1})^2}{n'^2} + \alpha^2 \frac{(Z_{eff2})^4}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) - \alpha^2 \frac{(Z'_{eff2})^2}{n'^3} \left(\frac{1}{j' + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n'} \right) \right) \quad (1.7)$$

1.4 Absorptionsspektrum

Trifft die Röntgenstrahlung auf Materie so wird sie in Abhängigkeit von ihrer Energie und vom Material in der Intensität abgeschwächt. Dies geschieht vorrangig durch Absorption und in geringem Maße auch durch Streuung. Bei der Absorption spricht man auch von inneren Photoeffekt. Wenn die Energie des Röntgenquants größer ist als die Bindungsenergie E_B eines Hüllenelektrons wird dieses ausgeschlagen und erhält die Differenz zwischen der Energie des Röntgenquants und E_B als kinetische Energie.

$$h\nu = E_B + E_{kin} \quad (1.8)$$

Für Röntgenquanten gilt als Näherung für den Absorptionskoeffizienten:

$$\mu \approx z^5 E^{-3,5}. \quad (1.9)$$

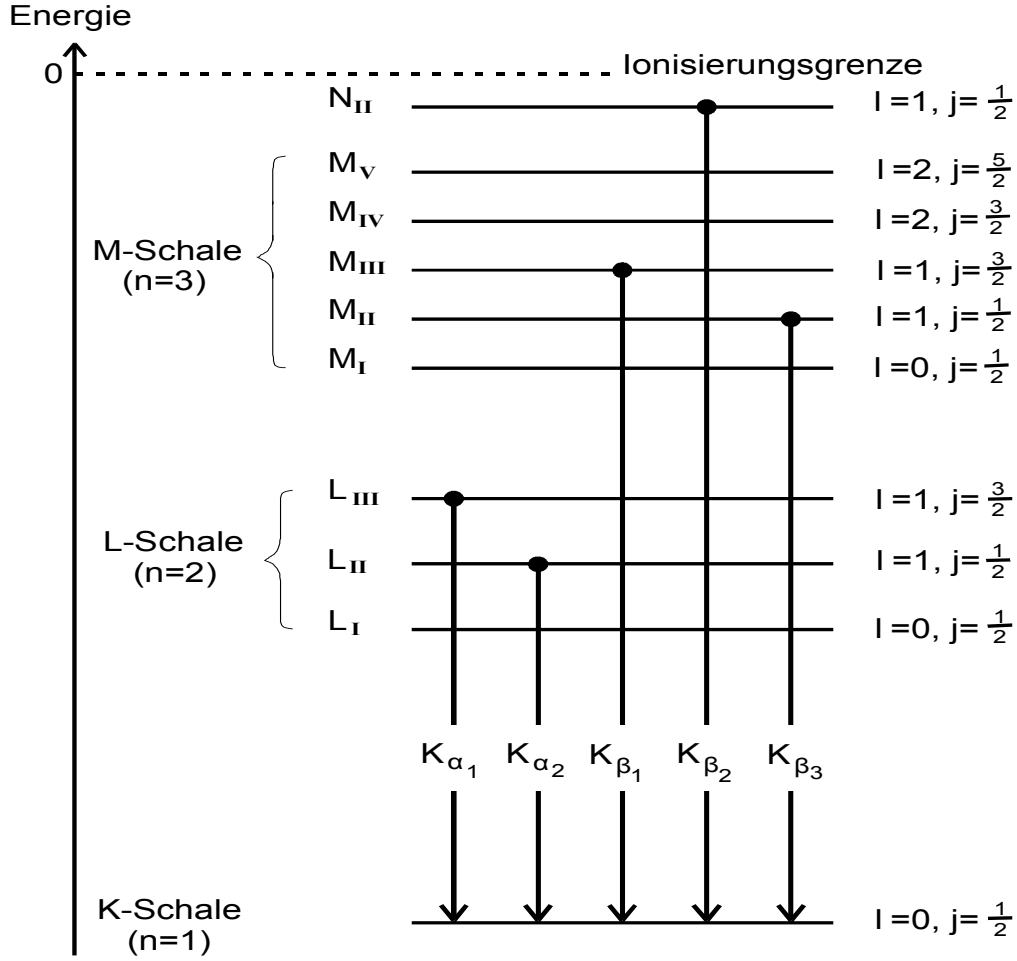


Abbildung 3: Feinstrukturaufspaltung für die ersten n-Schalen, sowie die möglichen Übergänge. [2]

In guter Näherung kann davon ausgegangen werden, dass für das Ausschlagen eines Elektrons aus der n-ten Schale die Energie $E(n) - E(\infty)$ benötigt wird. Für die K-Schale ergibt sich:

$$h\nu_{K_{abs}} = E_{1, \frac{1}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \cdot \left((Z - \sigma_{10})^2 + \alpha^2 (Z - s_{10})^4 \cdot \frac{1}{4} \right). \quad (1.10)$$

Es kann festgestellt werden, dass S_{10} verschwindet, da sich in der K-Schale kaum Elektronen aufhalten. Dadurch kann σ_{10} aus einer Messung von $h\nu_{k_{abs}}$ bestimmt werden. Aus den Abständen der L-Absorptionsenergien lässt sich \sum_{12} bestimmen. Mit den nach Gleichung (1.4) berechneten Energien ergibt sich die Differenz zu:

$$h\nu_{L,abs,2} - h\nu_{L,abs,3} = R_{\infty} \cdot \alpha^2 \frac{(Z - s_{21})^4}{16}. \quad (1.11)$$

Um diese Energien zu bestimmen werden Metallfolien mit Röntgenstrahlung bestrahlt und hinterher die Intensität in Abhängigkeit von der Energie gemessen. Wie in Abb.4 ersichtlich ergeben sich unstetige Stellen, die sogenannten Absorptionskanten. An den

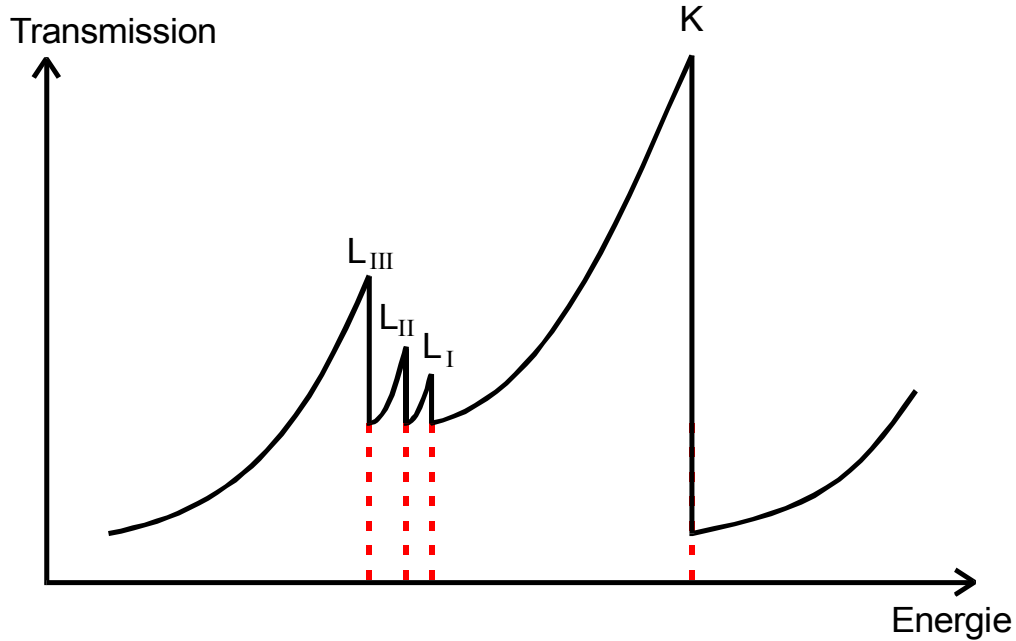


Abbildung 4: K- und L-Kanten bei der Röntgenabsorption [2]

unstetigen Stellen kann gerade ein neues Elektron ausgeschlagen werden. Für die K-Schale ergibt sich nur eine Kante, da es hier keine Feinstrukturaufteilung gibt.

1.5 Zur Auswertung

Für eine bessere Näherung bei Materialien mit $Z > 70$ wird ohne Herleitung folgende Gleichung berücksichtigt, die auch Glieder der Ordnung $\alpha^4 z^6$ berücksichtigt um $s_{2,1}$ zu berechnen:

$$(z - s_{2,1})^2 = \left(\frac{4}{\alpha} \sqrt{\frac{\Delta E}{R_\infty}} - \frac{5\Delta E}{R_\infty} \right) \left(1 + \frac{19}{32} \alpha^2 \frac{\Delta E}{R_\infty} \right) \quad (1.12)$$

mit:

$$\Delta E = h\nu_{L,abs,3} - h\nu_{L,abs,2} \quad (1.13)$$

Für Cu lassen sich aus den folgenden Gleichungen die Abschirmzahlen σ_1 und σ_2 abschätzen.

$$E_{K,abs} = R_\infty (z - \sigma_1)^2 \quad (1.14)$$

und

$$E_{K_\alpha} = R_\infty (z - \sigma_1)^2 - R_\infty \frac{1}{4} (z - \sigma_2)^2 \quad (1.15)$$

2 Durchführung

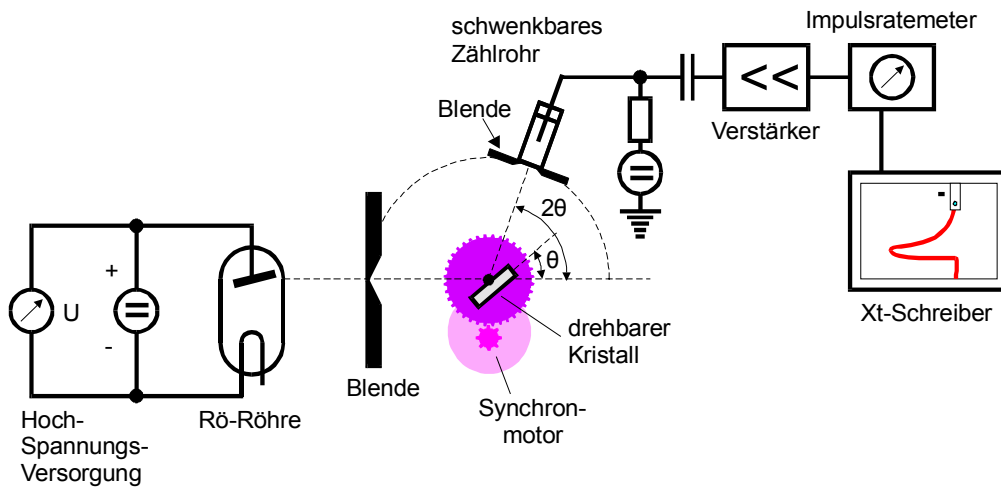


Abbildung 5: Versuchsaufbau [2]

Damit jeder Energie der Röntgenstrahlung ein Winkel zugeordnet werden kann, wird ein Kristallgitter zur Aufspaltung verwendet. Nach dem Bragg'schen Gesetz ergibt sich ein Interferenzmuster, nachdem die Röntgenstrahlung den Kristall passiert hat. Nach dem Bragg'schen Gesetz kommt es immer genau dann zu konstruktiver Interferenz, wenn der Gangunterschied zweier benachbarter Strahlen ein vielfaches der Wellenlänge ist. Daher ergibt sich nach Abb.6

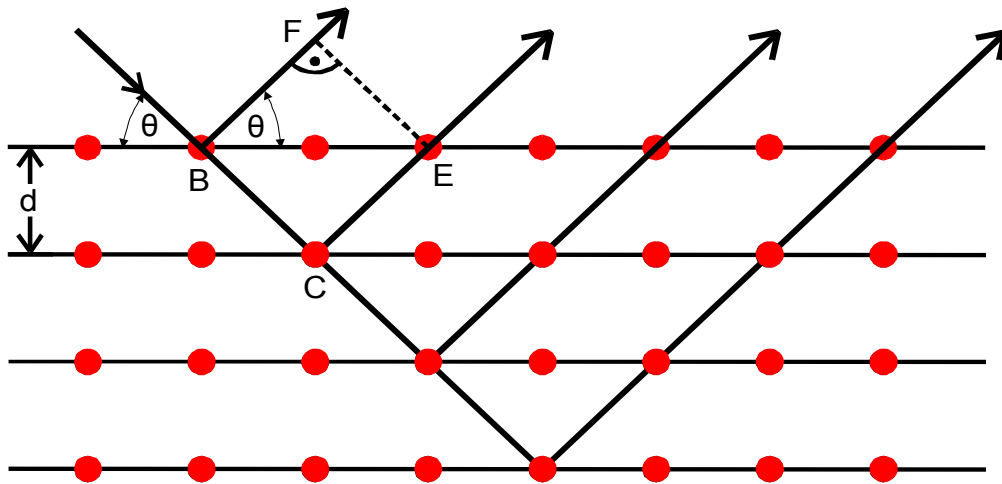


Abbildung 6: Bragg-Reflexion am Kristallgitter [2]

$$n\lambda = 2d \cdot \sin \theta. \quad (2.1)$$

Damit ist der Zusammenhang zwischen dem Winkel θ und der Energie gegeben durch:

$$E = \frac{hc}{\lambda} = n \cdot \frac{hc}{2d \sin \theta}. \quad (2.2)$$

Für den Versuch wird der in Abb.5 dargestellte Aufbau verwendet. Der erzeugte Röntgenstrahl trifft auf den drehbaren Kristall und wird nach dem Bragg'schen Gesetz gestreut. Dieser gestreute Strahl durchläuft unterschiedliche Materialien, die vor einem Geiger-Müller-Zählrohr angebracht werden. Zur Auswertung wird ein Rechner verwendet, der die diskreten Messungen durchführt. Einstellbar sind die Start- und Endwinkel, die Schrittweite der Winkeländerung und die Zeit jeder Einzelmessung.

3 Auswertung

3.1 Bestimmung verschiedener Abschirmungszahlen $\sigma_{1,0}$

Für die Stelle der Absorptionskanten ermittelt man jene Zählraten R die den Wert $R_{1/2} = 0,5 (R_{max} + R_{min})$ annehmen. Für Brom mit der Ordnungszahl $Z = 35$ sind die Messwerte aus Tabelle 1 in Abbildung 7 aufgetragen und es lässt sich die K-Absorptionskante bei einem Winkel von $2\theta = 26,4^\circ$ ablesen. Die Werte für R_{min} , R_{max} , und $R_{1/2}$ sind jeweils aus der Abbildung zu entnehmen.

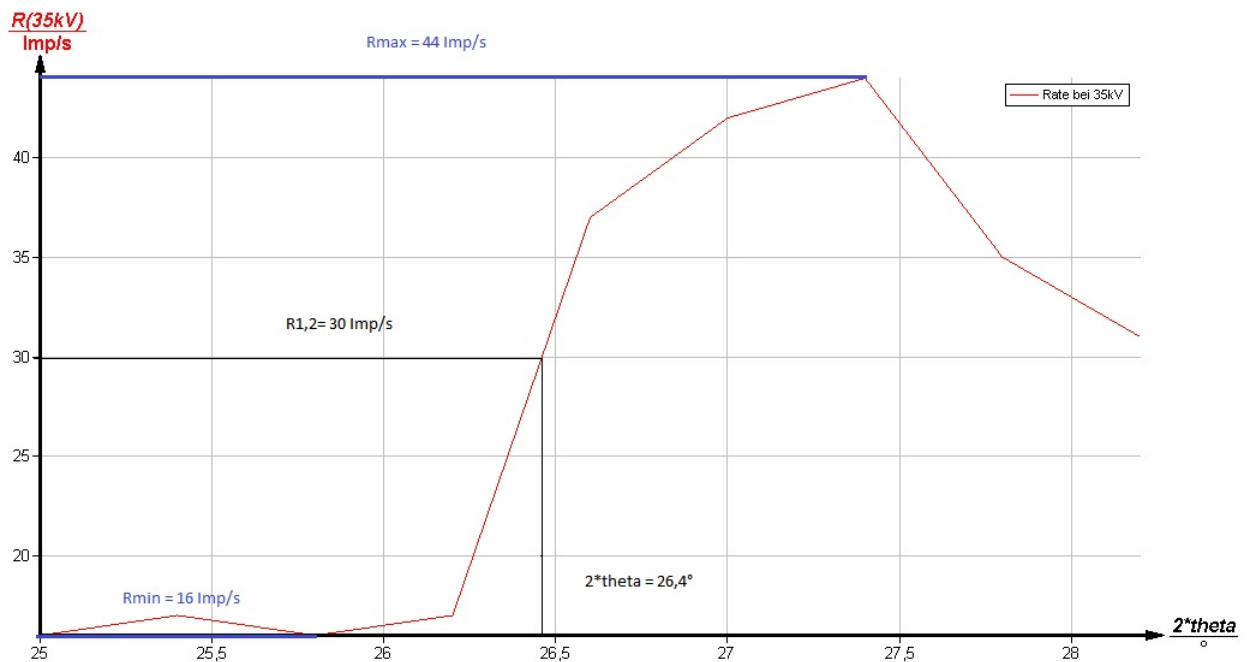


Abbildung 7: Absorptionsspektrum mit K-Kante (Brom)

Tabelle 1: Absorptionsspektrum (Brom)

2θ in Grad	R in Imp/s
25,00	16,00
25,40	17,00
25,80	16,00
26,20	17,00
26,60	37,00
27,00	42,00
27,40	44,00
27,8	35
28,2	31

Mit Gleichungen (1.10) und (2.2) lässt sich die Abschirmungszahl $\sigma_{1,0}$ bestimmen, dabei sei in folgender Gleichung h das Plancksche Wirkungsquantum, c die Vakuumlichtgeschwindigkeit, α die Feinstrukturkonstante, R_∞ die Rydbergenergie und n die Interferenzordnung.

$$\sigma_{1,0} = Z - \left(\frac{hcn}{2dR_\infty \sin \theta} - \frac{\alpha^2}{4} Z^4 \right)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow \sigma_{1,0} = 3,57$$

Für Zink mit der Ordnungszahl $Z=30$ sind die Messwerte aus Tabelle 2 in Abbildung 8 aufgetragen. Es lässt sich die K-Absorptionskante bei einem Winkel von $2\theta = 40,1^\circ$ ablesen.

Damit bestimmt sich die Abschirmungszahl zu $\sigma_{1,0} = 4,34$.

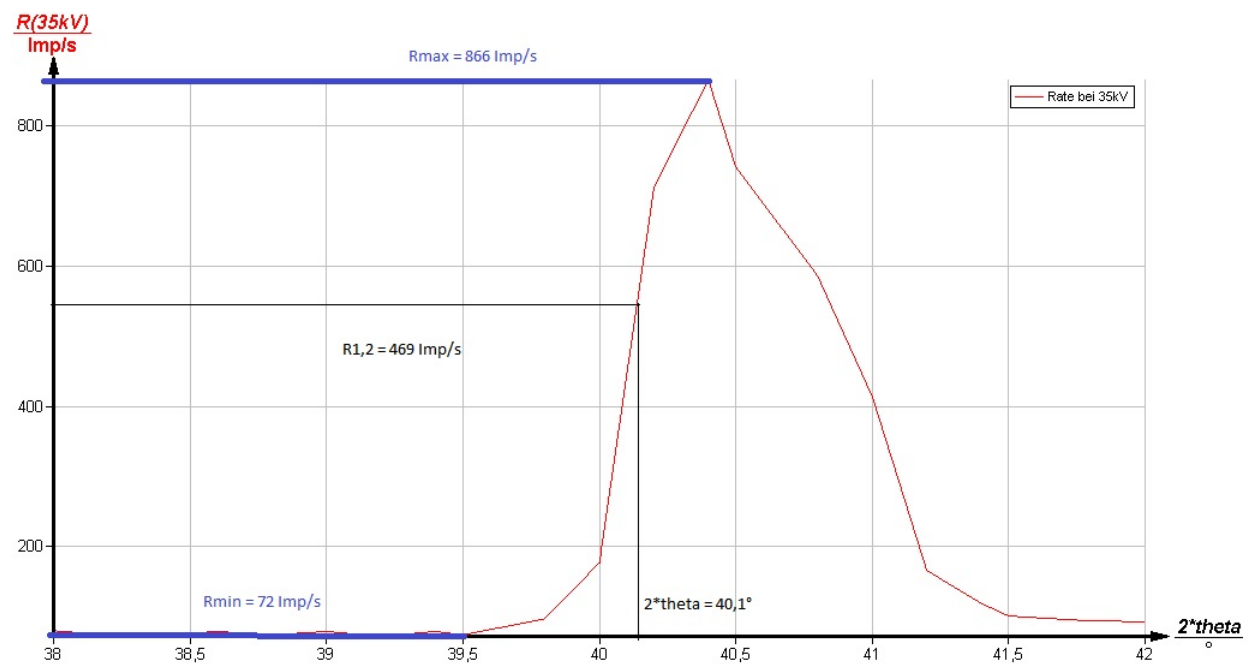


Abbildung 8: Absorptionsspektrum mit K-Kante (Zink)

Tabelle 2: Absorptionsspektrum (Zink)

2θ in Grad	R in Imp/s
38,0	80
38,2	74
38,4	74
38,6	79
38,8	74
39,0	79
39,2	72
39,4	79
39,5	74
39,8	97
40,0	177
40,2	712
40,4	866
40,5	742
40,8	587
41,0	415
41,2	166
41,4	119
41,5	101
41,8	94
42,0	93

3.2 Bestimmung verschiedener Abschirmungszahlen $s_{2,1}$

Analog zum Kapitel vorher werden nun die Elemente Gold und Wismut mit den Ordnungszahlen $Z=79$ und $Z=83$ untersucht. Die Messwerte aus den Tabellen 3 und 4 sind in den Abbildungen 9 und 10 aufgetragen.

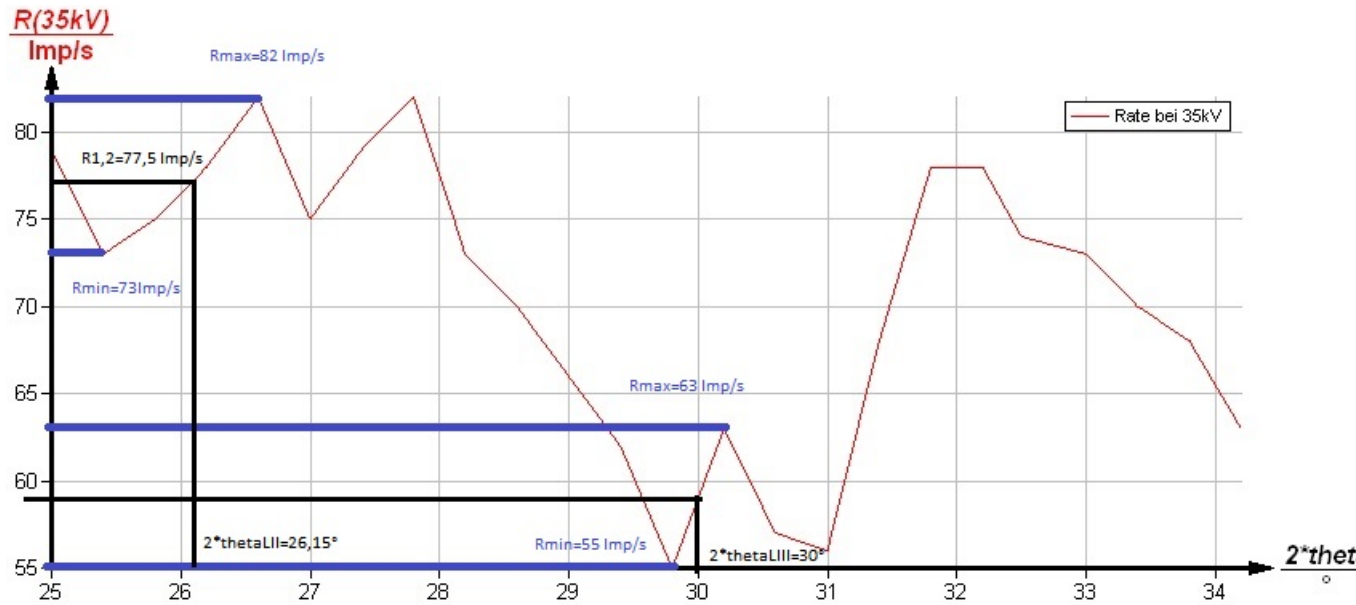


Abbildung 9: Absorptionsspektrum mit L-Kanten (Gold)

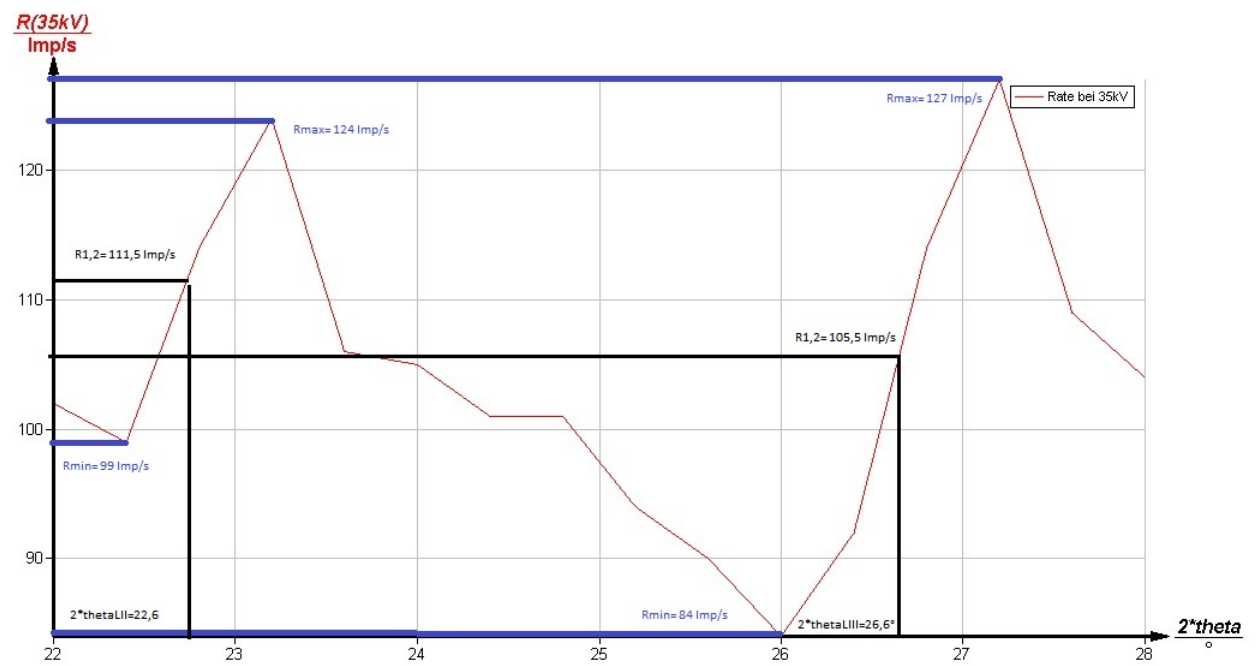


Abbildung 10: Absorptionsspektrum mit L-Kanten (Wismut)

Tabelle 3: Absorptionsspektrum (Gold)

2θ in Grad	R in Imp/s
25,0	79
25,4	73
25,8	75
26,2	78
26,6	82
27,0	75
27,4	79
27,8	82
28,2	73
28,6	70
29,0	66
29,4	62
29,8	55
30,2	63
30,6	57
31,0	56
31,4	68
31,8	78
32,2	78
32,5	74
33,0	73
33,4	70
33,8	68
34,2	63

Tabelle 4: Absorptionsspektrum (Wismut)

2θ in Grad	R in Imp/s
22,0	102
22,4	99
22,8	114
23,2	124
23,6	106
24,0	105
24,4	101
24,8	101
25,2	94
25,6	90
26,0	84
26,4	92
26,8	114
27,2	127
27,6	109
28,0	104

Mit Gleichung (1.12) und (2.2) lässt sich die Abschirmungszahl $s_{2,1}$ bestimmen:

$$s_{2,1} = Z - \left(\left(\frac{4}{\alpha} \left(\frac{\Delta E}{R_\infty} \right)^{\frac{1}{2}} - \frac{5\Delta E}{R_\infty} \right) \cdot \left(1 + \frac{19}{31} \alpha^2 \frac{\Delta E}{R_\infty} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.2)$$

$$\Delta E = \frac{hcn}{2d} \left(\frac{1}{\sin(\theta_{L,3})} - \frac{1}{\sin(\theta_{L,2})} \right) \quad (3.3)$$

$$\Rightarrow s_{2,1,\text{Gold}} = 4,43, s_{2,1,\text{Wismut}} = 3,17 \quad (3.4)$$

3.3 Abschätzung der Abschirmungszahlen $\sigma_{1,0}$ und $\sigma_{1,0}$ für Kupfer

Die Messwerte aus Tabelle 5 für Kupfer mit der Ordnungszahl $Z = 29$ sind in Abbildung 11 aufgetragen. Es lassen sich die K_α - und K_β -Kante ablesen.

Tabelle 5: Absorptionsspektrum (Kupfer)

2θ in Grad	R in Imp/s	2θ in Grad	R in Imp/s
37,0	123	42,6	132
37,2	124	42,8	126
37,4	127	43,0	132
37,5	119	43,2	126
37,8	121	43,4	131
38,0	116	43,6	129
38,2	120	43,8	135
38,4	113	44,0	150
38,6	108	44,2	164
38,8	110	44,4	208
39,0	108	44,5	303
39,2	114	44,8	2286
39,4	107	45,0	4196
39,5	114	45,2	3818
39,8	131	45,4	3087
40,0	186	45,5	2657
40,2	536	45,8	1153
40,4	1321	46,0	254
40,5	1209	46,2	162
40,8	976	46,4	142
41,0	762	46,5	120
41,2	455	46,8	116
41,4	197	47,0	107
41,5	172	47,2	104
41,8	157	47,4	104
42,0	145	47,6	91
42,2	135	47,8	89
42,4	136	48,0	86

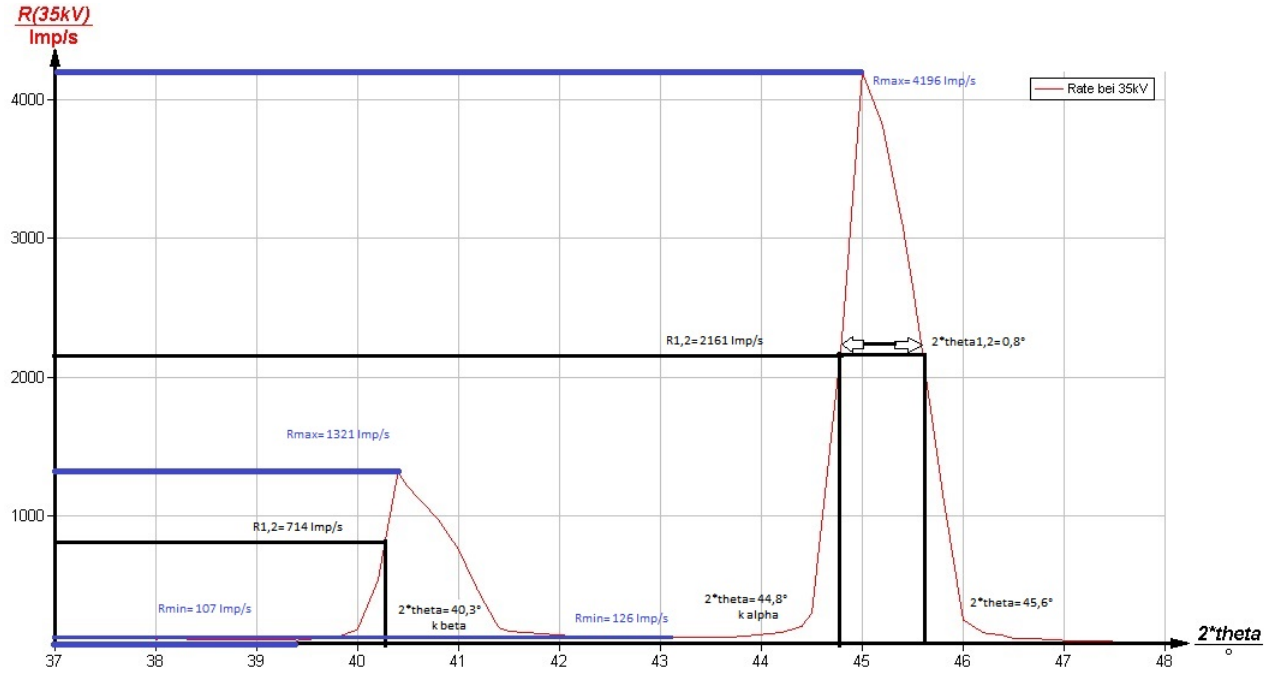


Abbildung 11: Emissionsspektrum mit K-Kanten (Kupfer)

Mit den Gleichungen aus der Theorie ergeben sich die Abschirmungszahlen zu:

$$\sigma_1 = Z - \left(\frac{hcn}{2dR_\infty \sin \theta_\beta} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.5)$$

$$\sigma_2 = Z - \left(4(Z - \sigma_1)^2 - \frac{2hcn}{dR_\infty \sin \theta_\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.6)$$

$$\Rightarrow \sigma_1 = 3,35; \sigma_2 = 13,10. \quad (3.7)$$

3.4 Bestimmung des energetischen Auflösungsvermögens

Aus der Emissionskurve wird der Grenzwinkel θ_{gr} bestimmt, an welchem $R = 0$ Imp/s gilt. Das geschieht durch lineare Regression der ersten Werte für die Cu-Messung 12.

$$R = \frac{a}{2} \cdot \theta + b \quad (3.8)$$

$$a = 13 \pm 32, b = -17,17 \pm 22 \quad (3.9)$$

$$\Rightarrow \theta_{gr} = -\frac{2b}{a} = (2,64 \pm 5)^\circ \quad (3.10)$$

Der Grenzwinkel lässt auf die Maximalenergie E_{max} des Spektrums schließen (vgl. GL 2.2):

$$E_{max} = 66,9 \text{ keV} \quad (3.11)$$

Die sich aus der Röhrenspannung von $U = 35 \text{ kV}$ ergebende Energie ist:

$$E = e_0 U = 35 \text{ keV}, (e_0 \text{ Elementarladung}). \quad (3.12)$$

Wird an der K_α -Emissionslinie bei halber Maximalintensität die Winkelbreite $\theta_{1/2} = 0,4^\circ$ als von $\theta = 22,4^\circ$ bis $\theta = 22,8^\circ$ abgelesen, kann die Energieauflösung berechnet werden zu:

$$E_{1/2} = \frac{hc}{2d} \left(\frac{1}{\sin(22,4^\circ)} - \frac{1}{\sin(22,8^\circ)} \right) = 135 \text{ eV}. \quad (3.13)$$

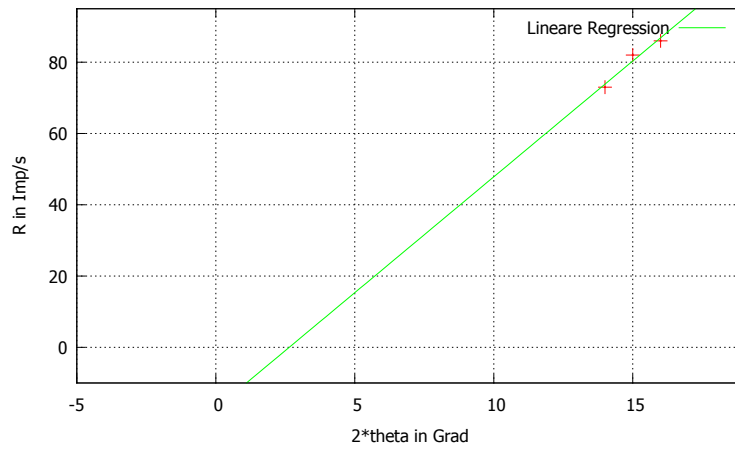


Abbildung 12: Lineare Regression des Anfangs der Emissionskurve (Kupfer)

4 Diskussion

Für einen Vergleich der Messwerte mit den Literaturwerten wird Tabelle 6 betrachtet. Mit Ausnahme von Zink liegen alle Werte nah am Literaturwert, besonders wenn man die maximale Winkelauflösung betrachtet auf die später noch einmal eingegangen werden soll.

Tabelle 6: Vergleich der Energiewerte der Spektrumsanten [3]

Element	Kante	θ /Grad	E_M /keV	E_T /keV	ΔE /keV
Brom	K	13,20	13,51	13,40	0,11
Zink	K	20,05	9,00	9,66	0,66
Gold	L_2	13,08	13,63	13,70	0,07
Gold	L_3	15,00	11,92	12,00	0,08
Wismut	L_2	11,30	15,74	15,71	0,03
Wismut	L_3	13,30	13,41	13,42	0,01
Kupfer	K_α	22,40	8,09	8,00	0,09
Kupfer	K_β	20,15	8,95	8,90	0,05

Wird die aus der Röhrenspannung bestimmte Maximalenergie $E_U = 35 \text{ keV}$ des Spektrums mit der über den genäherten Grenzwinkel bestimmten Maximalenergie verglichen fällt auf, dass $\Delta E = 31,9 \text{ keV}$. Die Näherung ist aufgrund der wenigen Messwerte eher schlecht, aber die Abweichungen können auch mit einer gestörten Zählrate zu erklären sein, wodurch es bei einem Winkel von Null noch eine nachweisbare Intensität gäbe. Die Winkelauflösung von $\theta_{1/2} = 0,4^\circ$ beschränkt die Genauigkeit der Messung, wie auch der Energieauflösung $E_{1/2} = 135 \text{ eV}$.

Literatur

- [1] Naturkonstanten herausgegeben über CODATA, abgerufen: 03.06.2013
<http://physics.nist.gov/cuu/Constants/>
- [2] Skript zum Versuch 602,Röntgen-Emissions- und Absorptionsspektren, abgerufen:03.06.2013
<http://129.217.224.2/HOMEPAGE/PHYSIKER/BACHELOR/AP/SKRIPT/V602.pdf>
- [3] Literaturwerte der Absorptions-/Emissionskanten (AS. = AS Unterstrich im Link), abgerufen 13.06.2013
<http://skuld.bmsc.washington.edu/scatter/AS.periodic.html>