

Physikalisches Anfängerpraktikum  
Universität Dortmund / Fachbereich Physik

## **Versuch 602**

# **Röntgen-Emissions- und Absorptionsspektren**

André Jagiolka	Britt-Marie Meiners
Matrikelnr.: 0118775	Matrikelnr.: 0118377
andre.jagiolka@uni-dortmund.de	inkino@hotmail.com

Durchführung: 24.05.2007  
Abgabe: 31.05.2007

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Theorie</b>	<b>3</b>
2.1	Entstehung von Röntgenstrahlung . . . . .	3
2.2	Röntgen-Emissionsspektrum . . . . .	4
2.3	Absorbtionsspektrum . . . . .	6
2.4	Messung von Intensität und Energie der Röntgenstrahlung . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Durchführung</b>	<b>8</b>
<b>4</b>	<b>Auswertung</b>	<b>9</b>
4.1	Berechnung der Abschirmungszahlen $\sigma_{1,0}$ . . . . .	9
4.2	Berechnung der Abschirmungszahlen $s_{2,1}$ . . . . .	10
4.3	Berechnung der Abschirmzahlen für Kupfer . . . . .	10
4.4	Berechnung des Grenzwinkels und der Auflösungsgenauigkeit . . . . .	11
<b>5</b>	<b>Anhang</b>	<b>12</b>

## 1 Einleitung

Die inneren Strukturen von Atomen können anhand von Photonen analysiert werden. Um an Informationen über ihre innersten Schalen zu bekommen, wird hochenergetische Röntgenstrahlung verwendet. Die Energie dieser Strahlung liegt zwischen  $10 \dots 100 \text{ keV}$ . Dieser Versuch beschreibt zum einen die Entstehung von Röntgenstrahlung, als auch die Wechselwirkung jener Strahlung mit Metallen. Letzteres gilt es zu untersuchen.

## 2 Theorie

### 2.1 Entstehung von Röntgenstrahlung

Die Quelle der Röntgenstrahlung ist eine sogenannte *Röntgenröhre*. In dieser Röhre werden Elektronen an einer Glühwendel durch den *glühelektrischen Effekt* ausgedampft und über ein elektrisches Feld in Richtung einer Anode beschleunigt. Durch diesen Prozess kann auf zwei Arten Strahlung entstehen. Einmal werden die Elektronen im *Coulomb-Feld* der Atome sehr

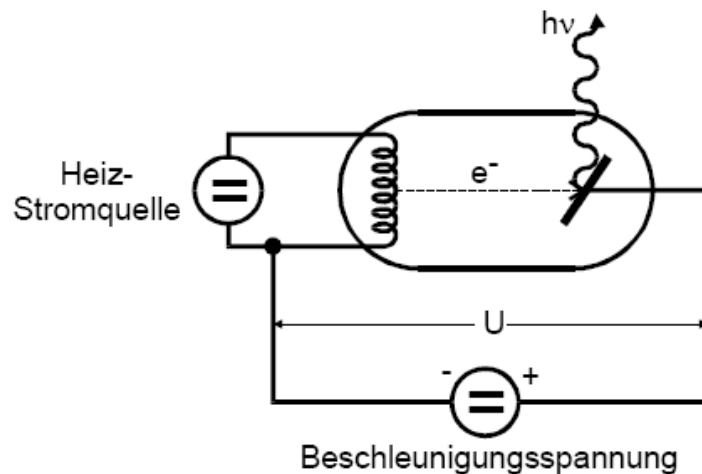


Abbildung 1: Schematischer Aufbau einer Röntgenröhre

stark abgebremst, so dass sie ihre komplette kinetische Energie abgeben und ein Photon emittiert wird. Das Spektrum dieser Strahlung ist kontinuierlich von Null bis zur maximalen kinetischen Energie der eintreffenden Elektronen.

Im anderen Fall treffen die Elektronen auf die Anode und ionisieren ein Atom durch Heraus-schlagen eines Elektrons aus der Elektronenhülle. Dazu muss das Elektron genug Energie besitzen um die Bindungsenergie der Schalen-Elektronen zu überwinden. In das entstandene Loch fällt nun ein Elektron aus einer höheren Schale, bis das Atom wieder genügend Elektronen besitzt. Während diesem Prozess werden ebenfalls Photonen emittiert. Im Gegensatz zum ersten Fall der Entstehung von Röntgenstrahlung ist das Spektrum bei der Ionisierung diskret. Die Energie der Photonen ergibt sich aus der Differenz der Energien des Elektrons, welches das Loch auffüllt.

$$E_{\text{photon}} = h\nu = E_n - E_m \quad (2.1)$$

$E_n$  und  $E_m$  beschreiben die Energieniveaus in der Elektronenhülle des Atoms. Die Energie der Strahlung hängt im Gegensatz zur Bremsstrahlung vom Material der Anode ab. Deshalb wird sie auch als charakteristische Röntgenstrahlung bezeichnet.

## 2.2 Röntgen-Emissionsspektrum

Betrachtet man kleine Energien  $E \rightarrow 0$ , so geht das Spektrum asymptotisch gegen Null. Auf der anderen Seite bricht das Spektrum bei einer maximalen Energie  $E_{max}$  ab. Dies ist die maximale kinetische Energie der beschleunigten Elektronen. Es gilt:

$$E_{max} = h\nu_{max} = e_0 \cdot U \quad (2.2)$$

Kennt man die genaue Atomstruktur, so kann man theoretisch mit Hilfe von Gleichung (2.1) die Lage der charakteristischen Linien im Spektrum berechnen. Die unterschiedlichen Energieniveaus, die bekannt sein müssen, erhält man aus der Schrödinger-Gleichung. Eine erste Näherung stellt die *Einelektronanregung* dar. Dabei geht man davon aus, dass das emittierte Elektron sich im elektrischen Feld des Atoms befindet. Dabei gilt es zu bedenken, dass die Schalen-Elektronen ein Teil des Kernfeldes abschwächen. Um diese Phänomene auszugleichen errechnet man eine neue Kernladungszahl  $z_{eff}$ . Für das emittierte Elektron ergibt sich die potentielle Energie

$$U = \frac{z_{eff} \cdot e^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r} \quad (2.3)$$

Jetzt kann über die Schrödinger-Gleichung die freigesetzte Energie bei einem Schalenprung ermittelt werden.

$$h\nu_{m,n} = R_\infty \cdot (z_{effm,n})^2 \cdot \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (2.4)$$

Diese Näherung gilt nur für kleine Kernladungszahlen  $z$ . Die Emissionskanten werden nach den Schalen benannt, auf die das Elektron springt. Bei Kernladungszahlen  $z > 25$  muss man eine genauere Näherung verwenden. Dabei müssen der Drehimpuls, so wie die Einflüsse der relativistischen Massenabhängigkeit der Elektronenmasse, mit einbezogen werden.

$$E_{n,j} = -R_\infty \left( \frac{z_{eff1}^2}{n^2} + \alpha^2 \cdot \frac{z_{eff2}^4}{n^3} \cdot \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right) \quad (2.5)$$

$\alpha$  ist die SOMMERFELD'sche Feinstrukturkonstante,  $j$  die Gesamtdrehimpulszahl des "aktiven" Elektrons. Die verschiedenen  $z_{eff}$  ergeben sich durch die folgenden Formeln (2.6) und (2.7).

$$z_{eff1} = z - \sigma \quad (2.6)$$

$$z_{eff2} = z - s \quad (2.7)$$

$\sigma$  ist die Konstante der vollständigen Abschirmung, welche stark von der Hauptquantenzahl  $n$ , so wie von Bahndrehimpuls  $l$  und  $z$ , abhängt.  $s$  beschreibt die Konstante der inneren Abschirmung, welche kaum von  $z$  abhängt, da nur die Elektronen auf der  $n$ -ten Schale eine Rolle spielen. Abbildung 2 zeigt, dass nicht alle Übergänge möglich sind. Solche Übergänge sind

prizipiell nur möglich, wenn sich die Bahndrehimpulse der beiden Niveaus um genau 1 unterscheiden. Wächst nun  $\Delta n$ , so nimmt die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang stark ab. So kann es kaum noch Übergänge ab  $\Delta n = 3$  geben. Man erhält die folgende Formel:

$$\frac{E}{R_{\infty}} = \frac{(z - \sigma_{n,l})^2}{n^2} + \frac{(z - \sigma_{n',l'})^2}{n'^2} + \alpha^2 \frac{(z - s_{n,l})^4}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) - \alpha^2 \frac{(z - s_{n',l'})^4}{n'^3} \left( \frac{1}{j' + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n'} \right) \quad (2.8)$$

Ab einer Kernladungszahl  $z > 70$  sollte man auch Glieder der Ordnung  $\alpha^4 z^6$  berücksichtigen.

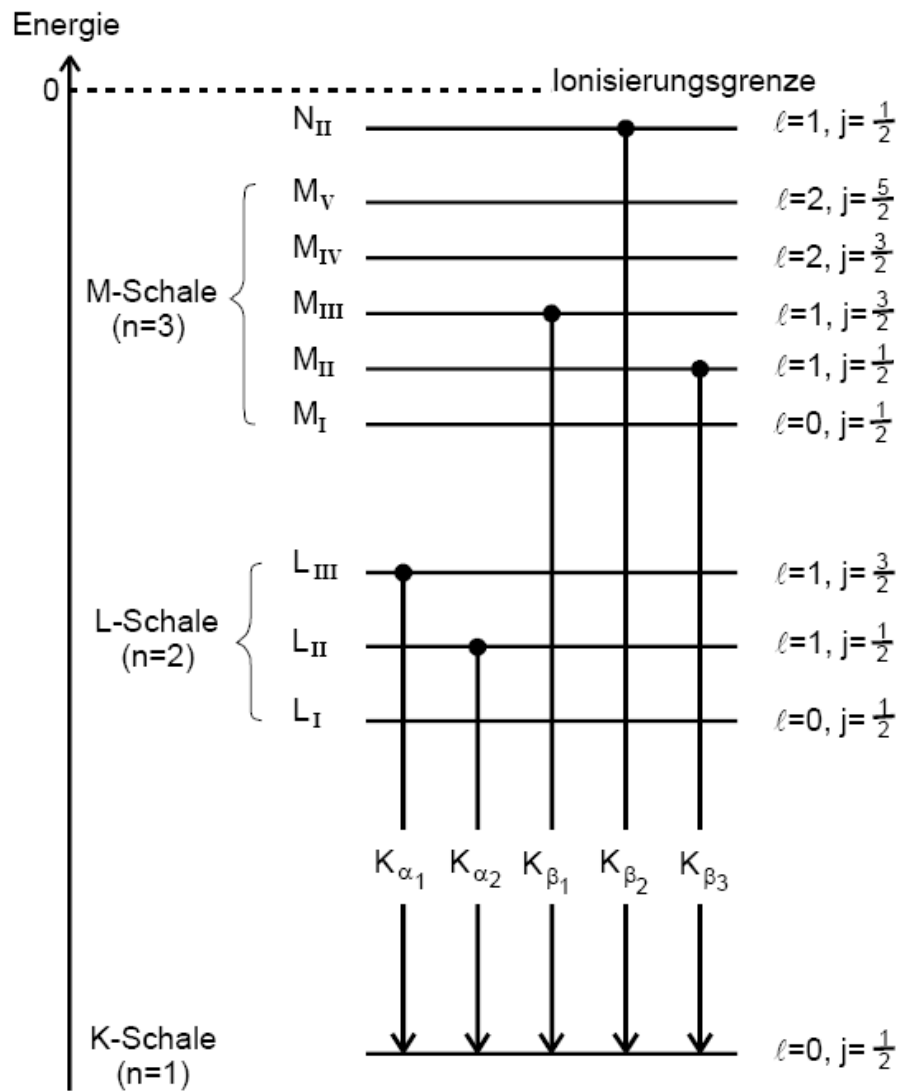


Abbildung 2: Feinstruktur-Aufspaltung der K-, L- und M-Schale eines Atoms, sowie mögliche K-Übergänge zwischen den Niveaus

### 2.3 Absorptionsspektrum

Die Strahlintensität wird aufgrund des sogenannten *inneren Photoeffekts* beim Durchdringen von Materie verringert. Dabei gibt es eine Wechselwirkung zwischen Photon und Hüllenelektron, welches dadurch aus dem Atom entfernt wird. Auch hier muss die Energie des Photons mindestens so groß sein, wie die Bindungsenergie des Elektrons.

$$h\nu = E_B + E_{kin} \quad (2.9)$$

Für typische Röntgenquanten, d.h. Energie kleiner als  $100\text{keV}$ , gilt die grobe Näherung von

$$\mu \propto z^5 \cdot E^{-3,5} \quad (2.10)$$

für den Absorptionskoeffizienten. Hat ein Photon genug Energie um eine Elektron einer weiter innen liegenden Schale auszulösen, so ändert sich der Koeffizient unstetig. Die Abstände der optischen Niveaus sind so klein, dass man in guter Näherung davon ausgehen kann, dass das Quant mindestens die Energie  $E(n) - E(\infty)$  benötigt um ein Elektron aus der n-ten Schale zu lösen. So ergibt sich für die K-Schale:

$$\begin{aligned} h\nu_{k_{abs}} &= E_{1, \frac{1}{2}} - E_{\infty} \\ &= R_{\infty} \frac{(z - \sigma_{1,0})^2 + \alpha^2 (z - s_{1,0})^4}{4} \end{aligned} \quad (2.11)$$

$s_{1,0}$  verschwindet aus der Gleichung, da sich auf der K-Schale kaum Elektronen aufhalten. Somit kann man  $\sigma_{1,0}$  aus einer Messung von  $h\nu_{k_{abs}}$  bestimmen. Aus den Abständen der L-Absorptionsenergien lässt sich  $s_{1,2}$  berechnen- Dazu muss zunächst die Energie mit Formel (2.5) ermittelt werden und bildet danach die Differenz.

$$h\nu_{L,abs,2} - h\nu_{L,abs,3} = R_{\infty} \cdot \alpha^2 \frac{(z - s_{2,1})^4}{16} \quad (2.12)$$

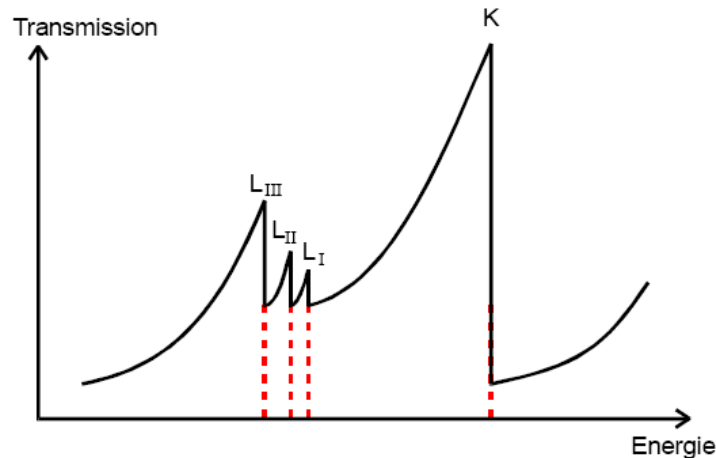


Abbildung 3: Röntgen-Absorptionsspektrum mit K- und L-Kanten (nicht maßstäblich)

Nun muss man die Absorptionsenergien bestimmen um die Absorptionskoeffizienten zu bestimmen. Dazu werden dünne Metallfolien mit Röntgenstrahlung bestrahlt und misst hinter der Folie die Intensität in Abhängigkeit der Energie der Strahlung. Laut Formel (2.10) nimmt der Absorptionskoeffizient mit steigender Quantenenergie ab, so dass eine höhere Intensität gemessen wird. Die un stetigen Änderungen sind bei den Energien bei denen die Quanten gerade ein neues Elektron aus dem Atom entfernen können. Man spricht hierbei auch von den *Absorptionskanten*. Da die K-Schale keine Feinstrukturaufspaltung hat ist dort nur eine Kante.

Die bei der Absorption entstandenen Löcher in der Elektronenhülle werden ähnlich wie in Kapitel 2.2 beschrieben wieder aufgefüllt. Hierbei wird wieder Strahlung emittiert, welche in alle Richtungen abgestrahlt wird. Man spricht hierbei von der *Fluoreszenzstrahlung*.

## 2.4 Messung von Intensität und Energie der Röntgenstrahlung

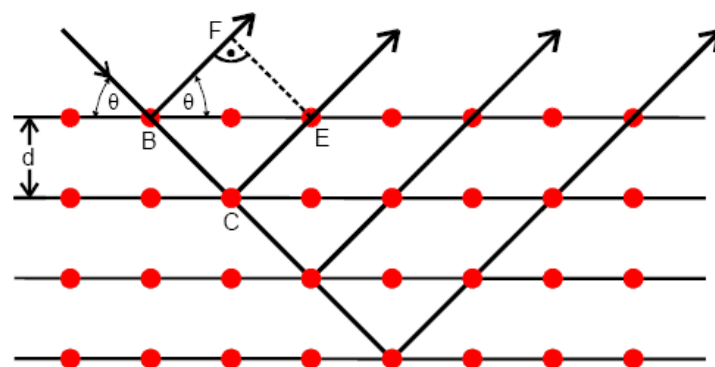


Abbildung 4: Zweidimensionales Kristallgitter

Damit man die Intensität der Röntgenstrahlung hinter dem Metall messen kann, wird ein Kristallgitter benutzt. Aufgrund der Wellennatur der Quanten entstehen Interferenzerscheinungen bei der Reflexion. Die einfallenden Strahlen werden an den Atomhüllen gestreut. Hierbei entsteht konstruktive Interferenz, wenn der Gangunterschied  $\Delta$  benachbarter Strahlen ein Vielfaches der Wellenlänge der Röntgenstrahlung ist. Diese Bedingung ist nur für bestimmte Winkel  $\Theta$  erfüllt. Deshalb ergibt sich aus der Geometrie der Anordnung für  $\Theta$

$$\Delta = 2d \cdot \sin\Theta \quad (2.13)$$

Aus Formel (2.14) ergibt sich letzten Endes, dass man nur dann eine wesentliche Intensität misst, wenn die *Bragg-Bedingung* erfüllt ist. Diese Bedingung ist durch Gleichung (2.15) gegeben.

$$n\lambda = 2d \cdot \sin\Theta \quad (2.14)$$

Man erhält nun einen Zusammenhang zwischen dem eingestellten Winkel und der entsprechenden Energie.

$$E = \frac{h \cdot c}{\lambda} = n \cdot \frac{h \cdot c}{2d \cdot \sin\Theta} \quad (2.15)$$

### 3 Durchführung

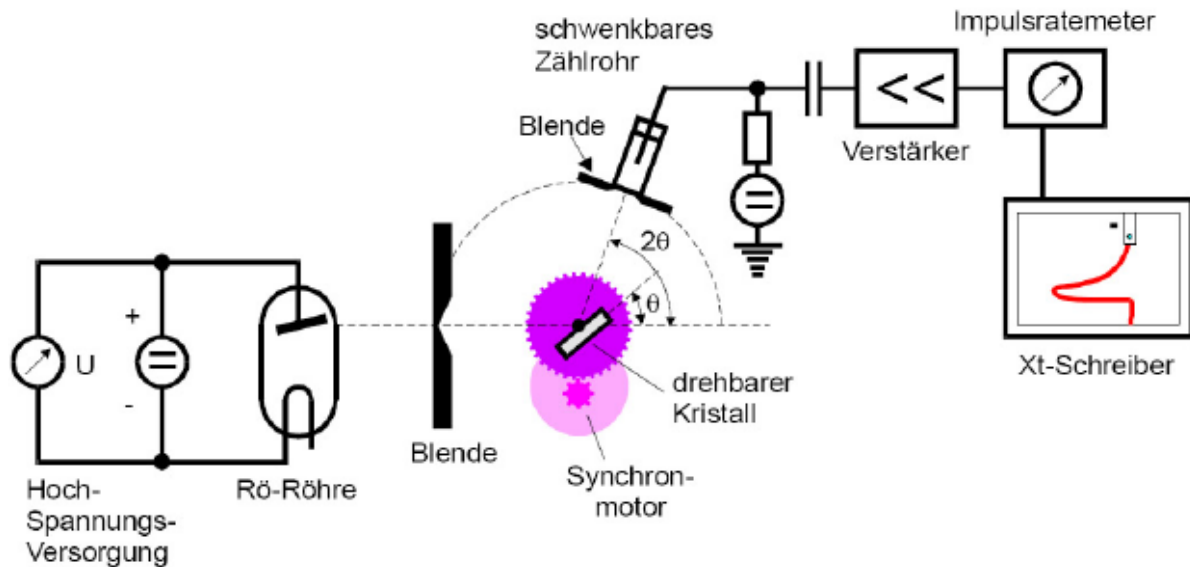


Abbildung 5: Aufbau der verwendeten Apparatur

In Abbildung 5 sieht man den schematischen Aufbau der Messapparatur. Zum Aufbau lässt sich folgendes sagen: Der Strahl, welcher in der Röntgenröhre erzeugt und mit Hilfe der Blende gebündelt wird, trifft auf den drehbaren Kristall und wird dort nach der Bragg'schen Reflexionsbedingung gestreut. Der gestreute Röntgenstrahl durchläuft eine Probe mit unterschiedlichen Metallen, die vor dem Geiger-Müller-Zählrohr platziert ist. Die vom Geiger-Müller-Zählrohr aufgenommenen Impulse kann man mit Hilfe eines Impulsratenmeters und einem XT-Schreiber aufnehmen. Bei uns wurden das Impulsratenmeter und der XT-Schreiber durch einen Computer ersetzt, so dass keine kontinuierliche Messung entstehen konnte, sondern eine diskrete. Man gibt die jeweiligen Winkelvariation, die Zeitkonstante und das Winkelintervall am Computer ein. Der Computer dreht nun den Kristall und das Zählrohr selbstständig, so dass der Kristall- und Zählrohrwinkel in einem Verhältnis von 1:2 stehen, wie es die Bragg'sche Bedingung erfordert. Bei der Wahl der Zeitkonstante sollte man beachten, dass man sie nicht zu groß oder zu klein wählt. Wenn man sie zu groß wählt kann es passieren, dass man zwar genauere Messwerte bekommt, aber somit schnelle Änderungen nicht mehr wahrgenommen werden. Bei zu kleiner Zeitkonstante ist dies genau umgekehrt, dadurch dass man sehr viele kleinere schnelle Änderungen aufnimmt, kommt es zu ungenaueren Messungen.



## 4 Auswertung

Als Erstes wird überprüft, ob das Gerät einen Offset hat – sprich ob der Zählrohrwinkel wirklich im Verhältnis 2:1 die meiste Intensität misst. Wie man in der Abbildung 7 im Anhang sieht, ist dies hier der Fall.

Für die folgende Auswertung werden einige Konstanten gebraucht, welche in Tabelle 1 angeführt werden.

h [eV]	c [ $\frac{m}{s}$ ]	$\alpha$	$R_\infty$ [eV]	d [m]
$4,14 \cdot 10^{-15}$	299792458	0,0073	13,6	$2,01 \cdot 10^{-10}$

Tabelle 1: Konstanten

Da die Intensität in der Realität stetig abfällt, bestimmt man den Wert nach der Formel (4.1).

$$\frac{1}{2} (I_{max} - I_{min}) \quad (4.1)$$

Von diesem Wert kann man nun den zugehörigen Winkel  $\Theta$  ablesen und diesen dann mit Hilfe der Formel (4.2) in die Energie umwandeln. Wobei hier die Interferenzordnung  $n = 1$  ist.

$$E = \frac{hcn}{2d\sin\Theta} \quad (4.2)$$

### 4.1 Berechnung der Abschirmungszahlen $\sigma_{1,0}$

Um die Abschirmungszahl  $\sigma$  zu bestimmen, errechnet man mit den Formeln (4.1) und (4.2) die Energie bei den K-Linien aus. Die dafür benötigten Werte liest man aus den Abbildungen 8, 9 und 10 im Anhang ab. Um letzten Endes die Abschirmungszahl  $\sigma_{1,0}$  zu bestimmen verwende man Formel (4.3).

$$\sigma_{1,0} = z - \sqrt{\frac{E_{K,abs}}{R_\infty} - \frac{\alpha^2 z^4}{4}} \quad (4.3)$$

Die Tabelle 2 beinhaltet die zur Rechnung benötigten Werte, sowie die Abschirmungszahlen, der Literaturwert stammt aus Quelle[2].

Material	Ordnungszahl z	$\Theta$ [°]	$E_{K,abs}$ [eV]	$E_{K,lit}$ [eV]	$\sigma_{1,0}$
Gallium	31	17,49	10262	10200	3,76
Brom	35	13,30	13407	11814	3,93
Strontium	38	11,09	16034	16105	4,08

Tabelle 2: Ergebnisse von Ga, Br, Sr

## 4.2 Berechnung der Abschirmungszahlen $s_{2,1}$

Um nun die Abschirmzahlen  $s$  zu berechnen, braucht man erst einmal die Energien  $E_{L_{III}}$  und  $E_{L_{II}}$ . Diese errechnet man genauso wie bei den Abschirmzahlen  $\sigma$ . Nun muss man allerdings zusätzlich noch die Differenz  $\Delta E$  laut Formel (4.4) bestimmen.

$$\Delta E = E_{L_{III}} - E_{L_{II}} \quad (4.4)$$

Mit diesem Ergebnis hat man nun alles zusammen um mit der Formel (4.5) die Abschirmungszahlen  $s_{2,1}$  zu berechnen.

$$s_{2,1} = z - \sqrt{\left(\frac{4}{\alpha} \sqrt{\frac{\Delta E}{R_{\infty}}} - \frac{5\Delta E}{R_{\infty}}\right) \left(1 + \frac{19\alpha^2}{32} \frac{\Delta}{R_{\infty}}\right)} \quad (4.5)$$

Auch hier sind sämtliche Werte in einer Tabelle dargestellt, der Tabelle 3. Die Werte zum Berechnen der Abschirmzahlen werden aus den Abbildungen 11 und 12 im Anhang genommen.

Material	Ordnungszahl $z$	$\Theta_{L_{III}} [^\circ]$	$\Theta_{L_{II}} [^\circ]$	$E_{L_{III}} [\text{eV}]$	$E_{L_{II}} [\text{eV}]$	$s_{2,1}$
Gold	79	13,16	15,16	13547	11831	4,54
Platin	78	13,64	15,55	13079	11504	4,96

Tabelle 3: Ergebnisse von Au und Pt

## 4.3 Berechnung der Abschirmzahlen für Kupfer

Auch hier werden die Winkel in Energien mit der Formel (4.2) umgerechnet. Allerdings wird hier der Winkel ganz normal am Peak abgelesen. Zur Berechnung der Abschirmungszahlen  $\sigma_1$  und  $\sigma_2$  braucht man jetzt nur noch die Formeln (4.6) und (4.7) benutzen.

$$\sigma_1 = z - \sqrt{\frac{E_{K_{\beta}}}{R_{\infty}}} \quad (4.6)$$

$$\sigma_2 = z - \sqrt{\frac{E_{K_{\beta}} - E_{K_{\alpha}}}{R_{\infty}}} \quad (4.7)$$

In Tabelle 4 werden alle Werte für Kupfer dargestellt. Die Winkel wurden aus Abbildung 13 im Anhang abgelesen.

Ordnungszahl	$\Theta_{\beta} [^\circ]$	$\Theta_{\alpha} [^\circ]$	$E_{\beta} [\text{eV}]$	$E_{\alpha} [\text{eV}]$	$\sigma_1$	$\sigma_2$
29	20,4	22,60	8848	8056	3,5	13,45

Tabelle 4: Ergebnisse von Kupfer

#### 4.4 Berechnung des Grenzwinkels und der Auflösungsgenauigkeit

Um den Grenzwinkel zu berechnen muss man eine Extrapolation um die Intensität 0 entwickeln. Der Schnittpunkt der beiden Geraden gibt den Grenzwinkel  $\Theta_{gr}$  an. Zur Bestimmung dieser Geraden werden die Messwerte im Winkelintervall  $[4,6;4,9]$  (ohne den Wert 4,8) und  $[5;6]$  benutzt. Für die beiden Geraden ergeben sich dann die Werte für die angegebene Geradengleichung:

$$y = mx + b$$

$$I_{4,6;4,9} = (-07,72 \pm 2,01) \frac{A}{^\circ} \cdot \Theta + (83,60 \pm 9,40)A \quad (4.8)$$

$$I_{5,6} = (121,76 \pm 22,72) \frac{A}{^\circ} \cdot \Theta - (524,48 \pm 4,16)A \quad (4.9)$$

Daraus wird ermittelt, dass der Schnittpunkt bei folgendem Winkel ist, der unter zur Hilfe-nahme der Formel (4.2) zur Energie umgerechnet wird.

$$\Theta_{gr} = 4,94^\circ \quad (4.10)$$

$$E_{max} = 35816eV \quad (4.11)$$

Die Abbildung 14 zeigt die Extrapolation um die Intensität 0.

Zum Schluss soll die Energieauflösung bestimmt werden. Um diese zu berechnen liest man die Winkelbreite  $\theta_{1/2}$  aus Abbildung 6 ab. Mit der Winkelbreite und Formel (4.2) kann nun

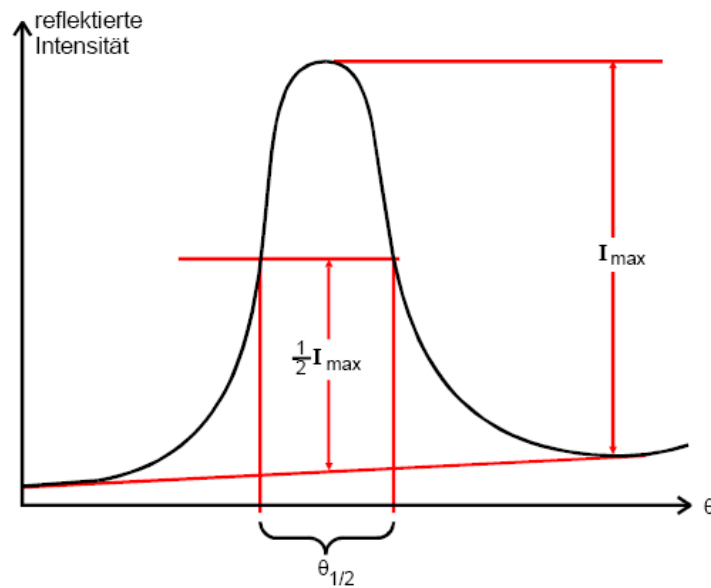


Abbildung 6: Bestimmung der Winkelbreite

die Energie berechnet werden. Die Energieauflösung setzt sich nun aus der Differenz dieser beiden Energien zusammen.

$$\Delta E = 168eV \quad (4.12)$$

## 5 Anhang

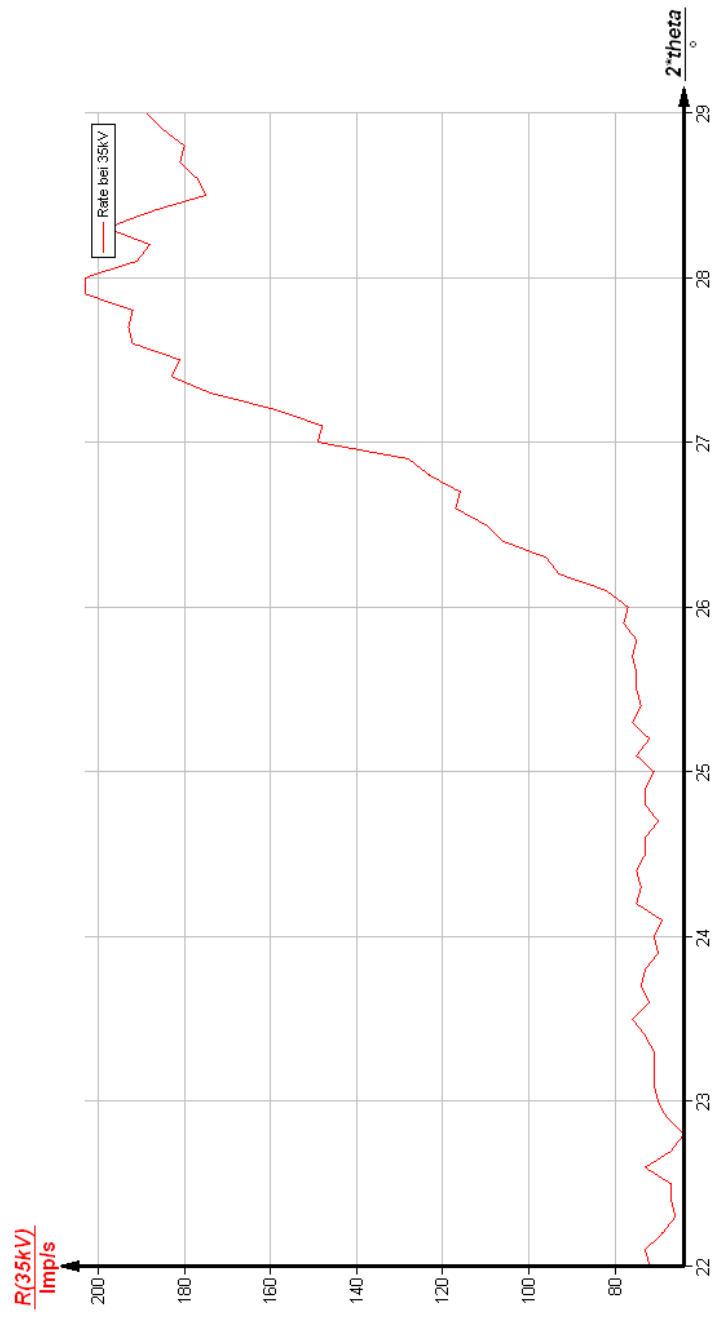


Abbildung 7: Messung zum Offset

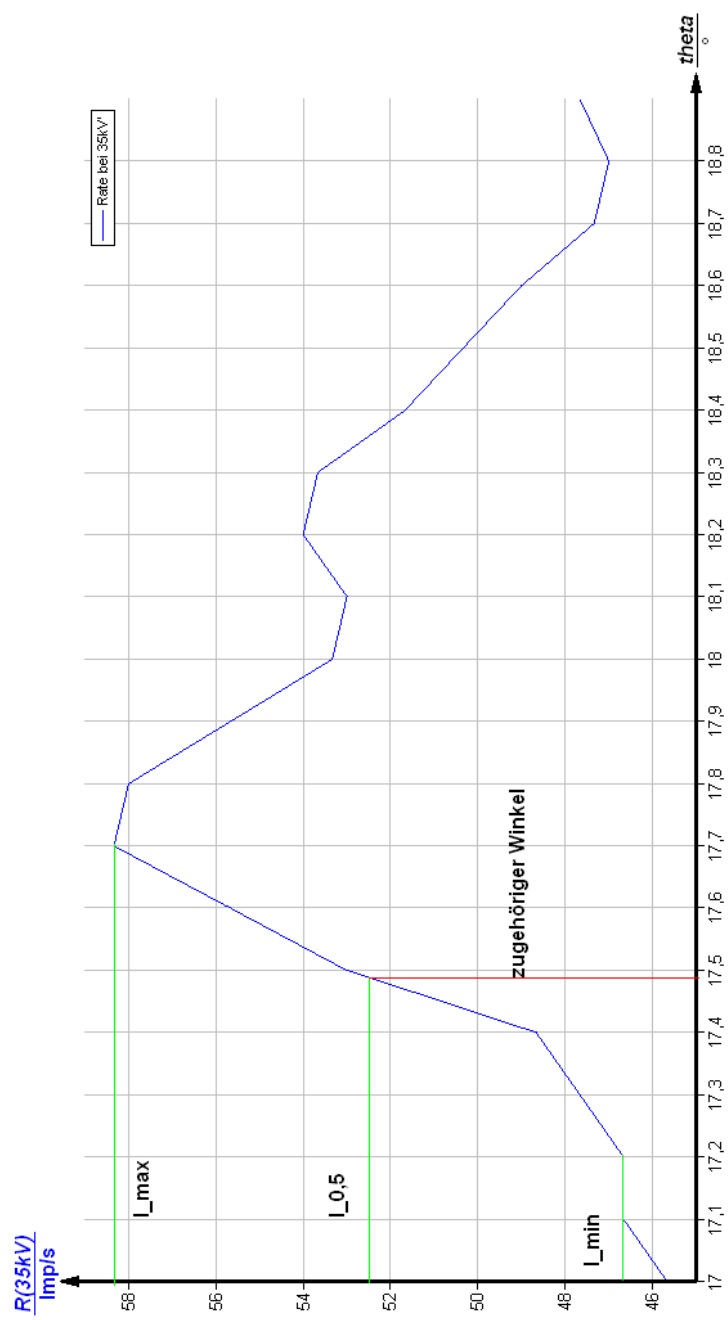


Abbildung 8: Messung von Gallium

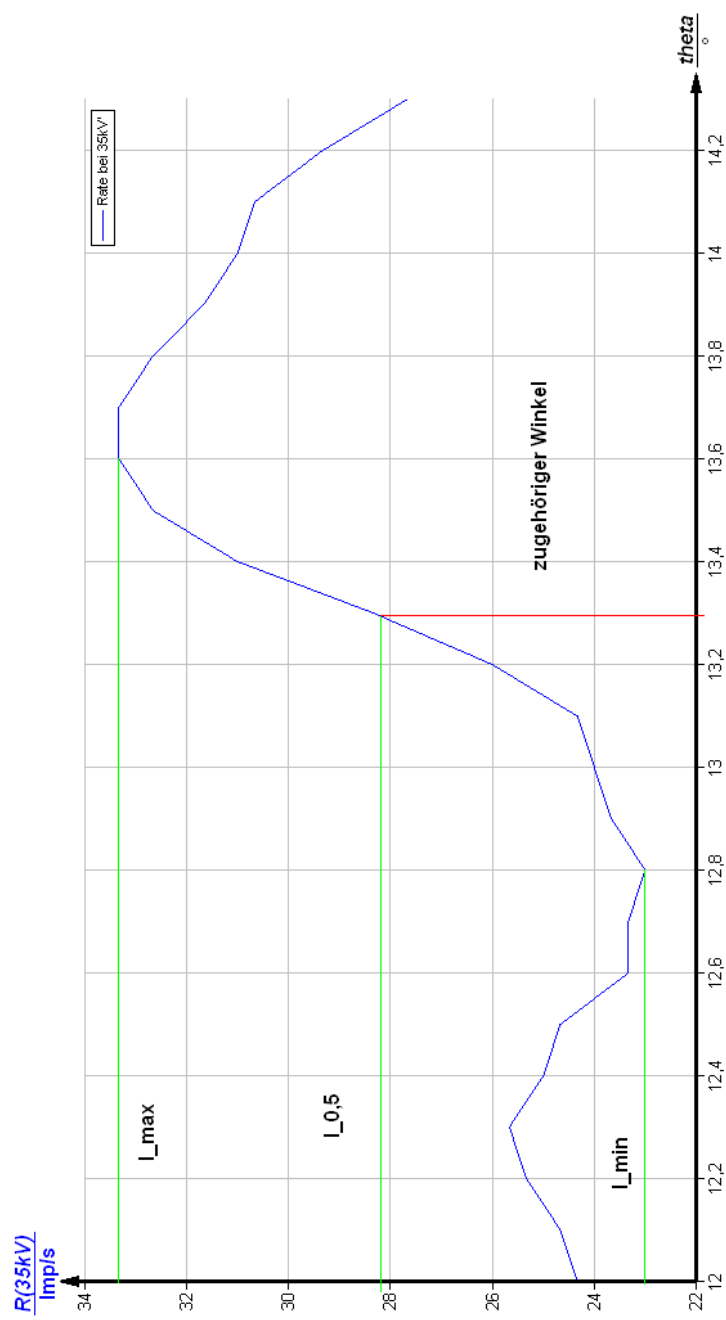


Abbildung 9: Messung von Brom

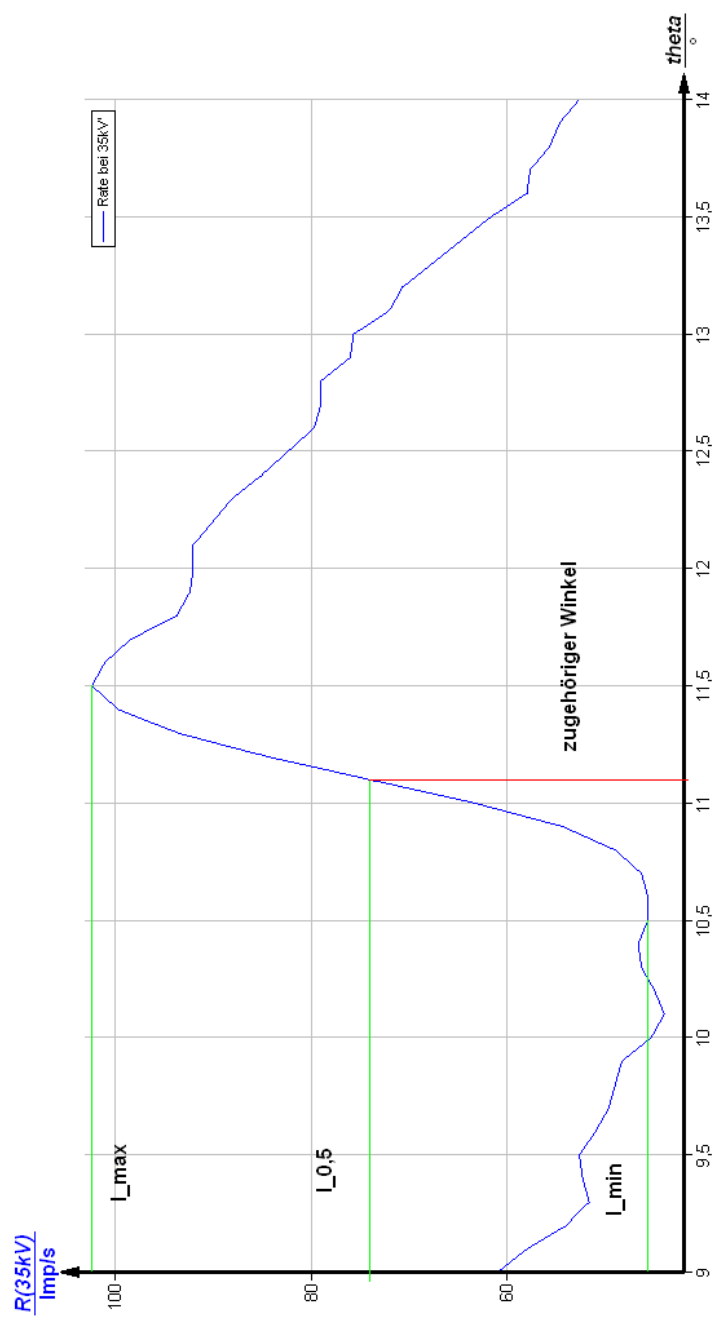


Abbildung 10: Messung von Strontium

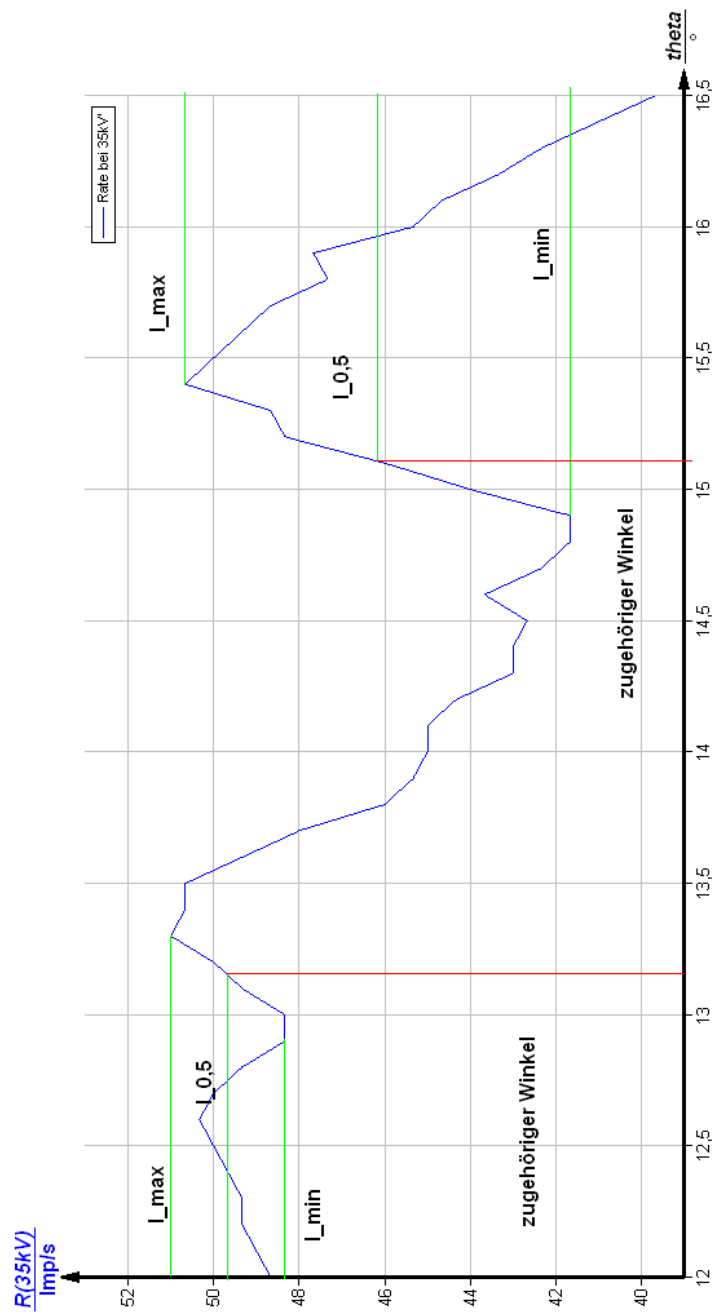


Abbildung 11: Messung von Gold



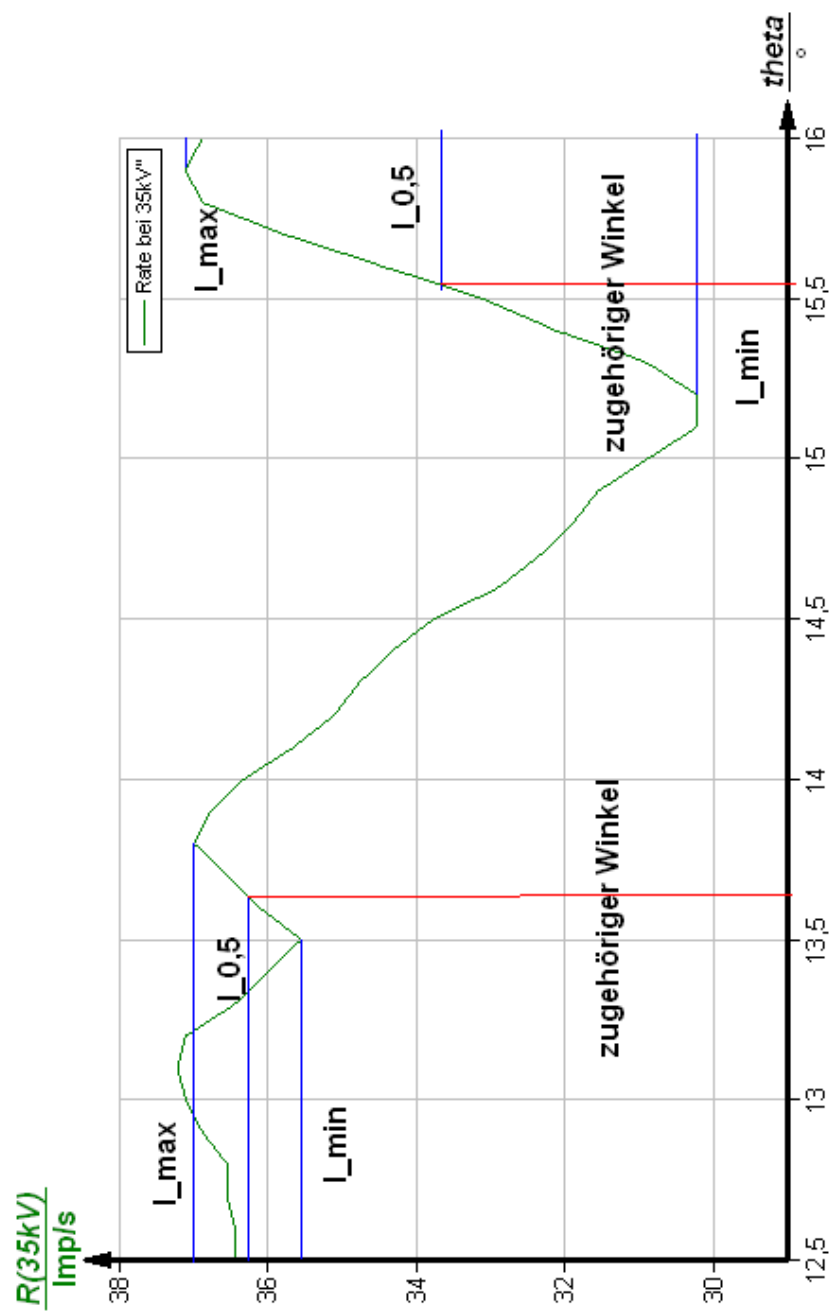


Abbildung 12: Messung von Platin

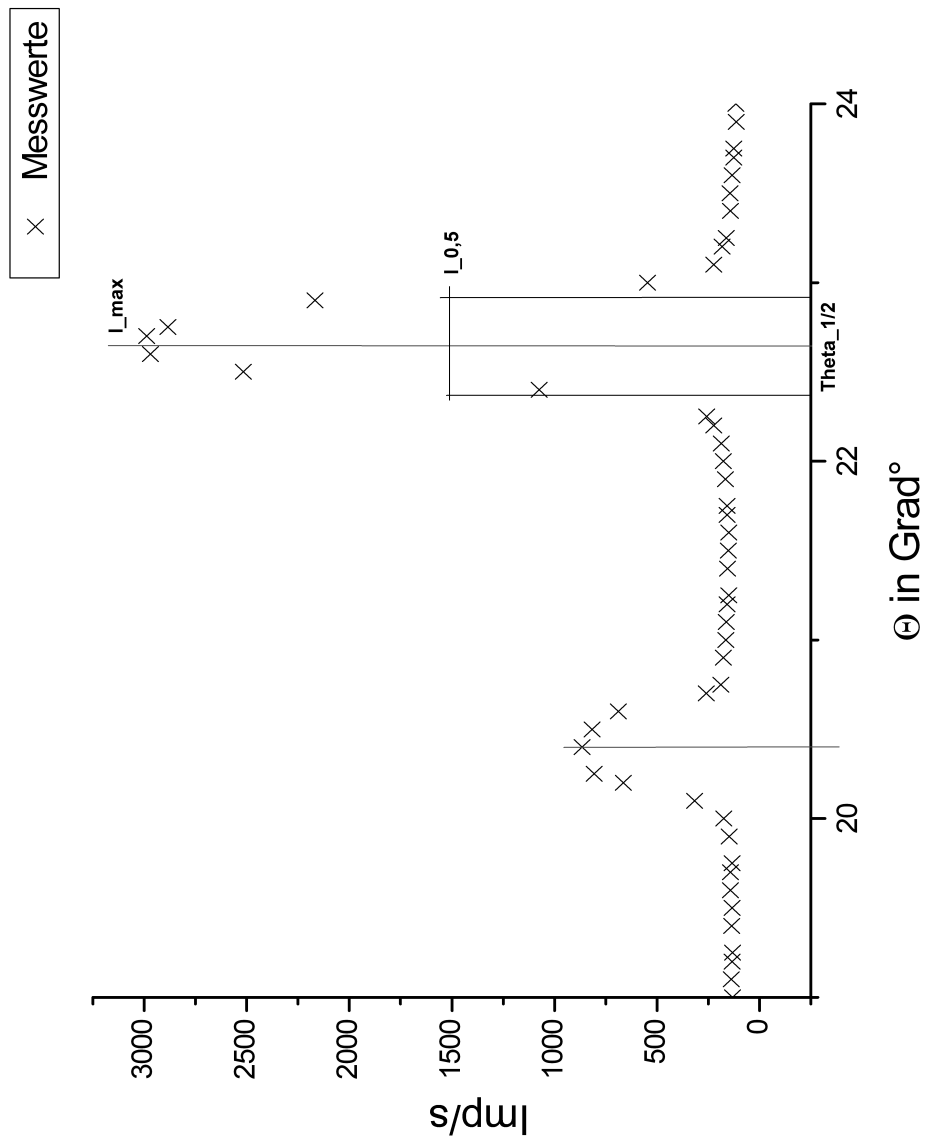


Abbildung 13: charakteristische Linien des Röntgenspektrums

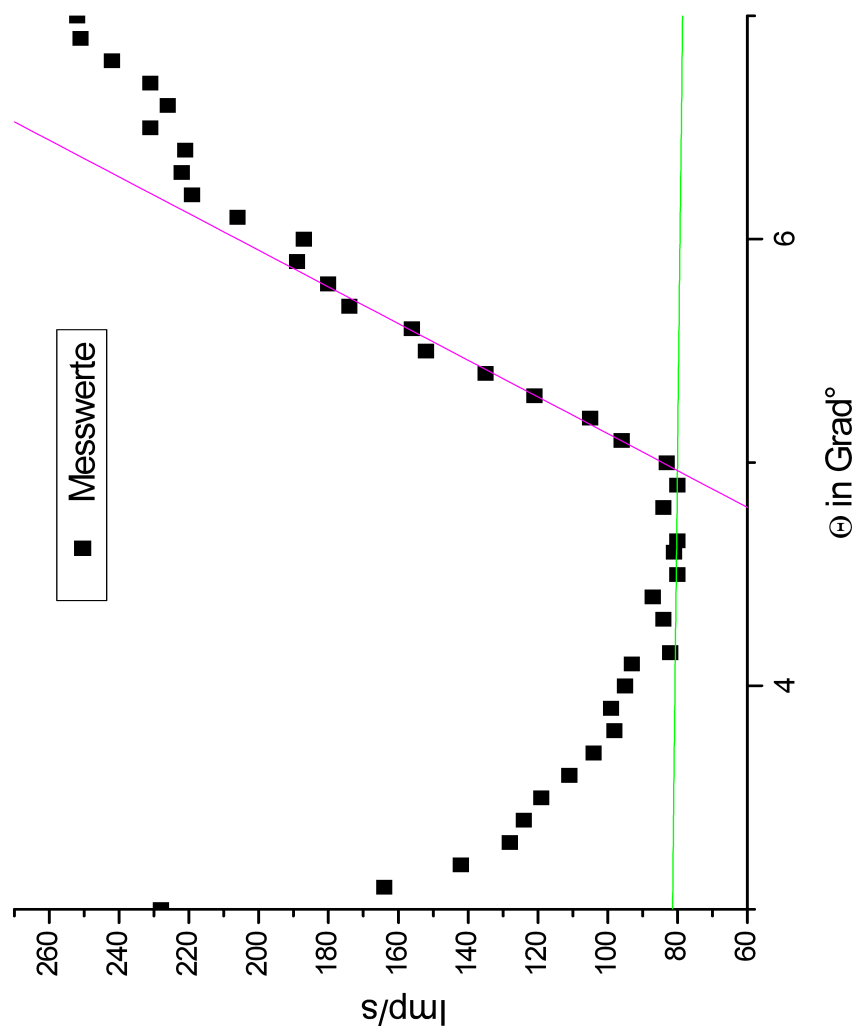


Abbildung 14: Extrapolation des Grenzwinkels

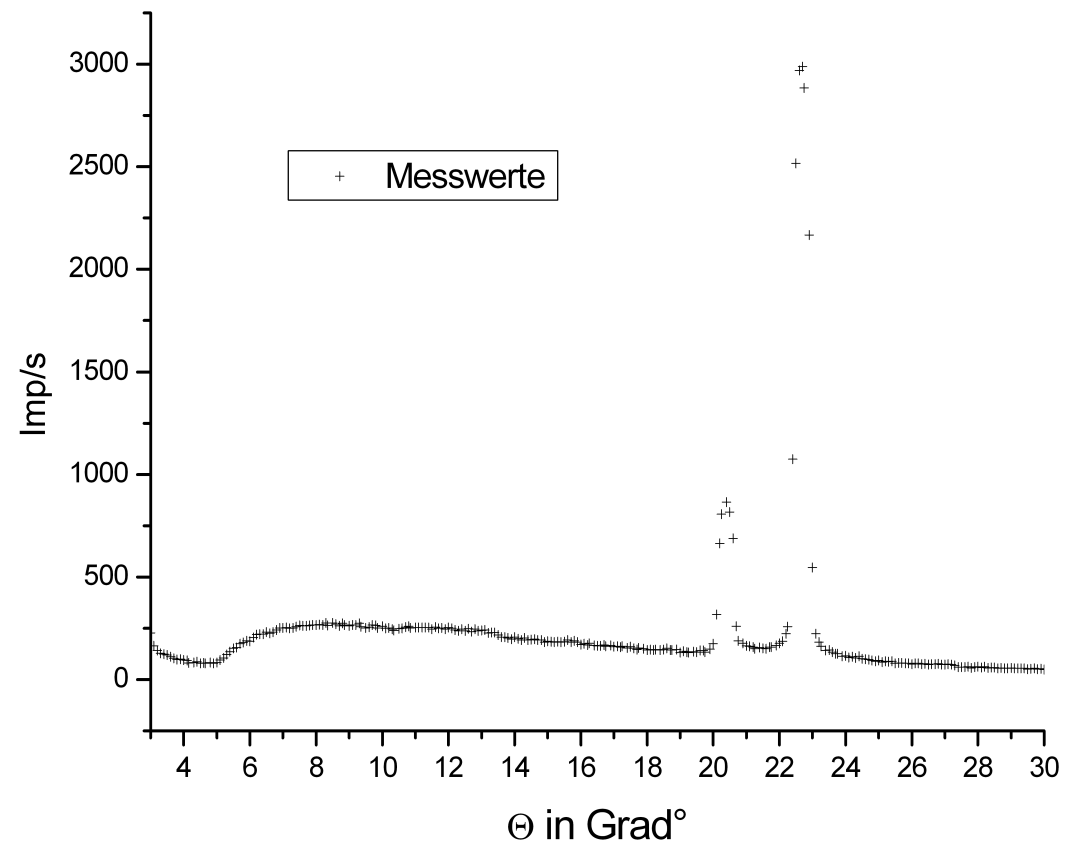


Abbildung 15: Röntgenspektrum

## **Literatur**

- [1] Physikalisches Anfänger-Praktikum Skript, Versuch 602, Röntgen-Emissions- und Absorptionsspektren, Universität Dortmund
- [2] Clayden Warren Wolters, Chemistry, Oxford, 2. Auflage