

Röntgen-Emissions- und Absorptionsspektren

Im vorliegenden Experiment soll die Erzeugung von Röntgenstrahlung und die Gestalt des Emissionsspektrums sowie die Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie untersucht werden.

Röntgenstrahlung entsteht durch Beschuss von Absorberatomen mit Elektronen, und zwar auf zwei Arten: Erstens, wenn ein einfallendes Elektron in die Hülle eines Absorberatoms eindringt und in den Einflussbereich des Coulombfeldes des Kerns gerät. Durch die Coulomb-Wechselwirkung wird es aus seiner geradlinigen Bahn abgelenkt, wobei ein Photon entsteht, das bevorzugt senkrecht zur Beschleunigungsrichtung der Elektronen abgestrahlt wird. Man bezeichnet diese Strahlung als Bremsstrahlung. Ihr Energiespektrum ist kontinuierlich, es reicht von Null bis zu einem Maximalwert, der genau dann erreicht wird, wenn die gesamte kinetische Energie des Elektrons in einem Abbremsungsprozess in Strahlungsenergie umgewandelt wird.

Zweitens kann das Elektron eine Ionisation des Atoms in einer seiner inneren Schalen hervorrufen, wodurch ein „Loch“ entsteht. Dieses wird sofort durch Fall eines Elektrons aus einer höheren Schale gefüllt, wobei ein Röntgenquant abgestrahlt wird. Für diesen Prozess muss das einfallende Elektron mindestens die Bindungsenergie des Elektrons besitzen, welches es aus seiner Schale herausschlägt. Das entstandene neue Loch wird wiederum von einem Elektron aus einer höheren Schale aufgefüllt, wobei wieder Energien in Form von Photonen freiwerden. Diese Energiebeträge sind diskret. Sie sind gegeben durch

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

Darin ist h das Planck'sche Wirkungsquantum und ν die Frequenz.

Da die Energie der auf diese Weise erzeugten Strahlung von den Atomen der bestrahlten Materieschicht abhängt, bezeichnet man sie auch als charakteristische Röntgenstrahlung. Die zur Erzeugung von Röntgenstrahlung benötigten schnellen Elektronen werden in einer Röntgenröhre erzeugt (Abb. 1). Sie enthält in einem evakuierten Glaskolben eine Glühkathode, die durch thermische Emission freie Elektronen erzeugt. Dem Glühdraht gegenüber steht die Anode. Sie besitzt eine positive Spannung U von einigen kV gegenüber der Kathode, die die Elektronen beschleunigt. An der Anode entsteht dann die Röntgenstrahlung.

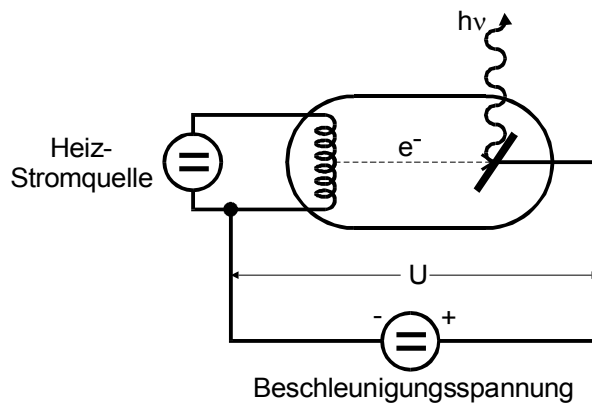


Abbildung 1

Die Abhängigkeit der Intensität von der Energie der Röntgenquanten bezeichnet man als das Spektrum der Strahlung. Dieses setzt sich aus zwei Anteilen zusammen, dem Bremsstrahlungskontinuum und den Linien der charakteristischen Strahlung. Die Intensität der Bremsstrahlung geht für $E \rightarrow 0$ asymptotisch gegen Null. Im Gegensatz dazu bricht das Spektrum mit wachsender Energie bei einer endlichen Energie E_{\max} ab, welche gleich der kinetischen Energie E_{kin} der beschleunigten Elektronen ist:

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

Darin steht e_0 für die Elementarladung.

Die Lage der Linien im charakteristischen Spektrum kann man aus der Schrödinger-Gleichung für das betreffende Atom errechnen. Die Energie-Eigenwerte ergeben sich näherungsweise zu

$$E_n = -R_{\infty} z_{\text{eff},n}^2 \cdot \frac{1}{n^2} \quad (3)$$

Darin bedeutet z_{eff} die effektive Kernladungszahl und n die Hauptquantenzahl.

Somit wird beim Übergang eines Elektrons von der m -ten zur n -ten Schale eine Energie vom Betrag

$$h\nu_{m,n} = R_{\infty} z_{\text{eff},n,m}^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (4)$$

frei. Mit Hilfe von (4) lässt sich nun die Lage der Linien im charakteristischen Spektrum errechnen, wenn man der Reihe nach für die Hauptquantenzahlen n und m alle natürlichen Zahlen mit $m > n$ einsetzt. Die innerste Schale ($n = 1$) wird aus historischen Gründen als K-Schale bezeichnet, die höheren Schalen mit $n > 1$ dem Alphabet folgend mit L, M, N,

O und so weiter. Übergänge aus höheren Schalen auf die K-Schale heißen K-Linien, Übergänge auf das L-Niveau entsprechend L-Linien und so weiter (Abb. 2).

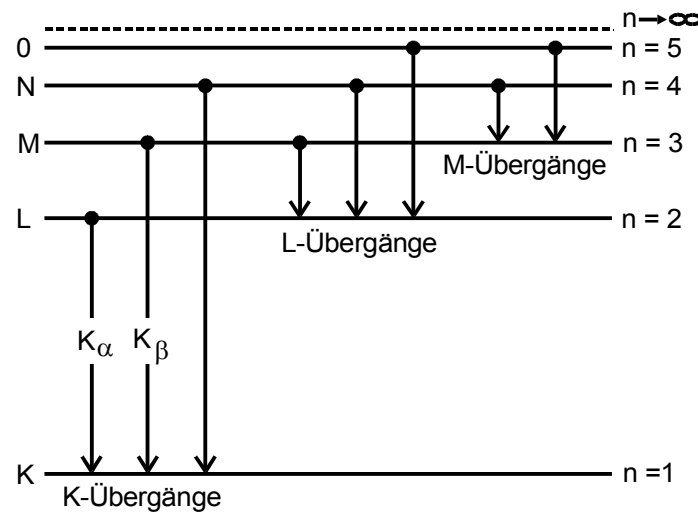


Abbildung 2

Bereits bei mittleren z -Werten gibt die Gleichung (3) die Energieniveaus in der Elektronenhülle nur ungenau wieder. Eine bessere Näherung ergibt sich im Rahmen der Störungsrechnung, die Sommerfeldsche Feinstrukturformel:

$$E_{n,j} = -R_{\infty} \left\{ z_{\text{eff}_1}^2 \cdot \frac{1}{n^2} + \alpha^2 z_{\text{eff}_2}^4 \cdot \frac{1}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right\} \quad (5)$$

Diese berücksichtigt relativistische Korrekturen und die Spin-Bahn-Kopplung.

Die Kernladungszahlen z_{eff_1} und z_{eff_2} werden durch die Abschirmungszahlen σ und s ausgedrückt:

$$z_{\text{eff}_1} = z - \sigma \text{ und } z_{\text{eff}_2} = z - s$$

Diese Größen beschreiben die Schwächung des Kernfeldes durch die beim Emissionsakt unbeteiligten Elektronen. Die Größe σ , welche im Hauptterm der Energiegleichung (5) steht, wird wesentlich bestimmt durch die Hüllenelektronen, deren Ladungsverteilungsmaximum innerhalb der n -ten Schale liegt. σ wird als Konstante der vollständigen Abschirmung bezeichnet. Im Gegensatz hierzu ist ein Einfluss der äußeren Elektronen auf die Drehimpulskopplung (2. Summand in (5)) kaum festzustellen. Die Abschirmungszahl s wird daher praktisch nur durch den Bruchteil der Elektronen bestimmt, die innerhalb der n -ten Schale liegen. Sie wird auch als Konstante der inneren Abschirmung bezeichnet.

$$E_{n,j} = -R_{\infty} \left\{ \left(z - \sigma_{n,\ell} \right)^2 \cdot \frac{1}{n^2} + \alpha^2 \left(z - s_{n,\ell} \right)^4 \cdot \frac{1}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right\} \quad (6)$$

Da es zu gegebener Hauptquantenzahl n mehrere ℓ - und j -Werte gibt, folgt aus (6) eine Aufspaltung der Energieniveaus in mehrere Unterniveaus, die Feinstruktur-Aufspaltung. Da $\ell_{\max} = n - 1$ ist, können die K-Elektronen ($n = 1$) keinen Bahndrehimpuls besitzen, sondern nur einen Eigendrehimpuls (Spin). Es ist daher für alle K-Elektronen $j = \frac{1}{2}$, woraus folgt, dass die K-Schale keine Feinstrukturaufspaltung besitzt. Bei der L-Schale mit $n = 2$ sind die Bahndrehimpulsquantenzahlen $\ell = 0$ und $\ell = 1$ möglich. Es treten somit folgende Quantenzahlkombinationen auf: $\{j = \frac{3}{2}, \ell = 1\}$, $\{j = \frac{1}{2}, \ell = 1\}$, $\{j = \frac{1}{2}, \ell = 0\}$. Damit erhält man insgesamt drei Unterniveaus, denn die zu den Kombinationen $\{j = \frac{1}{2}, \ell = 1\}$ und $\{j = \frac{1}{2}, \ell = 0\}$ gehörenden Niveaus besitzen wegen $s_{2,0} \neq s_{2,1}$ unterschiedliche Werte. Entsprechend muss sich die M-Schale ($n = 3$, $\ell_{\max} = 2$) in 5 Unterniveaus aufspalten (Abb. 3).

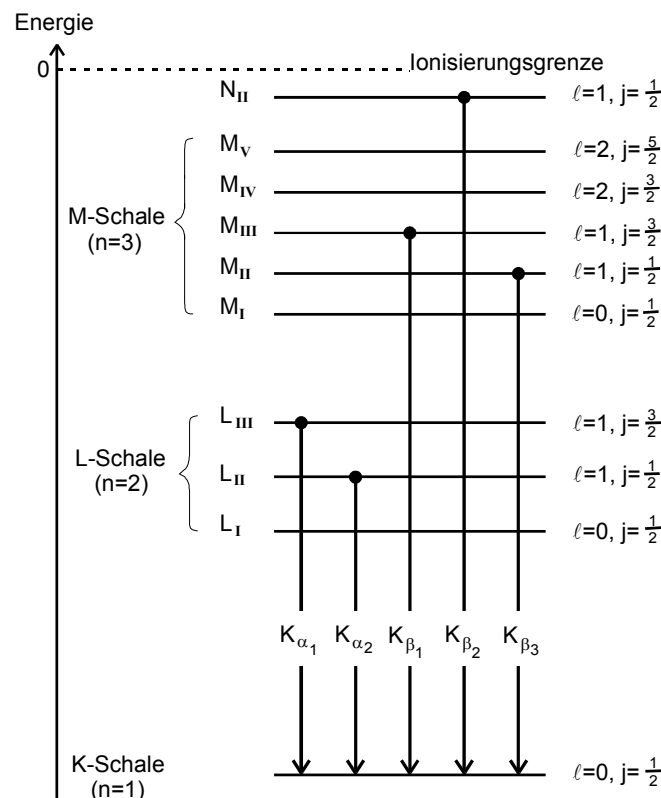


Abbildung 3

Für einen Übergang zwischen den beiden Niveaus mit den Quantenzahlen n' , ℓ' , j' und n , ℓ , j bekommt man aus (6)

$$E = R_{\infty} \left\{ \frac{(z - \sigma_{n\ell})^2}{n^2} - \frac{(z - \sigma_{n'\ell'})^2}{n'^2} + \alpha^2 \frac{(z - s_{n\ell})^4}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) - \alpha^2 \frac{(z - s_{n'\ell'})^4}{n'^3} \left(\frac{1}{j' + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n'} \right) \right\} \quad (7)$$

Es ist das Ziel dieses Experimentes, einige Abschirmungszahlen σ und s für verschiedene Atome zu bestimmen.

Beim Durchgang von Röntgenstrahlen durch Materie tritt eine energie- und materialabhängige Schwächung der Strahlintensität auf. Sie wird im Wesentlichen durch Absorption und in geringerem Umfang durch Streuung der Röntgenquanten hervorgerufen.

Der mikroskopische Vorgang, der die Absorption eines Quants bewirkt, wird als innerer Photo-Effekt bezeichnet. Das einfallende Quant tritt in Wechselwirkung mit einem Hüllenelektron eines Absorberatoms. Dieses wird dabei aus seiner Bindung entfernt. Damit dieser Prozess überhaupt möglich ist, muss die Quantenenergie $h\nu$ größer als seine Bindungsenergie E_B sein. Die überschüssige Energie erhält das Elektron in Form von kinetischer Energie, sodass gilt:

$$h\nu = E_B + E_{\text{kin}}$$

Für die K-Schale ergibt sich dann gemäß (6)

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

Da sich innerhalb der K-Schale kaum Elektronen aufhalten, verschwindet die Konstante der Abschirmung $s_{1,0}$ in (9). Für die L-Schale gilt:

$$h\nu_{L, \text{abs, I}} = E_{2,0, \frac{1}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left\{ \frac{(z - \sigma_{2,0})^2}{8} + \alpha^2 \frac{(z - s_{2,0})^4}{8} \cdot \frac{5}{8} \right\} \quad (9)$$

$$h\nu_{L, \text{abs, II}} = E_{2,1, \frac{1}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left\{ \frac{(z - \sigma_{2,1})^2}{4} + \alpha^2 \frac{(z - s_{2,1})^4}{8} \cdot \frac{5}{8} \right\} \quad (10)$$

$$h\nu_{L, \text{abs, III}} = E_{2,1, \frac{3}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left\{ \frac{(z - \sigma_{2,1})^2}{4} + \alpha^2 \frac{(z - s_{2,1})^4}{8} \cdot \frac{1}{8} \right\} \quad (11)$$

Bildet man nun mit Hilfe von (10) und (11) die Differenz der beiden Energien $h\nu_{L,absII}$ und $h\nu_{L,absIII}$, so bleibt

$$h\nu_{L,abs,II} - h\nu_{L,abs,III} = R_{\infty} \alpha^2 \frac{(z - s_{2,1})^4}{16} \quad (12)$$

Eine genauere Näherung erhält man durch Berücksichtigung höherer Terme zu

$$(z - s_{2,1})^2 = \left(\frac{4}{\alpha} \sqrt{\frac{\Delta E}{R_{\infty}}} - \frac{5 \Delta E}{R_{\infty}} \right) \left(1 + \frac{19}{32} \alpha^2 \frac{\Delta E}{R_{\infty}} \right) \quad (13)$$

Daraus lässt sich die Abschirmzahl $s_{2,1}$ errechnen. Abb. 4 gibt einen typischen Kurvenverlauf wieder.

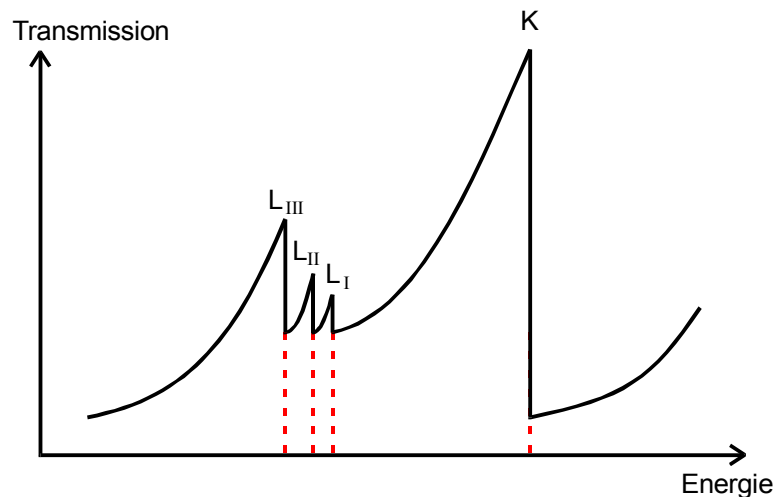


Abbildung 4

Der Absorptionskoeffizient nimmt monoton mit Quantenenergie ab und damit die Transmission zu. Die Monotonie wird unterbrochen, sobald die Energie der eingestrahnten Quanten ausreicht, ein Elektron aus einer der Schalen des Absorberatoms zu entfernen. An solchen Stellen ändert sich die Transmission sprunghaft. Die Kurve besitzt dort eine Unstetigkeitsstelle, welche als Absorptionskante bezeichnet wird. Die Lage dieser Kanten ist identisch mit den Absorptionsenergien $h\nu_{abs}$.

Im vorliegenden Experiment werden die Welleneigenschaften der Röntgenstrahlung verwendet, um eine Energiemessung durchzuführen. Beim Eindringen von Röntgenstrahlung in Kristalle treten Interferenzerscheinungen auf. Die einfallende Strahlung wird an den Elektronenhüllen der Atome auf den Gitterplätzen in nahezu alle Raumrichtungen elastisch gestreut. Konstruktive Interferenz tritt genau dann auf, wenn der Gangunterschied be-

nachbarter Strahlen in ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge λ ist diese Bedingung ist nur erfüllt, wenn der Röntgenstrahl unter ganz bestimmten Winkeln θ zur Netzebenen-schar einfällt, der gegeben ist durch

$$2d \sin\theta = n\lambda \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (n = \text{Interferenzordnung}) \quad (14)$$

Diese Gleichung wird als Braggsche Reflexionsbedingung bezeichnet. Es lässt sich über die Beziehung

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

die Röntgen-Quantenenergie in (14) einführen, sodass sich ergibt

$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{hc \cdot n}{2d \sin\theta} \quad (15)$$

und nach Gauß'scher Fehlerfortpflanzung

$$\Delta E = \left. \frac{\partial E}{\partial \theta} \right|_{\theta} \cdot \Delta \theta = \frac{hc \cdot n}{2d} \cdot \left| \frac{-\cos\theta}{\sin^2\theta} \right| \cdot \Delta \theta \quad (16)$$

Die Messung der Röntgen-Spektren wird mit der in Abb. 5 skizzierten Apparatur vorgenommen. Sie enthält einen Hochspannungsgenerator, der Spannungen zwischen 10 und 24 kV erzeugen kann bei einem Strom von ca. 1 mA. Die Röntgen-Röhre besitzt eine Cu-Anode. Ihre Strahlung fällt durch eine Blende auf einen schwenkbaren LiF-Einkristall. Die hier verwendeten Netzebenen liegen parallel zur Oberfläche des Kristalls und besitzen einen Netzebenenabstand von $d = 2,01 \text{ \AA}$. Bei dieser Apparatur tritt nur die Interferenzordnung $n = 1$ auf, da die Intensität nicht ausreicht, um weitere Ordnungen sichtbar zu machen.

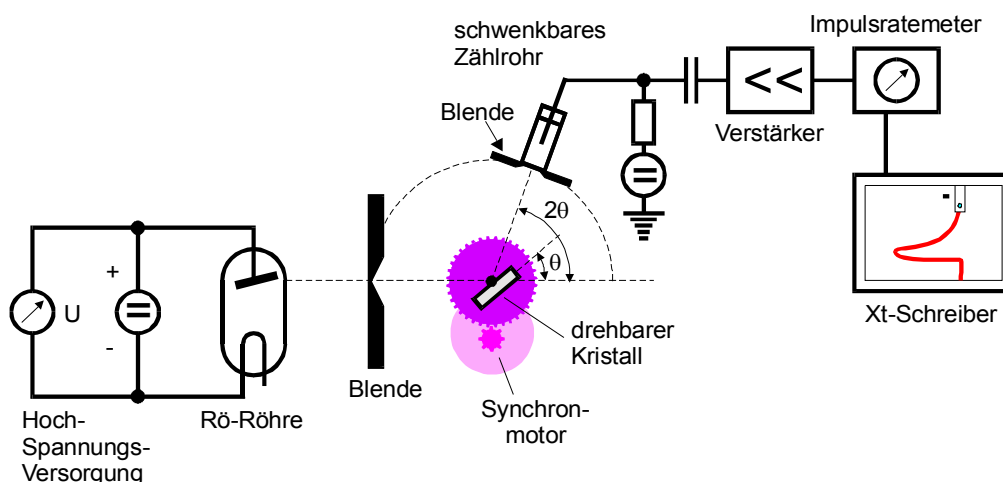


Abbildung 5

An das Zählrohr ist ein Verstärker angeschlossen, der die vom Zählrohr gelieferten Impulse auf eine solche Höhe bringt, dass sie vom Impulsratemeter verarbeitet werden können. Dieses Gerät gibt ein Gleichspannungssignal ab, dessen Betrag proportional zu Zahl der pro Zeiteinheit einfallenden Röntgen-Quanten ist und von einem x-t-Schreiber in Abhängigkeit von der Zeit aufgezeichnet werden kann.

Alle nachfolgend angegebenen Winkel beziehen sich auf den Zählrohrwinkel 2θ . Die verwendete Rydberg-Energie wird jeweils mit $\frac{R_\infty M}{M + m_0}$ angepasst, wobei M die Masse des Atoms und m_0 die Elektronenruhemasse ist.

Bestimmung der Abschirmungszahl $\sigma_{1,0}$ aus den K-Absorptionskanten

Nach (9) berechnet sich $\sigma_{1,0}$ zu

$$\sigma_{1,0} = z - \sqrt{\frac{h\nu}{R_\infty} - \frac{\alpha^2 z^4}{4}} = z - \sqrt{\frac{E}{R_\infty} - \frac{\alpha^2 z^4}{4}} \quad (17)$$

$$\Delta\sigma_{1,0} = \left. \frac{\partial\sigma_{1,0}}{\partial E} \right|_E \cdot \Delta E = \frac{1}{2R_\infty} \frac{1}{z - \sigma_{1,0}} \Delta E \quad (18)$$

Element	Kante	Winkel [deg]	Energie [eV] nach (15),(16)	Literaturwert [eV]	z	M [u]	Abschirmzahl $\sigma_{1,0}$ nach (17),(18)
Rubidium	K	$23,23 \pm 0,14$	15317 ± 182	15200	37	85,47	$3,82 \pm 0,20$
Strontium	K	$22,40 \pm 0,20$	15877 ± 280	16105	38	87,62	$4,25 \pm 0,30$
Yttrium	K	$20,76 \pm 0,20$	17116 ± 326	17038	39	88,91	$3,97 \pm 0,34$

Bestimmung der Abschirmungszahl $s_{2,1}$ aus den L_{II} , und L_{III} -Absorptionskanten

Nach (13) berechnet sich $s_{2,1}$ zu

$$s_{2,1} = z - \sqrt{\left(\frac{4}{\alpha} \sqrt{\frac{E_{L2} - E_{L3}}{R_\infty}} - \frac{5(E_{L2} - E_{L3})}{R_\infty} \right) \cdot \left(1 + \frac{19}{32} \alpha^2 \frac{E_{L2} - E_{L3}}{R_\infty} \right)} \quad (19)$$

$$\Delta s_{2,1} = \frac{\partial s_{2,1}}{\partial (E_{L2} - E_{L3})} \bigg|_{(E_{L2} - E_{L3})} \cdot \Delta (E_{L2} - E_{L3}) \quad (20)$$

$$= \frac{\Delta (E_{L2} - E_{L3})}{2(z - s_{2,1})} \left(\left(1 + \frac{19}{32} \alpha^2 \frac{E_{L2} - E_{L3}}{R_\infty} \right) \cdot \left(\frac{2}{\alpha R_\infty} \sqrt{\frac{R_\infty}{E_{L2} - E_{L3}}} - \frac{5}{R_\infty} \right) + \left(\frac{4}{\alpha} \sqrt{\frac{E_{L2} - E_{L3}}{R_\infty}} - \frac{5(E_{L2} - E_{L3})}{R_\infty} \right) \cdot \frac{19\alpha^2}{32R_\infty} \right)$$

Element	Kante	Winkel [deg]	Energie [eV] nach (15),(16)	Literaturwert [eV]	z	M [u]	Abschirmzahl $s_{2,1}$ nach (19),(20)
Platin	L 2	27,39 ± 1,00	13026 ± 933	13273,00	78	195,09	
Platin	L 3	31,43 ± 0,18	11386 ± 127	11564,00	78	195,09	4,27 ± 1,20
Gold	L 2	25,98 ± 0,64	13719 ± 664	13734,00	79	196,97	
Gold	L 3	30,02 ± 0,23	11907 ± 178	11919,00	79	196,97	3,61 ± 0,85
Quecksilber	L 2	25,19 ± 0,45	14142 ± 479	14209,00	80	200,59	
Quecksilber	L 3	29,59 ± 0,45	12076 ± 359	12284,00	80	200,59	2,38 ± 0,79

Bestimmung Abschirmungszahlen σ_1 , σ_2 und σ_3 für Kupfer

Die Abschirmungszahlen berechnen unter der Annahme, dass sich $E_{K,abs}$ mit $E_{K,\beta}$ abschätzen lässt, zu folgenden Werten.

Element	Kante	Winkel [deg]	Energie [eV] nach (15)	Literaturwert [eV]	z	M [u]
Kupfer	K_α	44,34 ± 0,08	8172 ± 28	8048	29	63,55
Kupfer	K_β	40,22 ± 0,08	8969 ± 34	8905	29	63,55

$$\sigma_1 \pm \Delta \sigma_1 = \left(z - \sqrt{\frac{E_{K_\beta}}{R_\infty}} \right) \pm \left(\frac{\Delta E_{K_\beta}}{2R_\infty (z - \sigma_1)} \right) = 3,33 \pm 0,05$$

$$\sigma_2 \pm \Delta \sigma_2 = \left(z - 2\sqrt{\frac{E_{K_\beta} - E_{K_\alpha}}{R_\infty}} \right) \pm \left(\frac{\Delta (E_{K_\beta} - E_{K_\alpha})}{R_\infty (z - \sigma_2)} \right) = 13,69 \pm 0,02$$

σ_3 lässt sich mit dieser Näherung nicht bestimmen.

Bestimmung des energetischen Auflösungsvermögens der Apparatur

Das Auflösungsvermögen $\theta_{1/2}$ der Apparatur berechnet sich nach Abb. 6 aus der K_{α} -Emissionslinie zu 177 eV.

Eine Extrapolation der Intensitätskurve auf Intensität Null liefert folgendes Ergebnis: Laut x-t-Plot wird diese bei etwa $2\theta = 18^{\circ}$ angenommen, das entspricht einer Energie von 19,7 keV (Spannung von 19,7 kV). Diese Messung wurde mit reduzierter Beschleunigungsspannung durchgeführt, um auf dem x-

t-Plot Ausschläge innerhalb der Skala zu erhalten. Für die nachfolgenden Messungen der Absorptionsspektren wurde die Spannung auf das Maximum geregelt, was erklärt, dass auf den Plots für Hg, Au und Pt noch eine merkliche Intensität bei 18° vorhanden ist.

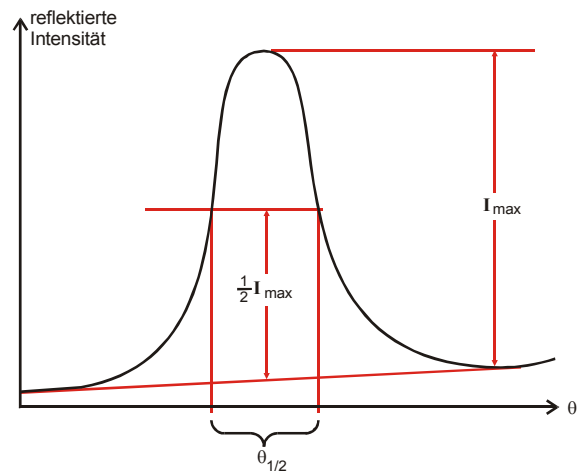


Abbildung 6