

# Versuchsprotokoll zum Anfängerpraktikum Physik

## Versuch 602: Röntgen-Emissions- und Absorptionsspektren

### 1. Einleitung

Mit Hilfe von Röntgenstrahlung ist es möglich, im Gegensatz zum sichtbaren Licht oder UV-Strahlung, zum inneren Teil eines Atoms vorzudringen. Der Grund hierfür ist, dass Röntgenstrahlung wesentlich energiereicher ist. In diesem Experiment sollen die Emissionsspektren einer Kupferanode und die Absorptionsspektren verschiedener Elemente untersucht werden.

### 2. Theorie

Röntgenstrahlung entsteht durch den Beschuss von Materie mit hochenergetischen Elektronen. Dabei gibt es zwei verschiedene Arten der Entstehung.

Gerät ein einfallendes Elektron tief in die Hülle eines Absorberatoms und damit in den Einflussbereich des Coulombfeldes des Kerns, wird es aus seiner geradlinigen Bahn abgelenkt (also beschleunigt). Dabei entsteht ein Photon, das meist senkrecht zur Elektrongeschwindigkeit abgestrahlt wird. Man bezeichnet die auf diese Weise entstehende 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 Strahlungsenergie umgewandelt wird.

Ein einfallendes Elektron kann aber auch ein Elektron aus der Hülle eines Absorberatoms „herausreißen“ und das Absorberatom damit ionisieren. Das entstandene „Loch“ wird sofort durch den Fall eines Elektrons aus einer höheren Schale gefüllt, wobei ein Röntgenquant abgestrahlt wird. Für den Ionisationsprozess muss das einfallende Elektron mindestens die Bindungsenergie des Elektrons besitzen, das es aus seiner Schale herausschlägt. Das neu entstandene Loch wird wiederum von einem Elektron aus einer höheren Schale gefüllt, wobei wieder Energien in Form von Photonenabstrahlung frei werden. Diese Energiebeträge sind im Gegensatz zu den Bremsstrahlungsquanten diskret. Sie sind gegeben durch den Energieunterschied der bei den Emissionsvorgängen beteiligten Schalen. Da die Energie der auf diese Weise entstandenen Röntgenstrahlung von den Atomen der bestrahlten Materie abhängt, bezeichnet man sie als charakteristische Röntgenstrahlung.

Die zur Erzeugung der Röntgenstrahlung benötigten energiereichen Elektronen werden in einer Röntgenröhre (Abb. 1) erzeugt. Sie enthält in einem evakuierten Glaskolben eine Glühkathode, die durch thermische Emission freie Elektronen erzeugt. Der Glühkathode

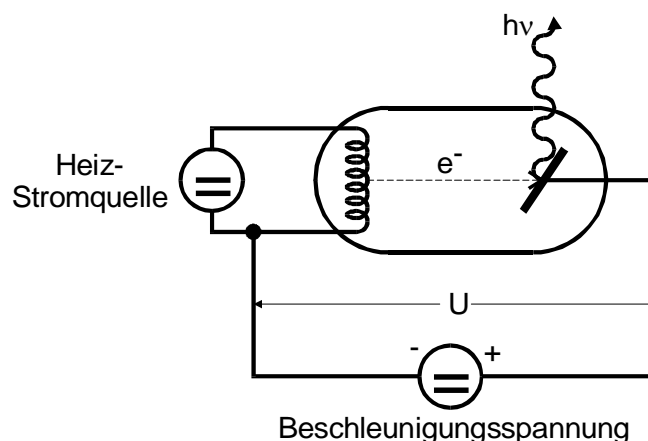


Abb. 1: Röntgenröhre

gegenüber steht die Anode, die durch eine positive Spannung von mehreren kV die Elektronen beschleunigt, so dass sie mit einer hohen Geschwindigkeit auf die Anode aufprallen, an der dann Röntgenstrahlung entsteht.

Die Abhängigkeit der Intensität von der Energie der Röntgenquanten bezeichnet man als Spektrum der Strahlung. Es setzt sich zusammen 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 bestimmten Energie  $E_{\max}$  ab, welche gleich der kinetischen Energie  $E_{\text{kin}}$  der beschleunigten Elektronen ist:

$$E_{\max} = h \nu_{\max} = e_0 U \quad (1)$$

( $h$ : Plancksche Konstante,  $\nu$ : Frequenz der Strahlung,  $e_0$ : Elementarladung)

Dabei ist  $E_{\text{kin}}$  durch die Beschleunigungsspannung  $U$  festgelegt.

Die Lage der Linien im charakteristischen Spektrum kann aus der Schrödinger-Gleichung für das emittierende Atom errechnen. Für die Lösung dieser Gleichung kann man die vereinfachende Annahme machen, dass alle nicht emittierenden Elektronen „nur“ die Kernladung  $z$  abschwächen und das emittierende Elektron sich damit in einem abgeschwächten Coulomb-Feld der Ladung  $z_{\text{eff}}$  befindet. Die Energieeigenwerte ergeben sich damit näherungsweise zu

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

( $z_{\text{eff}}$ : effektive Kernladungszahl,  $n$ : Hauptquantenzahl)

mit der Rydbergenergie

$$R_{\infty} = \frac{e_0^4 m_e}{8 \varepsilon_0^2 h^2} \approx 13,6 \text{ eV} . \quad (3)$$

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

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

frei. Mit Hilfe von (4) kann man nun die Lage der Linien im charakteristischen Spektrum errechnen, wenn man der Reihe nach für die Hauptquantenzahlen  $n$  und  $m$  alle natürlichen

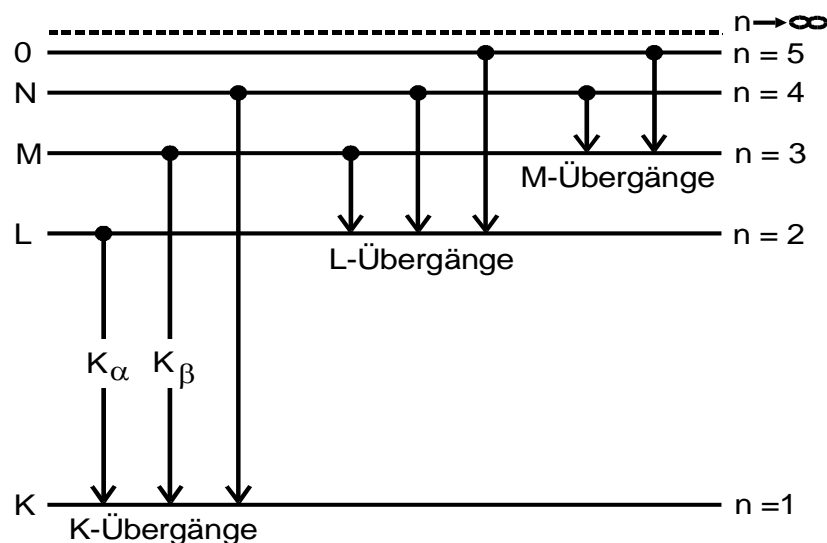


Abb. 2: Mögliche Übergänge im Röntgenspektrum

Zahlen mit  $m > n$  einsetzt. Die innerste Schale mit  $n=1$  heißt K-Schale, die höheren Schalen werden dem Alphabet folgend mit L, M usw. bezeichnet. Übergänge aus höheren Schalen heißen K-Linien, Übergänge auf das L-Niveau entsprechend L-Linien usw.

Die angenäherte Gleichung (2) kann durch zwei Modifikationen bedeutend verbessert werden. Zum einen indem man relativistische Effekte berücksichtigt, zum anderen den Einfluss der Drehimpulse des emittierenden Hüllenelektrons. Als Ergebnis erhält man die Sommerfeldsche Feinstrukturformel:

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

Hierin bedeuten  $\alpha$  die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante mit

$$\alpha = \frac{e_0^2}{2hc\epsilon_0} \quad (6)$$

( $c$ : Lichtgeschwindigkeit,  $\epsilon_0$ : Dielektrizitätskonstante)

und  $j$  die so genannte Spin-Bahn-Kopplung:  $j = l + s$ , mit der Bahndrehimpulszahl  $l$  und der Spinquantenzahl  $s$ , die die Werte  $+1/2$  oder  $-1/2$  annehmen kann. In (5) sind außerdem zwei verschiedene effektive Kernladungen eingeführt worden, die wie folgt definiert sind:

$$z_{eff,1} = z - \sigma \quad (7)$$

und

$$z_{eff,2} = z - s. \quad (8)$$

Die Größe  $\sigma$  wird wesentlich die Hüllenelektronen, deren Ladungsverteilungsmaximum innerhalb der  $n$ -ten Schale liegt, bestimmt. Da  $\sigma$  aber auch von den äußeren Elektronen beeinflusst wird, wird  $\sigma$  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 daher als Konstante der inneren Abschirmung bezeichnet. Da beide Abschirmungszahlen von der Hauptquantenzahl und der Bahndrehimpulszahl abhängen, werden sie mit den Indices  $n$  und  $l$  versehen.

$$E_{n,j} = -R_{\infty} \left[ (z - \sigma_{n,l})^2 \frac{1}{n^2} + \alpha^2 (z - s_{n,l})^4 \frac{1}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right] \quad (9)$$

Da es zu jeder Hauptquantenzahl  $n$  mehrere  $l$ - und  $j$ -Werte gibt, folgt aus (9) eine Aufspaltung der Energieniveaus in mehrere Unterniveaus, die man als Feinstruktur-Aufspaltung bezeichnet. Die Unterniveaus werden üblicherweise mit römischen Zahlen bezeichnet.

Für einen Übergang zwischen den beiden Energieniveaus mit den Quantenzahlen  $n', l', j'$  und  $n, l, j$  erhält man aus (9):

$$E = R_{\infty} \left[ \frac{(z - \sigma_{n,l})^2}{n^2} - \frac{(z - \sigma_{n',l'})^2}{n'^2} + \alpha^2 \left( \frac{(z - s_{n,l})^4}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) - \frac{(z - s_{n',l'})^4}{n'^3} \left( \frac{1}{j' + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n'} \right) \right) \right] \quad (10)$$

Mit (10) könnte man die Abschirmungszahlen für verschiedene Atome berechnen. Allerdings hängen die Energiewerte der Emissionslinien von 4 verschiedenen Abschirmungszahlen ab. Deshalb wird im vorliegenden Versuch zur Bestimmung von Abschirmungszahlen nicht das

Emissionsspektrum, sondern das Absorptionsspektrum benutzt, das im Folgenden beschrieben werden soll.

Beim Durchgang von Röntgenstrahlen durch Materie tritt eine energie- und materialabhängige Schwächung der Strahlintensität auf. Sie wird durch Absorption der Röntgenquanten hervorgerufen.

Der mikroskopische Effekt, 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 möglich ist, muss die Quantenenergie  $h\nu$  größer als die Bindungsenergie  $E_B$  des Elektrons. Die überschüssige Energie erhält das Elektron in Form von kinetischer Energie, so dass gilt:

$$h\nu = E_B + E_{kin} \quad (11)$$

Im Falle der Ionisation der n-ten Schale kann man näherungsweise sagen, dass das Quant die Energie  $E(n) - E(\infty)$  haben muss. Für die K-Schale ergibt sich dann gemäß (9):

$$h\nu_{K,abs} = E_{1,\frac{1}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left[ (z - \sigma_{1,0})^2 + \alpha^2 (z - s_{1,0})^4 \frac{1}{4} \right] \quad (12)$$

Da sich innerhalb der K-Schale kaum Elektronen aufhalten, verschwindet die Konstante der inneren Abschirmung  $s_{1,0}$  und man kann die Abschirmungszahl  $\sigma_{1,0}$  über eine Energiemessung bestimmen.

Die drei L-Absorptionsenergien errechnen sich nach (9) zu

$$h\nu_{L,abs,I} = E_{2,0,\frac{1}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left[ \frac{(z - \sigma_{2,0})^2}{8} + \alpha^2 \frac{(z - s_{2,0})^4}{8} \frac{5}{8} \right] \quad (13)$$

$$h\nu_{L,abs,II} = E_{2,1,\frac{1}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left[ \frac{(z - \sigma_{2,1})^2}{8} + \alpha^2 \frac{(z - s_{2,1})^4}{8} \frac{5}{8} \right] \quad (14)$$

$$h\nu_{L,abs,III} = E_{2,1,\frac{3}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left[ \frac{(z - \sigma_{2,1})^2}{8} + \alpha^2 \frac{(z - s_{2,1})^4}{8} \frac{1}{8} \right] \quad (15)$$

Bildet man die Differenz von (14) und (15), erhält man

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

woraus sich die Abschirmungszahl  $s_{2,1}$  errechnen lässt. Untersucht man Atome mit großem  $z$  ( $z > 70$ ) müssen auch Terme der Ordnung  $\alpha^4 z^6$  berücksichtigt werden. Dann gilt

$$(z - s_{2,1})^2 = \left( \frac{4}{\alpha} \sqrt{\frac{\Delta E}{R_{\infty}}} - \frac{5\Delta E}{R_{\infty}} \right) \left( 1 + \frac{19}{32} \alpha^2 \frac{\Delta E}{R_{\infty}} \right) \quad (17)$$

( $\Delta E = h\nu_{L,abs,III} - h\nu_{L,abs,II}$ )

Schickt man nun Röntgenstrahlen durch Materie und misst die Intensität der durchgehenden Strahlung in Abhängigkeit von der Energie, erhält man eine Kurve ähnlich Abb. 3:

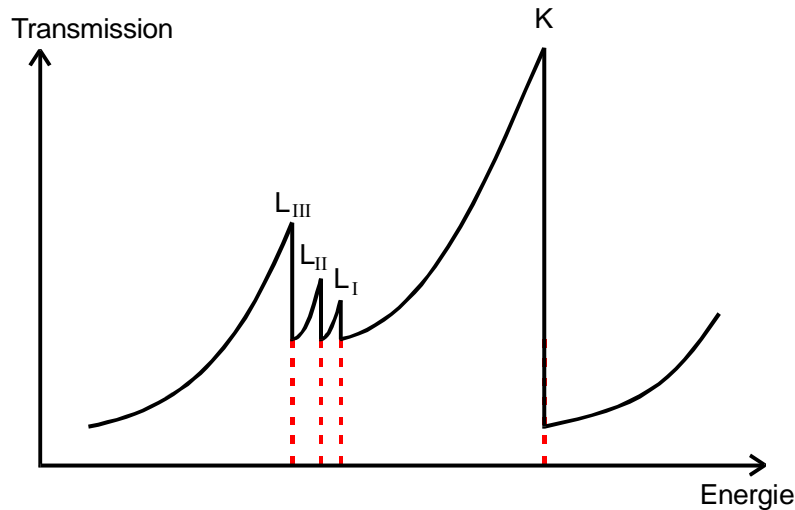


Abb. 3: typisches Röntgenabsorptionsspektrum

Die monoton steigende Kurve wird unterbrochen, wenn die Energie der eingestrahnten Quanten ausreicht, ein Elektron aus der Schale des Absorberatoms zu entfernen. An solchen Stellen ändert sich die Transmission sprunghaft. Die Kurve besitzt dort eine Unstetigkeitsstelle, welche man als Absorptionskante bezeichnet. Die Lage dieser Kante 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 dem Kristallgitter in alle Raumrichtungen gestreut. Konstruktive Interferenz tritt dann auf, wenn der Gangunterschied benachbarter Strahlen ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge  $\lambda$  ist. Diese Bedingung ist nur erfüllt, wenn der Röntgenstrahl unter ganz bestimmten Winkeln  $\theta$  zur Netzebenenschar einfällt. Diese Winkel sind gegeben durch die Braggsche Reflexionsbedingung:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (18)$$

(d: Netzebenenabstand)

Nutzt man aus, dass

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} \quad (19)$$

ist, erhält man aus (18)

$$E = \frac{h c n}{2d \sin \theta} \quad (20)$$

### 3. Durchführung

Die Messung der Röntgenspektren wird mit der in Abb. 4 skizzierten Apparatur vorgenommen. Sie enthält einen Hochspannungsgenerator, der Spannung bis 24 kV erzeugen kann. Die Röntgen-Röhre besitzt eine Kupfer-Anode. Ihre Strahlung fällt durch eine Blende auf einen schwenkbaren Lithium-Fluorid-Einkristall, dessen Netzebenen parallel zur Oberfläche liegen und einen Abstand von 0,201 nm besitzen. Im einstellbaren Winkelbereich der Apparatur tritt nur die Interferenzordnung  $n = 1$  auf. An das Detektor-Zählrohr ist ein Verstärker angeschlossen, der die von Zählrohr gelieferten Impulse auf eine solche Höhe

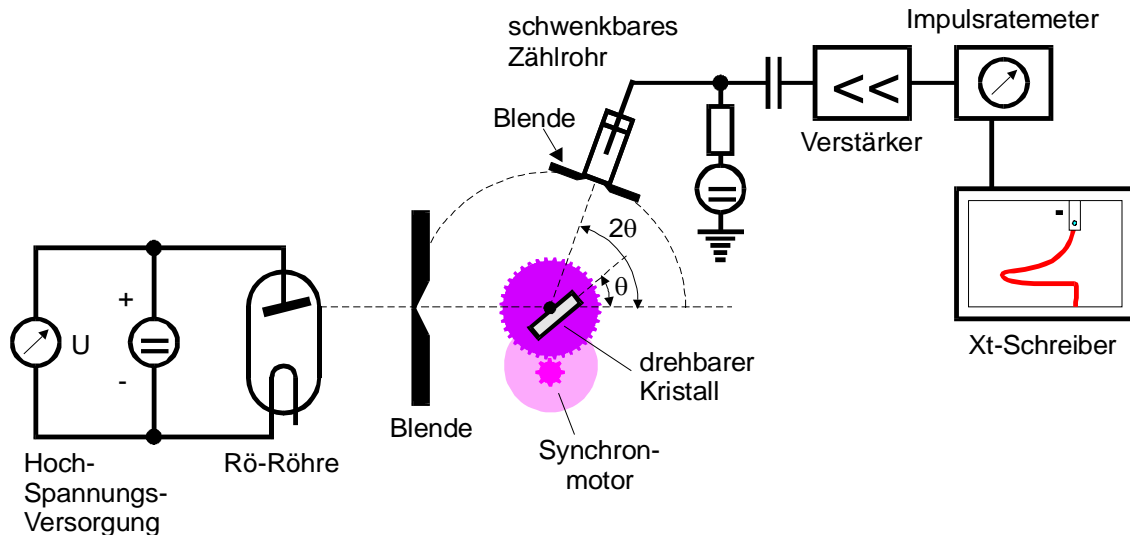


Abb. 4: Versuchsanordnung

bringt, dass sie vom Impulsratemeter verarbeitet werden können. Dieses Gerät gibt ein Gleichspannungssignal ab, dessen Betrag proportional zur Zahl der pro Zeiteinheit einfallenden Röntgenquanten ist. Der Xt-Schreiber wird über den den Kristall drehenden Synchronmotor gesteuert, so dass er die Intensität in Abhängigkeit vom Winkel (und damit nach (20) von der Energie) darstellen kann.

## 4. Auswertung

Für die Rydbergenergie wurde immer der modifizierte Werte  $R_{\infty} \cdot M / M + m_0$  eingesetzt, mit der Masse  $M$  des betrachteten Atoms und der Masse  $m_0$  des Elektrons.

### 4.1 Bestimmung der Abschirmungszahl $\sigma_{1,0}$

Tabelle 1 zeigt die festgestellten Winkel  $\theta$ , bei denen die K-Absorptionskanten für die verschiedenen Materialien abgelesen wurden. Daraus lässt sich mit (20) die Absorptionsenergie bestimmen. Der Fehler der Energie berechnet sich nach (21).

$$\sigma_E = E \cdot \left| \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \right| \cdot \sigma_{\theta} \quad (21)$$

Nach (12) berechnet sich  $\sigma_{1,0}$  dann nach

$$\sigma_{1,0} = z - \sqrt{\frac{E_{K,abs}}{R_{\infty}} - \frac{\alpha^2 z^4}{4}} \quad (22)$$

denn innerhalb der K-Schale halten sich kaum Elektronen auf, so dass  $s_{1,0} = 0$ . Der Fehler von  $\sigma_{1,0}$  berechnet sich dann nach

$$\sigma_{\sigma_{1,0}} = \frac{\sigma_{E_{K,abs}}}{2R_{\infty}(z - \sigma_{1,0})} \quad (23)$$

Alle berechneten Werte sind in Tabelle 1 zu finden. Für den Winkel wurde ein Fehler von  $\pm 0,1^\circ$  angenommen.

	$\theta [^\circ]$	E [eV]	$\sigma_E$	z	m [u]	$\sigma_{1,0}$	$\sigma_\alpha$
Germanium	16,6	10805	126	32	72,59	4,09	0,17
Rubidium	11,8	15147	254	37	85,47	4,03	0,28
Zirkonium	10	17808	353	40	91,22	4,32	0,36

Tabelle 1

#### 4.2 Bestimmung der Abschirmungszahl $s_{2,1}$ von Platin

Gleichung (17) lässt sich umformen zu

$$s_{2,1} = z - \sqrt{\left(\frac{4}{\alpha} \sqrt{\frac{\Delta E}{R_\infty}} - 5 \frac{\Delta E}{R_\infty}\right) \left(1 + \frac{19}{32} \alpha^2 \frac{\Delta E}{R_\infty}\right)}. \quad (24)$$

Der Fehler von  $\Delta E$  berechnet sich aus der Summe der Fehler der Einzelenergien nach (21). Der Fehler von  $s_{2,1}$  lässt sich dann mit

$$s_{2,1} = \frac{1}{2(z - s_{2,1})} \left[ \left( \frac{8}{\alpha} \sqrt{\frac{R_\infty}{\Delta E}} \frac{1}{R_\infty} - \frac{5}{R_\infty} \right) \left( 1 + \frac{19}{32} \alpha^2 \frac{\Delta E}{R_\infty} \right) + \left( \frac{4}{\alpha} \sqrt{\frac{\Delta E}{R_\infty}} - 5 \frac{\Delta E}{R_\infty} \right) \frac{19}{32} \frac{\alpha^2}{R_\infty} \right] \cdot \sigma_{2,1} \quad (25)$$

berechnen. Für den abgelesenen Winkel wurde wieder ein Fehler von  $\pm 0,1^\circ$  angenommen. Tabelle 2 zeigt alle aufgenommenen und daraus berechneten Werte.

Kante	$\theta [^\circ]$	Energie [eV]	$\sigma_E$	z	m [u]
L II	13,7	13056,81	93,48	78	195,1
L III	15,85	11322,32	69,60	78	195,1

Tabelle 2

Daraus folgt die Abschirmungszahl  $s_{2,1}$  mit (24) und (25):

$$s_{2,1} = 3,38 \pm 0,23.$$

#### 4.3 Bestimmung der Abschirmungszahlen $\sigma_1$ , $\sigma_2$ , $\sigma_3$

Wenn der Drehimpuls vernachlässigt wird, gilt Näherungsweise

$$\sigma_1 = z - \sqrt{\frac{E_{K_\beta}}{R_\infty}} \quad \text{und} \quad (26)$$

$$\sigma_2 = z - 2 \sqrt{\frac{E_{K_\alpha} - E_{K_\beta}}{R_\infty}} \quad (27)$$

wenn man annimmt, dass  $E_{K_\beta} \approx E_{K,abs}$ .

Die Fehler berechnen sich dann gemäß

$$\sigma_{\sigma_1} = \frac{\sigma_{E_{K_\beta}}}{2(z - \sigma_1)R_\infty} \quad \text{und} \quad (28)$$

$$\sigma_{\sigma_2} = \frac{\sigma_{E_{K\beta}} + \sigma_{E_{K\alpha}}}{(z - \sigma_1)R_{\infty}}. \quad (29)$$

	Emissionslinie	$\theta$ [°]	Energie [eV]	$\sigma_E$	z	m [u]
Kupfer	$K_{\beta}$	20,52	8822	41	29	195,1
Kupfer	$K_{\alpha}$	22,88	7954	33	29	195,1

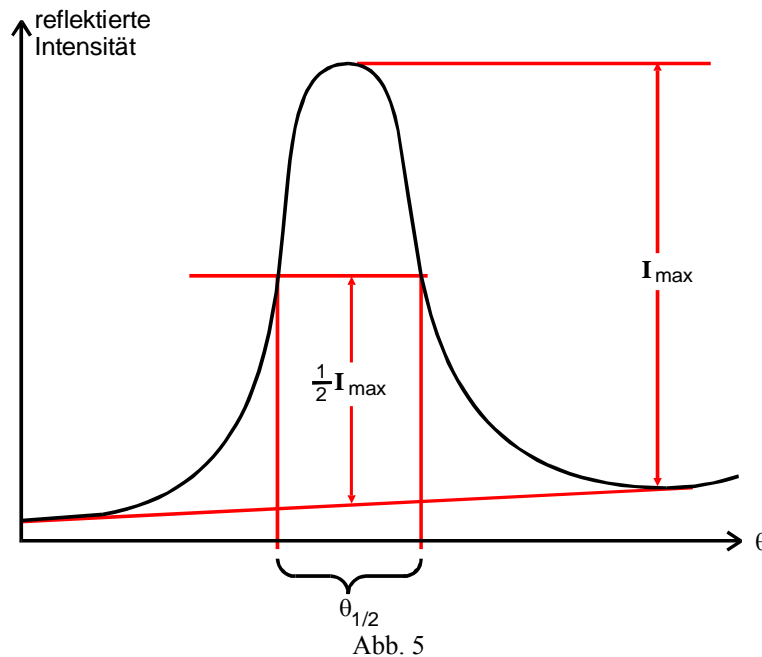
Tabelle 3

Mit den Werten der Tabelle 3 errechnen sich  $\sigma_1$  und  $\sigma_2$  zu

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= 3,55 \pm 0,06 \\ \sigma_2 &= 13,03 \pm 0,34. \end{aligned}$$

#### 4.4 Auflösungsvermögen der Apparatur

Aus der  $K_{\alpha}$ -Emissionslinie kann die Winkel und die Energieauflösung ermittelt werden. Zu diesem Zwecke liest man bei der halben Maximalintensität der Emissionslinie die Winkelbreite nach Abb. 5 ab. Daraus kann gemäß (20) die Energieauflösung berechnet werden.



Der Wert für  $\theta_{1/2}$  ergibt sich zu  $0,68^\circ$  mit  $\theta_1 = 23,13^\circ$  und  $\theta_2 = 22,45^\circ$ . Damit folgt für die Energieauflösung nach 20:

$$E = 225,4 \text{ eV}$$

Durch eine Extrapolation auf den Grenzwinkel  $\theta_{Gr}$ , bei dem die Intensität verschwindet, kann die Maximalenergie  $E_{\max}$  bestimmt werden. Da der Messbereich etwas zu klein gewählt wurde, kann der Grenzwinkel nur ungefähr angegeben werden. Mit  $\theta_{Gr} = 8^\circ$  ergibt sich für die maximale Energie

$$E_{\max} = 22,2 \text{ keV}$$

bei einer Beschleunigungsenergie der Röntgenröhre von ca.  $24 \text{ keV}$ .