

V602

Röntgenemission und -absorption

Yanick Sebastian Kind
yanick.kind@udo.edu

Till Willershausen
till.willershausen@udo.edu

Abgabe: 03.05.2021

TU Dortmund – Fakultät Physik

Inhaltsverzeichnis

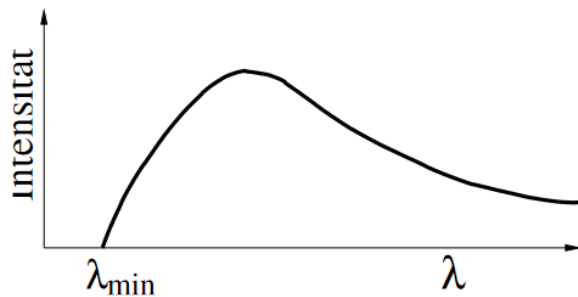
1	Theorie	3
2	Durchführung	7
3	Auswertung	7
3.1	Vorbereitungsaufgabe	8
3.2	Überprüfung der Bragg-Bedingung	8
3.3	Analyse eines Emissionsspektrums der Kupfer-Röntgenröhre	9
3.4	Bestimmung der Absorptionsenergien und -konstanten von verschiedenen Materialien	10
3.4.1	Zink	11
3.4.2	Gallium	11
3.4.3	Brom	12
3.4.4	Rubidium	13
3.4.5	Strontium	14
3.4.6	Zirkonium	15
3.5	Berechnung der Rydbergenergie	16
4	Diskussion	17
	Literatur	18

1 Theorie

In dem Versuch sollen das Emissionsspektrum einer Cu-Röntgenröhre und verschiedene Absorptionsspektren aufgenommen und analysiert werden.

Um Röntgenstrahlung zu erzeugen werden in einer evakuierten Röhre aus einer Glühkathode Elektronen emittiert und auf eine Anode hin beschleunigt. Die Röntgenstrahlung entsteht wenn die Elektronen auf die Anode treffen. Dabei besteht die entstandene Röntgenstrahlung sowohl aus dem kontinuierlichen Bremsspektrum, als auch aus der charakteristischen Röntgenstrahlung des Anodenmaterials. Bei der Abbremsung eines Elektrons im Coulombfeld des Atomkerns wird ein Photon emittiert dessen Energie dem Energieverlust des abgebremsten Elektrons entspricht. Da das Elektron sowohl eine Teilenergie als auch seine Gesamtenergie abgeben kann, handelt es sich beim Bremsspektrum um ein kontinuierliches Spektrum (Abbildung 1). Die minimale Wellenlänge

Abbildung 1: Typisches Bremsspektrum [1]



$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{e_0 U} \quad (1)$$

wird bei der vollständigen Abbremsung des Elektrons erreicht. Dabei beschreibt h das Plancksche Wirkungsquant, c die Lichtgeschwindigkeit und $e_0 U$ die gesamte kinetische Energie des Elektrons. Die charakteristische Röntgenstrahlung wird durch das Anodenmaterial bestimmt. Diese entsteht bei der Ionisierung des Atoms, wodurch ein Elektron aus einer äußeren Schale in die innere Schale zurückfällt. Dabei wird ein Röntgenquant mit der Energie der Energiedifferenz $h\nu = E_m - E_n$ der beiden Energieniveaus emittiert. Es entstehen scharfe Linien welche mit $K_\alpha, K_\beta, L_\alpha, \dots$ bezeichnet werden. Dabei sind die Buchstaben K, L, M, ... die Schalen des Atoms, auf der die Übergänge enden. Der griechische Buchstabe gibt an aus welcher Schale das Elektron stammt, welches die innere Schale auffüllt. Bei einem Mehrelektronenatom wird die Kernladung durch die Hüllenelektronen und die Wechselwirkung der Elektronen abgeschirmt. Durch die Verringerung der Coulomb Anziehung auf das äußere Elektron, ergibt sich

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

für die Bindungsenergie E_n eines Elektrons auf der n -ten Schale. Hierbei ist $R_\infty = 13,6 \text{ eV}$ die Rydbergenergie und $z_{\text{eff}} = z - \sigma$ die effektive Kernladung mit σ als Abschirmkonstante. Die Abschirmkonstante unterscheidet sich für jedes Elektron und ist empirisch bestimmbar. Die Elektronen besitzen neben der Hauptquantenzahl noch weitere Quantenzahlen resultierend aus dem Elektronenspin und dem Bahndrehimpuls, so dass eine Feinstruktur ersichtlich wird. Die Energien dieser Feinstruktur können mithilfe der Sommerfeldschen Feinstrukturformel

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

ermittelt werden. Wobei α die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante, n die Hauptquantenzahl und j der Gesamtdrehimpuls des betrachteten Elektrons ist.

Charakteristische Röntgenstrahlung tritt auch bei Absorption von Röntgenstrahlung durch einen Absorber auf. Bei Energien unter 1 MeV treten der Comptoneffekt so wie der Photoeffekt dominant auf. Wie in Abbildung 2 zu sehen, nimmt der Absorptionskoeffizient mit zunehmender Energie ab und wenn die Photonenenergie gerade größer als die Bindungsenergie eines Elektrons aus der nächsten Schale ist, steigt er sprunghaft an. Die Absorptionskanten haben nahezu die selben Energien wie die Bindungsenergie des Elektrons $h\nu_{\text{abs}} = E_n - E_\infty$. Die zugehörige Energie wird nach der zugehörigen Schale aus denen das Elektron stammt als K-, L-, M-, ... Absorptionskante bezeichnet. Mit Hilfe der Sommerfeldschen Feinstrukturformel kann die Abschirmkonstante mit

$$\sigma_K = Z - \sqrt{\frac{E_K}{R_\infty} - \frac{\alpha^2 Z^4}{4}} \quad (4)$$

bestimmt werden. Der zweite Term unter der Wurzel berücksichtigt dabei die Feinstrukturaufspaltung der K-Schale. Zur Bestimmung der Abschirmkonstanten σ_1 , σ_2 und σ_3 für Kupfer aus den Emissionsenergien der Kupfer K_α und K_β -Linien, können unter Vernachlässigung des Drehimpulsbeitrages die Abschirmkonstanten mit

$$\sigma_1 = z - \sqrt{\frac{E_{K,\text{abs}}}{R_\infty}} \quad (5)$$

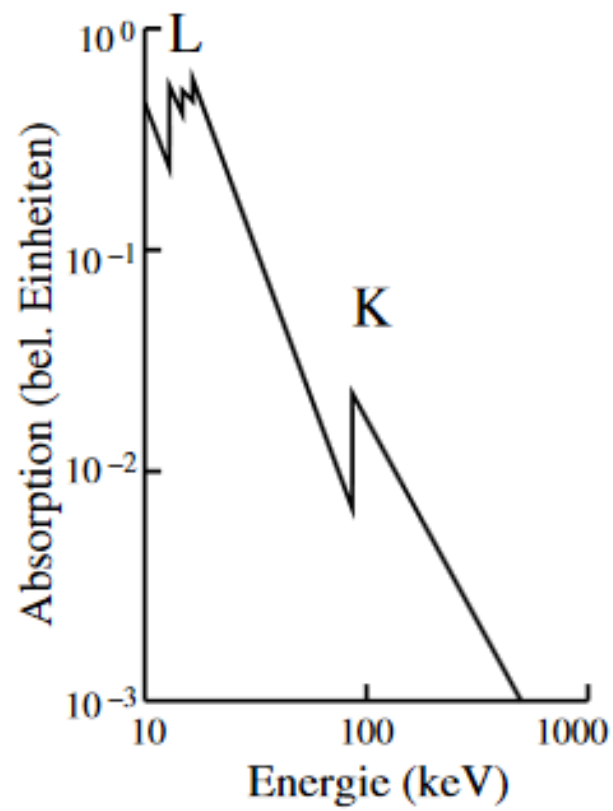
$$\sigma_2 = z - m \sqrt{\frac{1}{n^2} (z - \sigma_1)^2 - \frac{E_{K,\alpha}}{R_\infty}} \quad (6)$$

$$\sigma_3 = z - l \sqrt{\frac{1}{n^2} (z - \sigma_1)^2 - \frac{E_{K,\beta}}{R_\infty}} \quad (7)$$

berechnet werden. Dabei ist $n = 1$, $m = 2$ und $l = 3$.

Durch Benutzung der Bragg'schen Reflexion kann die Energie bzw. die Wellenlänge λ der Röntgenstrahlung experimentell analysiert werden. Hierbei fällt Röntgenlicht auf ein dreidimensionales Gitter, wobei die Photonen an jedem Atom des Gitters gebeugt

Abbildung 2: Absorptionsspektrum von Röntgenstrahlung [1]



werden. Die Strahlen interferieren, während es unter dem Glanzwinkel θ zu konstruktiver Interferenz kommt. So kann mit Hilfe der Bragg'schen Bedingung

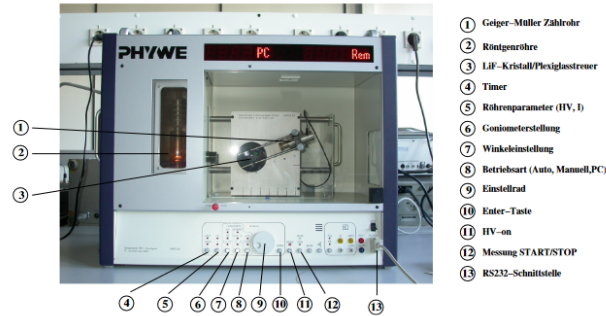
$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (8)$$

und einer bekannten Gitterkonstante d ($d_{\text{LiF}} = 201,4 \text{ pm}$) die Wellenlänge bestimmt werden. Dabei ist n die Beugungsordnung des Maximums.

2 Durchführung

Für den experimentellen Aufbau wird im wesentlichen eine Kupfer-Röntgenröhre, ein LiF-Kristall und ein Geiger-Müller-Zählrohr benötigt. In dem Röntgengerät aus Abbildung 3 sind die Teile bereits verbaut und können mit einem Rechner oder manuell bedient werden. An der Röntgenröhre wird eine Beschleunigungsspannung von $U_B = 35 \text{ kV}$ und

Abbildung 3: Versuchsaufbau zur Messung von Röntgenspektren [1]



ein Emissionsstrom von $I = 1 \text{ mA}$ eingestellt. Vor der Messung wird noch einmal überprüft, ob die 1 mm Blende und der LiF-Kristall in den Halterungen stecken und korrekt ausgerichtet sind. Für die Absorptionmessungen werden Blenden mit verschiedenen Absorbern vor das Geiger-Müller Zählrohr angebracht.

Um die Bragg Bedingung zu überprüfen, wird der LiF-Kristall auf einen festen Kristallwinkel von $\theta = 14^\circ$ gestellt. Das Geiger-Müller Zählrohr misst in einem Winkelbereich von $\alpha_{\text{GM}} = 26^\circ$ bis $\alpha_{\text{GM}} = 30^\circ$ mit einem Winkelzuwachs von $\Delta\alpha = 0,2^\circ$. Als Integrationszeit pro Winkel wird $\Delta t = 5 \text{ s}$ genutzt.

Um das Emissionsspektrum der Cu-Röntgenröhre zu bekommen, wird das Röntgenspektrum im Winkelbereich $4^\circ \leq \theta \leq 26^\circ$ in $0,1^\circ$ -Schritten unter einer Integrationszeit von $\Delta t = 10 \text{ s}$ gemessen. Dadurch ist auch keine zusätzliche Messung des Detailspektrums der K_α und K_β Linien von Kupfer nötig.

In der letzten Messreihe werden verschiedene Absorber zwischen den LiF-Kristall und das Geiger-Müller Zählrohr eingesetzt. Dabei werden Absorber aus Zink, Gallium, Brom, Rubidium und Strontium verwendet. Die Absorptionsspektren werden bei einer Integrationszeit von $t = 20 \text{ s}$ gemessen.

3 Auswertung

Jegliche Fehlerrechnung wurde mit der python-Bibliothek uncertainties [3] absolviert. Trotz dessen sind die Formeln für die Unsicherheiten in den jeweiligen Abschnitten angegeben. Allgemeine Rechnungen wurden mit der python-Bibliothek numpy [4] automatisiert. Die graphischen Unterstützungen wurden mit Hilfe der python-Bibliothek matplotlib [2] erstellt.

3.1 Vorbereitungsaufgabe

In der Tabelle 1 sind die recherchierten Kernladungszahlen Z , die Energien der K-Absorptionskanten E_K und die daraus berechneten Winkel θ und die Abschirmkonstanten σ_K für die jeweiligen Materialien gegeben.

Tabelle 1: Literatur- und berechnete Werte für die Vorbereitungsaufgabe

	Z	E_K / keV	$\theta / ^\circ$	$\sigma_K /$
Zn	30	9,65	18,6	3,566
Ga	31	10,37	17,3	3,61
Br	35	13,47	13,2	3,848
Rb	37	15,2	11,7	3,944
Sr	38	16,1	11	3,999
Zr	40	17,99	9,9	4,101
Ge	32	11,1	16,1	3,677

3.2 Überprüfung der Bragg-Bedingung

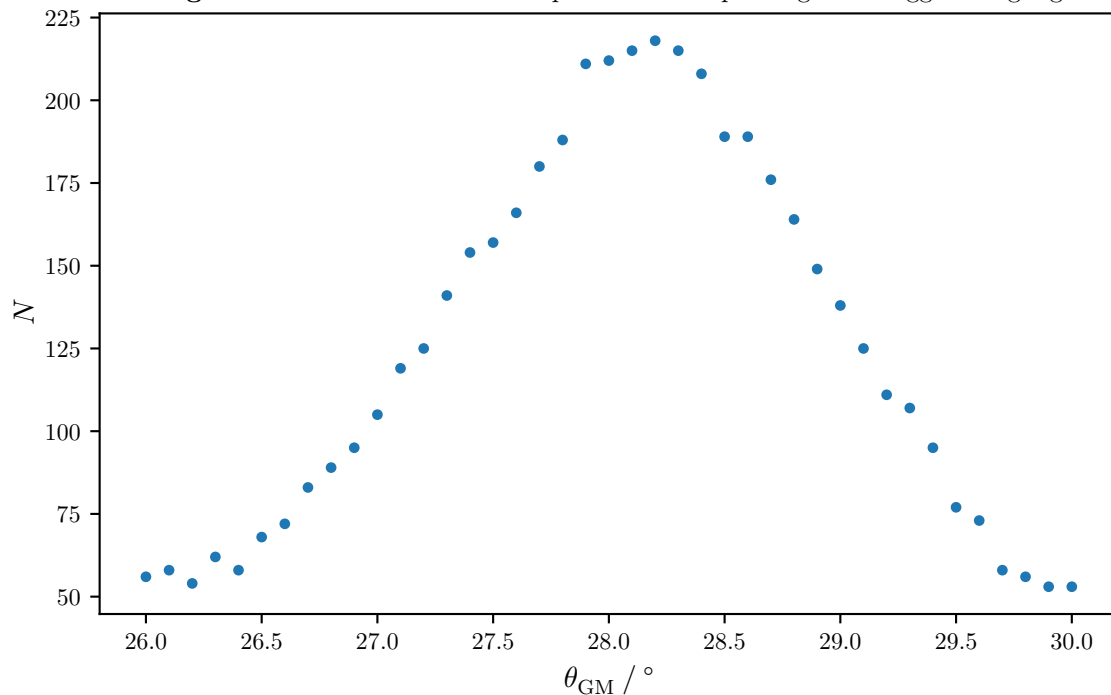
Zunächst muss die Bragg-Bedingung überprüft werden. Die dazu gemessenen Daten sind in der Tabelle 2 aufgetragen. Außerdem sind die Werte in der Abbildung 4 graphisch dargestellt. Das Maximum der Impulse $N_{\text{max}} = 218$ ist bei einem Winkel von $\theta_{\text{max}} = 28,2^\circ$

Tabelle 2: Gemessene Winkel und Impulse zur Überprüfung der Bragg-Bedingung

$\theta / ^\circ$	N	$\theta / ^\circ$	N	$\theta / ^\circ$	N	$\theta / ^\circ$	N
26,0	56	27,0	105	28,0	212	29,0	138
26,1	58	27,1	119	28,1	215	29,1	125
26,2	54	27,2	125	28,2	218	29,2	111
26,3	62	27,3	141	28,3	215	29,3	107
26,4	58	27,4	154	28,4	208	29,4	95
26,5	68	27,5	157	28,5	189	29,5	77
26,6	72	27,6	166	28,6	189	29,6	73
26,7	83	27,7	180	28,7	176	29,7	58
26,8	89	27,8	188	28,8	164	29,8	56
26,9	95	27,9	211	28,9	149	29,9	53
-	-	-	-	-	-	30,0	53

gemessen worden. Dieser Winkel weicht vom Sollwinkel $\theta_{\text{soll}} = 28^\circ$ nur um $0,2^\circ$ ab, so dass die Bragg-Bedingung erfüllt ist.

Abbildung 4: Gemessene Winkel und Impulse zur Überprüfung der Bragg-Bedingung



3.3 Analyse eines Emissionsspektrums der Kupfer-Röntgenröhre

Die K_α Linie befindet sich bei $\theta = 22,5^\circ$, während die K_β bei $\theta = 20,2^\circ$ wiederzufinden ist. Die Halbwertsbreiten betragen

$$\Delta K_\alpha = 0,6^\circ$$

$$\Delta K_\beta = 0,6^\circ .$$

Mit Hilfe der Bragg Bedingung (8) lässt sich die Wellenlänge bestimmen, wonach die Energie bestimmt werden kann. Die Energien ergeben sich zu

$$E_{K_\alpha} = 8,04 \text{ keV}$$

$$E_{K_\beta} = 8,92 \text{ keV}$$

$$\Delta E_{K_\alpha} = 203,41 \text{ eV}$$

$$\Delta E_{K_\beta} = 253,80 \text{ eV} .$$

Das Auflösungsvermögen

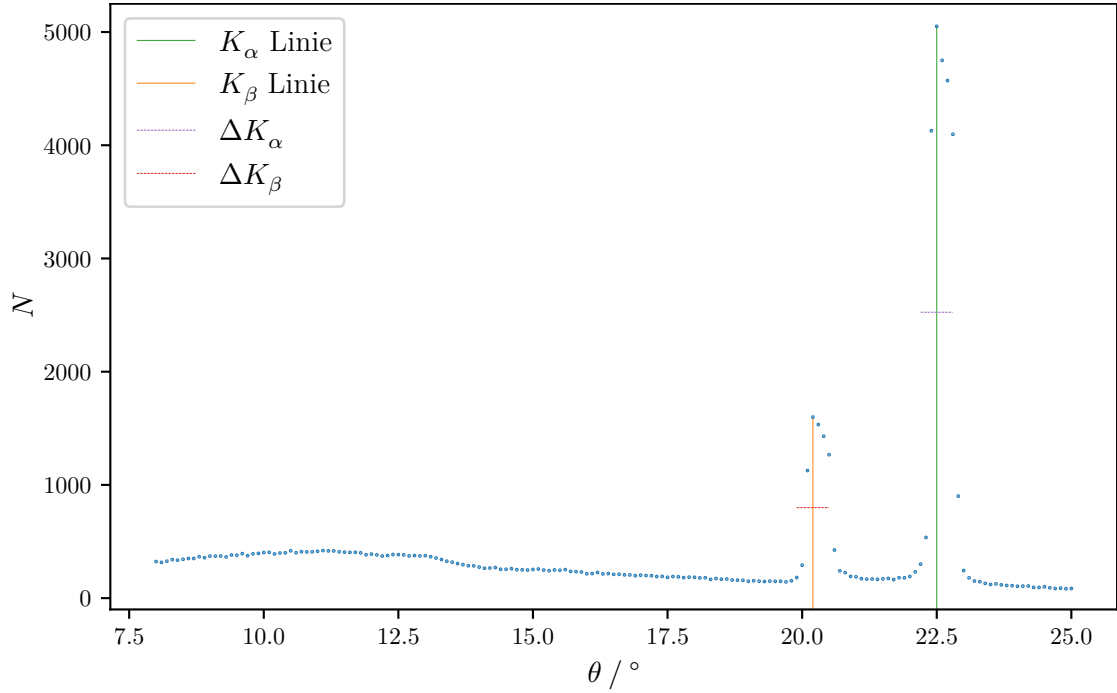
$$A_K = \frac{E_K}{\Delta E_K} \quad (9)$$

kann daraus zu

$$A_{K_\alpha} = 39,55$$

$$A_{K_\beta} = 35,13$$

Abbildung 5: Das Emissionsspektrum der Kupfer-Röntgenröhre



bestimmt werden. Mit Hilfe der Gleichungen (5), (6) und (7) lassen sich die Abschirmkonstanten σ_1 , σ_2 und σ_3 bestimmen. Mit $E_{\text{abs}} = (8987,96 \pm 0,15) \text{ eV}$ [5], der Rydberg Energie R_∞ und der Kernladungszahl $z_{\text{Kupfer}} = 29$ lässt sich

$$\sigma_1 = 3,292 \pm 0,021$$

$$\sigma_2 = 12,30 \pm 0,13$$

$$\sigma_3 = 22,29 \pm 0,74$$

errechnen. Der Fehler der n-ten Abschirmkonstante wird Mit Hilfe der Gauß-Fehlerfortpflanzung durch

$$\Delta\sigma_n = \left| \frac{\partial\sigma_n}{\partial E_{\text{abs}}} \Delta E_{\text{abs}} \right| \quad (10)$$

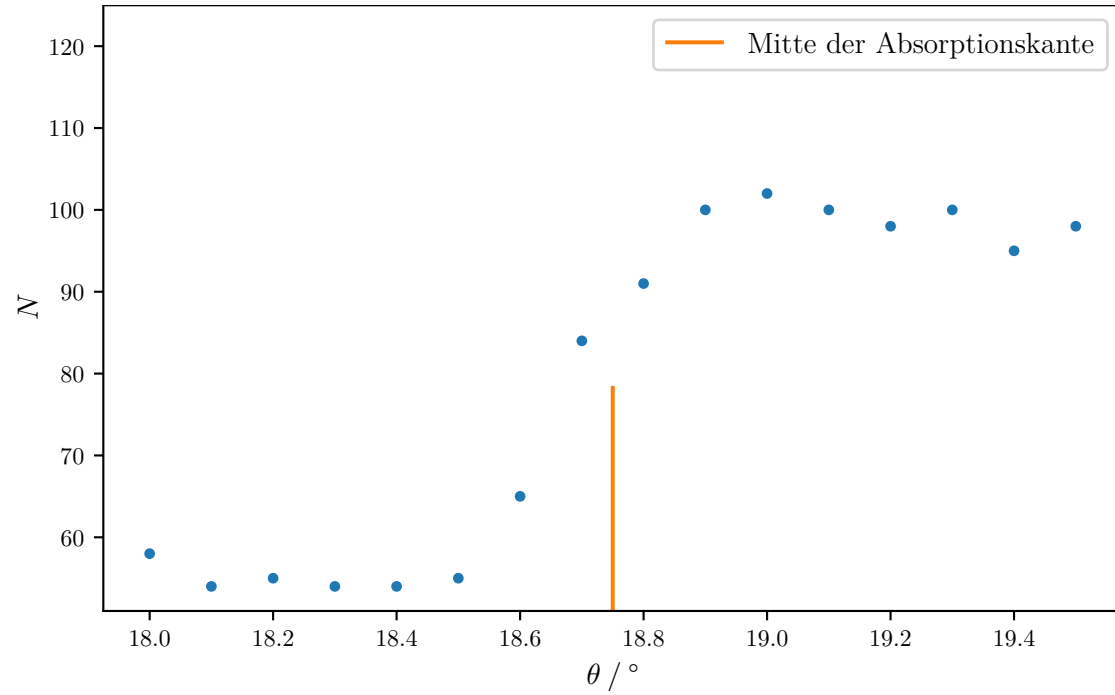
3.4 Bestimmung der Absorptionsenergien und -konstanten von verschiedenen Materialien

Bei der Aufnahme der Absorptionsspektren wurde ein LiF-Kristall, eine Beschleunigungsspannung von 35 kV und ein Strom von 1 mA verwendet. In den jeweiligen Unterabschnitten sind die Intensitäten $I_{\text{imp/s}}$ gegen den Winkel θ aufgetragen.

3.4.1 Zink

Bei der Durchführung mit Zink liegt die Mitte der Absorptionskante ungefähr bei $\theta_{\text{Zn}} \approx 18,75^\circ$. Daraus ergibt sich eine Absorptionsenergie bzw. Abschirmkonstante von

Abbildung 6: Absorptionsspektrum von Zink



$$E_{K,\text{abs Zn}} = 9,58 \text{ keV}$$

$$\sigma_{K_{\text{Zn}}} = 3,668 .$$

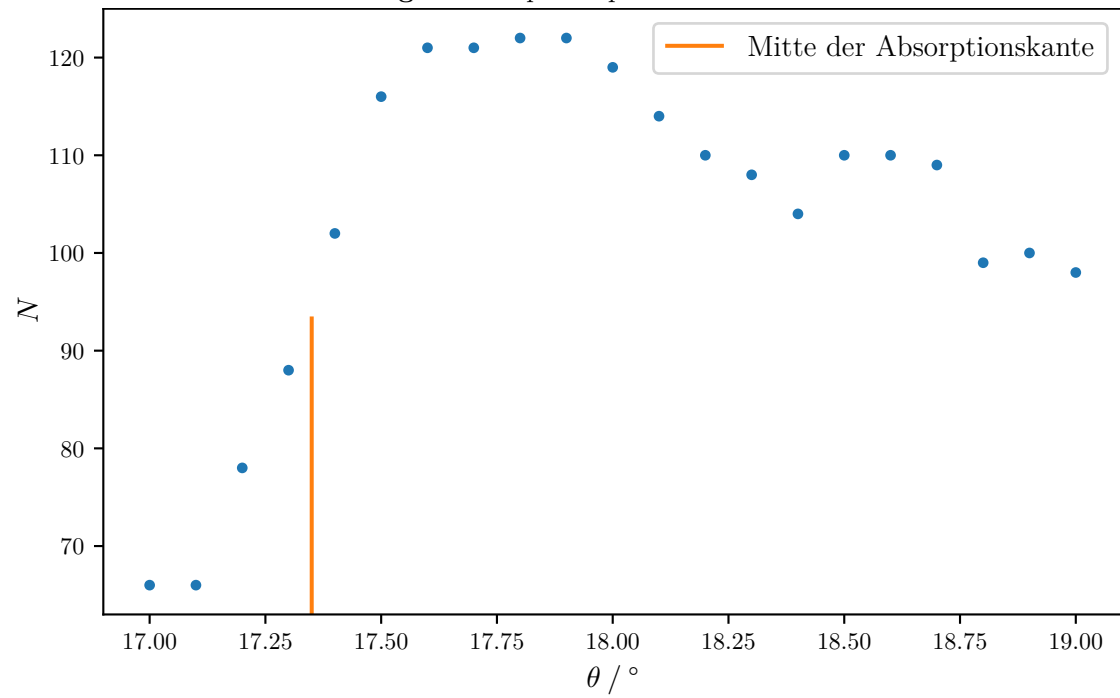
3.4.2 Gallium

Die Mitte der Absorptionskante liegt ungefähr bei $\theta_{\text{Ga}} \approx 17,35^\circ$. Die daraus errechnete Energie bzw. Abschirmkonstante beträgt

$$E_{K,\text{abs Ga}} = 10,32 \text{ keV}$$

$$\sigma_{K_{\text{Ga}}} = 3,673 .$$

Abbildung 7: Absorptionsspektrum von Gallium



3.4.3 Brom

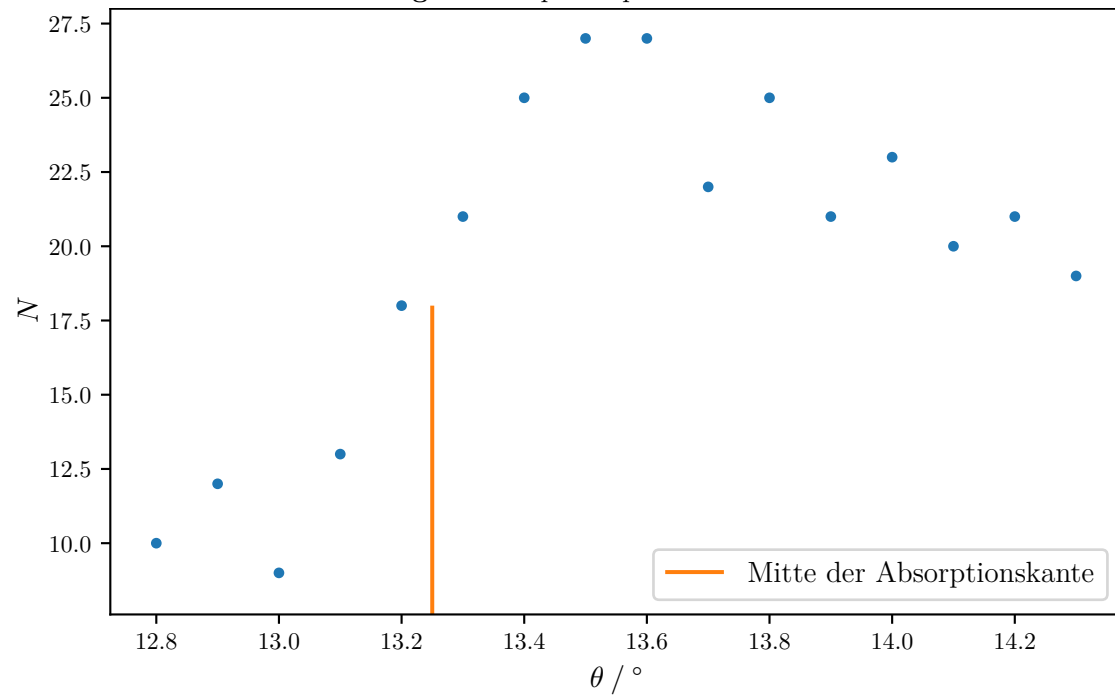
Bei Brom liegt die Kante ungefähr bei $\theta_{\text{Br}} \approx 13,25^\circ$. Somit lässt sich eine Absorptionsenergie bzw. Abschirmkonstante von

$$E_{K,\text{abs Br}} = 13,43 \text{ keV}$$

$$\sigma_{K_{\text{Br}}} = 3,894$$

errechnen.

Abbildung 8: Absorptionsspektrum von Brom



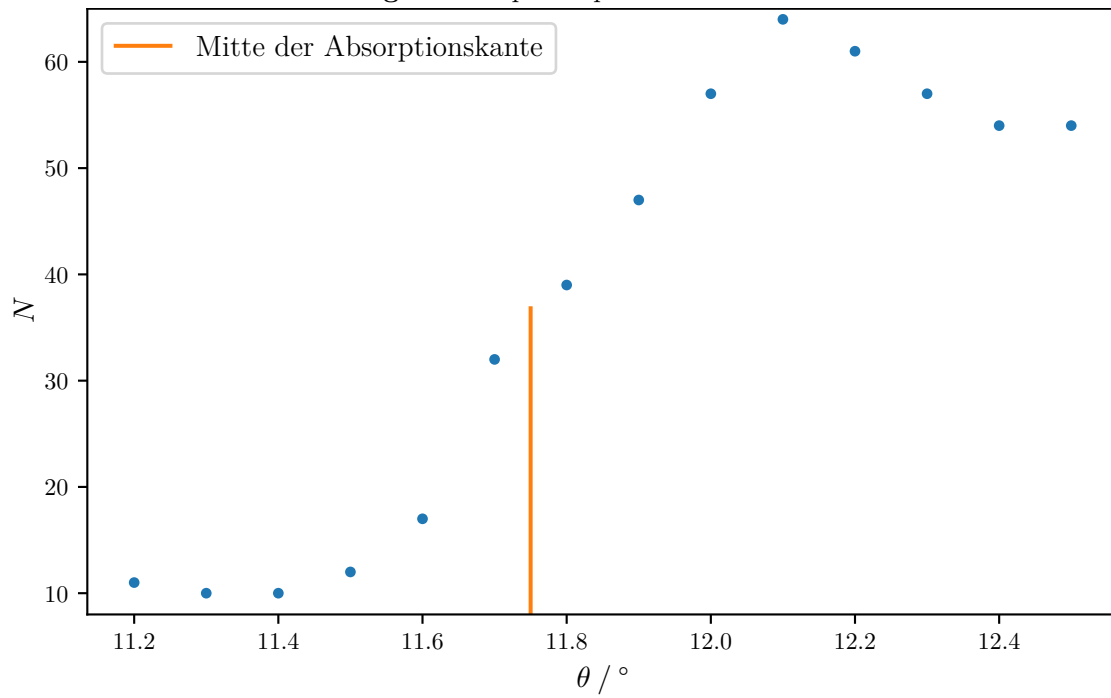
3.4.4 Rubidium

Die Mitte der Absorptionskante von Rubidium liegt ungefähr bei $\theta_{\text{Rb}} \approx 11,75^\circ$. Daraus ergibt sich eine Absorptionsenergie bzw. Abschirmkonstante von

$$E_{K,\text{abs Rb}} = 15,11 \text{ keV}$$

$$\sigma_{K_{\text{Rb}}} = 4,037 .$$

Abbildung 9: Absorptionsspektrum von Rubidium

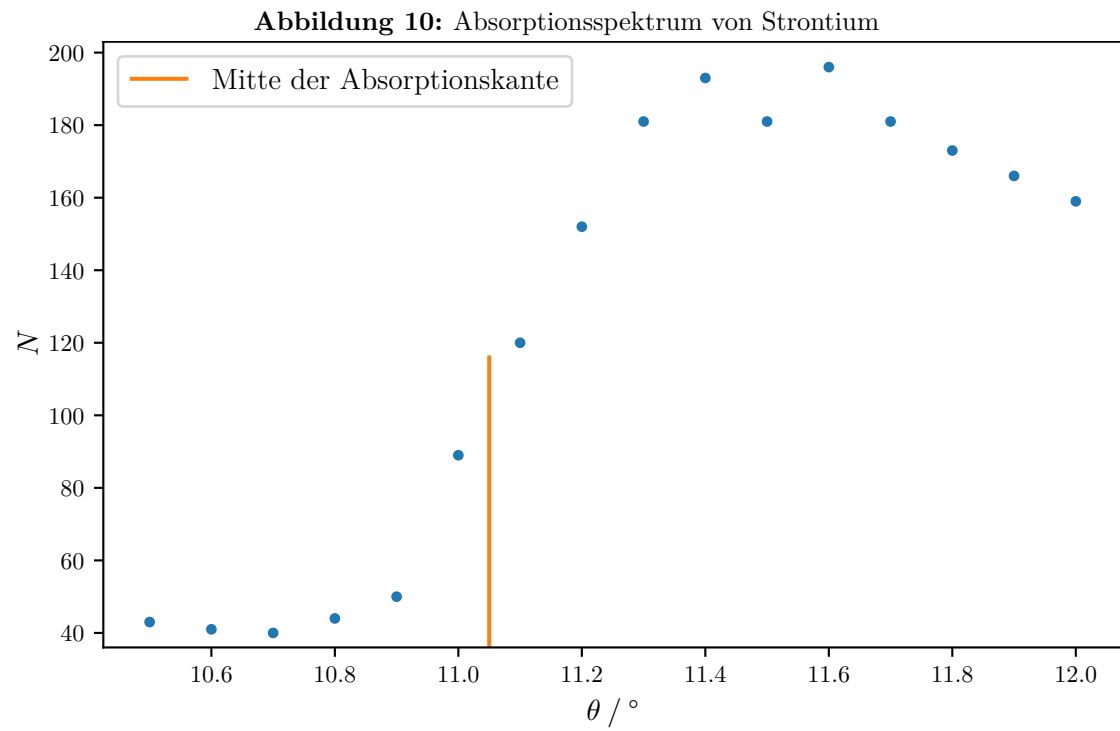


3.4.5 Strontium

Die in der Abbildung 10 hervorgehende Mitte der Absorptionskante liegt ungefähr bei $\theta_{\text{Sr}} \approx 11,05^\circ$. Daraus ergibt sich eine Absorptionsenergie bzw. Abschirmkonstante von

$$E_{K,\text{abs Sr}} = 16,06 \text{ keV}$$

$$\sigma_{K_{\text{Sr}}} = 4,041 \text{ .}$$



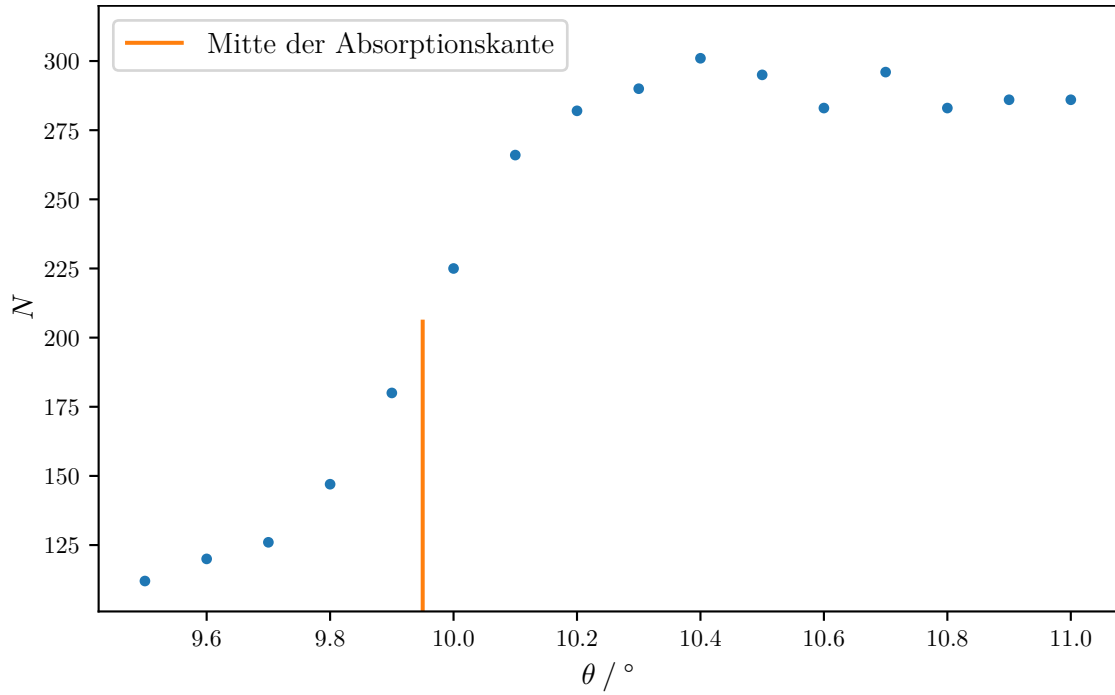
3.4.6 Zirkonium

Bei Zirkonium liegt die Mitte der Absorptionskante liegt ungefähr bei $\theta_{\text{Zr}} \approx 9,95^\circ$. Daraus ergibt sich eine Absorptionsenergie bzw. Abschirmkonstante von

$$E_{K,\text{abs Zr}} = 17,82 \text{ keV}$$

$$\sigma_{K_{\text{Zr}}} = 4,28 .$$

Abbildung 11: Absorptionsspektrum von Zirkonium



3.5 Berechnung der Rydbergenergie

Um die Rydbergfrequenz zu bestimmen kann das Moysley'sche Gesetz mit $n = 1$ zu

$$\sqrt{E_K} = \sqrt{Rhz} - \sqrt{Rh\sigma_k} \quad (11)$$

umgestellt werden. In Regressionsparameter überführt nimmt die Beziehung die Gestalt

$$y = mz + b \quad (12)$$

an. Mittels Durchführung der linearen Regression lassen sich die Regressionsparameter zu

$$m = (3,568 \pm 0,018) \sqrt{\text{eV}}$$

$$b = (-9,086 \pm 0,628) \sqrt{\text{eV}}$$

bestimmen. Daraus kann die Rydbergfrequenz zu

$$R = (3,079 \pm 0,031) \text{ Hz}$$

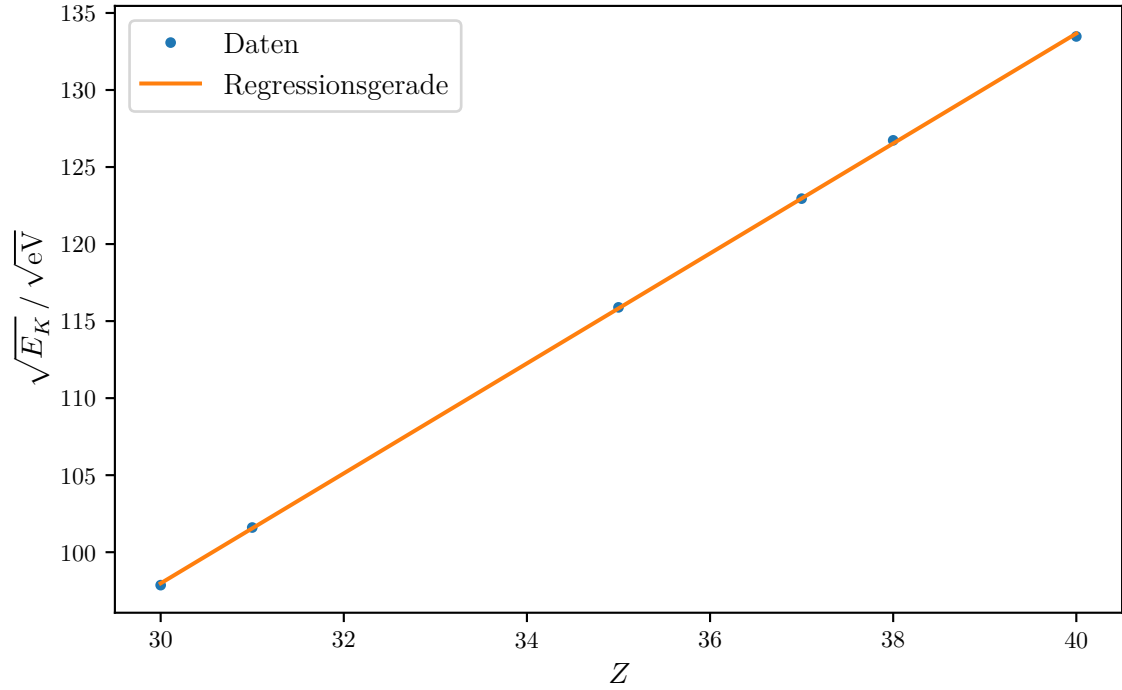
errechnet werden. Abschließend lässt sich die Rydbergenergie aus der Formel

$$R_\infty = hR \quad (13)$$

zu

$$R_\infty = (12,74 \pm 0,13) \text{ eV}$$

Abbildung 12: Lineare Regression zur Bestimmung der Rydbergfrequenz



bestimmen. Die Unsicherheiten der Rydbergfrequenz und der Rydbergenergie ist

$$\Delta R = \left| \frac{2m}{h} \Delta m \right| \quad (14)$$

$$\Delta R_{\infty} = h \Delta R . \quad (15)$$

4 Diskussion

In der der Tabelle 3 sind die Literaturwerte für die Abschirmkonstanten $\sigma_{K, \text{Lit}}$ die experimentell bestimmten Abschirmkonstanten σ_K und die daraus errechneten Verhältnisse η aufgetragen. Nach Betrachtung der Tabelle 3 fällt auf, dass alle berechneten Werte

Tabelle 3: Vergleich der berechneten Abschirmkonstanten mit den Literaturwerten

	$\sigma_{K, \text{Lit}}$	σ_K	$\eta / \%$
Zn	3,566	3,668	102,85
Ga	3,677	3,673	99,90
Br	3,848	3,894	101,19
Rb	3,944	4,037	102,36
Sr	3,999	4,041	101,05
Zr	4,101	4,28	104,37

etwas größer als die Literaturwerte sind. Somit lässt sich vermuten, dass die Ursache ein systematischer Fehler ist. Das Verhältnis der errechneten Rydbergenergie und des Literaturwertes beträgt

$$\mu = \frac{R_{\infty}}{R_{\infty_{\text{Lit}}}} = \frac{12,74 \text{ eV}}{13,606 \text{ eV}} = 93,63 \% . \quad (16)$$

Dies entspricht einer Abweichung von etwa 7 %, was im Vergleich zu der oben stehenden Tabelle 3 eine etwas erhöhte Abweichung ist. Dies könnte an Rundung von Dezimalstellen liegen. Andererseits könnte die Ursache bei der Abweichung der Absorptionsenergien liegen, da aus diesen die Rydbergfrequenz und somit auch die Rydbergenergie bestimmt worden ist.

Literatur

- [1] TU Dortmund. *V602, Röntgenemission und -absorption*.
- [2] John D. Hunter. „Matplotlib: A 2D Graphics Environment“. Version 1.4.3. In: *Computing in Science & Engineering* 9.3 (2007), S. 90–95. URL: <http://matplotlib.org/>.
- [3] Eric O. Lebigot. *Uncertainties: a Python package for calculations with uncertainties*. Version 2.4.6.1. URL: <http://pythonhosted.org/uncertainties/>.
- [4] Travis E. Oliphant. „NumPy: Python for Scientific Computing“. Version 1.9.2. In: *Computing in Science & Engineering* 9.3 (2007), S. 10–20. URL: <http://www.numpy.org/>.
- [5] National Instituts of Standards und Technology. *X-Ray Transition Energies Database*. URL: <https://physics.nist.gov/cgi-bin/XrayTrans/search.pl?element=Cu&trans=Kedge&lower=&upper=&units=eV> (besucht am 03.05.2021).