

Versuch 256: Röntgenfluoreszenz

Yago Obispo Gerster

5. März 2024

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Motivation	1
1.1	Physikalische Grundlagen	1
1.2	Röntgenfluoreszenz und Moseleysche Gesetz	1
1.3	Messverfahren: Röntgenenergiedetektor	2
2	Messprotokoll	3
3	Auswertung	6
3.1	Energiekalibrierung	6
3.2	Bestimmung der Rydberg Energie über die K_α Übergänge	6
3.3	Bestimmung der Rydberg Energie über die K_β Übergänge	8
3.4	Untersuchung der Zusammensetzung unterschiedlicher Legierungen	10
4	Zusammenfassung und Diskussion	10
4.1	Diskussion	11
5	Quellen und Python-Code	14

1 Einleitung und Motivation

Das Ziel des Versuches besteht darin, uns mit der Funktionsweise eines Röntgenenergiedetektors vertraut zu machen. Dabei soll dieser zunächst kalibriert werden, daraufhin werden die Energien der K_α bzw. K_β Übergänge für verschiedene Elemente bestimmt und die Gültigkeit des Moseleyschen Gesetzes überprüft. Zuletzt soll noch die Elementzusammensetzung unterschiedlicher Legierungen untersucht werden.

1.1 Physikalische Grundlagen

1.2 Röntgenfluoreszenz und Moseleysche Gesetz

Wenn Röntgenstrahlung auf Materie trifft, so kann diese Elektronen der inneren Schalen der Atome lösen. Dabei gehen Elektronen von höheren Energiezustän-

den in den freigewordenen energetisch günstigeren Zustand über und strahlen dabei sekundäre Röntgenstrahlung ab, welche im folgenden als *Röntgenfluoreszenz* bezeichnet wird.

Die Energie eines Elektrons auf der n -ten Schale ist beim Bohrschen Atommodell durch die Rydberg-Formel

$$E_n = hcR_\infty \left(\frac{(Z - \sigma_n)^2}{n^2} \right) \quad (1)$$

gegeben, wobei h das Plancksche Wirkungsquantum, c die Lichtgeschwindigkeit, R_∞ die Rydberg-Konstante, Z die Kernladungszahl und σ_n eine Abschirmungskonstante ist, welche berücksichtigt, dass die Hüllenelektronen teilweise den positiven Kern abschirmen.

Für die Energie der emittierten Strahlung eines Übergangs von einer Schale mit Hauptquantenzahl n_2 auf die Schale n_1 gilt damit:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = hcR_\infty \left(\frac{(Z - \sigma_{n_1})^2}{n_1^2} - \frac{(Z - \sigma_{n_2})^2}{n_2^2} \right) \quad (2)$$

Wenn wir anschliessend eine mittlere Abschirmkonstante σ einführen und sie mit den beiden vorherigen gleichsetzen, so ergibt sich:

$$\Delta E = hcR_\infty (Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (3)$$

$$\Leftrightarrow \sqrt{\frac{\Delta E}{hcR_\infty}} = (Z - \sigma) \sqrt{\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}} \quad (4)$$

Letztere Gleichung heisst *Moseleysche Gesetz*. Dabei stellt es sich in vielen Anwendungen als nützlich heraus, die Rydberg-Energie über $E_R = hcR_\infty$ zu definieren. Betrachtet man die K_α -Strahlung, d.h. den Übergang von der L- in die K-Schale, dann gilt für nicht schwere Kerne $Z \approx 30$ in etwa $\sigma \approx 1$. Das Moseley-Gesetz kann für diesen Spezialfall als

$$\sqrt{\frac{\Delta E}{hcR_\infty}} = (Z - 1) \sqrt{\frac{3}{4}} \quad (5)$$

ausgedrückt werden.

1.3 Messverfahren: Röntgenenergiedetektor

Um die Röntgenfluoreszenzenergie zu bestimmen wird ein Energiedetektor verwendet, der nach dem Prinzip eines Halbleiterdetektors arbeitet (siehe Prozess in Abbildung 1). Ein n -Halbleiter besitzt eine hohe Anzahl an frei beweglichen Elektronen, während ein p -Halbleiter viele Löcher besitzt, also stellen, an denen ein Elektron fehlt. Wenn ein n und ein p Halbleiter miteinander in Kontakt gebracht werden, dann kommt es zum pn -Übergang. Durch Diffusion gelangen Elektronen in den p -Halbleiter und Löcher in den n -Halbleiter und es kommt

zur Rekombination. Dabei entsteht eine Grenzschicht ohne freie Ladungsträger, die sogenannte *Verarmungszone*. Durch die Diffusion entsteht parallel eine Verschiebung der Ladungsträger, wodurch auch ein elektrisches Feld erzeugt wird. Um die Verarmungszone zu vergrössern kann ausserdem eine Spannung angelegt werden, sodass die Ladungsträger nach aussen gezogen werden.

Die Messung der Röntgenfluoreszenz läuft mit diesem Aufbau wie folgt ab: Ein Röntgenquant trifft auf die Verarmungszone und wird von dieser absorbiert (photoelektrischer Effekt), wobei ein Elektron emittiert wird, welches gegen die Kristallatome stösst und dabei Elektron-Loch-Paare hervorruft. Diese neu entstandene Ladung kann durch das E-Feld abgesaugt werden und mit einem *Integrator* in Form eines Pulssignals gemessen werden. Diese detektierten Signale sind logischerweise proportional zur Energie der auftreffenden Röntgenquanten, da dadurch das Photoelektron eine höhere kinetische Energie besitzt und mehrere Elektron-Loch-Paare erzeugen kann, welche die gemessene Ladung erhöhen. Ein *Vielkanalanalysator* unterteilt dann die gemessenen Signale nach deren Grösse in Kategorien, sogenannte *Kanäle* und kann die Anzahl der gezählten Signale pro Kanal in einem Histogramm grafisch darstellen.

Jedem Kanal kann dabei eine Energie zugeordnet werden. Dafür muss eine Eichung durchgeführt werden, bei welcher das Energiespektrum eines bekannten Elementes aufgenommen wird und jedem Kanal eine Energie zugeordnet wird.

2 Messprotokoll

Versuch 25b: Röntgenfluoreszenz

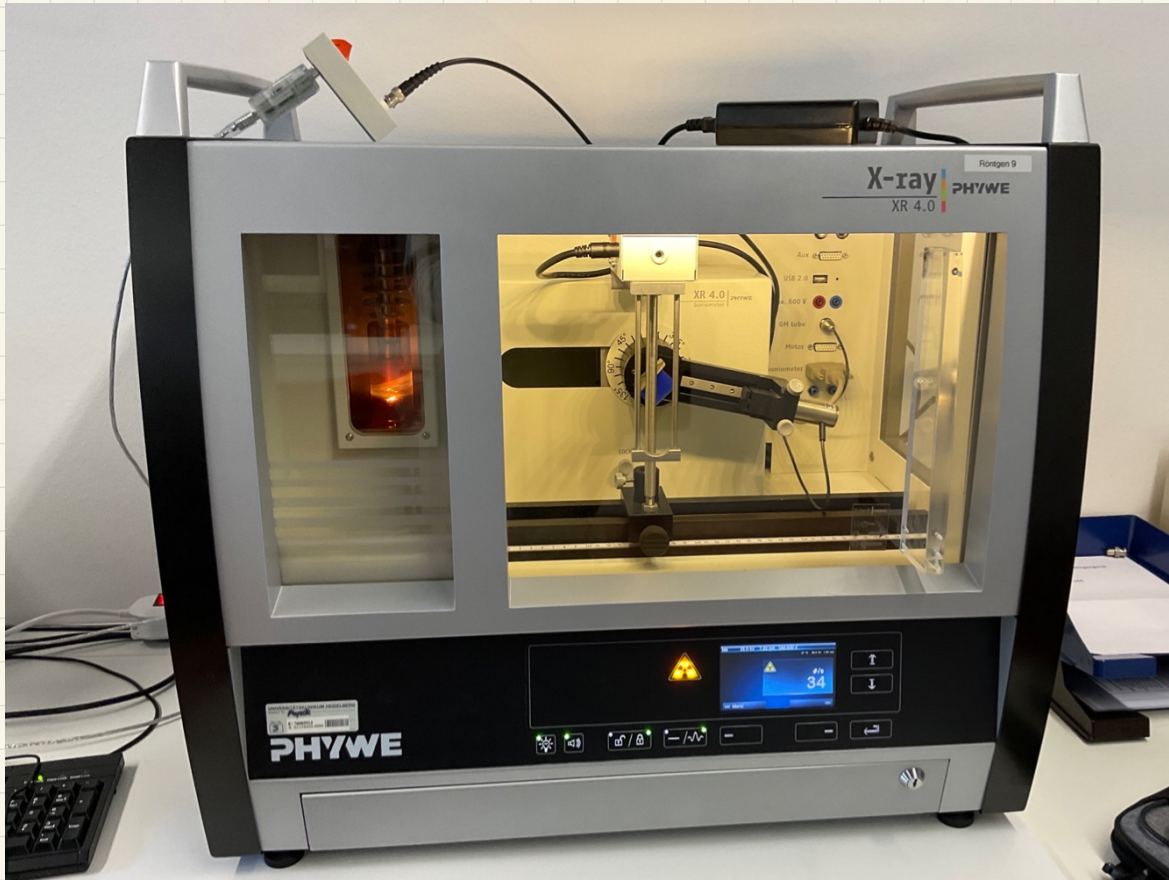
Yago Obispo Gerster

Betreuerin: Lena Kue

Lehmart Bederke

29. Feb. 9-12

Versuchsaufbau



Skizze 1: Versuchsaufbau

(1) Kalibrierung

$\mu_1 = 85 \text{ keV}$ $\mu_2 = 230 \text{ keV}$
↓ ↓
Eisen Molybdän

(2) Energiebestimmung unterschiedliche Elemente

Element	K_{α} [keV]	ΔK_{α} [keV]	K_{β} [keV]	ΔK_{β} [keV]
Ag	27,93	0,16	24,56	0,19
Fe	6,43	0,16	7,08	0,09
			8,66	0,17
Mo	17,47	0,17	19,57	0,39
Zn	8,65	0,17	9,60	0,16
Ni	7,49	0,17	8,27	1,38
Cu	8,06	0,16	8,92	0,16
Ti	4,68	0,14	—	—
Zr	15,83	0,16	17,7	0,27

Tabelle 1: Anfitten Gaußkurve

(3) Zusammensetzung von Legierungen

Legierung 1: Fe und Cu und Ni

Legierung 2: Cu und Zn

Legierung 3: Cu und Zn

5-cent-Stück: Cu

1-Euro: Ni und Cu

50-cent: Cu und ein wenig Zn

Unbekannte Leg.: Cu, Ga, Ge, As, Kr

lea bz

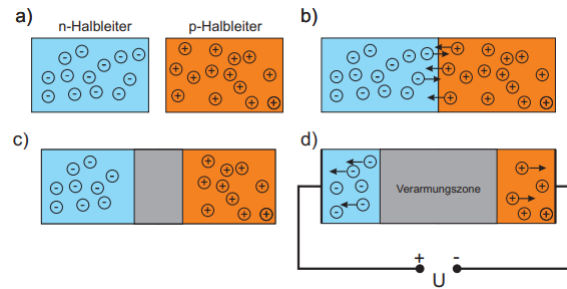


Abbildung 1: Röntgenenergie-detektor

3 Auswertung

3.1 Energiekalibrierung

Im ersten Versuchsschritt wurde zunächst eine Energiekalibrierung mit Silber und Molybdän durchgeführt. Diese ist wie in den Grundlagen besprochen notwendig, um jedem Kanal bei der späteren Untersuchung der Spektren auch eine Energie zuordnen zu können. Dazu haben wir die Silber und Molybdän Plättchen nacheinander im Röntgengerät (siehe Aufbau bild in Messprotokoll) fixiert, mit Röntgenstrahlung bestrahlt und die von diesen emittierte Strahlung daraufhin aufgezeichnet. Dabei konnten wir deutlich den K_α -Peak bei beiden identifizieren. An diesen wurde eine Gaußkurve gleicher Breite gefittet und die Kanalnummer des Peakschwerpunktes wurde notiert. Am Periodensystem (Quelle Praktikums skript V256, Seite 7) konnte dann der Wert der Energien den Peakschwerpunkten zugeordnet werden und damit war die Kalibrierung abgeschlossen.

3.2 Bestimmung der Rydberg Energie über die K_α Übergänge

Im Anschluss wurden die Röntgenfluoreszenzspektren mehrerer Elemente aufgenommen und dabei wurde an jeden K_α bzw. K_β -Peak eine Gaußkurve gleicher Breite gefittet, deren Energie notiert und ebenfalls die Peakbreite.

Zunächst befassen wir uns mit den K_α Energien.

Diese werden in Python in Numpy-Arrays gespeichert und die Wurzel der Messwerte wird gegen die entsprechende Kernladungszahl des Elementes geplottet (siehe Abbildung 2). Für den Fehler der Wurzel der Energien wurde nach Gaußscher Fehlerfortpflanzung der Ausdruck

$$\Delta\sqrt{E_\alpha} = \frac{\Delta E_\alpha}{2 \cdot \sqrt{E_\alpha}} \quad (6)$$

verwendet, wobei ΔE_α der durch den Gaußkurvenfit ermittelten Peakbreite entspricht. Dabei wurde die Wurzel gegen die Kernladungszahl aufgetragen, da wir damit - nach dem Moseleyschen Gesetz (4) - einen linearen Zusammenhang

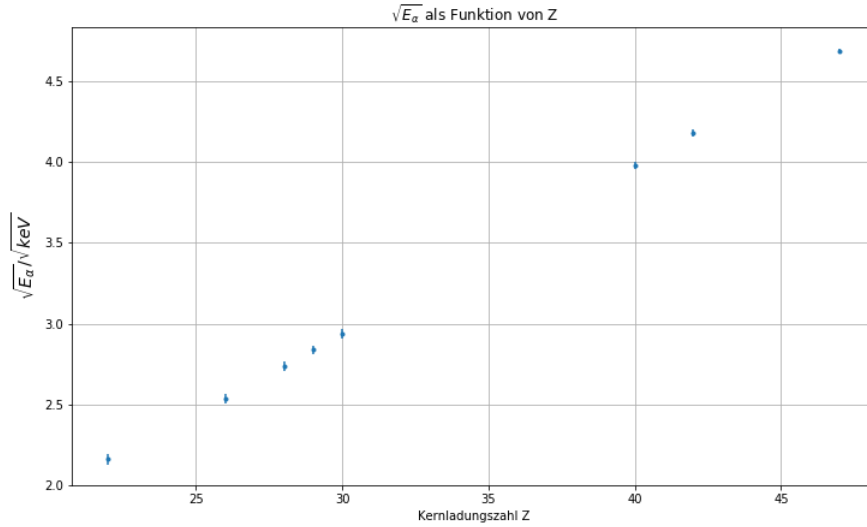


Abbildung 2: K_α Wurzel der Energien gegen ihre Ordnungszahl

erwartet haben. Dieser lineare Zusammenhang wird uns, wie man in Abbildung 2 erkennen kann, bestätigt.

Das Moseleysche Gesetz erlaubt uns weiterhin eine Bestimmung der Rydberg-Energie E_R . Dazu wird die Funktion

$$fitfunc(x) = \sqrt{E_R} \cdot (x - \sigma_{12}) \cdot \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right) \quad (7)$$

an die Messwerte angepasst. Dabei wurden die Quantenzahlen an die K_α -Strahlung angepasst, bei welcher der Übergang von der L-Schale (2) zur K-Schale (1) stattfindet. Die Anpassung wird in Abbildung 3 dargestellt. Für die Fitparameter erhalten wir

$$\sqrt{E_R} = (0,1178 \pm 0,0006) \sqrt{\text{keV}} \quad (8)$$

$$\sigma_{12} = (1,06 \pm 0,18) \quad (9)$$

Daraus kann die Rydberg-Energie gemäss

$$E_R = \sqrt{E_R}^2 \quad (10)$$

$$\Delta E_R = 2 \cdot \sqrt{E_R} \cdot \Delta \sqrt{E_R} \quad (11)$$

bestimmt werden wodurch wir in diesem Versuchsteil zu folgenden Ergebnissen kommen:

$$E_R = (13,87 \pm 0,13) \text{eV} \quad (12)$$

$$\sigma_{12} = (1,06 \pm 0,18) \quad (13)$$

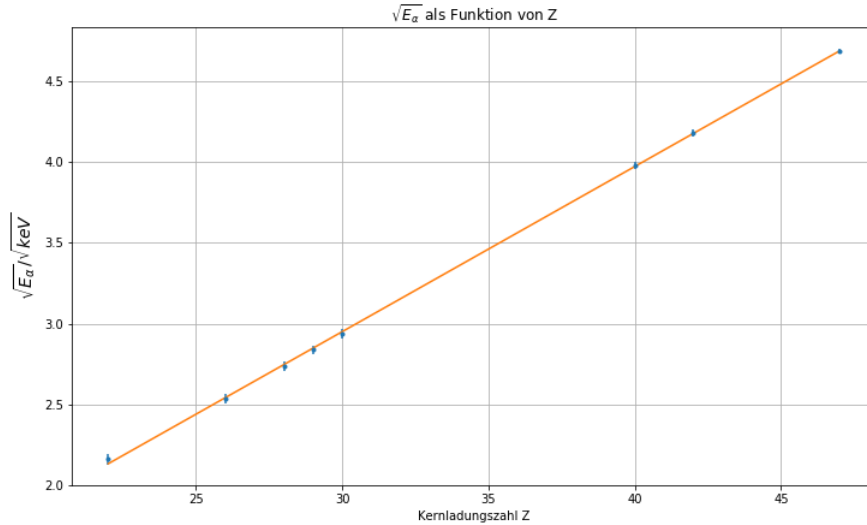


Abbildung 3: Anpassung des Moseleyschen Gesetzes

Das Ergebniss wird in der Diskussion mit dem Literaturwert verglichen und deren Fehler kritisch analysiert.

3.3 Bestimmung der Rydberg Energie über die K_β Übergänge

Das gleiche Verfahren kann dabei für die K_β -Strahlung wiederholt werden. Plottet man die Wurzel der Energien gegen die Kernladungszahl, so erhält man den Verlauf in Abbildung 4. Hier kann erneut der lineare Zusammenhang aus dem Moseleyschen Gesetz erkannt werden, weshalb wir dieses erneut mit der Fitfunktion

$$fitfunc(x) = \sqrt{E_R} \cdot (x-12) \cdot \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{3^2} \right) \quad (14)$$

an die Messdaten anpassen. Dabei wurde beachtet dass dieser Übergang von der M-Schale (3) zur K-Schale (1) stattfindet - weshalb die entsprechenden Quantenzahlen gewählt wurden. Der Fit ist in Abbildung 5 dargestellt. Dabei ist auffällig, dass der zweite Messpunkt, welcher in diesem Fall Nickel entspricht, einen besonders grossen Fehlerbalken besitzt. Dies liegt daran, dass die Peakbreite während des Versuches zu 1,38 bestimmt wurde, wobei es sich jedoch vermutlich um einen groben Fehler gehandelt hat. Da dies im folgenden keine weitere Wichtigkeit hat, kann dieser Fehler ignoriert werden.

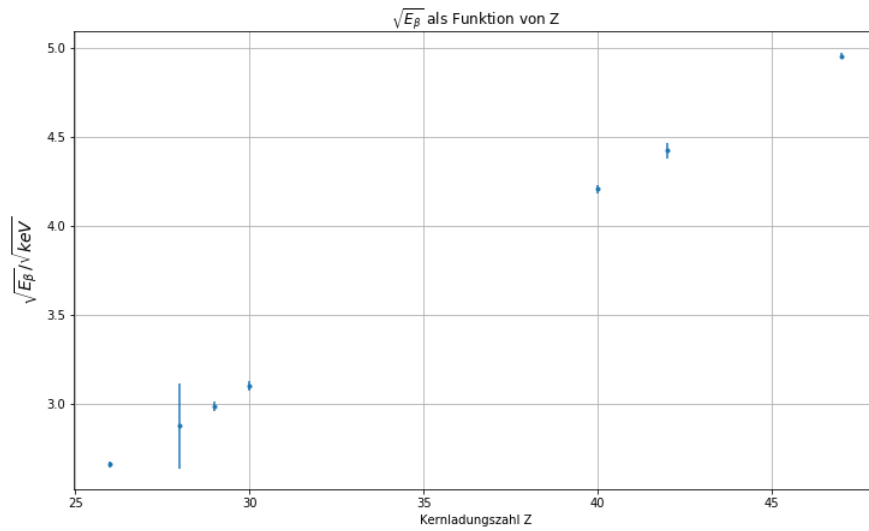


Abbildung 4: Wurzel der K_β -Energien gegen die Kernladungszahl

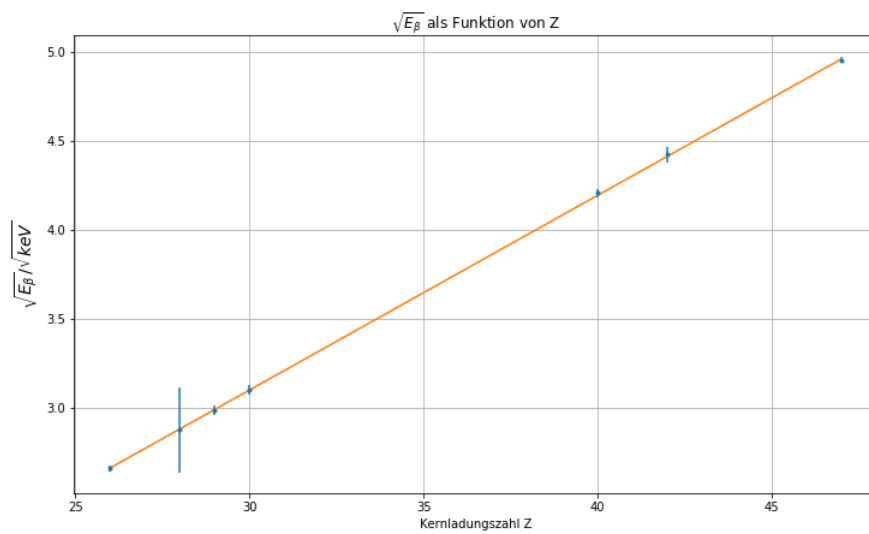


Abbildung 5: Anpassung des Moseleyschen Gesetzes

Für die Fitparameter erhalten wir:

$$\sqrt{E_R} = (0,1162 \pm 0,0003)\sqrt{keV} \quad (15)$$

$$\sigma_{12} = (1,70 \pm 0,10) \quad (16)$$

Dies führt zu folgenden Ergebnissen

$E_R = (13,50 \pm 0,08)eV$	(17)
$\sigma_{12} = (1,70 \pm 0,10)$	(18)

Auch diese werden in der Diskussion mit den Literaturwerten verglichen und deren Fehler untersucht.

3.4 Untersuchung der Zusammensetzung unterschiedlicher Legierungen

Im letzten Versuchsschritt haben wir nicht mehr reine Elemente verwendet, sondern uns für die Zusammensetzung unterschiedlicher Legierungen interessiert. Dafür wurde das Röntgenfluoreszenzspektrum dieser aufgenommen und anhand der Peaks wurde mit den zuvor erfassten Peaks der reinen Elemente eine Identifikation durchgeführt.

Dabei haben wir festgestellt, dass die mit der Nummer 1 markierte Legierung hauptsächlich aus Eisen und Chrom bestand und zu kleinen Anteilen aus Nickel. Die Nummer 2 und Nummer 3 bestanden beide aus Kupfer und Zink. Zusätzlich zu den nummerierten Legierungen wurde noch eine unbekannte Legierung, welche sich in einer Hülle befand untersucht. Diese bestand hauptsächlich aus Kupfer, Gallium und Germanium, aber auch leichte Anteile von Arsen und Krypton waren erkennbar.

Zuletzt haben wir noch unterschiedliche Geldstücke auf deren Röntgenfluoreszenz untersucht. Dabei haben wir festgestellt, dass 5-Cent-Stücke aus Kupfer bestehen, 50-Cent-Stücke aus Kupfer und ein wenig Zink und 1-Stücke aus Nickel und Kupfer. Damit haben wir also herausgefunden, dass alle Geldmünzen aus Kupfer bestehen und in einigen Fällen von Nickel bzw. Zn beschichtet sind. (Damit würde es sich nicht lohnen, Geldmünzen zu schmelzen und deren Material zu verkaufen, da der Wert des Kupfer-Rohmaterials kleiner ist als der Wert der Münze, und die Beschichtung mit Nickel oder Zink nur sehr dünn ist, was bereits auch einige Untersuchungen in der Vergangenheit belegt haben.)

4 Zusammenfassung und Diskussion

Zusammenfassend haben wir uns in diesem Versuch mit der Röntgenfluoreszenzstrahlung beschäftigt und deren Messtechnik.

Um mit dem Energiedetektor sinnvolle Aussagen treffen zu können, musste dieser zunächst kalibriert werden. Dazu wurde das Spektrum von Silber und Molybdän aufgenommen und den Peaks wurde die bereits bekannten Energien zugeordnet.

Daraufhin haben wir unterschiedliche Materialien bestrahlt und dabei die von diesen charakteristische emittierte Röntgenstrahlung genauer untersucht. Dabei wurden jeweils die Energien der K_α und K_β Peaks gemessen. Damit konnten wir eine Grafik erstellen, bei welcher wir die Wurzel der Energie gegen die Kernladungszahl des Elements aufgetragen haben. An die Messwerte haben wir daraufhin die Funktion aus dem Moseleyschen-Gesetz angepasst und dabei über die Fitparameter die Rydberg-Energie und die Abschirmungskonstante bestimmt. Damit erhalten wir insgesamt die Ergebnisse in Tabelle 1.

Im letzten Versuchsteil haben wir uns für die Zusammensetzung unterschiedli-

	E_R [eV]	σ_{12}
K_α	$(13,87 \pm 0,13)$	$(1,06 \pm 0,18)$
K_β	$(13,50 \pm 0,08)$	$(1,70 \pm 0,10)$

Tabelle 1: Ergebnisse

cher Legierungen interessiert und dafür deren Röntgenfluoreszenzstrahlung analysiert. Die Peaks wurden mit den gemessenen Peaks der Elemente verglichen und somit die enthaltenen Elemente gefunden.

Insbesondere haben wir herausgefunden dass Münzen hauptsächlich aus Kupfer bestehen und in einigen Fällen von Nickel bzw. Zink beschichtet sind.

4.1 Diskussion

Im Anschluss werde ich die berechneten Werte mit ihren Literaturwerten vergleichen, die erstellten Plots bei denen Anpassungen durchgeführt wurden auf deren Fitwahrscheinlichkeit untersuchen und die Fehlerquellen analysieren. Dabei werde ich weiterhin einige Vorschläge präsentieren, wie die Durchführung verbessert werden könnte um die Genauigkeit der Ergebnisse zu erhöhen.

Für die Sigma-Abweichung wird die bekannte Formel

$$\frac{|Wert1 - Wert2|}{\sqrt{Fehler1^2 + Fehler2^2}} \quad (19)$$

verwendet.

Als erstes werden die Energien der einzelnen Peaks der jeweiligen Elemente mit deren Literaturwert verglichen, welche dem Periodensystem entnommen werden können. Die σ -Abweichung befindet sich in Tabelle 2.

Dabei beobachten wir, dass die Sigma-Abweichungen sehr gering sind. Alle liegen dabei unter der typischen Signifikanzgrenze von 3σ und mit Ausnahme von Silber und Titan sogar unter der 1σ -Signifikanzgrenze. Dies garantiert uns damit, dass der Versuch angemessen durchgeführt wurde und die einzelnen Peaks gut messbar waren und richtig identifiziert wurden. Dabei ist jedoch weiterhin in Tabelle 2 auffällig, dass die Mehrheit der Messwerte grösser ist als die entsprechende Literaturwerte für die Energien. Man könnte also vermuten, dass hierbei ein systematischer Fehler vorliegen könnte. Dieser liegt wahrscheinlich an der Ungenauigkeit der Kalibrierung des Energiedetektors. Den Peaks von

Atom	E_α [keV]	$E_{\alpha lit}$ [keV]	Sigma	E_β [keV]	$E_{\beta lit}$ [keV]	Sigma
Ti	$4,68 \pm 0,14$	4,511	1,2	-	-	-
Fe	$6,43 \pm 0,16$	6,404	0,16	$7,08 \pm 0,09$	7,058	0,24
Ni	$7,49 \pm 0,17$	7,478	0,07	$8,3 \pm 1,4$	8,265	0,004
Cu	$8,06 \pm 0,16$	8,048	0,08	$8,92 \pm 0,16$	8,905	0,09
Zn	$8,65 \pm 0,17$	8,639	0,06	$9,06 \pm 0,16$	9,572	0,18
Zr	$15,83 \pm 0,16$	15,78	0,3	$17,70 \pm 0,21$	17,67	0,14
Mo	$17,47 \pm 0,17$	17,48	0,06	$19,6 \pm 0,4$	19,61	0,10
Ag	$21,93 \pm 0,16$	22,16	1,4	$24,56 \pm 0,19$	24,94	2,0

Tabelle 2: Vergleich der Energien der einzelnen Peaks mit Literaturwerten

Silber und Molybdän wurden dabei manuell Energiewerte zugeordnet. Dabei haben wir - bedingt durch die Auflösung des Spektrums durch die Software - wahrscheinlich nicht den genauen x-Wert des Peaks bei der Anpassung finden können, sondern ein Punkt der leicht verschoben ist. Diese leichte Verschiebung in der Kalibrierung führt dann zu der leichten systematischen Abweichung. Weiterhin wurde während des Versuches eine Gerade der Form des Moseleyschen Gesetzes an die Messwerte jeweils für die K_α -Strahlung in Abbildung 3 und für die K_β -Strahlung in Abbildung 5 angepasst. Im folgenden will ich die Güte dieser Fits mit der χ^2 -Methode genauer analysieren. Die χ^2 -Summe lässt sich dabei nach

$$\chi^2 = \sum_i^N \left(\frac{\text{Funktionswert}_i - \text{Messwert}_i}{\text{Fehler}_i} \right)^2 \quad (20)$$

berechnen. Die Fitwahrscheinlichkeit beschreibt dabei die Wahrscheinlichkeit, bei einer Wiederholungsmessung ein χ^2 -Wert zu erhalten, welcher grösser oder gleich dem χ^2 -Wert ist. Wir erhalten die Werte in Tabelle 3.

Die Fitwahrscheinlichkeit ist bei beiden dabei ziemlich gut, weshalb die Theorie

	K_α	K_β
χ^2	1,4	0,4
χ^2_{red}	0,23	0,08
Fitwahrscheinlichkeit	97%	100%

Tabelle 3: Güte der Fits

des Moseleyschen Gesetzes hierbei anhand des Versuches verifiziert wurde. Die Güte des Fits kann auch rein qualitativ an Abbildung 3 und Abbildung 5 bereits gesehen werden, da die Messpunkte mit sehr geringer Abweichung zu einer Gerade verbunden werden können. Die kleinen Abweichungen können zum einen auf die bereits angesprochenen Abweichungen der Energiepeaks von den Literaturwerten zurückgeführt werden, welche durch eine Verbesserung der Kalibrierungstechnik minimiert werden können. Zum anderen könnte man auch einen theoretischen Grund hierfür angeben: Das Moseleysche Gesetz (4) ist nur eine

Abschätzung der Energie der charakteristischen Strahlung, denn dieses Berücksichtigt nur Hauptquantenzahlen. Eine mögliche Feinstruktur, bei welcher die Energie weiter entartet ist und von der Dreh- bzw. Spinimpulsquantenzahl abhängig ist, wird hierbei vernachlässigt. Das verwendete Messgerät besitzt leider nicht die benötigte Auflösung um diese Entartung experimentell zu visualisieren, jedoch sollte es zu einer Aufspaltung der Peaks kommen, da beispielsweise das L-Niveau bereits dreifach entartet ist. Da diese Aufspaltung so schwer beobachtbar ist, spielt sie vermutlich keinen zu grossen Einfluss, weshalb die Annahme des Moseleyschen Gesetzes für unseren Versuch gerechtfertigt ist und entsprechend die Fitwahrscheinlichkeiten sehr gut. Bei genaueren (quantenmechanischen) Analysen müsste man dieses jedoch beachten und die Anpassungsfunktion ändern.

Des Weiteren haben wir während des Versuches die Rydberg-Energie E_R zwei Male - einmal für die K_α -Peaks und einmal für die K_β -Peaks - bestimmt. Diese vergleiche ich im Anschluss mit dem Literaturwert, für welchen nach Chemie Schule (Stand 04.03.2024) folgender Literaturwert angenommen wird:

$$E_{lit} = 13,60569253(30)eV \quad (21)$$

Die Abweichungen sind in Tabelle 4 aufgelistet.

Die Abschirmungskonstante wurde auch für beide Fälle bestimmt und kann

Peak	E_R [eV]	Abs. Abweichung [eV]	Sigma
K_α	$(13,87 \pm 0,13)$	0,27	2,0
K_β	$(13,50 \pm 0,08)$	0,11	1,4

Tabelle 4: Abweichung der Rydberg-Energie vom Literaturwert

mit dem Literaturwert, nämlich 1 für die K_α -Strahlung und 1,8 für die K_β -Strahlung (laut Wikipedia:Moseleysche Gesetz (Stand 05.03.2024)) verglichen werden.

Dabei erhalten wir auch für die Abschirmungskonstanten zu den Literaturwer-

Peak	σ_{12}	Abs. Abweichung	Sigma-Abw.
K_α	$(1,06 \pm 0,18)$	0,06	0,4
K_β	$(1,70 \pm 0,10)$	0,10	1

Tabelle 5: Abweichung der Abschirmungskonstante vom Literaturwert

ten passende Grössen die unterhalb der Signifikanzgrenze liegen. Dies bestätigt wieder eine korrekte Versuchsdurchführung und die Richtigkeit der Theorie.

Insgesamt hat mir dieser Versuch viel Spass gemacht, da die Zusammensetzung von Objekten dieses Mal nicht, wie bereits in vorherigen Versuchen, über Untersuchung der Wellenlängen mit Dispersion oder Beugung bestimmt wurde, sondern uns ein neues Messkonzept über den Röntgenenergiedetektor (pn-Halbleiter mit Verarmungszone) beigebracht wurde und wir im Versuch über Bestimmung der Röntgenfluoreszenzenenergien die Funktionsweise verifizieren konnten.

5 Quellen und Python-Code

- PAP 2.2 Anleitung der Universität Heidelberg
- Chemie Schule (Stand 04.03.2024)
- Wikipedia:Moseleysche Gesetz (Stand 05.03.2024)

256Röntgenfluoreszenz

March 5, 2024

1 Auswertung Versuch 256: Röntgenfluoreszenz

1.1 Yago Obispo Gerster | mn304

```
[1]: %matplotlib inline
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
def literatur_Vergleich(name,mess,sig_mess,lit,sig_lit):
    print(name,": ")
    print("Absolute Abweichung: ",np.abs(mess-lit))
    print("Sigma: ",np.abs(mess-lit)/np.sqrt(sig_mess**2 + sig_lit**2))
```

1.1.1 Kalpha Strahlung

```
[2]: #Trage Messwerte in Arrays ein
Z=np.array([22,26,28,29,30,40,42,47]) #Kernladungszahl

#K_alpha (Ti, Fe, Ni, Cu, Zn, Zr, Mo, Ag) in keV:
K_alpha=np.array([4.68,6.43,7.49,8.06,8.65,15.83,17.47,21.93]) #Energie der K_alpha Strahlung
Delta_K_alpha=np.array([0.14,0.16,0.17,0.16,0.17,0.16,0.17,0.16]) #Peakbreite der Kalpha Strahlung
sqrt_K_alpha=np.sqrt(K_alpha) #Wurzel der Energien
Delta_sqrt_K_alpha = Delta_K_alpha/(2*sqrt_K_alpha) #Fehler nach Gauss
```

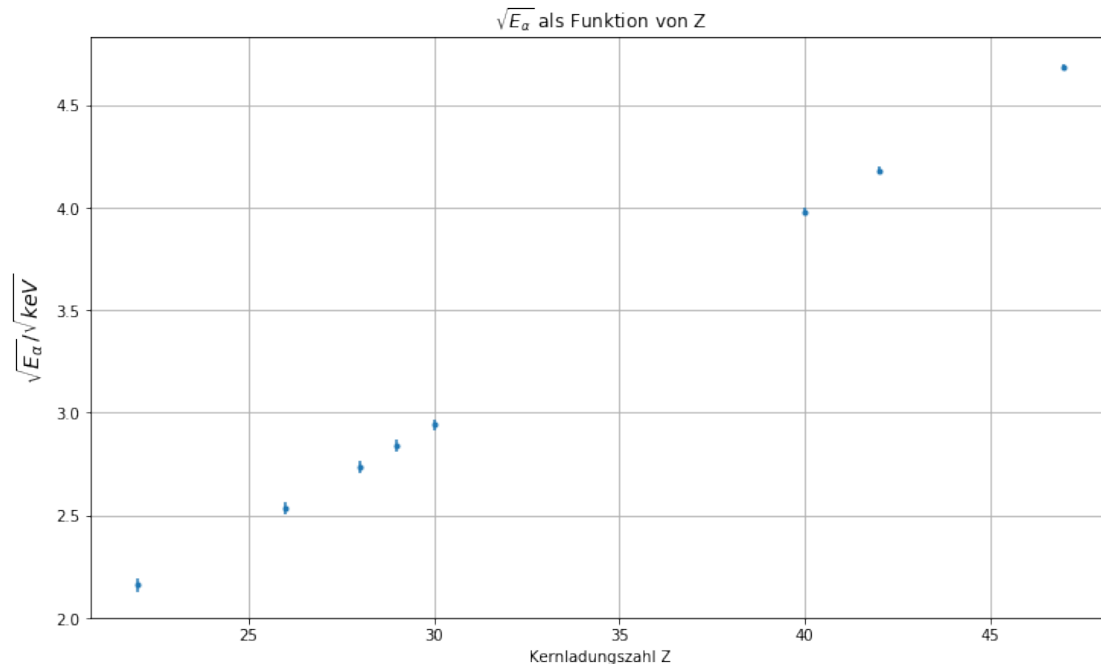
```
[3]: #Abweichung der K_alpha_Linien vom Literaturwert
K_alpha_lit = np.array([4.511,6.404,7.478,8.048,8.639,15.78,17.48,22.16])
literatur_Vergleich("Energien in keV der alpha_Linien",K_alpha,Delta_K_alpha,K_alpha_lit,0)
```

Energien in keV der alpha Linien :

Absolute Abweichung: [0.169 0.026 0.012 0.012 0.011 0.05 0.01 0.23]
Sigma: [1.20714286 0.1625 0.07058824 0.075 0.06470588 0.3125
0.05882353 1.4375]

```
[4]: #Trage Wurzel der Energien mit Fehlern grafisch über Z auf
plt.figure(figsize = (12,7))
```

```
plt.grid()
plt.errorbar(Z, sqrt_K_alpha, Delta_sqrt_K_alpha, fmt=".")
plt.xlabel('Kernladungszahl Z')
plt.ylabel(r'$\sqrt{E_{\alpha}}/\sqrt{\text{keV}}$', fontsize=14)
plt.title(r'$\sqrt{E_{\alpha}}$' + ' als Funktion von Z')
plt.savefig("256/K_alpha_vs_Z.png", format="png")
```



```
[5]: #Anpassung des Moseleyschen Gesetzes
#Hauptquantenzahlen für Kalpha von L-Schale (2) zu K-Schale (1)
n1=1
n2=2
def fit_func(x, sqrt_Er, sig12):
    return sqrt_Er*(x-sig12)*np.sqrt(1/n1**2-1/n2**2)
from scipy.optimize import curve_fit
popt, pcov=curve_fit(fit_func, Z, sqrt_K_alpha,sigma=Delta_sqrt_K_alpha)

#Plot
plt.figure(figsize=(12,7))
plt.grid()
plt.errorbar(Z, sqrt_K_alpha, Delta_sqrt_K_alpha, fmt=".")
plt.xlabel('Kernladungszahl Z')
plt.ylabel(r'$\sqrt{E_{\alpha}}/\sqrt{\text{keV}}$', fontsize=14)
plt.title(r'$\sqrt{E_{\alpha}}$' + ' als Funktion von Z')
plt.plot(Z, fit_func(Z,*popt))
plt.savefig("256/K_alpha_vs_Z_fit.png", format="png")
```

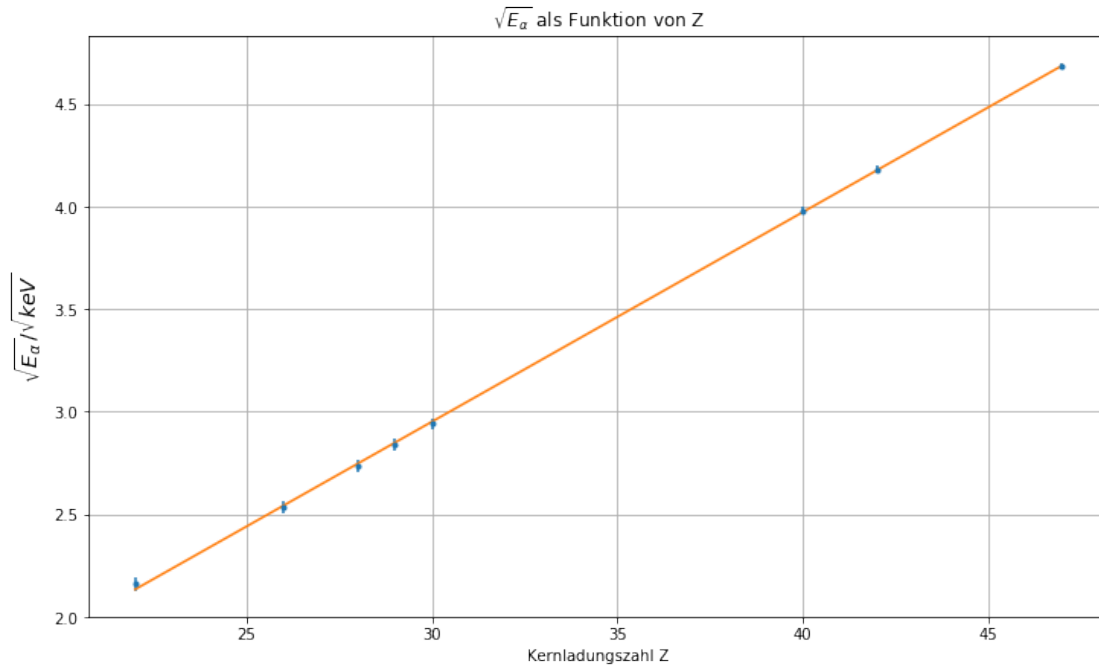


```

#Ausgabe der Fitergebnisse
print("sqrt_Er=",popt[0], ",Standardfehler=",np.sqrt(pcov[0][0])) #sqrtkeV
print("sig12=",popt[1], ",Standardfehler=",np.sqrt(pcov[1][1]))
sig12 = popt[1]
sig_sig12 = np.sqrt(pcov[1][1])

```

sqrt_Er= 0.11777553630791329 ,Standardfehler= 0.0005580763266353325
 sig12= 1.061641861194472 ,Standardfehler= 0.17515008906792098



```

[6]: #Berechne Rydberg-Energie in eV
Er = popt[0]**2 *1e3 #Energie in eV
sig_Er = 2*popt[0]*1e3*np.sqrt(pcov[0][0]) #Fehler aus Gauss
print("Er: ",Er,"+/-",sig_Er)

```

Er: 13.871076952616601 +/- 0.13145547734045296

```

[7]: #Analyse der Güte des Fits
chi2=np.sum((fit_func(Z,*popt)-sqrt_K_alpha)**2/Delta_sqrt_K_alpha**2)
dof=len(sqrt_K_alpha)-2 #Anzahl der Fitparameter hier 2
chi2_red=chi2/dof
print("chi2=", chi2_)
print("chi2_red=",chi2_red)

from scipy.stats import chi2

```

```
prob=round(1-chi2.cdf(chi2_,dof),2)*100
print("Wahrscheinlichkeit=", prob, "%")
```

```
chi2= 1.3805552035493045
chi2_red= 0.23009253392488407
Wahrscheinlichkeit= 97.0 %
```

```
[8]: #Vergleich mit den Literaturwerten und meinen Erwartungen
E_R_lit = 13.60569253 #eV
sig_E_R_lit = 0.00000030

literatur_Vergleich("Rydberg-Energie",Er,sig_Er,E_R_lit,sig_E_R_lit)
literatur_Vergleich("Abschirmungskonstante",sig12,sig_sig12,1,0)
```

```
Rydberg-Energie :
Absolute Abweichung: 0.26538442261660045
Sigma: 2.0188160127295225
Abschirmungskonstante :
Absolute Abweichung: 0.061641861194472014
Sigma: 0.35193736710329665
```

1.1.2 Kbeta Strahlung

```
[9]: #Trage Messwerte in Arrays ein
Z=np.array([26,28,29,30,40,42,47]) #Kernladungszahl

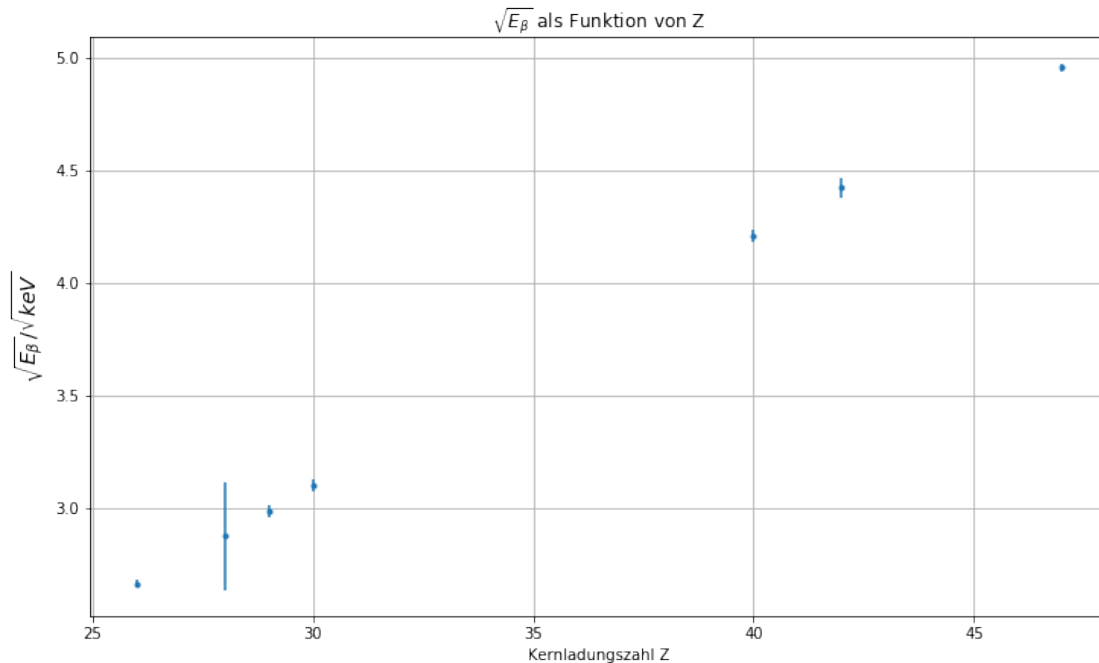
#K_beta (Fe, Ni, Cu, Zn, Zr, Mo, Ag) in keV:
K_beta=np.array([7.08,8.27,8.92,9.6,17.7,19.57,24.56]) #Energie der Kbeta_
↳Strahlung
Delta_K_beta=np.array([0.09,1.38,0.16,0.16,0.21,0.39,0.19]) #Peakbreite der_
↳Kalpha Strahlung
sqrt_K_beta=np.sqrt(K_beta) #Wurzel der Energien
Delta_sqrt_K_beta = Delta_K_beta/(2*sqrt_K_beta) #Fehler nach Gauss
```

```
[10]: #Abweichung der K_beta_Linien vom Literaturwert
K_beta_lit = np.array([7.058,8.265,8.905,9.572,17.67,19.61,24.94])
literatur_Vergleich("Energien in keV der beta_
↳Linien",K_beta,Delta_K_beta,K_beta_lit,0)
```

```
Energien in keV der beta Linien :
Absolute Abweichung: [0.022 0.005 0.015 0.028 0.03 0.04 0.38 ]
Sigma: [0.24444444 0.00362319 0.09375 0.175 0.14285714 0.1025641
2. ]
```

```
[11]: #Trage Wurzel der Energien mit Fehlern grafisch über Z auf
plt.figure(figsize = (12,7))
plt.grid()
```

```
plt.errorbar(Z, sqrt_K_beta, Delta_sqrt_K_beta, fmt=".")
plt.xlabel('Kernladungszahl Z')
plt.ylabel(r'$\sqrt{E_{\beta}}/\sqrt{\text{keV}}$', fontsize=14)
plt.title(r'$\sqrt{E_{\beta}}$' + ' als Funktion von Z')
plt.savefig("256/K_beta_vs_Z.png", format="png")
```

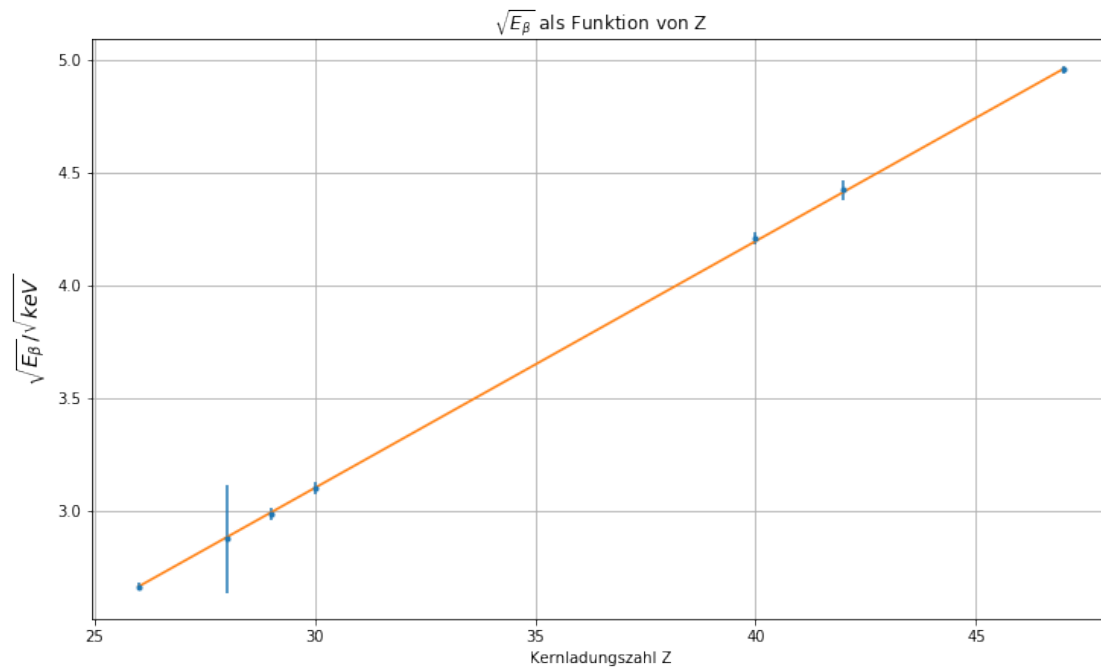


```
[12]: #Anpassung des Moseleyschen Gesetzes
#Hauptquantenzahlen für Kbeta von M-Schale (3) zu K-Schale (1)
n1=1
n2=3
def fit_func(x, sqrt_Er, sig12):
    return sqrt_Er*(x-sig12)*np.sqrt(1/n1**2-1/n2**2)
from scipy.optimize import curve_fit
popt, pcov=curve_fit(fit_func, Z, sqrt_K_beta,sigma=Delta_sqrt_K_beta)

#Plot
plt.figure(figsize=(12,7))
plt.grid()
plt.errorbar(Z, sqrt_K_beta, Delta_sqrt_K_beta, fmt=".")
plt.xlabel('Kernladungszahl Z')
plt.ylabel(r'$\sqrt{E_{\beta}}/\sqrt{\text{keV}}$', fontsize=14)
plt.title(r'$\sqrt{E_{\beta}}$' + ' als Funktion von Z')
plt.plot(Z, fit_func(Z,*popt))
plt.savefig("256/K_beta_vs_Z_fit.png", format="png")
```

```
#Ausgabe der Fitergebnisse
print("sqrt_Er=",popt[0], ",Standardfehler=",np.sqrt(pcov[0][0])) #sqrtkeV
print("sig12=",popt[1], ",Standardfehler=",np.sqrt(pcov[1][1]))
sig12 = popt[1]
sig_sig12 = np.sqrt(pcov[1][1])
```

sqrt_Er= 0.1161779762507521 ,Standardfehler= 0.00033068532660797417
sig12= 1.7020517522269445 ,Standardfehler= 0.09709863831535295



```
[13]: #Berechne Rydberg-Energie in eV
Er = popt[0]**2 *1e3 #Energie in eV
sig_Er = 2*popt[0]*1e3*np.sqrt(pcov[0][0]) #Fehler aus Gauss
print("Er: ",Er,"+/-",sig_Er)
```

Er: 13.49732216572032 +/- 0.07683670404226685

```
[14]: #Analyse der Güte des Fits
chi2_=np.sum((fit_func(Z,*popt)-sqrt_K_beta)**2/Delta_sqrt_K_beta**2)
dof=len(sqrt_K_beta)-2 #Anzahl der Fitparameter hier 2
chi2_red=chi2_/dof
print("chi2=", chi2_)
print("chi2_red=",chi2_red)

from scipy.stats import chi2
prob=round(1-chi2.cdf(chi2_,dof),2)*100
```

```
print("Wahrscheinlichkeit=", prob, "%")
```

```
chi2= 0.4024478750140478  
chi2_red= 0.08048957500280955  
Wahrscheinlichkeit= 100.0 %
```

```
[15]: #Vergleich mit den Literaturwerten und meinen Erwartungen  
E_R_lit = 13.60569253 #eV  
sig_E_R_lit = 0.00000030  
  
literatur_Vergleich("Rydberg-Energie",Er,sig_Er,E_R_lit,sig_E_R_lit)  
literatur_Vergleich("Abschirmungskonstante",sig12,sig_sig12,1.8,0)
```

```
Rydberg-Energie :  
Absolute Abweichung: 0.10837036427968094  
Sigma: 1.4103983978703958  
Abschirmungskonstante :  
Absolute Abweichung: 0.09794824777305555  
Sigma: 1.0087499626404983
```