Versuch 255 Röntgenspektrometer

Leonardo Karl Reiter March 21, 2024

Contents

1	Ziel	l des Versuchs	2
2	Gru 2.1	undlagen Bragg-Reflexion	2 2
3		rchführung	4
	3.1	Messung des Röntgenspektrums mit einem LiF-Kristall	4
	3.2	Messung des Röntgenspektrums mit einem NaCl-Kristall	
	3.3	Röntgenaufnahmen	4
4	Aus	swertung des Versuchs 255 zur Röntgenspektrometrie	4
	4.1	Pythonmodule	4
	4.2	Aufgabe 1: Analyse des LiF-Kristalls	5
		4.2.1 Röntgenspektrum LiF-Kristall	5
		4.2.2 a) Extrapolation der Grenzwellenlänge λ_{gr} und der Planck kosntante h	
		4.2.3 b) Analyse der K_{α} - und K_{β} -Linien	9
			15
	4.3	J = 1 = 1 = 1 = 1 = 1 = 1 = 1 = 1 = 1 =	
		4.3.1 Röntgenspektrum NaCl-Kristall	
		θ " β	19
		4.3.3 Gitterkonstante von NaCl	
		4.3.4 Bestimmung der Avodagadro-Konstante N_A	22
5	Dis	kussion	23

1 Ziel des Versuchs

Ziel des Versuchs ist es, sich mit dem Spektrum von Röntgenstrahlen vertraut zu machen. Hierzu wird mit einem LiF Kristall das Röntgenspektrum einer Molybdän-Anode aufgenommen und das Planksche Wirkungsquantum h geschätzt. Außerdem werden die Wellenlängen der K_{α} - und K_{β} -Lineien bestimmt. Zusätzlich wird bei einem festen Bragg-Winkel die Intensität in Abhängigkeit von der Spannung gemessen. Mit einem NaCl Kristall wird dessen Gitterkonstante und die Avogadrozahl bestimmt.

2 Grundlagen

An der kathode dder Röntgenröhre werden ddurch Glühemission freie Elektronen erzeugt, die mittels einer Beschleunigungsspannung zur Molybdän-Anode hin beschleunigt werden. Beim Aufprall werden die Eletronen durch das Coulombfeld der Atome abgebremst. Die dabei abgegebene Energie wird in Form von elektromagnetischen Wellen abgestrahlt. Diese liefern das sogenannte Bremsspektrum. An der kurzwelligen Seite setzt das Spektrum erst oberhalb einer Grenzwellenlänge λ_{gr} ein, welche aus der Energieerhaltung folgt, wenn die gesammte Energiee in das Photon übertragen wird:

$$E = e \cdot U_B = h \cdot \frac{c}{\lambda_{gr}} \tag{1}$$

$$\Rightarrow \lambda_{gr} = \frac{h c}{e U_B} \tag{2}$$

worin h das Plancksche Wirkungsquantum, c die Lichtgeschwindigkeit, e die Elementarladung und U_B die Beschleunigungspannung ist. Bei hohen Spannungen können die Elektronen das Anodenmaterial ionisieren, d.h. es werden Elektronen aus der innersten Hülle herausgeschlagen werden und Hüllenelektronen aus äußeren Schalen rücken nach, wobei die Energiedifferenz in einem Photon mit einer charakteristischen Wellenlänge abgestrahlt wird, so entsteht ein diskretes, materialspezisfisches Spektrum, welches das Bremsspektrum überlagert. Das disktrete Spektrum kann Serien zugeordnet werden, je nachdem was für ein Übergang erfolgt. Findet der Übergang stets auf die innerste Schale statt, so wird die zugehörige Serie K-Serie genannt. K_α -Strahlung entsteht bei einem Übergang von der L-Schale. K_β -Strahlung beim Übergang von der K-Schale. Die Energie dieser Linie lässt sich mithilfe des Moseleyischen Gesetztes abschätzen:

$$E_{n \to m} = h \, c \cdot R_{\infty} (Z - A)^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \tag{3}$$

mit der Rydbergkonstanten R_{∞} , der Kernladungszahl Z, der Abschirmungskonstanten A (≈ 1 für K_{α}) und den Quantenzahlen n und m. für Molybdän erhält man $E_{K_{\alpha}} \approx 17,2 keV$.

2.1 Bragg-Reflexion

Da die Atome in einem Kristall periodisch angeordnet sind und die Abstände zwischen den Atomen von der Größenordnung der Röntgenwellenlänge sind, eignen sich solche Kristalle als Beugungsgitter für Röntgenstrahlen. Diese Beugung wird Bragg-Beugung genannt. Das Bragg'sche Gesetz für die Beugungswinkel-Wellenlänge-Beziehung lautet:

$$2d \cdot \sin(\theta) = n\lambda \tag{4}$$

Hier ist θ der Beugungswinkel, d der Netzebenenabstand (in unserem Fall von kubischen Elementargittern gilt d=a/2) und λ die Wellenlänge. Die Beziehung folgt daraus, dass an der Oberläche des Kristalls relektierte Strahlen mit den an tieferen Netzebenen reflektierten Strahlen genau dann konstruktiv interferieren, wenn der Ganguntrschied:

$$\Delta s = 2dsin(\theta) \tag{5}$$

ein vielfaches der Wellenlänge beträgt.

Das Spektrum einer Röntgenquelle kann mit der Drehkristall methode ausgemessen werden. Dabei wird durch Drehen des Kristalls der Einfallwinkel θ variiert und die reflektirte Strahlung mit einem Zählrohr gemessen. Damit kann die Intensität der Strahlung in Abhängigkeit vom Beugungswinkel und ddamit der Wellenlänge gemessen werden und man erhält das Spektrum. Kristalle sind aus sogeenanntn Elementarzellen aufgeebaut, die sich periodisch wiederholen und im Fall von LiF und NaCl kubisch mit Seitenläng ea sind. Diee Avogadrozahl lässt sich bestimmen nach:

$$N_A = A_{el} \; \frac{V_{mol}}{V_{el}} \tag{6}$$

wobei A_{el} die Anzahl der zur Elementarzeelle gehörenden Atome (hier jeweils 4 für LiF und NaCl), und V_{mol} dasd Molvolumen und V das Volumen der Elementarzellee ist. Mit d=a/2 folgt für den verwendeten Kristall mit $A_{el}=4$ und $V_{el}=2d^3$:

$$N_A = 4 \frac{V_{mol}}{2d^3} = 4 \frac{M_{mol}}{\rho \cdot 2d^3} = \frac{1}{2} \frac{M_{mol}}{\rho d^3}$$
 (7)

Mit dem Molgewicht M_{mol} , der Dichte ρ und Netzabstand d

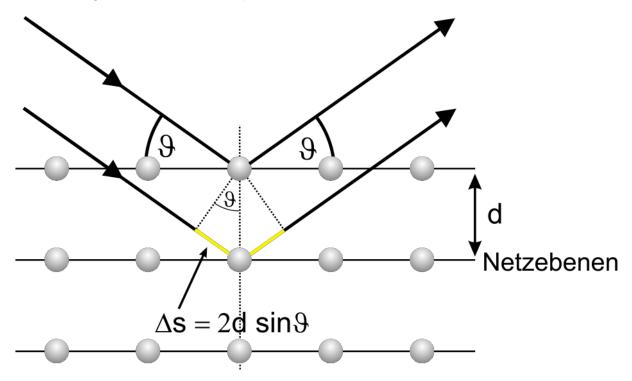


Figure 1: Bragg-Reflexion and einem Kristall

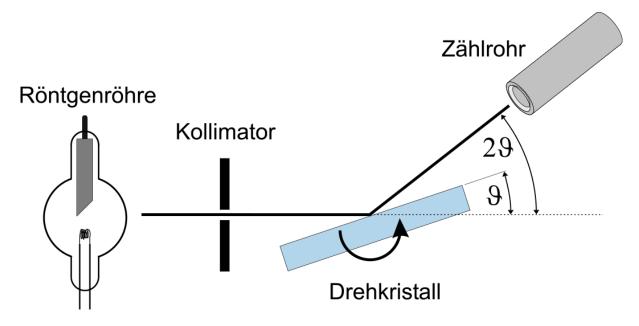


Figure 2: Drehkristallmethode zur Messung des Spektrums einer Röntgenröhre

3 Durchführung

3.1 Messung des Röntgenspektrums mit einem LiF-Kristall

Zunächst ist das Röntgenspektrum der Molybdän-Anode zu messen, dazu wird der LiF-Kristall auf dem Targethalter montiert und das Spektrum zwischen $\beta=3^\circ$ und 22° in $\Delta\beta=0.2^\circ$ Schritten am Computer gemessen. Aus dieser ersten Messung sollen nun grob die K_α - und K_β -Linien erster und zweitr Ordnung bestimmt werden, um die Messung in diesem Bereich über eine längere Zeit und kleineren Schritten $\Delta\beta=0.1^\circ$ zu wiederholen. Anschließend wird in einem festen Winkel von $\beta=7.5^\circ$ für unterschiedliche Spannungen $U_B=20$ bis 35 kV in $\Delta U_B=1$ kV Schritten die Zählrate gemessen.

3.2 Messung des Röntgenspektrums mit einem NaCl-Kristall

Die Messung am LiF-Kristall werden nun am NaCl-Krsitall in einem Winkelbereich von $\beta=3^{\circ}$ und 18°

3.3 Röntgenaufnahmen

In diesem Teil des Versuchs sollen unterschiedliche Objekte (Armbanduhr, Taschenrechner ect. Untersucht um Röntgenaufnahmen von diesen aufzunehmen. Dazu müssen Kollimator und Kristallhalter aus der Apparutur abmontiert werden.

4 Auswertung des Versuchs 255 zur Röntgenspektrometrie

4.1 Pythonmodule

```
[1]: #Importieren von allen benötigten Modulen

%matplotlib inline
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from scipy.optimize import curve_fit
from scipy.stats import chi2
import io
import matplotlib
matplotlib.rcParams.update({'font.size': 20})
```

```
plt.rcParams["figure.figsize"] = 16, 9
```

4.2 Aufgabe 1: Analyse des LiF-Kristalls

4.2.1 Röntgenspektrum LiF-Kristall

Messdaten Einlesen

```
[2]: daten = open('Data/plot_a.txt').read().replace(',','.')
beta1, counts1 = np.loadtxt(io.StringIO(daten), unpack=True)
beta1=beta1*(2*np.pi/360)
# print (len(beta1), len(counts1))
counts1_err=np.sqrt(counts1)
```

Plots der Betrachteten Messdaten

```
[3]: plt.errorbar(beta1,counts1,yerr=counts1_err,capsize=3,ecolor='black',

→label='Messwerte mit \nstat. Fehlern')

plt.title(r'Röntgenspektrum LiF')

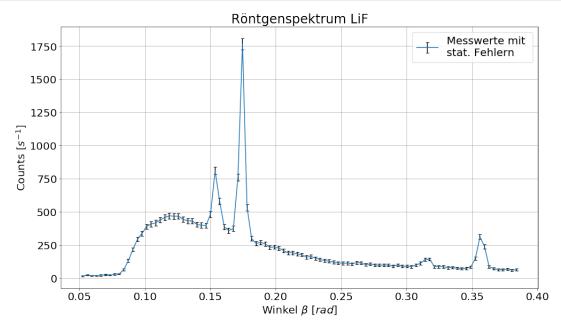
plt.xlabel(r'Winkel $ \beta $ [$rad$]')

plt.ylabel(r'Counts [$s^{-1}$]')

plt.legend(loc='best')

plt.grid(True)

plt.show()
```



4.2.2 a) Extrapolation der Grenzwellenlänge λ_{gr} und der Planck kosntante h

Schnittpunkt β_0 Untergrund und Anstieg

```
[4]: #Verwendete Fit-Funktionen
def linear(x,a,b):
    return a*x+b

#Fit der Messwerte

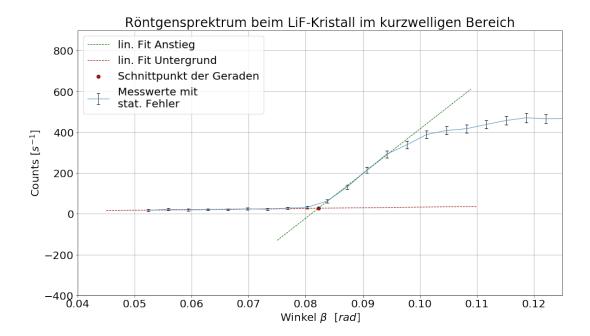
#Anstieg
popt1,pcov1=curve_fit(linear,beta1[9:13],counts1[9:13],sigma=counts1_err[9:13])
```

Für den Schnittpunkt der beiden Geraden und damit beta_0 folgt: beta_0 = 0.08221 ± 0.00392 [rad]

Visualisierung der betrachteten Geraden

```
[5]: plt.errorbar(beta1, counts1, yerr=counts1_err,linewidth=0.

→8, capsize=3, ecolor='black',
                  label='Messwerte mit \nstat. Fehler')
     plt.plot(np.linspace(0.075,0.109,2),linear(np.linspace(0.075,0.109,2),*popt1),
              linewidth=1,linestyle='--',
              color='darkgreen',label='lin. Fit Anstieg')
     plt.plot(np.linspace(0.045,0.11,2),linear(np.linspace(0.045,0.11,2),*popt2),
              linewidth=1,linestyle='--',
              color='darkred',label='lin. Fit Untergrund')
     plt.xlabel(r'Winkel $ \beta$ [$rad$]')
     plt.ylabel(r'Counts [$s^{-1}$]')
     plt.title(r'Röntgensprektrum beim LiF-Kristall im kurzwelligen Bereich')
     plt.xlim(0.04,0.125)
     plt.ylim(-400,900)
     plt.grid(True)
     #Einzeichnen des Schnittpunktes
     plt.scatter(beta0, linear(beta0,*popt1),color = 'red',
                 marker='o',edgecolor='black',label='Schnittpunkt der Geraden')
     plt.legend(loc='best')
     plt.show()
```



Güte des Fits des Anstiegs

Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits: $chi^2 = 0.4012916762567657$ $chi^2_red = 0.20064583812838285$

Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: 82.0 %

Güte des Fits des Untergrunds

```
[7]: chi_squared2=np.sum((linear(beta1[:8],*popt2)-counts1[:8])**2/counts1_err[:8]**2)

#Freiheitsgrade
dof2=len(beta1[:8])-2

chi_squared2_red=chi_squared2/dof2

print('Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits:')
```

```
print('chi^2= ' + str(chi_squared2))
print('chi^2_red= ' + str(chi_squared2_red))
print()

#Fitwahrscheinlichkeit
prob2=round(1-chi2.cdf(chi_squared2,dof2),2)*100

print('Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: ' + str(prob2) + ' %')
```

Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits: chi^2= 1.1377083565425403 chi^2_red= 0.18961805942375673

Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: 98.0 %

Grenzwellenlänge λ_{gr} aus Schnittpunkt β_0

```
[8]: d_LiF=201.4e-12 #m
d_LiF_err=0.05e-12

lambda_gr=2*d_LiF*np.sin(beta0)
lambda_gr_err=2*np.sqrt((d_LiF*np.cos(beta0)*beta0_err)**2+(d_LiF_err*np.

→sin(beta0))**2)

print('Daraus folgt mit der Bragg-Gleichung für die Grenzwellenlänge:')
print('lambda_gr = ' + str(round(lambda_gr,15)) + ' ± '

+ str(round(lambda_gr_err,15)) + ' [m]')
```

Daraus folgt mit der Bragg-Gleichung für die Grenzwellenlänge: lambda_gr = $3.3079e-11 \pm 1.573e-12$ [m]

$$\lambda_{gr} = (33.079 \pm 1.573)$$
 [pm]

Plancksches Wirkungsquantum h aus λ_{gr}

```
Für das Plancksche Wirkungsquantum h folgt: h = (6.187532245449362e-34 \pm 2.9424559959610894e-35) \; \text{Js} \\ damit liegen wir im 1.49 sigma-Bereich vom Literaturwert
```

$$h = (6.188 \pm 0.294) \cdot 10^{-34} \text{ [Js]}$$

 $h_{lit} = 6.62607015 \cdot 10^{-34} \text{ [Js]}$
 $\Rightarrow 1.49\sigma \text{ Abweichung}$

Spektrum zweiter Ordnung mit dem Bragg'schen Gesetz folgt die Beziehung zwischen θ_1 und θ_2 zu:

$$\frac{\sin(\theta_1)}{\sin(\theta_2)} = \frac{n_1}{n_2} = \frac{1}{2}$$

```
[10]: theta2=np.arcsin(2*np.sin(beta0))
    theta2_err=2*np.cos(beta0)*(2*np.cos(2*beta0)-1)**(-0.5)*beta0_err
    print('Das Spektrum zweiter Ordnung setzt bei folgendem Winkel ein:')
    print('theta2 = ' + str(theta2) + ' ± ' + str(theta2_err) + ' [rad]')
```

Das Spektrum zweiter Ordnung setzt bei folgendem Winkel ein: theta2 = 0.1649918863541537 ± 0.007917995139816284 [rad]

$$\theta_2 = (0.165 \pm 0.008)$$
 [rad]

4.2.3 b) Analyse der K_{α} - und K_{β} -Linien

Importieren der Messdaten

```
[11]: daten = open('Data/10 alph beta.txt').read().replace(',',','.')
      beta2, counts2 = np.loadtxt(io.StringIO(daten), unpack=True)
      beta2=beta2*(2*np.pi/360)
      #print (len(beta2), len(counts2))
      counts2_err=np.sqrt(counts2)
      daten = open('Data/20 alpha.txt').read().replace(',','.')
      beta3, counts3 = np.loadtxt(io.StringIO(daten), unpack=True)
      beta3=beta3*(2*np.pi/360)
      #print (len(beta3), len(counts3))
      counts3_err=np.sqrt(counts3)
      daten = open('Data/20 beta.txt').read().replace(',','.')
      beta3_1, counts3_1 = np.loadtxt(io.StringIO(daten), unpack=True)
      beta3_1=beta3_1*(2*np.pi/360)
      #print (len(beta3_1), len(counts3_1))
      counts3_1_err=np.sqrt(counts3_1)
      beta3 = np.array([*beta3, *beta3_1])
      counts3 = [*counts3, *counts3_1]
      counts3_err = [*counts3_err, *counts3_1_err]
      #print (len(beta3), len(counts3))
      #daten = open('Data/forged 20 alph beta.txt').read().replace(',','.')
      #beta3, counts3 = np.loadtxt(io.StringIO(daten), unpack=True)
      \#beta3=beta3*(2*np.pi/360)
      #print (len(beta3), len(counts3))
      #counts3_err=np.sqrt(counts3)
```

```
Fit der Messdaten
```

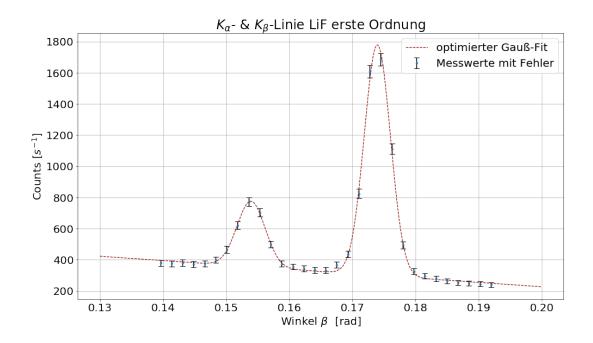
```
[12]: def gaussian(x, A, mu, sig, y0):
return y0 + (A*np.exp(-(x-mu)**2/(2*sig**2)))
```

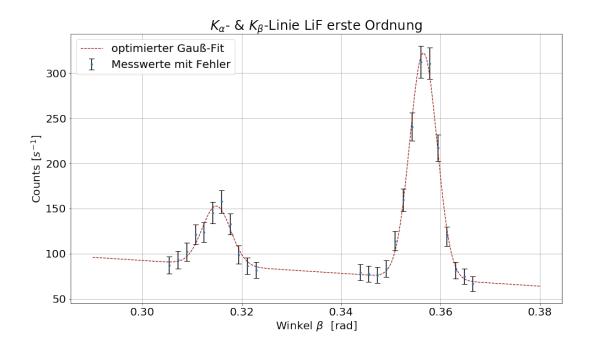
Plot der Messdaten

```
[13]: plt.errorbar(beta2, counts2, yerr=counts2_err, linestyle='', marker='.',
                   ecolor = 'black', capsize = 5, label='Messwerte mit Fehler')
      plt.plot(np.linspace(0.13,0.20,500),gauß_optimiert(np.linspace(0.13,0.
       \rightarrow20,500),*popt3),
               linewidth=1.2, linestyle='--', color='darkred', label='optimierter_

Gauß-Fit')
      plt.xlabel(r'Winkel $ \beta$ [rad]')
      plt.ylabel(r'Counts [$s^{-1}$]')
      plt.title(r'$K_\alpha$- & $K_\beta$-Linie LiF erste Ordnung')
      plt.grid(True)
      plt.legend(loc='best')
      plt.show()
      print('\n')
      plt.errorbar(beta3, counts3, yerr=counts3_err, linestyle='', marker='.',
                   ecolor = 'black', capsize = 5, label='Messwerte mit Fehler')
      plt.plot(np.linspace(0.29,0.38,500),gauf_optimiert(np.linspace(0.29,0.
       38,500),*popt4),
               linewidth=1.2, linestyle='--', color='darkred', label='optimierter⊔

Gauß-Fit')
      plt.xlabel(r'Winkel $ \beta$ [rad]')
      plt.ylabel(r'Counts [$s^{-1}$]')
      plt.title(r'$K_\alpha$- & $K_\beta$-Linie LiF erste Ordnung')
      plt.grid(True)
      plt.legend(loc='best')
      plt.show()
```





```
Güte der Fits
[14]: print('---- erste Ordnung -----')
    print()
    chi_squared3=np.sum((gau%_optimiert(beta2,*popt3)-counts2)**2/counts2_err**2)

#Freiheitsgrade
dof3=len(beta2)-8
```

```
chi_squared3_red=chi_squared3/dof3
print('Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits:')
print('chi_squared= ' + str(chi_squared3))
print('chi_squared_red= ' + str(chi_squared3_red))
print()
#Fitwahrscheinlichkeit
prob3=round(1-chi2.cdf(chi_squared3,dof3),2)*100
print('Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: ' + str(prob3) + ' %')
print()
print('---- zweite Ordnung ----')
print()
chi_squared4=np.sum(np.power((gau&_optimiert(beta3,*popt4)-counts3),2)/
                     (np.power(counts3_err,2)))
#Freiheitsgrade
dof4 = len(beta3) - 8
chi_squared4_red=chi_squared4/dof4
print('Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits:')
print('chi_squared= ' + str(chi_squared4))
print('chi_squared_red= ' + str(chi_squared4_red))
print()
 #Fitwahrscheinlichkeit
prob4=round(1-chi2.cdf(chi_squared4,dof4),2)*100
print('Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: ' + str(prob4) + ' %')
---- erste Ordnung -----
Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits:
chi_squared= 14.562812770384156
chi_squared_red= 0.6331657726253981
Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: 91.0 %
---- zweite Ordnung -----
Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits:
chi_squared= 7.521827301313788
chi_squared_red= 0.44246042948904635
Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: 98.0 %
```

Bestimmung Winkel der K_{α} - **und** K_{β} -Linien Die gesuchtengesuchten Winkel θ_{α} , θ_{β} entsprechen den Mittelwerten μ_1 μ_2 der Gaußkurven

```
[15]: print('----erste Ordnung -----')
    print()
    print('K_alpha_1: ' + str(popt3[6]) + ' ± ' + str(popt3[7]) + ' [rad]' )
    print('K_beta_1: ' + str(popt3[3]) + ' ± ' + str(popt3[4]) + ' [rad]' )
    print()
    print('---- zweite Ordnung -----')
    print()
```

Bestimmung der Wellenlängen λ_{α} , λ_{β} der K_{α} - und K_{β} -Linien

```
[16]: lambdaK_beta1=2*d_LiF*np.sin(popt3[3])
      lambdaK_beta1_err=2*np.sqrt((d_LiF*np.cos(popt3[3])*popt3[4])**2+
                                  (d_LiF_err*np.sin(popt3[3]))**2)
      lambdaK_alpha1=2*d_LiF*np.sin(popt3[6])
      lambdaK_alpha1_err=2*np.sqrt((d_LiF*np.cos(popt3[6])*popt3[7])**2+
                                   (d_LiF_err*np.sin(popt3[6]))**2)
      print('----erste Ordnung -----')
      print()
      print('Daraus ergeben sich die korrespondierenden Wellenlängen')
      print('K_alpha_1: ' + str(lambdaK_alpha1*1e12) + ' ± '
            + str(lambdaK_alpha1_err*1e12) + ' [pm]')
      print('K_beta_1: ' + str(lambdaK_beta1*1e12) + ' ± '
            + str(lambdaK_beta1_err*1e12) + ' [pm]' )
      lambdaK_beta2=d_LiF*np.sin(popt4[3])
      lambdaK_beta2_err=np.sqrt((d_LiF*np.cos(popt4[3])*popt4[4])**2+
                                (d_LiF_err*np.sin(popt4[3]))**2)
      lambdaK_alpha2=d_LiF*np.sin(popt4[6])
      lambdaK_alpha2_err=np.sqrt((d_LiF*np.cos(popt4[6])*popt4[7])**2+
                                 (d_LiF_err*np.sin(popt4[6]))**2)
      print()
      print('---- zweite Ordnung ----')
      print()
      print('Daraus ergeben sich die korrespondierenden Wellenlängen')
      print('K_alpha_2: ' + str(lambdaK_alpha2*1e12) + ' ± '
            + str(lambdaK_alpha2_err*1e12) + ' [pm]')
      print('K_beta_2: ' + str(lambdaK_beta2*1e12) + ' ± '
            + str(lambdaK_beta2_err*1e12) + ' [pm]' )
```

```
print() -----erste Ordnung -----  
Daraus ergeben sich die korrespondierenden Wellenlängen  
K_alpha_1: 69.72181724627963 ± 0.8225740728051693 [pm]  
K_beta_1: 61.764592774243354 ± 0.8866182597670368 [pm]  
----- zweite Ordnung -----  
Daraus ergeben sich die korrespondierenden Wellenlängen  
K_alpha_2: 70.3012757400618 ± 0.5181114342955249 [pm]  
K_beta_2: 62.37874521994594 ± 0.5509268942835379 [pm]  
\lambda_{\beta}^1 = (69.722 \pm 0.823) [pm] 
\lambda_{\beta}^2 = (69.765 \pm 0.887) [pm] 
\lambda_{\alpha}^2 = (70.301 \pm 0.518) [pm] 
\lambda_{\beta}^2 = (62.379 \pm 0.551) [pm]
```

Vergleich mit Literaturwerten

```
[17]: lambdaK_alphalit=71.1e-12 #m
      lambdaK_betalit=63.1e-12 #m
      diffalpha1=np.abs(lambdaK_alpha1-lambdaK_alphalit)
      diffbeta1=np.abs(lambdaK_beta1-lambdaK_betalit)
      print('----erste Ordnung -----')
      print()
      print('Der Vergleich mit den Literaturwerten liefert:')
      print()
      print('lambdaK_alpha1 = '+str(diffalpha1*1e12) + ' # '+str(lambdaK_alpha1_err*1e12)+
            ' [pm] \n=> sigma = '+str(round(diffalpha1/lambdaK_alpha1_err,2)))
      print('lambdaK_beta1 = '+str(diffbeta1*1e12)+' ± '+str(lambdaK_beta1_err*1e12)+
            ' [pm] \n=> sigma = '+str(round(diffbeta1/lambdaK_beta1_err,2)))
      diffalpha2=np.abs(lambdaK_alpha2-lambdaK_alphalit)
      diffbeta2=np.abs(lambdaK_beta2-lambdaK_betalit)
      print()
      print('---- zweite Ordnung ----')
      print()
      print('Der Vergleich mit den Literaturwerten liefert:')
      print()
      print('lambdaK_alpha2 = '+str(diffalpha2*1e12) + ' ± '+str(lambdaK_alpha2_err*1e12)+
            ' [pm] \n=> sigma = '+str(round(diffalpha2/lambdaK_alpha2_err,2)))
      print('lambdaK_beta2 = '+str(diffbeta2*1e12) + ' = '+str(lambdaK_beta2_err*1e12)+
            ' [pm] \n=> sigma = '+str(round(diffbeta2/lambdaK_beta2_err,2)))
      print()
```

----erste Ordnung -----

Der Vergleich mit den Literaturwerten liefert:

```
lambdaK_alpha1 = 1.3781827537203795 ± 0.8225740728051693 [pm]
=> sigma = 1.68
lambdaK_beta1 = 1.3354072257566372 ± 0.8866182597670368 [pm]
=> sigma = 1.51
---- zweite Ordnung ----
Der Vergleich mit den Literaturwerten liefert:
lambdaK_alpha2 =0.7987242599382116 ± 0.5181114342955249 [pm]
=> sigma = 1.54
lambdaK_beta2 =0.7212547800540509 ± 0.5509268942835379 [pm]
=> sigma = 1.31
```

Halbwersbreite für K_{α} in erster Ordnung

$$FWHM = 2 \cdot \sqrt{2 \ln(2)} \cdot \sigma \approx 2.4 \sigma$$

Aus dem Fit folgt für die Halbwertsbreite: FWHM_K_alpha1 = 0.004881491532639614 ± 7.294787730890395e-05 [rad] = 1.9662569803491743 ± 0.02938710946201914 [pm]

FWHM =
$$2\sqrt{2 \ln 2} \cdot \sigma$$

= $(4.881 \pm 0.073) \cdot 10^{-3}$ [rad]
= (1.966 ± 0.029) [pm]

4.2.4 c) Bestimmung der Einsatzspannung U_E und erneute Bestimmung von h

Einlesen der Messdaten

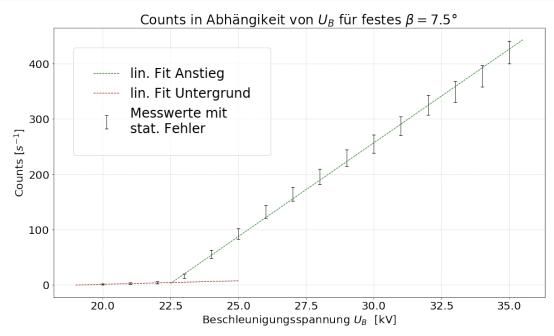
```
[20]: daten = open('Data/Spannungen LiF.txt').read()
U, counts4 = np.loadtxt(io.StringIO(daten), unpack=True)
#print (len(U), len(counts4))
counts4_err=np.sqrt(counts4)
```

Messdaten plot und Fit

```
[21]: #linearer Anstieg
popt5,pcov5=curve_fit(linear,U[3:],counts4[3:],sigma=counts4_err[3:])

#Untergrund
popt6,pcov6=curve_fit(linear,U[:3],counts4[:3],sigma=counts4_err[:3])
```

```
#Plot der Messdaten
plt.errorbar(U, counts4, yerr=counts4_err,linestyle='',
             linewidth=0.8,capsize=3,ecolor='black',
             label='Messwerte mit \nstat. Fehler')
plt.xlabel(r'Beschleunigungsspannung $U_B$ [kV]')
plt.ylabel(r'Counts [$s^{-1}$]')
plt.title(r'Counts in Abhängikeit von $U_B$ für festes $\beta=7.5$°')
plt.grid(ls='dotted')
#Fit linearer Anstieg
plt.plot(np.linspace(22.5,35.5,2),linear(np.linspace(22.5,35.5,2),*popt5),
         linewidth=1,linestyle='--', color='darkgreen',label='lin. Fit Anstieg')
#Fit Untergrund
plt.plot(np.linspace(19,25,2),linear(np.linspace(19,24,2),*popt6),
         linewidth=1,linestyle='--', color='darkred',label='lin. Fit Untergrund')
plt.legend(frameon=True,fontsize='large', borderpad=1.5, borderaxespad=1.5,loc=2)
plt.show()
```



```
[22]: #Güte des Fits des Anstiegs
    chi_squared5=np.sum((linear(U[3:],*popt5)-counts4[3:])**2/counts4_err[3:]**2)

#Freiheitsgrade
    dof5=len(counts4[3:])-2

    chi_squared5_red=chi_squared5/dof5

    print('Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits:')
    print('chi_squared= ' + str(chi_squared5))
    print('chi_squared_red= ' + str(chi_squared5_red))
    print()
```

```
#Fitwahrscheinlichkeit
      prob5=round(1-chi2.cdf(chi_squared5,dof5),2)*100
      print('Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: ' + str(prob5) + ' %')
     Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits:
     chi_squared= 3.738068440877467
     chi_squared_red= 0.33982440371613337
     Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: 98.0 %
[23]: #Güte des Fits des Untergrundes
      chi_squared6=np.sum((linear(U[:3],*popt6)-counts4[:3])**2/counts4_err[:3]**2)
      #Freiheitsgrade
      dof6=len(counts4[:3])-2
      chi_squared6_red=chi_squared6/dof6
      print('Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits:')
      print('chi_squared= ' + str(chi_squared6))
      print('chi_squared_red= ' + str(chi_squared6_red))
      print()
      #Fitwahrscheinlichkeit
      prob6=round(1-chi2.cdf(chi_squared6,dof6),2)*100
      print('Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: ' + str(prob6) + ' %')
     Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits:
     chi_squared= 0.037878787878788484
     chi_squared_red= 0.037878787878788484
     Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: 85.0 %
     Bestimmung der Grenzspannung U_{gr} = U_E
[24]: #Schnittpunkt der beiden Geraden ergibt Spannungsgrenze
      UE=(popt6[1]-popt5[1])/(popt5[0]-popt6[0])
      UE_err=np.sqrt(pcov6[1,1]/(popt5[0]-popt6[0])**2+
                     pcov5[1,1]/(popt5[0]-popt6[0])**2+
                     ((popt6[1]-popt5[1])*pcov5[0,0]**0.5/(popt5[0]-popt6[0])**2)**2+
                     ((popt6[1]-popt5[1])*pcov6[0,0]**0.5/(popt5[0]-popt6[0])**2)**2)
      print('Für den Schnittpunkt der beiden Geraden und damit UE folgt:')
      print('UE = ' + str(UE) + ' ± ' + str(UE_err) + ' kV')
     Für den Schnittpunkt der beiden Geraden und damit UE folgt:
     UE = 22.573812665968376 \pm 0.555365114387099 kV
                                  U_{gr} = U_E = (22.574 \pm 0.555) [kV]
     Bestimmung von h aus Einsatzspannung U_E
```

```
[25]: #Wellenlänge für theta=7.5°
      lambda_U=2*d_LiF*np.sin(7.5*(2*np.pi)/360)
      lambda_U_err=2*d_LiF_err*np.sin(7.5*(2*np.pi)/360)
      #Daraus folgt mit UE und Gl.(1):
```

```
h2=lambda_U*e*(UE*1e3)/c
h2_err=h2*np.sqrt((lambda_U_err/lambda_U)**2+(UE_err/UE)**2)

print('Wir erhalten aus der Bestimmung der Betriebsspannung:')
print('h = ' + str(h2) + ' ± ' + str(h2_err) + ' [Js]')
print()

#Vergleich mit dem Literaturwert
h_lit=6.62607015e-34 #Js #https://en.wikipedia.org/wiki/Planck_constant

sig = abs(h2-h_lit)/np.sqrt((h2_err)**2)
print('damit liegen wir im ' + str(round(sig,3)) + 'sigma-Bereich vom_

Literaturwert')
```

Wir erhalten aus der Bestimmung der Betriebsspannung: $h = 6.342955032056667e-34 \pm 1.5605849794556506e-35$ [Js]

damit liegen wir im 1.814sigma-Bereich vom Literaturwert

$$h = (6.343 \pm 1.561) \cdot 10^{-34} \text{ [Js]}$$

 $h_{lit} = 6.62607015 \cdot 10^{-34} \text{ [Js]}$
 $\Rightarrow 1.814\sigma \text{ Abweichung}$

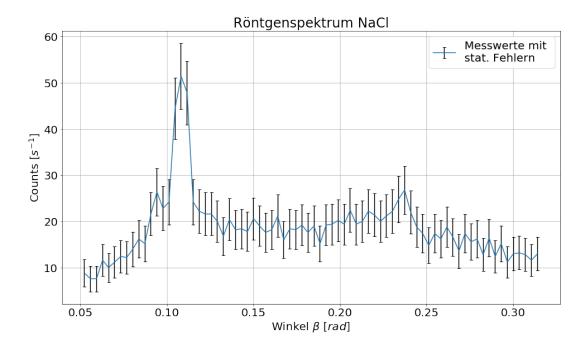
4.3 Aufgabe 2: Analyse des NaCl-Kristalls

4.3.1 Röntgenspektrum NaCl-Kristall

Einlesen der Messdaten

```
[26]: daten = open('Data/plot_NaCl.txt').read().replace(',','.')
beta4, counts5 = np.loadtxt(io.StringIO(daten), unpack=True)
beta4=beta4*(2*np.pi/360)
#print (len(beta4), len(counts5))
counts5_err=np.sqrt(counts5)
```

Plot der Messdaten

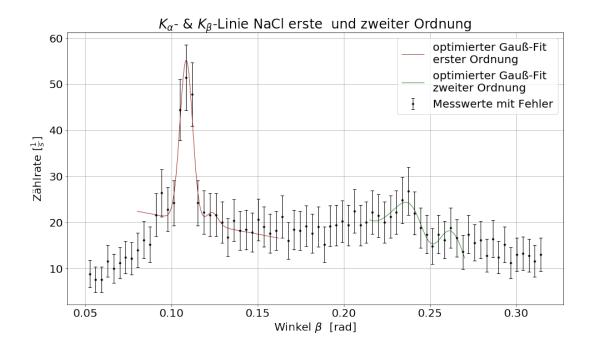


4.3.2 Ermittlung der Wellenlänge der K_{α} - und K_{β} -Linien

```
Fit der Messdaten
```

Plot der Messdaten

```
[33]: plt.errorbar(beta4, counts5, yerr=counts5_err,
                   linewidth=1,linestyle=' ',marker='.',color='black',capsize=3,
                   label='Messwerte mit Fehler')
      x=np.linspace(0.08,0.162,1000)
      plt.plot(x,gauß_optimiert(x,*popt7),
               linewidth=0.8,color='darkred',
               label='optimierter Gauß-Fit \nerster Ordnung')
      x=np.linspace(0.215,0.27,1000)
      plt.plot(x,gau%_optimiert(x,*popt8),
               linewidth=0.8,color='darkgreen',
               label='optimierter Gauß-Fit \nzweiter Ordnung')
      plt.xlabel(r'Winkel $\beta$ [rad]')
      plt.ylabel(r'Zählrate [$\frac{1}{s}$]')
      plt.title(r'$K_\alpha$- & $K_\beta$-Linie NaCl erste und zweiter Ordnung')
      plt.grid(True)
      plt.legend(loc='best')
      plt.show()
```



Güte des Fits

```
[34]: chi_squared7=np.sum((gauß_optimiert(beta4[mask1],*popt7)-counts5[mask1])**2/
                         counts5_err[mask1]**2)
      #Freiheitsgrade
     dof7=len(beta4[mask1])-8
     chi_squared7_red=chi_squared7/dof7
     print('---- erste Ordnung ----')
     print()
     print('Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits:')
     print('chi_squared= ' + str(chi_squared7))
     print('chi_squared_red= ' + str(chi_squared7_red))
     print()
      #Fitwahrscheinlichkeit
     prob7=round(1-chi2.cdf(chi_squared7,dof7),2)*100
     print('Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: ' + str(prob7) + ' %')
     print()
     chi_squared8=np.sum((gauß_optimiert(beta4[mask2],*popt8)-counts5[mask2])**2/
       #Freiheitsgrade
     dof8=len(beta4[mask2])-8
     chi_squared8_red=chi_squared8/dof8
     print('---- zweite Ordnung ----')
     print()
```

```
print('Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits:')
      print('chi_squared= ' + str(chi_squared8))
      print('chi_squared_red= ' + str(chi_squared8_red))
      print()
      #Fitwahrscheinlichkeit
      prob8=round(1-chi2.cdf(chi_squared8,dof8),2)*100
      print('Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: ' + str(prob8) + ' %')
      print()
     ---- erste Ordnung -----
     Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits:
     chi_squared= 1.6875994953420088
     chi_squared_red= 0.33751989906840174
     Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: 89.0 %
     ---- zweite Ordnung -----
     Wir erhalten die nachfolgenden Werte für die Güte des Fits:
     chi_squared= 1.0464978654824737
     chi_squared_red= 0.11627754060916375
     Die Fitwahrscheinlichkeit beträgt: 100.0 %
     Lage der K_{\alpha}- und K_{\beta}-Linien
[35]: #gesuchte Winkel entsprechen Mittelwerten der Gaußkurven
      print('---- erste Ordnung -----')
      print()
      print('K_alpha_1: ' + str(popt7[6]) + ' ± ' + str(popt7[7]) + ' [rad]' )
      print('K_beta_1: ' + str(popt7[3]) + ' ± ' + str(popt7[4]) + ' [rad]' )
      print()
      print('---- zweite Ordnung ----')
      print()
      print('K_alpha_2: ' + str(popt8[6]) + ' ± ' + str(popt8[7]) + ' [rad]' )
      print('K_beta_2: ' + str(popt8[3]) + ' ± ' + str(popt8[4]) + ' [rad]')
      print()
     ---- erste Ordnung ----
     K_alpha_1: 0.1236323960646607 \pm 0.0033032925700568886 [rad]
     K_{\text{beta}_1}: 0.10846890046651929 \pm 0.003674820189155608  [rad]
     ---- zweite Ordnung -----
     K_alpha_2: 0.25051044143387075 \pm 0.006767633264233576 [rad]
     K_{\text{beta}_2}: 0.19528806362414594 \pm 0.03571527464318335 [rad]
                                       \theta_{\alpha}^{1} = (0.124 \pm 0.003) [rad]
```

 $\theta_B^1 = (0.108 \pm 0.004)$ [rad]

```
\theta_{\alpha}^2 = (0.250 \pm 0.007) [rad] \theta_{\beta}^2 = (0.195 \pm 0.004) [rad]
```

4.3.3 Gitterkonstante von NaCl

```
[38]: #Wellenlängen von K_alpha und K_beta aus Aufgabe 1b)
      #(sowohl erste, als auch zweite Ordnung)
      K_a1=lambdaK_alpha1
      K_b1=lambdaK_beta1
      K_a2=lambdaK_alpha2
      K_b2=lambdaK_beta2
      lam=np.array([K_a1,K_b1,K_a2,K_b2])
      lam_err=np.array([lambdaK_alpha1_err,lambdaK_beta1_err,
                        lambdaK_alpha2_err,lambdaK_beta2_err])
      #mit dem Bragg-Gesetz gilt für die Gitterkonstante: a=2*d=n*lam/sin(theta)
      n=np.array([1,1,2,2])
      theta=np.array([popt7[6],popt7[3],popt8[6],popt8[3]])
      theta_err=np.array([popt7[7],popt7[4],popt8[7],popt8[4]])
      a=n*lam/np.sin(theta)
      a_err=a*np.sqrt((lam_err/lam)**2+(theta_err/np.tan(theta))**2)
      a_mean=np.mean(a)
      a_mean_err=1/4*np.sum(a_err**2)**0.5
      a_mean_std=1/np.sqrt(len(a))*np.std(a)
      print('Es ergibt sich eine (gemittelte) Gitterkonstante von:')
      print('a_mean = ',round(a_mean*1e12,2),' ± ',
            round(a_mean_err*1e12,2),'(sys.) ± ',
            round(a_mean_std*1e12,2),'(stat.) [pm]')
```

```
Es ergibt sich eine (gemittelte) Gitterkonstante von: a_mean = 586.5 \pm 30.06 \text{ (sys.)} \pm 16.31 \text{ (stat.)} [pm]
```

$$a_{mean} = (586.5 \pm 46.37)$$
 [pm]

4.3.4 Bestimmung der Avodagadro-Konstante N_A

```
[39]: #Dichte NaCl
rho=2.164e3 #kg/(m**3)
rho_err=0.0005e3

#Molekulargewicht NaCl
M=58.44e-3 #kg
M_err=0.005e-3

#Nach Skript gilt: N_A=0.5*M/(rho*d**3)=4*M/(rho*a**3)
N_A=4*M/(rho*a_mean**3)
N_A=err=N_A*np.sqrt((M_err/M)**2+(rho_err/rho)**2+(3*a_mean_err/a_mean)**2)
N_A_std=N_A*3*a_mean_std/a_mean

print('Die Avogadro-Zahl ergibt sich zu:')
print('N_A = ',round(N_A*1e-23,4),' ± ',
```

Die Avogadro-Zahl ergibt sich zu: $N_A = 5.3542 \pm 0.8233$ (sys.) ± 0.4467 (stat.) 10^23 [1/mol]

Der Vergleich mit dem Literaturwert liefert: damit liegen wir im 0.966 sigma-Bereich vom Literaturwert

$$N_A = (5.354 \pm 1.270) \cdot 10^{23} \text{ [1/mol]}$$

 $N_A^{lit} = (6.02214076) \cdot 10^{23} \text{ [1/mol]}$
 $\Rightarrow 0.966\sigma \text{ Abweichung}$

5 Diskussion

In diesem Versuch wurde mithilfe der Drehkristallmethode das Röntgenspeltrum einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode analysiert. Zunächst wird aus dem Beginn des Röntgenspektrums mittels linearer Regression die Grenzwellenlänge λ_{gr} und das planck'sche Wirkungsquantum h bestimmt (s. 4.2.2). Der experimentell bestimmte Wert von

$$\lambda_{gr} = (33.079 \pm 1.573)$$
 [pm]

fürt auf die Planckkostante

$$h = (6.188 \pm 0.294) \cdot 10^{-34}$$
[Js]

Dieser weicht von dem Literaturwert

$$h_{lit} = 6.62607015 \cdot 10^{-34}$$
 [Js]

um 1.49 σ ab, besitzt somit immernoch statistische Relevanz.

Aus den Aufnahmen der K_{α} - und K_{β} -Linien erster und zweiter Orndung wurden, mithilfe von Gaußkurven-Anpassung, die entsprechenden Winkel und daraus, mit dem Bragg'schen Gesetzes die Wellenlängen abgelesen. Wir erhielten folgende Werte:

$$\lambda_{\alpha}^{1} = (69.722 \pm 0.823) \text{ [pm]}$$
 $\lambda_{\beta}^{1} = (69.765 \pm 0.887) \text{ [pm]}$
 $\lambda_{\alpha}^{2} = (70.301 \pm 0.518) \text{ [pm]}$
 $\lambda_{\beta}^{2} = (62.379 \pm 0.551) \text{ [pm]}$

Außerdem wurde die Halbwertsbreite der α -Linie bestimmt:

FWHM =
$$(4.881 \pm 0.073) \cdot 10^{-3}$$
 [rad]
= (1.966 ± 0.029) [pm]

Der Literaturwert der Wellenlängen beträgt:

$$\lambda_{\alpha} = (71.105 \pm 0.025)$$
 [pm] $\lambda_{\beta} = (63.170 \pm 0.060)$ [pm]

Daraus ergeben sich in unserenm Fall, Abweichungen die allesamt im 2σ -Bereich liegen. Daraufhin wurde eine andere Methode verwendet um das planck'sche Wirkungsquantum h zu bestimmen. Dazu wurde die Einsatzspannung des Röntgenapparates, mittels Extrapolation (s.4.2.4) bestimmt. Wir erhielten eine Einsatzspannung von:

$$U_{gr} = U_E = (22.574 \pm 0.555) \text{ [kV]}$$

Aus der wieder das planck'sche Wirkungsquantum errechnet wurde mit folgendem Wert:

$$h = (6.343 \pm 1.561) \cdot 10^{-34} \text{ [Js]}$$

 $h_{lit} = 6.62607015 \cdot 10^{-34} \text{ [Js]}$
 $\Rightarrow 1.814\sigma \text{ Abweichung}$

Dies war die letzte Messung am LiF-Kristall.

Im zweiten Teil des Versuchs wurde noch das Spektrum eines NaCl-Kristalls untersucht. Wieder wurden die Peaks gefittet und daraus folgende Winkel abgelesen:

$$\begin{array}{l} \theta_{\alpha}^{1} = (0.124 \pm 0.003) \; [rad] \\ \theta_{\beta}^{1} = (0.108 \pm 0.004) \; [rad] \\ \theta_{\alpha}^{2} = (0.250 \pm 0.007) \; [rad] \\ \theta_{\beta}^{2} = (0.195 \pm 0.004) \; [rad] \end{array}$$

Diese Werte wurden mit der vorher bestimmten Wellenlänge geplottet und daraus der Netzabstand a_{mean} bestimmt (s.4.3.3)

$$a_{mean} = (586.5 \pm 46.37)$$
 [pm]

Hieraus wurde zum Schluss noch die Avogadrokonstante bestimmt (s.4.3.4):

$$N_A = (5.354 \pm 1.270) \cdot 10^{23} \text{ [1/mol]}$$

 $N_A^{lit} = (6.02214076) \cdot 10^{23} \text{ [1/mol]}$
 $\Rightarrow 0.966\sigma \text{ Abweichung}$

Die Auswertung zeigt, dass alle relevanten Größen die Gemessen bzw. abgeleitet wurden sich $1\text{-}2\sigma$ -Bereich ihrer Literaturwerte, befinden. Gleichzeitig sind die Fehler aufgrund der Gaußfits relativ klein. Allerdings sind die Gaußfits an einigen Stellen nur bedingt Sinnvoll, da lediglich über eine Hand voll Werte gefittet wird. Es wäre durchaus Sinnvoll gewesen die Schrittweite der Winkel zu reduzieren und die Messzeit Δt zu erhöhen, dadurch hätte man mehr Messwerte an interessanten Stellen gesehen und weniger Fluktuationen in den Zählraten gehabt. Besonders bei kleinen Zählraten ist der statistische Fehler sehr groß (nach dem Gesetz der großen Zahlen). Genaure Messungen würden aber mehr Zeit in Anspruch nehmen, weshalb man sich mit Ergebnissen im $1\text{-}2\sigma$ -Bereich von Literaturwerten, durchaus zufrieden geben kann.