עקיפת בראג וספקטרוסקופיית קרני רנטגן

תאריך הניסוי: 14/07/2026

מדריכה: ד"ר הדיל ח'מיס

מעבדה 4מח 114037 – מעבדה 331, מסלול 1

דן קצוב-פייגין
323002915
dan.k@campus.technion.ac.il

יובל הירשמן
322644295
yuval-h@campus.technion.ac.il

מסמך זה נכתב באמצעות Typst, שפה לכתיבת מסמכים.

מדידת ספקטרום הפליטה של שפופרת רנטגן, כיול זוויתי של גוניומטר וחקירת עקיפת בראג בגבישים

תקציר

בניסוי זה נחקר ספקטרום הפליטה של שפופרת רנטגן בעלת אנודת מוליבדן (Mo) באמצעות עקיפת בראג על גבישי פיזור מונוכרומטיים מסוג LiF ($d = 201.4\ \mathrm{pm}$) ו־KBr ($d = 329.9\ \mathrm{pm}$). מטרות הניסוי היו זיהוי קווי הפליטה האופייניים של האנודה, כיול שגיאות נקודת האפס של הגוניומטר, וחקירת ההשפעה של קוטר הצמצם על הרזולוציה הספקטרלית.

במהלך הניסוי כיילנו את זווית האפס של הגוניומטר עבור שני הגבישים. באמצעות התאמה גאוסיאנית דו-רכיבית לקווי הפליטה של מוליבדן (בגביש LiF עם צמצם $2\mathrm{mm}$), חילצנו את אנרגיות קווי הפליטה והשווינו לערכים מהספרות. כמו כן, השווינו את ביצועי הגבישים השונים וזיהינו את סף הבליעה העצמית של ברום (Br) בגביש KBr, המפחית באופן ניכר את החזרתיות של הגביש באנרגיות גבוהות. לבסוף, השווינו בין שיטות שונות לחילוץ האנרגיות וקיבלנו שברוב המקרים שיטת העוצמה המרבית סיפקה את הערך הקרוב ביותר לזה הספרותי.

1 רקע תיאורטי

1.1 קרינת רנטגן וספקטרום הפליטה

כאשר מאיצים אלקטרונים אל אנודה קורות מספר תופעות. ראשית, האנודה מאיטה את האלקטרונים והם פולטים "קרינת בלימה" בעלת ספקטרום רציף. בנוסף, אם לאלקטרון הפוגע באנודה יש מספיק אנרגיה, הוא יכול ליינן אטום באנודה, ובכך להעיף אלקטרון מאחת מקליפות האנרגיה הפנימיות (למשל קליפה K). את מקומו יתפוס אלקטרון ברמת אנרגיה גבוהה יותר. ירידת האנרגיה תגרום לפליטת קרינה אלקטרומגנטית שתדרה תלוי בהפרש בין רמות האנרגיה:

$$h\nu = E_{\text{initial}} - E_{\text{final}}$$

כאשר h קבוע פלאנק $[\text{keV}\cdot\text{s}]$, ν תדר הקרינה $[\text{Hz}]$, ו-E $[\text{keV}]$ הן רמות האנרגיה שהאלקטרון ירד ממנה ואליה.

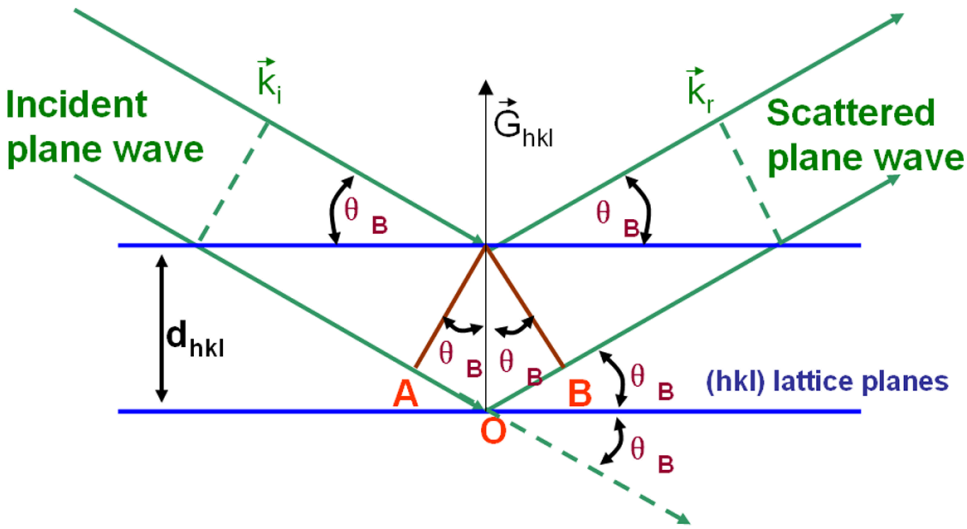
משום שאנרגיית הפוטון הנפלט תלויה רק ביסוד וברמות האנרגיה שלו, ותדרה נופל בטווח קרינת רנטגן, הקרינה הזו נקראת קרינת רנטגן האופיינית, וניתן על ידי מדידתה לאפיין רכיבי סגסוגות וחומרים אחרים. בנוסף, משום שרמות האנרגיה של אלקטרונים הן בדידות, גם ספקטרום קרינת רנטגן האופיינית הוא בדיד, וזאת בניגוד לקרינת הבלימה. לכן הסקפטרום הכולל שנפלט הוא סופרפוזיציה של ספקטרומים רציף (בלימה) ובדיד ("פיקים" אופייניים.)

1.2 חוק בראג להתאבכות קרני רנטגן

כאשר קרני רנטגן פוגעות בגביש שהמרווח בין מישוריו הוא d $[\text{pm}, \text{nm}]$, חלק מהקרניים יוחזרו מהמישור הראשון, חלק יחדרו ויוחזרו מהמישור השני, חלק יחדרו עמוק יותר ויוחזרו מהמישור השלישי, וכן הלאה. אם כל הקרניים המוחזרות יצאו מהגביש באותה פאזה תתרחש התאבכות בונה, שהתנאי אליה מוגדר על ידי חוק בראג:

$$2d\sin\theta_B = n\lambda \tag{1}$$

כאשר θ_B היא זווית בראג (זווית הפגיעה ביחס למישורי הגביש) $[\text{deg}]$, n הוא סדר העקיפה $(n = 1, 2, ...)$, ו־λ הוא אורך הגל של הקרינה.



איור 1: זווית בראג בגביש. ניתן לראות שכאשר המרחק שעוברות הקרניים החודרות הוא כפולה של אורך הגל, הן יצאו בפאזה תואמת לזאת שנכנסו בה, ותתקבל התאבכות בונה.

באמצעות המשוואה היסודית לאנרגיית פוטון, $E = \frac{hc}{\lambda}$ ניתן לקשר בין ספקטרום הקרינה האופייניות לזווית הנמדדת ולסדר העקיפה:

$$E = \frac{hcn}{2d\sin(\theta_B)}$$

כך ניתן באמצעות זיהוי סדר העקיפה ומדידת הזווית לאפיין את ספקטרום הקרינה האופיינית.

2 מערכת הניסוי ומהלך הניסוי

ביצענו את הניסוי באמצעות מערכת רנטגן של חברת PHYWE הכוללת שפופרת רנטגן בצידה השמאלי ותא מדידה בצידה הימני.

בשפופרת הרנטגן, אלקטרונים מואצים אל האנודה (אצלנו עשויה מוליבדן, Mo) ע"י מתח גבוה ($10 - 35\ \mathrm{keV}$), ובכך נפלטות קרינות בלימה ורנטגן אופייניות. ניתן לשלוט על מתח ההאצה (מעניק לכל אלקטרון יותר אנרגיה) ועל הזרם (גורם לפליטת כמות גדולה יותר של אלקטרונים). הקרינה עוברת דרך חור קטן אל תא המדידה. ניתן לשלוט על גודל החור באמצעות הלבשת צמצם (דיאפרמה) עם קטרים שונים. בכך ניתן לרכז את אלומת הקרינה ולשלוט בעוצמתה.

לאחר שהאלומה עוברת לתא המדידה היא מתנגשת בגביש ומפוזרת. הקרינה המפוזרת נקלטת על ידי מונה גייגר-מולר שמונה את הפוטונים הנקלטים. המונה והגביש ממוקמים על מד זווית (גוניומטר) שמאפשר למדוד את θ_B.

איור 2: מערכת המדידה.

2.1 מהלך הניסוי

במהלך הניסוי ביצענו את המדידות הבאות:

1. סריקה זוויתית של גביש LiF ($d = 201.4\ \mathrm{pm}$) עם צמצם של $2\mathrm{mm}$.
2. סריקה זוויתית של גביש KBr ($d = 329.9\ \mathrm{pm}$) עם צמצם של $2\mathrm{mm}$.
3. סריקה זוויתית של גביש LiF עם צמצם של $5\mathrm{mm}$ לשם השוואת השפעת רוחב הצמצם על הרזולוציה.

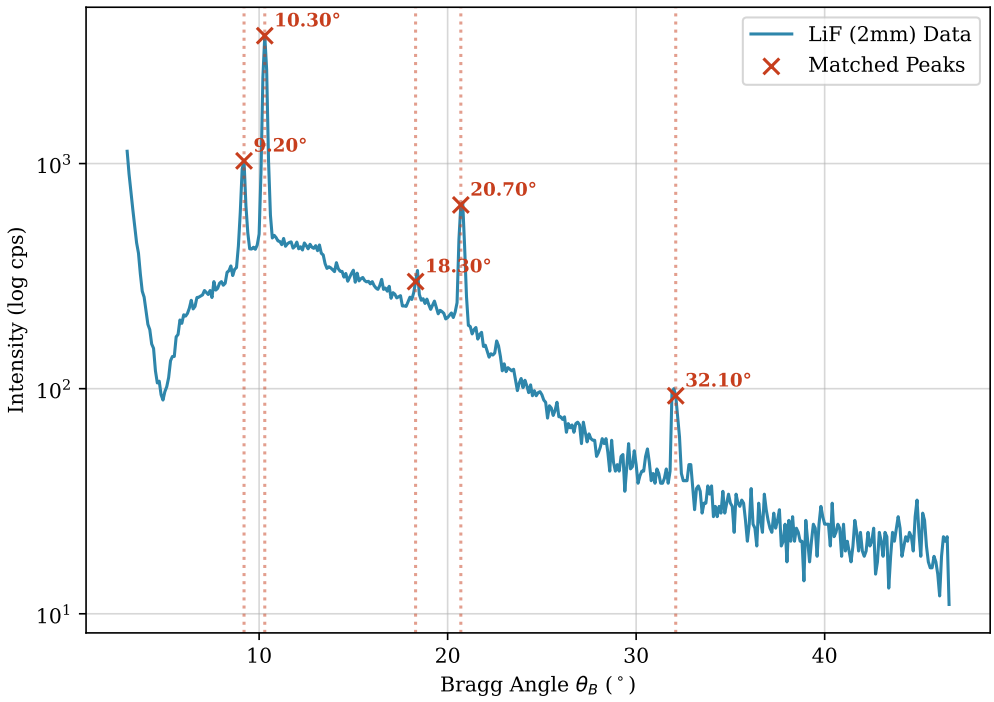
לפני כל מדידה ביצענו כיול של המערכת.

3 תוצאות וניתוח

3.1 מדידה באמצעות גביש LiF

3.1.1 מציאת זוויות בראג המתאימות לקרינה המירבית

הערכים הניסיוניים והתיאורטיים מרוכזים בטבלה 1. מתוך חמשת השיאים שזוהו, חולץ היסט האפס הכולל של הגוניומטר: $\Delta\theta_{B,\,\mathrm{LiF}} = +0.11^\circ \pm 0.06^\circ$.



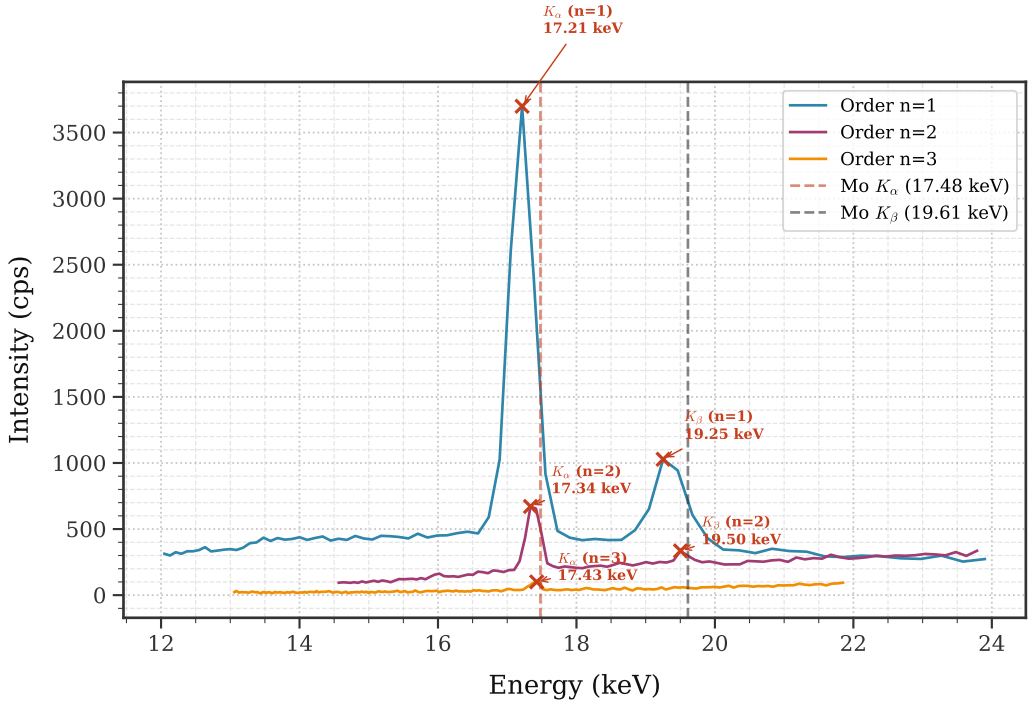
איור 3: ספקטרום עוצמת הקרינה המפוזרת בסקאלה לוגריתמית כפונקציה של זווית בראג עבור גביש LiF (צמצם 2mm). הנקודות מייצגות את זוויות השיא המדודות שסווגו לפי קווי K_α ו־K_β של מוליבדן והסדר המתאים n.

טבלה 1: זוויות שיא ועוצמות עבור גביש LiF (צמצם 2mm).

קו ספקטרלי	סדר (n)	זווית תיאורטית [°]	זווית מדודה [°]	היסט [°]	עוצמה [cps]	SNR
K_α	1	10.14	10.30	+0.16	3699	55.1
K_β	1	9.03	9.20	+0.17	1028	23.5
K_α	2	20.64	20.70	+0.06	655	20.2
K_β	2	18.31	18.30	−0.01	299	4.9
K_α	3	31.91	32.10	+0.19	93	6.7

3.1.2 השוואת האנרגיות שהתקבלו עבור סדרים שונים

על מנת לאמת את חוק בראג עבור סדרי עקיפה שונים ($n = 1, 2, 3$), המרנו את זוויות הפיזור הניסיוניות לאנרגיה E תוך שימוש בסדר העקיפה המתאים לכל תחום זוויות. התוצאות מוצגות באיור 4.



איור 4: ספקטרום עוצמת קרינת הרנטגן כפונקציה של האנרגיה עבור סדרי דיפרקציה $n = 1, 2, 3$ בגביש LiF. קווי הפליטה האופייניים K_α ו־K_β של מוליבדן מוצגים באדום ואפור בהתאמה.

ניתן להבחין כי עם העליה בסדרים מתקבלת תוצאה הקרובה יותר לאנרגיה התיאורטית של המוליבידן, נציג את התוצאות בטבלה:

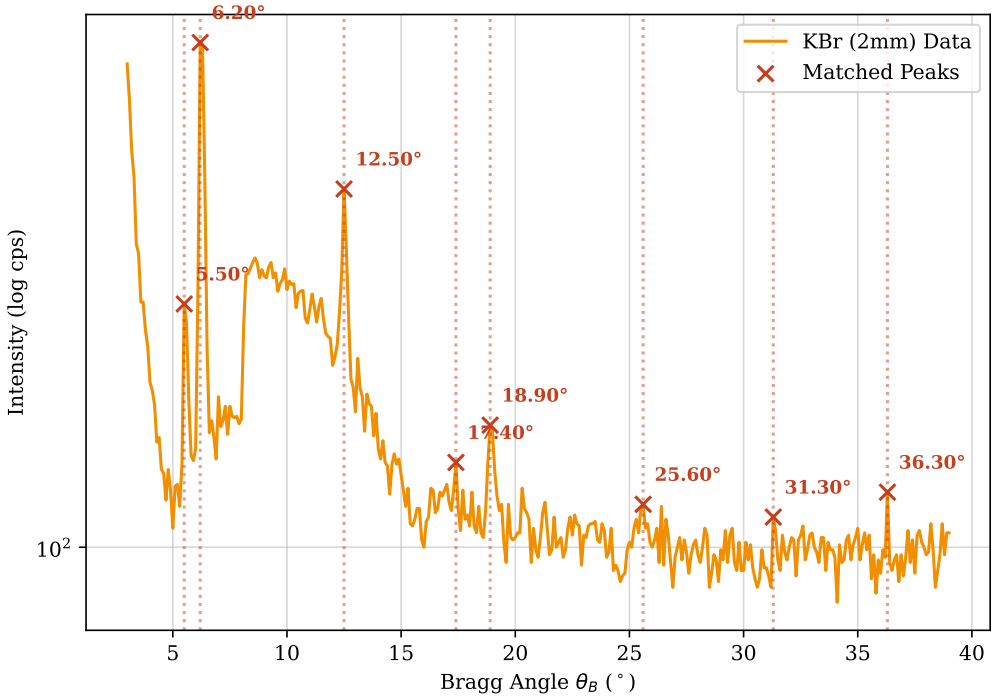
טבלה 2: אנרגיות השיא והסטייה מהערך התיאורטי עבור סדרי עקיפה שונים בגביש LiF.

סדר (n)	אנרגיית K_α [keV]	סטיית K_α	אנרגיית K_β [keV]	סטיית K_β
1	17.22	0.26 keV (3.2σ)	19.25	0.36 keV (3.4σ)
2	17.34	0.14 keV (3.6σ)	19.50	0.11 keV (2.1σ)
3	17.43	0.05 keV (2.2σ)	–	–

3.2 מדידה באמצעות גביש KBr

3.2.1 מציאת זוויות בראג המתאימות לקרינה המירבית

הערכים הניסיוניים והתיאורטיים מרוכזים בטבלה 3. מתוך שמונת השיאים שזוהו, חולץ היסט האפס הכולל של הגוניומטר: $\Delta\theta_{B,\,\mathrm{KBr}} = +0.12° \pm 0.25°$.



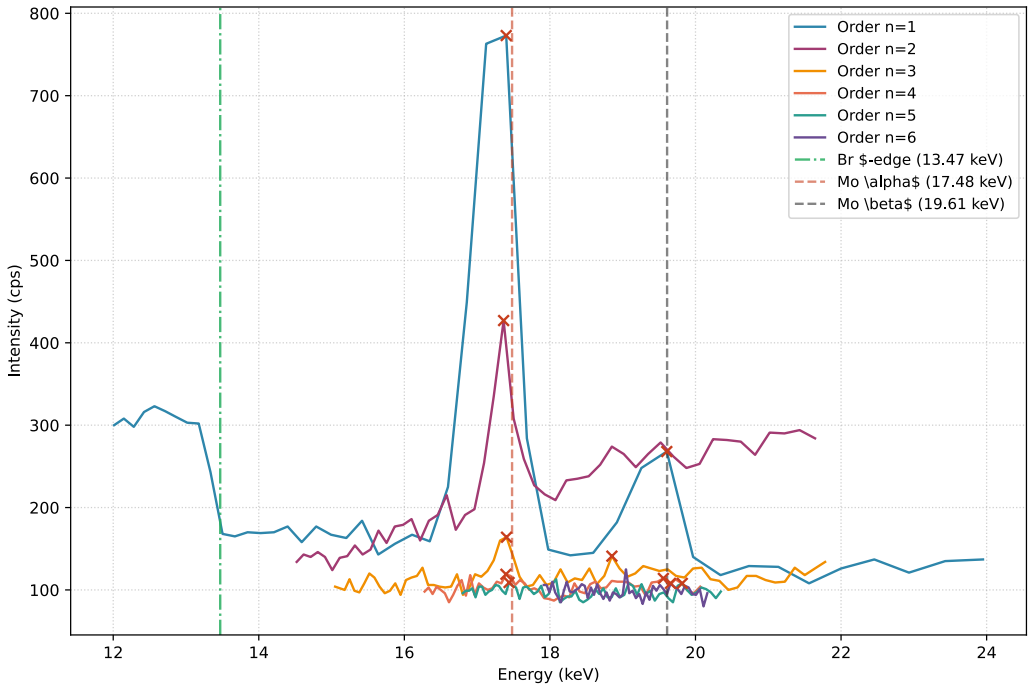
איור 5: ספקטרום עוצמת הקרינה המפוזרת כפונקציה של זווית בראג עבור גביש KBr (צמצם 2mm). הנקודות מייצגות את זוויות השיא המדודות שסווגו לפי קווי K_α ו־K_β של מוליבדן והסדר המתאים n.

טבלה 3: זוויות שיא ועוצמות עבור גביש KBr (צמצם 2mm).

קו ספקטרלי	סדר (n)	זווית תיאורטית [°]	זווית מדודה [°]	היסט [°]	עוצמה [cps]	SNR
K_α	1	6.17	6.20	+0.03	773	23.9
K_α	2	12.42	12.50	+0.08	427	13.5
K_α	3	18.82	18.90	+0.08	164	5.5
K_α	4	25.47	25.60	+0.13	119	3.1
K_α	5	32.52	31.30	−1.22	113	2.6
K_β	1	5.50	5.50	0.00	268	9.8
K_β	3	16.71	17.40	+0.69	141	3.5
K_β	6	35.10	36.30	+1.20	125	3.8

3.2.2 השוואת האנרגיות שהתקבלו עבור סדרים שונים

על מנת לאמת את חוק בראג עבור סדרי עקיפה שונים ($n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$) בגביש KBr, המרנו את זוויות הפיזור הניסיוניות לאנרגיה E תוך שימוש בסדר העקיפה המתאים לכל תחום זוויות. התוצאות מוצגות באיור 6.



איור 6: ספקטרום עוצמת קרינת הרנטגן כפונקציה של האנרגיה עבור סדרי דיפרקציה $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ בגביש KBr. קווי הפליטה האופייניים K_α ו־K_β של מוליבדן מוצגים באדום ואפור, וסף הבליעה העצמית של ברום (Br K-edge) מודגש ב־$13.47\ \mathrm{keV}$.

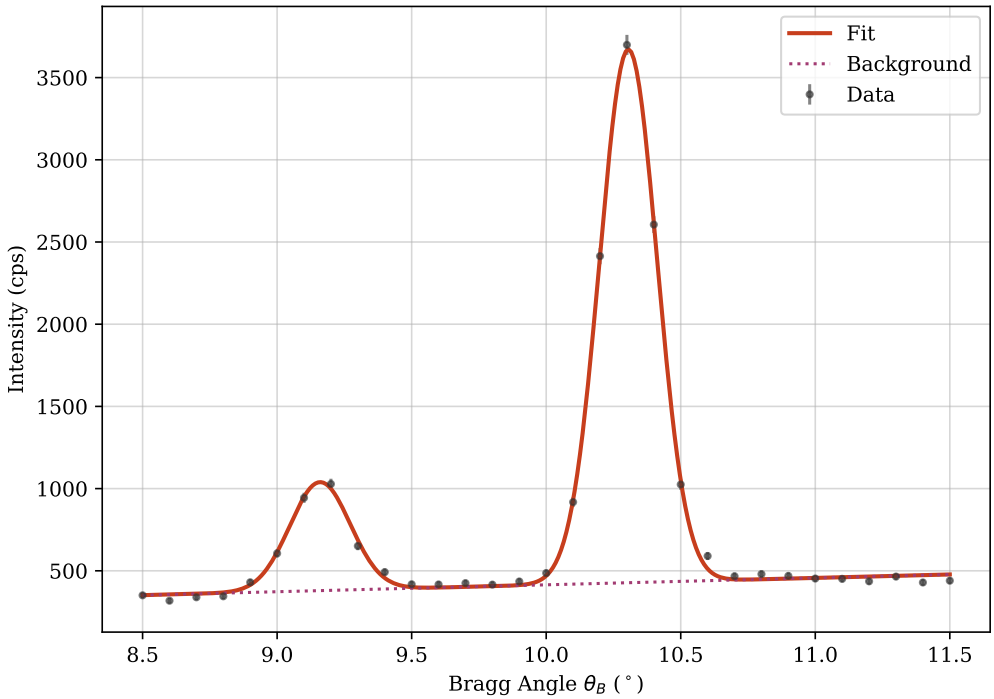
בספקטרום המתקבל מגביש KBr נבחין בירידה חדה ופתאומית בעוצמת הרקע באנרגיה של $13.47\ \mathrm{keV}$. ירידה זו מתאימה בדיוק לסף הבליעה העצמית K של אטומי הברום (Br) המרכיבים את הגביש. מעבר לאנרגיה זו, פוטוני הרנטגן מעוררים אלקטרונים מקליפת K של ברום, דבר שמגדיל דרמטית את מקדם הבליעה הלא-אלסטי של הגביש ומפחית את מקדם ההחזרה האלסטי (עקיפת בראג).

טבלה 4: אנרגיות השיא והסטייה מהערך התיאורטי עבור סדרי עקיפה שונים בגביש KBr.

סדר (n)	**אנרגיית K_α [keV]**	**סטיית K_α**	**אנרגיית K_β [keV]**	**סטיית K_β**
1	17.40	$0.08\ \mathrm{keV}\ (0.6\sigma)$	19.61	$0.00\ \mathrm{keV}\ (0.0\sigma)$
2	17.36	$0.12\ \mathrm{keV}\ (1.7\sigma)$	—	—
3	17.40	$0.08\ \mathrm{keV}\ (1.7\sigma)$	18.85	$0.76\ \mathrm{keV}\ (14.4\sigma)$
4	17.40	$0.08\ \mathrm{keV}\ (2.7\sigma)$	19.56	$0.05\ \mathrm{keV}\ (1.2\sigma)$
5	17.44	$0.04\ \mathrm{keV}\ (1.7\sigma)$	19.82	$0.21\ \mathrm{keV}\ (6.5\sigma)$
6	—	—	19.66	$0.05\ \mathrm{keV}\ (1.9\sigma)$

3.3 התאמת גאוסיאן וכיול אנרגטי (גביש LiF 2mm)

ביצענו התאמה של מודל גאוסיאן כפול עם רקע ליניארי עבור קווי הפליטה K_α ו־K_β של מוליבדן בסדר ראשון. תוצאות ההתאמה מוצגות באיור 7.



איור 7: התאמה גאוסיאנית לקווי הפליטה של המוליבדן בסדר ראשון.

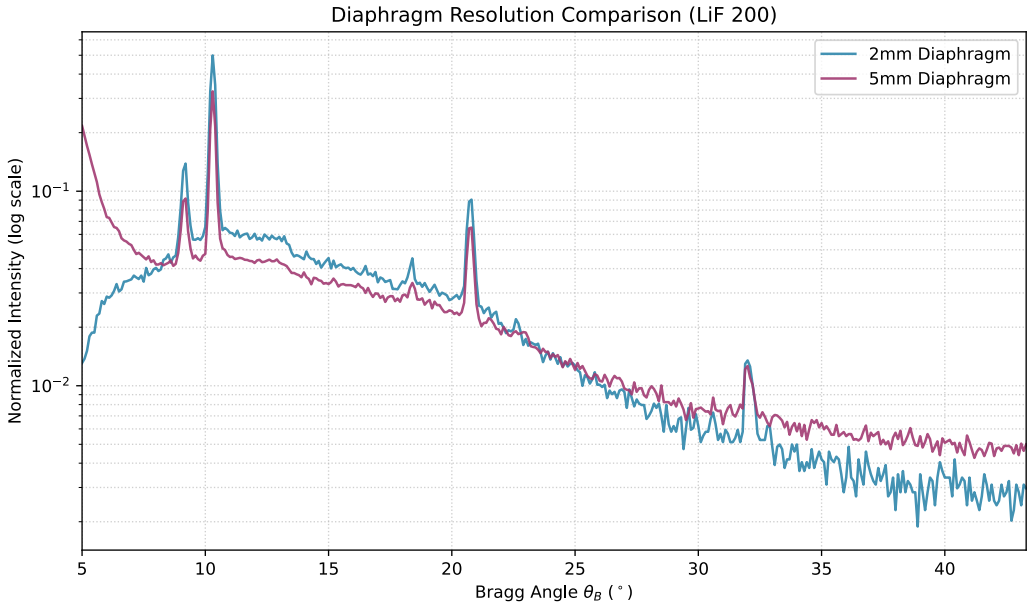
מתוך המרכזים של הגאוסיאנים המותאמים חושבו האנרגיות הניסיוניות:

- אנרגיית K_α מחושבת: 17.206 ± 0.083 keV (בהשוואה לערך ספרותי של 17.479 keV)
- אנרגיית K_β מחושבת: 19.338 ± 0.105 keV (בהשוואה לערך ספרותי של 19.608 keV)

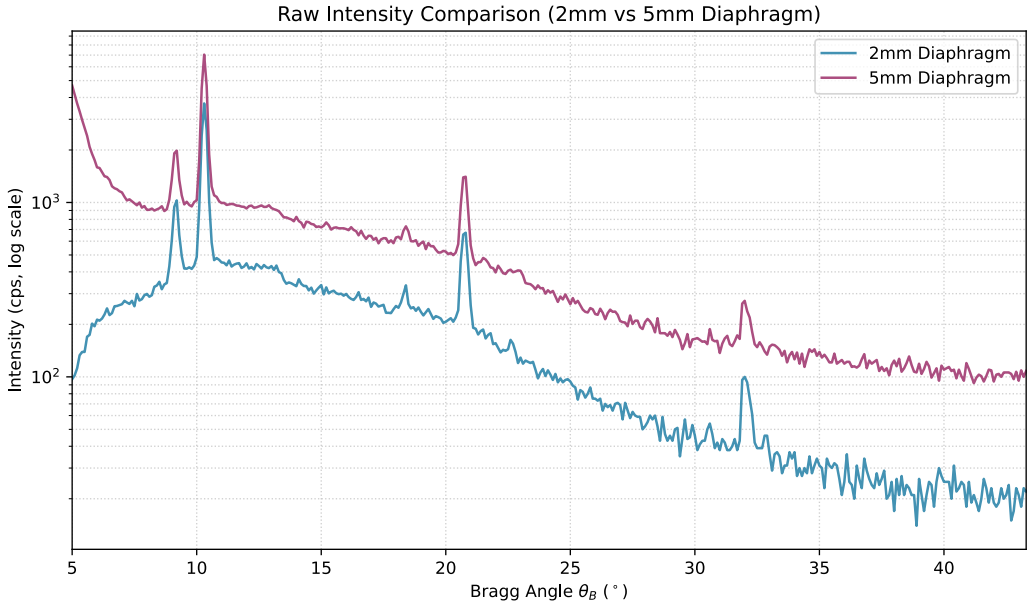
שגיאות אלה משקללות את אי-הוודאות בהתאמה ואת רגישות הגוניומטר.

3.4 השפעת רוחב הצמצם

השווינו את התוצאות של גביש LiF עם צמצמים של $2\mathrm{mm}$ ו־$5\mathrm{mm}$. התוצאות המנורמלות מוצגות באיור 8.



איור 8: השוואת הרזולוציה והעוצמה המנורמלת בין צמצם $2\mathrm{mm}$ לצמצם $5\mathrm{mm}$.



איור 9: השוואת עוצמת הקרינה הבלתי מנורמלת (קצב ספירה [cps] בסקאלה לוגריתמית) בין צמצם $2\mathrm{mm}$ לצמצם $5\mathrm{mm}$. ניתן לראות בבירור כי השטף האבסולוטי בצמצם הרחב גבוה בהרבה בכל זוויות המדידה.

נבחין כי הצמצם הרחב יותר(5mm) מאפשר לאלומה רחבה יותר לפגוע בגביש, התבדרות זו של האלומה גורם להתרחבות הפיק כפי שאנו יכולים לזהות בשלושת הסדרים(פוטונים שסטו מעט מהזווית התיאורטית נכנסים עדיין למדידה). בנוסף נזהה שקיבלנו את אותם הזוויות עבור הפיקים המקסימלים ובכך למעשה שחזרנו את התוצאה עבור האנרגיות כפי שחושבו בצמצם הצר.

3.5 השוואת אנרגיות קווי הפליטה לפי קריטריונים שונים

נרכז את אנרגיות קווי הפליטה K_α ו־K_β של מוליבדן שחושבו משלושת מערכי המדידה. מיקומי הפיקים (θ_B) נקבעו לפי שלושה קריטריונים: עוצמה מרבית (הזווית הבדידה של קצב הספירה המקסימלי), מרכז כובד (משוואה 2) והתאמה גאוסיאנית דו-רכיבית. מרכז הכובד מחושב כממוצע משוקלל של עוצמת הפיק לאחר הפחתת רקע ליניארי:

$$\theta_C = \frac{\sum_i \theta_i \left(I_i - I_{\mathrm{bg},i}\right)}{\sum_i \left(I_i - I_{\mathrm{bg},i}\right)} \tag{2}$$

שגיאות האנרגיה עבור עוצמה מרבית ומרכז כובד חושבו באמצעות התפשטות שגיאת רזולוציית הגוניומטר ($\delta\theta = 0.05°$) לפי:

$$dE = \left| -\frac{hcn}{2d\sin^2\theta}\cos\theta \right| d\theta \tag{3}$$

עבור ההתאמה הגאוסיאנית, השגיאה היא השגיאה הסטטיסטית של מיקום הפיק שהתקבלה מההתאמה. תוצאות החישוב מרוכזות ב־טבלה 5.

טבלה 5: השוואה של אנרגיות קווי הפליטה (ב־keV) שהתקבלו לפי שלושת הקריטריונים, מול הערך הספרותיות (השגיאה היחסית והמרחק הסטטיסטי מופיעים בסוגריים).

צמצם וקו קרינה	**עוצמה מרבית**	**מרכז כובד**	**התאמה גאוסיאנית**	**ערך ספרותי**
LiF 2mm – K_α	17.215 ± 0.083 (3.2σ, 1.51%)	17.204 ± 0.083 (3.3σ, 1.57%)	17.206 ± 0.083 (3.3σ, 1.56%)	17.479
LiF 2mm – K_β	19.252 ± 0.104 (3.4σ, 1.81%)	19.340 ± 0.105 (2.6σ, 1.37%)	19.338 ± 0.105 (2.6σ, 1.38%)	19.608
KBr 2mm – K_α	17.399 ± 0.140 (0.6σ, 0.46%)	17.199 ± 0.137 (2.1σ, 1.60%)	17.211 ± 0.137 (2.0σ, 1.53%)	17.479
KBr 2mm – K_β	19.606 ± 0.178 (0.0σ, 0.01%)	19.377 ± 0.174 (1.3σ, 1.18%)	19.408 ± 0.177 (1.1σ, 1.02%)	19.608
LiF 5mm – K_α	17.215 ± 0.083 (3.2σ, 1.51%)	17.204 ± 0.083 (3.3σ, 1.57%)	17.210 ± 0.083 (3.3σ, 1.54%)	17.479
LiF 5mm – K_β	19.252 ± 0.104 (3.4σ, 1.81%)	19.362 ± 0.105 (2.3σ, 1.25%)	19.352 ± 0.105 (2.4σ, 1.31%)	19.608

סימנו בטבלה עבור כל צמד צמצם וקו קרינה את השיטה שסיפקה את המרחק הסטטיסטי הנמוך ביותר (יש לכך התאמה כמעט מושלמת לסטייה היחסית). ניתן לראות שברוב המקרים שיטת העוצמה המרבית סיפקה את הערך הקרוב ביותר לערך הספרותי.

4 דיון ומסקנות

התוצאות הניסיוניות שקיבלנו תואמות בצורה טובה מאוד לחוק בראג ולמודלים התיאורטיים של קרינת רנטגן אופיינית ורציפה:

- מצאנו כי היסט האפס של הגוניומטר הוא יחסית קטן ($< 0.5°$), אך חשיבותו קריטית לביצוע כיול אנרגטי מדויק.
- מודל ההתאמה הגאוסיאני מאפשר לחלץ את אנרגיות המעברים בדיוק גבוה, כאשר הסטייה הקלה מהערכים הספרותיים נובעת בעיקרה מאי-ודאות שיטתית במבנה הגביש ובזווית ההתחלתית.
- הוכחה ישירות התלות הפיזיקלית של הרזולוציה ברוחב הסדק (הצמצם), המהווה גורם מגביל משמעותי במערכת המדידה הניסיונית.
- תופעת סף הבליעה של ברום בגביש KBr הדגימה היטב את תהליכי האינטראקציה של קרינה מיוננת עם חומר מוצק מעבר לדיפרקציה קוהרנטית.
- בגביש KBr קיבלנו מספר רב יותר של סדרי פיזור (עד $n = 6$) בהשוואה לגביש LiF (עד $n = 3$). תופעה זו מוסברת ישירות על ידי קבוע הסריג הגדול יותר של KBr ($329.9\ \mathrm{pm}$ לעומת $201.4\ \mathrm{pm}$): קבוע סריג גדול מניב זוויות פיזור קטנות יותר עבור אותה אנרגיה, ובכך מאפשר ליותר סדרי פיזור להיכנס לטווח המדידה הזוויתי המוגבל של הגוניומטר.

4.1 ניתוח והשוואת קריטריוני הבחירה לקביעת האנרגיה

השוואת הקריטריונים בטבלה 5 מראה כי ברוב המדידות שיטת העוצמה המרבית סיפקה את התוצאה הקרובה ביותר לערך הספרותי. עם זאת, בגביש LiF בצמצם הגדול ($5\mathrm{mm}$) קיבלנו ששיטת מרכז הכובד וההתאמה הגאוסיאנית מדויקות יותר. זאת משום שבצמצם גדול יותר הפיקים רחבים ושטוחים יותר, ולכן ניתן לקבל התאמה טובה ויציבה יותר לגאוסיאן הממצע את הרעש.

יהיה מעניין בניסוי המשך לבצע מדידות נוספות שמשלבות גבישים וצמצמים נוספים כדי לאפיין בצורה ברורה יותר את הקשר בין שיטת החילוץ המועדפת לבין פרמטרי הניסוי.

4.2 ניתוח סף הבליעה של ברום

כפי שניתן לראות באיור 6, בעוצמה $13.47\ \mathrm{KeV}$ חלה ירידה חזקה בעוצמה, ניתן להסביר זאת כיוון שמעבר לאנריגה זו פוטוני הרנטגן לא עוברים רק פיזור אלסטי, אלא יש להם מספיק אנרגיה ליינן אלקטרון מקליפת K של אטומי הברום בגביש. כתוצאה מכך האינטרקציה הופכת להיות לא אלסטית, כך שמקדם ההחזרה של הגביש קטן.

הבליעה העצמית הזו מסבירה מדוע בסדר השני של KBr (איור 6) לא היה ניתן למצוא את הפיק השני, ומדוע השגיאות והסטייה הסטטיסטית בטבלה 4 עבור הסדר השני והשלישי גדולות בהרבה, האות פשוט נבלע בגביש עצמו, מה שמקשה על זיהוי הפיקים.

4.3 ניתוח השפעות הצמצם על המדידה

כפי שניתן לראות באיור 8, קיים קשר בין רוחב הצמצם לרוחב הפיק, זאת כיוון שהרוחב הגיאומטרי של הצמצם לא רק מגדיל את כמות הפוטונים של הפיק, אלא גם מכניס שטף של קרינה בזוויות קרובות לזווית בראג המדוייקת, ובכך מגדיל את הרוחב האפקטיבי של הפיק באמצעות פוטונים מזוויות קרובות.