

VERSUCH NUMMER 602

Röntgenemission und -absorption

Tim Alexewicz
tim.alexewicz@udo.edu

Sadiah Azeem
sadiah.azeem@udo.edu

Durchführung: 12.04.2022

Abgabe: 19.04.2022

TU Dortmund – Fakultät Physik

Inhaltsverzeichnis

1	Ziel	3
2	Theorie	3
2.1	Röntgenstrahlung	3
2.2	Charakteristisches Spektrum	3
2.3	Bragg-Bedingung	4
3	Versuchsaufbau und Durchführung	5
3.1	Überprüfung der Bragg-Bedingung	5
3.2	Emissionsspektrum einer Cu-Röntgenröhre	5
3.3	Absorptionsspektrum	5
4	Vorbereitung	6
5	Auswertung	6
5.1	Überprüfung der Bragg-Bedingung	6
5.2	Emissionsspektrum	7
5.3	Absorptionsspektren	9
6	Diskussion	13
6.1	Überprüfung der Bragg-Bedingung	13
6.2	Absorptionsspektren	14
6.3	Mosleysches Gesetz	14
7	Literaturverzeichnis	14

1 Ziel

Das Ziel des Versuches ist es, die Bragg Bedingung zu überprüfen, das Emissionsspektrum einer Cu-Röntgenröhre sowie das Absorptionsspektrum, bzw. die K-Kante und Abschirmungskonstante von fünf verschiedenen Materialien zu ermitteln.

2 Theorie

2.1 Röntgenstrahlung

Röntgenstrahlung entsteht, wenn ein freies Elektron auf eine Anode einschlägt. Ein freies Elektron entsteht durch das Erhitzen einer Glühkathode. Die Röntgenstrahlung eines Anodenmaterials ist durch ihre charakteristische Röntgenstrahlung sowie dem kontinuierlichen Bremspektrum dessen charakterisiert. Bremsstrahlung entsteht durch das Beschleunigen eines Elektrons. Diese Beschleunigung kann durch die elektromagnetische Wechselwirkung zwischen Elektron und Atom verursacht werden. Dabei wird ein Photon, auch Röntgenquant genannt, vom Elektron emittiert. Da das Elektron seine ganze Energie abgeben kann, ist das Bremspektrum kontinuierlich. Wenn das Elektron vollständig gebremst wird, wandelt sich die kinetische Energie $E_{\text{Kin}} = eU$ in Strahlungsenergie $E = h\nu$ um. Die maximale Energie des Elektrons ergibt sich dann aus

$$\lambda_{\min} = \frac{h \cdot c}{E}, \quad (1)$$

der minimalen Wellenlänge.

2.2 Charakteristisches Spektrum

Das charakteristische Spektrum ergibt sich daraus, dass das Anodenmaterial ionisiert wird und dann ein Elektron einer äußeren Schale in die innere Schale wandert, also in einen energetisch niedrigeren Zustand wechselt. Dadurch muss wieder ein Röntgenquant emittiert werden, dessen Energie sich aus der Energiedifferenz

$$h\nu = E_m - E_n \quad (2)$$

der beiden Energieniveaus ermitteln lässt. Diese signifikanten Sprünge ergeben das charakteristische Spektrum des Anodenmaterials, die als scharfe Linien dargestellt werden können. Diese Linien werden mit $K_\alpha, K_\beta, L_\alpha, \dots$ bezeichnet, wobei K, L, M, \dots für die jeweilige Schale steht. Dabei stehen griechische Buchstaben für die Herkunft des äußeren Elektrons, dass in die innere Schale wechselt. In einem Mehrelektronenatom schirmen die Hüllenelektronen die Elektronen der unteren Schalen ab. Dadurch wechselwirkt das äußere Elektron schwächer mit dem Kern und die Bindungsenergie, also die Energie, die überwunden werden muss, um das Elektron von der n -ten Schale des Atoms zu lösen beträgt

$$E_n = -R_\infty z_{\text{eff}}^2 \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (3)$$

wobei die Abschirmung in der effektiven Kernladung $z_{eff} = z - \sigma$ enthalten ist, mit der Abschirmkonstante σ und der Rydbergenergie $R_\infty = 13.6$ eV.

Zusätzlich können noch der Bahndrehimpuls und der Spin der äußeren Elektronen betrachtet werden. Dabei spaltet sich die charakteristische Kennlinie auf. Diese neue Struktur wird Feinstruktur genannt. Diese kann durch die Sommerfeldsche Feinstrukturformel

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

berechnet werden, mit der Rydbergenergie R_∞ , der Feinstrukturkonstante α , der effektiven Kernladungszahl z_{eff} , der Energiequantenzahl n und dem Gesamtdrehimpuls j des Elektrons. Bei einer Röntgenstrahlung unter 1 MeV sind bei der Absorption der Comptoneffekt und der Photoeffekt relevant. Der Absorptionskoeffizient nimmt mit steigender Energie ab und springt, wenn die Photonenergie größer als die Bindungsenergie des Elektrons der nächsten inneren Schale ist. Das wird auch als Kante bezeichnet. Die Energien der Elektronen

$$h\nu_{abs} = E_n - E_\infty, \quad (5)$$

die aus den Schalen K, L, M, \dots stammen, werden Absorptionskanten genannt. Bei der K-Kante gibt es nur eine Kante, bei L jedoch mehr. In der K-Schale ist $n = 1$ und aus der Sommerfeldschen Feinstrukturformel lässt sich die Abschirmkonstante

$$\sigma_K = Z - \sqrt{\frac{E_K}{R_\infty} - \frac{\alpha^2 Z^4}{4}} \quad (6)$$

berechnen.

2.3 Bragg-Bedingung

Die Wellenlänge der Röntgenstrahlung lässt sich aus der Bragg-Bedingung

$$2d \sin \theta = n \lambda \quad (7)$$

bestimmen, mit dem Glanzwinkel θ , der gebeugten Wellenlänge λ und der Beugungsordnung n . Das funktioniert, weil das Röntgenlicht an der Netzebene des Kristalls beugt, aber nur mit dem selben Wellenvektor \vec{k} austreten kann, wenn es konstruktiv interferieren soll, heißt $\vec{p} = \hbar \vec{k} = \hbar \vec{k}' = \vec{p}'$, mit \vec{p} Impuls der einlaufenden Welle und \vec{p}' Impuls der auslaufenden Welle.

3 Versuchsaufbau und Durchführung

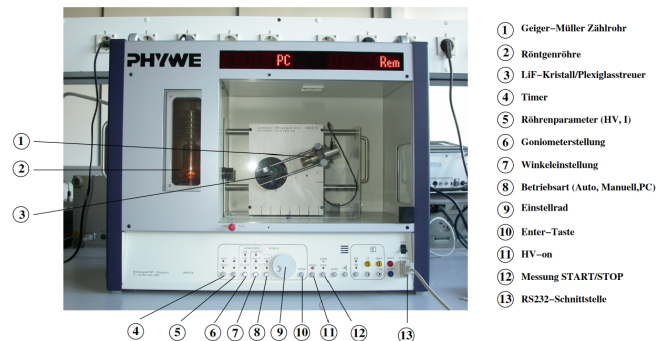


Abbildung 1: Das Messgerät

Für das Experiment wird lediglich eine Kuper-Röntgenröhre, ein KBr-Kristall und ein Geiger-Müller-Zählrohr benötigt. Das alles ist in dem Gerät aus Abbildung 1 geschaltet und kann über einen Rechner gesteuert werden. Das Gerät funktioniert mit dem Drehkristallverfahren, bei dem die Wellenlänge gleich bleibt, aber die Bragg-Bedingung für unterschiedliche θ erfüllt wird. Die Beschleunigungsspannung wird auf $U = 35 \text{ keV}$ und der Emissionsstrom auf $I = 1 \text{ mA}$ gestellt.

3.1 Überprüfung der Bragg-Bedingung

Der KBr-Kristall wird auf einen festen Winkel von $\theta = 14^\circ$ gestellt. Dann soll das Geiger-Müller-Zählrohr den Winkelbereich zwischen $\alpha_1 = 26^\circ$ und $\alpha_2 = 30^\circ$ in $\Delta\alpha = 0.1^\circ$ -Schritten mit einer Integrationszeit von $\Delta t = 5 \text{ s}$ pro Winkel die Intensität messen.

3.2 Emissionsspektrum einer Cu-Röntgenröhre

Zum Messen des Emissionsspektrums einer Cu-Röntgenröhre wird das Programm auf den 2:1 Koppelmodus gestellt und dann das Röntgenspektrum der Beugungsordnung $n = 1$ im Winkelbereich zwischen $4^\circ \leq \theta \leq 26^\circ$ in $\Delta\alpha = 0.2^\circ$ -Schritten mit Integrationszeit $\Delta t = 5 \text{ s}$ gemessen. Der Koppelmodus 2:1 sagt aus, dass während der Kristall um 0.1° gedreht, das Geiger-Müller-Zählrohr um 0.2° gedreht wird. Das muss passieren, um die Bragg-Bedingung zu erfüllen.

3.3 Absorptionsspektrum

Es sollen fünf Absorber mit Kernladungszahlen $30 \leq Z \leq 50$ vor das Geiger-Müller-Zählrohr gesetzt werden und das Absorptionsspektrum in $\Delta\alpha = 0.1^\circ$ -Schritten mit Integrationszeit $\Delta t = 20 \text{ s}$ gemessen werden. Der Winkelbereich ist variabel.

4 Vorbereitung

Zur Vorbereitung sollte ermittelt werden, bei welchen Energien in keV die $\text{Cu} - K_\alpha$ - und $\text{Cu} - K_\beta$ -Linie zu erwarten ist. Diese liegen bei $E_{\text{Cu}-K_\alpha} = 8.05\text{keV}$ und $E_{\text{Cu}-K_\beta} = 8.91\text{keV}$. Die Glanzwinkel errechnen sich unter der Benutzung von (1) und (7) zu $\theta_\alpha = 13.5^\circ$ und $\theta_\beta = 12.2^\circ$. Zusätzlich dazu sollte von Zn, Ge, Br, Rb, Sr und Zr die Absorptionskanten E_K , der Glanzwinkel θ_K und die Abschirmkonstante σ_K gefunden werden:

	Z	E_K [keV]	θ_K [°]	σ_K
Zn	30	9.65	11.3	3.56
Ga	31	10.37	10.5	3.61
Ge	32	11.10	9.8	3.68
Br	35	13.47	8.0	3.85
Rb	37	15.80	7.1	3.94
Sr	38	16.10	6.7	3.99
Zr	40	18.00	6.0	4.09

Tabelle 1: Stoffe und deren theoretische Ordnungszahlen, Absorptionskanten, Glanzwinkel und Abschirmkonstanten.

5 Auswertung

5.1 Überprüfung der Bragg-Bedingung

Nach der Bragg-Bedingung ist das gemessene Intensitätsmaximum beim Glanzwinkel von $\theta_{theo} = 11,26^\circ$ zu erwarten.

Der experimentiell bestimmte Glanzwinkel liegt bei dem verwendeten KBr-Kristall bei $\theta_{exp} = 11,25^\circ$, so wird durch die in Tabelle 2 aufgeführten Werte der Sollwinkel verifiziert.

Tabelle 2: Die Werte für die Messung zur Verifikation der Bragg-Bedingung.

$2 \cdot \theta / ^\circ$	$N / Imp/s$
21,8	219,0
21,9	233,0
22,0	249,0
22,1	247,0
22,2	258,0
22,3	259,0
22,4	275,0
22,5	295,0
22,6	289,0
22,7	282,0
22,8	288,0
22,9	287,0
23,0	266,0
23,1	257,0
23,2	266,0
23,3	267,0
23,4	258,0
23,5	244,0

5.2 Emissionsspektrum

Maximale Energie und minimale Wellenlänge

Das charakteristische Spektrum der Kupfer-Röntgenröhre ist in Abbildung 2 zu sehen. Mit zunehmendem Winkel ist der Grenzwinkel bei K_α und K_β erkennbar. Aus dem Grenzwinkel

$$\theta_{min} = 7,9^\circ$$

lassen sich die maximale Energie und die minimale Wellenlänge

$$E_{max} = 9,137\text{keV}$$

$$\lambda_{min} = 137.5\text{pm}$$

berechnen.

Auflösungsvermögen der Apparatur

Mit Hilfe der Halbwertsbreite lässt sich auch das Auflösungsvermögen der Apparatur bestimmen.

Die Halbwertsbreite berechnet sich aus den Winkeln $\theta_\beta = 11,9^\circ$ und $\theta_\alpha = 13,2^\circ$.

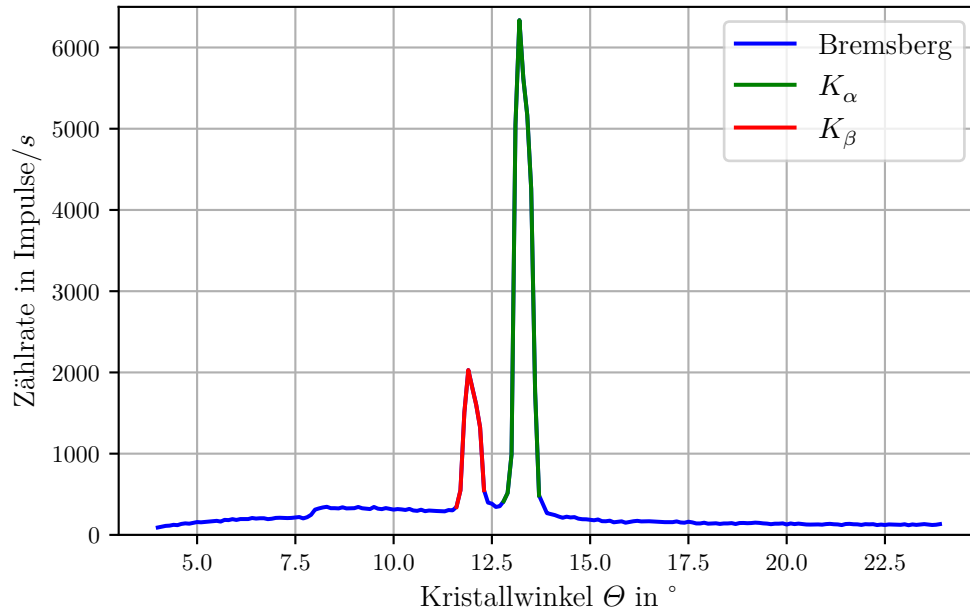


Abbildung 2: Emissionsspektrum der Kupfer-Röntgenröhre.

So ergeben sich die Energien zu $E_\alpha = 9,145$ keV und $E_\beta = 8,255$ keV. Aus einem Gaußschen Fit mit Matlab mit der Funktion

$$f(x) = a \cdot \exp(-((x - b)/c)^2)$$

ergeben sich mit

$$FWHM = 2\sqrt{\ln(2)} \cdot c$$

die Halbwertesbreiten für die jeweiligen K-Linien

$$FWHM_\alpha = 0.4587 \text{ keV}$$

$$FWHM_\beta = 0.5107 \text{ keV}$$

mit denen sich folgende Auflösungsvermögen durch

$$A = \frac{E_{\alpha/\beta}}{FWHM_{\alpha/\beta}}$$

berechnet werden können. Es ergeben sich die Auflösungsvermögen $A_\alpha = 17.9836$ und $A_\beta = 17.6305$.

Abschirmkonstanten

Aus den berechneten Energien $E_{K\alpha}$ und $E_{K\beta}$ und dem Literaturwert $E_{K,abs} = 8980.476$ eV können die Abschirmkonstanten σ_1 , σ_2 und σ_3 von Kupfer wie folgt bestimmt werden. Die Ordnungszahl lautet $Z = 29$, $n = 1$, $m = 2$ und $l = 3$.

Aus

$$\sigma_1 = Z - \sqrt{\frac{E_{Kabs}}{R_\infty}}$$

$$\sigma_2 = Z - \sqrt{\frac{m^2}{n^2}(Z - \sigma_1)^2 - \frac{m^2}{R_\infty}E_{K\alpha}}$$

$$\sigma_3 = Z - \sqrt{\frac{l^2}{n^2}(Z - \sigma_1)^2 - \frac{l^2}{R_\infty}E_{K\beta}}$$

ergeben sie sich zu $\sigma_1 = 3,30$, $\sigma_2 = 13,57$. σ_3 kann nicht korrekt bestimmt werden, da sich ein komplexer Wert ergibt.

5.3 Absorptionsspektren

Absorptionsspektrum von Brom

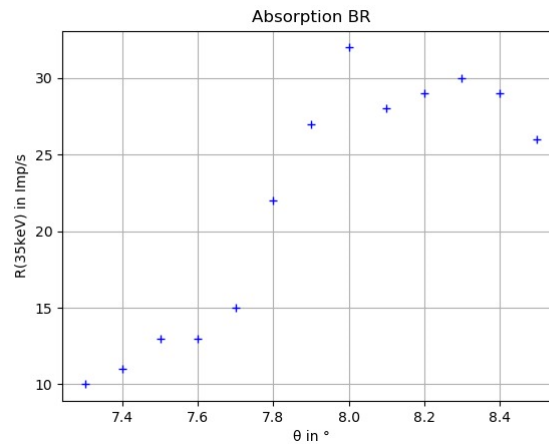


Abbildung 3: Absorptionsspektrum der Röntgenstrahlung von Zink.

In ?? ist das gemessene Absorptionsspektrum von Brom abgebildet.

Sei das niedrige Plateau bei 7.6° und das hohe Plateau bei 8.2° erreicht. Dann ergibt sich mittels

$$f(\theta_{\frac{1}{2}}) = \frac{y_1 + y_2}{2}$$

die Intensität des Glanzwinkels. Durch lineare Regression mit der Formel

$$f(\theta) = a \cdot \theta + b \quad (8)$$

kann dann der Glanzwinkel bestimmt werden. Dieser ergibt sich zu $\theta_{\frac{1}{2}} = 7.86^\circ$ mit $a = 30\text{Imp}/^\circ\text{s}$ und $b = -213.3\text{Imp}/\text{s}$. Jetzt lässt sich mit dem Lösen von $f(\theta_{\frac{1}{2}}) = a \cdot \theta + b$ der Glanzwinkel $\theta_{\frac{1}{2}} = 7.86^\circ$ bestimmen. Dann kann mit Hilfe der Bragg Bedingung die Wellenlänge λ und daraus die Absorptionskante $E_{Br} = 13.789\text{keV}$ berechnet werden. Setzt man die Absorptionskante in (??) ein, ergibt sich für die Abschirmkonstante

$$\sigma_{Br} = 3.47$$

Absorptionsspektrum von Gallium

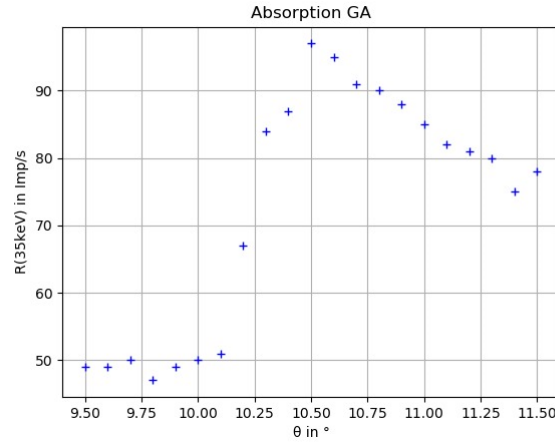


Abbildung 4: Absorptionsspektrum der Röntgenstrahlung von Zink.

Das berechnen der Werte für Gallium funktioniert wie bei ???. Das untere Plateau liegt bei 10.1° , das Obere bei 11° . Damit ergibt sich $f(\theta_{\frac{1}{2}}) = 68\text{Imp}/\text{s}$. Des weiteren ist $a = 29.88\text{Imp}/^\circ\text{s}$ und $b = -213.7\text{Imp}/\text{s}$ und damit der Glanzwinkel $\theta_{frac12} = 9.4^\circ$. Damit lässt sich die Absorptionskante bei $E_{Ga} = 11.6\text{keV}$ bestimmen. Mit Hilfe von (??) ergibt sich

$$\sigma_{Ga} = 2.01,$$

die Absorptionskonstante von Gallium.

Absorptionsspektrum von Strontium

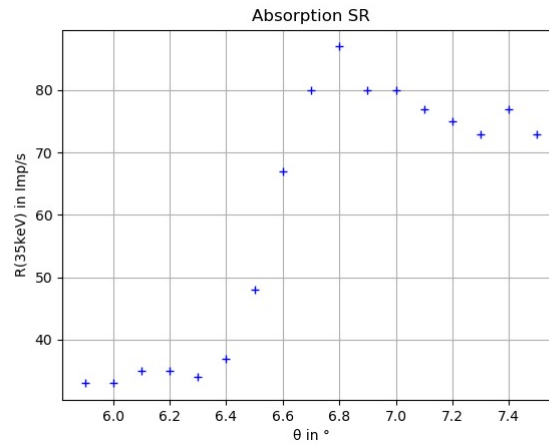


Abbildung 5: Absorptionsspektrum der Röntgenstrahlung von Zink.

Das untere Plateau wird bei $\theta = 6.4^\circ$ und das Obere bei $\theta = 7.1^\circ$ gewählt. Damit ergibt sich $f(\theta_{frac12}) = 57\text{Imp/s}$ und der Glanzwinkel lässt sich mit $a = 57.86\text{Imp/s}$ und $b = -321\text{Imp/s}$ zu $\theta_{frac12} = 6.53^\circ$ bestimmen. Daraus ergibt sich die Absorptionskante $E_{Sr} = 16.58\text{keV}$ und damit die Absorptionskonstante

$$\sigma_{Sr} = 3.48$$

von Strontium.

Absorptionsspektrum von Zink

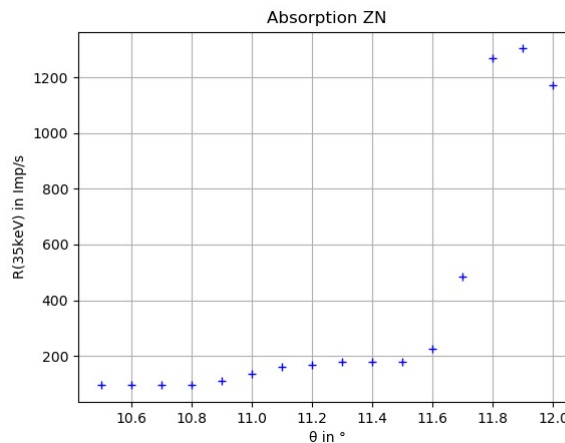


Abbildung 6: Absorptionsspektrum der Röntgenstrahlung von Zink.

Das untere Plateau sitzt bei $\theta = 10.8^\circ$, das Obere bei $\theta = 11.8^\circ$. Dadurch wird $f(\theta_{frac12}) = 682.5 \text{ Imp/s}$ und durch $a = 695.8 \text{ Imp/}^\circ\text{s}$ und $b = -7573 \text{ Imp/s}$ ergibt sich der Glanzwinkel $\theta_{frac12} = 11.86^\circ$ und damit die Absorptionskante $E_{Zn} = 9.175 \text{ keV}$. Aus der Absorptionskante bestimmt sich die Absorptionskonstante

$$\sigma_{Zn} = 4.23$$

von Zink.

Absorptionsspektrum von Zirkonium

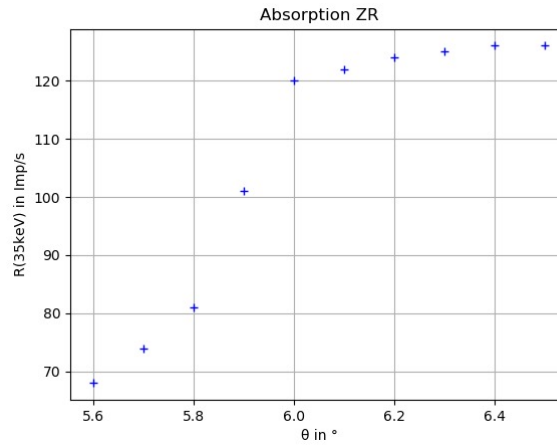


Abbildung 7: Absorptionsspektrum der Röntgenstrahlung von Zink.

Das untere Plateau liegt bei $\theta = 5.8^\circ$, das Obere bei $\theta = 6.2^\circ$. Es ergibt sich $f(\theta_{frac12}) = 102.5 \text{ Imp/s}$ und mit $a = 107 \text{ Imp/}^\circ\text{s}$ und $b = -532.4 \text{ Imp/s}$ der Glanzwinkel $\theta_{frac12} = 5.93^\circ$ und mit diesem die Absorptionskante $E_{Zr} = 18.25 \text{ keV}$. Aus der Absorptionskante bestimmt sich die Absorptionskonstante

$$\sigma_{Zr} = 3.84$$

von Zirkonium.

Moseleysches Gesetz

Nach dem Moseleyschen-Gesetz ist die Absorptionskante proportional zum Ordnungszahl-quadrat und zur Rydbergkonstante. Nach dem Moseleyschen Gesetz kann die Rydbergkonstante als Steigung eines $\sqrt{E_K} - Z$ Diagramms betrachtet werden, die hier mittels linearer Regression bestimmt wird. Die lineare Ausgleichsrechnung ergibt für die Ausgleichsgerade $y = ax + b$ die Parameter $a = 3,443 \pm 0,2283 \text{ keV}$ und $b = -5,864 \pm 7,9946 \text{ keV}$.

So ergibt sich für die experimentiell bestimmte Rydbergkonstante $R_{exp} = 9,56 \cdot 10^6 \frac{1}{\text{m}}$.

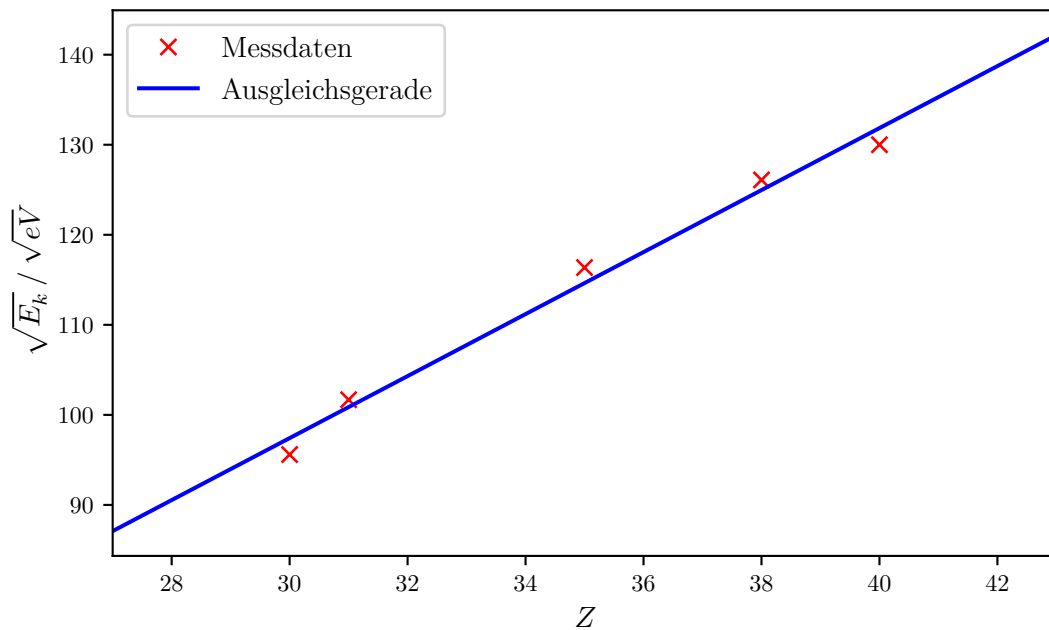


Abbildung 8: Die Quadratwurzel der Absorptionsenergie in Abhängigkeit von der Ordnungszahl Z mit Ausgleichsgeraden.

6 Diskussion

Bei den K-Linien weichen die Energien um

$$E_{\alpha\%} = 2 \%$$

$$E_{\beta\%} = 1 \%$$

und die Winkel um

$$\theta_{\alpha\%} = 2 \%$$

$$\theta_{\beta\%} = 2 \%$$

ab. Das ist wieder in einem geringen Rahmen und akzeptabel.

6.1 Überprüfung der Bragg-Bedingung

Wird der Theoriewert mit dem experimentellen Wert verglichen, ergibt sich zu

$$\left| \frac{\theta_{theo} - \theta_{exp}}{\theta_{exp}} \right| = 0.08\%,$$

woraus sich erkennen lässt, dass die Abweichung sehr gering ist und die Bragg-Bedingung erfüllt.

6.2 Absorptionsspektren

Für die Energien, Winkel und Abschirmkonstanten ergeben sich folgende Abweichungen:

	$E_{\%}$	$\theta_{\%}$	$\sigma_{\%}$
Zn	5.2 %	5 %	18.8 %
Ga	10.6 %	10.5 %	41.6 %
Br	2.3 %	1.8 %	9.9 %
Sr	2.9 %	2.5 %	12.8 %
Zr	1.4 %	1.2 %	6.1 %

Tabelle 3: Die Abweichungen in Prozent.

Die Abweichungen der Energien, Winkel und Abschirmkonstanten sind sehr gering, ausser bei Gallium. Das kann daran liegen, dass der Glanzwinkel unterhalb des unteren Plateaus und deshalb nicht auf der K-Kante liegt. Ausserdem ist der Verlauf der Kante nicht linear, weshalb eine lineare Regression hier eine sehr oberflächliche Annäherung ist.

6.3 Mosleysches Gesetz

Die theoretische Rydbergkonstante ist $R_{\infty} = 1.097 \cdot 10^7 \frac{1}{m}$. Im Vergleich mit der experimentellen ergibt sich eine Abweichung von

$$R_{\%} = 13 \%$$

die dadurch erklärbar ist, dass die Konstante mit einer linearen Ausgleichsrechnung berechnet wurde.

7 Literaturverzeichnis

[1] Technische Universität Dortmund, *V602: Röntgenemission und -absorption* [2] Bernhard Rupp, *X-Ray Absorption Edge Energies* <https://www.ruppweb.org/Xray/elements.html>