

V602

## **Röntgenemission und -absorption**

Theodor Zies

theodor.zies@tu-dortmund.de

Tom Troska

tom.troska@tu-dortmund.de

Durchführung: 26.04.2022

Abgabe: 03.05.2022

TU Dortmund – Fakultät Physik

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Zielsetzung</b>	<b>3</b>
<b>2. Theorie</b>	<b>3</b>
2.1. Röntgenstrahlung . . . . .	3
2.2. Absorption von Röntgenstrahlung . . . . .	4
2.3. Abschirmkonstante . . . . .	4
2.4. Bragg'sche Reflexion . . . . .	5
<b>3. Durchführung</b>	<b>6</b>
3.1. Vorbereitung . . . . .	6
3.2. Messung . . . . .	7
<b>4. Auswertung</b>	<b>7</b>
4.1. Überprüfung der Bragg-Bedingung . . . . .	7
4.2. Emissionsspektrum einer Cu-Röhre . . . . .	8
4.3. Absorptionsspektrum verschiedener Elemente . . . . .	11
4.3.1. Bestimmung des Bragg-Winkels, Absorptionsenergie, und Ab- schirmkonstanten. . . . .	11
4.3.2. Bestimmung der Rydbergkonstanten . . . . .	12
<b>5. Diskussion</b>	<b>13</b>
<b>Literatur</b>	<b>14</b>
<b>A. Anhang</b>	<b>15</b>

## 1. Zielsetzung

Ziel dieses Versuches ist es, das Emissionsspektrum einer Cu-Röntgenröhre zu untersuchen, sowie die Absorptionsspektren fünf verschiedener Materialien zu analysieren.

## 2. Theorie

### 2.1. Röntgenstrahlung

Für die Erzeugung von Röntgenstrahlung werden in einer evakuierten Röhre aus einer Glühkathode Elektronen emittiert und zu einer Anode beschleunigt. Beim Auftreffen auf die Anode wird die kinetische Energie der Elektronen in Form von Röntgenstrahlung abgegeben.

Das Spektrum der Röntgenstrahlung ist in Abbildung 1 zu sehen und setzt sich dabei aus dem *kontinuierlichen Bremspektrum* und der *charakteristischen Röntgenstrahlung* zusammen.

- Das *kontinuierlichen Bremspektrum* entsteht aufgrund der Abbremsung der Elektronen, da diese ihre kinetische Energie beim Eindringen in das Coulombfeld des Atomkerns in Form von Bremsstrahlung abgeben. Es handelt sich um ein kontinuierliches Spektrum, da das Elektron nur einen Teil seiner Energie oder im Extremfall die gesamte kinetische Energie abgeben kann.
- Die *charakteristische Röntgenstrahlung* entsteht aufgrund einer Anregung der Atome des Anodenmaterials. Dabei entsteht eine Leerstelle in einer inneren Schale, die von einem Elektron aus einer äußeren aufgefüllt wird. Dabei wird ein Röntgenquant emittiert, dessen Energie genau der Energiedifferenz der Schalen entspricht, also

$$E_{\text{diff}} = E_m - E_n$$

Da die Energien der einzelnen Schalen diskret sind, besteht das charakteristische Spektrum aus scharfen Linien, die mit  $K_\alpha$ ,  $K_\beta$ ,  $L_\alpha$ , ... bezeichnet werden. Die Buchstaben  $K$ ,  $L$ ,  $M$ , ... stehen hierbei für die Schalen, auf denen die Übergänge enden. Aus welcher Schale die beteiligten äußeren Elektronen kommen, wird durch  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , ... angegeben.

Bei größeren Atomen wird die Kernladung durch die Elektronen abgeschirmt, deshalb wird die Bindungsenergie auf der  $n$ -ten Schale verringert und lässt sich über

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

berechnen. Hierbei ist  $R_\infty = 13,6 \text{ eV}$  die Rydbergenergie und  $z_{\text{eff}} = z - \sigma$  die effektive Kernladung. Die Abschirmkonstante  $\sigma$  kann empirisch bestimmt werden und wird in 2.3 näher betrachtet.

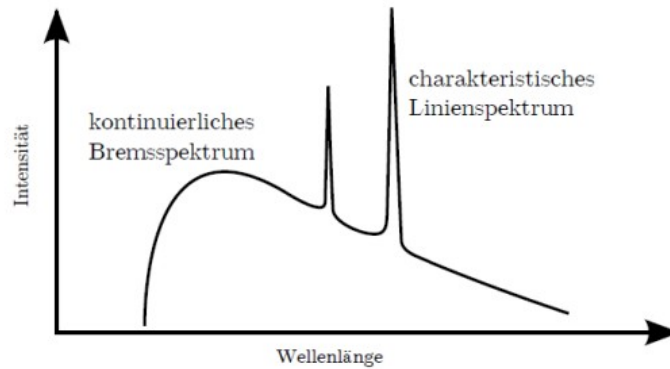


Abbildung 1: Qualitative Darstellung des Spektrums von Röntgenstrahlung.[2]

## 2.2. Absorption von Röntgenstrahlung

Die Absorption von Röntgenstrahlung unter 1 MeV findet hauptsächlich durch den Compton- und Photoeffekt statt, mit zunehmender Energie nimmt die Absorption also ab. Sobald die Energie der Röntgenquanten jedoch gerade größer ist als die Bindungsenergie eines Elektrons auf der nächsten inneren Schale, steigt die Absorption sprunghaft an, da das Röntgenquant von einem Elektron aufgenommen werden kann. Diese Stellen bezeichnet man als Absorptionskanten, sie liegen nahezu an der identischen Stelle wie die Bindungsenergie des Elektrons. Je nach Schale werden die Benennung der Kanten mit einem  $K$ ,  $L$ ,  $M$ , ... versehen, sie sind in Abbildung 2 deutlich zu sehen.

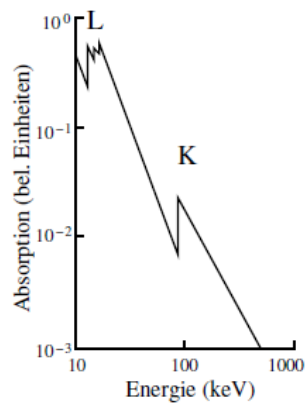


Abbildung 2: Absorption von Röntgenstrahlung abhängig von der Energie.[3]

## 2.3. Abschirmkonstante

Die zuvor erwähnte Abschirmkonstante wird nun für Kupfer betrachtet. Da Kupfer vier Schalen besitzt, lassen sich jeweils für die 3 äußeren Schalen die Abschirmkonstanten  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  und  $\sigma_3$  berechnen.

Wenn die Emissionsenergien der  $K_\alpha$ - und  $K_\beta$ -Linie sowie die Absorptionsenergie  $E_{K, \text{ abs}}$  bekannt sind, lassen sich die Abschirmkonstanten über

$$E_{K, \text{ abs}} = R_\infty (z - \sigma_1)^2 \quad (2)$$

$$E_{K, \alpha} = R_\infty \frac{1}{n^2} (z - \sigma_1)^2 - R_\infty \frac{1}{m^2} (z - \sigma_2)^2 \quad (3)$$

$$E_{K, \beta} = R_\infty \frac{1}{n^2} (z - \sigma_1)^2 - R_\infty \frac{1}{l^2} (z - \sigma_3)^2, \quad (4)$$

bestimmen, wobei für Kupfer  $n = 1$ ,  $m = 2$  und  $l = 3$  gilt. Ein Theoriewert für die Absorptionsenergie lautet  $E_{K, \text{ abs}} = 8,988 \text{ keV}$  [4].

Eine andere Möglichkeit zur Bestimmung der Abschirmkonstante erfolgt über Betrachtung des Absorptionsspektrums. Für die  $K$ -Schale lässt sich die Abschirmkonstante  $\sigma_K$  über

$$\sigma_K = z - \sqrt{\frac{E_K}{R_\infty} - \frac{\alpha^2 z^4}{4}} \quad (5)$$

bestimmen, insofern die Energie der  $K$ -Kante bekannt ist. In der Gleichung beschreibt  $\alpha$  die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante.

## 2.4. Bragg'sche Reflexion

Um die Energie der Röntgenstrahlung zu bestimmen, bietet sich eine Messung der Wellenlänge  $\lambda$  an. Die Energie lässt sich dann leicht über

$$E = \frac{hc}{\lambda} \quad (6)$$

bestimmen. Lässt man Röntgenstrahlung auf ein dreidimensionales Gitter fallen, werden die Photonen an jedem Atom des Gitters gebeugt. Daher gibt es einen Glanzwinkel  $\theta$ , bei dem konstruktive Interferenz auftritt, dieser Winkel lässt sich leicht messen. Diese sogenannte Bragg'sche Reflexion ist in Abbildung 3 dargestellt. Bei bekannter Gitterkonstante  $d$  kann dann die Wellenlänge mithilfe der Bragg'schen Bedingung

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

berechnet werden.

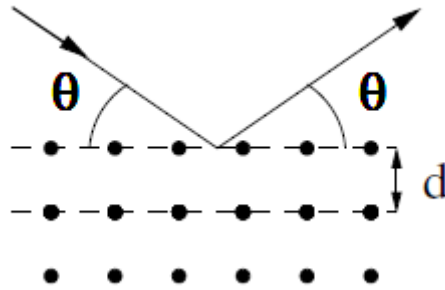


Abbildung 3: Skizze der Bragg'sche Reflexion.[3]

### 3. Durchführung

Für den Versuch wird eine Kupfer-Röntgenröhre verwendet, deren Röntgenstrahlung wird an einem LiF-Kristall gebrochen und mit einem Geiger-Müller-Zählrohr gemessen. Die Röntgenröhre erzeugt Elektronen mit einer Energie von 35 keV mit einem Emissionsstrom von 1 mA. Der verwendete LiF-Kristall besitzt eine Gitterkonstante von  $d = 201,4 \text{ pm}$ .

#### 3.1. Vorbereitung

Zur Vorbereitung auf den Versuch sollen Literaturwerte zu den  $K_\alpha$  und  $K_\beta$  Linien von Kupfer recherchiert werden. Zusätzlich wurde aus diesen Werten mithilfe von Gleichung 6 und Gleichung 7 der zugehörige Braggwinkel berechnet.

$$\begin{aligned} K_\alpha &= 8 \text{ keV} \\ \theta_\alpha &= 22,66^\circ \\ K_\beta &= 8,95 \text{ keV} \\ \theta_\beta &= 20,14^\circ \end{aligned}$$

Für die Auswertung der Absorptionsmessung werden Literaturwerte für die  $K$ -Kanten verschiedener Elemente benötigt. Auch hier werden direkt mit Gleichung 6 und Gleichung 7 der Braggwinkel sowie mit Gleichung 5 die Abschirmkonstante berechnet, alle Werte finden sich in Tabelle 1.

**Tabelle 1:** Literaturwerte für die Absorptionsenergie  $E_K$ , sowie errechnete Werte für  $\theta_K$  und  $\sigma_K$ . Dabei ist  $Z$  die Ordnungszahl des jeweiligen Elements [4]

	$Z$	$E_K^{\text{Lit}} / \text{keV}$	$\theta_K^{\text{Lit}} / ^\circ$	$\sigma_K$
Zink	30	9,65	18,60	3,56
Gallium	31	10,37	17,29	3,61
Germanium	32	11,10	16,20	3,68
Brom	35	13,47	13,23	3,85
Rubidium	37	15,20	11,70	3,94
Strontium	38	16,10	11,04	4,00
Zirkonium	40	17,99	9,86	4,10

### 3.2. Messung

Ziel der ersten Messung ist es, die Braggbedingung zu prüfen. Dafür wird der LiF-Kristall auf einen festen Winkel von  $\theta = 14^\circ$  eingestellt. Mithilfe des Geiger-Müller-Zählrohrs wird nun die Intensität der Röntgenstrahlung in einem Bereich zwischen  $26^\circ$  und  $30^\circ$  gemessen, dabei beträgt der Winkelzuwachs  $\Delta\alpha = 0,1^\circ$  mit einer Integrationszeit von  $\Delta t = 5 \text{ s}$ .

Als nächstes soll das Emissionsspektrum der Cu-Röntgenröhre untersucht werden. Dafür wird der Winkel des LiF-Kristall an den des Geiger-Müller-Zählrohrs gekoppelt, damit die Braggbedingung zu jedem Zeitpunkt erfüllt ist. Es wird in einem Bereich zwischen  $4^\circ$  und  $26^\circ$  gemessen, diesmal mit  $\Delta\alpha = 0,2^\circ$  und wie vorher  $\Delta t = 5 \text{ s}$ .

Direkt dannach soll der Bereich um die  $K_\alpha$  und  $K_\beta$  Kanten genauer untersucht werden. Dafür wird in einem möglichst kleinem Winkelbereich diese Stelle erneut vermessen, um für eine gute Auflösung zu sorgen wird  $\Delta\alpha = 0,1^\circ$  gewählt,  $\Delta t = 5 \text{ s}$  bleibt gleich.

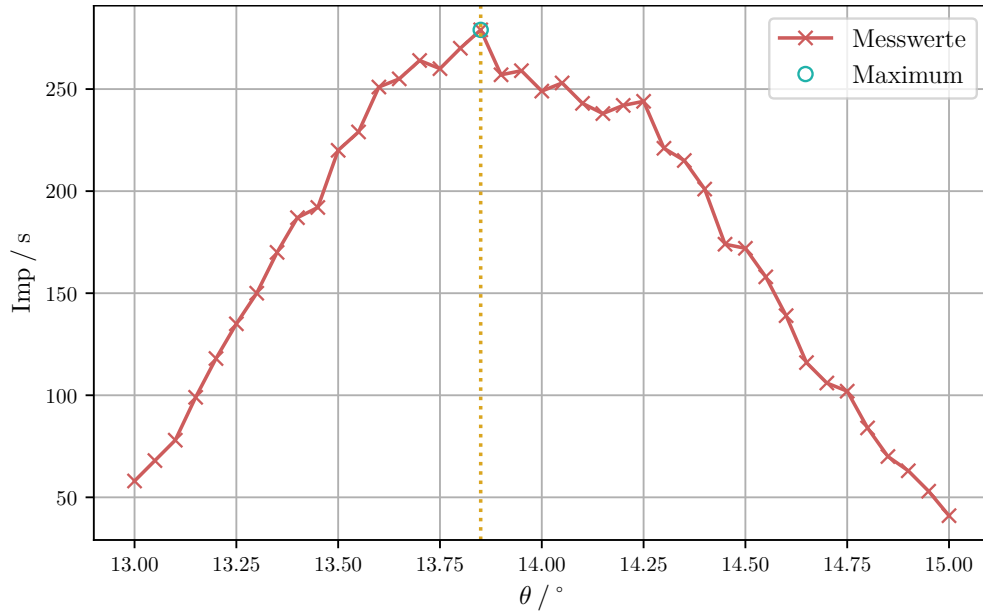
Die weiteren Messungen dienen zur Untersuchung des Absorptionsspektrums und werden mit fünf verschiedenen Elementen durchgeführt. Vor jeder Messung wird eine dünne Schicht des Absorbers direkt vor dem Geiger-Müller-Zählrohr befestigt. Anschließend wird in einem geeigneten Messbereich, der um den in Tabelle 1 berechneten Braggwinkel liegt, eine Messung mit einem Winkelzuwachs von  $\Delta\alpha = 0,1^\circ$  gestartet. Die Integrationszeit wird hier auf  $\Delta t = 20 \text{ s}$  eingestellt.

Alle Messwerte werden digital erfasst und zur Auswertung in *.txt* Dateien abgespeichert.

## 4. Auswertung

### 4.1. Überprüfung der Bragg-Bedingung

Zur Überprüfung der Bragg-Bedingung werden die Messwerte graphisch in Abbildung 4 dargestellt und es wird das Maximum bei  $\theta_{\text{exp}} = 13,85^\circ$  abgelesen. Da der theoretische Bragg-Winkel bei  $\theta_{\text{theorie}} = 14^\circ$  liegt, beläuft sich die relative Abweichung hier auf rund  $\Delta\theta = 1,1 \%$ .



**Abbildung 4:** Überprüfung der Bragg-Bedingung liefert experimentellen Bragg-Winkel von  $\theta_{\text{exp}} = 13,85^\circ$ .

## 4.2. Emissionsspektrum einer Cu-Röhre

Die Daten zu der breiten Messreihe des Emissionsspektrum werden in Abbildung 5 visualisiert. Der Bremsberg, sowie die  $K_\alpha$ - und  $K_\beta$ -Linien sind deutlich zu erkennen und lassen sich zu

$$K_\alpha = 22,4^\circ$$

$$K_\beta = 20,2^\circ$$

bestimmen. Der Grenzwinkel  $\theta_{\text{Grenz}}$  ist nicht besonders deutlich zu sehen, kann aber auf etwa

$$\theta_{\text{Grenz}} = 5,2^\circ$$

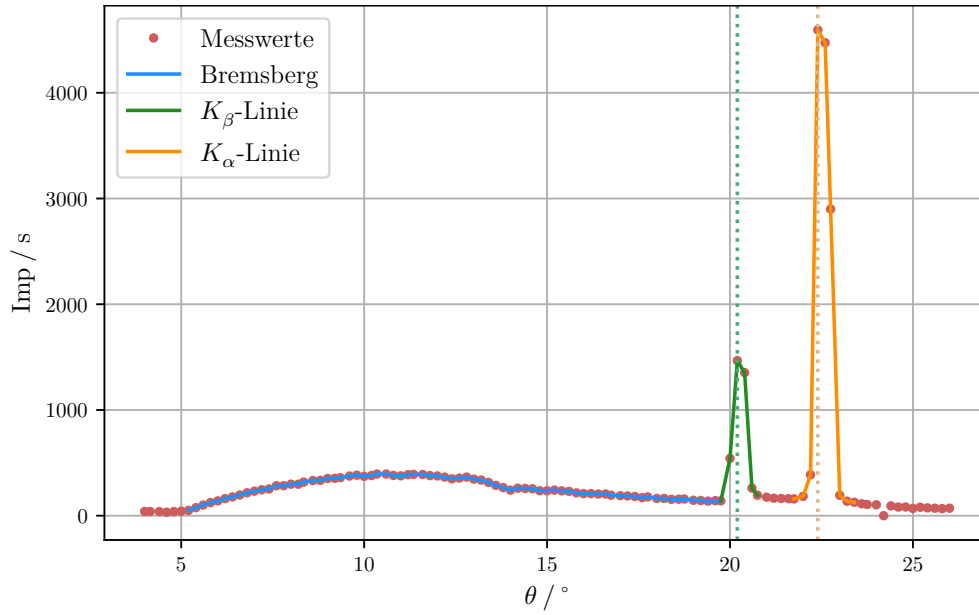
geschätzt werden. Daraus folgt mit (6) und (7) eine minimale Wellenlänge von

$$\lambda_{\text{min}} = 36,51 \text{ pm}$$

und eine maximale Energie von

$$E_{\text{max}} = 33,96 \text{ keV}.$$



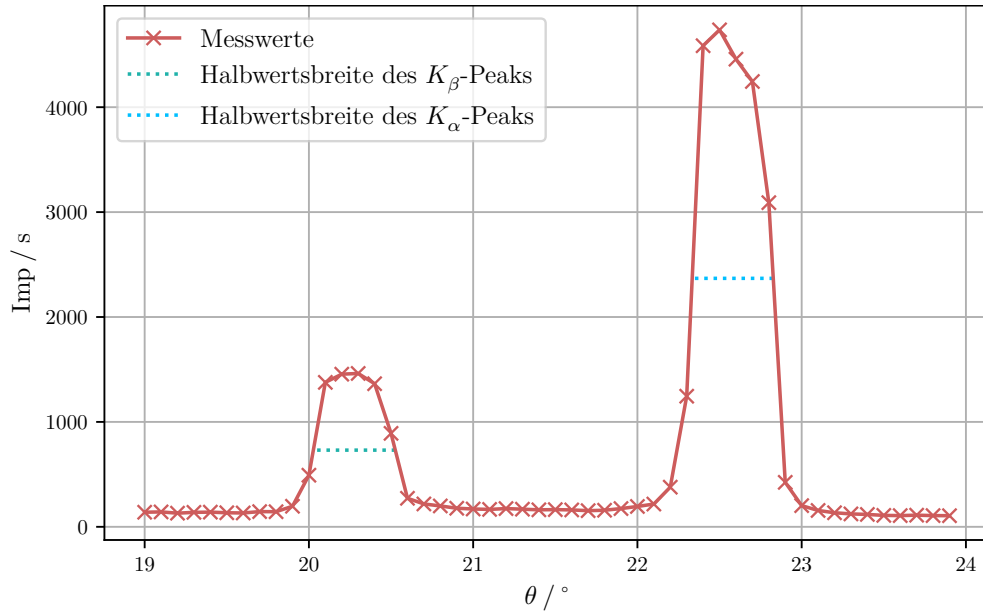


**Abbildung 5:** Emissionsspektrum der Cu-Röhre mit Markierungen des Bremsbergs, sowie der  $K_\alpha$ - und  $K_\beta$ -Linien.

In Abbildung 6 sind die Daten der Aufzeichnung des Detailspektrums dargestellt. Damit das Auflösungsvermögen der Apparatur bestimmt werden kann, werden die Halbwertsbreiten der  $K_\alpha$ - und  $K_\beta$ -Linien in den Plot eingezeichnet und die Schnittpunkte mit der Messwertkurve bestimmt. So ergeben sich für jeden Peak zwei Winkel, denen über (6) und (7) Energien zugeordnet werden können. Die Energiedifferenz dieser Energien  $\Delta E$  wird verwendet, um über

$$A = \frac{E}{\Delta E}$$

das Auflösungsvermögen zu berechnen.



**Abbildung 6:** Detailspektrum der Cu-Röhre mit eingezeichneten Halbwertsbreiten der  $K_\alpha$ - und  $K_\beta$ -Linien.

**Tabelle 2:** Darstellung des Auflösungsvermögens.

$K$ -Linie	$E / \text{keV}$	$\Delta E / \text{keV}$	$A$
$\alpha$	8,04	0,17	52,3
$\beta$	8,87	0,21	42,4

In einem nächsten Schritt werden mit (2), (3), und (4), sowie den Energien der  $K$ -Linien aus Tabelle 2 die Abschirmkonstanten berechnet.

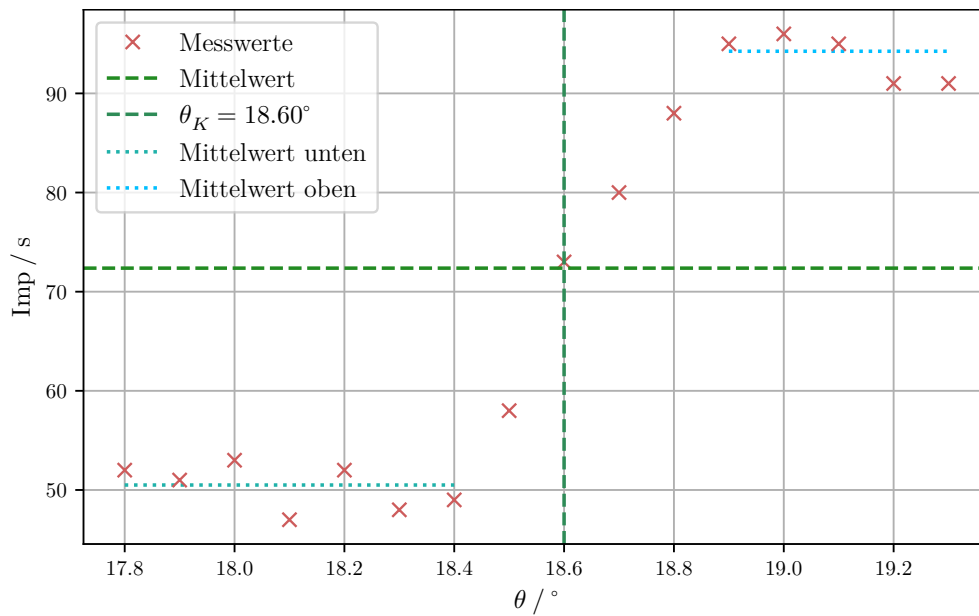
**Tabelle 3:** Darstellung der Abschirmkonstanten. Die Berechnung erfolgt sowohl für die Energien aus Tabelle 2, als auch für Theoriewerte.

$\sigma_n$	experimentell	theoretisch	relative Abweichung
$\sigma_1$		3,29	
$\sigma_2$	12,30	11,95	2,91 %
$\sigma_3$	20,16	23,99	15,94 %

### 4.3. Absorptionsspektrum verschiedener Elemente

#### 4.3.1. Bestimmung des Bragg-Winkels, Absorptionsenergie, und Abschirmkonstanten.

Die Daten aus den Messungen der Absorptionsspektren der verschiedenen Absorber werden graphisch dargestellt und es wird die Absorptionsenergie bestimmt. Dies geschieht indem zunächst die Messwerte vor dem Wendepunkt und nach dem Mittelpunkt einzeln gemittelt werden und dann wiederum der Mittelwert dieser beiden Mittelwerte als horizontale Linie in den Plot eingezeichnet wird. Die Schnittstelle der Messwertkurve mit dieser Linie ist dann der Braggwinkel  $\theta_K$  zur Absorptionsenergie der K-Kante. Aus der Absorptionsenergie lässt sich mit (5) außerdem die Abschirmkonstante berechnen. Dies wird für fünf verschiedene Absorber durchgeführt, die Plots für Brom, Gallium, Strontium, und Zirkonium sind im Anhang A zu finden.



**Abbildung 7:** Bestimmung des Bragg-Winkels des Zink-Absorbers.

In den nachfolgenden Tabellen 4, 5, und 6 sind die berechneten Werte, sowie die relativen Abweichungen zu den Theoriewerten aufgeführt.

**Tabelle 4:** Bragg-Winkel der verschiedenen Absorber.

Element	$\theta_K^{\text{lit}} / ^\circ$	$\theta_K^{\text{exp}} / ^\circ$	$\Delta\theta_K / \%$
Zn	18,60	18,60	0,00
Br	13,23	13,18	0,38
Ga	17,29	17,32	0,17
Sr	11,04	11,02	0,18
Zr	9,86	9,90	0,41

**Tabelle 5:** Absorptionsenergie der verschiedenen Absorber.

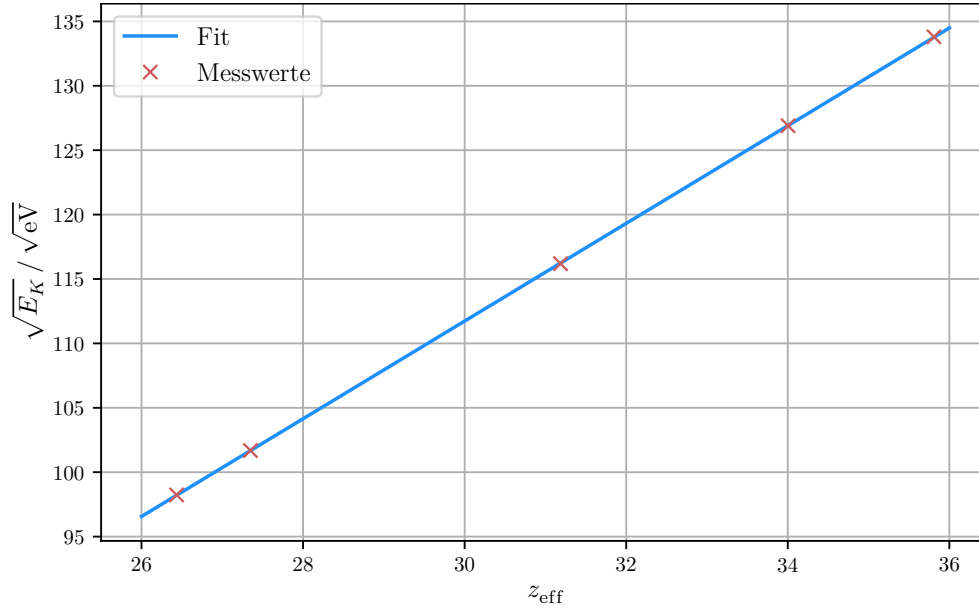
Element	$E_K^{\text{lit}} / \text{keV}$	$E_K^{\text{exp}} / \text{keV}$	$\Delta E_K / \%$
Zn	9,65	9,65	0,01
Br	13,47	13,50	0,22
Ga	10,37	10,34	0,30
Sr	16,10	16,10	0,02
Zr	17,99	17,90	0,48

**Tabelle 6:** Abschirmkonstanten der verschiedenen Absorber.

Element	$\sigma_K^{\text{lit}}$	$\sigma_K^{\text{exp}}$	$\Delta\sigma_K / \%$
Zn	3,56	3,57	0,15
Br	3,85	3,81	0,97
Ga	3,61	3,65	1,15
Sr	4,00	3,99	0,09
Zr	4,10	4,19	2,21

#### 4.3.2. Bestimmung der Rydbergkonstanten

Aus dem Moseleyschen Gesetz (1) folgt ein linearer Zusammenhang zwischen  $\sqrt{E_K}$  und  $z$ . Der Proportionalitätsfaktor ist die Rydbergenergie  $R_\infty$ . Die Daten werden in dem Diagramm Abbildung 8 dargestellt und es wird mit der python-Erweiterung *scipy* [1] eine lineare Ausgleichsrechnung durchgeführt. Aufgrund der Abschirmung der Kernladung durch die äußeren Elektronen, wird mit der effektiven Kernladung  $z_{\text{eff}}=z-\sigma_K$  gerechnet.



**Abbildung 8:** Plot der Absorptionsenergien und zugehörigen Ordnungszahlen.

Die lineare Ausgleichsrechnung liefert die Gerade vom Typ  $y = mx + b$  mit den Parametern

$$m = (3,792 \pm 0,005) \sqrt{\text{eV}}$$

$$b = (-2,03 \pm 0,15) \sqrt{\text{eV}}.$$

Für die Rydbergenergie ergibt sich demnach

$$R_{\infty} = (14,38 \pm 0,04) \text{ eV}$$

was einer relativen Abweichung zum Theoriewert von rund  $\Delta R_{\infty} = 5,74\%$  entspricht.

## 5. Diskussion

Der experimentell bestimmte Braggwinkel stimmt gut mit der theoretisch erwarteten Braggbedingung überein. Der relativ kleine Fehler von  $\Delta\theta = 1,1\%$  kann auf eine nicht perfekte Einstellung der Messapparatur zurückgeführt werden, sollte aber keinen großen Einfluss auf die weiteren Messergebnisse haben.

Der qualitative Verlauf des Emmissionsspektrums der Cu-Röhre weist den erwarteten Bremsberg sowie die  $K_{\alpha}$ - und  $K_{\beta}$ -Linien auf. Ihre absoluten Werte stimmen gut mit den Theoriewerten überein, die maximale Energie  $E_{\text{max}} = 33,96 \text{ keV}$  liegt leicht unter dem theoretischen Maximum von  $35 \text{ keV}$ , das die Röhre erzeugen kann.

Die Abweichungen der K-Linien betragen  $\Delta K_{\alpha} = 0,5\%$ - und  $\Delta K_{\beta} = 1,3\%$  und fallen somit sehr gering aus. Aus den Energien der K-Linien wurden experimentelle Werte für die Abschirmkonstanten  $\sigma_2$  und  $\sigma_3$  bestimmt. Vor allem  $\sigma_3$  weist mit  $15,94\%$  eine relativ

große Abweichung zur Theorie auf, diese könnte an Ableseungenauigkeiten der Peaks liegen, da diese relativ breit sind.

Im letzten Versuchsteil wurden die Absorptionsenergien und Abschirmkonstanten von fünf verschiedenen Elementen berechnet. Nahezu sämtlich Werte besitzen hier sehr geringe Abweichungen von der Theorie, die deutlich kleiner als 1 % sind. Die größte Abweichung tritt bei der Abschirmkonstante von Zr auf. Sie liegt bei lediglich 2,21 % und ist somit ebenfalls akzeptabel.

Die experimentell berechnete Rydbergenergie weicht um 5,74 % von der Theorie ab, der etwas größere Fehler liegt hier wahrscheinlich daran, dass die für die Regression verwendeten Werte der Abschirmkonstanten bereits fehlerbehaftet sind.

Zusammenfassend konnten mit diesem Versuch viele Theoriewerte präzise bestätigt werden, die digitale Erfassung der Daten sowie eine gute Kalibrierung der Messapparatur haben hier positiven Einfluss gehabt.

## Literatur

- [1] Eric Jones, Travis E. Oliphant, Pearu Peterson u. a. *SciPy: Open source scientific tools for Python*. Version 0.16.0. URL: <http://www.scipy.org/>.
- [2] Nils Mosch. *Software zur Berechnung von Röntgenspektren mit beliebiger Spannung und Vorfilterung auf Basis von Rohdaten*. 2018. URL: [https://reposit.haw-hamburg.de/bitstream/20.500.12738/8471/1/Bachelor\\_Thesis\\_Nils\\_Mosch.pdf](https://reposit.haw-hamburg.de/bitstream/20.500.12738/8471/1/Bachelor_Thesis_Nils_Mosch.pdf) (besucht am 27. 04. 2022).
- [3] *Versuch V602: Röntgenemission und -absorption*. TU Dortmund, Fakultät Physik.
- [4] *X-Ray Transition Energies Data Base*. URL: <https://physics.nist.gov/cgi-bin/XrayTrans/search.pl?element=Cu&lower=&upper=&units=eV> (besucht am 27. 04. 2022).

## A. Anhang

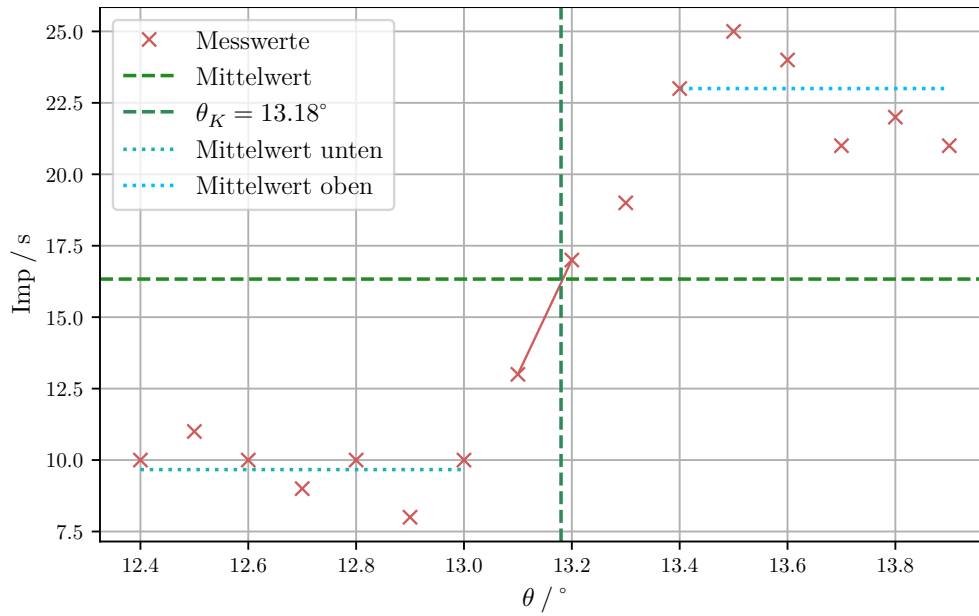


Abbildung 9: Bestimmung des Bragg-Winkels des Brom-Absorbers.

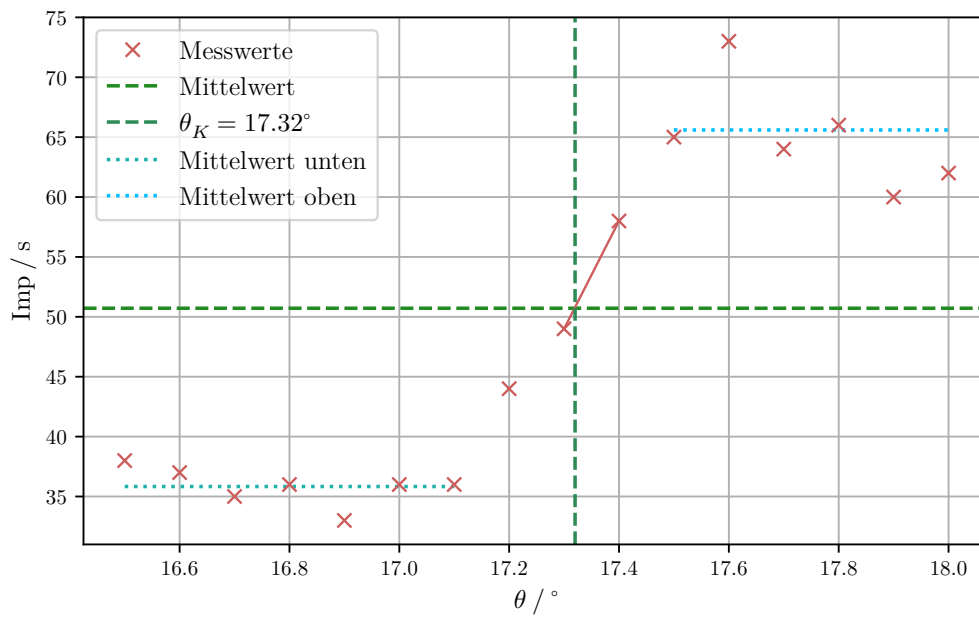
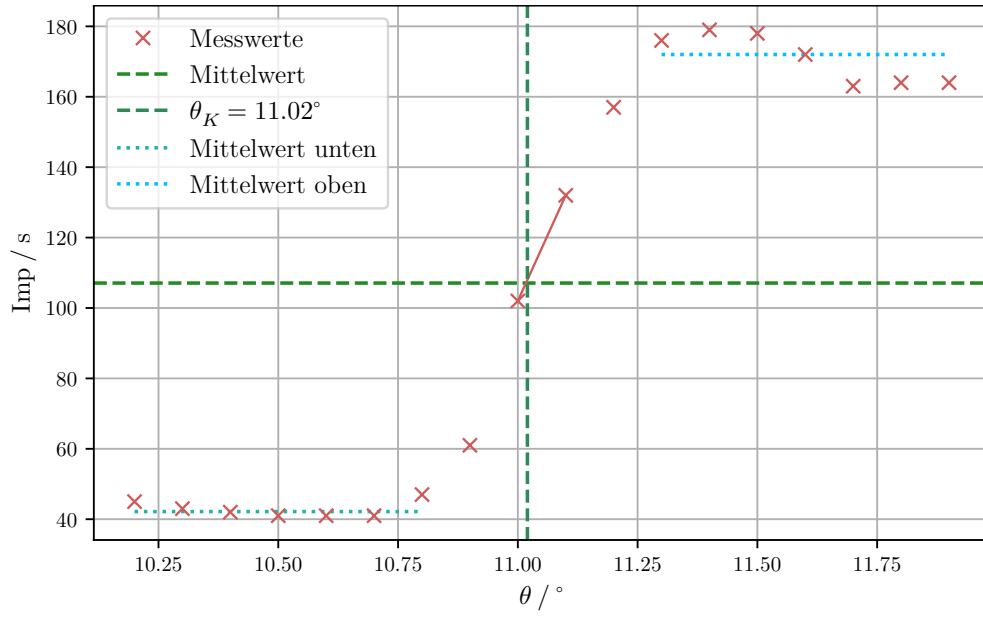
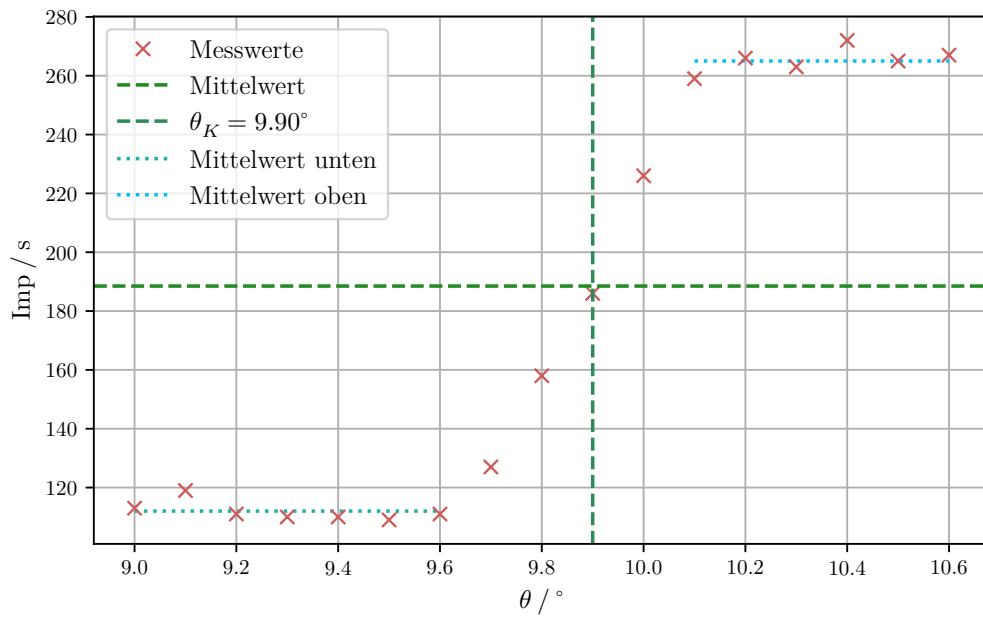


Abbildung 10: Bestimmung des Bragg-Winkels des Gallium-Absorbers.



**Abbildung 11:** Bestimmung des Bragg-Winkels des Strontium-Absorbers.



**Abbildung 12:** Bestimmung des Bragg-Winkels des Zirkonium-Absorbers.