

V602

Röntgenemission und -absorption

Umut Aydinli
umut.aydinli@tu-dortmund.de

Muhammed-Sinan Demir
sinan.demir@tu-dortmund.de

Durchführung: 19.04.2022

Abgabe: 26.04.2022

TU Dortmund – Fakultät Physik

Inhaltsverzeichnis

1 Zielsetzung	3
2 Theorie	3
3 Vorbereitungsaufgabe	5
4 Versuchsaufbau und Versuchsdurchführung	5
4.1 Überprüfung der Bragg Bedingung	6
4.2 Das Emissionsspektrum einer Cu-Röntgenröhre	6
4.3 Das Absorptionsspektrum	7
5 Auswertung	7
5.1 Überprüfung der Bragg-Bedingung	7
5.2 Emissionsspektrum einer Cu-Röhre	8
5.2.1 Maximalenergie des Bremsspektrums	8
5.2.2 Auflösungsvermögen des Apparatur	9
5.2.3 Bestimmung der Abschirmkonstanten von Kupfer	9
5.3 Bestimmung der Abschirmkonstanten aus den Absorptionsspektren	10
5.4 Bestimmung der Rydbergkonstante	13
6 Diskussion	14
Literatur	15

1 Zielsetzung

In dem Versuch V602 geht es um die Bestimmung des Emissionsspektrums einer Kupferröntgenröhre, das Absorptionsspektrum verschiedener Stoffe und die Überprüfung der Bragg Bedingung.

2 Theorie

Um Röntgenstrahlen zu erzeugen werden Elektronen durch das Erhitzen einer Glühkathode, welche in einem elektrischen Feld ist, durch eine evakuierte Röhre auf eine Anode beschleunigt. Beim Auftreffen der Elektronen auf der Anode entsteht Röntgenstrahlung. Diese setzt sich aus der charakteristischen Röntgenstrahlung des Anodenmaterials sowie dem kontinuierlichen Bremspektrum zusammen. Das Elektron wird in dem Coulombfeld des Atomkerns abgebremst, wobei ein Photon ausgesendet wird, welches die Energie besitzt, die das Elektron beim Abbremsen verliert. Dies ist der Vorgang beim Entstehen des Bremspektrums. Damit das Bremspektrum kontinuierlich ist, muss das Elektron seine ganze kinetische Energie, sowie seine Energie abgeben. Die minimale Wellenlänge bei vollständiger Abbremsung ergibt sich durch

$$\lambda_{\min} = \frac{h \cdot c}{e_0 \cdot U} \quad (1)$$

und wird von kinetischer Energie zu Strahlungsenergie umgewandelt. Bei dem charakteristischen Spektrum wird das Anodenmaterial so ionisiert, dass eine Leerstelle in der innersten Schale entsteht, wodurch ein Elektron, unter der Voraussetzung das ein Röntgenquant ausgesendet wird, aus einer äußeren Schale in die innere zurückfallen kann. Die Energiedifferenz $h\nu = E_{\text{kin}} - E_n$ der beiden Energieniveaus ist gleich der Energie des Röntgenquants, wodurch das charakteristische Spektrum aus scharfen Linien besteht und die Energie charakteristisch für das Anodenmaterial der Röntgenröhre ist. Diese Linien werden durch die Schale (K,L,M) und α oder β gekennzeichnet, beispielsweise K_α , K_β . Bei einem Mehrelektronenatom verringert sich die Coulomb Anziehung aufgrund des Schirmens durch die Hüllenelektronen und die Wechselwirkung der Elektronen untereinander, wodurch sich die Bindungsenergie eines Elektrons auf der n-ten Schale durch

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

berechnen lässt. $R_\infty = 13,6 \text{ eV}$ ist die Rydbergenergie, σ die Abschirmkonstante und $z_{\text{eff}} = z - \sigma$ die effektive Kernladung, welche den Abschirmeffekt berücksichtigt. Durch die Formel (2) lässt sich die Energie $E_{K\alpha}$, wobei die Abschirmkonstante für jedes Elektron unterschiedlich ist und empirisch bestimmt wird.

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

Durch den Bahndrehimpuls sowie den Elektronenspin der äußeren Elektronen, besitzen nicht alle die selbe Bindungsenergie, was zur Folge hat, dass die charakteristischen Linien in einer Reihe eng beieinander liegen aufgelöst sind. Diese sind jedoch nicht aufspaltbar in diesem Versuch. Beobachtbar sind hierbei die Überlagerung der Bremsstrahlung der Cu-K $_{\alpha}$ - und Cu-K $_{\beta}$ Linien die von der Kupferanode ausgehen. Der Comptoneffekt und der Photoeffekt sind zwei dominante Prozesse die bei der Absorption von Röntgenstrahlung unter 1 MeV auftreten. Durch zunehmende Energie wird der Absorptionskoeffizient kleiner, steigt jedoch sprunghaft an wenn die Bindungsenergie eines Elektrons aus der nächst inneren Schale kleiner ist als die Energie des Photons. Die Bindungsenergie des Elektrons ist nahezu identisch mit den Absorptionskanten $h\nu_{\text{abs}} = E_n - E_{\infty}$, wobei die Energien je nach Schale als K-, L-, M- Absorptionskante bezeichnet werden. Bei Betrachtung der Feinstruktur fällt auf, dass die K-Kante nur einmal vorhanden ist, wobei die L-Kante drei verschiedene besitzt. Durch Berechnung der Bindungsenergie $E_{n,j}$ eines Elektrons mit Hilfe der Sommerfeldschen Feinstrukturformel, werden diese Feinstrukturen berücksichtigt.

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

Hierbei steht R_{∞} für die Rydbergenergie, z_{eff} für die effektive Kernladung, α für die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante, n für die Hauptquantenzahl und j für den Gesamtdrehimpuls des Elektrons. Die Abschirmkonstante $\sigma_{K, \text{abs}}$ kann durch die Sommerfeldsche Feinstrukturformel für ein Elektron aus der K-Schale mit der Hauptquantenzahl eins bestimmt werden.

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

Die Feinstrukturspaltung der K-Schale wird durch den zweiten Term unter der Wurzel berücksichtigt. Um die Abschirmkonstante σ_L zu bestimmen müssen die Abschirmzahlen jedes Elektrons berücksichtigt werden, was bedeutet das dabei ebenso die Feinstrukturen berücksichtigt werden. Die Berechnung der Abschirmkonstante kann jedoch durch die Energiedifferenz ΔE_L zweier L-Kanten bestimmt werden.

$$\sigma_L = Z - \left(\frac{4}{\alpha} \sqrt{\frac{\Delta E_L}{R_{\infty}}} - \frac{5\Delta E_L}{R_{\infty}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{19}{32} \alpha^2 \frac{\Delta E_L}{R_{\infty}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

wobei die Energiedifferenz $\Delta E_L = E_{L_{II}} - E_{L_{III}}$, Z die Ordnungszahl, R_{∞} die Rydbergenergie und α die Feinstrukturkonstante ist.

Die Braggsche Reflexion ist ein experimenteller Weg die Energie E sowie die Wellenlänge λ der Röntgenstrahlung zu bestimmen. Dabei wird das Röntgenlicht auf eine, wie in diesem Versuch vorhandenen, LiF-Kristall geworfen, wobei der Kristall wie ein dreidimensionales Gitter funktioniert und die Photonen an jedem Atom des Kristalls gebeugt werden. Durch das interferieren der Röntgenstrahlen miteinander erhält man bei einem Glanzwinkel von θ konstruktive Interferenz. Durch die Formel

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

lässt sich bei einem Winkel θ und einer Gitterkonstante d , welche bei dem LiF-Kristall bei $d = 201,4 \text{ pm}$ ist, die Wellenlänge λ bestimmen.

$$E = \frac{h \cdot \nu}{2d \sin(\theta)} \quad (8)$$

3 Vorbereitungsaufgabe

Die erste Vorbereitungsaufgabe besteht aus der Recherche der Literaturwerte für die Energien der Cu-K_α - und Cu-K_β Linien und bei welchen Winkeln θ diese bei einem KBr-Kristall liegen. Der Kristall hat eine Dicke von $d = 204.1 \text{ pm}$.

In der zweiten Vorbereitungsaufgabe soll eine Tabelle erstellt werden für fünf verschiedene Stoffe. Aufgenommen werden die Ordnungszahl Z , der Literaturwert [3] [2] der K-Kante E_K^{lit} , der Braggwinkel zu E_K^{lit} θ_K^{lit} und die Abschirmkonstante σ_K . Um den Winkel θ_K^{lit} zu bestimmen muss in den Nenner der Formel (1) der Wert für E_K^{lit} eingesetzt werden und durch das Umstellen der Bragg Bedingung in Formel (7) der Winkel bestimmt.

Tabelle 1

	Z	$E_K^{\text{lit}} / \text{keV}$	$\theta_K^{\text{lit}} / ^\circ$	σ_K
Zn	30	9,65	18,28	3,96
Ga	31	10,37	17,01	3,39
Br	35	13,47	13,09	3,53
Sr	38	16,10	10,96	3,59
Zr	40	17,99	9,80	3,63

4 Versuchsaufbau und Versuchsdurchführung

Der Aufbau für diesen Versuch besteht aus einer Kupfer-Röntgenröhre, einem KBr-Kristall, einem Geiger-Müller-Zählrohr und einem Rechner mit dem Programm

measure. Die Röntgenröhre kann manuell aber auch mit dem Rechner bedient werden, jedoch werden in diesem Versuch alle Messungen mit dem Rechner aufgenommen. In dem Programm werden folgende Einstellungen gewählt:
 In der oberen Zeile des Programms wird unter dem Menüpunkt Messgerät, Röntgengerät ausgewählt. Unter Messart können Drehmodus, Kristallwinkel, Spektren, Beschleunigungsspannung, Emissionsstrom, Startwinkel sowie Stopwinkel und die Integrationszeit eingestellt werden und die Messung nach einstellen starten. Der Emissionsstrom wird dabei durchgehend auf 1 mA und die Beschleunigungsspannung auf 35 kV gestellt.

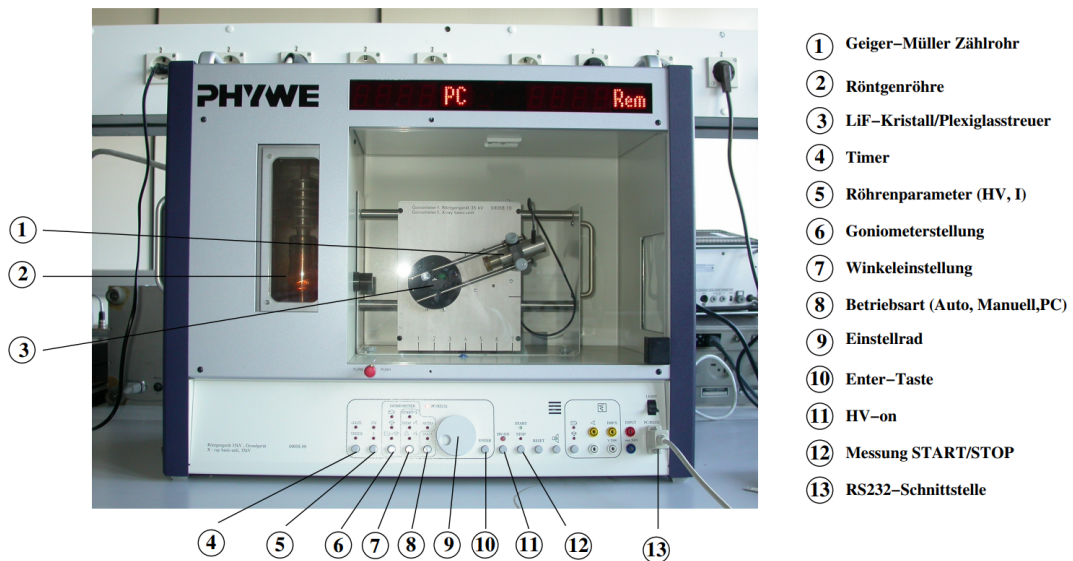


Abbildung 1: Röntgenröhre mit Geiger-Müller-Zählrohr [1].

4.1 Überprüfung der Bragg Bedingung

Um die Bragg Bedingung zu überprüfen wird in dem Programm der Kristall auf einen Festwinkel von $\theta = 14^\circ$ eingestellt. Der Startwinkel wird auf $\alpha_{\text{Gm}} = 26^\circ$, der Stopwinkel wird auf $\alpha_{\text{Gm}} = 30^\circ$, der Winkelzuwachs wird auf $\Delta\alpha = 0,1^\circ$ und die Integrationszeit wird auf $\Delta t = 5 \text{ s}$ gestellt. Danach kann die Messung gestartet und mit den gemessenen Daten das Maximum der Kurve bestimmt werden. Diese wird dann mit dem Sollwinkel verglichen und bei mehr als 1° Unterschied muss der Assistent oder die Praktikumsleitung informiert werden.

4.2 Das Emissionsspektrum einer Cu-Röntgenröhre

Um das Emissionsspektrum der Kupferröhre zu bestimmen wird unter dem Menüpunkt Messart der 2:1 Koppelmodus ausgewählt, der Startwinkel auf $\alpha = 4^\circ$ und der

Stopwinkel auf $\theta = 26^\circ$ gesetzt. Der Winkelzuwachs wird auf $0,2^\circ$ und die Integrationszeit auf $\Delta t = 5\text{ s}$ gesetzt. Danach kann die Messung gestartet werden.

4.3 Das Absorptionsspektrum

Für die Bestimmung des Absorptionsspektrums der fünf verschiedenen Stoffe, welche in der Vorbereitungsaufgabe vorkamen, wird die Integrationszeit auf $\Delta t = 20\text{ s}$ und der Winkelzuwachs auf $0,1^\circ$ gesetzt. Die jeweiligen Proben werden an dem Geiger-Müller-Zählrohr, mit Festziehen der an der Probe vorhandenen Schraube, befestigt. Start und Stopwinkel werden individuell über den in der Vorbereitungsaufgabe berechneten Winkel angepasst. Es sollten jedoch ca. $\pm 1^\circ$ bis 2° der berechneten Winkels als Start- Stopwinkel gewählt werden. Dies wird für alle fünf Stoffe wiederholt.

5 Auswertung

5.1 Überprüfung der Bragg-Bedingung

Im ersten Teil der Versuchsreihe wird die Braggbedingung überprüft. Dazu wird das Maximum aus dem Spektrum bestimmt. Das Maximum muss sich beim Doppelten Winkel $2\theta = 28^\circ$ befinden, da der Einfallswinkel $\theta = 14^\circ$ beträgt.

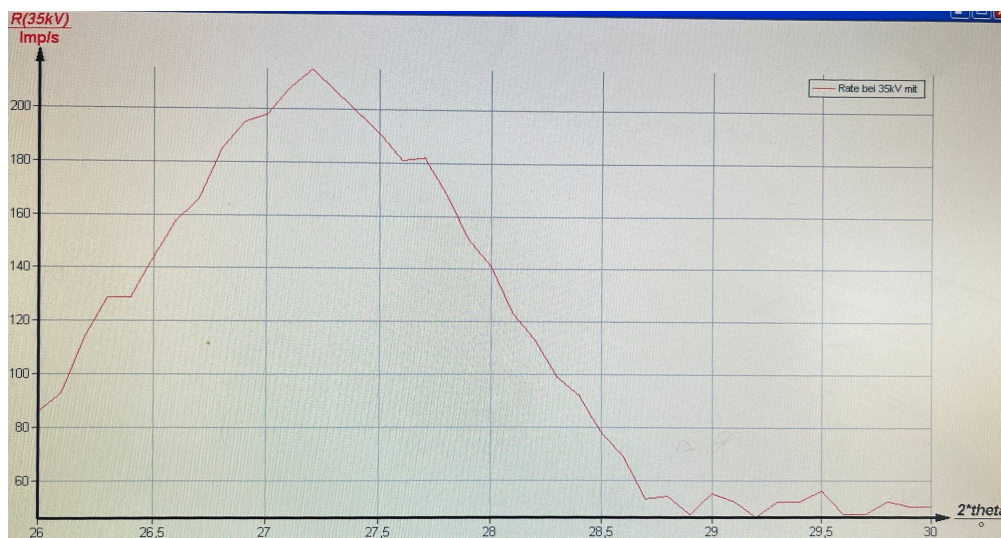


Abbildung 2: Messkurve bei einem Einstellwinkel von $\theta = 14^\circ$.

Aus der Abbildung 2 lässt sich der Winkel

$$\theta = (27,21 \pm 0,1)^\circ$$

ablesen.

5.2 Emissionsspektrum einer Cu-Röhre

5.2.1 Maximalenergie des Bremsspektrums

Um die Maximalenergie zu bestimmen wird der Winkel untersucht, bei dem sich die Intensität von null unterscheidet. Dazu liegt das Emissionsspektrum in Abbildung 3 vor. Auffällig hierbei ist, dass es einen Unterschied bei dem Winkel

$$\theta_1 = 8^\circ$$

gibt. Jedoch findet vorher eine minimale Änderung der Intensität bei dem Winkel

$$\theta_2 = 6,6^\circ$$

statt. Daher werden beide Winkel als Relationswinkel gewählt.

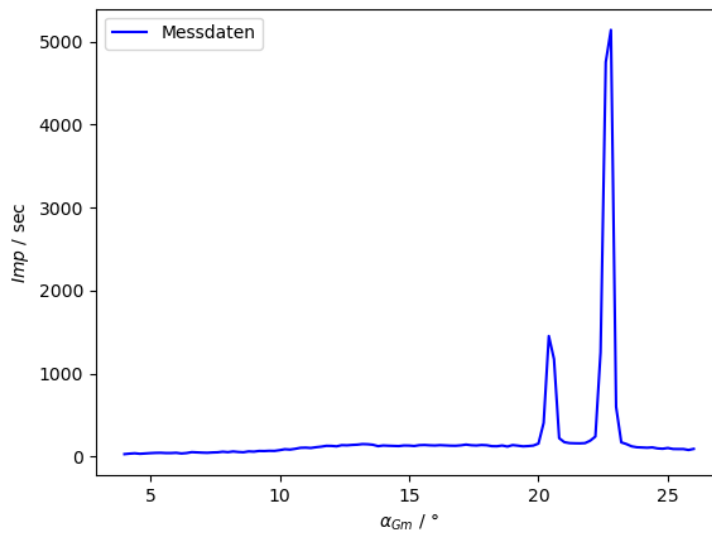


Abbildung 3: Emissionsspektrum der Cu-Röhre.

Aus der Formel (8) folgt für die Energiewerte

$$E_1 = 22,12 \text{ keV} ,$$

$$E_2 = 26,79 \text{ keV} .$$

Dabei beträgt die minimale Wellenlänge, mit der Formel (1) und $e \cdot U = 35 \text{ keV}$:

$$\lambda_{\min} = 3,54 \cdot 10^{-11} \text{ m} .$$

5.2.2 Auflösungsvermögen des Apparatur

Zur Bestimmung des Auflösungsvermögens werden die Grenzwinkel, bei denen das Maximum auf die Härte ihres Wertes sunken, untersucht. Daraus ergibt sich für die Grenzwinkel mit den jeweiligen Energien nach (8). Die Auflösungsenergie beschreibt das Verhältnis der Absorptionsenergie und der Energieänderung, die sich aus den Halbwertsbreiten bilden. Die Auflösungsenergien sind in Tabelle (2).

Tabelle 2

	$\theta_1 / ^\circ$	$\theta_2 / ^\circ$	E_1 / keV	E_2 / keV	$A = \frac{E_k}{\Delta E}$	E_K / keV
K_β	20,40	20,70	8,83	8,71	73,58	8,83
K_α	22,41	22,93	8,07	7,90	46,76	7,95

5.2.3 Bestimmung der Abschirmkonstanten von Kupfer

Aus der Abbildung 3 werden die Energien an der K_α sowie K_β Linien bestimmt. Durch das Ablesen der Winkel folgt für die Energien

$$\theta_\alpha = 22,8^\circ ,$$

$$\theta_\beta = 20,4^\circ ,$$

$$E_{K_\alpha} = 7,95 \text{ keV} ,$$

$$E_{K_\beta} = 8,83 \text{ keV} .$$

Durch die Formel (5) lassen sich die Abschirmkonstanten bestimmen. Dabei ist $Z = 29$ die Ordnungszahl, $n = 1$, $m = 2$ und $l = 3$. Die Rydbergenergie beträgt $R_\infty = 13,6 \text{ eV}$. Die Abschirmkonstante $E_{k, \text{abs}}$ lässt sich nicht durch die Apparatur bestimmen, daher wird der Wert aus der Literatur [3] genommen mit $E_{k, \text{abs}} = 8,98 \text{ keV}$

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= Z - \sqrt{\frac{E_{k, \text{abs}}}{R_\infty}} = 3,30, \\ \sigma_2 &= Z - 2\sqrt{-\frac{E_{K_\alpha}}{R_\infty} + (Z - \sigma_1)^2} = 11,57, \\ \sigma_3 &= Z - 3\sqrt{-\frac{E_{K_\beta}}{R_\infty} + (Z - \sigma_2)^2} = 18,94.\end{aligned}$$

5.3 Bestimmung der Abschirmkonstanten aus den Absorptionsspektren

Es werden für fünf Materialien (Zn, Ga, Br, Sr, Zr) jeweilige Absorptionsspektren erstellt und daraus die dazugehörige Abschirmkonstante mit Hilfe der Untersuchung der K-Kanten bestimmt. Die Bestimmung der Abschirmkonstanten erfolgt nach der Formel (5) und der Energien nach (8). Die Winkel werden aus dem Spektrum ermittelt. Die ermittelten Werte werden tabellarisch in Tabelle 3 festgehalten. Die Absorptionsspektren sind wie folgt.

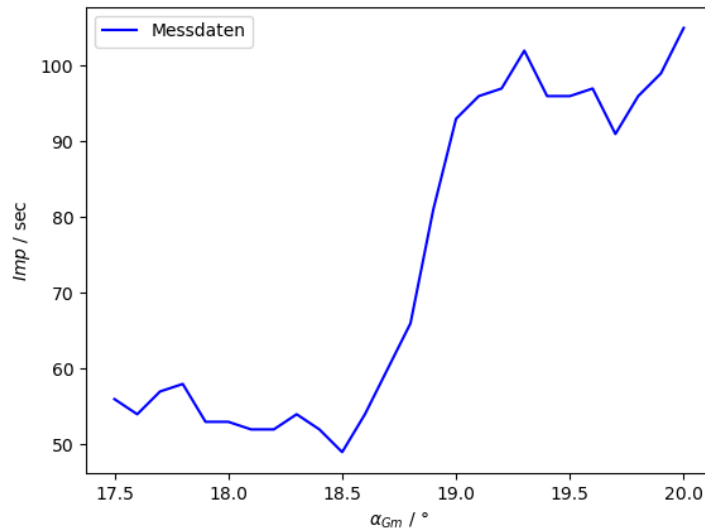


Abbildung 4: Absorptionsspektrum von Zink.

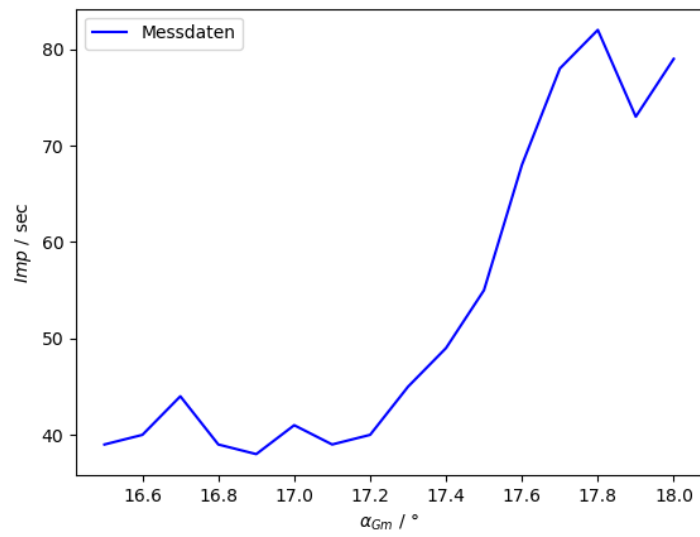


Abbildung 5: Absorptionsspektrum von Gallium.

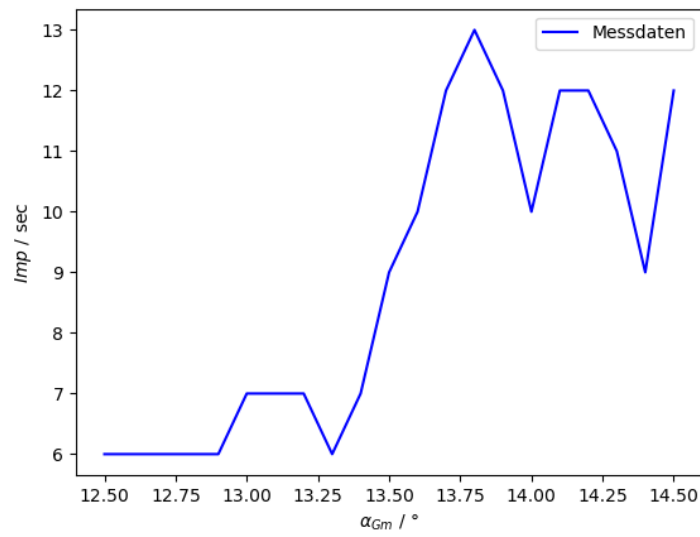


Abbildung 6: Absorptionsspektrum von Brom.

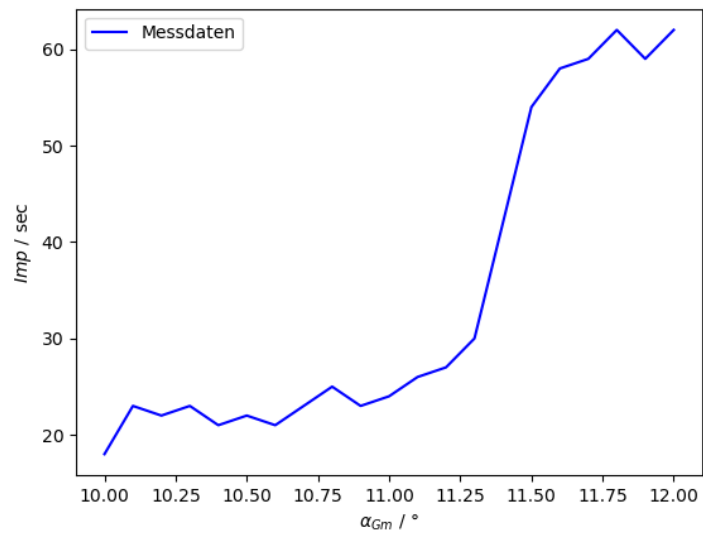


Abbildung 7: Absorptionsspektrum von Strontium.

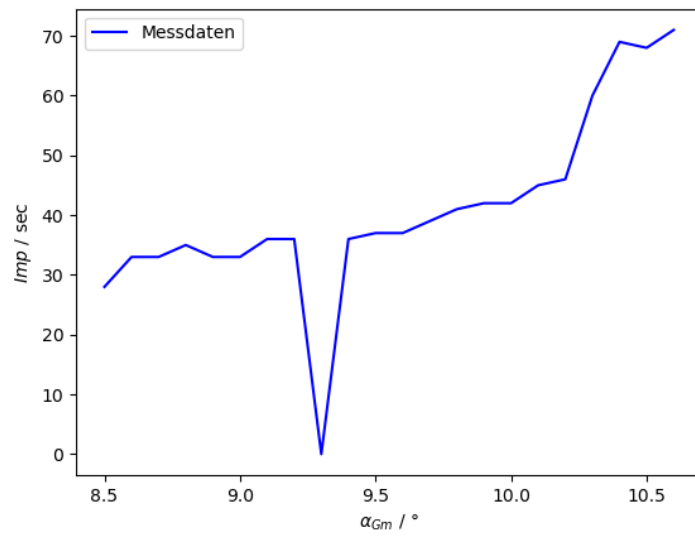


Abbildung 8: Absorptionsspektrum von Zirkonium.

Tabelle 3: Messwerte zu den jeweiligen Materialien.

	Z	$\theta / ^\circ$	E / keV	σ
Zn	30	18,82	9,54	3,51
Ga	31	17,58	10,19	3,62
Br	35	13,50	13,19	3,85
Sr	38	11,44	15,52	4,21
Zr	40	10,10	17,56	4,06

5.4 Bestimmung der Rydbergkonstante

Nach Moseley ist die Absorptionsenergie E_k proportional zu Z^2 . Die Energien werden in Abbildung 9 gegen die Ordnungszahlen aufgestellt.

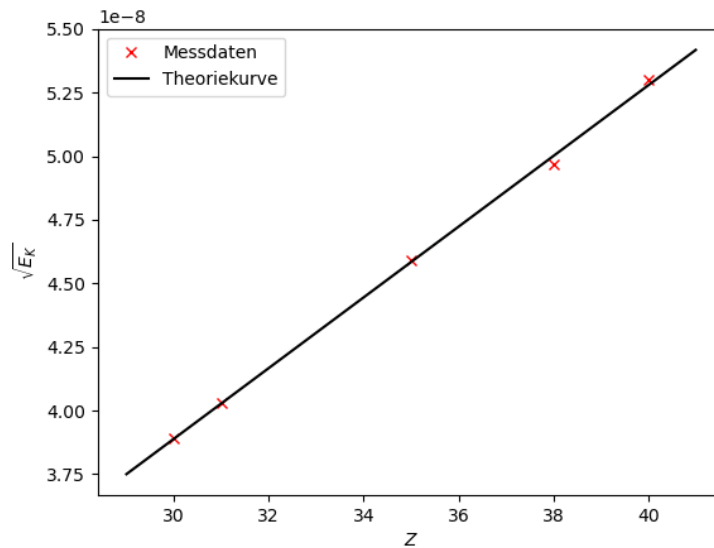


Abbildung 9: Energien in Wurzel gegen die Quantenzahl.

Die Steigung m der Gerade wird durch eine lineare Regression mit

$$y = m \cdot x + n$$

ermittelt

$$m = (1,38 \pm 0,02) \cdot 10^{-9} \sqrt{\text{J}}.$$

Die Rydberg-Konstante ergibt sich aus dem Moseleyschen-Gesetz

$$R_{\infty} = \frac{4m^2}{3h\nu},$$

somit

$$R_{\infty} = (1,27 \pm 0,48) \cdot 10^7 \frac{1}{\text{m}}.$$

6 Diskussion

Im ersten Teil der Versuchsreihe wurde die Bragg-Bedingung untersucht. Dies führt zu einer relativen Abweichung von:

$$\begin{aligned} \theta_{\text{Exp}} &= 27,21^\circ & \theta_{\text{Theo}} &= 28^\circ \\ & & & \rightarrow 2,82\%. \end{aligned}$$

Die Abweichung ist sehr gering dennoch besteht eine gewisse Ungenauigkeit, die womöglich auf das Messen der Apparatur führt. Auffällig im zweiten Teil der Reihe sind folgende Abweichungen:

Tabelle 4: Abweichung der maximalen Energie mit E_{Theo}

$E_{\text{Theo}} = 35\text{keV}$	
E_1	36,8%
E_2	27,4%

Tabelle 5: Abweichung der Energien und Abschirmkonstanten

	σ_{Lit} mit σ_{Exp} in %	E_{Lit} mit E_{Exp} in %
Zn	1,40	1,13
Ga	6,15	1,73
Br	8,45	2,07
Sr	14,25	3,06
Zr	11,23	2,39

Die gemessenen Energien weisen auf eine minimale Abweichung auf, dagegen sind die Abschirmkonstanten deutlich höher. Der höchste Wert beträgt 14,25%. Die Ungenauigkeit führt auf das Ablesen der Werte oder auf eine Fehlerquelle der Apparatur

selber, wie das Erfassen der Daten. Es ist anzumerken, dass der Rechner um ein älteres Modell handelt. Die mögliche Fehlerquelle lässt sich ebenso mit der maximalen Energie begründen, da die Abweichung deutlich größer ist als die anderen Abweichungen. Zudem wurden mehrere Materialien getestet, da es häufig zu einer Unstimmigkeiten der Werte kam.

Die Rydberg Konstante ließ sich aus der Steigung der Gerade bestimmen. Somit folgt für die Abweichung

$$R_{\infty} = (1,27 \pm 0,48) \cdot 10^7 \frac{1}{\text{m}} \quad R_{\infty, \text{Theo}} = 1,097 \cdot 10^7 \frac{1}{\text{m}} \\ \rightarrow 15,7\%$$

Grundsätzlich eignen sich alle Methoden, da sich die Messergebnisse in einem annehmbaren Bereich befinden, trotz der kleinen Ungenauigkeiten.

Literatur

- [1] TU Dortmund. *Röntgenemission und -absorption*. 2022. URL: https://moodle.tu-dortmund.de/pluginfile.php/1977196/mod_resource/content/4/V602.pdf (besucht am 19.04.2022).
- [2] Grossberger. *Röntgenfluoreszenz, Moseley-Gesetz*. 2022. URL: <http://www.grossberger.net/atomphysik/moseley1.html> (besucht am 19.04.2022).
- [3] *Wellenlängen und Anregungsenergien von K- und L- Absorptionskanten*. 2022. URL: <https://wissen.science-and-fun.de/tabellen-fur-spektroskopiker/wellenlaengen-und-anregungsenergien-von-k-und-l-absorptionskanten/> (besucht am 19.04.2022).