

Versuch 256

Röntgenfluoreszenz

Viktor Ivanov

2. Juli 2024

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
1.1	Motivation	2
1.2	Physikalische Grundlagen	2
1.2.1	Röntgenenergiedetektor	3
2	Messprotokoll und Durchführung des Versuchs	4
3	Auswertung	8
3.1	Bestimmung der Rydberg Energie über die K_α Übergänge	8
3.2	Bestimmung der Rydberg Energie über die K_β Übergänge	10
3.3	Untersuchung der Zusammensetzung unterschiedlicher Legierungen	11
4	Zusammenfassung und Diskussion	11
4.1	Diskussion	11
5	Anhang	13
5.1	Quellen	13
5.2	Python-Code	13

1 Einleitung

1.1 Motivation

Das Ziel dieses Versuchs ist die K_α und die K_β Übergänge von verschiedenen Elementen zu messen und daraus die Rydberg-Energie zu bestimmen. Am Ende des Versuchs bestimmen wir die chemische Zusammensetzung von zwei Legierungen.

1.2 Physikalische Grundlagen

Wenn Röntgenstrahlung Materie auftrifft, werden Elektronen von den inneren Schalen herausgelöst und die Fehlstellen werden von Elektronen aus den höheren Schalen aufgefüllt. Die sekundäre Röntgenstrahlung ist "Röntgenfluoreszenz" genannt und ist charakteristisch für die bestrahlte Probe. Es ist in Abbildung 1 zu finden. Aus dem Bohr'schen Atommodell

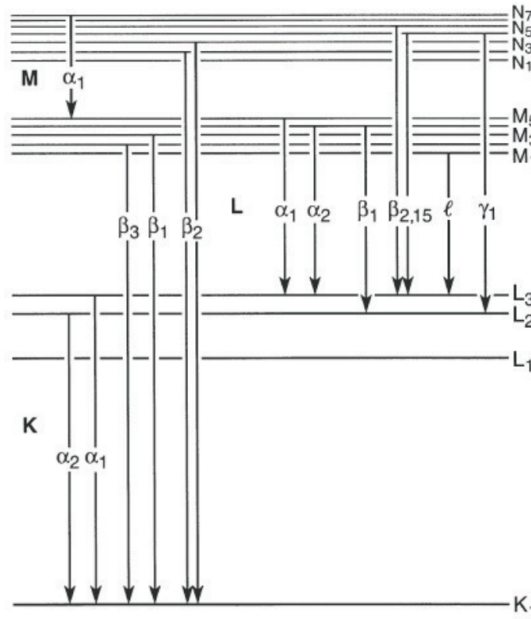


Abbildung 1: Übergänge in einem Atom

können wir die Energie der Fluoreszenzstrahlung approximieren:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = chR_\infty \left(\frac{(Z - \sigma_{n1})^2}{n_1^2} - \frac{(Z - \sigma_{n2})^2}{n_2^2} \right) \quad (1)$$

Wobei n_i die Hauptquantenzahlen der entsprechenden Schale, c die Lichtgeschwindigkeit, h das Planck'sche Wirkungsquantum, Z die Kernladungszahl und R_∞ die Rydberg-Konstante beschreiben.

Die Größen σ_i sind Abschirmkonstanten, die berücksichtigen, dass Elektronen, besonders in höheren Schalen, wegen der anderen Elektronen von dem positiven Kern teilweise abgeschirmt sind. Wir können eine mittlere Abschirmkonstante σ_{12} einführen, die in unserem Fall ungefähr eins ist, da wir einen Übergang von der L-Schale ($n_2 = 2$) in die K-Schale ($n_1 = 1$) für einen nicht zu schweren Kern untersuchen.

Die Energie der emittierten Strahlung beträgt dann:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = chR_\infty (Z - \sigma_{12})^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (2)$$

Nach Einsetzen der Rydberg- Energie $E_R = hcR_\infty \approx 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13,6 \text{ eV}$ erhalten wir die Formel:

$$\sqrt{\frac{E}{E_R}} = (Z - \sigma_{12}) \sqrt{\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)} \quad (3)$$

Und nach Einsetzen der Approximation der Abschirmkonstante und der Hauptquantenzahlen erhalten wir letztendlich:

$$\sqrt{\frac{E}{E_R}} = (Z - 1)\sqrt{\frac{3}{4}} \quad (4)$$

1.2.1 Röntgenenergiedetektor

Wir verwenden einen Halbleiterdetektor, um die Energie der Fluoreszenzstrahlung zu bestimmen (Abbildung 2). Das ist ein in Sperrrichtung betriebener pn-Übergang. Ein p-Halbleiter hat eine hohe Zahl von Fehlstellen, wobei ein n-Halbleiter eine hohe Zahl von frei beweglichen Elektronen hat. Wenn die beiden im Kontakt gebracht werden, entsteht ein pn-Übergang, bei dem die Fehlstellen durch die Elektronen gefüllt sind und um die Grenzschicht keine freien Ladungsträger vorhanden sind. Das heißt "Verarmungszone". Dieser Bereich kann nicht beliebig groß sein, wegen des entstehenden elektrischen Feldes. Wenn wir aber eine äußere Spannung anlegen, können wir diesen Bereich vergrößern. Wenn ein Röntgenphoton auf die Verarmungszone trifft, wird das durch Aussenden eines Photo-

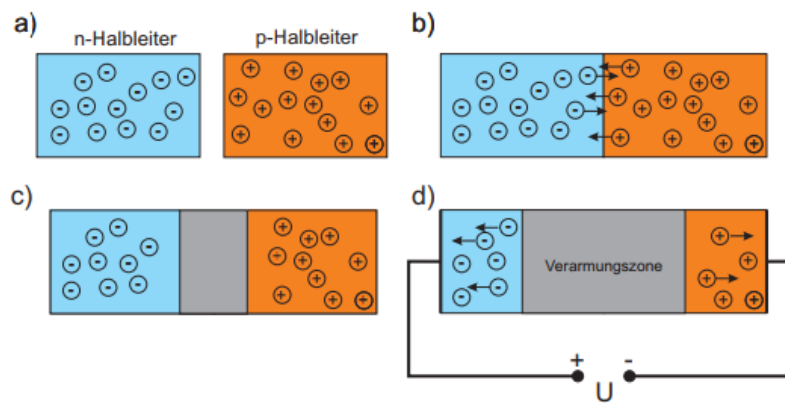


Abbildung 2: a) p- und n- Halbleiter. b) pn- Übergang. c) Grenzschichtbereich d) pn- Übergang mit anliegender Spannung

elektrons absorbiert. Wegen der entstehenden Stöße mit den Kristallatomen entstehen Elektronen-Loch-Paare und da die entstandene Ladung proportional zur Energie des einfallenden Röntgenquants ist, können wir es mit einem Verstärker messen.

In Abbildung 3 ist das Funktionsprinzip eines Röntgenenergiedetektors dargestellt. Ein Impuls entspricht einem detektierten Röntgenphoton. Ein Vielkanalanalysator stellt die Verteilung der Pulshöhen dar. Er hat normalerweise

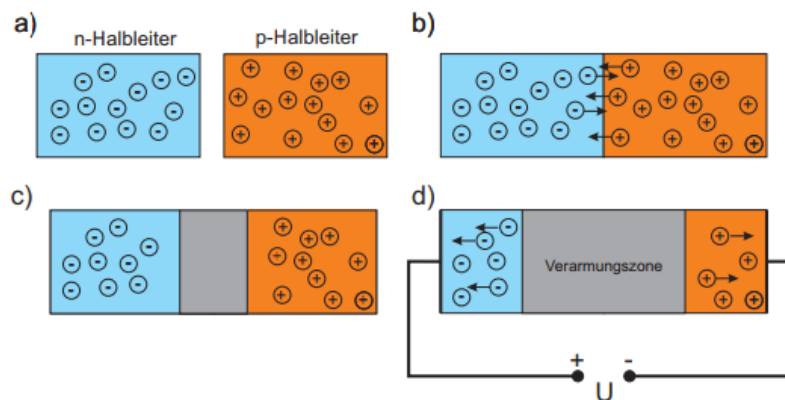


Abbildung 3: Funktionsprinzip des Röntgenenergiedetektors

512 Kanäle, er zählt die Signalhöhen und unterteilt sie in den zugehörigen Kanälen. Eine Messung und das dazugehörige Histogramm kann man in Abbildung 4 finden.

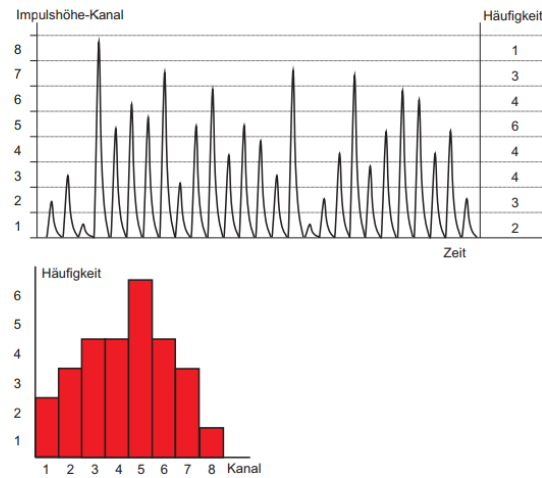


Abbildung 4: Messung von einem Vielkanalanalysator (oben) und die dazugehörige Histogramm (unten)

2 Messprotokoll und Durchführung des Versuchs

Das Messprotokoll befindet sich auf der nächsten Seite.

22.06.24

Messprotokoll Versuch 256 Röntgenfluoreszenz

Danae Drontsas
Viktor Ivanov

I Messaufbau

- Röntgengerät mit Röntgenröhre
- Röntgenenergiedetektor
- Vielkanalanalysator
- Metallproben
- Computer



Bild 1: Versuchsaufbau

II Durchführung des Versuchs

1) Energiekalibrierung

Zunächst werden die im Folgenden aufgeführten Metalle mit Röntgenstrahlung bestrahlt und die Energie der emittierten Photonen mit einem Vielkanalanalysator analysiert.

Metall	Kanal	# Ereignisse
Fe	79	7204
Mo	214	869
Zn	106	6802
Cu	99	7022
Zr	194	1294
Ni	268	185

Einstellungen
 512 Kanäle
 negative Pulse
 Verstärkungsfaktor -1,5
 Messzeit 180s

Tabelle 1: Messung der Spektren verschiedener Metalle

2) Energiekalibrierung

Es werden die gemessenen Spektren von Fe und Mo mit einer Gaußkurve gefittet.

Metall	Peakschwerpunkt μ
Fe	79
Mo	214

Tabelle 2: Energiekalibrierung / Gaußkurve

Metall	μ [keV]	σ [keV]	Strahlung
Fe	6,41	0,21	K α
	6,93	0,28	K β
Mo	17,45	0,21	K α
	19,55	0,25	K β
Zn	8,64	0,22	K α
	9,55	0,26	K β
Cu	8,04	0,22	K α
	8,88	0,24	K β
Zr	15,8	0,22	K α
	17,69	0,19	K β
Ni	7,46	0,23	K α
	8,19	0,27	K β

Tabelle 3: Gaußkurven mit Parametern in keV angepasst

3) Untersuchung verschiedener Legierungen

Es werden die Spektren unbekannter Legierungen analysiert

Probe 1: Cr und Fe
(mehr Fe)

Peak bei Eisen und kleineres bei 5,5 keV

Probe 2: Cu (ca 60%) und Zn (ca 40%)

24.06

AFB

3 Auswertung

3.1 Bestimmung der Rydberg Energie über die K_α Übergänge

Zuerst haben wir die Energien kalibriert, wobei wir die K_α -Peaks von Eisen und Molybdän gemessen haben, wie im Messprotokoll beschrieben. Nach der Kalibrierung sind die Energien in keV anstatt in Kanalnummern angezeigt. An jedes Element haben wir eine Gaußkurve angepasst, wir haben den Peakschwerpunkt μ_1 und die Peakbreite σ_1 notiert. Eine Abbildung mit den Energien aller Elemente ist in 5 zu finden.

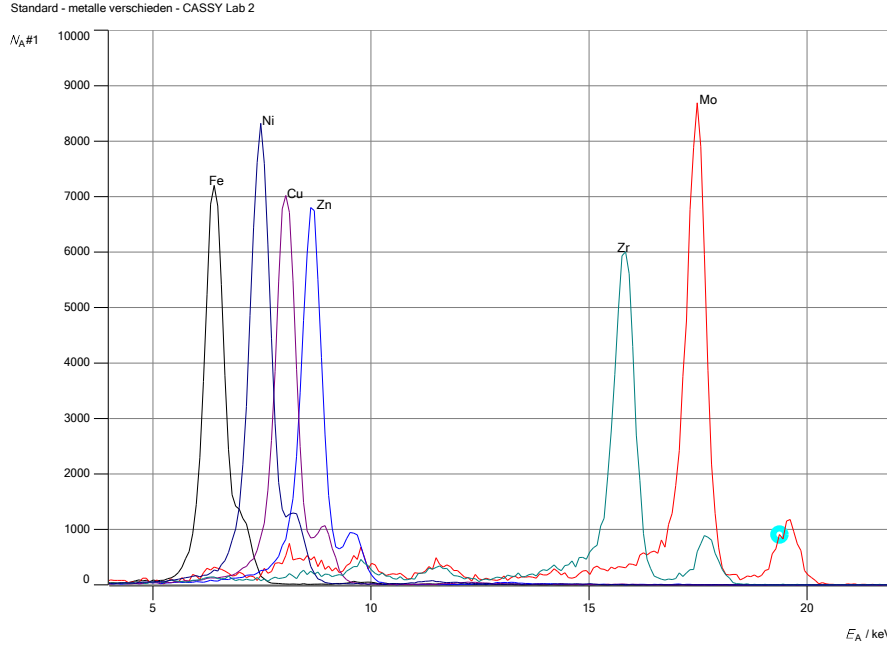


Abbildung 5: Gemessene Energien von allen Elementen

Die Peakschwerpunkte μ_1 sind die Energien von den entsprechenden Elementen, wobei die Peakbreiten σ_1 ihre Fehler sind. Wir haben die Wurzeln von den Energien genommen und die gegen die Kernladungszahlen in einem Diagramm eingetragen (Abbildung 6). Der Fehler beträgt nach der Gauß'schen Fehlerfortpflanzung:

$$\Delta\sqrt{E_\alpha} = \frac{\Delta E_\alpha}{2 \cdot \sqrt{E_\alpha}} \quad (5)$$

Ich habe nach Gleichung 3 eine Funktion angefitet, mithilfe von der ich die Rydberg Energie und auch die Abschirmkonstante bestimmen kann. Das Diagramm mit der angefiteten Funktion kann man in Abbildung 7 finden. Für die Fitparameter habe ich folgende Werte erhalten:

$$\sqrt{E_R} = (0.11919 \pm 0.00021) keV^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

$$\sigma_{12} = 1.51 \pm 0.06 \quad (7)$$

Wenn man die Wurzel der Rydberg-Energie quadriert, bekommt man die Rydberg-Energie:

$$E_{R,K_\alpha} = (14.21 \pm 0.05) keV \quad (8)$$

$$\sigma_{12,K_\alpha} = 1.51 \pm 0.06 \quad (9)$$

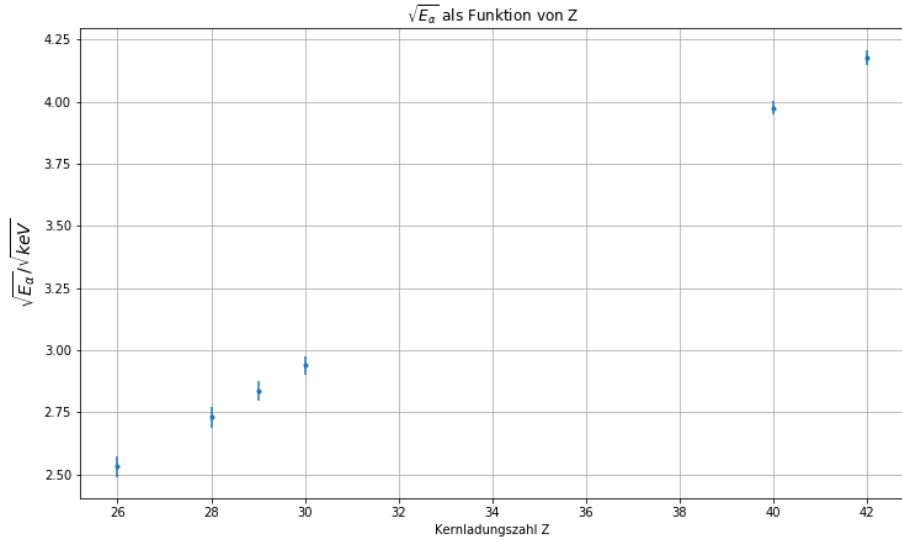


Abbildung 6: Wurzel von den Energien gegen ihre Kernladungszahlen K_α

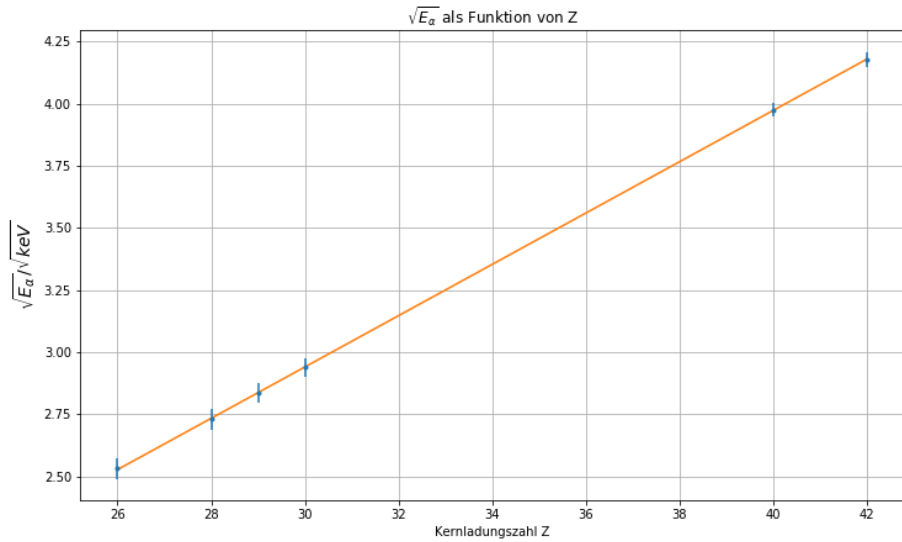


Abbildung 7: Angepasste Funktion nach der Moseleyschen Gesetz K_α

Wir können durch die χ^2 -Abweichung die Güte des Fits quantitativ untersuchen. Die χ^1 -Summe beträgt:

$$\chi^2 = \sum_i^N \left(\frac{\text{Funktionswert}_i - \text{Messwert}_i}{\text{Fehler}_i} \right)^2 \quad (10)$$

Die reduzierte χ_{red}^2 -Summe berechnet man indem man die χ^2 -Summe durch die Anzahl der Freiheitsgrade teilt:

$$\chi_{red}^2 = \frac{\chi^2}{\# \text{Freiheitsgrade}} \quad (11)$$

Für die Güte des Fits haben wir folgende Werte berechnet:

$$\chi^2_{K_\alpha} = 0,03 \quad (12)$$

$$\chi^2_{red,K_\alpha} = 0,007 \quad (13)$$

$$Fitwahrscheinlichkeit_{K_\alpha} = 100\% \quad (14)$$

Die σ -Abweichung zwischen unseren und dem Literaturwert beträgt

$$\sigma_{E_R,K_\alpha} = 11,8\sigma \quad (15)$$

$$\sigma_{\sigma_{1,2},K_\alpha} = 8,54\sigma \quad (16)$$

Das sind ziemlich große Abweichungen und wegen der so guten Fit habe ich lange überlegt, warum die Ergebnisse so weit von den Literaturwerten sind. Der größte Grund nach meiner Meinung ist, dass wir nicht geschafft haben, das Goniometer auf einen Winkel von 45° einzustellen.

Das Ergebnis besprechen wir ausführlicher in der Diskussion.

3.2 Bestimmung der Rydberg Energie über die K_β Übergänge

In diesem Teil haben wir dasselbe wie im letzten, aber mit den K_β Übergänge gemacht. Der Fit der Funktion kann man in Abbildung 8 finden.

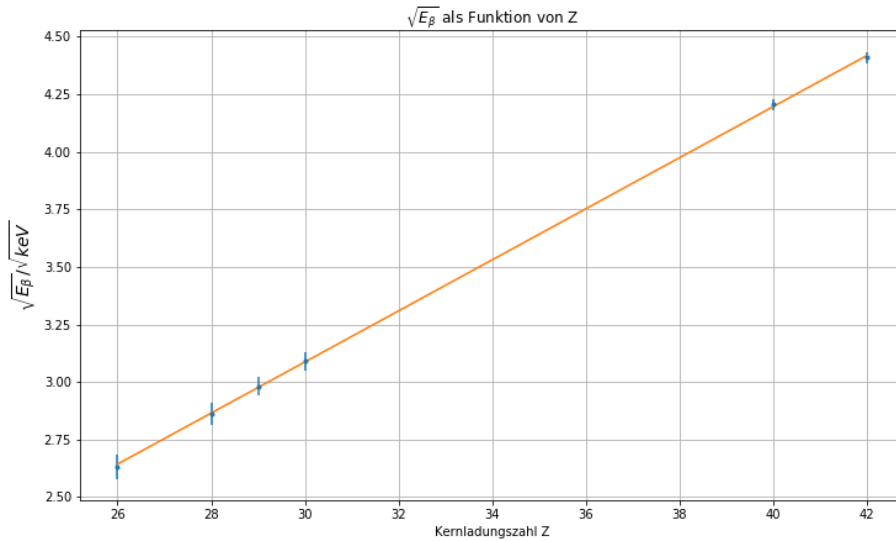


Abbildung 8: Angepasste Funktion nach der Moseleyschen Gesetz K_β

Für die Fitparameter habe ich folgende Werte erhalten:

$$\sqrt{E_R} = (0,1177 \pm 0,0007) \text{keV}^{\frac{1}{2}} \quad (17)$$

$$\sigma_{12} = 2,18 \pm 0,21 \quad (18)$$

Die Rydberg-Energie und die Abschirmkonstante betragen dann:

$$E_{R,K_\beta} = (13,86 \pm 0,16) \text{ keV} \quad (19)$$

$$\sigma_{12,K_\beta} = 2,18 \pm 0,21 \quad (20)$$

Für die Güte des Fits haben wir folgende Werte berechnet:

$$\chi_{K_\beta}^2 = 0,35 \quad (21)$$

$$\chi_{red,K_\beta}^2 = 0,09 \quad (22)$$

$$\text{Fitwahrscheinlichkeit}_{K_\beta} = 99\% \quad (23)$$

Die σ -Abweichung zwischen unseren und dem Literaturwert beträgt

$$\sigma_{E_{R,K_\beta}} = 1,54\sigma \quad (24)$$

$$\sigma_{\sigma_{1,2,K_\beta}} = 1,86\sigma \quad (25)$$

Die Ergebnisse besprechen wir in der Diskussion.

3.3 Untersuchung der Zusammensetzung unterschiedlicher Legierungen

Am Ende des Versuchs haben wir auch zwei verschiedene Legierungen untersucht. Ein Diagramm mit den gemessenen Energien nach der Fluoreszenzstrahlung ist unter 9 zu finden. Wir haben herausgefunden, dass die Probe 1 eine Legierung von *Cr* (Chrom) mit Kernladungszahl 24 und *Fe* (Eisen) mit Kernladungszahl 26 ist. Das *Fe* ist mehr als das *Cr*, da die gemessene Energie höher ist. Wir sehen, dass der Peak bei der K_α ein bisschen nach rechts verschoben. Das ist wegen der K_β Peak, der ein bisschen nach rechts zu finden ist.

Die zweite Probe ist eine Legierung von *Cu* (Kupfer) mit Kernladungszahl 29 und *Zn* (Zink) mit Kernladungszahl 30. Das *Cu* ist mehr als das *Zn*, da die gemessene Energie höher ist. Hier sind alle Peaks leicht zu erkennen.

4 Zusammenfassung und Diskussion

Im Versuch haben wir die Energien von den K_α und K_β - Linien einigen Elementen nach den Kernladungszahlen geplottet und eine Funktion angefitet. Daraus haben wir die Rydberg-Energien und den Abschirmungskonstanten bestimmt. Alle Ergebnisse habe ich in Tabelle 4 zusammengefasst. Am Ende haben wir die chemische Zusammensetzung von zwei Legierungen bestimmt.

4.1 Diskussion

Bei dem ersten Teil, in denen wir die Rydberg Energie über die K_α Übergänge bestimmt haben, haben wir für die Güte des Fits unerwartete Ergebnisse. Eine optimale χ_{red}^2 Wert sollte im Idealfall 1 betragen, was bei uns nicht der Fall ist. Ein so kleiner Wert bedeutet, dass die Fitfunktion "overfittet" ist. Der Grund dafür könnte zum Beispiel die zu kleine Fehler sein. Da wir aber die Fehler durch die Breite einer Gaußkurve bestimmt haben, würde ich behaupten, dass sie präzise sind. Ein anderer möglicher Grund für die so kleine χ_{red}^2 Wert könnte Falsifizierung der Daten sein, was auch sicherlich nicht der Fall ist, da wir alle Daten vom Computer abgeschrieben haben und die Diagramme beweisen, dass die Werte richtig sind.

Zwischen unseren und den Literaturwerten für die Rydberg Energie und die Abschirmungskonstante haben wir σ -Abweichungen von mehr als 8σ erhalten, was viel mehr als die optimale 1σ ist. Es gibt drei mögliche Gründe dafür. Eine ist, dass meiner Python Code falsch ist, was sehr unwahrscheinlich ist, da ich mit der Hilfe vom Skript es geschrieben habe und auch wegen des sehr schlechten Resultates meine Kommilitonen gefragt habe. Der zweite mögliche Grund ist der ziemlich kleine relative Fehler von unseren Ergebnissen, $\Delta_{rel}E_{R,K_\alpha} = 0,35\%$ und $\Delta_{rel}\sigma_{12,K_\alpha} = 5,2\%$. Der Fehler von der Rydberg Energie ist besonders klein, was sicherlich die σ -Abweichung

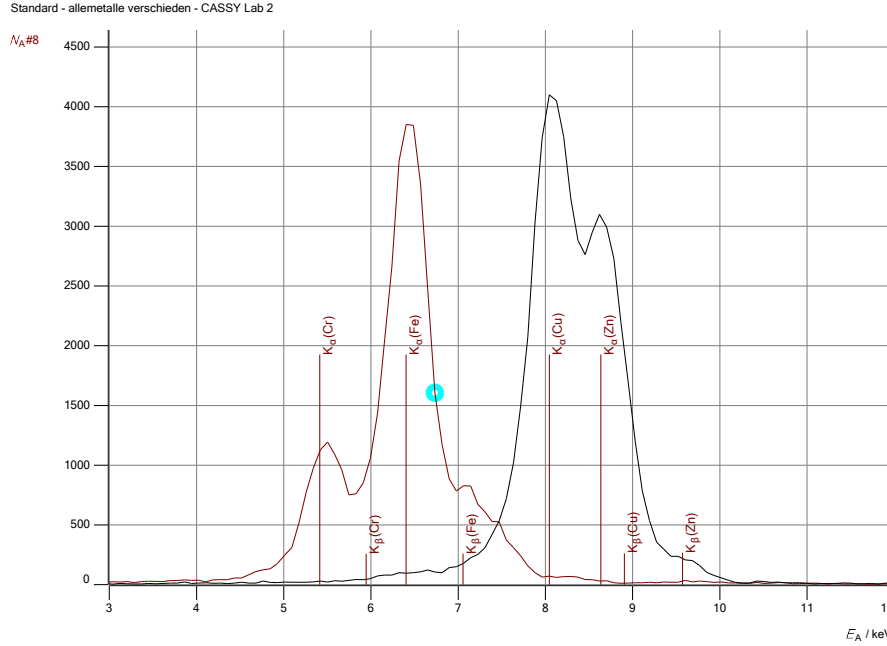


Abbildung 9: Energien der zwei untersuchte Legierungen

Tabelle 4: Zusammenfassung der Ergebnissen

	K_α	ΔK_α	K_β	ΔK_β
E_R [keV]	14.21	0.05	13.86	0.16
σ_{12} []	1.51	0.06	2.18	0.21
χ^2 []	0.03	-	0.35	-
χ^2_{red} []	0.007	-	0.09	-
Fitwahrscheinlichkeit [%]	100	-	99	-
σ_{E_R} [σ]	11.8	-	1.54	-
$\sigma_{\sigma_{12}}$ [σ]	8.54	-	1.86	-

erhöht. Der letzte Grund habe ich schon im Auswertung besprochen und es ist, dass wir den Goniometer auf 45° nicht einstellen konnten. Wenn wir aber die σ -Abweichungen zwischen unseren und den theoretischen Werten für die K_α -Peaks betrachten (Tabelle 5), sehen wir, dass unsere Werte eigentlich ziemlich richtig sind, da alle Abweichungen kleiner als 1σ sind. Daher ist der Grund höchstwahrscheinlich der Code und die kleinen Abweichungen. Um diese Hypothese zu überprüfen, habe ich den Code von der Einleitung ein bisschen verändert, wobei ich die Abschirmkonstante als 1 einsetzte, dann bekomme ich den Wert $E_{R,K_\alpha} = (13,790 \pm 0,036)keV$. Für die Güte des Fits erhalte ich folgende Werte: $\chi^2_{red,K_\alpha} = 0,12$; $Fitwahrscheinlichkeit_{K_\alpha} = 97\%$. Die Abweichung beträgt 5σ .

Tabelle5: σ -Abweichungen von K_α -Peaks zwischen Literatur- und Messwerten

	σ -Abweichung [σ]
Fe	0.45
Ni	0.28
Cu	0.10
Zn	0.08
Zr	0.10
Mo	0.76

Der relative Fehler beträgt $\Delta_{rel}E_{R,K_\alpha,2} = 0,26\%$. Bei solchen Werten ist der χ_{red}^2 mehr erwartet (da es näher an 1 liegt) und die Abweichung bei der Rydberg Energie ist kleiner.

Das zeigt, dass die sehr großen Abweichungen wirklich wegen eines nicht perfekt geschriebenen Code (der den besten Fit sucht, was bei dieser Fall nicht der Literaturwert entspricht) und wegen den nicht realistische Fehler, die mithilfe von mehr Messungen verbessert werden können.

Bei dem zweiten Teil, in denen wir die Rydberg Energie über die K_β Übergänge bestimmt haben, kann ich dasselbe sagen. Die Ergebnisse in diesem Fall sind besser, was aufgrund der kleineren Abweichung zwischen dem gemessenen σ_{12,K_β} Wert und dem Literatureurwert sind. Wenn wir den richtigen σ_{12} Wert ersetzen, erhalten wir $E_{R,K_\beta} = (13,563 \pm 0,033)keV$, $\chi_{red,K_\beta}^2 = 0,16$; *Fitwahrscheinlichkeit* $_{K_\beta} = 96\%$. Die Abweichung beträgt $1,27\sigma$. Der relative Fehler beträgt $\Delta_{rel}E_{R,K_\beta} = 0,24\%$. Wie oben erwähnt, die Abweichungen sind noch signifikant (größer als 1σ) wegen der kleinen Fehler, aber liegen in dem 3σ Bereich, daher ist unser Ergebnis bei dem zweiten Versuchsteil nicht zu schlecht.

Der letzte Versuchsteil wurde in 3.3 diskutiert.

Im Allgemeinen hat dieser Versuch Spaß gemacht, da ich mich viel mit den möglichen Fehlerquellen beschäftigt habe und ein bisschen "out of the box"denken sollte. Die Ergebnisse waren nicht sehr erfolgreich, aber wir haben gezeigt, was wir sollten und unsere Erwartungen wurden erfüllt.

Es war auch ziemlich interessant, ein Gerät, das in der Materialwissenschaft und Kristallografie verwendet wird, zu benutzen.

5 Anhang

5.1 Quellen

Alle Informationen, die ich im Protokoll verwendet habe, stammen aus der Praktikumsanleitung, Ausgabe 4.2023.

5.2 Python-Code

Der Python-Code befindet sich auf der nächsten Seite.

July 2, 2024

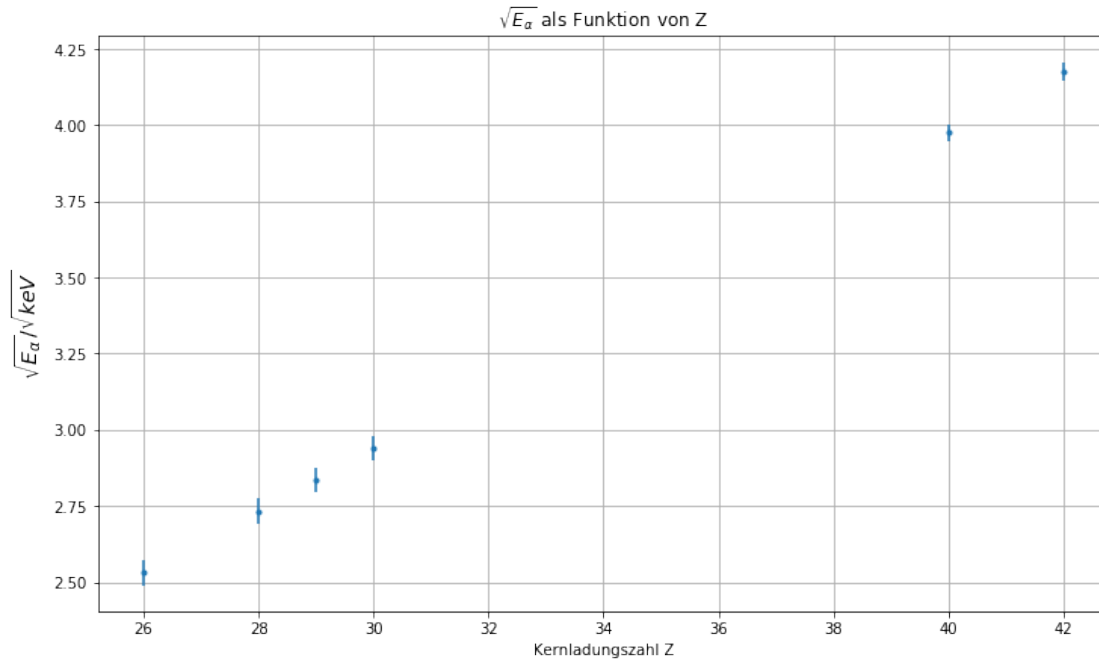
```
[1]: %matplotlib inline
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
def literatur_Vergleich(name,mess,sig_mess,lit,sig_lit):
    print(name,": ")
    print("Absolute Abweichung: ",np.abs(mess-lit))
    print("Sigma: ",np.abs(mess-lit)/np.sqrt(sig_mess**2 + sig_lit**2))

[2]: #Trage Messwerte in Arrays ein
Z=np.array([26,28,29,30,40,42]) #Kernladungszahl
#K_alpha (Fe, Ni, Cu, Zn, Zr, Mo) in keV:
K_alpha=np.array([6.41,7.46,8.04,8.64,15.8,17.45]) #Energie der Kalpha Strahlung
Delta_K_alpha=np.array([0.21,0.23,0.22,0.22,0.22,0.25]) #Peakbreite der Kalpha_
    ↳Strahlung
sqrt_K_alpha=np.sqrt(K_alpha) #Wurzel der Energien
Delta_sqrt_K_alpha = Delta_K_alpha/(2*sqrt_K_alpha) #Fehler nach Gauss

[3]: #Abweichung der K_alpha_Linien vom Literaturwert
K_alpha_lit = np.array([6.404,7.478,8.048,8.639,15.78,17.48])
literatur_Vergleich("Energien in keV der alpha_
    ↳Linien",K_alpha,Delta_K_alpha,K_alpha_lit,0)

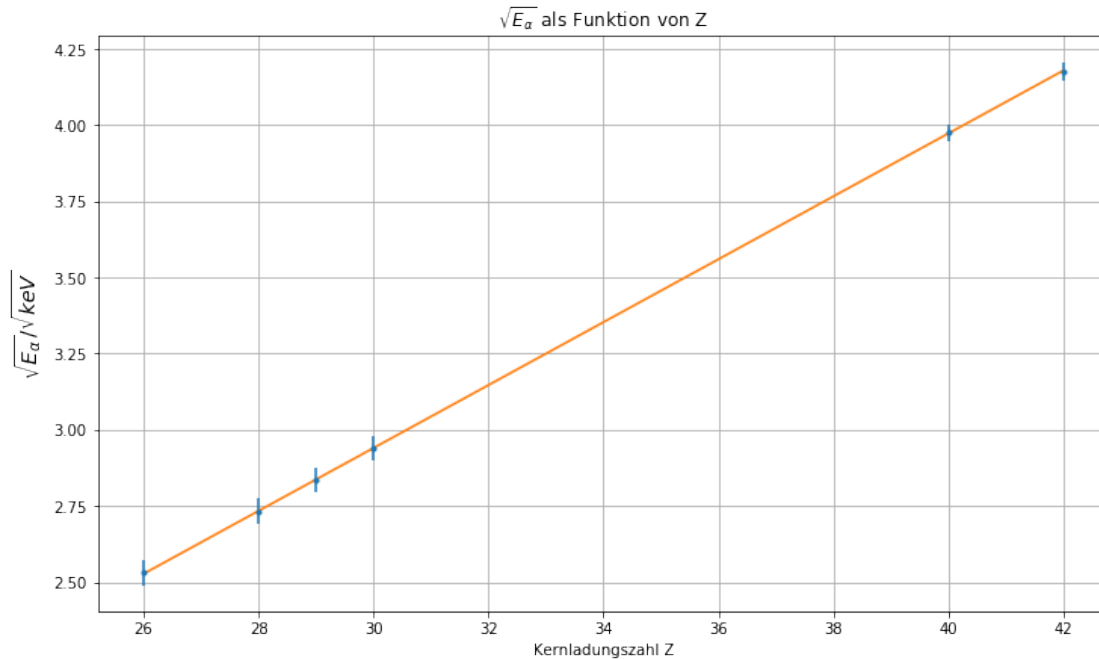
Energien in keV der alpha Linien :
Absolute Abweichung: [0.006 0.018 0.008 0.001 0.02  0.03 ]
Sigma: [0.02857143 0.07826087 0.03636364 0.00454545 0.09090909 0.12      ]

[4]: #Trage Wurzel der Energien mit Fehlern grafisch über Z auf
plt.figure(figsize = (12,7))
plt.grid()
plt.errorbar(Z, sqrt_K_alpha, Delta_sqrt_K_alpha, fmt=".")
plt.xlabel('Kernladungszahl Z')
plt.ylabel(r'$\sqrt{E_{\alpha}}/\sqrt{\text{keV}}$', fontsize=14)
plt.title(r'$\sqrt{E_{\alpha}}$' + ' als Funktion von Z')
plt.savefig("K_alpha_vs_Z.png", format="png")
```



```
[5]: #Anpassung des Moseleyschen Gesetzes
#Hauptquantenzahlen für Kalpha von L-Schale (2) zu K-Schale (1)
n1=1
n2=2
def fit_func(x, sqrt_Er, sig12):
    return sqrt_Er*(x-sig12)*np.sqrt(1/n1**2-1/n2**2)
from scipy.optimize import curve_fit
popt, pcov=curve_fit(fit_func, Z, sqrt_K_alpha,sigma=Delta_sqrt_K_alpha)
#Plot
plt.figure(figsize=(12,7))
plt.grid()
plt.errorbar(Z, sqrt_K_alpha, Delta_sqrt_K_alpha, fmt=".")
plt.xlabel('Kernladungszahl Z')
plt.ylabel(r'$\sqrt{E_\alpha}/\sqrt{\text{keV}}$', fontsize=14)
plt.title(r'$\sqrt{E_\alpha}$' + ' als Funktion von Z')
plt.plot(Z, fit_func(Z,*popt))
plt.savefig("K_alpha_vs_Z_fit.png", format="png")
#Ausgabe der Fitergebnisse
print("sqrt_Er=",popt[0], ",Standardfehler=",np.sqrt(pcov[0][0])) #sqrtkeV
#print("sig12=",popt[1], ",Standardfehler=",np.sqrt(pcov[1][1]))
sig12 = popt[1]
sig_sig12 = np.sqrt(pcov[1][1])
```

sqrt_Er= 0.1191899094782475 ,Standardfehler= 0.00021299465896364712



```
[6]: #Berechne Rydberg-Energie in eV
Er = popt[0]**2 *1e3 #Energie in eV
sig_Er = 2*popt[0]*1e3*np.sqrt(pcov[0][0]) #Fehler aus Gauss
print("Er: ",Er,"+/-",sig_Er)
```

Er: 14.206234521432833 +/- 0.05077362824245459

```
[7]: #Analyse der Güte des Fits
chi2=np.sum((fit_func(Z,*popt)-sqrt_K_alpha)**2/Delta_sqrt_K_alpha**2)
dof=len(sqrt_K_alpha)-2 #Anzahl der Fitparameter hier 2
chi2_red=chi2/dof
print("chi2=", chi2_)
print("chi2_red=",chi2_red)
from scipy.stats import chi2
prob=round(1-chi2.cdf(chi2_,dof),2)*100
print("Wahrscheinlichkeit=", prob, "%")
```

chi2= 0.027589886907228856
chi2_red= 0.006897471726807214
Wahrscheinlichkeit= 100.0 %

```
[8]: #Vergleich mit den Literaturwerten und meinen Erwartungen
E_R_lit = 13.60569253 #eV
sig_E_R_lit = 0.00000030
literatur_Vergleich("Rydberg-Energie",Er,sig_Er,E_R_lit,sig_E_R_lit)
#literatur_Vergleich("Abschirmungskonstante",sig12,sig_sig12,1,0)
```

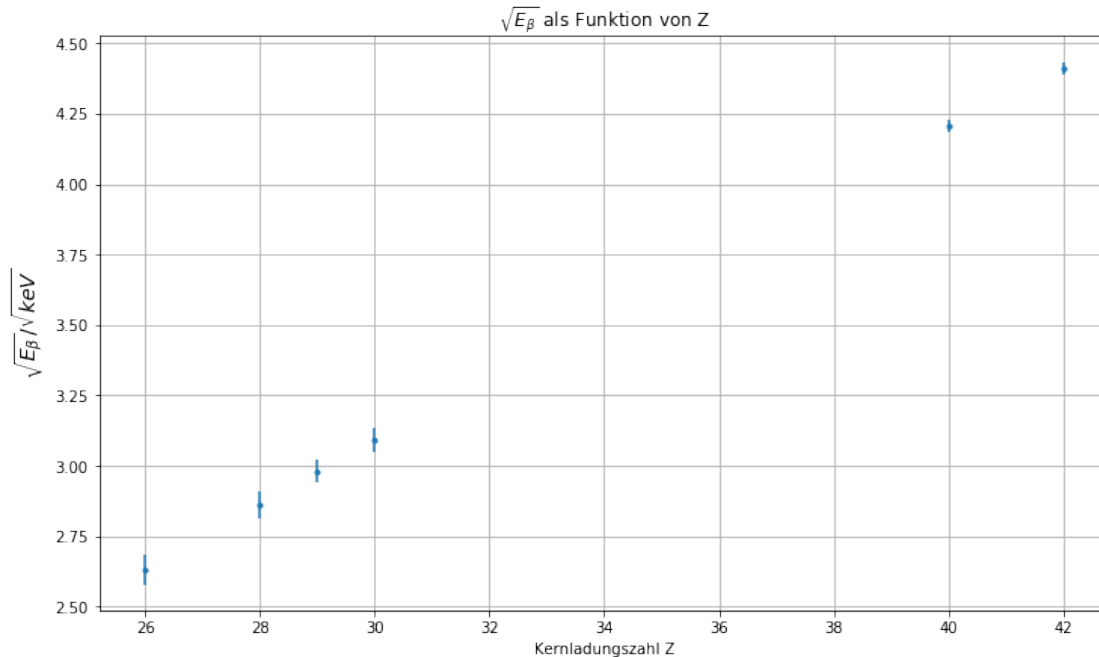

Rydberg-Energie :
Absolute Abweichung: 0.6005419914328325
Sigma: 11.82783291662036

```
[9]: #Trage Messwerte in Arrays ein
Z=np.array([26,28,29,30,40,42]) #Kernladungszahl
#K_beta (Fe, Ni, Cu, Zn, Zr, Mo) in keV:
K_beta=np.array([6.93,8.19,8.88,9.55,17.69,19.45]) #Energie der Kbeta Strahlung
Delta_K_beta=np.array([0.28,0.27,0.24,0.26,0.19,0.21]) #Peakbreite der Kalpha_1
↳Strahlung
sqrt_K_beta=np.sqrt(K_beta) #Wurzel der Energien
Delta_sqrt_K_beta = Delta_K_beta/(2*sqrt_K_beta) #Fehler nach Gauss
```

```
[10]: #Abweichung der K_beta Linien vom Literaturwert
K_beta_lit = np.array([7.058,8.265,8.905,9.572,17.67,19.61])
literatur_Vergleich("Energien in keV der beta_1
↳Linien",K_beta,Delta_K_beta,K_beta_lit,0)
```

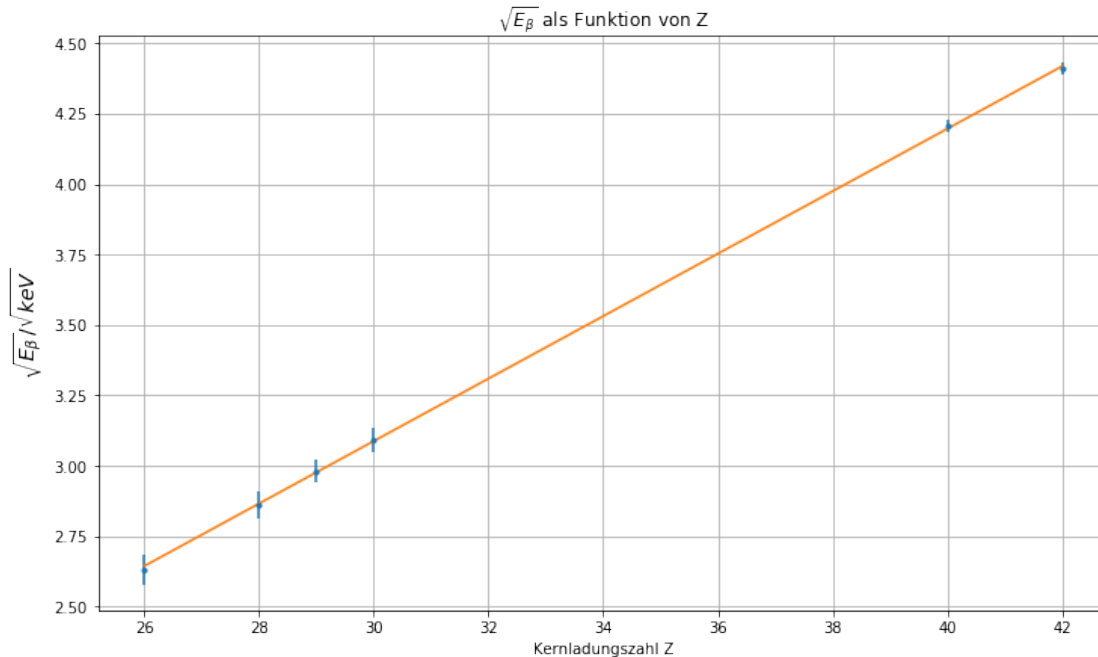
Energien in keV der beta Linien :
Absolute Abweichung: [0.128 0.075 0.025 0.022 0.02 0.16]
Sigma: [0.45714286 0.27777778 0.10416667 0.08461538 0.10526316 0.76190476]

```
[11]: #Trage Wurzel der Energien mit Fehlern grafisch über Z auf
plt.figure(figsize = (12,7))
plt.grid()
plt.errorbar(Z, sqrt_K_beta, Delta_sqrt_K_beta, fmt=".")
plt.xlabel('Kernladungszahl Z')
plt.ylabel(r'$\sqrt{E\_beta}/\sqrt{keV}$ ', fontsize=14)
plt.title(r'$\sqrt{E\_beta}$' + ' als Funktion von Z')
plt.savefig("K_beta_vs_Z.png", format="png")
```



```
[12]: #Anpassung des Moseleyschen Gesetzes
#Hauptquantenzahlen für Kbeta von M-Schale (3) zu K-Schale (1)
n1=1
n2=3
def fit_func(x, sqrt_Er, sig12):
    return sqrt_Er*(x-sig12)*np.sqrt(1/n1**2-1/n2**2)
from scipy.optimize import curve_fit
popt, pcov=curve_fit(fit_func, Z, sqrt_K_beta,sigma=Delta_sqrt_K_beta)
#Plot
plt.figure(figsize=(12,7))
plt.grid()
plt.errorbar(Z, sqrt_K_beta, Delta_sqrt_K_beta, fmt=".")
plt.xlabel('Kernladungszahl Z')
plt.ylabel(r'$\sqrt{E_\beta}/\sqrt{\text{keV}}$', fontsize=14)
plt.title(r'$\sqrt{E_\beta}$' + ' als Funktion von Z')
plt.plot(Z, fit_func(Z,*popt))
plt.savefig("K_beta_vs_Z_fit.png", format="png")
#Ausgabe der Fitergebnisse
print("sqrt_Er=",popt[0], ",Standardfehler=",np.sqrt(pcov[0][0])) #sqrtkeV
print("sig12=",popt[1], ",Standardfehler=",np.sqrt(pcov[1][1]))
sig12 = popt[1]
sig_sig12 = np.sqrt(pcov[1][1])
```

```
sqrt_Er= 0.1177170973771719 ,Standardfehler= 0.0006911898402096185
sig12= 2.1825773402543653 ,Standardfehler= 0.2053240757294798
```



```
[13]: #Berechne Rydberg-Energie in eV
Er = popt[0]**2 *1e3 #Energie in eV
sig_Er = 2*popt[0]*1e3*np.sqrt(pcov[0][0]) #Fehler aus Gauss
print("Er: ",Er,"+/-",sig_Er)
```

Er: 13.857315014906572 +/- 0.1627297234521351

```
[14]: #Analyse der Güte des Fits
chi2=np.sum((fit_func(Z,*popt)-sqrt_K_beta)**2/Delta_sqrt_K_beta**2)
dof=len(sqrt_K_beta)-2 #Anzahl der Fitparameter hier 2
chi2_red=chi2/dof
print("chi2=", chi2_)
print("chi2_red=",chi2_red)
from scipy.stats import chi2
prob=round(1-chi2.cdf(chi2_,dof),2)*100
print("Wahrscheinlichkeit=", prob, "%")
```

chi2= 0.35212037087245407
chi2_red= 0.08803009271811352
Wahrscheinlichkeit= 99.0 %

```
[15]: #Vergleich mit den Literaturwerten
E_R_lit = 13.60569253 #eV
sig_E_R_lit = 0.00000030
literatur_Vergleich("Rydberg-Energie",Er,sig_Er,E_R_lit,sig_E_R_lit)
#literatur_Vergleich("Abschirmungskonstante",sig12,sig_sig12,1.8,0)
```

Rydberg-Energie :
Absolute Abweichung: 0.25162248490657113
Sigma: 1.5462601396244315

[]:

[]: