

Versuch 602 – Röntgen Emissions- und Absorptionsspektren

Marco Lafrentz Philipp Leser

15.11.2005 – Abtestiert am 29.11.2005*

Ziel des durchgeführten Versuchs waren Untersuchungen über die Struktur der inneren Elektronenhülle von verschiedenen Atomen mit Hilfe von Röntgenstrahlung.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	2
2. Theorie	2
2.1. Entstehung von Röntgenstrahlung	2
2.2. Erzeugung von Röntgenstrahlung	3
2.3. Röntgen-Emissionsspektrum	3
2.3.1. ohne Feinstruktur	3
2.3.2. mit Feinstruktur	5
2.4. Röntgen-Absorptionsspektrum	7
2.5. Messung von Intensität und Energie der Röntgenstrahlung	8
2.6. Versuchsaufbau und Durchführung	9
3. Auswertung	10
3.1. Bestimmung der $\sigma_{1,0}$ Abschirmzahlen bei Niob und Strontium	10
3.2. Bestimmung der $s_{2,1}$ Abschirmzahl für Gold und Platin	12
3.3. Abschätzung der Abschirmungszahlen σ_1 und σ_2 für Kupfer	13
3.4. Bestimmung der Energieauflösung der Apparatur	13
A. Anhang	14
A.1. Literatur	14
A.2. Messdaten	14
B. Vergleich mit Literaturwerten	15

*Kapitel B im Anhang entstand in der Korrektur des Protokolls und sollte an sich in die Auswertung.

1. Einleitung

Für die Untersuchung der inneren Elektronenhülle eines elektronenreichen Atoms benötigt man hochenergetische Röntgen-Strahlung. Ihr Energiebereich reicht von 10eV bis 100keV und schließt sich somit im elektromagnetischen Spektrum auf der höherenergetischen Seite an die UV-Strahlung an. Mit Hilfe von sichtbarem Licht, UV- oder IR-Strahlung würde man lediglich den äußeren Teil der Hülle untersuchen können, z.B. bei Alkali-Atomen das äußerste „Leuchtelektron“.

Wir konzentrieren uns zunächst auf die Entstehung von Röntgenstrahlung und die resultierenden Emissionsspektren. Im weiteren Verlaufe diskutieren wir die Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie und die entstehenden Absorptionsspektren. Desweiteren, werden wir Verfahren zur Energie- und Intensitätsmessung bei Röntgenstrahlung darstellen.

2. Theorie

2.1. Entstehung von Röntgenstrahlung

Dringen Elektronen in Materie ein, so kann es sein, dass in vielen aufeinander folgenden Ionisationsprozessen ihre kinetische Energie in Wärme umgewandelt wird. Mit einer geringen Wahrscheinlichkeit ist es ebenfalls möglich, dass das einfallende Elektron tiefer in die Hülle eines Absorberatoms eindringt und durch COULOMB-Wechselwirkung mit dem Atomkern von seiner Bahn abgelenkt wird. Bekanntermaßen wird das Elektron, wenn es eine Beschleunigung erfährt, mit einer Wahrscheinlichkeit proportional zum Quadrat der Kernladungszahl z Strahlung emittieren. Quantenmechanisch entstehen bei diesen Vorgängen Photonen, die bevorzugt senkrecht zur Elektronengeschwindigkeit abgestrahlt werden. Die so entstandene Strahlung bezeichnet man als **Bremsstrahlung**. Ihr Energiespektrum ist kontinuierlich und reicht bis zu einem Maximalwert, der der gesamten kinetischen Energie des einfallenden Elektrons entspricht.

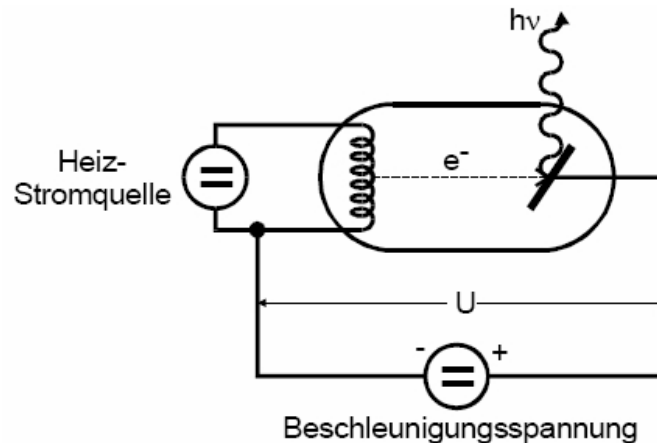
Neben diesem Prozess können Elektronen, die tiefer in die Hülle eindringen, auch eine Ionisation im Inneren der Atomhülle verursachen. Ist die Energie des Elektrons mindestens so hoch wie die Bindungsenergie des Hüllenelektrons, so ist es möglich, dass es das Hüllenelektron aus seinem Niveau herausschlägt. Der entstehende Zustand ist jedoch instabil und wird innerhalb von 10^{-8} s wieder in den Grundzustand versetzt, indem ein Elektron einer höheren Schale das entstandene „Loch“ schließt. So entsteht in der höheren Schale ein neues Loch und wird wiederum von einem Elektron noch höherer Schale gefüllt und so fort. Die frei werdende Energie wird auch hier in Form von Quanten abgegeben. Ihre Energiebeträge sind im Gegensatz zu den Photonen aus der Bremsstrahlung diskret und gegeben durch die Energiedifferenzen der beteiligten Schalen. Es gilt folglich

$$E_{\text{Photon}} = h\nu = E_n - E_m$$

(h = PLANCK'sches Wirkungsquantum, ν = Frequenz der Strahlung, E_n und E_m Energieniveaus der Schalen). Die Energieniveaus der Schalen sind stoffspezifisch. Man bezeichnet diese Strahlung als **charakteristische Strahlung**.

2.2. Erzeugung von Röntgenstrahlung

Die benötigten Elektronen werden üblicherweise in einer Röntgenröhre erzeugt. Ihre schematische Darstellung zeigt die folgende Abbildung (Literatur [1]).



Sie erzeugt in einem evakuierten Glaskolben an einem Glühdraht (Kathode) durch thermische Prozesse freie Elektronen. Gegenüber der Kathode befindet sich eine Anode (in unserem Versuch aus Kupfer) mit einer positiven Spannung von einigen kV (unsere Apparatur hatte eine Beschleunigungsspannung von $U = 35\text{kV}$). Das erzeugte elektrische Feld beschleunigt die freien Elektronen, sodass sie mit hoher kinetischer Energie auf die Anode prallen. Dort entsteht durch die oben beschriebenen Prozesse die Röntgenstrahlung.

2.3. Röntgen-Emissionsspektrum

2.3.1. ohne Feinstruktur

Das Spektrum der Strahlung ist die Abhängigkeit der Intensität von der Energie der Strahlungsquanten. Unter der Intensität versteht man hierbei die Zahl der einfallenden Quanten pro Zeit- und Flächeneinheit. Bisher wurde gezeigt, dass sich das Spektrum von Röntgenstrahlung aus zwei Teilen zusammensetzt:

Das kontinuierliche Spektrum der Bremsstrahlung Ihre Intensität geht für $E \rightarrow 0$ asymptotisch gegen Null und bricht in der anderen Richtung bei einer maximalen Energie E_{max} ab. Dieser Maximalwert entspricht der kinetischen Energie E_{kin} der beschleunigten Elektronen. Da E_{kin} durch die Beschleunigungsspannung U festgelegt ist, gilt (mit e_0 als Elementarladung)

$$E_{\text{kin}} = h\nu_{\text{max}} = e_0U.$$

Das diskrete Spektrum der charakteristischen Strahlung Kennt man die Energieniveaus des emittierenden Atoms, so sind diese diskreten Werte gemäß $E_{\text{Photon}} = h\nu = E_n - E_m$ zu berechnen. Die Energieniveaus ergeben sich als Lösungen der SCHRÖDINGER-Gleichung des Atoms. Da wir aber Viel-Elektronen-Atome verwenden, ist die Lösung des Eigenwertproblems eine sehr schwierige Angelegenheit. Zur Vereinfachung reduziert man hier die Problemstellung auf eine sogenannte **Einelektronenanregung**. Hierbei wird das elektrische Feld des Atomkerns und der restlichen Hüllenelektronen zu einem effektiven COULOMB-Feld zusammengefasst. Praktisch führt man hierzu eine effektive Größe $z_{\text{eff}} < z$ an Stelle der Kernladungszahl z ein. Für die potentielle Energie des Elektrons folgt somit (mit $\epsilon_0 = \text{Influenz}$, $r = \text{Ortskoordinate}$):

$$U = -\frac{z_{\text{eff}}e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Mit Verweis auf das Skript [1] zum Versuch Nr.604 Kapitel 2, erhält man unter diesen Bedingungen die Energie-Eigenwerte (wobei $R_\infty = \text{RYDBERG-Energie}$, $z_{\text{eff}_n} = \text{effektive Kernladungszahl}$, $n = \text{Hauptquantenzahl}$):

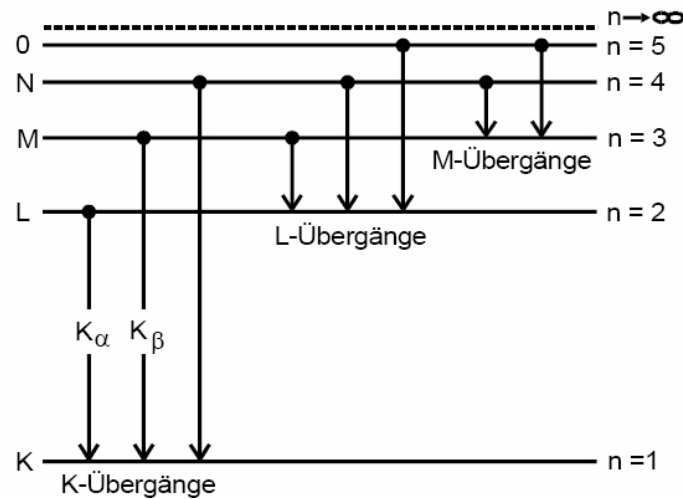
$$E_n = -R_\infty z_{\text{eff}_n}^2 \frac{1}{n^2}$$

Daraus ergibt sich für die Röntgenstrahlung bei einem Übergang von der m -ten zur n -ten Schale eine Energie von

$$h\nu_{m,n} = R_\infty z_{\text{eff}_{m,n}}^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

Hieraus lässt sich nun die Lage der Linien im charakteristischen Spektrum errechnen, wenn man für n und m der Reihe nach die natürlichen Zahlen einsetzt (wobei $n < m$). Zu beachten ist, dass dies nur für Atome mit kleinen Kernladungszahlen z eine gültige Näherung darstellt. Eine bessere Näherung beschreiben wir im nächsten Abschnitt.

Nun zur Nomenklatur der Röntgenlinien: Aus historischen Gründen bezeichnet man die innerste ($n=1$) Schale eines Atoms mit K-Schale. Höhere Schalen dann dem Alphabet nach L, M, N und so weiter. Übergänge werden nun nach der innersten beteiligten Schale bezeichnet. So heißen Übergänge auf die K-Schale K-Linien, auf die L-Schale L-Linien und so fort. Mögliche Übergänge und ihre Bezeichnungen sind in der folgenden Abbildung (aus [1]) dargestellt - die Länge der Pfeile ist ein Indikator für die Energie der Strahlung:



Im Gegensatz zu optischen Spektren, die direkt vom Bindungszustand der äußeren Elektronen abhängen und somit stark variieren können, hat das Spektrum der Röntgenstrahlung immer die Gestalt eines Linienspektrums, das sich mit höheren Frequenzen nur monoton verschiebt.

2.3.2. mit Feinstruktur

Im Rahmen der Störungsrechnung gelingt eine bessere Näherung der Zusammenhänge über die Betrachtung der Feinstruktur der Atome mit Hilfe der SOMMERFELD'schen Feinstrukturformel. Sie berücksichtigt zusätzlich die relativistische Massenabhängigkeit der Elektronen und den Einfluss des Drehimpulses des „aktiven“ Hüllenelektrons. Sie lautet in erster Näherung:

$$E_{n,j} = R_\infty \left[z_{\text{eff}_1}^2 \frac{1}{n^2} + \alpha^2 z_{\text{eff}_2}^4 \frac{1}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

Hierin ist α die SOMMERFELD'sche Feinstrukturkonstante und j entspricht der Gesamtdrehimpulsquantenzahl, zusammengesetzt aus der Bahndrehimpulsquantenzahl l und der Spinquantenzahl $s = \frac{1}{2}$ nach $j = l + s$ bzw. $j = l - s$. Auch hier werden effektive Kernladungszahlen verwendet. Im weiteren Verlauf wollen wir sie durch sogenannte Abschirmungszahlen σ und s ausdrücken:

$$z_{\text{eff}_1} = z - \sigma$$

$$z_{\text{eff}_2} = z - s$$

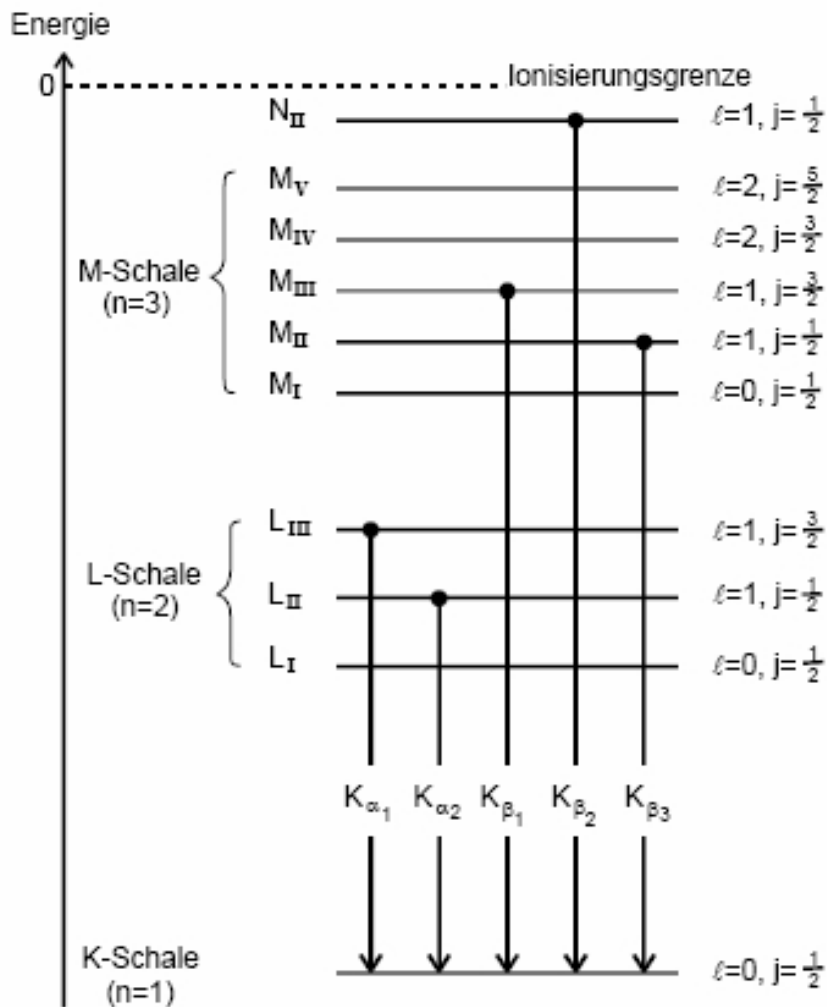
Die beiden Größen beschreiben die Abschwächung des Kernfeldes durch unbeeitigte Hüllenelektronen. σ wird auch als **Konstante der vollständigen Abschirmung** bezeichnet. Sie wird hauptsächlich durch Hüllenelektronen, deren Ladungsverteilungsmaximum innerhalb der n -ten Schale liegt bestimmt. Jedoch hat ebenfalls der Einfluss äußerer Elektronen eine Wirkung auf σ . Anders verhält es sich bei der **Konstante der inneren Abschirmung** s , die nur durch Elektronen der n -ten Schale bestimmt ist.

Beide Konstanten zeigen eine n - und l -Abhängigkeit und mit ihnen schreibt sich unser Energieterm:

$$E_{n,j} = R_{\infty} \left[(z - \sigma_{n,l})^2 \frac{1}{n^2} + \alpha^2 (z - s_{n,l})^4 \frac{1}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

Da für gegebene Hauptquantenzahl n mehrere l und j Werte möglich sind, folgt eine Aufspaltung der Energieniveaus des vorherigen Kapitels in Unterniveaus. Dies bezeichnet man als **Feinstruktur-Aufspaltung** und soll jetzt genauer diskutiert werden.

Aus der Beziehung $l_{\max} = n - 1$ lässt sich die Anzahl an Feinstruktur-niveaus jeder Schale errechnen. Anschaulich ergibt sich eine Aufteilung wie in der folgenden Abbildung gezeigt.



Man erkennt, dass nur einige Übergänge möglich sind: Diese gehorchen gewissen Übergangsregeln. Zum einen müssen sich die Bahndrehimpulse um genau $\Delta l = \pm 1$ unterscheiden und Übergänge aus Schalen $n > 3$ sind höchst selten. Für einen

Übergang zwischen zwei Energieniveaus E' und E ergibt sich:

$$E = R_{\infty} \left[\frac{(z - \sigma_{n,l})^2}{n^2} - \frac{(z - \sigma_{n',l'})^2}{n'^2} + \alpha^2 \frac{(z - s_{n,l})^4}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) - \alpha^2 \frac{(z - s_{n',l'})^4}{n'^3} \left(\frac{1}{j' + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n'} \right) \right]$$

Ziel des Experimentes ist es, einige Abschirmungszahlen σ und s verschiedener Atome zu bestimmen. Hierzu ist die Betrachtung von Emissionsspektren jedoch nur bedingt geeignet. Daher diskutieren wir im nächsten Kapitel eine andere Methode.

2.4. Röntgen-Absorptionsspektrum

Beim Durchgang durch Materie tritt eine material- und energieabhängige Schwächung der Strahlintensität auf, in erster Linie verursacht durch Absorption, desweiteren in geringem Maße durch Streuung. Die Absorption eines Quants wird mikroskopisch als „innerer Photoeffekt“ bezeichnet. Hat das einfallende Quant mindestens die Bindungsenergie eines Hüllenelektrons des Absorberatoms, so kann es dieses aus dem Bindungszustand hinausschlagen. Die überschüssige Energie erhält das Elektron als kinetische Energie: $h\nu = E_B + E_{\text{kin}}$. Die Wahrscheinlichkeit für diesen Vorgang ist direkt proportional zur Kernladungszahl z des Absorberatoms und der Quantenenergie $h\nu$. In einem Energiebereich unter 100keV lässt sich der Absorptionskoeffizient μ annähern mit:

$$\mu \propto z^5 E^{-3,5}$$

Für den Fall, dass ein Quant ein Elektron aus seiner Schale schlägt, ist es möglich anhand energetischer Betrachtungen und der Näherung, dass der Energiebereich des sichtbaren Lichtes zu vernachlässigen ist, für die K-Schale folgende Energie aufstellen:

$$h\nu_{K_{\text{Abs}}} = E_{1,\frac{1}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left[(z - \sigma_{1,0})^2 + \alpha^2 (z - s_{1,0})^4 \frac{1}{4} \right] \quad (2.1)$$

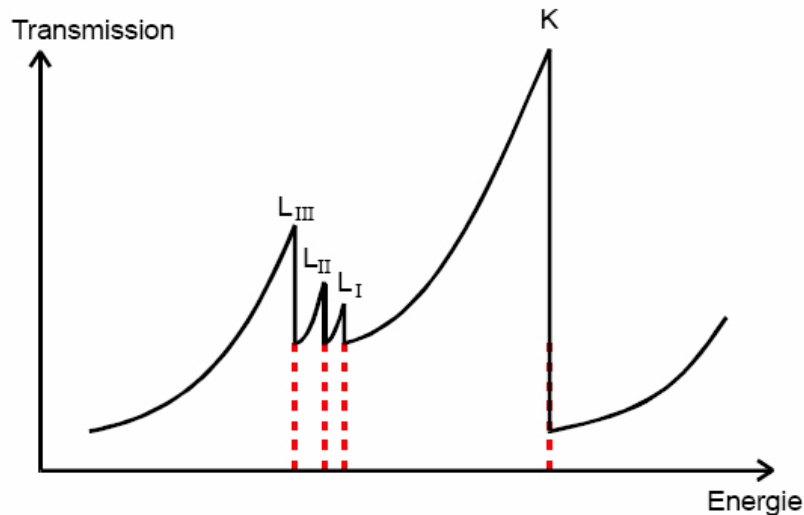
Für die K-Schale verschwindet die innere Abschirmungskonstante $s_{1,0}$, da sich nur wenige Elektronen auf ihr befinden. Wir erhalten eine Beziehung zwischen der Abschirmungszahl σ und der recht einfach messbaren Energie $h\nu_{K_{\text{Abs}}}$. Eine andere Möglichkeit zur Bestimmung der Abschirmungszahlen soll am Beispiel der 3 L-Kanten gezeigt werden:

$$\begin{aligned} h\nu_{L_{\text{AbsI}}} &= E_{2,0,\frac{1}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left[\frac{(z - \sigma_{2,0})^2}{8} + \alpha^2 \frac{(z - s_{2,0})^4}{8} \frac{5}{8} \right] \\ h\nu_{L_{\text{AbsII}}} &= E_{2,1,\frac{1}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left[\frac{(z - \sigma_{2,1})^2}{8} + \alpha^2 \frac{(z - s_{2,1})^4}{8} \frac{5}{8} \right] \\ h\nu_{L_{\text{AbsIII}}} &= E_{2,1,\frac{3}{2}} - E_{\infty} = R_{\infty} \left[\frac{(z - \sigma_{2,1})^2}{8} + \alpha^2 \frac{(z - s_{2,1})^4}{8} \frac{1}{8} \right] \end{aligned}$$

Bildet man die Differenz der beiden Energien $h\nu_{L_{\text{AbsII}}}$ und $h\nu_{L_{\text{AbsIII}}}$, so erhält man eine Beziehung aus der sich die Abschirmzahl $s_{2,1}$ berechnen lässt:

$$h\nu_{L_{\text{AbsII}}} - h\nu_{L_{\text{AbsIII}}} = R_{\infty} \alpha^2 \frac{(z - s_{2,1})^4}{16} \quad (2.2)$$

Praktisch läuft die Ermittlung wie folgt ab: Man bestrahlt eine dünne Schicht der zu untersuchenden Materie mit monoenergetischer Röntgenstrahlung und misst die Intensität der nicht absorbierten Strahlung in Abhängigkeit von der Energie. Ein solches Absorptionsspektrum hat idealisiert die folgende Gestalt (aus [1]):

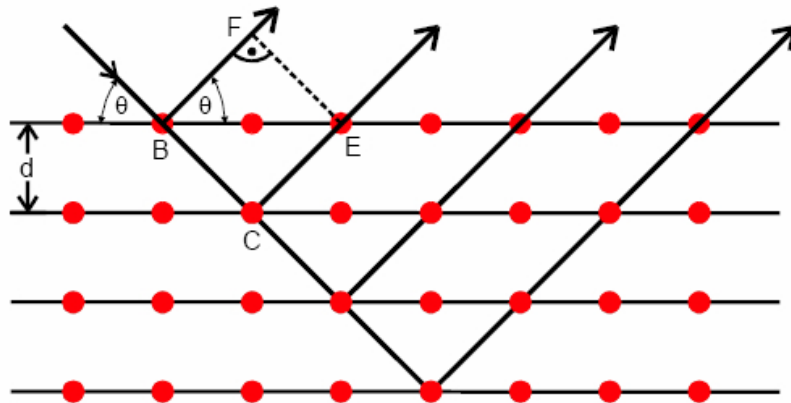


Die K-Kante und die L-Kanten sind deutlich zu erkennen. Gemäß $\mu \propto z^5 E^{-3,5}$ nimmt die Transmission mit ansteigender Quantenenergie zu, bis sie ausreicht, um ein Elektron aus der Hülle zu entfernen. An einer solchen Stelle erhält man im Idealfall eine Unstetigkeitsstelle der Kurve, welche man als Absorptionskante bezeichnet. Die Lage entspricht den Absorptionsenergien $h\nu_{\text{Abs}}$. Je nach Anzahl an Feinstruktur-niveaus erhält man entsprechend viele Unstetigkeitsstellen je Schale. Nebenher entstehen bei den Absorptionsvorgängen auch die Fluoreszenzstrahlung und COMPTON-Effekte. Diese wollen wir jedoch auf Grund ihrer ungerichteten Wirkung nicht weiter beachten. Ihr Einfluss ist bei Atomen mit Kernladungszahlen $z < 13$ allerdings nicht unerheblich (wir beschränken uns in diesem Experiment auf höhere Kernladungszahlen).

2.5. Messung von Intensität und Energie der Röntgenstrahlung

Zur Messung der Intensität (Anzahl an Quanten pro Flächen- und Längeneinheit) der Röntgenstrahlung nutzt man Messgeräte, die auf der ionisierenden Wirkung der Strahlung beruhen. Oft, wie auch in unserem Versuch, verwendet man hierzu ein GEIGER-MÜLLER-Zählrohr in Verbindung mit einem elektrischen Zählwerk und einem Zeitgeber. Weitere Messinstrumente wären das Proportional-Zählrohr, der Szintillations-Detektor und Detektoren auf Halbleiter-Basis. Neben der Intensität messen all diese Apparaturen ebenfalls die emittierte Energie, dessen Betrag proportional zur Höhe des vom Quant erzeugten elektrischen Impulses ist.

In unserem Experiment wird die benötigte monoenergetische Röntgenstrahlung mittels Interferenzerscheinungen nach elastischer Streuung an einem Kristall realisiert. Dies ist aufgrund der räumlich periodischen Anordnung von Atomen in dem Kristall möglich. Durch geometrische Überlegungen ergibt sich, dass es nur konstruktive Interferenz geben kann, sofern der Gangunterschied Δ zweier benachbarter Strahlen ein ganzzahliges Vielfaches von der Wellenlänge λ ist. Eine Veranschaulichung dieser Überlegung ist in der folgenden Abbildung zu sehen (d =Netzabstand):

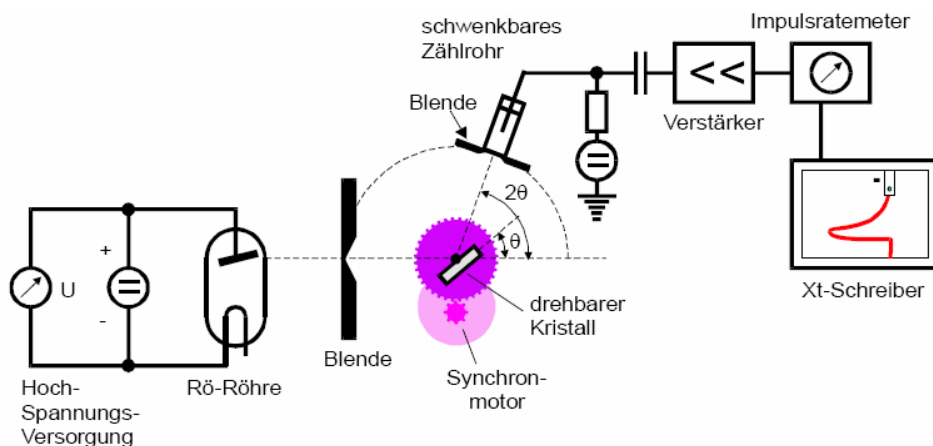


Diese Beziehung nennt man BRAGG'sche Reflexionsbedingung (n = Interferenzordnung):

$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda} = \frac{hcn}{2d \sin \theta} \quad (2.3)$$

Bei gegebenem Netzabstand d und gegebener Interferenzordnung n hat man eine eindeutige Beziehung zwischen dem Winkel θ und der Röntgen-Energie E . So kann man über eine Beugungswinkelmessung monoenergetische Röntgenstrahlung von einem bestimmten Betrage erzeugen.

2.6. Versuchsaufbau und Durchführung



Die Abbildung zeigt den schematischen Aufbau unseres Versuchs (aus [1]). Der in der Röntgenröhre erzeugte Röntgenstrahl trifft, nachdem er ein Loch in einer Blende passiert, auf einen drehbaren Kristall ($d = 20.1\text{nm}$). Nach der Reflexion (es treten hierbei nur Interferenzen 1. Ordnung auf) unter der BRAGG-Bedingung trifft der nun monoenergetische Röntgenstrahl auf eine dünne Schicht des zu untersuchenden Stoffes. Hinter der zu untersuchenden Materie befindet sich ein Zählrohr. Die Zählung und das Notieren der gemessenen Impulse geschieht völlig automatisch, da unser Versuch direkt an einen Computer angeschlossen war. Unsere Aufgabe bestand darin, die Winkel- und Zeitintervalle der Messung sinnvoll festzulegen. Dabei wählten wir erst grobe Intervalle, um einen Überblick zu erhalten, um in einer zweiten Messung die für uns interessanten Bereiche genauer zu untersuchen. Die Messergebnisse sind jedoch nicht kontinuierlich, wie es bei einem x t-Schreiber der Fall wäre, sondern diskret. Ursache hierfür ist, dass der Computer in bestimmten Schrittweiten von mindestens 0.1° gemessen hat. Bei jedem Winkel wurde über ein bestimmtes Zeitintervall gemessen und gemittelt. Der Neigungswinkel des Kristalls und des Zählrohrs standen in einem Verhältnis von 2 : 1

3. Auswertung

3.1. Bestimmung der $\sigma_{1,0}$ Abschirmzahlen bei Niob und Strontium

Zur Bestimmung der $\sigma_{1,0}$ -Abschirmzahlen messen wir die Lage der K -Kanten bei zwei verschiedenen Elementen aus. Die Umrechnung von Winkelangaben auf der x -Achse in die gesuchten Energien erfolgt mit Hilfe der BRAGG-Reflexion (Gleichung 2.3):

$$E = \frac{hcn}{2d \sin \Theta}$$

Hierbei ist $h = 4.13567 \cdot 10^{-15}\text{eV}$ das PLANCK'sche Wirkungsquantum, die Lichtgeschwindigkeit $c = 299792458 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, n die Interferenzordnung (in diesem Versuch ist $n = 1$) und $d = 2.01 \cdot 10^{-10}\text{m}$ der Netzebenenabstand des verwendeten LiF-Kristalls)

Die Bestimmung des Winkels der gesuchten Kante lässt sich wie folgt feststellen: theoretisch sollte die Kante eine Unstetigkeit im Spektrum sein, in der Praxis gibt es jedoch eine endliche Steigung. Zur Ermittlung des richtigen Winkelwerts addiert man die Minimal- und Maximalintensitäten der Kante und findet den halben Wert im Plot.

Aufgrund der diskreten Natur der Messungen und der damit verbundenen nur näherungsweise möglichen Angabe der Mittelwerte gehen wir bei allen folgenden Betrachtungen von einer Winkelungenauigkeit von $\pm 0.05^\circ$ auf die gebildeten Mittelwerte und damit auf die Lagen der Kanten aus. Die Minimal- und Maximalwinkel der jeweiligen Kanten nehmen wir als fehlerfrei an, da wir dort nur Messpunkte benutzen, die die Apparatur in der Form liefert.

Den Fehler auf die Energie erhalten wir dann mit Hilfe der GAUSS'schen Fehlerfortpflanzung aus Gleichung 2.3. Wir berechnen die Ableitung von E nach dem Winkel, setzen dort den interessierenden Winkel ein (hier und weiterhin in diesem

Protokoll mit dem zusätzlichen Index 0 angedeutet) und multiplizieren mit dem Fehler auf den Winkel:

$$\begin{aligned}\Delta E &= \left| \frac{\partial E}{\partial \Theta} \right|_{\Theta_0} \cdot \Delta \Theta_0 \\ &= \frac{hcn}{2d} \cdot \frac{1}{\sin^2 \Theta_0} \cdot \cos \Theta_0 \cdot \Delta \Theta_0\end{aligned}$$

Für Strontium erkennen wir die maximalen und minimalen Werte für die Winkel

$$\begin{aligned}\Theta_{\max}^{\text{Sr}} &= 11.4^\circ \\ \Theta_{\min}^{\text{Sr}} &= 10.5^\circ\end{aligned}$$

Wir ermitteln nun den Wert $(I_{\max} + I_{\min})/2$ und finden den dazugehörigen Winkelwert. Da wir nur eine endliche Anzahl von Messpunkten zur Verfügung haben, approximieren wir die Zwischenwerte linear (wie in den beigefügten Plots der Messapparatur). Den dazugehörigen Winkel gibt man dann als Lage der Kante an. Da diese Rechnungen im Wesentlichen grafisch anhand der Plots erfolgen, geben wir die Zwischenrechnungen im weiteren Verlauf nicht mit an. Die gesuch-

Tabelle 1: Lage der K-Kanten, z ist die Kernladungszahl

Element	Kristallwinkel [deg]	Energie [eV]
Sr ($z = 38$)	10.95 ± 0.05	16236.6 ± 73.2
Nb ($z = 41$)	9.2 ± 0.05	19290.5 ± 103.9

ten Abschirmungszahlen $\sigma_{1,0}$ für die beiden Elemente berechnen wir nun mit Hilfe von Gleichung 2.1 (E_K ist die Energie, bei der wir die K-Kante erkannt haben, $R_\infty = 13.6\text{eV}$ ist die RYDBERG-Energie, z die Kernladungszahl, $\alpha = 1/137$ die SOMMERFELD'sche Feinstrukturkonstante):

$$\begin{aligned}E_K &= R_\infty \left((z - \sigma_{1,0})^2 + \alpha^2 \frac{z^4}{4} \right) \\ \frac{E_K - R_\infty \alpha^2 \frac{z^4}{4}}{R_\infty} &= (z - \sigma_{1,0})^2 \\ \sigma_{1,0} &= z - \sqrt{\frac{E_K - R_\infty \alpha^2 \frac{z^4}{4}}{R_\infty}}\end{aligned}$$

Die Fehler auf die Abschirmungszahlen berechnen wir erneut mit Hilfe der Fehlerfortpflanzungsformel:

$$\begin{aligned}\Delta \sigma_{1,0} &= \left| \frac{\partial \sigma_{1,0}}{\partial E_K} \right|_{E_{K,0}} \cdot \Delta E_{K,0} \\ &= \frac{1}{2R_\infty \sqrt{\frac{E_{K,0} - \frac{1}{4}R_\infty z^2 \alpha^2}{R_\infty}}} \cdot \Delta E_{K,0}\end{aligned}$$

Durch Einsetzen der Werte erhalten wir für die hier benutzten Elemente

- Sr: $\sigma_{1,0}^{\text{Sr}} = 3.45 \pm 0.08$
- Nb: $\sigma_{1,0}^{\text{Nb}} = 3.33 \pm 0.10$

3.2. Bestimmung der $s_{2,1}$ Abschirmzahl für Gold und Platin

Für die Umrechnung der Winkelbeziehungen gilt auch hier wieder Gleichung 2.3 mit den gleichen Bedingungen. Um die $s_{2,1}$ Abschirmzahl bestimmen zu können, müssen wir die Lage der L_{II} und L_{III} -Kanten bestimmen, wozu wir wieder die Lage des Mittelwerts zwischen Kantenmaximum und -minimum benutzen. Die

Tabelle 2: Lage der L_{III} -Kanten, z ist die Kernladungszahl

Element	L_{III} Kristallwinkel [deg]	L_{III} Energie [eV]
Au ($z = 79$)	14.74 ± 0.05	12121.8 ± 40.2
Pt ($z = 78$)	15.36 ± 0.05	11643.6 ± 37.0

Tabelle 3: Lage der L_{II} -Kanten, z ist die Kernladungszahl

Element	L_{II} Kristallwinkel [deg]	L_{II} Energie [eV]
Au ($z = 79$)	13.05 ± 0.05	13658.9 ± 51.4
Pt ($z = 78$)	13.48 ± 0.05	13230.8 ± 48.2

Abschirmkonstante $s_{2,1}$ errechnen wir mit der in der Theorie gegebenen Formel 2.2 (Die Konstanten wie im letzten Abschnitt angegeben, ΔE ist die Differenz der L_{III} und L_{II} -Kantenenergien):

$$s_{2,1} = z - \sqrt{\left(\frac{4}{\alpha} \sqrt{\frac{\Delta E}{R_{\infty}}} - \frac{5\Delta E}{R_{\infty}}\right) \left(1 + \frac{19}{32} \alpha^2 \frac{\Delta E}{R_{\infty}}\right)}$$

Zur Berechnung des Fehler beachte man, dass der Fehler auf die Energiedifferenz ΔE gleich den addierten Fehlern der einzelnen Energien ist. Man erhält nun den Fehler auf die Abschirmungszahl $s_{2,1}$ wieder mit GAUSS (der Übersichtlichkeit halber benennen wir den Fehler auf die Differenz ΔE mit δE):

$$\begin{aligned} \Delta s_{2,1} &= \left| \frac{\partial s_{2,1}}{\partial \Delta E} \right|_{\Delta E_0} \cdot \delta E \\ &= \frac{19 \left(-\frac{5\Delta E_0}{R_{\infty}} + \frac{(\Delta E_0/R_{\infty})^{0.25}}{\alpha} \right) \alpha^2}{32R_{\infty}} + \left(-\frac{5}{R_{\infty}} + \frac{2}{\sqrt{\Delta E_0/R_{\infty} R_{\infty} \alpha}} \right) \cdot \left(1 + \frac{19\Delta E_0 \alpha^2}{32R_{\infty}} \right) \cdot \delta E \\ &= \frac{2 \sqrt{\left(-\frac{5\Delta E_0}{R_{\infty}} + \frac{(\Delta E_0/R_{\infty})^{0.25}}{\alpha} \right) \cdot \left(1 + \frac{19\Delta E_0 \alpha^2}{32R_{\infty}} \right)}}{2} \cdot \delta E \end{aligned}$$

Mit diesen Formeln kommen wir auf folgende Abschirmzahlen $s_{2,1}$ mit Ungenauigkeiten:

- Au: $s_{2,1}^{\text{Au}} = 6.34 \pm 0.97$
- Pt: $s_{2,1}^{\text{Pt}} = 4.81 \pm 0.88$

3.3. Abschätzung der Abschirmungszahlen σ_1 und σ_2 für Kupfer

Zunächst bestimmen wir die Lage der K_α und K_β -Linien im Emissionsspektrum für Kupfer. Für die gesuchten Abschirmungszahlen gibt die Anleitung folgende

Tabelle 4: Lage der K-Kanten beim Kupfer, $z = 29$

	Kristallwinkel [deg]	Energie [eV]
K_α -Kante	22.45 ± 0.05	8076.38 ± 17.06
K_β -Kante	20.09 ± 0.05	8978.82 ± 21.42

Näherungen an:

$$\sigma_1 = z - \sqrt{\frac{E_{K_\beta}}{R_\infty}}$$

$$\sigma_2 = z - \sqrt{-\frac{E_{K_\alpha} - R_\infty (z - \sigma_1)^2}{R_\infty/4}}$$

Die Fehler auf diese Größen sind damit

$$\Delta\sigma_1 = \left| \frac{\partial\sigma_1}{\partial E_{K_\beta}} \right|_{E_{K_\beta,0}} \cdot \Delta E_{K_\beta}$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{\frac{E_{K_\beta,0}}{R_\infty}} R_\infty} \cdot \Delta E_{K_\beta}$$

$$\Delta\sigma_2 = \sqrt{\left| \frac{\partial\sigma_2}{\partial E_{K_\alpha}} \right|_{E_{K_\alpha,0}}^2 \cdot \Delta E_{K_\alpha}^2 + \left| \frac{\partial\sigma_2}{\partial E_{K_\beta}} \right|_{E_{K_\beta,0}}^2 \cdot \Delta E_{K_\beta}^2}$$

$$= \sqrt{\frac{\Delta E_{K_\alpha}^2}{(-E_{K_\alpha,0} + E_{K_\beta,0}) R_\infty} + \frac{\Delta E_{K_\beta}^2}{(-E_{K_\alpha,0} + E_{K_\beta,0}) R_\infty}}$$

Damit erhalten wir schlussendlich

$$\sigma_1 = 3.31 \pm 0.03$$

$$\sigma_2 = 12.71 \pm 0.25$$

3.4. Bestimmung der Energieauflösung der Apparatur

Für die Bestimmung der Energieauflösung benötigen wir zunächst die Winkelbreite der CuK_α -Emissionslinie. Das Maximum liegt bei $\Theta_{\text{max}} = 22.7^\circ$ und die beiden

Grenzwinkel bei $\Theta_1 = 22.21^\circ$ und $\Theta_2 = 22.81^\circ$. Damit erhalten wir Energien von $E_1 = 8159.17\text{eV}$ und $E_2 = 7955.57\text{eV}$. Die Energieauflösung ΔE beträgt also

$$\Delta E = E_1 - E_2 = 203.6\text{eV}$$

Die Extrapolation auf den Grenzwinkel ist mit den Daten der von uns benutzten Apparatur kaum möglich, jedoch können wir eine ungefähre Aussage machen: Der kleinste von uns vermessene Winkel war $\Theta_{\text{kleinst}} = 6^\circ$, das entspricht einer Energie von etwa 30keV . Tatsächlich scheint das Spektrum jedoch über den gemessenen Bereich hinauszugehen, eine lineare Näherung legt einen Grenzwinkel von 5° nah. Die dazugehörige Energie wäre

$$E_{\text{max}} = 35\text{keV}$$

Dies passt gut zur benutzten Beschleunigungsspannung von 35kV .

A. Anhang

A.1. Literatur

[1] Die Abbildungen im Theorieteil stammen aus der Versuchsanleitung (<http://berniers-lee.physik.uni-dortmund.de/praktikum/AP-Anleitungen/INHALTneu.htm>).

A.2. Messdaten

Angefügt in Kopie.

B. Vergleich mit Literaturwerten

Für die Energiewerte der *K* und *L*-Kanten fanden wir im Internetangebot des Biomolecular Structure Center der Universität von Washington, Seattle (<http://www.bmsc.washington.edu/scatter/periodic-table.html>) Referenzwerte, die wir hier mit den von uns ermittelten Werten vergleichen: Es

Tabelle 5: Vergleich unserer Messwerte mit Literaturwerten

Element	Kante	gemessene Energie [eV]	Literaturwert [eV]
Sr ($z = 38$)	<i>K</i>	16236.6 ± 73.2	16104.6
Nb ($z = 41$)	<i>K</i>	19290.5 ± 103.9	18985.6
Au ($z = 79$)	<i>L</i> _{III}	12121.8 ± 40.2	11918.7
	<i>L</i> _{II}	13658.9 ± 51.4	13733.6
Pt ($z = 78$)	<i>L</i> _{III}	11643.6 ± 37.0	11563.7
	<i>L</i> _{II}	13230.8 ± 48.2	13272.6

zeigt sich, dass unsere Messwerte größtenteils auch innerhalb der Fehlergrenzen die Theoriewerte nicht ganz erreichen; es scheint also weitere, von uns unberücksichtigte Fehlerquellen gegeben zu haben.