

Physikalisches Fortgeschrittenen-Praktikum  
TU Dortmund / Fachbereich Physik

# Röntgen-Spektroskopie

Ernesto Ruge & Dominik Duda \*

25. Mai 2009

---

\*mail@ernestoruge.de, domi.duda@web.de,

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Theorie</b>	<b>3</b>
2.1	Energieeigenwerte wasserstoffähnlicher Atome ohne Berücksichtigung von Spin und relativistischen Effekten . . . . .	3
2.2	Berücksichtigung der relativistischen Massenabhängigkeit . . . . .	5
2.3	Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung . . . . .	5
2.4	Energieeigenwerte wasserstoffähnlicher Atome . . . . .	6
2.5	Bezeichnung der Energieniveauübergänge . . . . .	7
2.6	Energie von Röntgenemissionslinien . . . . .	8
2.7	Die Abschirmkonstanten . . . . .	8
2.8	Absorptionsspektren . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Aufbau und Durchführung</b>	<b>10</b>
3.1	Beschreibung der Messapparatur . . . . .	10
3.2	Der lithiumgedriftete Silizium-Detektor . . . . .	10
3.3	Durchführung . . . . .	12
<b>4</b>	<b>Auswertung</b>	<b>13</b>
4.1	Eichmessung . . . . .	13
4.2	Bestimmung des Auflösungsvermögen des Detektors . . . . .	15
4.3	K-Absorptionskanten . . . . .	16
4.4	L-Absorptionskanten und Fluoreszenzspektrum . . . . .	18
<b>5</b>	<b>Diskussion</b>	<b>22</b>
<b>6</b>	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>22</b>
<b>7</b>	<b>Anhang</b>	<b>22</b>

## 1 Einleitung

Mithilfe der Röntgenspektroskopie kann man detaillierte Aussagen über die Energieeigenwerte der Elektronen im Inneren einer Elektronenhülle machen. In diesem Versuch sollen somit Vergleiche zwischen den auf Basis der Quantenmechanik theoretisch berechneten Werten und den gemessenen Werten gemacht werden, wobei man bei der Berechnung der Energieeigenwerte analog zum Wasserstoffatom verfährt. Dabei wird die Annahme gemacht, dass zwischen dem jeweils angeregten Elektron und den restlichen Elektronen, die als starr aufgefasst werden, keine Wechselwirkung auftritt. So dass deren Existenz letztlich nur eine Abschirmung der Kernladung  $z$  bewirkt und man so zur mathematischen Beschreibung in der Schrödingergleichung des Wasserstoffatoms lediglich die Kernladungszahl  $z$  durch die effektive Kernladungszahl  $z_{eff}$  zu substituieren hat. Des Weiteren werden zu Erhöhung der Genauigkeit relativistische Korrekturen (Feinstrukturen) vorgenommen, die im Zuge der quantenmechanischen Störungsreihenentwicklung erster Ordnung eine Korrektur der Energieeigenwerte bewirken.

## 2 Theorie

### 2.1 Energieeigenwerte wasserstoffähnlicher Atome ohne Berücksichtigung von Spin und relativistischen Effekten

Geht man von einem Elektron in einem Coulombfeld einer Kernladung  $z_{eff} \cdot e_0$  aus, so erhält man die potentielle Energie

$$U(r) = -\frac{z_{eff} \cdot e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (2.1)$$

so dass die Schrödingergleichung die Gestalt

$$E\psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta - \frac{z_{eff} \cdot e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi \quad (2.2)$$

annimmt. Löst man die Gleichung in Polarkoordinaten (unter Berücksichtigung der Rotations-symmetrie des Systems) auf und nutzt einen Separationsansatz aus um die Eigenfunktionen  $\psi$  gemäß

$$\psi(r, \phi, \theta) = Y(\phi, \theta) \cdot \frac{\chi(r)}{r}$$

in die Kugelflächenfunktion (also den Winkelanteil)  $Y(\phi, \theta)$  und  $\chi(r)$ , den Radialanteil, aufzuspalten. Mit der Variablentransformation

$$\rho = \frac{r m_0 e_0^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$$

erhält man folgende Gleichung:

$$\left( \frac{d^2}{d\rho^2} - \ell(\ell+1) \frac{1}{\rho^2} + 2z_{eff} \frac{1}{\rho} + \tilde{E} \right) \chi = 0, \quad (2.3)$$

in der die Abkürzungen

$$\tilde{E} = \frac{E}{R_\infty} \quad \text{und} \quad R_\infty = \frac{m_0 e_0^4}{8\epsilon_0 h^2}$$

verwendet wurden, wobei  $R_\infty = 13,6 \text{ eV}$  die Rydbergenergie und  $\ell$  der Eigenwert des Bahndrehimpulses sind. Betrachtet man zunächst lediglich asymptotische Lösungen also solche  $\chi$  für die  $\rho$  hinreichend groß wird, dann fallen der zweite und der dritte Term der Gleichung (2.3) heraus und man erhält als einzige physikalische Lösung

$$\chi(\rho) = \text{const} \cdot \exp\left(-\sqrt{-\tilde{E}}\rho\right), \quad (2.4)$$

falls man zudem beachtet, dass  $\chi$  eines gebundenen Zustandes bei  $\rho \rightarrow \infty$  verschwinden muss (da die gebundenen Zustände für  $\rho \rightarrow \infty$  zu Streuzuständen werden und die Elektronen somit in Kernenähe eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit haben die gegen Null geht). Für den Fall  $\rho \rightarrow 0$  ergibt sich

$$\chi(\rho) = \text{const} \cdot \rho^{\ell+1}, \quad (2.5)$$

als einzige Lösung, die physikalisch sinnvoll ist. Aus (2.4) und (2.5) lassen sich nun per Potenzreihenansatz (für die Konstante *const*) die Energieeigenwerte:

$$\tilde{E} = -\frac{z_{eff}^2}{(k + \ell + 1)^2} \quad \text{mit} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.6)$$

berechnen. Mit  $n := k + \ell + 1$  kann man nun die Hauptquantenzahl definieren, mit der sich die Energieeigenwerte wie folgt darstellen lassen:

$$E_n = -R_\infty \frac{z_{eff}^2}{n^2} \quad (2.7)$$

## 2.2 Berücksichtigung der relativistischen Massenabhängigkeit

Die relativistische Massenabhängigkeit wird als zusätzlicher Term im Rahmen einer Störungsrechnung zu den Eigenwerten des Hamiltonoperators hinzugefügt. Hierzu ersetzt man den Operator der kinetischen Energie durch die für relativistische Geschwindigkeiten  $v$  korrekte Gleichung:

$$T_{rel} = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 P^2} - mc^2 \quad (2.8)$$

Führt man mit (2.8) eine Taylorreihenentwicklung durch und beachtet man, dass es sich bei dem zweiten Glied der Gleichung nur um eine kleine Störung handeln soll, kann man die Erwartungswerte des Störoperators  $H_S \propto P^4$  zu denen der ungestörten Eigenfunktion hinzuaddieren:

$$E_{rel_n} = \frac{1}{8} \frac{1}{m_0^3 c^2} \langle \psi, P^4 \psi \rangle + E_n \quad (2.9)$$

Berechnet man nun die Energieeigenwerte, erhält man:

$$E_{rel_n} = -R_\infty \left( \frac{z_{eff}^2}{n^2} + \alpha^2 \frac{z_{eff}^4}{n^3} \left( \frac{2}{2\ell + 1} - 3 \frac{3}{4n} \right) \right), \quad (2.10)$$

in der die Abkürzung

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

verwendet wird. Diese Konstante ist in der Literatur unter dem Begriff Feinstrukturkonstante zu finden.

## 2.3 Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung

Auch hier soll durch Störungsrechnung ein zusätzlicher Störterm gefunden werden:

$$H_{ges} = H + H_{SpB} \quad (2.11)$$

Der Operator  $H_{SpB}$  lässt sich aus der Diracschen Theorie des relativistischen Elektrons ableiten. Wenn man nur Glieder bis zur Ordnung  $\frac{1}{c^2}$  berücksichtigt und als Feld ein Coulombfeld zugrunde legt, erhält man folgende Gleichung:

$$H_{SpB} = \frac{1}{2m_0^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} S \cdot L - \frac{e_0 \hbar^2}{8m_0^2 c^2} \nabla \cdot \vec{E} \quad (2.12)$$

Für  $\ell \neq 0$  erhält man dann:

$$\langle \psi, H_{SpB} \psi \rangle = \alpha^2 R_\infty \frac{z_{eff}^4}{n^3} \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}}{\ell(\ell+1)(2\ell+1)} \quad (2.13)$$

Dies vereinfacht sich für  $\ell = 0$  zu:

$$\langle \psi, H_{SpB} \psi \rangle = \alpha^2 R_\infty \frac{z_{eff}^4}{n^3} \quad (2.14)$$

## 2.4 Energieeigenwerte wasserstoffähnlicher Atome

Mit Hilfe der vorangegangenen Überlegungen lassen sich nun die Energieeigenwerte für wasserstoffähnliche Atome angeben. Für  $\ell \neq 0$  gilt:

$$E_{n,\ell,j} = -R_\infty \left( \frac{z_{eff}^2}{n^2} + \alpha^2 \frac{z_{eff}^4}{n^3} \left( \frac{2}{2\ell+1} - \frac{3}{4n} \right) - \alpha^2 R_\infty \frac{z_{eff}^4}{n^3} \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}}{\ell(\ell+1)(2\ell+1)} \right) \quad (2.15)$$

Beachtet man nun, dass der Elektronenspin nur parallel oder antiparallel zum Bahndrehimpuls stehen kann, erhält man letztlich die Sommerfeldsche Feinstrukturformel in der Näherung  $O\left(\frac{1}{c^2}\right)$ :

$$E_{n,j} = -R_\infty \left( \frac{z_{eff}^2}{n^2} + \alpha^2 \frac{z_{eff}^4}{n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right) \quad (2.16)$$

Für  $\ell = 0$  gilt:

$$E_{n,\frac{1}{2}} = -R_\infty \left( \frac{z_{eff}^2}{n^2} + \alpha^2 \frac{z_{eff}^4}{n^3} \left( 1 - \frac{3}{4n} \right) \right) \quad (2.17)$$

Mit (2.15) konnten Emissionslinien im Spektrum wasserstoffähnlicher Atome erstmalig erklärt werden. Bei Atomen ab etwa  $z > 70$  muss allerdings noch ein weiterer Korrekturterm beachtet werden:

$$\Delta E(\alpha^4 z_{eff}^6) = -R_\infty \alpha^4 \frac{z_{eff}^6}{n^6} \left( \frac{1}{4} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} \right)^3 + \frac{3}{4} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} \right)^2 - \frac{3}{2} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} \right) + \frac{5}{8} \right) \quad (2.18)$$

## 2.5 Bezeichnung der Energieniveauübergänge

Solange ein Atom im Grundzustand ist, kann es aufgrund des Pauliverbotes (es können keine Übergänge in niedrigere Niveaus stattfinden) keine Röntgenquanten emittieren. Das bedeutet, dass ein Elektronenstoß oder ein energiereiches Röntgenquant benötigt wird, um das Atom (instabil) anzuregen. Die durch die Anregung des entsprechenden Elektrons entstandene Lücke, wird alsbald durch ein Elektron einer höheren Schale aufgefüllt, wobei wiederum ein Loch in einer oberen Schale entsteht. Auch dieses Loch wird durch ein energiereicheres Elektron (unter Aussendung eines Photons gefüllt, wobei sich dieser Vorgang solange wiederholt, bis dass alle Elektronen einen minimalen Energieeigenwert aufweisen.

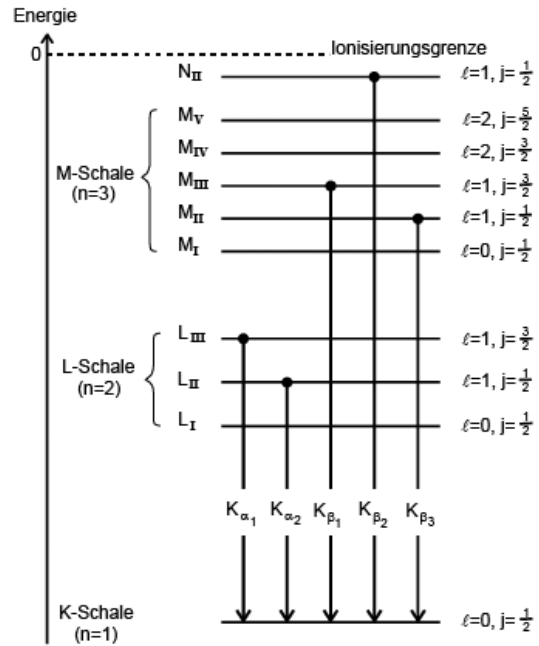


Abbildung 1: K-Übergänge

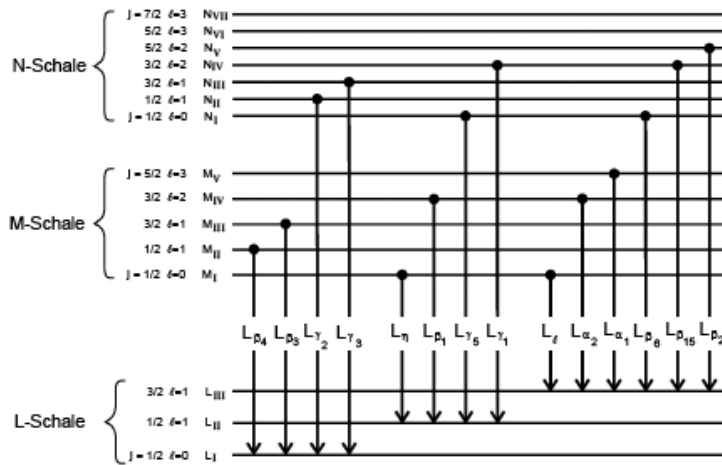


Abbildung 2: Bezeichnung der L-Übergänge

Der Begriff „Schale“ stammt dabei noch aus dem Atommodell nach Bohr, in dem die Schalen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen (beim Umlauf der Elektronen auf konstanten Bahnen um den Kern) charakterisieren. In der modernen Quantenmechanik lässt sich der Begriff Schale auf die Gesamtheit aller Elektronen innerhalb eines Atoms beziehen, die jeweils die gleiche Hauptquantenzahl  $n$  besitzen. Durch die relativistischen Korrekturen, spalten alle Schalen in  $2n - 1$  Unterschalen auf. In Abbildung 1 und 2 sind die Übergänge von Elektronen höhere Schalen auf die  $K$ -Schale ( $n=1$ ) bzw. die  $L$ -Schalen ( $n=2$ ) schematisch dargestellt. Übergänge, die auf die  $K$ -Schale gehen, werden als  $K$ -Strahlung bezeichnet, dies gilt analog für  $L$ - und weitere Strahlung.

Um die Strahlungsübergänge weiter zu charakterisieren, wurden griechische Indices eingeführt. Somit wird z.B. der Übergang eines Elektrons aus der  $L$ -Schale in die  $K$ -Schale als  $K_{\alpha_1}$ -Linie bezeichnet siehe (Abb. 1), wenn sich die Quantenzahlen des Elektrons beim Übergang von  $\ell = 1, j = \frac{3}{2}$  auf  $\ell = 0, j = \frac{1}{2}$  ändern. Die Wahrscheinlichkeit dieser Übergänge zwischen den Schalen unterliegt bestimmten Auswahlregeln der Quantenzahlen  $n, \ell$  und  $j$ , wobei die für diesen Versuch interessierenden Übergänge in Abb. 1 und 2 aufgeführt sind. Folgende Quantenzahländerungen (Auswahlregeln) sind dabei für Röntgenübergänge relevant.

$$\Delta n = 1, 2, 3 \tag{2.19}$$

$$\Delta \ell = \pm 1 \tag{2.20}$$

$$\Delta j = 0, \pm 1 \tag{2.21}$$

## 2.6 Energie von Röntgenemissionslinien

Bei einer Röntgenemission wird nach (2.) ein Photon der Energie

$$E = |E_{n',j'}| - |E_{n,j}| \tag{2.22}$$

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

freigesetzt.

## 2.7 Die Abschirmkonstanten

Durch  $\sigma_{n,\ell}$  und  $s_{n,\ell}$  werden jeweils die vollständige und innere Abschirmung ausgedrückt, wobei die beiden Größen gemäß

$$\begin{aligned} z_{eff} &= z - \sigma \\ z_{eff} &= z - s \end{aligned}$$

mit der effektiven Kernladungszahl verknüpft sind. Beide Größen beschreiben die Schwächung des Kernfeldes, welche durch die beim Emissionsprozeß unbeteiligten Elektronen hervorgerufen wird.

So wird die Größe  $\sigma_n$  im wesentlichen durch die Anzahl der Hüllenelektronen bestimmt, deren Ladungsverteilungsmaximum innerhalb der  $n$ -ten Schale liegt, wobei dennoch der Einfluss „äußerer“ Elektronen, also solcher mit  $n' > n$  auf  $\sigma_n$  zu bemerken ist, da  $\sigma_n$  bei festgehaltenem  $n$  und steigendem  $z$  anwächst. Dieser Effekt ist verständlich, wenn man berücksichtigt, dass die radiale Ladungsverteilung eines Hüllenelektrons auch noch in Kernnähe deutlich von null verschieden ist.

Im Gegensatz dazu ist ein Einfluss der äußeren Elektronen auf die Spin-Bahn-Kopplung nicht feststellbar, so dass die Abschirmungszahl  $s_n$  praktisch  $z$ -unabhängig ist (außer bei Atomen mit sehr niedrigen  $z$ -Werten). Dabei wird der Wert der Konstante  $s_n$  im wesentlichen durch diejenigen Elektronen bestimmt, die innerhalb der  $n$ -ten Schale liegen. Somit wird die Größe  $s_n$  auch als Konstante der inneren Abschirmung bezeichnet, während man  $\sigma_n$  auch Konstante der vollständigen Abschirmung nennt.

Beide Größen hängen von der Hauptquantenzahl  $n$  und der Nebenquantenzahl  $\ell$  ab, wobei beide mit steigendem  $n$  sehr stark anwachsen.

### 2.8 Absorptionsspektren

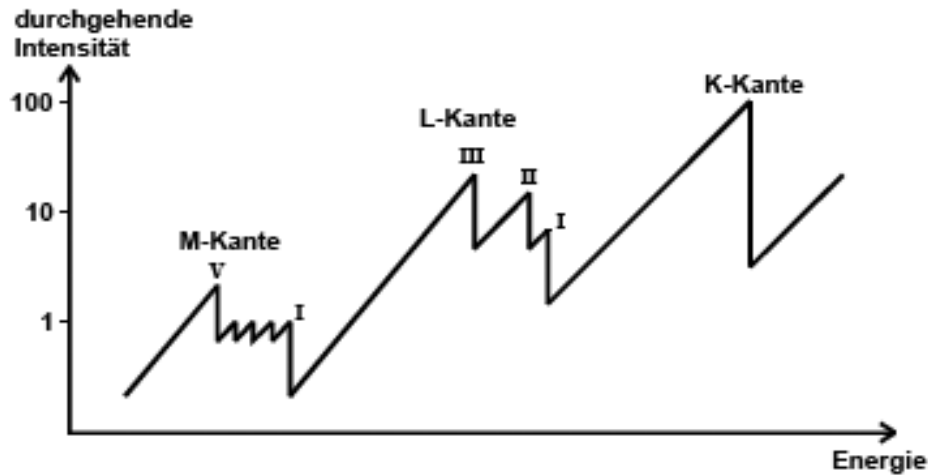


Abbildung 3: Typisches Röntgenabsorptionsspektrum

Beim Durchgang durch Materie wird die Intensität von Strahlung reduziert. Ein typisches Spektrum zeigt Abb. 3, in dem die stetigen Abschnitte dem Absorptionsgesetz

$$dI = -\gamma I dx$$

folgen. Dabei sind  $I$  die Intensität,  $\gamma$  die Abschirmungskonstante und  $x$  die Schichtdicke. In guter Näherung entspricht das Absorptionsgesetz einem  $E^{3,5}$ -Gesetz, wobei die Absorption bei bestimmten Energien sprunghaft ansteigt. Diese Stellen werden als Absorptionsskanten bezeichnet. Das sprunghafte Ansteigen lässt sich dadurch erklären, dass die Energie des einfallenden Röntgenquants ausreicht, um ein Elektron aus einer der Schalen des Absorberatoms zu entfernen. Das Elektron wird dabei in das nächste (unbesetzte) Niveau oder den kontinuierlichen Energiebereich oberhalb der Ionisationsenergie versetzt. Für die Absorption eines Röntgenquants durch ein Elektron der  $K$ -Schale eines Atoms ist die Energie

$$E_{K_{abs}} = R_{\infty} \left( \frac{(z - \sigma_{1,0})^2}{1^2} + \alpha^2 (z - s_{1,0})^4 \cdot \frac{1}{4} \right) \quad (2.23)$$

notwendig.

### 3 Aufbau und Durchführung

#### 3.1 Beschreibung der Messapparatur

Innerhalb dieses Versuchs werden sowohl Absorptions- als auch Emissionsspektren verschiedener Elemente untersucht. Als Quelle wird dazu die Bremsstrahlung einer Röntgenröhre verwendet, welche ein kontinuierliches Energiespektrum liefert. Störend ist hierbei lediglich die charakteristische Strahlung der Röhre, welche sich als Streustrahlung über die eigentliche Messung legt. Der prinzipielle Aufbau der Apparatur ist in Abb.4 dargestellt. Als Detektor wird ein sog.

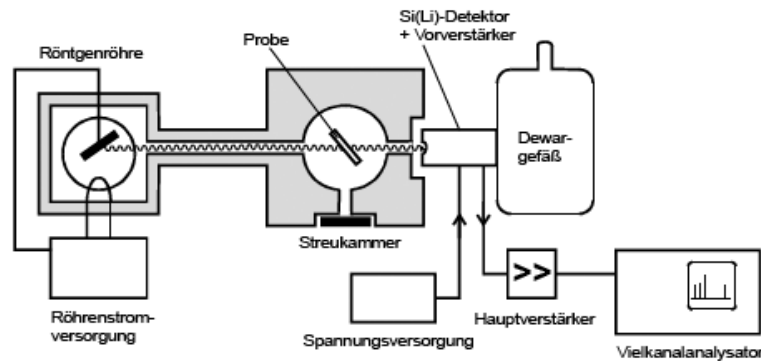


Abbildung 4: Schematischer Aufbau

lithiumgedrifteter Silizium-Detektor verwendet, welcher eine hohe Energieauflösung bietet. Er gibt pro einfallendes Röntgenquant einen elektrischen Impuls ab, welcher dann von einem Vor- und Hauptverstärker linear verstärkt wird, bevor er dann auf einen Vielkanalanalysator geleitet wird. Der Vielkanalanalysator sortiert und speichert die Impulse gemäß ihrer Höhe in verschiedene Kanäle (bis zu 1024). Das Impulshöhenspektrum kann schließlich auf einem Bildschirm sichtbar gemacht werden.

#### 3.2 Der lithiumgedriftete Silizium-Detektor

Der im Titel genannte Detektor ist eine Photodiode (die Diode besteht hier aus einem scheibenförmigen Si-Einkristall, dessen Seiten  $p$ - bzw.  $n$ -dotiert sind), welche durch verschiedene Maßnahmen deutlich verbessert wurde. Prinzipiell gelten zunächst die Grundlagen der Siliziumdiode - Elektronen und Löcher diffundieren durch die Grenzfläche zwischen den beiden Schichten in die jeweilige Nachbarzonen ein und rekombinieren dort, so dass sich in der Umgebung der Grenzfläche eine Zone ausbildet, die an beweglichen Ladungsträgern verarmt ist. Dadurch verbleiben in der  $p$ -Schicht die ortsfesten Akzeptoren, welche eine negative Raumladung erzeugen. In der  $n$ -Schicht befinden sich überwiegend die Donatoren, welche eine positiven Raumladung bewirken. Die Raumladungen erzeugen ein elektrisches Feld, welches die Diffusion der beweglichen Ladungsträger schließlich unterbindet.

Die so entstehende ladungsträgerarme Zone weist eine Breite auf, deren Größenordnung im Bereich  $\mu\text{m}$  liegt. Durch eine von Außen an den Kristall angelegte Gleichspannung  $U$  lässt sich diese Zone zusätzlich vergrößern.

Ein Röntgenquant mit ausreichender Energie erzeugt eine Reihe von Elektronen-Loch-Paaren in seinem Weg durch das Kristallgitter. Diese weit über das Leitungsband angehobenen Elek-

tronen geben ihre Energie durch Bildung weiterer Elektronen-Loch-Paare ab. Wenn man eine genügend hohe Spannung anlegt, lassen sich die Elektronen und Löcher an verschiedenen Elektroden trennen, so dass schließlich ein Impuls weitergeben wird.

Die Sperrschichtbreite  $S$  einer normalen Photodiode ist jedoch zumeist nicht breit genug, weswegen man den spezifischen Widerstand  $\rho_S$  des Halbleitermaterials erhöhen muss, da Widerstand und Sperrschichtbreite gemäß

$$S[mm] = a\sqrt{U\rho_S}$$

voneinander abhängen. Dabei ist  $U$  die angelegte Spannung und  $a$  ist eine Konstante, die den Wert 0,0005 hat falls die Dichte der Akzeptoren  $N_A$  viel größer ist als die Dichte der Donatoren  $N_D$  und 0,0003 falls  $N_D \gg N_A$ . Um den spezifischen Widerstand des Halbleitermaterials zu vergrößern, kann man Ionen in den Kristall einbauen, die eine entgegengesetzte Elektronenaffinität wie die bereits vorhandenen Störstellen besitzen. Dieser Drift neutralisiert jedes Störstellenatom durch ein hineingedriftetes Zusatzion, weswegen  $\rho_S$  um mehrere Größenordnungen steigt. Die so entstandene Diode nennt sich p-i-n-Diode und hat eine Verarmungszone von mehreren  $mm$  Dicke. Da allerdings die Li-Atome bei Zimmertemperatur bereits sehr beweglich sind, muss der Detektor mit flüssigem Stickstoff gekühlt werden.

Somit hat man einen Detektor, dessen Auflösungsvermögen das aller anderen Detektoren übertrifft. Wenn die mittlere Anzahl der entstandenen Elektronen-Loch-Paare pro absorbiertem Röntgenquant  $\bar{n}$  beträgt, dann ist die Standardabweichung gegeben durch:

$$\sigma = \sqrt{\frac{FE}{E_B}} \tag{3.1}$$

$F$  ist hierbei der sog. Fano-Faktor, der für Silizium den Wert  $F = 0,13$  hat. Hieraus lässt sich die Halbwertsbreite im Energiespektrum an der Stelle  $E$  berechnen, welche das Auflösungsvermögen des Detektors ohne Berücksichtigung von Effekten wie dem Rauschen des Verstärkers darstellt:

$$\Delta E_{\frac{1}{2}} = \frac{\Delta n_{\frac{1}{2}}}{\bar{n}} E = \sqrt{8 \ln(2) F E E_B} \tag{3.2}$$

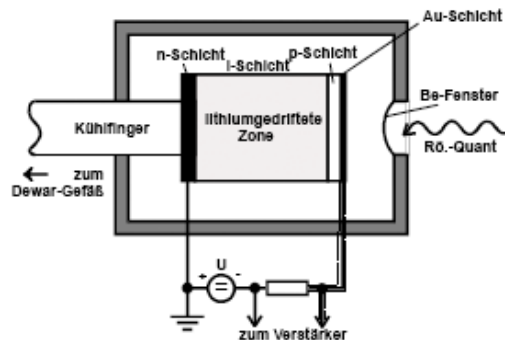


Abbildung 5: Querschnitt durch einen Si(Li)Detektor

Die Abbildung 5 zeigt den schematischen Aufbau eines solchen Si(Li)-Detektors, bei dem der Kristall im Vakuum montiert und über einen Kühlfinger mit einem Kryostaten verbunden ist, wobei diese Maßnahmen dazu dienen, den Detektor auf der Temperatur des siedenden Stickstoffes zu halten und ihn vor Reifbildung zu schützen.

Die untere Grenze der spektralen Empfindlichkeit eines Si(Li)-Detektors hängt im wesentlichen von der Absorption im Berylliumfenster ab (deswegen verwendet man dafür ein Material mit niedriger Kernladungszahl  $z = 4$ ), welches die Photonen zunächst durchqueren müssen, bevor die zum Detektor gelangen können. Weitere Abhängigkeiten der unteren Grenze der spektralen Empfindlichkeit sind die sogenannte tote Zone sowie die Goldkontaktierung der  $p$ -Schicht, wobei man unter der toten Zone die  $p$ -dotierte Raumladungsschicht versteht, in der keine Ladungsträgerpaare getrennt werden können, die aber von den Röntgenquanten durchdrungen werden muss, um in die Sperrschicht zu gelangen. Üblicherweise beträgt die Dicke der Totschicht  $0,3 \mu\text{m}$  und die der Goldschicht  $0,02 \mu\text{m}$ .

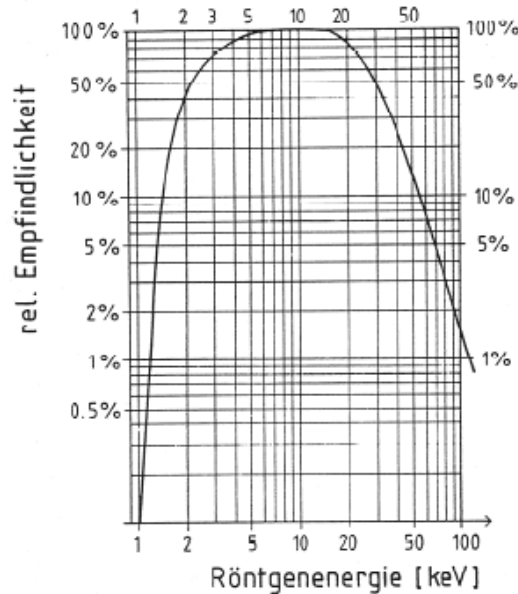


Abbildung 6: Spektrale Empfindlichkeit des Detektors

Abb. 6 zeigt die spektrale Empfindlichkeit, welche bei niedrigen Energien durch Tot- und Goldschicht und bei hohen Energien wegen der endlichen Länge der lithiumgedrifteten Zone abnimmt.

### 3.3 Durchführung

- Zunächst eicht man die Apparatur anhand der  $\text{Cu}K_\alpha$ ,  $\text{Cu}K_\beta$  und  $\text{Zr}K_\alpha$  Linie
- Dann misst man die K-Absorptionskanten einiger Elemente
- Daraufolgend werden die L-Absorptionskanten bestimmter Elemente vermessen
- Messung der K-Fluoreszenzspektren einiger Elemente inclusive Unterscheidung der  $K_{\alpha_1}$ - und  $K_{\alpha_2}$ -Linien.
- Letztlich werden Ausdrücke des  $U-L$ -Absorbtionsspektrums und des  $Sm$ -Fluoreszenzspektrums angefertigt.

## 4 Auswertung

Um den einzelnen Kanälen des Vielkanalanalysators die entsprechenden Energiewerte zuzuordnen zu können, muss zu Beginn einer Messung ein Eichspektrum aufgenommen werden. Dabei werden die  $Cu K_{\alpha}$ - ( $8,040 keV$ ),  $Cu K_{\beta}$ - ( $8,904 keV$ ) und die  $Zr K_{\alpha}$ -Emissionslinie ( $15,730 keV$ ) verwendet. Um optimale Ergebnisse erzielen zu können werden insgesamt 2 Eichspektren aufgenommen, wobei das erste Eichspektrum bis Energiewerte von  $20 keV$  reicht und das zweite Eichspektrum den Energiebereich von  $0 keV$  bis  $50 keV$  abdeckt.

Bevor die benötigten Energiewerte berechnet werden können, müssen zunächst die entsprechenden Eichgeraden errechnet werden.

### 4.1 Eichmessung

Mittels linearer Regression lassen sich die gemessenen Kanäle den richtigen Energiewerten über die Eichgerade zuordnen. Bei den linearen Regressionen werden die gemessenen Kanalnummern gegen die entsprechenden Emissionslinien (siehe Tabelle 1 und 2) aufgetragen. Der Verlauf der entsprechenden Regressionsgeraden wird in der Abbildung 7 bzw. 8 veranschaulicht.

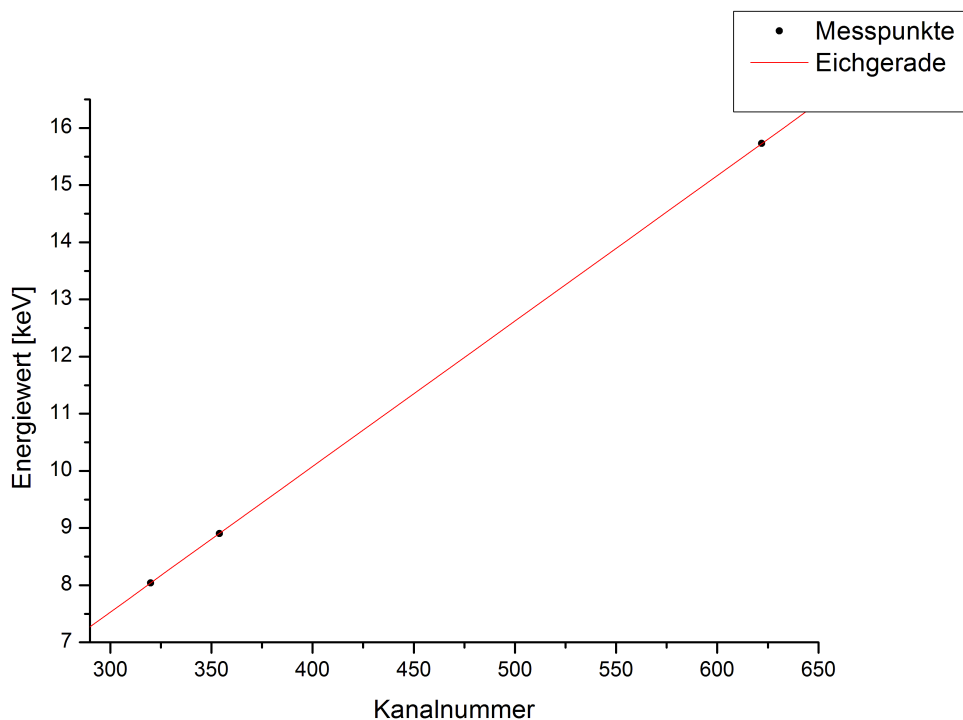


Abbildung 7: Verlauf der Eichgeraden für Energien bis  $20 keV$

Die Eichgerade hat dabei die folgende Gestalt:

$$E = (254,700 \pm 0,056) \cdot 10^{-4} \frac{keV}{Kanal} \cdot K - (11,002 \pm 0,254) \cdot 10^{-2} keV \quad (4.1)$$

Emmissionslinie	$E [keV]$	Kanal
Kupfer $K_\alpha$	8,040	320
Kupfer $K_\beta$	8,904	354
Zirconium $K_\alpha$	15,730	622

Tabelle 1: Daten zur Eichmessung bis Energien von 20 keV

Emmissionslinie	$E [keV]$	Kanal
Kupfer $K_\alpha$	8,040	141
Kupfer $K_\beta$	8,904	154
Zirconium $K_\alpha$	15,730	273

Tabelle 2: Daten zur Eichmessung für den Energiebereich von 0 keV bis 50 keV

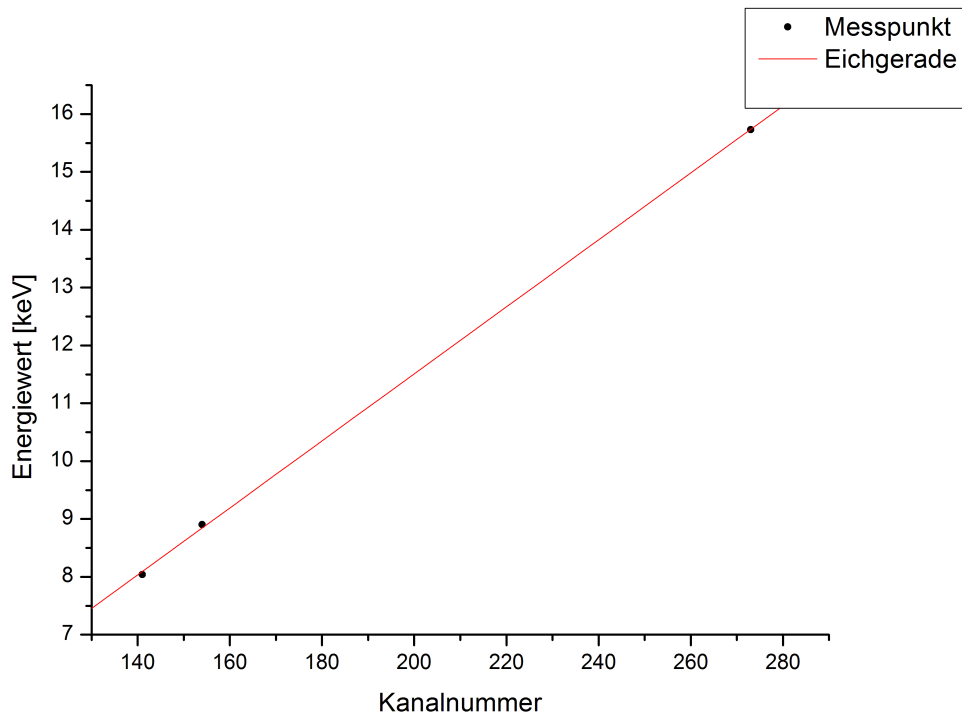


Abbildung 8: Verlauf der Eichgeraden für den Energiebereich von 0 keV bis 50 keV

Für diesen Energiebereich hat die Eichgerade die Form:

$$E = (579,000 \pm 7,679) \cdot 10^{-4} \frac{keV}{Kanal} \cdot K - (7,136 \pm 15,238) \cdot 10^{-2} keV \quad (4.2)$$

## 4.2 Bestimmung des Auflösungsvermögens des Detektors

Um über die Exaktheit der im folgenden präsentierten Messwerte Aussagen treffen zu können, soll zunächst das Auflösungsvermögen des Detektors berechnet werden. Dieses lässt sich durch die Halbwertsbreite einer Emmissionslinie abschätzen, wobei dies entweder für ideale Detektoren über (3.2) geschehen kann, oder für reale Detektoren aus den aufgenommenen Messwerten. Hier soll als Beispiel die  $Cu K_\alpha$ -Linie des Eichspektrums dienen, bei der die Halbwertsbreite für ideale Detektoren zu

$$\Delta E_{\frac{1}{2}, \text{ideal}} = 0,144 \text{ keV} \quad (4.3)$$

bestimmt werden kann, während sich die entsprechende Halbwertsbreite für einen realen Detektor in diesem Fall zu

$$\Delta E_{\frac{1}{2}, \text{real}} = 0,272 \text{ keV} \quad (4.4)$$

abschätzen lässt. Somit besteht eine Abweichung von 88,4 % zwischen dem idealen und dem realen Detektor.

Zur Bestimmung dieses Wertes liest man mittels des Cursors die Anzahl der gezählten Ereignisse auf dem Maximum des Peaks ab, und sucht mit Hilfe des Cursors links und rechts neben dem Maximum den Kanal an dem die Anzahl der Ereignisse genau die Hälfte des Maximumwertes annimmt. Da es sich bei dem Merkmal „Kanal“ um einen diskreten Wert handelt ist es sehr unwahrscheinlich, dass die gesuchte Anzahl an Ereignissen einen eigenen Kanal aufweist. Um dieses Problem zu lösen können die beiden Kanäle ausgelesen werden, deren Ereigniszahl am nächsten zu dem gesuchten Halbwert liegt, so dass per linearer Interpolation die entsprechende Stelle bestimmt werden kann.

Sobald die entsprechenden Positionen gefunden sind, lassen diese sich über die Eichgerade (4.1) in die entsprechenden Energiewerte umrechnen. Nun muss nur noch die Differenz beider Werte berechnet werden um die gesuchte Halbwertsbreite zu bestimmen. Die bei dieser Berechnung verwendeten Wertepaare sind in Tabelle 3 aufgeführt.

Kanal	Counts
311	448
312	530
320	974
326	520
327	451

Tabelle 3: Messwerte zur Bestimmung des Auflösungsvermögens des verwendeten Detektors

### 4.3 K-Absorptionskanten

Mit Hilfe der Gleichung (2.23) lassen sich aus dem Absorptionsspektren einzelner Elemente die Konstanten der vollständigen Absorption

$$\sigma_{1,0} = z - \underbrace{\sqrt{\frac{E_{K, abs}}{R_\infty} - \frac{\alpha^2 z^4}{4}}}_{z'} \quad (4.5)$$

berechnen, wobei man  $s_{1,0} = 0$  annehmen soll. Die Messwerte (Mittelwert der Kanäle), die zu den Absorptionskanten der betrachteten Elementen gehören, werden in Tabelle 4 ebenso wie die zugehörigen Energien, die mit (4.5) berechneten Absorptionskonstanten und deren Fehler aufgeführt. Dabei wurden die Energiewerte der Absorptionslinien der Elemente bis  $Z = 41$  mittels (4.1) berechnet, während man ab  $Z = 42$  Gleichung (4.2) verwenden muss.

z	Element	Kanal	$E$ [keV]	$\sigma_{1,0}$	$\sigma_{1,0} \text{ Theorie}$
22	Titan	200,5	$4,997 \pm 0,003$	$2,92 \pm 0,02$	2,98
23	Vanadium	225,0	$5,621 \pm 0,003$	$2,77 \pm 0,02$	3,06
26	Eisen	285,5	$7,162 \pm 0,003$	$3,19 \pm 0,02$	3,27
30	Zink	390,5	$9,836 \pm 0,003$	$3,31 \pm 0,02$	3,54
31	Gallium	410,0	$10,333 \pm 0,003$	$3,67 \pm 0,02$	3,59
32	Germanium	441,0	$11,122 \pm 0,004$	$3,65 \pm 0,02$	3,66
35	Brom	533,5	$13,478 \pm 0,004$	$3,84 \pm 0,03$	3,84
37	Rubidium	603,0	$15,248 \pm 0,004$	$3,90 \pm 0,03$	3,95
38	Strontium	639,0	$16,165 \pm 0,004$	$3,94 \pm 0,03$	4,00
40	Zirconium	713,0	$18,050 \pm 0,005$	$4,05 \pm 0,03$	4,10
41	Niobium	753,5	$19,082 \pm 0,005$	$4,06 \pm 0,03$	4,15
42	Molybdän	346,0	$19,985 \pm 0,029$	$4,22 \pm 0,17$	4,20
44	Ruthenium	382,5	$22,112 \pm 0,031$	$4,31 \pm 0,18$	4,30
46	Paladium	420,5	$24,327 \pm 0,033$	$4,43 \pm 0,19$	4,39
47	Silber	439,0	$25,406 \pm 0,035$	$4,55 \pm 0,20$	4,44
50	Zinn	501,0	$29,020 \pm 0,039$	$4,73 \pm 0,21$	4,57
52	Telur	547,5	$31,730 \pm 0,042$	$4,73 \pm 0,22$	4,66
56	Barium	644,5	$37,384 \pm 0,049$	$4,85 \pm 0,25$	4,82
60	Neodym	748,5	$43,446 \pm 0,056$	$5,04 \pm 0,28$	4,98

Tabelle 4: Messwerte zur Bestimmung der K-Absorptionskanten

Die Fehler der Energiewerte werden dabei über

$$\Delta E = \sqrt{(K \cdot \Delta a)^2 + (\Delta E_0)^2} \quad (4.6)$$

ermittelt, wobei  $\Delta a$  und  $\Delta E_0$  die Fehler der Steigung und des Energiewert-Achsenabschnittes der Eichgeraden (4.1) und (4.2) sind.

Des Weiteren können die Fehler der Absorptionskonstanten  $\sigma_{1,0}$  über

$$\Delta\sigma_{1,0} = \sqrt{\frac{\Delta E^2}{4z' R_\infty}} \quad (4.7)$$

berechnet werden. Wenn man nun die entsprechenden Werte der Kernladungszahlen  $Z$  und der Abschirmungszahlen  $\sigma_{1,0}$  gegeneinander aufträgt (siehe Abbildung 9), ist zwischen den beiden Größen ein eindeutiger linearer Zusammenhang zu erkennen. Der Regressionsverlauf ist dabei

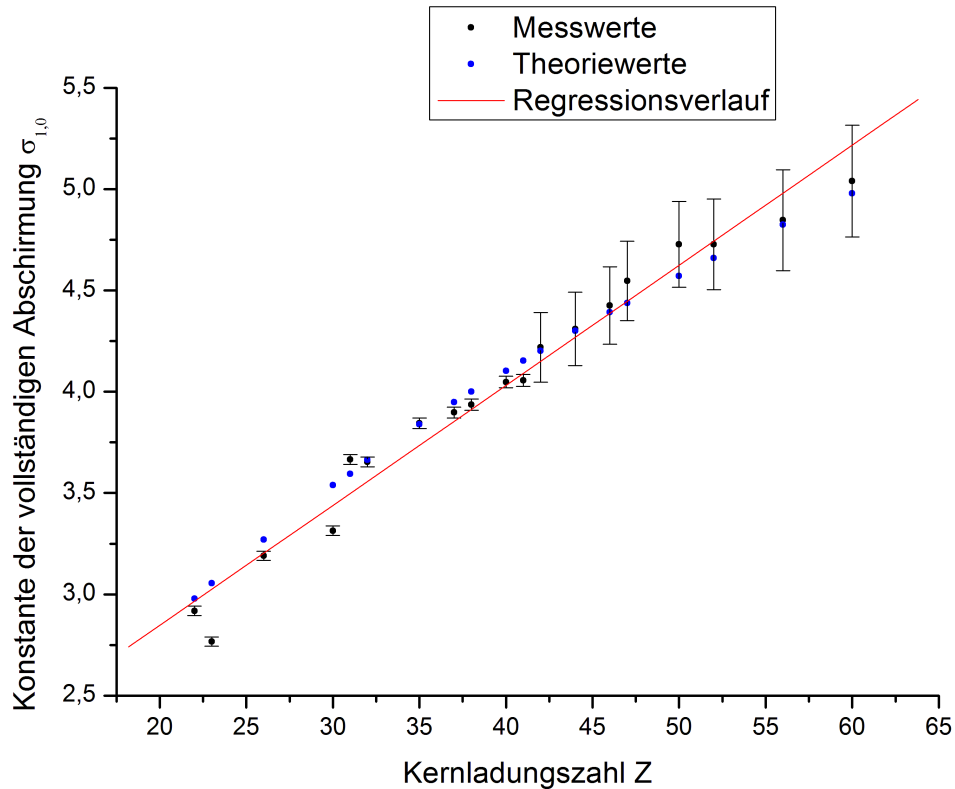


Abbildung 9: Zusammenhang zwischen der Kernladungszahl  $Z$  und der vollständigen Abschirmungskonstante  $\sigma_{10}$

durch die Geradengleichung

$$\sigma_{1,0} = (0,059 \pm 0,002) \cdot Z + (1,661 \pm 0,101)$$

gegeben.

#### 4.4 L-Absorptionskanten und Fluoreszenzspektrum

Sowohl mittels der  $L$ -Absorptionskanten als auch mit Hilfe des Fluoreszenzspektrums lässt sich die Abschirmungskonstante  $s_{2,1}$  berechnen.

Dies kann für die  $L$ -Absorptionskanten (siehe Abbildung 3) mit Hilfe des Kantenabstandes  $\Delta = E_{L_{II}} - E_{L_{III}}$ , geschehen, indem man die Gleichung

$$s_{2,1} = z - \sqrt{\left(\frac{4}{\alpha} \sqrt{\frac{\Delta}{R_\infty}} - \frac{5 \cdot \Delta}{R_\infty}\right) \left(1 + \frac{19}{32} \alpha^2 \frac{\Delta}{R_\infty}\right)}, \quad (4.8)$$

bei der es sich lediglich um eine Näherung handelt, verwendet. Die Messwerte, die dabei bei der Berechnung von  $s_{2,1}$  verwendet wurden, sind ebenso wie die berechneten Werte der Abschirmkonstante in Tabelle 5 aufgeführt und anschließend in Abbildung 10 veranschaulicht.

$z$		Kanal	$E_{L_{III}}$ [keV]	Kanal	$E_{L_{II}}$ [keV]	$E_{L_{II}} - E_{L_{III}}$	$s_{2,1}$	$s_{2,1}$ Theorie
73	Ta	398,0	$10,027 \pm 0,003$	439,0	$11,071 \pm 0,004$	$1,044 \pm 0,005$	$6,46 \pm 0,58$	3,59
78	Pt	459,5	$11,593 \pm 0,004$	639,0	$13,325 \pm 0,004$	$1,732 \pm 0,006$	$3,38 \pm 0,47$	3,60
79	Au	473,0	$11,937 \pm 0,004$	544,5	$13,758 \pm 0,004$	$1,821 \pm 0,005$	$3,54 \pm 0,43$	3,60
80	Hg	486,5	$12,281 \pm 0,004$	566,5	$14,319 \pm 0,004$	$2,038 \pm 0,006$	$2,63 \pm 0,41$	3,60
83	Bi	531,5	$13,427 \pm 0,004$	624,5	$15,796 \pm 0,004$	$2,369 \pm 0,006$	$3,03 \pm 0,39$	3,52
92	U	681,5	$17,248 \pm 0,005$	826,0	$20,928 \pm 0,005$	$3,680 \pm 0,007$	$4,10 \pm 0,33$	3,60

Tabelle 5: Messwerte zur Bestimmung der inneren Abschirmkonstanten  $s_{21}$

Die Fehler der Kantenabstände lassen sich einfach über die Fehlerfortpflanzung nach Gauß gemäß

$$\Delta(E_{L_{II}} - E_{L_{III}}) = \sqrt{(\Delta E_{L_{III}})^2 + (\Delta E_{L_{II}})^2} \quad (4.9)$$

berechnen, so dass man die Fehler der Abschirmkonstanten über

$$\Delta s_{21} = \frac{1}{2(z - s_{21})} \cdot \left[ \frac{2}{\alpha \sqrt{\Delta} R_\infty} - \frac{5}{R_\infty} - \frac{95 \Delta \alpha^2}{16 R_\infty^2} + \frac{57 \alpha \Delta^{\frac{1}{2}}}{16 R_\infty^{\frac{3}{2}}} \right] \quad (4.10)$$

bestimmen kann.

Wie schon erwähnt lässt sich die Abschirmkonstante  $s_{21}$  auch über das Fluoreszenzspektrum bestimmen, wenn die  $K_{\alpha_1}$ - und die  $K_{\alpha_2}$ -Linie bzw. deren Lage im Energiespektrum bekannt sind. Aus diesen Werten (siehe Tabelle 6) lassen sich über (4.8) die inneren Abschirmkonstanten  $s_{21}$  berechnen, wobei

$$\Delta = E_{K_{\alpha_1}} - E_{K_{\alpha_2}}$$

gilt. Die entsprechenden Fehler lassen sich über (4.10) berechnen, da die Energiewerte bei dieser Messung sehr nah beieinander liegen, ergeben sich sehr kleine Energiedifferenzen, was bei der quadratischen Addition der Einzelfehler (4.9) für verhältnismäßig große Fehler der Energiedifferenz (und somit auch für große Fehler für  $s_{21}$ ) sorgt. Deswegen wurde an dieser Stelle der Fehler für die Energiedifferenzen auf ca. 5 % abgeschätzt, was in etwa den Fehlern der entsprechenden Energiewerte entspricht.

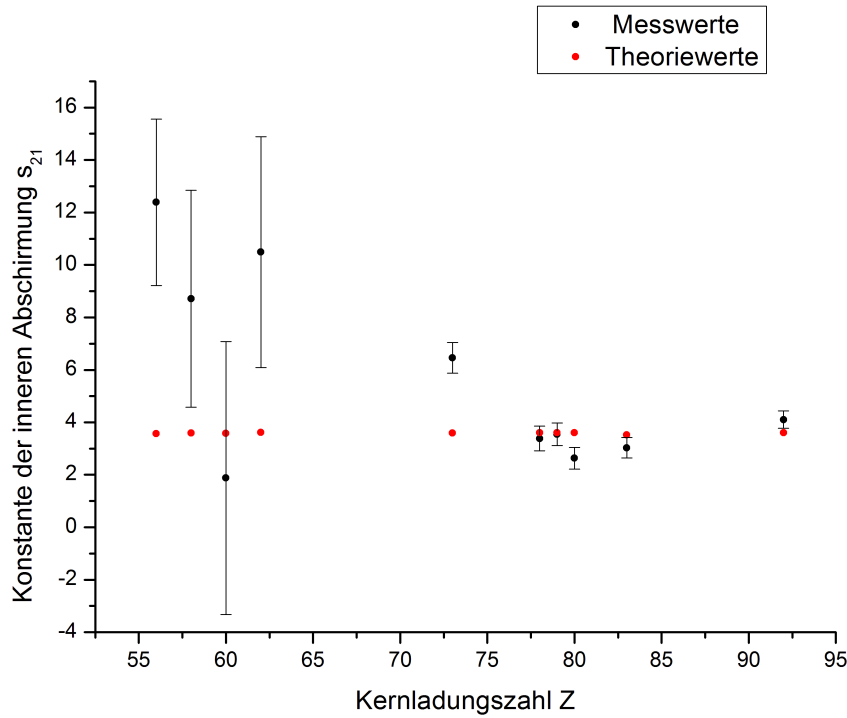


Abbildung 10: Zusammenhang zwischen der Kernladungszahl  $Z$  und der Konstanten der inneren Abschirmung  $s_{21}$

Die Messwerte weichen bis auf einige Ausnahmen zwar stark von den Theoriewerten ab, was bei dieser sehr empfindlichen Messung (gerade für die Werte der Fluoreszenzspektren) durch ein zu geringe Auflösungsvermögen des Detektors zu erklären ist, beweisen jedoch die erwartete Annahme, dass zwischen  $s_{21}$  und  $z$  kein erkennbarer Zusammenhang besteht.

$Z$		Kanal	$E [keV]$	Kanal	$E [keV]$	$E_{K_{\alpha_1}} - E_{K_{\alpha_2}}$	$s_{1,0}$	$s_{1,0,Theo.}$
56	Ba	552	$31,992 \pm 0,042$	555	$32,167 \pm 0,042$	$0,175 \pm 0,009$	$12,39 \pm 3,17$	3,57
58	Ce	593	$34,382 \pm 0,045$	598	$34,674 \pm 0,045$	$0,291 \pm 0,015$	$8,71 \pm 4,14$	3,59
60	Nd	633	$36,714 \pm 0,048$	643	$37,297 \pm 0,048$	$0,583 \pm 0,029$	$1,88 \pm 5,20$	3,58
62	Sm	686	$39,803 \pm 0,051$	692	$40,153 \pm 0,052$	$0,350 \pm 0,018$	$10,49 \pm 4,40$	3,61

Tabelle 6: Messwerte der  $K$ -Fluoreszenzspektren

Mit den Konstanten der inneren Abschirmung  $s_{21}$  aus den Messreihen der  $L$ -Absorbtionskanten (siehe Tabelle 5), lassen sich auch die Konstanten der vollständigen Abschirmung (siehe Tabelle 7) berechnen, wobei für  $j = \frac{3}{2}$

$$\sigma_{2,1} = z - \underbrace{\sqrt{\frac{4 \cdot E_{2,\frac{3}{2}}}{R_\infty} - \alpha^2 \frac{(z - s_{21})^4}{16}}}_{z_{eff}} \quad (4.11)$$

gilt. Entsprechend würde für  $j = \frac{1}{2}$

$$\sigma_{2,1} = z - \underbrace{\sqrt{\frac{4 \cdot E_{2,\frac{1}{2}}}{R_\infty} - \alpha^2 \frac{5 \cdot (z - s_{21})^4}{16}}}_{z_{eff}} \quad (4.12)$$

gelten. Hier wird sich allerdings auf die  $L_{III}$ -Kante beschränkt. Die Fehler können schließlich über

$$\Delta\sigma_{21} = \sqrt{\frac{2}{z_{eff} R_\infty} \cdot (\Delta E_{2,j})^2 + \frac{\alpha^2 \cdot (z_{eff})^2}{8} (\Delta s_{21})^2} \quad (4.13)$$

berechnet werden. Der Wert  $E_{2,j}$  benennt dabei, die Energie der Röntgenquanten die von den Absorberelektronen der Quantenzahlen  $n = 2$  und  $j$  absorbiert werden (und auch die Lage der entsprechenden  $L$ -Kante im Energiespektrum). Die entsprechenden Werte sind in der Tabellen 7 aufgeführt und in Abbildung 11 veranschaulicht.

$z$	Element	Kanal	$E$ [keV]	$s_{2,1}$	$\sigma_{21,j=\frac{3}{2}}$	$\sigma_{Theorie}$
73	Tantal	398	$10,027 \pm 0,003$	$6,46 \pm 0,03$	$19,31 \pm 0,08$	19,85
78	Platin	459,5	$11,593 \pm 0,004$	$3,38 \pm 0,01$	$20,51 \pm 0,07$	20,51
79	Gold	473	$11,937 \pm 0,004$	$3,54 \pm 0,01$	$20,68 \pm 0,07$	20,70
80	Quecksilber	486,5	$12,281 \pm 0,004$	$2,63 \pm 0,01$	$20,91 \pm 0,06$	20,84
83	Bismut	531,5	$13,427 \pm 0,004$	$3,03 \pm 0,01$	$21,26 \pm 0,06$	21,25
92	Uran	681,5	$17,248 \pm 0,005$	$4,10 \pm 0,01$	$22,20 \pm 0,06$	22,40

Tabelle 7:  $L_{III}$ -Absorptionskanten einiger Elemente

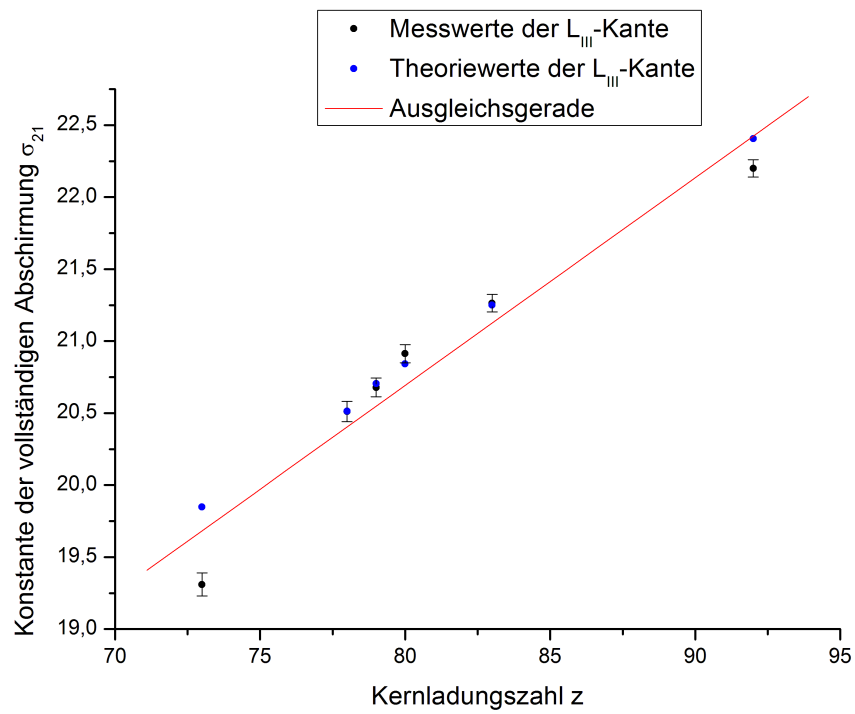


Abbildung 11: Zusammenhang der Kernladungszahl  $Z$  und der Konstanten der vollständigen Abschirmung  $\sigma_{21}$

Durch die Messwerte der  $L_{III}$ -Kanten lässt sich ein linearer Zusammenhang zwischen der Konstante der vollständigen Abschirmung  $\sigma_{21}$  und der Kernladungszahl  $Z$  erkennen, wobei bei den Elementen Tantal und Uran Abweichungen außerhalb der Fehlergrenzen aufgetreten sind.

---

## 5 Diskussion

Die signifikantesten Fehlerquellen dieses Versuches sind in der Tatsache zu sehen, dass der verwendete Detektor nicht den idealen Ansprüchen genügt, über ein Rauschen verfügt und vor Versuchsbeginn nicht ausreichend lang gekühlt wurde. Ebenso ist zu beachten, dass der Detektor über eine von 0 verschiedene Totzeit verfügt. All dies könnte erklären, warum gerade die Messwerte des Fluoreszenzspektrums, aus welchen die Konstanten der inneren Abschirmung  $s_{21}$  berechnet wurden, zu solch großen Fehlern geführt haben (siehe Abb.10). Was nicht weiter verwunderlich ist, da die Abstände der Literaturwerte der  $K_{\alpha_1}$ - und der  $K_{\alpha_2}$ -Linie in den Energiespektren unter  $0,4 \text{ keV}$  liegen, was nahe an den Grenzen des Auflösungsvermögens des verwendeten Detektors ist (siehe Abschnitt 4.2).

Des Weiteren lässt sich das Abweichen der mit (4.8) berechneten Werte (aus dem  $L$ -Absorptionsspektrum einiger Elemente) für  $s_{21}$  relativ zu den Theoriewerten dadurch erklären, dass es sich bei der Gleichung (4.8) nur um eine Näherung handelt.

Weitere Fehlerquellen stammen aus den theoretischen Ansätzen zur Lösung der entsprechenden Schrödingergleichung. So wird die Wechselwirkung der als starr angenommenen Elektronen untereinander vernachlässigt. Ebenso ist eine Quelle für Ungenauigkeiten in den störungstheoretischen Ansätzen zu sehen, bei denen nur bis zur linearen Ordnung  $\lambda H_S$  entwickelt wurde. Über das Emissionsspektrum des Samariums (siehe Anhang) sollte noch gesagt werden, dass neben den  $K_{\alpha}$ -Linien der Kupferelektrode auch noch ein mit „\*“ bezeichneter Peak zu finden ist, der anscheinend von einer Schraube stammt, welche im Anschluss an das Experiment in der Streukammer gefunden wurde.

## 6 Literaturverzeichnis

- [1] Siegfried Finke, Versuchsanleitungen zum Fortgeschrittenen-Praktikum
- [2] [http://www.kayelaby.npl.co.uk/atomic\\_and\\_nuclear\\_physics/4\\_2/4\\_2\\_1.html](http://www.kayelaby.npl.co.uk/atomic_and_nuclear_physics/4_2/4_2_1.html)

## 7 Anhang

- [1] Ausdruck des Absorptionsspektrums von Uran
- [2] Ausdruck des Emissionsspektrums von Samarium

