

**Erweiterte Möglichkeiten für das Experimentieren
im Physikunterricht durch den Einsatz eines neu entwickelten
energieauflösenden Detektors für Röntgenstrahlen**

Inauguraldissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades
der Erziehungswissenschaftlichen Fakultät
der Universität zu Köln

vorgelegt von
Artem Ivanov

aus
Irkutsk

März 2005

Von der Erziehungswissenschaftlichen Fakultät der Universität zu Köln angenommene Dissertation.

Erster Gutachter: Herr Prof. Dr. Rolf Pelster

Zweiter Gutachter: Herr PD Dr. Andreas Heithausen

Dritter Gutachter: Herr Univ.-Prof. Dr. Mohsen Abd-Elmeguid

Die mündliche Prüfung fand am 09.12.2005 statt.

О сколько нам открытий чудных
Готовят просвещенья дух
И опыт, сын ошибок трудных,
И гений, парадоксов друг,
И случай, бог изобретатель.

А. С. Пушкин, 1829

*Wie viele wundersame Entdeckungen
beschert uns der Geist der Aufklärung,
sowie die Erfahrung als Ergebnis mühevoller Fehler,
auch das Genie als Freund der Paradoxa,
und schließlich der Zufall, Gottes Erfindung.*

A. S. Puschkin, 1829

deutsche Wiedergabe Prof. Dr. H. Conrad, 2005

INHALTSVERZEICHNIS

1. Einleitung	11
2. Einführung	15
2.1 Die Entdeckung der Röntgenstrahlen	15
2.2 Nobelpreise für Arbeiten an Röntgenstrahlen	16
2.3 Anwendungen	17
3. Physikalische Grundlagen	19
3.1 Erzeugung von Röntgenstrahlen	19
3.1.1 Quellen für Röntgenstrahlen	19
3.1.2 Bremsstrahlungskontinuum	21
3.1.3 Charakteristisches Spektrum	25
3.1.4 Anregung des Röntgenspektrums	30
3.2 Absorption von Röntgenstrahlen	31
3.2.1 Wechselwirkung der Röntgenstrahlen mit Materie	31
3.2.2 Absorptionskanten und Absorptionskoeffizienten	33
3.3 Streuung von Röntgenstrahlen	35
3.3.1 Allgemeine Klassifikation	35
3.3.2 Elastische Streuung	35
3.3.3 Unelastische (Compton-) Streuung	37
3.3.4 Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen	41
3.4 Detektoren für Röntgenstrahlen	43
3.4.1 Fotografische Emulsionen	43
3.4.2 Ionisationskammer	43
3.4.3 Gas-Proportionalzähler und Geiger-Müller-Zähler	44
3.4.4 Szintillationszähler	46

3.4.5	Halbleiterdetektoren	47
3.4.6	Andere Detektoren	49
3.5	Möglichkeiten der Röntgenspektromaufnahme	51
4.	Röntgenstrahlen im Physikunterricht	55
4.1	Richtlinien und Lehrpläne	55
4.1.1	Allgemeine Ziele des Physikunterrichts der Oberstufe	55
4.1.2	Inhalte des Physikunterrichts	57
4.2	Stellung des Experimentes im Physikunterricht	58
4.3	Moderne Ansätze für den Unterricht	62
4.4	Experimente in Physikschulbüchern	70
4.5	Experimentiermöglichkeiten mit den existierenden Schulröntgengeräten	78
4.5.1	Experimentieranleitungen der Hersteller	78
4.5.2	Experimente mit Röntgenstrahlen in Büchern zur Experimen- tellen Physik und Fachzeitschriften	86
4.5.3	Engpässe bei der praktischen Umsetzung	89
4.6	Neue Möglichkeiten	93
5.	Der neue Halbleiterdetektor für Schulen	99
5.1	Das Problem und seine Lösung	99
5.2	Technische Daten	101
5.3	Funktionsprinzip	103
5.4	Pile-Up Rejection	106
5.5	Spektrumartefakte	107
5.6	Energieauflösung	108
5.7	Abhängigkeit von der Zählrate	109
5.8	Fluoreszenz des Gehäusematerials	112
5.9	Ansprechwahrscheinlichkeit	113
5.10	Langzeitstabilität	114
5.11	Linearität	115
6.	Software	119
6.1	Hardware Voraussetzungen	120
6.2	Grundsätzliche Bedienung	120

6.3	Aufnahme von Röntgenspektren	127
6.4	Auswertung von Messungen	129
6.4.1	Anpassung mit Gauss-Kurven (<i>Gauss-Fit</i>)	129
6.4.2	Anpassung mit den Elementenspektren (<i>Element-Fit</i>)	132
6.4.3	Spektrum-Rechner	134
6.4.4	Integralberechnung	135
6.4.5	Baseline-Korrektur	135
6.4.6	Abstandsmessung	137
6.4.7	Vergleich mit den Tabellenwerten	137
6.4.8	Kurvenglättung	141
6.4.9	Erzeugung der Ansprechwahrscheinlichkeitskurve des Detektors	141
6.4.10	Eigenheiten bei der Auswertung der importierten Dateien der Software <i>Röntgengerät</i>	142
6.5	Vorbereitung der Vorlagen — keine Zeit im Unterricht verlieren . . .	143
7.	Experimente mit dem Halbleiterdetektor	145
7.1	Zielsetzung des Kapitels	145
7.2	Bemerkungen zur energieauflösenden Spektromaufnahme	146
7.3	Experimente zur Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen	149
7.3.1	Untersuchung der Bragg-Reflexion	149
7.3.2	Kristallstruktur-Analyse mit Hilfe eines energieauflösenden De- tektors	156
7.4	Experimente zur Einführung in die Quantenphysik	166
7.4.1	Aufnahme eines Röntgenspektrums: energieaufgelöst vs. wel- lenlängenaufgelöst	166
7.4.2	Untersuchung des Energiespektrums einer Röntgenröhre in Abhängigkeit von Hochspannung, Emissionsstrom und An- odenmaterial	175
7.4.3	Untersuchung der Energieverschiebung der unelastisch gestreu- ten Photonen in Abhängigkeit vom Streuwinkel und vom Ma- terial des Streukörpers (Compton-Effekt)	186
7.5	Experimente zur Physik der Atomhülle	196

7.5.1	Untersuchung der charakteristischen Spektren in Abhängigkeit von der Ordnungszahl des Elements (Moseley-Gesetz) . . .	196
7.5.2	Untersuchung der chemischen Zusammensetzung mit Hilfe der Röntgenfluoreszenz-Spektren	206
8.	Demonstrationsexperimente für den Unterricht	213
8.1	Zielsetzung des Kapitels	213
8.2	Demonstrationsexperimente zur Einführung in die Quantenphysik . . .	215
8.2.1	Aufnahme des Spektrums einer Röntgenröhre mit dem Halbleiterdetektor	215
8.2.2	Abhängigkeit des Spektrums einer Röntgenröhre von Anodenspannung und Emissionsstrom	223
8.2.3	Quantitative Demonstration des Compton-Effekts	231
8.3	Demonstrationsexperimente zur Atomphysik	241
8.3.1	Überprüfung des Moseley-Gesetzes	241
8.3.2	Analyse der chemischen Zusammensetzung von Alltagsobjekten	252
9.	Ausblick	261
9.1	Anregung der Röntgenfluoreszenz mit Radioisotopen	261
9.1.1	Röntgenspektrum eines ^{241}Am -Präparates	262
9.1.2	Benutzung der Radioisotope zur Anregung der charakteristischen Spektren	263
9.2	Fachübergreifende Experimente	264
9.2.1	Gesteinsanalyse	265
9.2.2	Wichtige chemische Elemente in Lebensmitteln	266
9.2.3	Experimentelles zum Thema „Gesundheit“	267
10.	Zusammenfassung	269
	Anhang	271
A.	Spektren-Datenbank	273

B. Strahlenschutz	277
B.1 Begriffsbestimmungen	277
B.2 Natürliche und Zivilisatorische Strahlenexposition des Menschen . . .	280
B.3 Schutzvorschriften	281
B.3.1 Quellen der Röntgenstrahlung	282
B.3.2 Verantwortlichkeiten	282
B.3.3 Umgang mit Röntgenquellen in der Schule	283

1. EINLEITUNG

Ziele dieser Arbeit

Röntgenstrahlen spielen eine wichtige Rolle im heutigen Leben, auch im Physikunterricht ist ihnen eine hohe Stellung gegeben. Besonders effektiv können Röntgenstrahlen in die Erläuterung der Quanten- und Atomphysik einbezogen werden.

Im Zuge seiner Arbeit bei der Lehrmittelfirma Leybold Didactic ist es dem Autor aufgefallen, dass einige für das Unterrichten der Quanten- und Atomphysik sehr wichtige Experimente nicht oder nicht überzeugend in der Schule durchgeführt werden können. Zum großem Teil sind die für diese Experimente nötigen Geräte auf dem Lehrmittelmarkt vorhanden, es fehlt nur die entscheidende Komponente — die Möglichkeit, Röntgenspektren ohne Kristalldispersion aufzunehmen.

Es wurde das Ziel gesetzt, einen *energieauflösenden Detektor* für Röntgenstrahlung zu entwickeln, der

- die gewünschten fehlenden Experimente durchführen lässt,
- zusammen mit den existierenden Schulröntgengeräten benutzt werden kann,
- einfach in der Bedienung und Instandhaltung ist und
- zu einem für die Schule erschwinglichen Preis erworben werden kann.

Da ein solcher Detektor als Messinstrument zu verstehen ist, muss auch eine Möglichkeit gegeben werden, die damit gewonnenen Daten aufzunehmen, darzustellen und auszuwerten — es muss eine *Software* entwickelt werden, die den praktischen Einsatz des Detektors in der Schule ermöglicht. Die Entwicklung der Software wurde damit auch als Ziel der Arbeit aufgenommen.

Um einen effektiven Einsatz dieses neues Mittels im Unterricht zu ermöglichen, sollte ein ausgearbeitetes System von Experimentieranleitungen vorhanden sein, das

nicht nur die Möglichkeiten des Experimentierens darstellt, sondern auch abgeschlossene *Beschreibungen zu den Experimenten* anbietet. Es wurde beschlossen, die Experimentieranleitungen sowohl für *Praktikumsexperimente* mit ausgedehnten quantitativen Untersuchungen als auch für kurze anschauliche *Demonstrationsexperimente* auszuarbeiten. Der Akzent wurde dabei darauf gesetzt, dass diese Anleitungen alle nötigen theoretischen Grundlagen und Aufbauhinweise beinhalten und es einem interessierten Lehrer ermöglichen, auch einzelne Experimente wahlweise durchzuführen.

Aufbau der Arbeit

Kapitel 2 gibt eine Einführung zur Historie der Entdeckung und der Erforschung der Röntgenstrahlen. Es sind auch ihre wichtigsten Anwendungen kurz charakterisiert.

In **Kapitel 3** sind die physikalischen Grundlagen dieses Themenbereiches erläutert. Dies umfasst die Möglichkeiten zur Erzeugung und die Eigenschaften der Röntgenstrahlen, ihre Absorption und Streuung beim Durchgang durch Materie. Außerdem werden die Funktionsweise der Detektoren für Röntgenstrahlung und die Varianten der Röntgenspektromaufnahme behandelt.

In **Kapitel 4** wird die Stellung der Röntgenstrahlung im Physikunterricht der gymnasialen Oberstufe analysiert, besondere Aufmerksamkeit dabei ist den experimentellen Möglichkeiten gewidmet. Es werden sowohl die realisierbaren als auch die erwünschten aber bisher nicht in der Schule möglichen Experimente zusammengefasst und der Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen vorgestellt, der die vorhandenen Lücken schließt.

Kapitel 5 ist der Beschreibung des entwickelten energieauflösenden Halbleiterdetektors für Röntgenstrahlen gewidmet. Es sind seine technischen Daten angegeben, das Funktionsprinzip erläutert und die für den Einsatz wichtigen Eigenschaften beschrieben.

In **Kapitel 6** ist die Software *VKA Lab* vorgestellt, die für das Experimentieren mit dem Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen entwickelt wurde. Es werden die grundsätzliche Bedienung, die Aufnahme der Spektren mit dem Detektor und ihre

Auswertung erläutert.

In **Kapitel 7** sind die Anleitungen zu den Praktikum-Experimenten mit dem energieauflösenden Halbleiterdetektor dargestellt, mit dem Ziel die vielfältigen Experimentiermöglichkeiten zu demonstrieren. Die Anleitungen beinhalten die nötigen theoretischen Grundlagen, Aufbau- und Durchführungshinweise sowie Messbeispiele mit Auswertung. Damit können sie direkt zum Experimentieren benutzt werden.

Diese Experimente können sowohl in der Schule als auch im Praktikumsbereich der Hochschule eingesetzt werden.

Kapitel 8 stellt eine Auswahl von Experimenten vor, die zum Einsatz als Demonstrationsexperimente im Unterricht der Quanten- und Atomphysik bestimmt sind. Diese Experimenten sind gegenüber den in Kapitel 7 aufgeführten an eine Durchführungszeit von wenigen Minuten angepasst und so strukturiert, dass sie eine schnelle, eindeutige und gut interpretierbare Demonstration des Effektes erlauben. Die Anleitungen sind detailliert beschrieben und sind mit den gesetzten Lernzielen und didaktischen Kommentaren versehen.

Der Ausblick (**Kapitel 9**) gibt Anregungen zu weiteren u.a. fachübergreifenden Experimenten und stellt einige experimentelle Ergebnisse dar.

Im **Anhang** sind kurze Beschreibungen der Spektren aus der Spektren-Datenbank gegeben, die der Dissertation beigelegt ist. Außerdem ist eine Zusammenfassung der Begriffsbestimmungen aus dem Strahlenschutz und die für die Schule zutreffenden gesetzlichen Schutzvorschriften aufgeführt.

Bemerkungen

Aus Gründen der Lesbarkeit wurde es auf Redewendungen wie „Schülerinnen und Schüler“ oder „Lehrerinnen und Lehrer“ verzichtet, es wird die allgemein sprachlich gebräuliche maskuline Form benutzt.

2. EINFÜHRUNG

2.1 Die Entdeckung der Röntgenstrahlen

Das Ende des 19. und der Beginn des 20. Jahrhunderts zeichnete sich durch mehrere für die heutige Physik wegweisende Entdeckungen aus, darunter natürlich Einsteins Relativitätstheorie und die Entwicklung der Quantentheorie durch Max Planck, Niels Bohr, Werner Heisenberg und andere. Eine weitere bahnbrechende Entwicklung leitete 1895 Wilhelm Conrad Röntgen mit der Entdeckung der X-Strahlen ein.

Im November 1895 war W.C. Röntgen mit der Untersuchung von Katodenstrahlen beschäftigt. Als Experimentiergeräte nutzte er einen Funkeninduktor mit Unterbrecher, eine Vakuumröhre und einen Leuchtschirm, also Geräte, die es um diese Zeit in jedem Hochschullaboratorium gab.

Am Abend des 8. November 1895 hatte er die Vakuumröhre mit schwarzem Papier umkleidet. Als er im verdunkelten Raum den Funkeninduktor einschaltete, bemerkte er ein Aufleuchten kleiner Kristalle, die in der Nähe lagen. Auch ein Leuchtschirm erstrahlte in grünem Licht. Als der Physiker die Hand zwischen Vakuumröhre und Bildschirm hielt, erblickte er das Knochengestüst seiner Hand. Röntgen vermutete eine neue Art von Strahlung.

Die nächsten sieben Wochen arbeitete er einsam in seinem Laboratorium an der Untersuchung der neuen Strahlen und ihrer Eigenschaften. Er bemerkte, dass die Strahlen viele undurchsichtige Objekte durchdringen, dass man mit ihnen fluoreszierende Substanzen zum Leuchten bringen kann, die Photoplatte schwärzen und die Luft elektrisch leitend machen kann.

Am 28. Dezember 1895 legte W.C. Röntgen die erste Mitteilung über seine Entdeckung unter dem Titel „Eine neue Art von Strahlen“ der Würzburger Physikalisch-Medizinischen Gesellschaft vor [56]. Sie wurde sofort gedruckt. Im März 1896 erschien eine zweite und im März 1897 eine dritte Mitteilung zu der von ihm entdeckten Strahlung, die er selbst X-Strahlung nannte, da ihr physikalischer Charakter zu-

nächst unklar war.

Es dauerte fast siebzehn Jahre, bis 1912 durch die Interferenzversuche von M. von Laue, W. Friedrich und P. Knipping die elektromagnetische Wellennatur dieser Strahlen endgültig bestätigt war.

Der Name „Röntgenstrahlung“ geht auf einen Vorschlag aus dem Jahre 1896 zurück: Am 23. Januar 1896 sprach Röntgen vor der Physikalisch-Medizinischen Gesellschaft in Würzburg über seine Entdeckung. Am Schluss der Veranstaltung schlug der Anatom Rudolf von Kölliker unter dem Beifall der Versammelten vor, statt von X-Strahlen von „Röntgenschen Strahlen“ zu sprechen. Die Bezeichnung „Röntgenstrahlen“ setzte sich allerdings nur im deutschen und im russischen Sprachraum durch.

2.2 Nobelpreise für Arbeiten an Röntgenstrahlen

Für die Untersuchung der von ihm entdeckten Strahlen hat W.C. Röntgen den ersten Nobelpreis für Physik erhalten. Danach wurden mehrere Nobelpreise für Arbeiten über und mit Röntgenstrahlen vergeben (nach [4], [12], [52] und [65]):

1901 erhielt Wilhelm Conrad Röntgen (1845–1923) den ersten Nobelpreis für Physik als Anerkennung des außerordentlichen Verdienstes, das er sich durch die Entdeckung und die Untersuchung der nach ihm benannten Strahlen erworben hat.

1914 bekam Max von Laue (1879–1960) den Nobelpreis für Physik für seine Theorie der Beugung der Röntgenstrahlen an Kristallen. Die ersten Interferenzaufnahmen (Luediagramme) an Kristallen wurden 1912 von W. Friedrich und F. Knipping nach Anregung von M. v. Laue gemacht.

1915 erhielten William Henry Bragg (1862–1942) und William Lawrence Bragg (1890–1971) den Nobelpreis für Physik für ihre Verdienste um die Erforschung der Kristallstrukturen mittels Röntgenstrahlen.

1917 erhielt Charles Glover Barkla (1877–1944) den Nobelpreis für Physik für seine Entdeckung der charakteristischen Röntgenstrahlung der Elemente.

1924 bekam Karl Manne Siegbahn (1886–1978) den Nobelpreis für Physik für seine röntgenspektroskopischen Entdeckungen und Forschungen.

1927 erhielt Arthur Holly Compton (1892–1962) den Nobelpreis für Physik für die Entdeckung des nach ihm benannten Effektes, den er mit Hilfe von Röntgenstrahlen entdeckt hatte.

1962 erhielten Max Perutz und John C. Kendrew den Nobelpreis für Chemie für die Bestimmung der Struktur des Hämoglobins mit der Röntgenstrukturanalyse.

1962 bekamen Francis Crick, M. Wilkins und James Watson den Nobelpreis für Medizin für die Aufklärung der Doppelhelix-Struktur der DNS, die mit Hilfe der mit röntgenographischen Methoden gewonnenen Daten erfolgte.

1964 bekam Dorothy M. Hodgkin den Nobelpreis für Chemie für die Bestimmung der Strukturen des Penicillins und des Vitamins B_{12} mit der Röntgenstrukturanalyse.

1985 erhielten Herbert Hauptman und Jerome Karle den Nobelpreis für Chemie für Entwicklung der Methoden der Bestimmung der chemischen Strukturen kleiner Moleküle mit Röntgenstrahlen.

1988 bekamen Johann Deisenhofer, Robert Huber und Hartmut Michel den Nobelpreis für Chemie für die Aufklärung der Struktur der Proteine, die für die Photosynthese entscheidend sind, mit der Röntgenstrukturanalyse.

2.3 Anwendungen

Die Röntgenstrahlen haben sehr schnell nach ihrer Entdeckung Anwendung in der Medizin gefunden. Die ersten kommerziellen Röntgengeräte wurden schon einige Monate nach Röntgens Entdeckung in Kliniken eingesetzt, um Fremdkörper im Patienten aufzuspüren und bei der Behandlung von Knochenbrüchen zu helfen. Allerdings waren diese Untersuchungen für die Patienten nicht ungefährlich, weil die nötige Strahlungs-dosis erheblich war.

Heutzutage sind die medizinischen und zahnärztlichen Röntgengeräte hoch entwickelt und können die Röntgenaufnahmen und die Röntgentomographie mit minimaler Strahlenbelastung durchführen.

Die Beugung der Röntgenstrahlen an Kristallen wird in der Strukturanalyse ausgenutzt, die sowohl in der Materialforschung und in der Geologie als auch in Medizin und Chemie angewendet wird.

Mit Hilfe der Röntgenspektralanalyse erfolgt die Bestimmung der chemischen Zusammensetzung der Proben anhand der emittierten charakteristischen Linien. Moderne Forschungsinstrumente erlauben Röntgenaufnahmen mit hoher räumlicher und gleichzeitig spektraler Auflösung, die die Verteilung der chemischen Elemente in der Probe wiedergeben. Kompakte tragbare Analysatoren werden im Produktions- und Umweltmonitoring eingesetzt.

Außerdem findet die Röntgenstrahlung Anwendung bei der Gepäckkontrolle in Flughäfen, als Röntgenlithographie bei der Chip-Herstellung, in der Röntgenastonomie und in vielen anderen Gebieten.

3. PHYSIKALISCHE GRUNDLAGEN

3.1 Erzeugung von Röntgenstrahlen

3.1.1 Quellen für Röntgenstrahlen

Das älteste Gerät zur Erzeugung von Röntgenstrahlen ist die auf W.C. Röntgen zurückgehende gasgefüllte *Ionenröhre mit kalter Kathode*. Sie besteht im allgemeinen aus drei Elektroden: Kathode (z.B. Aluminium), Anode und Antikathode. Die Röntgenstrahlen gehen von der Antikathode aus, die zur ihren Erzeugung erforderlichen Elektronen werden in der Gasentladung beim Aufprallen der Ionen auf die Aluminiumkathode aus dieser herausgelöst.

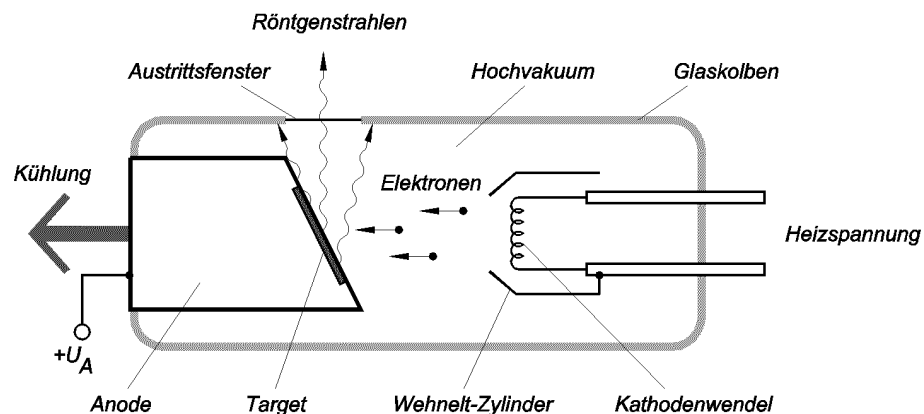


Fig. 3.1: Aufbauprinzip einer Hochvakuum-Röntgenröhre.

Die heute meist verwendete *Hochvakuum-Röntgenröhre* wurde 1913 von W.D. Coolidge eingeführt. In dieser Röhre werden die Elektronen durch thermische Emission statt der Gasentladung erzeugt. Das Aufbauprinzip einer Röntgenröhre dieser Bauart ist in Fig. 3.1 gezeigt. Sie besteht aus einem evakuierten Glaskolben, in dem sich Anode, Kathode und Wehnelt-Zylinder befinden. Der Glaskolben kann ein Austrittsfenster aus Beryllium oder dünnerem Glas haben, um auch die Röntgenstrah-

len kleiner Energie durchzulassen. Die aus Wolfram gemachte Kathodenwendel wird durch den Stromfluss zum Glühen gebracht. Die heiße Wendel emittiert Elektronen, die zu der auf hohem positiven Potenzial befindenden Anode beschleunigt werden. Der Wehnelt-Zylinder dient zur groben Fokussierung der Elektronen in einen Brennfleck auf dem Target (Anode). Das Target ist eine Scheibe aus Metall, die in die aus Kupfer (für bessere Wärmeleitung) gemachte Anode eingebaut ist. Die Anode wird mit Wasser oder Luft gekühlt.

Nach dem Durchlaufen der Beschleunigungsspannung $U_A \sim 10 - 100$ kV nimmt ein Elektron mit der Ladung e die kinetische Energie E_{kin} auf:

$$E_{kin} = e \cdot U_A \sim 10 - 100 \text{ keV}$$

und prallt auf die Anode. Bei der Wechselwirkung der hochenergetischen Elektronen mit den Atomen des Anodenmaterials der Röhre entsteht Röntgenstrahlung.

Zu den heutzutage verwendeten Quellen für Röntgenstrahlen zählen unter anderem *Mikrofokusgenerator*-, *Synchrotronstrahlungs*-, *Laserplasma*- und *Plasmafokusquellen* [51, 64]. In einem Mikrofokusgenerator wird ein hochenergetischer Elektronenstrahl mit Hilfe elektrostatischer oder elektromagnetischer Linsen in einen sehr feinen Brennfleck ($\sim 10\mu\text{m}$) auf dem Target fokussiert. Damit erhält man eine intensive Röntgenquelle sehr kleiner Abmessungen, die meist zusammen mit abbildenden röntgenoptischen Systemen verwendet wird.

Bei der Synchrotronstrahlung handelt es sich um die elektromagnetische Strahlung relativistischer geladener Teilchen (Elektronen), die in einem Speicherring kreisen und bei Umlenkung in eine geschlossene Umlaufbahn ausstrahlen. Bei der Elektronenenergie von einigen GeV (10^9 Elektronenvolt) befindet sich das Maximum der Emission im Bereich harter Röntgenstrahlen.

In Plasma-Röntgenquellen werden Röntgenstrahlen aus dichtem Hochtemperatur-Plasma ($T > 10^6$ K) ausgestrahlt, das z.B. bei der Fokussierung der Strahlung gepulster Hochleistungslaser auf ein Target entsteht.

In der Schulpraxis werden zur Erzeugung von Röntgenstrahlen Röntengeräte mit Hochvakuum-Röntgenröhren verwendet. Deswegen werden im folgendem die Merkmale der Strahlung von Röntgenröhren dieser Bauart detailliert betrachtet.

3.1.2 Bremsstrahlungskontinuum

Zunächst wird der allgemeine Prozess der Wechselwirkung von Elektronen mit dem Anodenmaterial betrachtet. Nach dem Aufprall können die Elektronen in Richtung Kathode zurückgestoßen werden oder im Targetmaterial gestreut werden, wobei sie ihre hohe kinetische Energie verlieren — sie werden von einigen zehntausend Elektronenvolt bis auf eine Energie im Bereich weniger Elektronenvolt abgebremst. Es gibt mehrere Prozesse, die bei der Abbremsung der Elektronen auftreten ([9], S.14):

1. Der Hauptanteil der Energie wird den einfallenden Elektronen durch Wechselwirkungen mit Leitungs- und Valenzelektronen des Targets entnommen. Dabei können mehrere niederenergetische (< 50 eV) Elektronen aus dem Material ausgestoßen werden. Bei jeder solchen Wechselwirkung verlieren die einfallenden Elektronen $10 - 100$ eV.
2. Einige der einfallenden Elektronen können mit den Elektronen aus den inneren Schalen der Targetatome wechselwirken. Dabei wird die *charakteristische Strahlung* des Targetelements ausgesandt.
3. Wenn die einfallenden Elektronen die Elektronenhüllen von Targetatomen durchdringen, können sie im Coulomb-Feld des Kernes elastisch (ohne Energieverlust) oder unelastisch gestreut werden. Bei der unelastischen Streuung strahlen die Elektronen einen Teil ihrer Energie als Röntgenphotonen aus, dadurch kommt der *kontinuierliche Spektrumanteil* zustande. Bei Anodenspannungen $U_A < 100$ kV erdulden nur 0,5 bis 1% der Elektronen diesen Prozess.

Die meisten unelastisch gestreuten Elektronen geben ihre Energie nicht in einem einzigen Stoß ab, sondern in mehreren ungleichen Schritten ΔE , von denen jeder einem Röntgenphoton mit der Energie ΔE entspricht. Da die Elektronen hierbei abgebremst werden, wurde diese Röntgenstrahlung auf Vorschlag von A. Sommerfeld als *Bremsstrahlung* bezeichnet. Die Strahlung von mehreren schrittweise abgebremsten Elektronen erzeugt ein kontinuierliches Spektralband — das *Bremsstrahlungskontinuum*.

Das Bremsstrahlungskontinuum weist eine hochenergetische Grenze auf, die bei der Energie $E_{max} = e \cdot U_A$ liegt. Die Anwesenheit dieser Grenze ist leicht nach quantenmechanischen Vorstellungen zu erklären: Strahlung der Energie E_{max} entsteht

nur dann, wenn ein Elektron mit $E_{kin} = e \cdot U_A$ seine *ganze* kinetische Energie in einem Streuprozess einem *einzelnen* Photon zuführt, Strahlung größerer Energie kann es nach dem Energieerhaltungssatz nicht geben.

Mit $E_{max} = h\nu_{max} = hc/\lambda_{min}$ ergibt sich dann

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{eU_A}. \quad (3.1)$$

Dieser Ausdruck für die kurzwellige Grenze heißt *Duane-Huntsches Verschiebungsgesetz* nach den amerikanischen Physikern William Duane und Franklin L. Hunt, die 1915 eine umgekehrte Proportionalität zwischen der Grenzwellenlänge und der Röhren-Hochspannung festgestellt haben.

Das Vorhandensein dieser Grenze ist ein Beweis für die Existenz von Quantenphänomenen. Die klassisch berechnete Grenzwellenlänge des Bremsstrahlungskontinuums ist viel *kleiner* als die aus Gl. (3.1) ausgerechnete Grenze: „the classical frequency spectrum is always confined to very low frequencies compared to the maximum allowed by conservation of energy“ (*Classical Electrodynamics* [25], S. 511).

Die spektrale Strahlungsverteilung des Bremsstrahlungskontinuums einer massiven Anode kann nach Kulenkampff [34] mit folgender Formel beschrieben werden:

$$J_\lambda = CZ \left(\frac{1}{\lambda^2} \right) \left(\frac{1}{\lambda_{min}} - \frac{1}{\lambda} \right) + BZ^2 \frac{1}{\lambda^2}.$$

Dabei ist J_λ die auf gleiche Wellenlängenintervalle reduzierte Strahlungsstärke, Z die Ordnungszahl, B und C sind Konstanten. Da $C \gg B$ ist, ist der zweite quadratisch von Z abhängende Teil des Ausdrucks unsignifikant. Bei der frequenzabhängigen Spektrumdarstellung¹ gilt dann für die auf gleiche Frequenzintervalle reduzierte Strahlungsstärke J_ν :

$$J_\nu = Const_\nu \cdot Z \cdot (\nu_{max} - \nu).$$

Die Konstante beträgt für die Strahlungsstärke eines einzelnen Elektrons $Const_\nu \approx 4 \cdot 10^{-58} \text{ Watt} \cdot \text{s}^2$ (nach Pohl [53], S. 219). Die Strahlungsstärke einer Röntgenröhre ist damit proportional zur Anzahl der Elektronen, also zum fließenden Anodenstrom I_A .

¹ Zur Umrechnung der einen Darstellung auf die andere wird der Ausdruck $J_\nu = -J_\lambda \cdot c/\nu^2$ benutzt. Er kann aus den Beziehungen $\lambda = c/\nu$, $d\lambda/d\nu = -c/\nu^2$, $J_\lambda d\lambda = J_\nu d\nu$ hergeleitet werden. Das Minuszeichen berücksichtigt die entgegengesetzte Richtung der Frequenz- und der Winkelskala [53].

In der Energiedarstellung weisen die Spektren dann die Strahlungsstärke

$$J_E = \text{Const}_E \cdot Z \cdot (E_{max} - E)$$

auf, mit $\text{Const}_E \approx 9 \cdot 10^8 \frac{W}{J^2} \approx 2,4 \cdot 10^{-29} \frac{W}{eV^2}$.

Die integrale Strahlungsstärke (Intensität) des Bremsstrahlungskontinuums ist mit der Formel nach Beatty [7] gegeben

$$J_{int} \approx (1,4 \cdot 10^{-9} \frac{1}{V}) \cdot I_A \cdot Z \cdot U_A^2. \quad (3.2)$$

Die Strahlungsstärke J_{int} ist hier in Watt, der Anodenstrom I_A in Ampere, die Hochspannung an der Röntgenröhre U_A in Volt angegeben. Da $I_A \cdot U_A = P$ im rechten Teil der Gleichung die elektrische Leistung an der Röntgenröhre ist, ist der Nutzeffekt der Bremsstrahlung $\eta = J_{int}/P \approx (1,4 \cdot 10^{-9})Z \cdot U_A$ sehr klein: z.B. für eine Molybdän-Anode ($Z=42$) und $U_A = 35$ kV ist $\eta \approx 2,1 \cdot 10^{-3}$. Somit wird die Anode einer Röntgenröhre mit nahezu voller Leistung $I_A \cdot U_A$ erwärmt.

Die Grafiken Fig. 3.2 bis Fig. 3.4 stellen die Bremsstrahlungsspektren für unterschiedliche Anodenspannungen, Anodenströme und Ordnungszahlen des Anodenmaterials in zweierlei Weise dar: in Abhängigkeit von der Wellenlänge (typisch für Bragg-Spektren) und von der Energie (typisch für Spektren der energieauflösenden Detektoren).

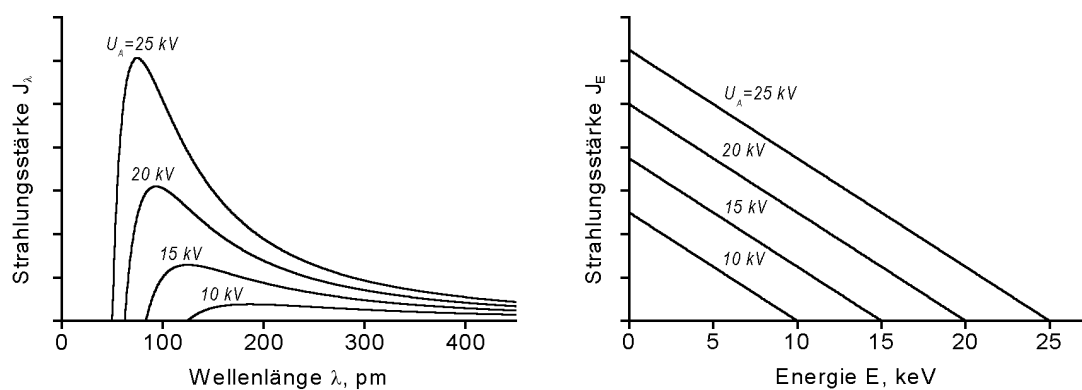


Fig. 3.2: Auswirkung der Änderung der Beschleunigungsspannung auf die spektrale Energieverteilung der Bremsstrahlung einer massiven Anode, dargestellt als Wellenlängen- bzw. Energiespektrum: $\lambda_{min} \sim 1/U_A$ ($E_{max} \sim U_A$) – Duane-Huntsches Verschiebungsgesetz. Die Strahlungsstärken J_λ und J_E sind die auf gleiche Wellenlängen- bzw. gleiche Energieintervalle reduzierte Strahlungsleistung.

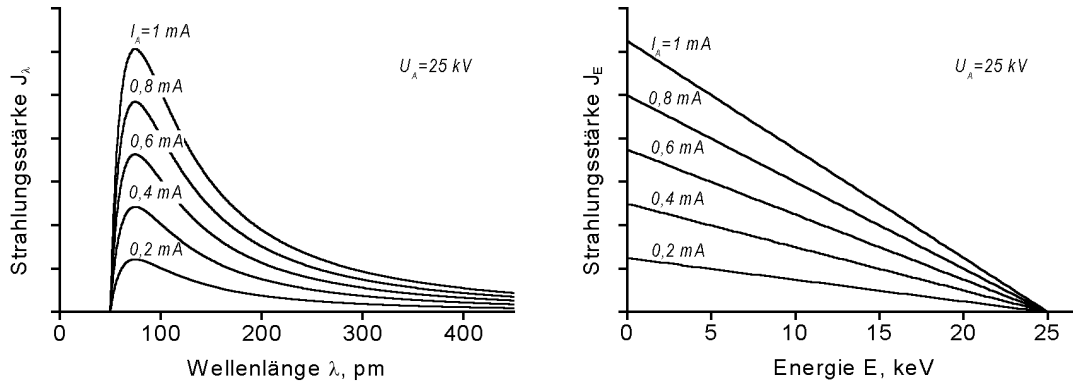


Fig. 3.3: Auswirkung der Änderung des Anodenstromes I_A auf die spektrale Energieverteilung der Bremsstrahlung einer massiven Anode: $J \sim I_A$, $\lambda_{min} = Const$, $E_{max} = Const$.

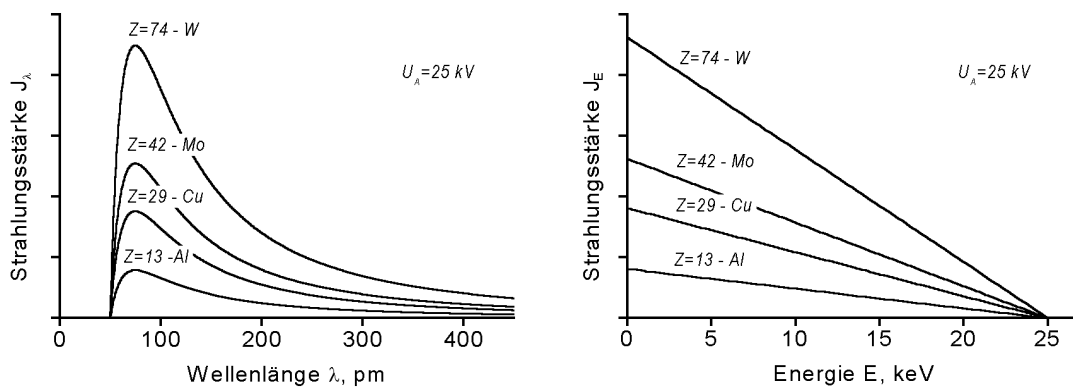


Fig. 3.4: Auswirkung der Änderung der Ordnungszahl Z des Anodenmaterials auf die spektrale Energieverteilung der Bremsstrahlung einer massiven Anode: $J \sim Z$, $\lambda_{min} = Const$, $E_{max} = Const$. Die charakteristische Linien der Elemente sind nicht gezeigt.

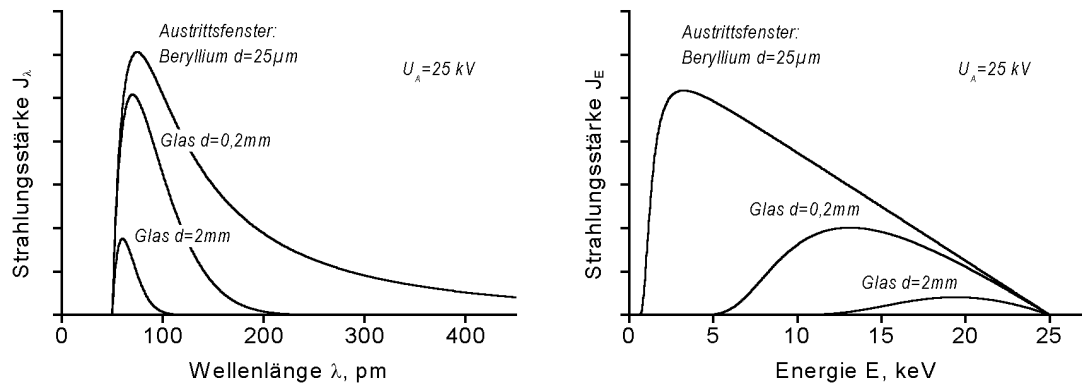


Fig. 3.5: Auswirkung eines Austrittsfensters einer Röntgenröhre auf die spektrale Verteilung der Bremsstrahlung: $25\mu\text{m}$ -Beryllium-Fenster, $0,2\text{mm}$ -dickes Glasfenster (Röntgenröhre mit Kupfer-Anode von Leybold Didactic, Kat.-Nr. 55485) und eine 2mm -dicke Glaswand (Röntgenröhre mit Molybdän-Anode von Leybold Didactic, Kat.-Nr. 55482).

Die oben angegebenen das Bremsstrahlungskontinuum beschreibenden Formeln sind nur annähernd richtig, weil sie z.B. die Selbstabsorption der Strahlung im Anodenmaterial nicht berücksichtigen. Dazu kommt noch die Absorption im Austrittsfenster bzw. der Glaswand einer realen Röntgenröhre und ggf. in der Luftstrecke bis zum Detektor. Die Wirkung eines Austrittsfensters auf die spektrale Verteilung der Bremsstrahlung ist in Fig. 3.5 für ein $25\mu\text{m}$ -Beryllium-Fenster, ein $0,2\text{mm}$ -dickes Glasfenster und eine Glaswand von 2mm Dicke gezeigt.

3.1.3 Charakteristisches Spektrum

Ein bestimmter Teil der hochenergetischen Elektronen, die in einer Röntgenröhre zur Anode beschleunigt werden, schlagen Elektronen aus den inneren Schalen der Targetatome heraus. Dasselbe kann auch durch Absorption von Photonen erzielt werden. Das dabei ionisierte Atom hat dann eine Vakanz (Elektronenloch) in einer zuvor abgeschlossenen Unterschale. Diese Elektronenlöcher können mit Elektronen aus anderen schwächer durch den Atomkern gebundenen Schalen des Atoms aufgefüllt werden. Die Bindungsenergie eines K -Schalen-Elektrons ist am größten (vgl. Fig. 3.6), danach folgen die L -Schalen, M -Schalen usw., das heißt, eine Lücke in der K -Schale kann dadurch geschlossen werden, dass ein Elektron aus der L -Schale

(oder M -, N -Schale usw.) in die K -Schale übergeht. Da ein Elektron in der L -Schale schwächer gebunden ist als ein Elektron in der K -Schale, wird von dem Ion Energie in Form eines Röntgenphotons ausgesandt, das Elektronenloch der K -Schale wird dabei an die L -Schale weitergegeben. Sukzessive kann das L -Schalen-Elektronenloch durch ein Elektron der M -, N -Schale usw. aufgefüllt werden. Der Prozess geht weiter bis zum Übergang eines „freien“ Elektrons aus dem Valenz- oder Leitungsband, das das Elektronenloch im Ion endlich schließt. Jeder Schritt in dieser Kette ist mit der Emission eines Photons verbunden. Die dabei entstehende Strahlung weist nur bestimmte diskrete Photonenenergien auf und heißt *charakteristische Strahlung* des Targetatoms.

Die Energien der emittierten Photonen hängen von den Energieniveaus des ionisierten Atoms ab, die für jeden Element charakteristisch sind. Da die Übergänge hauptsächlich zwischen den inneren Schalen passieren, sind Energien des charakteristischen Spektrums weitgehend von der chemischen Bindung des Atoms unabhängig, daher werden diese Linien für die Analyse der chemischen Zusammensetzung verwendet.

Das Termschema eines Atoms kann mit Hilfe der Quantenphysik berechnet werden. Jedes Elektron im Atom wird mit einem Satz Quantenzahlen beschrieben: n , l , m , s und j . Die Hauptquantenzahl n gibt die Elektronenschale an: $n = 1, 2, 3, 4$, usw. für die K -, L -, M -, N -, usw. Schale. Die Orbitalquantenzahl l bestimmt die Form der Orbitale: $l = 0, 1, \dots, (n-1)$ steht für s, p, d, f , usw. Die magnetische Quantenzahl m beschreibt die Projektion des Bahndrehimpuls \mathbf{l} auf das magnetische Feld $\hbar l_z = \hbar m$, $m = -l, \dots, 0, \dots, l$. Die Quantenzahl $s = \pm \frac{1}{2}$ steht für den Elektronenspin. Die Quantenzahl j des Gesamtimpuls $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ ist die Vektorsumme des Bahndrehimpuls und des Spins des Elektrons, $j = l \pm \frac{1}{2}$ für $l \geq 1$.

Die zu einer Röntgenlinie gehörenden Energieniveaus können wasserstoffähnlich behandelt werden, indem statt der realen Kernladung Z eine effektive Kernladung $Z_{eff} = Z - \sigma_n$ mit einer Abschirmkonstanten σ_n eingesetzt wird. Der Energiezustand eines Elektrons einer inneren Schale wird dann approximativ durch eine modifizierte Bohrsche Formel mit der Hauptquantenzahl n und $Z - \sigma_n$ beschrieben (nach [54], S. 124):

$$E_n = -Rhc \frac{(Z - \sigma_n)^2}{n^2},$$

hierbei ist R die Rydberg-Konstante, $R = m_e e^4 / 8 \varepsilon_0^2 h^3 c$. Diese Formel beschreibt die Grobstruktur der Energie eines Elektrons einer inneren Schale. Die Abschirmkonstante σ_n hängt im allgemeinen Fall von n und Z ab.

Die Feinstruktur der Elektronen der inneren Schalen kann auch wasserstoffähnlich in Analogie zu den Valenzelektronen berechnet werden. Für die Beschreibung wird die Sommerfeldsche Formel eingesetzt mit einer weiteren Abschirmungskonstanten s_n bzw. einer weiteren effektiven Kernladung $Z_{eff.fein} = Z - s_n$:

$$E_{j,l} = -\frac{hcR\alpha^2 (Z - s_n)^4}{n^3} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right),$$

dabei ist α die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante.

Die Auswahlregeln für Elektronenlochübergänge zwischen den Schalen sind identisch mit den optischen Übergangsregeln für Ein-Elektron-Atome: $\Delta l = \pm 1$, $\Delta j = 0, \pm 1$, $\Delta n \neq 0$. In Fig. 3.6 ist ein Energieniveau-Diagramm mit einigen möglichen Übergängen eines schweren Atoms abgebildet.

Die Bezeichnungen der charakteristischen Röntgenlinien sind auf Arbeiten von C.G. Barkla [5] und M. Siegbahn [62] zurückzuführen, die Anfang des 20. Jahrhunderts entstanden sind; in der Zeit gab es noch wenige Erkenntnisse über die Atomstruktur. Sie sind aus heutiger Sicht nicht immer logisch, werden aber traditionell weiter verwendet. In der Siegbahn-Notation (nach [9], S. 25) besteht die Bezeichnung einer Röntgenlinie (z.B. $\text{Cu}K\alpha_1$, $\text{Au}L\beta_2$, $\text{W}L\eta$, $\text{U}l$) aus

1. einem Symbol des chemischen Elements,
2. einem Symbol der Elektronenschale (K , L , M usw.), die vor dem Elektronenübergang ionisiert war — es ist Bezeichnung der *Serie*,
3. einem griechischen Kleinbuchstaben eventuell mit einem numerischen Index oder einem lateinischen Kleinbuchstaben, zur Bezeichnung einer konkreter *Linie* innerhalb der Serie.

Die α -Linien entsprechen den Übergängen mit $\Delta n = 1$, die β - und die γ -Linien stehen üblicherweise für $\Delta n = 1$ oder $\Delta n = 2$, weitere Bezeichnungen sind nicht systematisch. Der Symbol $K\alpha$ wird für das Paar $K\alpha_1\alpha_2$ verwendet, $K\beta$ — für das Paar $K\beta_1\beta_3$.

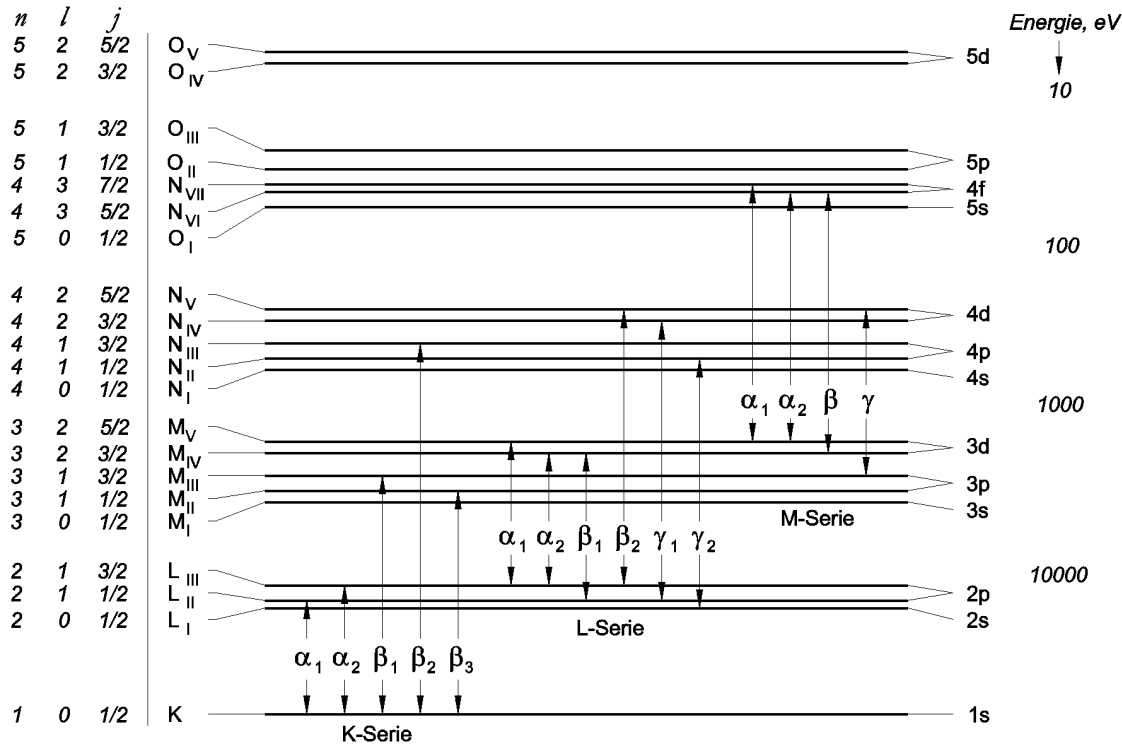


Fig. 3.6: Röntgenniveaus und einige Röntgenspektallinien eines schweren Atoms. Jedes Niveau stellt die Energie des Atoms mit einem (einzigen) entfernten Elektron dar. Die griechischen Buchstaben zeigen die traditionellen Bezeichnungen der charakteristischen Röntgenlinien. Auch gezeigt sind die Quantenzahlen für die einzelnen Energieniveaus und eine Größenordnung ihrer Energie relativ zum nicht ionisierten Atom.

Für die Frequenzen der charakteristischen Linien $\nu = (E_2 - E_1) / h$ bei den Übergängen $n_2 \rightarrow n_1$ ($n_2 > n_1$) gilt

$$\nu = cR \left[\frac{(Z - \sigma_{n_1})^2}{n_1^2} - \frac{(Z - \sigma_{n_2})^2}{n_2^2} \right].$$

Wird statt σ_{n_1} und σ_{n_2} eine einzige mittlere Abschirmkonstante $\sigma_{2,1}$ für Übergänge von n_2 nach n_1 eingeführt, lässt sich diese Formel zum *Moseleyschen Gesetz* umschreiben:

$$\sqrt{\frac{\nu}{\nu_R}} = (Z - \sigma_{2,1}) \sqrt{\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)}, \quad (3.3)$$

mit der Rydberg-Frequenz $\nu_R = cR$. Danach hängt die Quadratwurzel der Frequenz der charakteristischen Linien einer Serie linear von der Ordnungszahl Z ab. Für die $K\alpha$ -Linien leichterer Elemente ($Z < 30$) ist die Abschirmkonstante $\sigma_{2,1} \approx 1$ und

somit

$$\sqrt{\frac{\nu}{\nu_R}} = \frac{3}{4}(Z - 1).$$

Mit wachsender Ordnungszahl wird $\sigma_{2,1}$ kleiner und für $Z \geq 55$ sogar negativ ([31], S. 273), d.h. bei diesen Z überwiegt der Einfluss der äußeren Elektronen die Abschirmung durch die inneren.

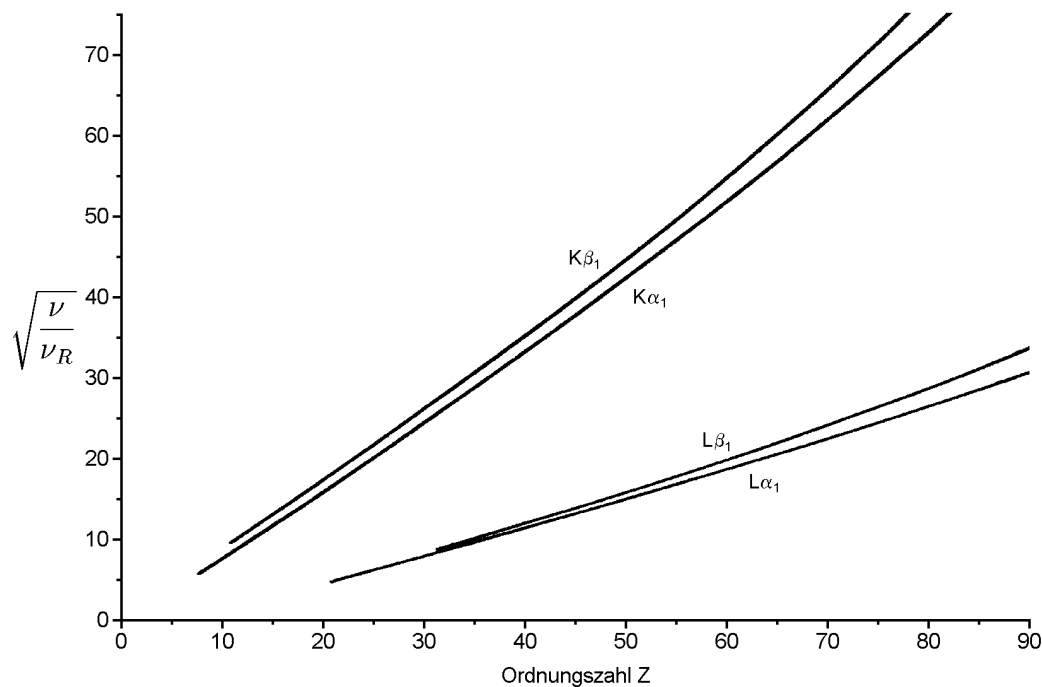


Fig. 3.7: Das Moseley-Diagramm für ausgewählte charakteristische Linien (nach [9]).

Das experimentelle Moseley-Diagramm für $K\alpha_1$ -, $K\beta_1$ -, $L\alpha_1$ - und $L\beta_1$ -Linien ist in Fig. 3.7 gezeigt. Es ist zu erkennen, dass alle eingezeichneten Kurven vom linearen Zusammenhang abweichen.

Ein Elektronenloch einer inneren Schale kann wie oben beschrieben durch ein Elektron einer Schale geringerer Bindungsenergie aufgefüllt werden mit der Ausstrahlung der dabei freigesetzten Energie als charakteristisches Röntgenphoton. In Konkurrenz zur Emission der Röntgenlinie kann dabei ein *strahlungsloser Übergang* auftreten, wobei die freiwerdende Energie dazu verwendet wird, ein anderes Elektron aus einer Schale geringerer Bindungsenergie zu entfernen. Dieser Prozess wurde 1925 von dem französischen Physiker P. Auger entdeckt und wird als *Auger-Effekt* bezeichnet, das dabei herausgeschlagene Elektron wird *Auger-Elektron* genannt.

Die relativen Anteile dieser zwei konkurrierenden Prozesse werden durch die Fluoreszenzausbeute ω charakterisiert. Sie ist als Verhältnis der Zahl der in einer Röntgen-Serie emittierten Röntgenphotonen zu der Zahl der auf dem Grundniveau der Serie insgesamt gebildeten Elektronenlöcher definiert. Die Auger-Ausbeute a ist als $a = 1 - \omega$ gegeben.

Die Fluoreszenzausbeute für eine Serie der charakteristischen Röntgenstrahlung wächst mit wachsender Ordnungszahl Z . Ihr Zahlenwert für $Z = 20$ ist $\omega \approx 0,1$; für $Z = 40$: $\omega \approx 0,75$ und für $Z = 80$: $\omega \approx 0,97$. Da sie ausgesprochen klein für die kleinen Z ist, besteht eine fundamentale Schwierigkeit, die Röntgenfluoreszenzspektren für Elemente mit $Z < 10$ aufzunehmen. Im Gegensatz dazu, hat die Auger-Elektron-Spektroskopie Vorteile beim Untersuchen der leichten Elemente.

3.1.4 Anregung des Röntgenspektrums

In der Praxis werden die Röntgenstrahlen hauptsächlich durch Beschuss eines Targets mit beschleunigten Elektronen, Protonen oder Ionen, durch Bestrahlung des Targets mit Röntgenstrahlen oder auch durch Aussetzen des Targets der α -, β - oder γ -Strahlung eines radioaktiven Präparates erzeugt. Der Elektronen- (Ionen-) Beschuss wird als *primäre (Direkt-) Anregung* bezeichnet, die Anregung mit hochenergetischen Photonen als *sekundäre (Fluoreszenz-) Anregung*.

Die Primäranregung wird z.B. in Röntgenröhren realisiert. Die Elektronenlöcher der Targetatome werden durch die hochenergetischen Teilchen erzeugt, das Teilchen schlägt ein Elektron (*Sekundärelektron*) heraus und wird dabei gestreut. Die Primäranregung wird dadurch charakterisiert, dass dabei außer dem charakteristischen Röntgenspektrum auch ein Bremsstrahlungskontinuum ausgestrahlt wird.

Bei der Fluoreszenzanregung (z.B. beim Bestrahlen des Targets mit Röntgenstrahlen aus einer Röntgenröhre) werden Vakanzen der Targetatome durch Absorption von hochenergetischen Photonen erzeugt. Das Photon wird dabei *vollständig* absorbiert und seine Energie auf die Ionisationsenergie des Atoms und die kinetische Energie des Photoelektrons geteilt. Da die anregenden Photonen nur in einem Schritt absorbiert werden, besteht das Röntgenfluoreszenzspektrum *ausschließlich aus charakteristischen Linien*. Zusätzlich kann im Fall der Anregung mit einem kontinuierlichen Röntgenspektrum auch in den *sekundären Spektren* ein kontinuier-

licher Anteil vorhanden sein, der durch die Streuung des anregenden Kontinuums am Target entsteht.

Ein anderer wesentlicher Unterschied der beiden Anregungsarten besteht darin, dass bei der Primäranregung die Intensität des Röntgenspektrums mit wachsender Anregungsenergie wächst und bei der Fluoreszenzanregung fällt. Bei der Fluoreszenzanregung ist die Intensität einer Röntgenserie maximal, wenn die anregenden Photonen mit ihrer Energie gerade über die der Serie entsprechende Absorptionskante kommen (siehe Abschnitt 3.2.2).

3.2 Absorption von Röntgenstrahlen

3.2.1 Wechselwirkung der Röntgenstrahlen mit Materie

Beim Durchgang durch Materie werden die Röntgenstrahlen abgeschwächt. Die Intensitätsänderung beim Durchdringen einer homogenen Schicht mit der Dicke dx ist mit

$$\frac{dJ}{J} = -\mu \cdot dx$$

gegeben. Dabei ist J die Intensität der Strahlung und μ der lineare Schwächungskoeffizient.

Die Intensität J der Röntgenstrahlung nach einer Materialdicke x wird durch Integrieren obiger Gleichung berechnet (Lambertsches Gesetz). Man erhält

$$J = J_0 e^{-\mu x}, \quad (3.4)$$

wobei J_0 die Intensität der Röntgenstrahlung vor dem Abschwächer ist.

Zur Schwächung der Röntgenstrahlen tragen sowohl Absorption als auch Streuung bei (vgl. Fig. 3.8). Der lineare Schwächungskoeffizient setzt sich daher aus dem linearen Absorptionskoeffizienten τ und dem linearen Streukoeffizienten σ zusammen:

$$\mu = \tau + \sigma.$$

Bei der Absorption verschwinden die Röntgenphotonen, indem sie ihre Energie im Material des Abschwächers zum Herausschlagen von Photoelektronen (z.B. Auger-Elektronen) und zur Anregung von charakteristischer Fluoreszenzstrahlung abgeben.

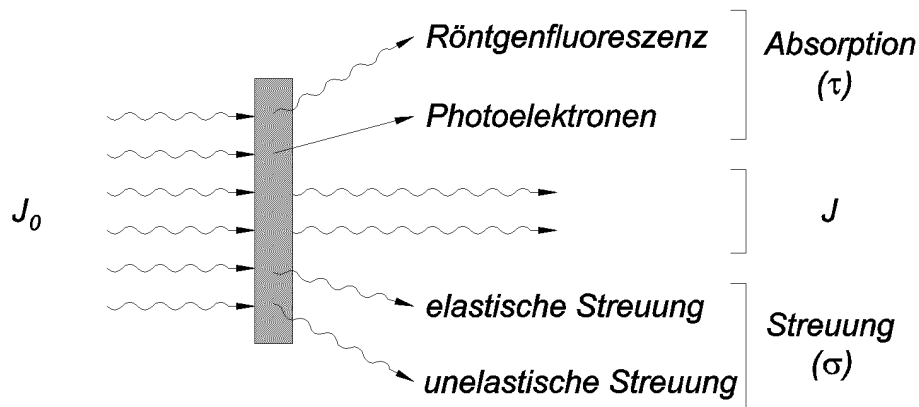


Fig. 3.8: Schematische Zusammenstellung von Prozessen, die bei der Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie auftreten.

Bei der Streuung verlassen die Photonen den Strahl, weil sie entweder elastisch (ohne Frequenzänderung) oder unelastisch (mit Frequenzänderung) im Abschwächer gestreut werden (siehe Abschnitt 3.3). Außer beim Durchgang hochenergetischer Röntgenstrahlen durch Abschwächer aus leichten Elementen dominiert die Absorption über die Streuung.

Im Lambertschen Gesetz (3.4) werden vier unterschiedliche Ausdrücke für den Schwächungskoeffizienten (bzw. Absorptionskoeffizienten oder Streukoeffizienten) verwendet [9]:

1. Der lineare Schwächungskoeffizient μ gibt die Schwächung pro Dickeneinheit an. Aus (3.4) folgt

$$\mu = \frac{\ln(J_0/J)}{x}.$$

2. Der Massenkoeffizient ist definiert als

$$\mu_m = \frac{\mu}{\rho},$$

dabei ist ρ die Dichte des Abschwächermaterials.

3. Der atomare Schwächungskoeffizient ist

$$\mu_a = \frac{\mu}{\rho} \frac{A}{N_A} = \frac{\mu}{n},$$

dabei ist A das Atomgewicht, $N_A = 6,02 \cdot 10^{23} \text{ 1/mol}$ die Avogadro-Zahl und n die Anzahl der Atome pro Volumeneinheit.

4. Der molare Schwächungskoeffizient ist

$$\mu_{mol} = \frac{\mu}{\rho} A.$$

In der Praxis wird meistens der Massenkoeffizient μ_m verwendet, weil dieser Koeffizient für jedes Element spezifisch ist und kaum von der chemischen Bindung oder dem Aggregatzustand abhängt². Die Massenkoeffizienten sind relativ einfache Funktionen der Energie und der Ordnungszahl und können für unterschiedliche Elemente direkt verglichen werden.

Der gesamte Massenkoeffizient eines Gemisches oder einer chemischen Verbindung μ_{mix} wird aus den Massenkoeffizienten der Bestandteile $\mu_m^1, \mu_m^2 \dots \mu_m^n$ und ihren relativen Massenanteilen $c_1, c_2 \dots c_n$ ($\sum_{i=1}^n c_i = 1$) zusammengesetzt [67]:

$$\mu_{mix} = \sum_{i=1}^n c_i \mu_m^i$$

3.2.2 Absorptionskanten und Absorptionskoeffizienten

Die Schwächungskoeffizienten nehmen mit zunehmender Energie in weiten Bereichen monoton ab. Daher haben energiereiche (harte) Röntgenstrahlen ein größeres Durchdringungsvermögen als energieärmere (weiche) Röntgenstrahlen (vgl. Fig. 3.9).

Wenn jedoch die Energie der einfallenden Strahlung groß genug ist, können Elektronen aus den K -, L - usw. Schalen herausgeschlagen werden. Dabei erfährt der Schwächungskoeffizient einen sprunghaften Anstieg, der als *Absorptionskante* bezeichnet wird [54].

Die Energie, bei der im Absorptionsspektrum eine Kante zu finden ist, ist die Bindungsenergie der entsprechenden Elektronenschale des Atoms. So kann die Ionisation der K -Schale nur mit der Strahlung erfolgen, deren Energie größer als die

² Die Vorteile des Massenkoeffizienten sind überzeugend von W.T. Sproull illustriert (zitiert nach [9], S. 53): "A beam of x-rays passing from the ceiling to the floor of a chamber filled with hydrogen and oxygen may be [say] 10% absorbed, or 90% of it will reach the floor. If a spark explodes the hydrogen and oxygen, filling the chamber with steam, 90% of the x-rays will still reach the floor. Then if the chamber is chilled so that the steam condenses to a thin layer of water or ice on the floor, 90% of the x-rays will still reach the floor. This is not true for light or ultraviolet or infrared radiation, and it explains why the mass absorption coefficient of x-rays is commonly used, whereas the linear absorption coefficient is ordinarily used in optics."

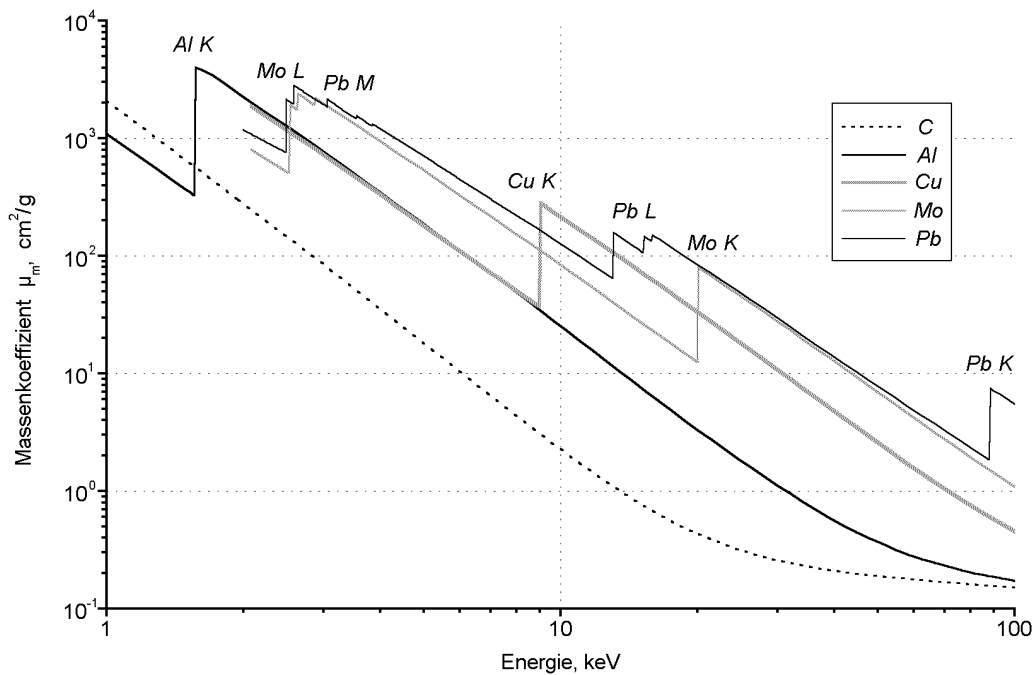


Fig. 3.9: Abhängigkeit der Schwächungskoeffizienten von Kohlenstoff, Aluminium, Kupfer, Molybdän und Blei von der Energie der Röntgenstrahlen (nach [14]). Die Absorptionskanten sind im Bild beschriftet.

Energie E_K der K -Kante ist. Eine kleinere Energie ist nicht ausreichend: das Elektron muss aus dem Atom entfernt werden, weil alle höheren Unterschalen besetzt sind. Das bedeutet, dass auch die K -Linien nur mit der Strahlung angeregt werden können, deren Energie höher als die Energie der K -Kante ist. Zum Beispiel kann die $K\alpha$ -Linie von Kobalt ($E_{Co\ K\alpha} = 6,93$ keV) nicht die $K\alpha$ -Linie von Eisen ($E_{Fe\ K\alpha} = 6,40$ keV) anregen, obwohl $E_{Co\ K\alpha} > E_{Fe\ K\alpha}$ ist, da ihre Energie nicht die Energie der K -Kante von Eisen ($E_{Fe\ K} = 7,11$ keV) übersteigt.

Die Zahl der im Spektrum eines Elements vorhandenen Absorptionskanten stimmt mit der Zahl seiner Elektronenschalen überein: es kann eine K -Kante, drei L -Kanten, fünf M -Kanten usw. geben. In den Mehrfachserien sind die $LIII$ -, MV - und $NVII$ -Kanten am stärksten ausgeprägt (vgl. Fig. 3.9).

Zwischen den Absorptionskanten ändern sich die Schwächungskoeffizienten monoton nach dem Bragg-Pierce-Gesetz [9]:

$$\mu_m \approx KZ^4E^{-3}.$$

Dabei ist Z die Elementsordnungszahl und K ist eine Konstante, die an jeder Absorptionskante einen anderen Wert annimmt.

3.3 Streuung von Röntgenstrahlen

3.3.1 Allgemeine Klassifikation

Man unterscheidet vier Arten der Streuung [51]:

- *elastische Streuung*, die ohne Frequenzänderung der Strahlung geschieht. Zum Beispiel *Rayleigh*-Streuung, die an Teilchen statt findet, die klein gegen die Wellenlänge sind (Atome);
- *unelastische Streuung*, bei der sich die Frequenz der Strahlung ändert: *Compton*-Streuung im Frequenzbereich der Röntgenstrahlen;
- *kohärente Streuung*, mit einer definierten Phasenbeziehung;
- *inkohärente Streuung*, mit statistischer Phasenbeziehung.

Bei der Behandlung der Röntgenstrahlung werden oft die *unelastische* und die *inkohärente* Streuung synonym benutzt, da die unelastische Streuung immer auch inkohärent ist [9].

3.3.2 Elastische Streuung

Die elastische Streuung ist im Wellenbild leicht einzusehen [51]. Unter dem Einfluss der elektrischen Feldkomponente der Strahlung beginnen im Atom die elastisch gebundenen Elektronen zu oszillieren und strahlen mit der gleichen Frequenz ab. Diese Abstrahlung erfolgt in einem weiten Winkelbereich, ihre Amplitude hängt stark vom Bindungszustand des streuenden Elektrons ab.

Wenn die Frequenz ω_0 der Strahlung groß gegen alle Resonanzfrequenzen der Elektronen ist, können diese als quasifrei angesehen werden. Für diese Streuung entwickelte J.J. Thomson ein einfaches klassisches Modell, das unten behandelt wird.

Zuerst wird die einfallende Strahlung in Form einer linearpolarisierten monochromatischen ebenen Welle betrachtet. Ihre elektrische Feldstärke E

$$E = E_0 \sin \omega_0 t$$

setzt das Elektron in eine periodische Bewegung mit der Gleichung

$$\ddot{x} = \frac{F}{m_e} = \frac{e}{m_e} E_0 \sin \omega_0 t,$$

dabei ist x die Ortskoordinate des Elektrons, e und m_e seine Ladung bzw. Masse. Die von einer beschleunigten Ladung in eine Raumwinkeleinheit emittierte mittlere Strahlungsleistung beträgt

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{e^2 \langle \ddot{x}^2 \rangle}{16\pi^2 \varepsilon_0 c^3} \sin^2 \varphi = \left(\frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 m_e c^2} \right)^2 \frac{\varepsilon_0 c E_0^2}{2} \sin^2 \varphi,$$

dabei ist φ der Winkel zwischen der Beschleunigungsrichtung und der Strahlungsrichtung. Der Ausdruck in der Klammer wird als der klassische Elektronenradius r_e bezeichnet:

$$r_e = \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 m_e c^2} \approx 2,8 \cdot 10^{-15} \text{ m}$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt der Streuung wird als

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dP/d\Omega}{J}$$

definiert [25]. Dabei ist die Intensität der einfallenden Strahlung J (W/m²) der zeitlich gemittelte Betrag des Pointing-Vektors. Sie beträgt für die angenommene Welle

$$J = \frac{\varepsilon_0 c E_0^2}{2},$$

somit wird

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_e^2 \sin^2 \varphi.$$

Im Fall der Strahlung mit zufälliger Polarisierung wird der differentielle Wirkungsquerschnitt über die möglichen Polarisationsrichtungen gemittelt. Man bekommt dann den Ausdruck

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_e^2 \left(\frac{1 + \cos^2 \vartheta}{2} \right). \quad (3.5)$$

Dabei ist ϑ der Winkel zwischen der einfallenden und der gestreuten Strahlung. Es ist ersichtlich, dass der differentielle Wirkungsquerschnitt unabhängig von der Frequenz der einfallenden Welle ist, und dass er symmetrisch um die Streurichtung mit $\vartheta = 90^\circ$ ist. Die Frequenz der Strahlung ändert sich mit der Streuung nicht.

Der totale Wirkungsquerschnitt der Thomson-Streuung σ_T wird durch Integrieren über den vollen Raumwinkel berechnet:

$$\sigma_T = \frac{8\pi}{3} r_e^2 \approx 6,65 \cdot 10^{-29} \text{ m}^2.$$

Mit zunehmender Frequenz der Strahlung macht sich der Rückstoss der Photonen bemerkbar und die klassische Streuung geht über in die Compton-Streuung.

3.3.3 Unelastische (Compton-) Streuung

Bei der unelastischen Streuung ist die Wellenlänge der gestreuten Strahlung größer als diese der einfallenden. Die klassische Auffassung lässt aber die Wellenlängenänderung nicht verstehen, deswegen muss die quantenphysikalische Auffassung verwendet werden [51].

Es wird angenommen, dass die streuenden Elektronen frei sind, was für die äußeren Elektronenschalen bei den Strahlungsenergien im Bereich der Röntgenstrahlen (größer ca. 10 keV) eine gute Näherung ist. Die Strahlung wird im Korpuskularbild behandelt. Somit wird der Streuprozess wie folgt beschrieben: ein Photon der Frequenz ν , also mit der Energie $h\nu$ und dem Impuls $h\nu/c$, trifft auf ein ruhendes freies Elektron der Masse m , das nach dem Stoß die Geschwindigkeit v hat. Das Photon wird dabei um den Winkel ϑ gestreut und hat die Frequenz $\nu' < \nu$, das Elektron bewegt sich unter dem Winkel φ zur Richtung des einfallenden Photons (Fig. 3.10). Für diesen Stoßvorgang wird die Erhaltung von Energie und Impuls verlangt, wie beim elastischen Stoß zweier klassischer Teilchen.

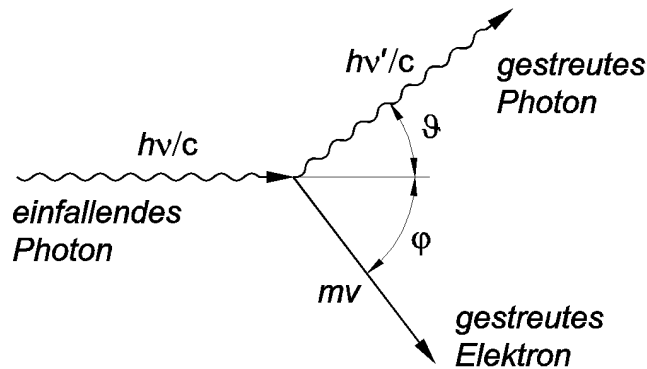


Fig. 3.10: Schematische Darstellung der Compton-Streuung.

Die Energieerhaltung liefert die Gleichung

$$h\nu + m_e c^2 = h\nu' + mc^2. \quad (3.6)$$

Hierbei ist $m_e c^2$ die Ruheenergie und mc^2 die gesamte Energie des Elektrons. Die Masse des bewegten Elektrons hängt mit seiner Ruhemasse zusammen:

$$m = \frac{m_e}{\sqrt{1 - \beta^2}}; \quad \beta = \frac{v}{c}.$$

Für die Impulserhaltung ergeben sich zwei Gleichungen: parallel zur Stoßrichtung

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cos \vartheta + mv \cos \varphi \quad (3.7)$$

und senkrecht zur Stoßrichtung

$$0 = \frac{h\nu'}{c} \sin \vartheta + mv \sin \varphi. \quad (3.8)$$

Aus den Gleichungen (3.7) und (3.8) wird φ durch Quadrieren und Addieren eliminiert:

$$\left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 - 2\frac{h^2\nu\nu'}{c^2} \cos \vartheta = m^2v^2$$

und nach einer Umformung:

$$\left(\frac{h\nu}{c} - \frac{h\nu'}{c}\right)^2 + 2\frac{h^2\nu\nu'}{c^2} (1 - \cos \vartheta) = m^2c^2\beta^2. \quad (3.9)$$

Der Ausdruck $m^2c^2\beta^2$ auf der rechten Seite von Gl. (3.9) kann auch aus der Gl. (3.6) abgeleitet werden:

$$m^2c^2\beta^2 = \frac{h^2(\nu - \nu')^2}{c^2} + 2hm_e(\nu - \nu').$$

Die Kombination mit der Gl. (3.9) ergibt dann für die Frequenzänderung:

$$\nu - \nu' = \frac{h\nu\nu'}{m_e c^2} (1 - \cos \vartheta),$$

woraus für ν' selbst folgt:

$$\nu' = \frac{\nu}{1 + \frac{h\nu}{m_e c^2} (1 - \cos \vartheta)}. \quad (3.10)$$

Die Frequenzänderung $\nu - \nu'$ wächst mit wachsender Photonenenergie $h\nu$ und mit wachsendem Streuwinkel ϑ . Ihren maximalen Wert nimmt sie bei der Rückstreuung ($\vartheta = 180^\circ$). Bei sehr kleinen Photonenenergien $h\nu \ll m_e c^2$ ändert sich die Frequenz bei der Streuung nicht — die Streuung geht über in die elastische Streuung.

Für die Wellenlängenänderung $\Delta\lambda$, die der Frequenzänderung $\nu - \nu'$ entspricht, folgt

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \vartheta) = \lambda_C (1 - \cos \vartheta),$$

dabei ist $\lambda_C = \frac{h}{m_e c} \approx 2,43$ pm die Compton-Wellenlänge. Es ist ersichtlich, dass die Wellenlängenänderung von der primären Wellenlänge unabhängig ist.

Der Ausdruck für den differentiellen Wirkungsquerschnitt der Compton-Streuung wurde 1929 von Klein und Nishina mit Hilfe der Quantenelektrodynamik berechnet:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2 \left(\frac{\nu}{\nu'} + \frac{\nu'}{\nu} - \sin^2 \vartheta\right)$$

oder

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} \frac{1 + \cos^2 \vartheta}{[1 + \alpha(1 - \cos \vartheta)]^2} \left(1 + \frac{\alpha^2(1 - \cos \vartheta)^2}{(1 + \cos^2 \vartheta)[1 + \alpha(1 - \cos \vartheta)]}\right), \quad (3.11)$$

wobei $\alpha = \frac{h\nu}{m_e c^2}$ das Verhältnis der Photonenenergie zur Elektronenruhemasse angibt. Die Abhängigkeit des Wirkungsquerschnittes $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ sowie der normierten Frequenz der gestreuten Strahlung $\frac{\nu'}{\nu}$ vom Streuwinkel bei unterschiedlichen α ist in Fig. 3.11 dargestellt.

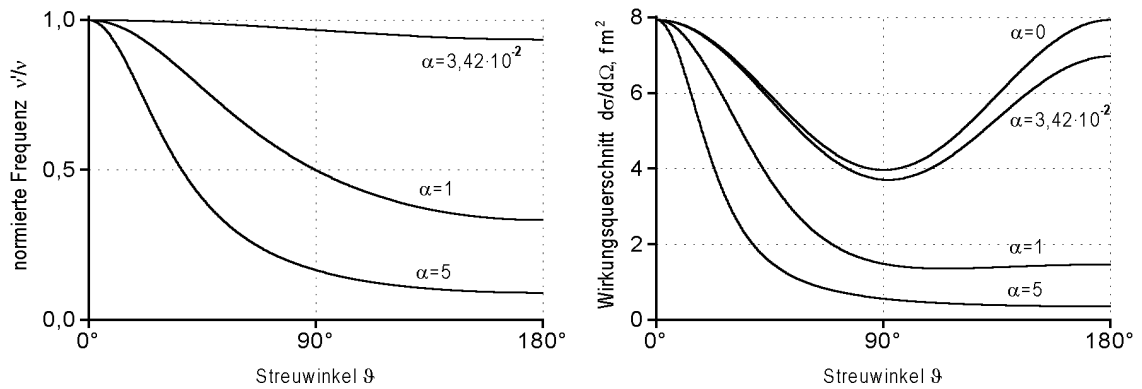


Fig. 3.11: Abhängigkeit der normierten Frequenz der gestreuten Strahlung $\frac{\nu'}{\nu}$ und des differentiellen Wirkungsquerschnittes $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ der Compton-Streuung vom Streuwinkel. Parameter $\alpha = \frac{h\nu}{m_e c^2}$: $\alpha = 0$ entspricht der Thomson-Streuung; bei $\alpha = 3,42 \cdot 10^{-2}$ gilt für die Photonenenergie $h\nu = 17,5$ keV (Molybdän $K\alpha$); bei $\alpha = 1$ gilt $h\nu = 511$ keV.

Der totale Wirkungsquerschnitt σ_C für Compton-Streuung (nach [51]) ergibt sich zu

$$\sigma_C = \frac{\sigma_T}{1 + 2\alpha},$$

wobei σ_T der Wirkungsquerschnitt für Thomson-Streuung ist.

Im Experiment werden die Compton-Streuung und die Rayleigh-Streuung häufig zusammen beobachtet. Der Anteil der Compton-gestreuten Photonen wächst mit steigender Strahlungsenergie, mit abnehmender Ordnungszahl des Elements des

Streukörpers (d.h. mit abnehmender Bindung der Elektronen im Atom) und mit wachsendem Streuwinkel [9].

Die unelastische Streuung herrscht vor, wenn die Energie der Röntgenstrahlung die Bindungsenergie der Elektronen wesentlich übersteigt. Bei der Bindungsenergien der Elektronen, die nah zur Strahlungsenergie kommen oder diese übersteigen, dominiert die elastische Streuung. Das Verhältnis zwischen Compton- und Rayleigh-Streuung ist in Tab. 3.1 für unterschiedliche Streuer angegeben³ (nach [1]).

Tab. 3.1: Verhältnis der Intensität der unelastischen Streuung zur Intensität der elastischen Streuung für unterschiedliche Streuer

Element	$J_{unelastisch}/J_{elastisch}$
${}_3Li$	alles unelastisch
${}_6C$	5,48
${}_{16}S$	1,91
${}_{26}Fe$	0,51
${}_{29}Cu$	0,21
${}_{82}Pb$	≈ 0

Mit abnehmendem Streuwinkel ist der Anstieg der Intensität der elastisch-gestreuten Strahlung bei realen Streukörpern wesentlich höher als nach der Thomson-Formel (3.5) zu erwarten wäre. Die Ursache dafür liegt in der kohärenten Addition der Amplituden aller Elektronen im Atom [25]. Für $\vartheta \gg \vartheta_{grenz}$ wird der differentielle Querschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx Zr_e^2 \left(\frac{1 + \cos^2 \vartheta}{2} \right)$$

durch die Summe der Thomson-Streuung aller Elektronen im Atom repräsentiert.

Bei $\vartheta \ll \vartheta_{grenz}$ gilt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx Z^2 r_e^2 \left(\frac{1 + \cos^2 \vartheta}{2} \right).$$

Das heißt, die Intensität ist proportional zum *Quadrat* der Anzahl der streuenden Elektronen. Der Wert des Grenzwinkels ϑ_{grenz} ist

$$\vartheta_{grenz} \sim \frac{\sqrt[3]{Z}}{h\nu}$$

($h\nu$ wird in keV angegeben).

³ Die Literaturquelle gibt die Energie der Primärstrahlung nicht an. Vermutlich geht es um die Molybdän- $K\alpha$ -Linie bei $E = 17,48$ keV und den Streuwinkel $\vartheta = 90^\circ$.

3.3.4 Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen

Jetzt wird der Fall behandelt, dass der Streukörper ein Einkristall ist. Die allgemeinen Überlegungen der zwei obigen Abschnitte treffen auch hier zu: an Elektronen des Streukörpers wird die Strahlung in alle Richtungen elastisch (Rayleigh-) sowie unelastisch (Compton-) gestreut. Da jetzt die streuenden Elektronen an den regelmäßig angeordneten Atomen lokalisiert sind, können unter bestimmten Bedingungen die an verschiedenen Kristallgitter-Punkten *kohärent* gestreuten Wellen konstruktiv miteinander interferieren. Somit stimmt die Winkelabhängigkeit der Intensität der Rayleigh-gestreuerten Strahlung⁴ nicht mit Gl. 3.5 überein: die primäre Röntgenstrahlung wird am Kristall nur in bestimmte Richtungen *gebeugt*.

Die Möglichkeit der Beugung der Röntgenstrahlen an Kristallen wurde 1912 von M. v. Laue erkannt [19]. Das Experiment brachte gleichzeitig die Erkenntnis über die Wellennatur der Röntgenstrahlung und die Bestätigung der Raumgitterstruktur kristalliner Stoffe.

Nach der Auffassung von Laue werden alle einzelnen Atome der Kristallgitter als Quellen sekundärer Wellen betrachtet. Für einen Röntgenstrahl, der unter den Winkeln $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1$ zu den Achsen eines kubischen Kristalls einfällt und unter den Winkeln $\alpha_2, \beta_2, \gamma_2$ gebeugt wird, lautet die Laue-Bedingung für konstruktive Interferenz:

$$\begin{cases} a \cdot \cos \alpha_1 - a \cdot \cos \alpha_2 = h \cdot \lambda \\ a \cdot \cos \beta_1 - a \cdot \cos \beta_2 = k \cdot \lambda \\ a \cdot \cos \gamma_1 - a \cdot \cos \gamma_2 = l \cdot \lambda. \end{cases}$$

Dabei ist a der Abstand zwischen den Zellen der Kristallgitter; λ ist die Wellenlänge der Strahlung; h, k, l sind ganzzahlige erweiterte Millersche Indizes. Da die h, k, l kleine ganze Zahlen sind, kann die Laue-Bedingung nur für bestimmte Wellenlängen λ erfüllt sein.

Eine andere Auffassung für die Behandlung der Beugung der Röntgenstrahlen an Kristallen wurde 1913 von W.H. und W.L. Bragg vorgeschlagen [11]. Danach wird ein Kristall als ein Stapel parallel zueinander angeordneter Netzebenen betrachtet. Die Atome im Kristall können zu vielen verschiedenen Netzebenen zusammengefasst

⁴ Da die Strahlung bei der Compton-Streuung eine winkelabhängige Frequenzänderung erfährt und nicht kohärent ist, kann mit ihr keine Interferenz statt finden.

werden, die sich in der „Dichte der Packung“ und im Netzebenenabstand voneinander unterscheiden.

Um konstruktiv zu interferieren, müssen die Röntgenstrahlen in dieser Auffassung zwei Bedingungen erfüllen:

$$\text{Einfallswinkel } \alpha_1 = \text{Ausfallswinkel } \alpha_2 = \alpha$$

und

$$n \cdot \lambda = 2 \cdot d \cdot \sin \alpha, \quad (3.12)$$

wobei d der Netzebenenabstand und die Beugungsordnung n eine ganze Zahl ist.

Zur Herleitung der Gl. (3.12) müssen die an zwei Netzebenen gestreuten Strahlen betrachtet werden. In Fig. 3.12 (a) sind die einfallenden Strahlen mit 1 und 2 und die gestreuten mit 1' und 2' bezeichnet. Die Strahlen 1' und 2' interferieren konstruktiv miteinander, wenn der Gangunterschied $\Delta L = AB + BC$ einem ganzzahligen Vielfachen der Wellenlänge entspricht. Da der Winkel $\angle ADB = \angle BDC = \alpha$ ist, wird der Gangunterschied zu $\Delta L = 2d \sin \alpha$.

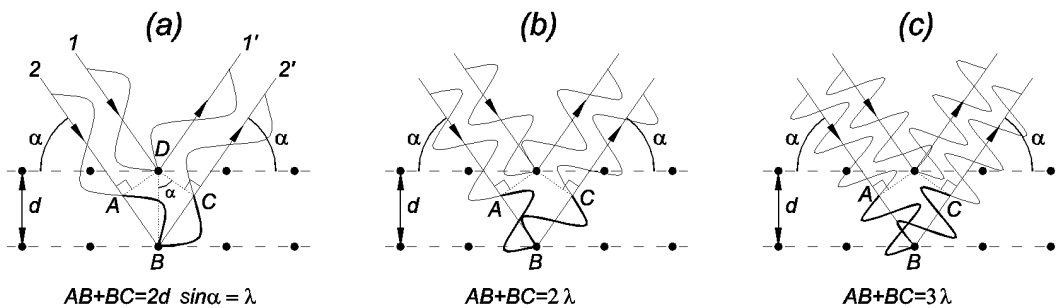


Fig. 3.12: Schematische Darstellung der Bragg-Reflexion und Herleitung der Bragg-Bedingung. (a): erste Beugungsordnung ($n = 1$); (b): zweite Beugungsordnung ($n = 2$); (c): dritte Beugungsordnung ($n = 3$).

In Fig. 3.12 ist die Situation für drei Beugungsordnungen skizziert: Teilbild (a) entspricht der ersten Beugungsordnung $\Delta L = 1 \cdot \lambda$, (b) — der zweiten $\Delta L = 2 \cdot \lambda$ und (c) — der dritten Beugungsordnung $\Delta L = 3 \cdot \lambda$.

In der Tat liefern die Auffassungen von Laue und Bragg nur *unterschiedliche Beschreibungen* desselben Prozesses und können eine aus der anderen abgeleitet werden.

3.4 Detektoren für Röntgenstrahlen

Die Hauptfunktion der Detektoren ist die Umwandlung der Energie der Röntgenphotonen in eine Form, die durch visuelle Beobachtung oder elektronische Messung erfasst werden kann. Sie müssen es gestatten, die Intensität und evtl. die Energie der Röntgenstrahlen quantitativ zu messen. Es gibt viele unterschiedliche Detektorarten, die alle im wesentlichen auf der ionisierenden Wirkung der Röntgenstrahlen basieren.

3.4.1 Fotografische Emulsionen

Röntgenstrahlen setzen durch einen Ionisationsprozess metallisches Silber aus Silberhalogeniden ab. Die in einem bestimmten zeitlichen Intervall integrierte Intensität der Röntgenstrahlung kann durch die Schwärzungsstärke des Filmes abgeschätzt werden.

Dies ist das älteste und einfachste Verfahren zum Nachweis der Röntgenstrahlen, das auch heutzutage in kristallographischen Anwendungen eingesetzt wird. Allerdings ist das Verfahren unbequem und hat eine hohe Ungenauigkeit bei der Messung der Intensität.

3.4.2 Ionisationskammer

Die Ionisationskammer ist ein Gerät, das die durch Röntgenstrahlen verursachte Ionisation im Messvolumen quantitativ bestimmen lässt. Sie besteht im wesentlichen aus einem mit Gas gefüllten Gefäß, in dem die Elektroden eines Platten- oder Zylinderkondensators angebracht sind. An die Elektroden wird eine hohe elektrische Gleichspannung (sog. Saugspannung) angelegt, so dass die im Gas durch Röntgenstrahlen gebildeten Ladungsträger zu den Elektroden wandern. Der damit erzeugte elektrische Strom dient als Maß für die Intensität der Röntgenstrahlung. Die Saugspannung wird so hoch gewählt, dass alle im Gasvolumen gebildete Ladungsträger zu den Elektroden geleitet werden, bevor sie durch Wechselwirkungsprozesse mit dem Gas oder den Kammerwänden verloren gehen.

Ionisationskammern wurden Anfang des 20. Jahrhunderts als Detektoren für Röntgenstrahlen benutzt, nachdem es 1896 J. Perrin gelang, mit einer solchen Kam-

mer die Intensität der Röntgenstrahlung zu messen.

3.4.3 Gas-Proportionalzähler und Geiger-Müller-Zähler

Ein gasgefüllter Detektor besteht im wesentlichen aus einem metallischen Zylinder mit einem axial geführten dünnen Draht (vgl. Fig. 3.13). Dieser Zähl draht ist mit einer hohen Spannung verbunden (bis ca. 2 kV gegenüber dem geerdeten Gehäuse) und stellt die Anode des Detektors dar. Der metallische Mantel dient als Kathode.

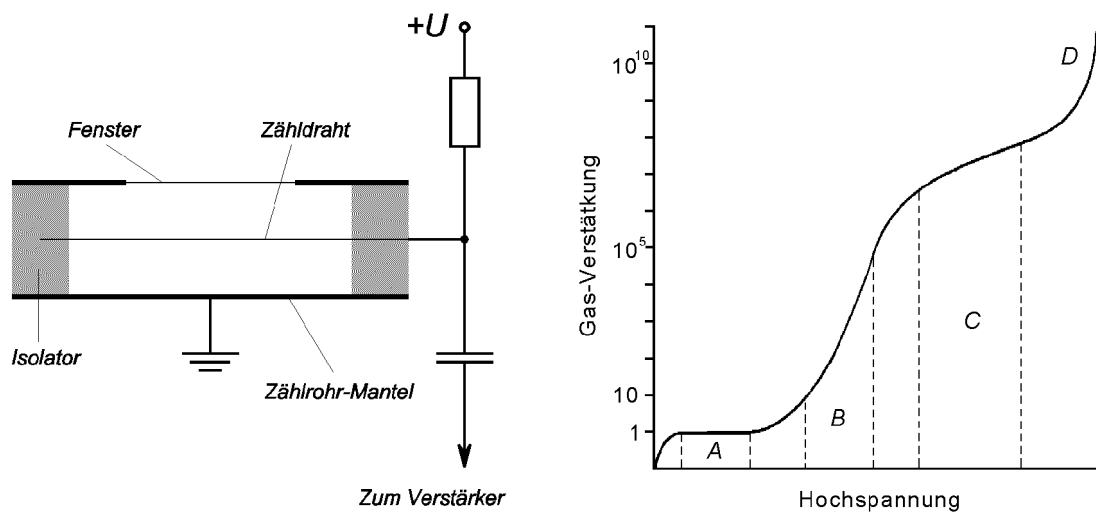


Fig. 3.13: Schematische Darstellung des Aufbaus eines gasgefüllten Detektors und Gas-Verstärkung des Detektors in Abhängigkeit von der angelegten Spannung. Abhängig von der Gas-Verstärkung unterscheidet man drei Arbeitsbereiche eines gasgefüllten Detektors: *A* – Ionisationskammer-Bereich, *B* – Proportionalzähler-Bereich und *C* – Geigerzähler Bereich. Im Bereich *D* zündet Gasentladung.

Der Detektor ist üblicherweise mit einem Edelgas oder einem Gasgemisch bei einem Druck von 0,1 bis 1 bar gefüllt. Das dünne Eintrittsfenster kann, abhängig von Verwendungszweck, sowohl seitlich als auch am Ende des Zylinders angebracht sein.

Die Funktionsweise des Detektors basiert auf der Ionisierung des Füllgases durch Röntgenstrahlen. Die im Gas beim Durchgang eines Röntgenphotons gebildeten Elektronen werden zur Anode (Zähl draht) angezogen. Im starken elektrischen Feld um den Draht werden die Elektronen beschleunigt, so dass sie auch weitere Ionisation des Gases hervorrufen können. Schließlich werden alle erzeugten Elektronen von

der Anode gesammelt und bilden im den Auskopplungskondensator einen kurzen Impuls, der von der nachfolgenden Elektronik verstärkt und erfasst wird.

Die Höhe der im Detektor stattfindenden Gas-Verstärkung und somit die Eigenschaften des Ausgangssignales hängen von der angelegten Hochspannung ab [9]. Im Bereich (A) in Fig. 3.13 ist das elektrische Feld im Detektor ausreichend, um die ganze erzeugte Ladung einzusammeln, bevor sie durch Rekombination abgebaut wird. Die sekundäre Ionisation findet allerdings noch nicht statt — die Gas-Verstärkung liegt bei 1 und bleibt konstant über einen beträchtlichen Spannungsbereich. In diesem Bereich werden die Ionisationskammern betrieben.

Im Bereich (B) in Fig. 3.13 ist die Spannung hoch genug, um eine erhebliche sekundäre Ionisation zuzulassen. Jedes durch Röntgenstrahlung erzeugte Elektron ruft bei seiner Beschleunigung eine Elektronenlawine hervor, die Gas-Verstärkung steigt bis $10^2 - 10^5$. Die Lawinen sind um die Anode in einem Volumen lokalisiert, dessen Durchmesser einige Zähl drahtdurchmesser beträgt, und wechselwirken nicht miteinander. Die Amplitude des Ausgangsimpulses unter diesen Bedingungen ist proportional zur Energie des einfallenden Röntgenphotons.

Die für den Einsatz in diesem Bereich entwickelten Detektoren heißen Gas-Proportionalzähler. Mit ihnen kann die Energieauflösung $\Delta E_{Gas} \approx 0,9$ keV (Halbwertsbreite) für die $Fe K\alpha$ -Linie ($E = 6,4$ keV) erreicht werden [67]. Die Amplituden ihrer Ausgangsimpulse haben eine Größenordnung von wenigen Millivolt und müssen weiter verstärkt werden.

Bei einem weiteren Anstieg der Hochspannung können Gas-Verstärkungen von 10^8 und mehr erreicht werden (vgl. Bereich (C) in Fig. 3.13). Allerdings sind die Ausgangspulse nicht mehr zur Energie des Röntgenphotons proportional, da jede Ionisation eine Gasentladung in der Röhre hervorruft. In diesem Bereich arbeiten die Geiger-Müller-Zähler.

Die Geiger-Müller-Zähler haben einige praktische Vorteile. Zu einem brauchen sie zum Betrieb keine teuren stabilisierten Hochspannungsnetzgeräte. Zweitens ist die Ausgangssignalamplitude hoch genug (ca. 1 V), um ohne Verstärker zu arbeiten. Außerdem können diese Zähler wegen niedrigerer Anforderungen an die Feldhomogenität mechanisch einfach und robust aufgebaut werden.

Schließlich führt die Zunahme der Hochspannung zur Zündung einer selbststän-

digen Gasentladung im Detektor (vgl. Bereich (D) in Fig. 3.13). In diesem Bereich sind keine Messungen möglich.

3.4.4 Szintillationszähler

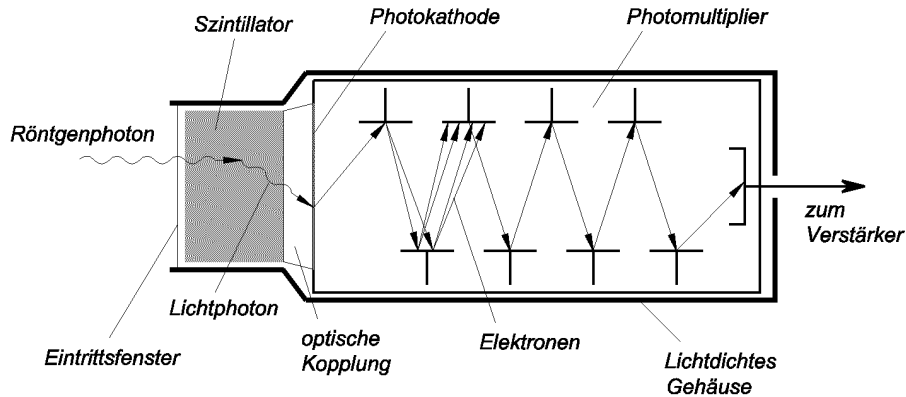


Fig. 3.14: Schematische Darstellung des Szintillationszählers.

Der Szintillationszähler besteht aus zwei wesentlichen Komponenten (vgl. Fig. 3.14):

1. aus einem Szintillator-Kristall, der wandelt die Energie des ankommenden Röntgenphotons in eine Serie von Lichtimpulsen der Energie von ca. 3 eV um, und
2. einem Fotomultiplier, der verwandelt diese Lichtimpulse in die Spannungsimpulse, die elektronisch weiterverarbeitet werden können.

Der Szintillator ist üblicherweise ein Alkali-Chalogenid-Kristall, aktiviert mit Thallium oder Europium (z.B. $NaI(Tl)$) [67]. Beim Passieren eines Röntgenphotons durch einen solchen Szintillator werden durch Energieübertrag Elektronen ins Leitungsband gehoben, während im Valenzband Löcher erzeugt werden. Durch Einfangen der frei beweglichen Löchern und Elektronen von den Aktivator-Atomen werden diese angeregt, und emittieren beim Übergang in den Grundzustand Licht mit Wellenlängen von etwa 410 nm (für $NaI(Tl)$ -Szintillator). Das emittierte Licht gelangt durch optische Kopplung auf die Fotokathode eines Fotomultipliers und löst dort Elektronen aus.

Der Multiplier besteht aus ca. 10 hintereinander angeordneten Elektroden (Dynoden), zwischen denen eine Spannung von je ca. 100 V anliegt. Ein aus der Foto-

kathode ausgelöstes Elektron wird zur ersten Dynode beschleunigt und schlägt dort einige sekundäre Elektronen heraus, die wiederum aus der zweiten Dynode weitere Elektronen freisetzen. Insgesamt wird im Fotomultiplier der Elektronenimpuls auf etwa das 10^6 -fache verstärkt.

Wenn die an den Fotomultiplier angelegte Spannung konstant bleibt, ist die Ausgangssignalamplitude proportional zur Energie des Röntgenphotons. Die Energieauflösung eines Szintillationszähler beträgt $\Delta E_{Szint} \approx 3,3$ keV (Halbwertsbreite) für die $Fe K\alpha$ -Linie ($E = 6,4$ keV). Somit ist sie wesentlich schlechter als der Wert $\Delta E_{Gas} \approx 0,9$ keV, der mit einem Gas-Proportionalzähler erreicht werden kann.

3.4.5 Halbleiterdetektoren

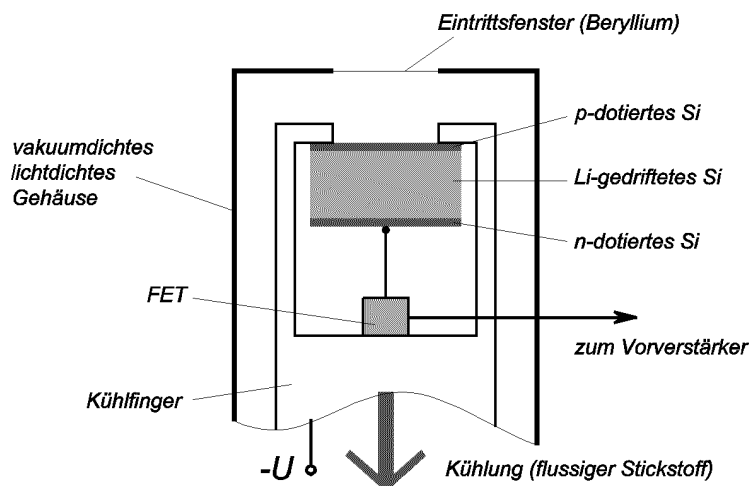


Fig. 3.15: Schematische Darstellung des Si(Li)-Detektors.

Dieser Abschnitt ist den „klassischen“ Halbleiterdetektoren wie dem Si(Li)-Detektor (*lithium-drifted silicon detector*), dem Ge(Li)-Detektor oder dem Hochrein-Germanium-Detektor (*ultra high purity germanium detector*) gewidmet. Ihre Funktionsweise wird am Beispiel des Si(Li)-Detektors erläutert.

Der prinzipielle Aufbau eines Si(Li)-Detektors ist in Fig. 3.15 dargestellt. Der Kern des Detektors ist ein Silizium-Kristall, in dem die vorhandenen Störstellen durch Eindiffundieren von Lithium-Atomen neutralisiert sind. Nach diesem Prozess wird der Kristall zu einem störstofffreien intrinsischen Halbleiter mit sehr hohem

spezifischem Widerstand. Die Flächen des Kristalls werden *p*- bzw. *n*-dotiert und mit Gold-Elektroden (Dicke etwa 20 nm) versehen [9].

Elektrisch stellt der Detektor eine Silizium P-I-N Diode mit einem breiten intrinsischen Bereich von 2 bis 5 mm dar. Im Betrieb wird an diese Diode eine Sperrspannung von 300 bis 900 V angelegt. Da die Lithium-Atome leicht beweglich sind, kann der Detektor allerdings nur bei Temperaturen von flüssigem Stickstoff betrieben werden, um ihr Diffundieren unter Einfluss der angelegten Spannung zu verhindern.

Auf den Kühlfinger neben dem Si(Li)-Kristall ist auch der Feldeffekt-Transistor (FET) montiert, der die erste Stufe des Vorverstärkers bildet. Die gekühlten Teile sind in ein evakuiertes lichtdichtes Gehäuse mit einem dünnen Beryllium-Fenster für die einfallenden Röntgenstrahlen eingebaut.

Das Funktionsprinzip des Detektors kann wie folgt beschrieben werden. Ein einfallendes Röntgenphoton wird im Detektor absorbiert und löst dabei ein schnelles Photoelektron aus. Dieses Elektron verliert seine Energie in Stößen mit Atomen im Kristall, wobei die Atome ionisiert werden und somit Elektron-Loch-Paare entstehen. Durch das angelegte elektrische Feld werden die Elektronen und die Löcher auseinander gezogen und an den Elektroden gesammelt, bevor sie rekombinieren können.

Im Silizium wird eine mittlere Energie von $\epsilon \approx 3,81$ eV gebraucht, um ein Elektron-Loch-Paar zu erzeugen [58]. Somit beträgt die an der Kathode gesammelte mittlere Ladung nach der Absorption eines *Fe K α* -Photons ($E = 6398$ eV) nur $N = E/\epsilon \approx 1679$ Elektronen oder etwa 10^{-16} Coulomb. Es ist ersichtlich, dass die Ladung zur Energie des einfallenden Photons proportional ist. Allerdings ist dieses Signal außerordentlich klein und muss vielfach mit einem sehr rauscharmen linearen Verstärker elektronisch verstärkt werden.

Die Anzahl der im Detektor von Röntgenphotonen bestimmter Energie erzeugten Elektronen unterliegt statistischen Schwankungen. Die Standardabweichung von der mittleren Anzahl N ist mit

$$\sigma_N = \sqrt{FN}$$

gegeben, mit dem *Fano-Faktor* $F < 1$. Der Fano-Faktor berücksichtigt die bei der Erzeugung von Elektron-Loch-Paaren im Kristall ablaufenden Prozesse, die eine kleinere Abweichung zufolge haben, als nach der Poisson-Statistik ($\sigma_N = \sqrt{N}$) zu

erwarten wäre. Für Si(Li)-Detektoren ist $F \approx 0,11$, Germanium-Detektoren haben $F \approx 0,13$ [58].

Die Standardabweichung σ_E bei der Messung der Energie der Röntgenphotonen wird aus einem durch Ionisation hervorgerufenen Anteil $\sigma_{ionisation} = E \cdot \sigma_N/N$ und aus einem von dem elektronischen Rauschen des Verstärkers verursachten Anteil σ_{el} zusammengesetzt:

$$\sigma_E^2 = \sigma_{el}^2 + \sigma_{ionisation}^2$$

$$\sigma_E = \sqrt{\sigma_{el}^2 + \epsilon F E}$$

Die Energieauflösung eines Si(Li)-Detektors für die $Fe K\alpha$ -Linie ($E = 6,4$ keV) beträgt $\Delta E_{Si(Li)} \approx 0,16$ keV (Halbwertsbreite) [67]. Somit ist sie wesentlich besser als $\Delta E_{Gas} \approx 0,9$ keV und $\Delta E_{Szint} \approx 3,3$ keV, die mit einem Gas-Proportionalzähler bzw. mit einem Szintillatorzähler erreicht werden können.

3.4.6 Andere Detektoren

In diesem Abschnitt wird ein kurzer Überblick über andere Detektoren für Röntgenstrahlen gegeben, die zurzeit eingesetzt bzw. entwickelt werden (nach [64]).

Gas proportional scintillation counters (GPSC) sind wie die Gas-Proportionalzähler auf der Ionisation des Gases durch Röntgenstrahlen basiert. Allerdings werden die erzeugten Elektronen anders nachgewiesen: sie driften unter dem Einfluss eines schwachen elektrischen Feldes aus dem Absorptionsbereich in den Szintillationsbereich, in dem ein etwas größeres Feld herrscht, so dass die Elektronen die Gasatome anregen — aber nicht ionisieren — können. Die angeregten Atome (Xe) emittieren Photonen ($\lambda \approx 180$ nm), die von einem Photomultiplier nachgewiesen werden. Pro Primärelektron können bis zu 500 Szintillations-Photonen entstehen.

Mit einem GPSC lässt sich eine Energieauflösung erreichen, die etwa 1,75-mal besser als bei einem Gas-Proportionalzähler ist: $\Delta E_{GPSC} \approx 0,5$ keV für die $Fe K\alpha$ -Linie ($E = 6,4$ keV). Ihren Einsatz finden die GPSCs in tragbaren Geräten, die bei Raumtemperatur arbeiten und auch in Fällen, wenn sehr weiche Röntgenstrahlung registriert werden soll oder ein Detektor mit großer Aktivfläche benötigt wird.

Ein PIN-Detektor basiert auf einer Silizium PIN-Diode und funktioniert wie ein Si(Li)-Detektor. Die PIN-Detektoren brauchen keinen flüssigen Stickstoff zur Kühlung — sie werden mit Peltier-Elementen gekühlt. Allerdings können die Röntgenstrahlen mit $E > 10$ keV mit ihnen schlechter nachgewiesen werden, weil sie nur ca. 0,5 mm dick sind, auch die messbaren Zählraten sind kleiner als bei Si(Li)-Detektoren.

Die Energieauflösung von PIN-Detektoren ist fast genauso gut, wie von Si(Li)-Detektoren: $\Delta E_{PIN} \approx 0,18$ keV für die $Fe K\alpha$ -Linie ($E = 6,4$ keV). Wegen ihres kompakten Aufbaus werden sie oft in „hand-held“-Analysatoren eingesetzt; auch in der Raumfahrt finden sie Anwendung.

Ein Silizium Drift-Detektor hat die Struktur einer doppelseitigen Diode, so dass bei der Trennung der durch Röntgenstrahlen erzeugten Elektronen-Loch Paare die Elektronen vorerst nicht an einer Seite, sondern in der mittleren Ebene des Silizium-Chips gesammelt werden. Unter dem Einfluss eines parallel zur Detektor-Oberfläche gerichteten elektrischen Feldes driften die Elektronen zu der kleinen Anode. Durch Minimierung der Anodenfläche und Integrieren des Feldeffekt-Transistors in den Chip wird das elektronische Rauschen wesentlich reduziert.

Drift-Detektoren können bei Raumtemperatur arbeiten oder mit einem Peltier-Kühler versehen werden. Bei -10°C kann die Energieauflösung der $Fe K\alpha$ -Linie ($E = 6,4$ keV) $\Delta E_{Drift} \approx 0,14$ keV betragen. Drift-Detektoren werden ähnlich wie die PIN-Detektoren eingesetzt.

Superconducting Tunnel Junctions (STJ) bestehen aus zwei Schichten eines supraleitenden Metalls (Dicke $< 1 \mu\text{m}$), die durch eine 1–2 nm dicke Isolatorschicht getrennt sind. Der durch die Isolatorschicht fließende Tunnelstrom ist zur Anzahl der durch Röntgenstrahlen erzeugten Quasipartikel proportional. Zur Erzeugung einer Signal-Ladung wird eine Energie von $\epsilon \sim 1$ meV benötigt — die theoretisch erreichbare Energieauflösung ist damit sehr gut.

In der Praxis wurde mit den STJs die Energieauflösung $\Delta E_{STJ} \approx 30$ eV für die $Fe K\alpha$ -Linie ($E = 6,4$ keV) erreicht. Allerdings funktionieren diese Detektoren nur bei Temperaturen ~ 1 K.

Cryogenic Microcalorimeters weisen die Temperaturänderung nach, die durch Absorption eines Röntgenphotons entsteht. Diese Temperaturänderungen sind außerordentlich klein. Um sie messen zu können, müssen die Absorber ein kleines Volumen haben (um 10^{-3} mm^3) und die Arbeitstemperatur muss bis $\sim 10 \text{ mK}$ reduziert werden. Unter diesen Bedingungen lässt sich aber die Energieauflösung von $\Delta E_{MC} \approx 4,3 \text{ eV}$ für $E = 6 \text{ keV}$ erreichen.

3.5 Möglichkeiten der Röntgenspektromaufnahme

Es werden zwei Methoden für Aufnahme von Röntgenspektren eingesetzt: basierend auf der Wellenlängen-Dispersion (WDS = Wavelength-Dispersive Spectroscopy) und auf der Energie-Dispersion (EDS = Energy-Dispersive Spectroscopy).

Kristall-Dispersion. Die Idee, einen Kristall zur Auswahl bestimmter Wellenlängen im Röntgenbereich einzusetzen, geht auf W.L. und W.H. Bragg zurück, die 1913 das erste Röntgenspektrometer gebaut haben. Diese Methode wird häufig als „Bragg-Methode“ oder „Drehkristallmethode“ bezeichnet. Der entsprechende Aufbau zur Aufnahme des Spektrums einer Röntgenquelle ist in Fig. 3.16 skizziert.

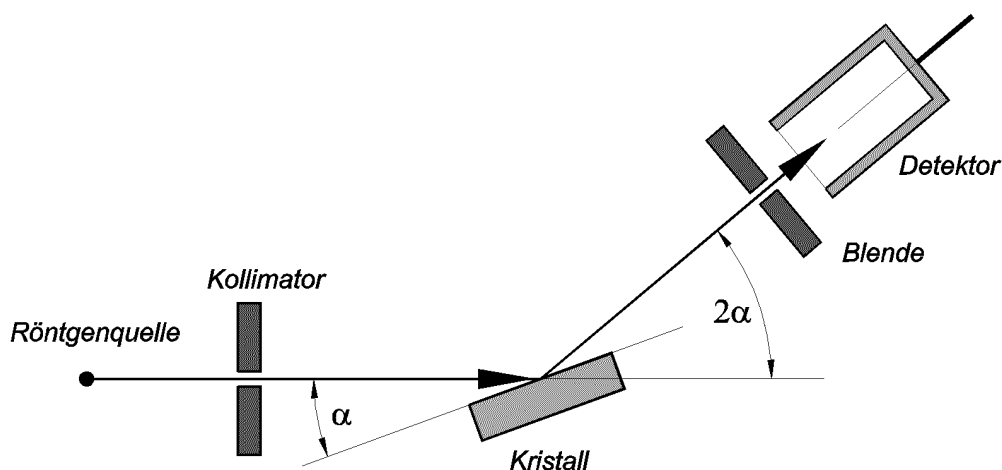


Fig. 3.16: Schematischer Aufbau zur Aufnahme eines Röntgenspektrums nach der Bragg-Methode (Wellenlängen-Dispersion).

Der Einkristall wird so geschnitten, dass seine Oberfläche parallel zu einer ausgewählten Netzebenenschar verläuft. Durch den Kollimator fällt auf den Kristall

unter dem Winkel α ein schmales Bündel der Röntgenstrahlung aus der Quelle. Der Detektor mit der Blende wird unter dem Winkel 2α zur Richtung des Primärstrahls eingestellt (Fig. 3.16). Dadurch wird die Bedingung der Bragg-Reflexion *Einfallswinkel = Ausfallswinkel* erfüllt und die Röntgenstrahlen werden in den Detektor reflektiert. Die Reflexion findet aber selektiv statt: die Wellenlänge der reflektierten Strahlung ist durch

$$n \cdot \lambda = 2 \cdot d \cdot \sin \alpha$$

gegeben, wobei d der Netzebenenabstand und n die Beugungsordnung ist.

Bei der Spektromaufnahme werden der Kristall und der Detektor synchron in kleinen Winkelschritten verstellt, wobei der Detektor immer unter dem zweifachen Kristallwinkel α zum Primärstrahl steht. Damit wird vom Detektor die Intensität der Strahlung mit der durch den Kristall ausgewählten Wellenlänge λ erfasst. Das Auftragen der gemessenen Intensitäten gegen der Wellenlänge ergibt das Spektrum der Röntgenquelle.

Energie-Dispersion. Die energiedispersive Methode der Spektromaufnahme basiert auf der Vermessung der Energien der ankommenden Röntgenphotonen in einem energieauflösenden Detektor (z.B. Si PIN-Detektor). Der benötigte Aufbau ist ganz einfach: der Detektor wird direkt der Strahlung der zu vermessenden Röntgenquelle ausgesetzt (vgl. Fig. 3.17).

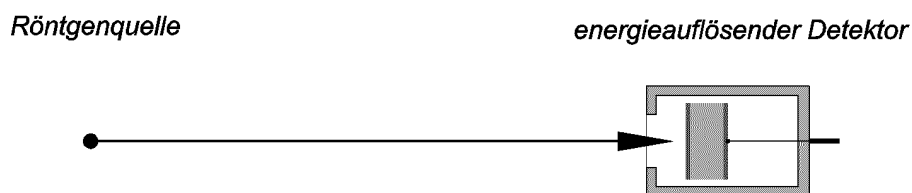


Fig. 3.17: Schematischer Aufbau zur Aufnahme eines energiedispersiven Röntgenspektrums.

Die Amplitude des vom Detektor ausgegebenen Impulses ist zur Energie des registrierten Photons proportional. Zur Erzeugung des Spektrums muss die Amplitudenverteilung dieser Impulse gefunden werden. Dafür wird ein Vielkanal-Analysator eingesetzt.

Bei der Vielkanal-Analyse wird der volle Bereich der Impulsamplituden $[0, A_{max}]$ in N Kanäle gleicher Breite $\Delta A = A_{max}/N$ geteilt. Ein Impuls mit der Amplitude A wird dem Kanal i zugeordnet, wenn

$$\Delta A \cdot (i - 1) < A < \Delta A \cdot i.$$

Nach der Vollendung der Aufnahme enthält damit der Kanal i eines energiedispersiven Spektrums die Anzahl der Impulse, deren Amplitude die obige Bedingung erfüllt hat.

Nachdem die Energiekalibrierung durchgeführt worden ist, die ein linearer Zusammenhang $E_i = f(i)$ zwischen der Energie der Photonen und der Kanalnummer festlegt, bekommt man ein Spektrum, das die Abhängigkeit der Intensität von der Energie wiedergibt.

Vergleich der Methoden. Da die beiden Methoden der Röntgenspektromaufnahme auf unterschiedlichen Prinzipien basiert sind, gibt es auch grundlegende Unterschiede in den mit ihnen gewonnenen Spektren und im Verlauf der Aufnahme. Die wichtigsten Unterschiede sind in Tab.3.2 zusammengeführt.

Tab. 3.2: Vergleich der Methoden der Röntgenspektromaufnahme: Wellenlängen-Dispersion vs. Energie-Dispersion

Wellenlängen-Dispersion	Energie-Dispersion
Das Spektrum ist in der Form $J_\alpha(\alpha)$ aufgenommen, $J_\alpha = 2d \cdot \cos \alpha \cdot J_\lambda$. Für kleine Winkel gilt $J_\alpha \approx 2d \cdot J_\lambda$. Dabei sind J_α und J_λ die auf gleiche Winkelintervalle bzw. Wellenlängenintervalle reduzierte Strahlungsstärke, d ist der Netzebenenabstand des Kristalls.	Das Spektrum ist in Form $J_E(E)$ aufgenommen. Dabei ist J_E die auf gleiche Energieintervalle reduzierte Strahlungsstärke.
Das Spektrum wird Punkt für Punkt aufgenommen, der Bereich ist durch den Anfangs- und den Endwinkel des Kristalls gegeben. Oft sind lange Messzeiten nötig.	Das volle aus der Quelle emittierte Spektrum wird gleichzeitig erfasst. Gewöhnlich kürzere Messzeiten.
Bessere Auflösung möglich, besonders bei der charakteristischen Strahlung der leichten Elemente.	
Spektren sind durch Überlagerung verschiedener Beugungsordnungen teilweise nicht eindeutig.	Spektren sind von der Überlagerung verschiedener Beugungsordnungen frei.
Zur Spektromaufnahme ist ein anspruchsvolles Goniometer nötig.	Einfacher Experimentaufbau.

4. RÖNTGENSTRAHLEN IM PHYSIKUNTERRICHT: OBJEKT UND INSTRUMENT

4.1 Richtlinien und Lehrpläne

4.1.1 Allgemeine Ziele des Physikunterrichts der Oberstufe

Der Bildungsauftrag der gymnasialen Oberstufe (am Beispiel des Landes Nordrhein-Westfalen [41]) lässt sich mit zwei Stichpunkten beschreiben: die Vermittlung einer wissenschaftspropädeutischen Ausbildung und die Hilfe zur persönlichen Entfaltung in sozialer Verantwortlichkeit. Voraussetzung für das Gelingen dieses Bildungsprozesses ist laut dem KMK-Beschluss vom 25.02.1994 die Festigung „einer vertieften allgemeinen Bildung mit einem gemeinsamen Grundbestand von Kenntnissen und Fähigkeiten, die nicht erst in der gymnasialen Oberstufe erworben werden sollen“. Auch die Erreichung der Studierfähigkeit durch das Auseinandersetzen mit „einem Gefüge von Aufgabenfeldern, fachlichen und überfachlichen Themen, Gegenständen, Arbeitsweisen und Lernformen“ ([41], S. XI) wird in den Richtlinien betont.

Die Ziele des Physikunterrichts für nordrhein-westfälische Schulen sind in den Richtlinien für das Fach Physik (Sekundarstufe I für das Gymnasium in NRW [40], S. 32) genannt:

- die Schülerinnen und Schüler sollen Gegebenheiten aus Natur und Technik wahrnehmen und beschreiben, sie physikalisch angemessen erklären und deuten, sowie Zusammenhänge zwischen ihnen herstellen;
- die Schülerinnen und Schüler sollen Interesse für Naturvorgänge und für physikalisch-technische Fragestellungen entwickeln, physikalische Denk- und Sicht-

weisen aufbauen und zu selbstständigem Handeln fähig werden;

- die Schülerinnen und Schüler sollen in zunehmendem Maße urteils- und handlungsfähig werden in Bezug auf die Auswirkungen physikalisch-technischer Anwendungen und sollen die Bereitschaft entwickeln, Verantwortung für Natur und Umwelt zu übernehmen.

Der Physikunterricht der gymnasialen Oberstufe führt die Aufgaben und Ziele des Unterrichts der Sekundarstufe I fort. „Er integriert und vertieft dort begonnene Konzepte, erweitert und intensiviert die quantitative Erfassung physikalischer Phänomene, präzisiert Modellvorstellungen, thematisiert Modellbildungsprozesse, führt hin zu umfangreicherer Theoriebildung und berücksichtigt verstärkt wissenschaftstheoretische und philosophische Aspekte“ ([41], S. 5). Folgende Aspekte und Schwerpunkte werden dabei unter anderem vor dem Hintergrund der Studierfähigkeit, der allgemeinen Bildung und des Erwerbs von in beruflichen Bereichen oder Situationen anwendbaren Kenntnissen und Fähigkeiten gesetzt [41]:

- die Erarbeitung, Nutzung und Reflexion von physikalischen Erkenntnissen und Methoden, durch die die Schüler Einblick in die Wissenschaft Physik gewinnen;
- die Erarbeitung grundlegender Vorstellungen des naturwissenschaftlichen Weltbildes;
- die Ermöglichung der Erkenntnis, auf welche Weise und mit welchen Folgen Naturwissenschaften und Technik unser Leben beeinflussen;
- die Leistung eines Beitrags zur Wissenschaftspropädeutik durch den fachspezifischen Ansatz. Neben fachlichen Inhalten und Methoden werden grundlegende allgemeine Fähigkeiten entwickelt: sich informieren, recherchieren, experimentieren, analysieren, interpretieren, bewerten, referieren und diskutieren;
- die Leistung eines Beitrags zur Studierfähigkeit und zur allgemeinen Bildung.

Von größtem Interesse für die vorgestellte Arbeit ist, wie die Ziele des Physikunterrichts am Material der mit der Röntgenstrahlung verbundenen Phänomene realisiert werden.

4.1.2 Inhalte des Physikunterrichts

Dieser Abschnitt wendet sich den Inhalten des Physikunterrichts zu, mit denen die Ziele des Unterrichts erreicht werden können. Es werden hier die Themen besonderen Interesses für diese Arbeit behandelt, in denen auf den Einsatz von Röntgenstrahlung als Objekt des Unterrichts und als Instrument zur Gewinnung physikalischer Erkenntnisse zugegriffen wird.

Die Analyse der Lehrpläne verschiedener Bundesländer hat gezeigt, dass die Röntgenstrahlung in der Qualifikationsphase der Gymnasialen Oberstufe ein unabdingbarer Teil des Physikunterrichts ist. Es ist je nach Bundesland unterschiedlich in den Texten ausgearbeitet und erhält unterschiedliche Akzente. Die Lehrpläne einiger Bundesländer (z.B. Baden-Württemberg [36] und Brandenburg [38]) schlagen vor, alle wesentlichen Eigenschaften der Röntgenstrahlen im Unterricht zu erarbeiten.

Röntgenstrahlen werden in den Lehrplänen in folgenden Themen behandelt:

- elektromagnetische Schwingungen und Wellen,
- Einführung in die Quantenphysik,
- Grundlagen der Atomphysik,
- Medizinische und technische Anwendungen.

Im Themenkreis „Elektromagnetische Schwingungen und Wellen“ sollen die Schüler einen Einblick in die Entstehung und die Eigenschaften elektromagnetischer Wellen gewinnen. Mit dem Überblick über das elektromagnetische Spektrum bekommen sie eine Vorstellung über die unterschiedlichen Quellen der Strahlung, nehmen die Existenz unsichtbarer Strahlung wahr und lernen die Methoden der Wellenlängenbestimmung kennen. Die Röntgenstrahlung wird mit Hilfe des klassischen Wellenmodells als Teil des elektromagnetischen Spektrums kürzester Wellenlänge dargestellt, zur Bestimmung ihrer Wellenlänge kann die Bragg-Reflexion eingesetzt werden.

Die Reihenfolge der Themen innerhalb der „Einführung in die Quanten- und Atomphysik“ wird in den verschiedenen Bundesländern recht unterschiedlich gewählt (vgl. Abschnitt 4.3), die zu betrachtenden Inhalte bleiben aber weitgehend gleich. Die Schüler sollen den Teilchenaspekt des Lichts (Photoeffekt und Photonenmodell) und den Wellenaspekt der Materie (de Broglie-„Materie-Wellen“) ken-

nen lernen und eine Vorstellung über unelastische Streuung der Röntgenstrahlen an Elektronen (Compton-Effekt) bekommen. Bei der experimentellen Bestimmung des Planckschen Wirkungsquantums wird die Energieabhängigkeit der kurzwelligen Grenze des Röntgenbremsstrahlung eingesetzt.

Mit den „Grundlagen der Atomphysik“ sollen die Schüler Einblick in die Struktur des Atoms gewinnen, einige Atommodelle kennen lernen. Optische Spektren und charakteristische Röntgenspektren werden als Instrument zur Untersuchung der äußeren bzw. inneren Elektronenschalen dargestellt. Die Schüler erfahren, wie das Periodensystem der Elemente aufgebaut ist. Die Abhängigkeit der Energie der charakteristischen Röntgenlinien von der Ordnungszahl des Elements (Moseley-Gesetz) kann zur Prüfung der Einordnung der Elemente eingesetzt werden.

Ausführlich wird die Röntgenstrahlung in den Klassen 12 und 13 in Physikleistungskursen betrachtet, aber auch Grundkurse beschäftigen sich damit. So sehen z.B. die Lehrpläne für Physikgrundkurse in Bayern [37] und Rheinland-Pfalz [42] außer Anwendungen der Röntgenstrahlen in Medizin und Technik auch die Untersuchung der Bragg-Reflexion und der charakteristischen Röntgenstrahlung vor. Der Grundkurs in Baden-Württemberg [36] geht noch weiter bis zum Compton-Effekt und zum Moseley-Gesetz.

Die konkreten Ansätze zur Ausarbeitung der von den Lehrplänen vorgeschriebenen Inhalte des Physikunterrichts werden in den Abschnitten 4.3, 4.4 und 4.5 beschrieben.

4.2 Stellung des Experimentes im Physikunterricht

Seit Beginn des 20. Jahrhunderts gilt die Forderung, dass Schüler im Physikunterricht Gelegenheit erhalten sollen, selbst zu experimentieren. Bereits in den *Meraner Grundsätzen* von 1906 wird gefordert: „Für die Physikalische Ausbildung sind planmäßig geordnete Übungen im eigenen Beobachten und Experimentieren erforderlich“ (zitiert nach J. Willer [66], S. 280). Diese Forderung ist von folgenden Motiven gestützt:

- der Physikunterricht soll nicht nur Kenntnisse, sondern auch fachspezifische Verfahrensweisen der Physik vermitteln, von denen eine der wichtigsten das

Experiment ist;

- Schüler können durch eigenes Planen und Handeln beim selbstständigen Experimentieren mit wichtigen Experimentiertechniken vertraut werden;
- das Experimentieren bietet jenen Schülern, die eher manuell als sprachlich begabt sind, wertvolle Entfaltungsmöglichkeiten;
- das selbsttätige Experimentieren soll den Lernerfolg von Schülern sowie ihr Interesse an der Physik stärken.

W. Bleichroth weist darauf hin, dass jedes physikalische bzw. technische Experiment im Unterricht mit einer bestimmten didaktischen Absicht eingesetzt wird ([10], S. 218). Er erfüllt eine bestimmte methodische Funktion und kann in allen Phasen des Unterrichtsprozesses eingesetzt werden. Das Experiment ist somit als das wichtigste, den Physikunterricht geradezu kennzeichnende Unterrichtsmedium anzusehen. Nach ihrer Funktion werden Experimente z.B. als Einführungsexperimente, Überraschungsexperimente, Schauexperimente, Erkenntnisexperimente, Entwicklungsexperimente, Bestätigungsexperimente, als Anwendungsexperimente oder als Wiederholungsexperimente bezeichnet.

Je nachdem, ob der physikalische oder technische Sachverhalt original oder modellhaft repräsentiert wird, sind die beiden großen Klassen der Originalexperimente und Modellexperimente zu unterscheiden [10]. Als Originalexperimente werden die Experimente bezeichnet, die „Abläufe an und mit den apparativen Anordnungen, die den physikalischen Sachverhalt, das Phänomen, den gesetzmäßigen Zusammenhang mittelbar oder unmittelbar beobachtbar machen“. Die meisten Experimente in den Themengebieten der Schulphysik sind solche Originalexperimente. Im Unterschied zu den Originalexperimenten wird bei den Modellexperimenten anstelle des originalen physikalischen oder technischen Objektes ein Ersatzobjekt verwendet, das Analogien zum Original aufweist.

Die meisten Experimente im Physikunterricht werden vom Lehrer vor der Klasse durchgeführt und werden dementsprechend als Lehrer- oder Demonstrationsexperimente bezeichnet. Eine bestimmte Rollenverteilung ist damit zwangsläufig vorgegeben: der Lehrer findet sich in der Rolle des Vorführenden, des Vormachenden und Vorzeigenden, die Schüler in der Rolle des mehr oder weniger passiven Zuschauers.

Diese Rollenverteilung beim Lehrerexperiment kann aufgehoben oder zumindest abgemildert werden, wenn der Lehrer das Experiment in den Lernprozess einbezieht und die Schüler dabei aktiv an den Vorüberlegungen und Planungen des Experimentes beteiligt [10].

Beim Schülerexperiment wird der Schüler zum selbst verantwortlich Handelnden, der das Experiment in Gang setzen, beeinflussen und mit allen Sinnen wahrnehmen und beobachten kann. Die eher rezeptive Haltung, die er beim Lehrerexperiment einnehmen musste, verwandelt sich in eine Haltung des aktiven und produktiven Tuns. Die verantwortliche Selbsttätigkeit bei Schülerexperimenten fördert das Interesse und ruft eine starke Motivation hervor. Gerade dadurch erhält das Schülerexperiment seine besondere erziehende und das Lernen fördernde Bedeutung im Physikunterricht [10].

Auch in den Lehrplänen wird auf eine hohe Stellung des Experimentierens im Physikunterricht aufmerksam gemacht. Es seien hier einige Auszüge aus den Präambeln der Lehrpläne verschiedener Bundesländer zur Wichtigkeit des Experimentes im Physikunterricht zitiert:

So der *Lehrplan Physik*, Rheinland-Pfalz [42], S. 10: „Das reproduzierbare Experiment sichert die Überprüfbarkeit der Aussagen der Physik. Dem Experiment als Bindeglied zwischen Realität und Theorie kommt damit eine zentrale Bedeutung zu.

- Es hat für die Vorstellungen, Hypothesen und Theorien bestätigenden oder falsifizierenden Charakter (Schiedsrichterfunktion).
- Es selbst produziert wiederum Phänomene (Phänomenproduzent).
- Es fördert Ideen und treibt die Theorien voran (Ideenförderer und Theorienproduzent).“

Der *Bildungsplan für das Gymnasium*, Baden-Württemberg [36], S. 31 gibt an: „Ein lebendiger Experimentalunterricht und das selbständige und kreative Experimentieren in Schülerübungen vermitteln den Schülerinnen und Schülern Freude an der Physik, verdeutlichen ihnen aber auch, wie mühevoll die Gewinnung naturwissenschaftlicher Erkenntnisse ist.“

Im *Rahmenplan Physik* von Mecklenburg-Vorpommern [39], S. 7 steht: „Die Schüler vertiefen im Rahmen einer umfangreichen experimentellen Arbeit die Einsicht,

dass die experimentelle Methode eine wesentliche Methode zur Erkenntnisgewinnung ist, welche die Naturwissenschaft Physik hervorgebracht hat.“

Der *Physiklehrplan für Gymnasium von Freistaat Sachsen* [43], S. 8 gibt an: „Eine grundlegende Aufgabe des Physikunterrichts besteht weiterhin darin, die Schüler an die wichtigsten naturwissenschaftlichen Denk- und Arbeitsmethoden heranzuführen und sie schrittweise zum selbständigen Anwenden zu befähigen. Im Vordergrund steht dabei die Arbeit mit physikalischen Experimenten, sowohl in Form von Demonstrations- und Schülerexperimenten als auch von Praktikums- und Hausexperimenten. Die Schüler sollen in alle Phasen des Experimentes aktiv einbezogen werden. Besonders in der Oberstufe wird dabei dem Aufstellen von Hypothesen und Prognosen und deren experimenteller Überprüfung Aufmerksamkeit geschenkt.“

Eins der Ziele des Physikunterrichts in der Sekundarstufe II ist, die Schüler zu experimentieren zu befähigen. Im *Lehrplan für Physik des Landes Nordrhein-Westfalen* [41] steht z.B., dass die Schüler in der gymnasialen Oberstufe unter anderem Fähigkeiten und Fertigkeiten im Planen und Durchführen der Experimente erreichen sollen:

- umfangreichere und anspruchsvollere Experimente planen, sorgfältig durchführen und auswerten;
- verschiedene Visualisierungsmöglichkeiten der Messwerte kennen, angemessen verwenden und bewerten.

Der *Lehrplan Physik*, Rheinland-Pfalz gibt noch ein wichtiges, mit der Darstellung und Präsentation von Experimenten und Ergebnissen verbundenes Ziel des Physikunterrichts an ([42], S. 11): „Die Wirksamkeit von Ideen und Ergebnissen hängt in einer Informationsgesellschaft zunehmend von der adressatengerechten Darstellung und Präsentation ab. Inhaltsgebunden können die Schülerinnen und Schüler dies erlernen, indem sie

- Experimente präsentieren und sachgerecht vorführen,
- Protokolle und Ergebnisse des Experimentes ansprechend darstellen,
- physikalische Sachverhalte mediengerecht präsentieren.“

Es ist ganz eindeutig, welche hohe Stellung den Experimenten im Erreichen der Ziele des Physikunterrichts zugeschrieben wird. Die Wichtigkeit des Experimentierens für den Physikunterricht hat den Autor inspiriert, Möglichkeiten zu suchen, die zurzeit in der Schule eingesetzten Experimente mit Röntgenstrahlen zu optimieren und auch einige früher in der Schule nicht realisierbare Experimente zu ermöglichen.

4.3 Moderne Ansätze für das Unterrichten der Quantenphysik und der Atomphysik in der Schule

Wie die Analyse von Lehrplänen zeigt, wird die Röntgenstrahlung am intensivsten im Themenkreis Quanten- und Atomphysik in den Physikunterricht einbezogen. Für diese Arbeit ist es also besonders wichtig, die Folge der physikalischen Inhalte und die gestellten didaktischen Akzente beim Unterrichten dieser Themen zu berücksichtigen.

Es gibt zurzeit keine einheitliche didaktische Position, wie die Quanten- und Atomphysik in der Schule zu unterrichten ist. In diesem Abschnitt werden einige Ansätze erörtert, die schon einer extensiven Erprobung in der Schulpraxis unterzogen worden sind.

In seinem Buch nennt J. Willer ([66], S. 366 ff.) fünf unterschiedliche Unterrichtskonzepte deutscher Didaktiker:

- den Ansatz von Wilfried Kuhn mit der Orientierung auf die historische Entwicklung der Quantenphysik;
- das quantenmechanische Formalismus des Zeigerkalküls und das Lichtwegkonzept von Franz Bader sowie Helmut Schön und Mitarbeitern;
- das „Berliner Konzept“ von Helmut Fischler, Michael Lichtfeld und Mitarbeitern;
- den anwendungsorientierten „Bremer Unterrichtsansatz“ einer „anschaulichen Quantenphysik“ von Hans Niedderer und Mitarbeitern;
- das „Münchener Unterrichtskonzept“ von Rainer Müller und Hartmut Wiesner.

Diese Konzeptionen richten die Aufmerksamkeit jeweils vorwiegend auf einen bestimmten Aspekt der Quantenphysik und empfehlen dementsprechend jeweils eine andere Herangehensweise an die Quantenphysik. Unten wird eine kurze Zusammenfassung dieser Ansätze gegeben.

Historisch-genetisches Unterrichtsverfahren

Nach diesem Verfahren wird das Unterrichten der Quantenphysik in der Schule in Parallelen zu ihrer historischen Entwicklung strukturiert. Die Leitidee dieses Ansatzes ist, die Widersprüche und Schwierigkeiten, die zur Zeit der Gründung der Quantenmechanik ein Umdenken erzwungen haben und jetzt von den Schülern gleichermaßen ein Umdenken erfordern, exemplarisch aufzuarbeiten, um zu erkennen, wie der neue Denkansatz bei der Bewältigung dieser Widersprüche Schritt für Schritt an Erklärungskraft gewonnen hat. Solche Widersprüche können den Schülern zeigen, in welche Richtung sie ihre eigene Gedankengänge lenken müssen. Hinzu kommt, dass viele Schüler gern Erfolge und Irrwege in der physikalischen Erkenntnisgewinnung mit bestimmten Personen verbinden.

Dieser Ansatz für den Unterricht der Quanten- und Atomphysik ist in den von W. Kuhn herausgegeben Physik-Schulbüchern realisiert worden (siehe z.B. *Physik 2* [32] für Grundkurse der Sekundarstufe II).

Quantenphysik mit Hilfe des Zeigerkalküls

Die Anregung, die Quantenphysik korrekt mit rotierenden Zeigern zu beschreiben, wurde von R. Feynman in seinem populärwissenschaftlichen Buch über die Quantenelektrodynamik gegeben (QED [17]). Diese Zeiger veranschaulichen die für die Quantenphysik unerlässlichen komplexen Wahrscheinlichkeitsamplituden.

Die Idee wurde für den Einsatz in der Schule von Franz Bader aufgegriffen und in seinem Unterrichtskonzept zur Quantenphysik verfolgt [2]. Danach soll „widersprüchlicher Modellballast“ abgeworfen werden. Damit entfallen manche zeitaufwendigen Probleme, wie die Diskussion des Dualismus Welle-Teilchen, des Compton-Effekts sowie des Unterschiedes zwischen Gruppen- und Phasen-Geschwindigkeit. Die mühsame Zeigeraddition wird mit Hilfe von Rechnern gemacht — der Unterricht greift somit intensiv auf Computerprogramme zu.

Dieser neuartige Lehrgang zur Quantenphysik ist in der neuen Auflage des Schulbuches *Physik Sek II* [3] von Bader vorgelegt. Das Zeigerkalkül wird schon bei den mechanischen Wellen und Interferenzerscheinungen eingeführt und kann von den Schülern mit Hilfe von Computerprogrammen eingeübt werden.

Berliner Konzept einer „Einführung in die Quantenphysik“

Dem Berliner Unterrichtskonzept zur Quantenphysik (nach H. Fischler [18]) liegt die Zielvorgabe zugrunde, planmäßig die klassischen Atom- und Teilchenvorstellungen der Schüler abzubauen und sie zu neuen Mustern umzustrukturieren und weiterzuentwickeln. Die Bezüge zur klassischen Physik werden weitgehend vermieden. Um die klassische Vorstellung vom Elektron als einem realen Teilchen von vornherein in Frage zu stellen, beginnt der Unterrichtsgang mit der Erörterung des Elektronenverhaltens in der Beugungsröhre und beim Doppelspaltexperiment. Statt den Materiewellen nach de Broglie werden Wahrscheinlichkeitsverteilungen erarbeitet, der Begriff Quantenobjekt eingeführt sowie das daran spezifisch Neue anhand der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation aufgezeigt. Erst danach werden der Photoeffekt, das Photon als Quantenobjekt und der Compton-Effekt behandelt. Bei der Behandlung des Wasserstoffatoms wird auf das Bohrsche Modell verzichtet.

Die von Lichtfeld durchgeführte Untersuchung (M. Lichtfeld in [18]) hat nachgewiesen, dass dieser Unterrichtsgang zu bemerkenswerten Lernerfolgen führt. Es gibt auch ein Physik-Schulbuch (*Impulse Physik 2* [6]), das nach dieser Konzeption realisiert ist.

Bremer Konzept

Das Bremer Unterrichtskonzept einer „anschaulichen Quantenphysik“ orientiert sich weniger an einer Vertiefung der Interpretationsdiskussion und ihrer philosophischen Probleme, vielmehr aber an der Erschließung von Anwendungen des zu erarbeitenden Quantenmodells auf Phänomene der Atomphysik, der Chemie und der Festkörperphysik (H. Niedderer in [18]). Das Bohrsche Atommodell soll so weit berücksichtigt werden, wie es jeweils von den Schülern eingebracht wird. Vermittelt werden soll jedoch ein Atommodell nach Schrödinger, welches dem heutigen Stand der Physik wesentlich näher steht.

Die Einführung in die Quantenphysik geschieht in einer qualitativen Weise, mittels einer Modellbildungssoftware. Zuerst werden die Begriffe Zustand, Eigenfrequenz, Amplitudenfunktion und Zustandszahl am klassischen System „stehende Seilwelle“ eingeführt und die am Computer gefundenen Lösungen mit dem Experiment verglichen. Anschließend werden diese Begriffe auf die Beschreibung gebundener Elektronen im Atom übertragen und in die quantenmechanische Sprache als Zustand, Eigenenergie, Ψ -Funktion und Quantenzahl „übersetzt“. Das Bedürfnis der Schüler nach einem anschaulichen Bild wird mit der Darstellung von Ladungswolken aufgegriffen. Die durchgehende, erfolgreiche Anwendung des Ladungswolkenmodells auf verschiedene Probleme der Atomphysik soll dann dazu führen, dass dieses Modell für die Schüler gegenüber dem von ihnen zuvor favorisierten Elektronenbahnmodell an Überzeugungskraft gewinnt.

Münchener Unterrichtskonzept

Das von Hartmut Wiesner und Rainer Müller entwickelte Unterrichtskonzept zur Quantenmechanik [49] stellt Deutungsfragen der Quantenphysik in den Vordergrund: der Erörterung davon wird bereits im Grundkurs eine große Rolle gegeben. Dafür wird die statistische Interpretation nach Einstein und Born zugrunde gelegt, im Gegensatz zur vorrangig in den Physikschulbüchern benutzten Kopenhagener Interpretation nach Bohr und Heisenberg (vgl. Dorn-Bader *Physik Sek II* [3], *Kuhn Physik 2* [32] und *Metzler Physik* [22]).

Diese Konzeption gliedert sich in einen qualitativen Basiskurs und einen quantitativen Aufbaukurs. In dem Basiskurs werden Grundlagen und Deutungsfragen der Quantenphysik sowie Probleme des quantenmechanischen Messprozesses mit Hilfe von Simulationsprogrammen qualitativ erarbeitet. Im Aufbaukurs sollen darauf aufbauend Elemente der theoretischen Beschreibung auf elementarem mathematischem Niveau entwickelt werden, so werden z.B. das Konzept des Operators und die Schrödinger-Gleichung, als Eigenwertgleichung der Gesamtenergie eines stationären Zustandes, eingeführt.

Themenfolge in den Unterrichtsgängen

Da die betrachteten Ansätze unterschiedliche Akzente im Unterrichten der Quanten- und Atomphysik stellen, sind auch die Themenfolgen in den Unterrichtsgängen unterschiedlich. Die Schlüsselthemen des historisch-genetischen Unterrichtsverfahrens, des Unterrichtskonzeptes von F. Bader, des Berliner Konzeptes und des Münchener Unterrichtskonzeptes sind zum Vergleich miteinander in Tab. 4.1 und Tab. 4.2 zusammengefasst. Da das Bremer Unterrichtskonzept sich vorwiegend mit der Atomphysik beschäftigt, ist es nicht in der Tabelle aufgeführt.

Nach der Überzeugung von W. Kuhn, kann „der Schüler Quantenmechanik nur im historischen Kontext verstehen“ (W. Kuhn in [18]). Somit schlägt er vor, die Themen nach der historischen Entwicklung einzuordnen. Die von F. Bader vorgeschlagene Themenfolge ist von der historischen nicht sehr weit, aber mehr nach den logischen Zusammenhängen realisiert. Die Themenfolgen nach den Berliner und Münchener Konzepten unterscheiden sich allerdings von der historischen erheblich.

Tab. 4.1: Die Themenfolge in den Unterrichtsgängen nach dem Historisch-genetischen Unterrichtskonzept und nach dem Konzept des „Zeigerkalküls“

Historisch-genetisches Konzept	Konzept des „Zeigerkalküls“
<ul style="list-style-type: none"> • Strahlung des schwarzen Körpers, Plancksches Wirkungsquantum; • lichtelektrischer Effekt in Einsteins „Photonen“-Deutung; • Compton-Effekt; • Franck-Hertz-Experiment; • Entwicklung verschiedener Atommodelle; • These von de Broglie und Dualismusproblematik; • Heisenbergsche Unschärferelation und Quantenmechanischer Messprozess; • Interpretationsprobleme der Quantenphysik. 	<ul style="list-style-type: none"> • Photoeffekt und Lichtquanten; • Umkehrungen des Photoeffekts, Röntgenbremsstrahlung; • Compton-Effekt¹; • Umdeutung des Huygensschen Prinzips von Wellen auf Quanten; • Quantenobjekt Photon; • Quantenobjekt Elektron; • Unbestimmtheitsrelation; • Franck-Hertz-Experiment; • Schrödinger-Gleichung; • Wasserstoffatom, Röntgenspektren in schweren Atomen; • Laser; • Einblicke in die Festkörperphysik.

¹ Obwohl Bader in seiner Veröffentlichung von 1996 (S. 22 in [2]) vorschlägt, wegen der nötigen „zeitraubenden“ Diskussionen dem Compton-Effekt keine wesentliche Stelle im Unterricht zu geben und statt dessen den Photonenimpuls anhand des Experimentes mit der Ablenkung des Na-Atomstrahls durch die Photonen des Na-Lichts einzuführen, wird der Compton-Effekt in seinem Lehrbuch von 2000 *Physik Sek II* [3], wahrscheinlich wegen der Konformität mit der Lehrplänen, in einem eigenen Abschnitt behandelt.

Tab. 4.2: Die Themenfolge in den nach dem Berliner Konzept und nach dem Münchener Konzept realisierten Unterrichtsgängen

Berliner Konzept	Münchener Konzept
<ul style="list-style-type: none"> • Interferenzen bei Elektronen; • Photoeffekt; • Photonen-Beugung; • Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation; • Röntgenstrahlung; • Compton-Effekt; • Franck-Hertz-Experiment; • Wasserstoffatom; • Charakteristisches Röntgenspektrum; • Laser. 	<p>Basiskurs:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Photoeffekt; • Photoneninterferenz in einem Mach-Zehnder-Interferometer; • Besonderheiten des quantenmechanischen Messprozesses; • Elektroneninterferenz im Doppelspaltexperiment; • Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation. <p>Aufbaukurs:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Schrödinger-Gleichung; • Linienspektren von Atomen; • Bohrsches Atommodell; • Franck-Hertz-Experiment; • Quantenmechanisches Modell des Wasserstoffatoms.

Folgerungen für die Stellung der Röntgenstrahlung im Quanten- und Atomphysikunterricht

Es ist für die vorgestellte Arbeit von grundlegendem Interesse, festzustellen, an welchen Etappen und in welchen Zusammenhängen Röntgenstrahlen beim Unterrichten von Quanten- und Atomphysik zum Einsatz kommen. Die Analyse des historisch-genetischen Unterrichtsverfahrens nach W. Kuhn, des Berliner Konzepts von H. Fischler und M. Lichtfeld und der Zeigerkalkül-unterstützten Konzeption von F. Bader zeigt, dass obwohl in den Ansätzen die allgemeine Reihenfolge der Themen unterschiedlich gewählt ist, die Röntgenstrahlen und die mit ihnen über physikalische Phänomene gewonnenen Erkenntnisse in sehr ähnlichen logischen Einheiten behandelt werden.

In der ersten Themen-Einheit wird auf die grundlegenden Merkmale der Röntgenstrahlung eingegangen. Nach allen diesen Unterrichtskonzepten passiert das unmittelbar nach der Behandlung des Photoeffekts². Außer der Erzeugung der Röntgenstrahlung, ihrem Nachweis und der Beugung am Kristall, geht es hier um die Grenzfrequenz des kontinuierlichen Spektrums — ein physikalisches Phänomen, das oft als Beweis für die Notwendigkeit quantenphysikalischer Beschreibung einbezogen wird. Seine Wichtigkeit wird zusätzlich noch damit erhöht, dass die Vermessung der Grenzfrequenz ein präzises Verfahren für die Bestimmung des Planckschen Wirkungsquantums liefert. Es wird auch betont, dass die Bremsstrahlung als Umkehrung des Photoeffekts angesehen werden kann und die beiden Prozesse eine Energieübertragung von einem „Quantenobjekt Photon“ zu einem „Quantenobjekt Elektron“ (und umgekehrt) darstellen.

Unmittelbar danach folgt die Behandlung des Compton-Effekts, als logische Weiterentwicklung der Schülerkenntnisse über die Wechselwirkung von Photonen und Elektronen. Dabei wird die Notwendigkeit erkannt, den Lichtquanten einen Impuls

² Es muss eine Bemerkung gemacht werden über den Zeitpunkt (Themenkreis), in dem die Röntgenstrahlung zuerst eingeführt wird. Gemäß den Lehrplänen von z.B. Baden-Württemberg [36], Bayern [37] und Thüringen [45] soll die Röntgenstrahlung schon in der Themen „Elektromagnetische Wellen“ und „das elektromagnetische Spektrum“ eingeführt werden. Der Lehrplan von Mecklenburg-Vorpommern [39] weist explizit darauf hin, dass diese Thematik sowohl im Stoffgebiet „Elektromagnetische Wellen“, als auch im Stoffgebiet „Physik der Atomhülle“ behandelt werden kann.

zuzuschreiben, und dieser wird eingeführt. Allerdings wird eindringlich hervorgehoben, dass der Compton-Effekt kein entscheidendes Experiment dafür liefert, dass das Teilchenmodell die einzig richtige Beschreibung des Lichts gibt.

Eine weitere Stelle, wo alle betrachteten Unterrichtskonzepte die Röntgenstrahlung behandeln, gehört zum Stoffgebiet der Atomphysik. Es ist die charakteristische Röntgenstrahlung der schwereren Elemente. Hier wird sie als Instrument eingesetzt, mithilfe dessen Erkenntnisse über den Aufbau von inneren Elektronenschalen im Atom gewonnen werden können. In der logischen Struktur des Physikkurses erfolgt die Betrachtung der Elektronenübergänge der inneren Schalen nach der Behandlung des optischen Spektrums des Wasserstoffatoms. Es werden die Parallelen zwischen der Lymanserie des Wasserstoff-Spektrums und den charakteristischen Röntgenspektren gezogen. Die mit dem eingesetzten Atommodell gewonnene Gesetzmäßigkeit für die charakteristische Strahlung verschiedener Elemente (Moseley-Gesetz) dient als rein physikalische Grundlage für die Einordnung der chemischen Elemente in ein Periodensystem.

Die oben zusammengefasste Reihenfolge der Themen im Unterrichtsstoff wurde, zusammen mit den Ergebnissen der Analyse von Lehrplänen und Physikschulbüchern (Abschnitt 4.1.2 bzw. 4.4), als Grundlage für die Auswahl und Einordnung der in dieser Arbeit vorgeschlagenen Experimente eingesetzt.

4.4 Experimentelle Behandlung der Röntgenstrahlung in Physikschulbüchern

Schulbücher sind auch eine unabdingbare Datenquelle zu den Möglichkeiten der Behandlung von Röntgenstrahlung im heutigen Physikunterricht. Meistens bieten sie auch etwas mehr Lernstoff, als in den Lehrplänen ausgeschrieben ist, und stellen natürlich unterschiedliche Akzente. So wird z.B. für das Schlüsselthema der vorgestellten Dissertation — die Einführung in die Quantenphysik — jeweils ein anderer Ansatz gewählt: das historisch-genetische Verfahren ist in *Kuhn Physik 2* realisiert, das Berliner Konzept – in *Impulse Physik 2* usw.

In diesem Abschnitt wird die Behandlung der Röntgenstrahlung in einigen verbreiteten Schulbüchern betrachtet. Das Ziel ist vor allem, die eingesetzten und zi-

tierten Experimente aufzugreifen, um festzustellen, welche von ihnen im Unterricht tatsächlich durchgeführt werden können und für welche die apparative Möglichkeiten fehlen. Letztere können nur als fertige Daten dargestellt werden und sind den didaktischen Vorteilen eines real durchgeführten Experimentes entzogen (vgl. Abschnitt 4.2).

In der Tab. 4.3 sind die in den Lehrbüchern eingesetzten Experimente mit und zu den Röntgenstrahlen zusammengefasst. Die Zusammenfassung beruht auf den aktuellen Ausgaben folgender Physikschulbücher: *Dorn-Bader Physik Sek II* [3], *Impulse Physik 2* [6], *Kuhn Physik 2* [32], *Metzler Physik* [22], *Hammer-Knauth-Kühnel Physik 13* [27], *Paetec Physik* [48], *Cornelsen Physik* [16].

Die Experimente sind in drei Gruppen geteilt, die den von den Lehrplänen vorgesehenen Themen entsprechen (vgl. Abschnitt 4.1.2): Röntgenstrahlen als Teil des elektromagnetischen Spektrums, Einführung in die Quantenphysik und Physik der Atomhülle.

Tab. 4.3: Zusammenfassung der in Physikschulbüchern eingesetzten Experimente mit Röntgenstrahlen

Physikschulbuch	Themen des Unterrichtsstoffs		
	Elektromagnetische Schwingungen und Wellen	Grundlagen der Quantenphysik	Grundlagen der Atomphysik
<i>Dorn-Bader Physik Sek II</i>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Durchstrahlung von Objekten, Invarianz zum Einfluss elektrischer und magnetischer Felder; 2. Entladung eines Elektroskops durch Röntgenstrahlen; 3. Modellexperiment zur Bragg-Reflexion mit Mikrowellen; 4. Aufnahme eines Röntgenspektrums nach der Drehkristallmethode; 5. Aufnahme nach dem Debye-Scherrer-Verfahren. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Abhängigkeit der Grenzwellenlänge der Bremsstrahlung von der Beschleunigungsspannung (Aufnahme nach der Drehkristallmethode); 2. Abhängigkeit der Grenzwellenlänge der Bremsstrahlung vom Anodenmaterial. <p>Zum Compton-Effekt werden die in der Originalarbeit von A.H. Compton vorgestellten Spektren skizziert.</p>	<p>Kein Experiment.</p> <p>Das charakteristische Röntgenspektrum wird anhand eines nach der Drehkristallmethode aufgenommenen Spektrums erörtert.</p> <p>Die Behandlung des Moseley-Gesetzes wird mit einer experimentellen Moseley-Gerade illustriert.</p>

Tab. 4.3: Zusammenfassung der in Physikschulbüchern eingesetzten Experimente mit Röntgenstrahlen (Fortsetzung)

Physikschulbuch	Themen des Unterrichtsstoffs		
	Elektromagnetische Schwingungen und Wellen	Grundlagen der Quantenphysik	Grundlagen der Atomphysik
<i>Impulse Physik 2</i>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Durchstrahlung von Objekten; 2. Modellexperiment zur Bragg-Reflexion mit Mikrowellen; 3. Reflexion von Röntgenstrahlen an Kristall; 4. Aufnahme eines Röntgenspektrums nach der Drehkristallmethode. <p>Laue-Diagramme werden in Bildform dargestellt.</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Schwächung der Röntgenstrahlung beim Durchgang durch Gegenstände in Abhängigkeit von der Anodenspannung; 2. Nachweis des Vorhandenseins der kurzwelligen Grenze der Bremsstrahlung (nach der Drehkristallmethode); 3. Abhängigkeit der Grenzwellenlänge der Bremsstrahlung von der Anodenspannung; 4. Untersuchung des Compton-Effekts mit der Anordnung nach Pohl (qualitativ). 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Nachweis des Vorhandenseins charakteristischer Linien im Spektrum einer Röntgenröhre (nach der Drehkristallmethode); 2. Untersuchung der Absorptionsspektren: Absorptionskanten. <p>Die Behandlung des Moseley-Gesetzes wird mit einer experimentellen an den Absorptionskanten gemessenen Moseley-Gerade illustriert.</p>

Tab. 4.3: Zusammenfassung der in Physikschulbüchern eingesetzten Experimente mit Röntgenstrahlen (Fortsetzung)

Physikschulbuch	Themen des Unterrichtsstoffs		
	Elektromagnetische Schwingungen und Wellen	Grundlagen der Quantenphysik	Grundlagen der Atomphysik
<i>Kuhn Physik 2</i> Grundkurse	Kein Experiment. Röntgenstrahlung wird erst im Kapitel „Quanten und Atome“ eingeführt.	1. Modellexperiment zur Bragg-Reflexion mit Mikrowellen. Das Debye-Scherrer-Verfahren zur Röntgenspektromaufnahme und der Compton-Effekt werden theoretisch behandelt.	Kein Experiment. Die charakteristische Röntgenstrahlung und das Moseley-Gesetz werden rein theoretisch behandelt.

Tab. 4.3: Zusammenfassung der in Physikschulbüchern eingesetzten Experimente mit Röntgenstrahlen (Fortsetzung)

Physikschulbuch	Themen des Unterrichtsstoffs		
	Elektromagnetische Schwingungen und Wellen	Grundlagen der Quantenphysik	Grundlagen der Atomphysik
<i>Metzler Physik</i>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Durchstrahlung verschiedener Gegenstände; 2. Entladung eines Elektroskops durch Röntgenstrahlen; 3. Modellexperiment zur Bragg-Reflexion mit Mikrowellen; 4. Aufnahme eines Röntgenspektrums nach der Drehkristallmethode; 5. Aufnahme nach dem Debye-Scherrer-Verfahren; 6. Aufnahme eines Laue-Diagramms. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Nachweis des Vorhandenseins der kurzwelligen Grenze der Bremsstrahlung (nach der Drehkristallmethode); 2. Abhängigkeit der Grenzwellenlänge der Bremsstrahlung von der Anodenspannung; 3. Abhängigkeit der Grenzwellenlänge der Bremsstrahlung vom Material der Anode; 4. Untersuchung des Compton-Effekts mit der Anordnung nach Pohl (qualitativ). 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Nachweis des Vorhandenseins charakteristischer Linien im Spektrum einer Röntgenröhre (nach der Drehkristallmethode); 2. Untersuchung der Absorptionsspektren: Absorptionskanten. <p>Das Moseley-Gesetz wird ohne Experimente behandelt.</p>

Tab. 4.3: Zusammenfassung der in Physikschulbüchern eingesetzten Experimente mit Röntgenstrahlen (Fortsetzung)

Physikschulbuch	Themen des Unterrichtsstoffs		
	Elektromagnetische Schwingungen und Wellen	Grundlagen der Quantenphysik	Grundlagen der Atomphysik
<i>Hammer-Knauth-Kühnel Physik 13</i>	Kein Experiment. Das Thema wird im Buch nicht behandelt.	Kein Experiment. Die Röntgenstrahlung wird im Kapitel „Struktur des Atoms; Atomhülle“ behandelt.	Kein Experiment. Theoretisch werden Laue-Aufnahmen von Röntgenstrahlinterferenzen, die Grenzfrequenz des kontinuierlichen Röntgen-Bremsspektrums, charakteristische Röntgenspektren und das Moseley-Gesetz behandelt.
<i>Paetec Physik</i>	Kein Experiment. Röntgenstrahlung wird erst im Kapitel „Quantenphysik“ eingeführt.	Kein Experiment. Theoretisch wird folgendes behandelt: Grenzfrequenz der Bremsstrahlung; kontinuierliches und charakteristisches Spektrum; Röntgeninterferenz nach Bragg, Laue, Debye-Scherrer ³ ; Compton-Effekt.	Kein Experiment.

³ Abbildungen der Debye-Scherrer- und Laue-Aufnahmen sind die einzigen dargestellten experimentellen Ergebnisse.

Tab. 4.3: Zusammenfassung der in Physikschulbüchern eingesetzten Experimente mit Röntgenstrahlen (Fortsetzung)

Physikschulbuch	Themen des Unterrichtsstoffs		
	Elektromagnetische Schwingungen und Wellen	Grundlagen der Quantenphysik	Grundlagen der Atomphysik
<i>Cornelsen Physik</i>	Kein Experiment. Röntgenstrahlung wird erst im Kapitel „Quanten, Atome, Kerne“ eingeführt.	Experimentell ⁴ : 1. Analyse eines nach der Drehkristallmethode aufgenommenen Spektrums; 2. Abhängigkeit der Grenzwellenlänge der Bremsstrahlung vom Material der Anode; 3. Abhängigkeit der Grenzwellenlänge der Bremsstrahlung von der Anodenspannung. Laue-Diagramme und Debye-Scherrer-Verfahren zur Röntgeninterferenz werden in Bildform dargestellt. Zum Compton-Effekt werden Spektren aus der Originalarbeit von A.H. Compton angeführt.	Experimentell ⁴ : 1. Interpretation der charakteristischen Linien in einem nach der Drehkristallmethode aufgenommenen Spektrum; 2. Untersuchung der Absorptionsspektren: Absorptionskanten. Das Moseley-Gesetz ist ganz knapp behandelt.

⁴ Die meisten in *Cornelsen Physik* eingesetzten Experimente sind nicht explizit mit „Experiment“ oder „Versuch“ gekennzeichnet. Sie werden entweder im Text kurz beschrieben und ihre Ergebnisse in graphischer Form präsentiert, oder die experimentellen Ergebnisse werden als Ausgangspunkt für Aufgaben angegeben.

Wie aus der Tab. 4.3 zu entnehmen ist, wird in *Dorn-Bader Physik Sek II*, *Impulse Physik 2* und *Metzler Physik* ein gut ausgearbeitetes System mit Experimenten zur Röntgenstrahlung präsentiert. *Hammer-Knauth-Kühnel Physik 13* und *Paetec Physik* dagegen benutzen zur Unterrichtsstoffvermittlung keine Experimente.

Diese recht unterschiedliche Situation kann dadurch erklärt werden, dass erstens diese Lehrbücher unterschiedliche Zielgruppen haben — Schüler der Leistungs- bzw. Grundkurse, und dass zweitens der Einsatz von vielen zitierten Experimenten einen großen Zeitaufwand bedeutet, oder dass es überhaupt keine für Schulen zugängliche Apparatur gibt, die eine sichere Durchführung der Experimente garantiert.

Die Frage, welche experimentellen Geräte den Schulen zur Verfügung stehen und welche Experimente mit ihnen möglich sind, wird im nächsten Abschnitt behandelt. Neue Möglichkeiten, die durch Einsatz des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Röntgendetektors auftreten, werden im Abschnitt 4.6 dargestellt.

4.5 Experimentiermöglichkeiten mit den existierenden Schulröntengeräten

4.5.1 Experimentieranleitungen der Hersteller

Der Hauptanteil der Röntengeräte in deutschen Schulen ist von zwei Lehrmittelfirmen hergestellt: Leybold Didactic GmbH aus Hürth oder Phywe Systeme GmbH & Co. KG aus Göttingen. Beide Hersteller bieten für ihre Geräte auch die Experimentieranleitungen an, nach denen eine ziemlich große Anzahl an Experimenten für Schulen sowie Hochschulen durchgeführt werden kann.

Die Röntengeräte beider Hersteller haben eine ähnliche Ausführung und unterscheiden sich nur in Details, die nicht die Möglichkeiten der Geräte, sondern mehr den Umgang mit ihnen beeinflussen. Die Experimentierliteratur ist auch historisch gewachsen und unterscheidet sich wenig von einem Hersteller zum anderen.

Hier werden die Experimente mit und zur Röntgenstrahlung zusammengefasst, die in den LEYBOLD Handblättern Physik [46] erscheinen, da sie ausführlicher als die von Phywe ausgearbeitet sind. Alle Experimente sind ähnlich wie in der Tab. 4.3 nach drei Themen angeordnet: Grundlegende Eigenschaften der Röntgenstrahlen

und Strukturanalyse, Experimente zur Einführung in die Quantenphysik und Experimente zur Einführung in die Atomphysik. Im Klammern nach dem Experimenttitel steht die Nummer, unter der es in den LEYBOLD Handblättern Physik vorkommt.

Alle vom Hersteller vorgeschlagenen Experimente sind mit ihren Zielen zitiert, um die umfangreichen Möglichkeiten des Einsatzes moderner Schulröntengeräte zu zeigen. Wie der Vergleich mit der Tab. 4.3 zeigt, ist die Auswahl der Experimente ausreichend, um den größten Teil der nach den Lehrplänen und Schulbüchern zu behandelnden Phänomene abzudecken.

Obwohl diese Experimentieranleitungen für das Gymnasial- und Hochschulphysikpraktikum bestimmt sind, können sie auch an den Einsatz als Demonstrationsexperimente angepasst werden. Eine solche Anpassung ist aber nicht für alle Experimente möglich, weil die für ein Demonstrationsexperiment im Unterricht zur Verfügung stehende Zeit sehr begrenzt ist. Die bei der Durchführung der Schlüsselexperimente auftretenden Probleme werden im Abschnitt 4.5.3 zusammengefasst und analysiert.

Tab. 4.4: Zusammenfassung der in den LEYBOLD Handblättern Physik vorgeschlagenen Experimente mit Röntgenstrahlen

Experiment	Schwerpunkte
<i>1. Grundlegende Eigenschaften der Röntgenstrahlen und Strukturanalyse</i>	
1.1 Fluoreszenz eines Leuchtschirms durch Röntgenstrahlung (P6.3.1.1)	<ul style="list-style-type: none"> • Nachweis von Röntgenstrahlung durch Beobachtung der Fluoreszenz eines Leuchtschirms; • Durchleuchtung von Materialien mit unterschiedlichem Absorptionsvermögen; • Untersuchung der Abhängigkeit von Helligkeit und Kontrast des Leuchtschirmbildes vom Emissionsstrom und der Röhren-Hochspannung.
1.2 Röntgenphotographie: Schwärzung von Filmmaterial durch Röntgenstrahlung (P6.3.1.2)	<ul style="list-style-type: none"> • Nachweis von Röntgenstrahlung durch Schwärzung von lichtundurchlässig verpacktem Filmmaterial; • Untersuchung des Zusammenhangs zwischen Ionendosis und Schwärzungsgrad des Films.
1.3 Nachweis von Röntgenstrahlung mit einer Ionisationskammer (P6.3.1.3)	<ul style="list-style-type: none"> • Nachweis von Röntgenstrahlung mit einer luftgefüllten Ionisationskammer und Messung des Ionisationsstroms; • Untersuchung der Abhängigkeit des Ionisationsstroms von der Kondensatorspannung und Nachweis der Sättigungscharakteristik; • Untersuchung der Abhängigkeit des Sättigungs-Ionisationsstroms vom Emissionsstrom der Röntgenröhre bei konstanter Röhren-Hochspannung; • Untersuchung der Abhängigkeit des Sättigungs-Ionisationsstroms von der Röhren-Hochspannung bei konstantem Emissionsstrom.

Tab. 4.4: Zusammenfassung der in den LEYBOLD Handblättern Physik vorgeschlagenen Experimente mit Röntgenstrahlen (Fortsetzung)

Experiment	Schwerpunkte
1.4 Bestimmung der Ionendosisleistung der Röntgenröhre mit Molybdän-Anode (P6.3.1.4)	<ul style="list-style-type: none"> • Einführung und Erklärung der Begriffe Ionendosis und Ionendosisleistung zur Quantifizierung der Wirkung von Röntgenstrahlen; • Bestimmung der Ionendosisleistung in einem luftgefüllten Plattenkondensator durch Messung des Ionisationsstroms.
1.5 Untersuchung der Schwächung von Röntgenstrahlung in Abhängigkeit von Absorbermaterial und Absorberdicke (P6.3.2.1)	<ul style="list-style-type: none"> • Untersuchung der Schwächung von Röntgenstrahlung in Abhängigkeit von der Absorberdicke; • Bestätigung des Lambertschen Schwächungsgesetzes; • Untersuchung der Schwächung von Röntgenstrahlung in Abhängigkeit vom Absorbermaterial; • Nachweis der Wellenlängenabhängigkeit der Schwächung.
1.6 Bragg-Reflexion: Beugung von Röntgenstrahlen an einem Einkristall (P6.3.3.1)	<ul style="list-style-type: none"> • Untersuchung der Bragg-Reflexion an einem NaCl-Einkristall mit der charakteristischen Röntgenstrahlung des Molybdän; • Wellenlängenbestimmung für die charakteristische Röntgenstrahlung $K\alpha$ und $K\beta$ von Molybdän; • Bestätigung des Braggschen Reflexionsgesetzes; • Bestätigung der Wellennatur der Röntgenstrahlung.

Tab. 4.4: Zusammenfassung der in den LEYBOLD Handblättern Physik vorgeschlagenen Experimente mit Röntgenstrahlen (Fortsetzung)

Experiment	Schwerpunkte
1.7 Bragg-Reflexion: Bestimmung der Gitterkonstanten von Einkristallen (P7.1.2.1)	<ul style="list-style-type: none"> • Untersuchung und Vergleich der Bragg-Reflexion an einem LiF- und einem NaCl-Einkristall; • Bestimmung der Gitterkonstanten von NaCl und LiF.
1.8 Laue-Aufnahme: Untersuchung der Gitterstruktur kristalliner Stoffe (P7.1.2.2)	<ul style="list-style-type: none"> • Auswertung der Laue-Aufnahmen eines NaCl- und eines LiF-Kristalls; • Untersuchung der Symmetrie und der Gitterstruktur der beiden Kristalle.
1.9 Debye-Scherrer-Aufnahme: Bestimmung der Netzebenenabstände von polykristallinen Pulverproben (P7.1.2.3)	<ul style="list-style-type: none"> • Auswertung der Debye-Scherrer-Aufnahmen einer NaCl- und einer LiF-Probe; • Untersuchung der Gitterstruktur von NaCl- und LiF-Kristallen; • Bestimmung der Gitterkonstanten und der Netzebenenabstände.
<i>2. Experimente zur Einführung in die Quantenphysik</i>	
2.1 Duane-Huntsches Verschiebungsgesetz und Bestimmung des Planckschen Wirkungsquantums (P6.3.3.3)	<ul style="list-style-type: none"> • Bestimmung der Grenzwellenlänge des Bremsstrahlungskontinuums in Abhängigkeit von der Hochspannung der Röntgenröhre; • Bestätigung des Duane-Huntschen Verschiebungsgesetzes; • Bestimmung des Planckschen Wirkungsquantums.

Tab. 4.4: Zusammenfassung der in den LEYBOLD Handblättern Physik vorgeschlagenen Experimente mit Röntgenstrahlen (Fortsetzung)

Experiment	Schwerpunkte
2.2 Untersuchung des Energiespektrums einer Röntgenröhre in Abhängigkeit von Hochspannung und Emissionsstrom (P6.3.3.2)	<ul style="list-style-type: none"> • Aufzeichnung der Energiespektren einer Röntgenröhre mit Mo-Anode durch Bragg-Reflexion der Röntgenstrahlung an einem NaCl-Einkristall in erster Beugungsordnung; • Deutung der Energiespektren als Überlagerung aus dem Kontinuum der Bremsstrahlung und den Linien der charakteristischen Röntgenstrahlung des Anodenmaterials; • Untersuchung der Abhängigkeiten der Bremsstrahlung und der charakteristischen Strahlung von Hochspannung und Emissionsstrom.
2.3 Compton-Effekt: Nachweis des Energieverlusts des gestreuten Röntgenquants (P6.3.3.7)	<ul style="list-style-type: none"> • Messung der Transmissionen einer Cu-Folie für die ungestreute und die an einem Aluminiumkörper gestreute Röntgenstrahlung; • Bestimmung der Wellenlängenverschiebung für die gestreute Röntgenstrahlung aus der Änderung der Transmission; • Vergleich der gemessenen mit der für Compton-Streuung berechneten Wellenlängenverschiebung.

Tab. 4.4: Zusammenfassung der in den LEYBOLD Handblättern Physik vorgeschlagenen Experimente mit Röntgenstrahlen (Fortsetzung)

Experiment	Schwerpunkte
<i>3. Experimente zur Einführung in die Atomphysik</i>	
3.1 Untersuchung der Wellenlängenabhängigkeit des Schwächungskoeffizienten (P6.3.2.2)	<ul style="list-style-type: none"> • Messung der Transmission einer Kupferfolie und einer Zirkonfolie für Röntgenstrahlung in Abhängigkeit von der Wellenlänge; • Untersuchung der Wellenlängenabhängigkeit des Schwächungskoeffizienten außerhalb der Absorptionskanten; • Bestätigung des λ^3-Gesetzes für den Absorptionskoeffizienten.
3.2 Untersuchung der Abhängigkeit des Schwächungskoeffizienten von der Ordnungszahl (P6.3.2.3)	<ul style="list-style-type: none"> • Messung der Transmission für Röntgenstrahlung in Abhängigkeit von der Ordnungszahl bei fester Wellenlänge außerhalb der Absorptionskanten; • Untersuchung der Ordnungszahl-Abhängigkeit des Schwächungskoeffizienten außerhalb der Absorptionskanten; • Bestätigung des Z^4-Gesetzes für den Absorptionskoeffizienten.
3.3 Feinstruktur der charakteristischen Röntgenstrahlung einer Molybdän-Anode (P6.3.3.4)	<ul style="list-style-type: none"> • Untersuchung der charakteristischen Röntgenstrahlung des Molybdän durch Bragg-Reflexion an einem NaCl-Einkristall in der fünften Beugungsordnung; • Identifizierung der charakteristischen Linien $K\alpha$, $K\beta$ und $K\gamma$; • Auflösung der Feinstruktur der $K\alpha$-Linie als Liniendublett und Bestimmung des Wellenlängenabstands innerhalb des Dubletts.

Tab. 4.4: Zusammenfassung der in den LEYBOLD Handblättern Physik vorgeschlagenen Experimente mit Röntgenstrahlen (Fortsetzung)

Experiment	Schwerpunkte
3.4 Kantenabsorption: Filterung von Röntgenstrahlung (P6.3.3.5)	<ul style="list-style-type: none"> • Aufzeichnung des ungefilterten und des durch eine Zirkonfolie gefilterten Spektrums einer Röntgenröhre mit Mo-Anode; • Vergleich der Intensitäten der charakteristischen Linien im ungefilterten und im gefilterten Spektrum.
3.5 Moseley-Gesetz und Bestimmung der Rydberg-Konstante (P6.3.3.6)	<ul style="list-style-type: none"> • Messung der <i>K</i>-Absorptionskanten in den Transmissionsspektren von Zr, Mo, Ag und In; • Bestätigung des Moseleyschen Gesetzes; • Bestimmung der Rydberg-Konstante.

4.5.2 Experimente mit Röntgenstrahlen in Büchern zur Experimentellen Physik und Fachzeitschriften

Ausführliche Beschreibungen von Experimenten mit Röntgenstrahlen für den Einsatz im Unterricht sind in der Literatur zu finden: von besonderer Bedeutung ist das Werk *Ionisierende Strahlen* [23] von H. Harreis und H.G. Bänderle und das von W. Kuhn herausgegebene *Handbuch der experimentellen Physik* [31]. Auch in Publikationen in Fachzeitschriften für Physikdidaktik werden solche Experimente immer wieder behandelt.

Die beiden zitierten Bücher beschreiben viele im Physikunterricht einsetzbare Experimente, sowohl einfache qualitative, als auch anspruchsvolle quantitative Experimente. Dieses Angebot deckt sich aber weitgehend mit den herstellerseitig vorgeschlagenen Experimenten. Im allgemeinen ist die Anzahl der vom Hersteller vorgeschlagenen Experimente [46] größer, die Bücher [23], [31] geben aber der dazugehörigen theoretischen Behandlung eine größere Stellung.

Hier werden nur die Experimente aufgelistet, die nicht schon im Abschnitt 4.5.1 aufgetreten sind, mit dem Ziel, anhand der Daten beider Abschnitte einen Überblick über die derzeit in der Schule realisierbaren Experimente zu schaffen, die eventuell vorhandenen Lücken zu lokalisieren und, wenn möglich, zu schließen.

Tab. 4.5: Einige Experimente mit Röntgenstrahlen aus [23] und [31]

Experiment	Schwerpunkte
<i>1. Grundlegende Eigenschaften der Röntgenstrahlen und Strukturanalyse</i>	
1.1 Strahlungsnachweis mit dem Zählrohr	<ul style="list-style-type: none"> • Vermessung der Zählrohrcharakteristik eines Geiger-Müller-Zählrohres; • Bestimmung des Plateau-Bereiches des Zählrohres; • Bestimmung der Totzeit des Zählrohres.
1.2 Untersuchungen der Kristallstruktur mit einer Debye-Scherrer-Kamera	<ul style="list-style-type: none"> • Auswertung der Drehkristallverfahren-Aufnahme eines LiF-Kristalls; • Untersuchung der Gitterstruktur des LiF-Kristalls; • Bestimmung der Gitterkonstanten und der Netzebenenabstände.
<i>2. Experimente zur Einführung in die Atomphysik</i>	
2.1 Untersuchung der charakteristischen Strahlung einer Röntgenröhre in Abhängigkeit von Hochspannung	<ul style="list-style-type: none"> • Untersuchung der Intensität der $K\alpha$- und $K\beta$-Linien von Kupfer in Abhängigkeit von Energie der anregenden Elektronen; • Bestimmung der Ionisationsenergie der K-Schale von Kupfer.
2.2 Untersuchungen der Absorptionsspektren: Absorptionskanten	<ul style="list-style-type: none"> • Bestimmung der K-Kante von Strontium; • Bestimmung der L-Kanten von Wismut.

Tab. 4.5: Einige Experimente mit Röntgenstrahlen aus [23] und [31] (Fortsetzung)

Experiment	Schwerpunkte
2.3 Moseley-Gesetz: Überprüfung anhand der Absorptionsspektren	<ul style="list-style-type: none"> • Aufnahme der Absorptionsspektren von Zn, As_2O_3, KBr und $Sr(NO_3)_2$; • Bestimmung der K-Absorptionkanten von Zn, As, Br und Sr; • Bestätigung des Moseley-Gesetzes.
2.4 Untersuchung von Röntgenfluoreszenz	<ul style="list-style-type: none"> • Aufnahme von Röntgen-Emissionsspektren mit einem Szintillationszähler; • Anregung von Röntgenfluoreszenz durch die γ-Strahlung von ^{241}Am; • Anregung von Röntgenfluoreszenz durch die β-Strahlung eines $^{90}Sr/^{90}Y$-Präparates; • Nachweis der Fluoreszenzstrahlung von ^{204}Tl-, ^{137}Cs- und ^{109}Cd-Präparaten.
2.5 Moseley-Gesetz: Überprüfung anhand der Röntgenfluoreszenz-Spektren	<ul style="list-style-type: none"> • Aufnahme der Röntgen-Emissionsspektren von Br, Sr, Zr, Mo, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Sn, I, Ba, Sm, Gd, Dy und Tm mit einem Szintillationszähler bei der Anregung durch γ-Strahlung von ^{241}Am; • Bestätigung des Moseley-Gesetzes.

4.5.3 Engpässe bei der praktischen Umsetzung

Beim Vergleichen von Tab. 4.4 und Tab. 4.5 mit den Abschnitten 4.1.2 und 4.3 scheint es auf den ersten Blick, dass alle nach den Lehrplänen für die Gymnasien geforderten Themen im Umkreis „Röntgenstrahlung“ mehr oder weniger von dem großen Angebot an Experimenten abgedeckt sind. Aber beim Übergang vom abstrakten „machbar“ zur konkreten Fragestellung, wie es im Unterricht realisiert werden kann, tauchen zum Teil erhebliche Probleme auf. Solche bei der praktischen Umsetzung auftretenden Engpässe werden in diesem Abschnitt analysiert.

Zeitaufwand

Viele Experimente brauchen zu ihrer Durchführung lange Messzeiten, was sie mehr zu Praktikums- als zu Demonstrationsexperimenten geeignet macht. Es betrifft besonders Experimente zu Themen der Einführung in die Quanten- und Atomphysik, wo quantitative Ergebnisse erwartet werden.

Der Zeitaufwand kann am Beispiel der Bragg-Aufnahme abgeschätzt werden. Bei einer solchen Spektromaufnahme werden der Kristall und der Sensor synchron in kleinen Winkelschritten verstellt, wobei der Sensorwinkel ϑ immer das zweifache vom Kristallwinkel α darstellt: $\vartheta = 2 \cdot \alpha$ (Fig. 3.16). Der Wert des Winkelschrittes wird aus der zu erreichenden Auflösung bestimmt und soll für die Aufnahmen mit „scharfen“ Spektrummerkmalen, wie z.B. charakteristische Linien, $d\alpha = 0,1^\circ$ betragen. Die vom Sensor (Geiger-Müller-Zählrohr) gezählten Ereignisse werden während der Zeit dt , die der Sensor in jeder Winkelposition verbleibt, gemittelt. Gewöhnlich ist die hinreichende statistische Genauigkeit schon bei $dt = 5$ s pro Winkelschritt erreicht.

Für die Aufnahme des Spektrums einer Molybdän-Röhre bei der Anodenspannung $U_A = 35$ kV mit einem NaCl-Kristall in 1. Ordnung, wird der Energiebereich von $E \approx 10$ keV bis 35 keV angestrebt ($\lambda \approx 35$ pm bis 125 pm). Der Winkel α muss entsprechend von $\alpha_{\downarrow} = 3,6^\circ$ bis $\alpha_{\uparrow} = 12,6^\circ$ variiert werden. Bei den angenommenen Werten für $d\alpha$ und dt beträgt die gesamte Messdauer 450 s (7,5 min). Bei der Aufnahme des Spektrums einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode muss der Bereich auf $E \approx 5$ keV bis 35 keV erweitert werden, um die charakteristischen Linien von Kupfer zu beinhalten. So vergrößert sich die Messdauer auf ca. 20 min.

In den Fällen, wenn eine bessere Genauigkeit erwünscht ist oder einige Spek-

tren aufgenommen werden müssen, wird es schwierig, solch ein Experiment in der Unterrichtsstunde unterzubringen.

Dementsprechend darf die Messzeit für alle Experimente, in denen eine spektrale Abhängigkeit untersucht wird, nicht unterschätzt werden. Dazu zählen z.B. die Aufnahmen zum Duane-Huntschen Verschiebungsgesetz oder die Aufnahmen von Absorptionsspektren. Üblicherweise ist dieses Problem dadurch gemildert, dass die modernen Schulröntengeräte solche Aufnahmen automatisch durchführen können, so dass die dafür nötige Zeit zu anderen Zwecken im Unterricht benutzt werden kann.

Probleme bei der Demonstration des Compton-Effekts

Der Compton-Effekt spielt im Rahmen einer Unterrichtsreihe über Quantenphysik eine entscheidende Rolle, sowohl aus historischer als auch aus fachdidaktischer Sicht (siehe z.B. [60], [20], [21], [24], [33]). Dieses Experiment bestätigt, dass Energie- und Impulserhaltung und die relativistischen Ansätze für Impuls und Energie auch für die Wechselwirkung von Photonen und Elektronen gelten. Allerdings kann der Compton-Effekt nicht als Beweis für den Teilchencharakter von Röntgenstrahlen dargestellt werden, da seine Ergebnisse auch aus „Wellensicht“ interpretiert werden können [33], [60].

In der Originalarbeit von A.H. Compton [15] wurde die an einem Graphit-Target gestreute Strahlung einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode untersucht. Zur spektralen Zerlegung wurde ein Bragg-Spektrometer mit einem Calcit-Kristall und einer Ionisationskammer als Nachweisgerät eingesetzt. Die Ergebnisse zeigten, dass das Streuspektrum aus zwei Komponenten besteht: einer Komponente bei der unveränderten Wellenlänge der $K\alpha$ -Linie von Molybdän und einer verschobenen Komponente, wobei die Verschiebung vom Streuwinkel anhängig ist.

Obwohl die Durchführung des Experimentes zum Compton-Effekt in der Originalversion von Compton für den Unterricht sehr interessant wäre, ist sie mit einem Schulröntengerät nicht möglich — dazu müsste es umgebaut werden: die Röntgenröhre muss versetzt und ein Streuer eingebaut werden. Ein Beispiel eines solchen Umbaus ist in [31] beschrieben, mit dem Warnhinweis, dass der Umbau für Lehr- und Unterrichtszwecke nach der Röntgenverordnung **nicht erlaubt** ist und nur im

Rahmen eines Forschungsprojekts gemacht worden war.

Das einzige Experiment zur Compton-Streuung von Röntgenstrahlen, das zurzeit in der Schule durchgeführt werden kann, zeigt qualitativ eine Verkleinerung der Strahlungsenergie nach der Streuung. Dazu wird eine Experimentieranordnung benutzt, die häufig R.W. Pohl zugeschrieben wird [53].

Bei diesem Demonstrationsexperiment fällt ein Röntgenstrahl auf einen Streukörper, die unter einem bestimmten Winkel gestreute Strahlung wird mit einem Zählrohr nachgewiesen (vgl. Fig 4.1). Zum Nachweis der Energieänderung wird ein Abschwächer nacheinander in zwei verschiedenen Stellungen in den Strahl gebracht: (1) zwischen der Röntgenröhre und dem Streukörper und (2) zwischen dem Streukörper und dem Zählrohr. In beiden Positionen wird die Zählrate gemessen. Die Verkleinerung der Energie bei der Streuung lässt sich daraus schließen, dass in der Stellung (2) die Zählrate kleiner als in der Stellung (1) ist, denn das Transmissionsvermögen des Abschwächers ist für die kleinere Energien geringer.

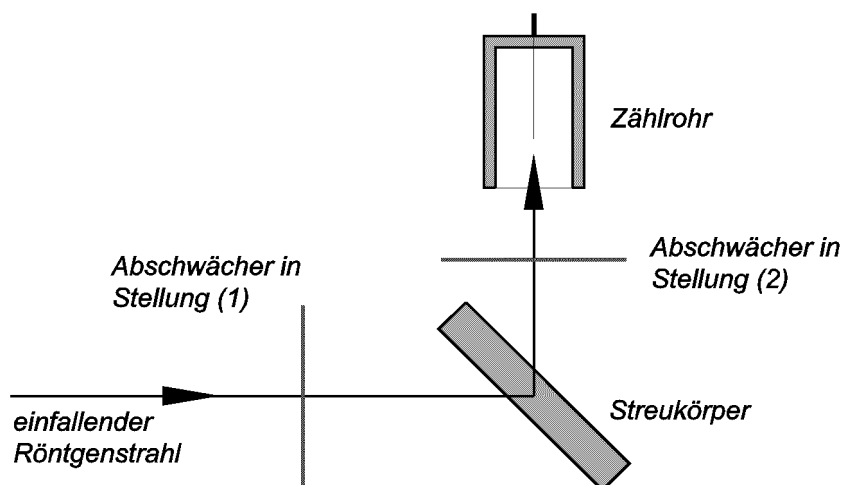


Fig. 4.1: Schematische Darstellung der Anordnung „nach Pohl“ zur Untersuchung des Compton-Effektes.

Die Ergebnisse dieses Experimentes können auch quantitativ ausgewertet werden. Allerdings sind sie mit einem großen Fehler verhaftet und geben nicht die richtige Winkelabhängigkeit wieder⁵.

⁵ Es war in der Literatur [26] ein modifiziertes Auswertungsverfahren beschrieben, der „wenigstens die Tendenz der Winkelabhängigkeit zeigen kann“.

Als eine Alternative zur Compton-Streuung von Röntgenstrahlen kann in der Schule die Streuung von γ -Strahlen eingesetzt werden ([20], [21], [24], [31]). Es werden die radioaktiven Präparate ^{137}Cs ($E_\gamma = 662 \text{ keV}$) oder ^{241}Am ($E_\gamma = 59,5 \text{ keV}$) verwendet. Der Nachweis der Energieverschiebung der gestreuten Photonen wird mit einem Szintillationszähler und einem Vielkanal-Analysator durchgeführt.

Nach dieser Methode kann die quantitative Bestätigung des Compton-Effekts erfolgen. Dennoch hat sie auch Nachteile. Zu einem sind bei der radioaktiven Strahlung Abschirmungsmaßnahmen erforderlich, um den Einfluss der direkt in den Detektor gelangenden Strahlung zu minimieren. Zweitens ist die Aufnahme eines zusätzlichen „Null-Effekt“-Spektrums (d.h. ohne Streukörper) erforderlich. Außerdem sind die in dem Szintillationszähler selbst ablaufenden Prozesse kompliziert und benötigen Deutung (z.B. die Entstehung der Compton-Kante), zudem ist seine Auflösung nicht ausreichend, um bei der ^{241}Am -Strahlung die Compton- und Rayleigh-Peaks zu trennen. Dazu kommt noch die Tatsache, dass der Effekt nicht wie im Originalexperiment an Röntgenstrahlen behandelt wird.

Probleme bei der Untersuchung von charakteristischer Strahlung

Die Röntgenemissions- und Absorptionsspektren stellen ein wichtiges Instrument für die Untersuchung der Atomstruktur dar. Anhand der mit ihnen gewonnenen Daten werden die Energien der inneren Elektronen-Schalen ermittelt (vgl. Abschnitt 3.1.3). Durch die Untersuchung der charakteristischen Strahlung verschiedener Elemente gelang es H.G.J. Moseley 1914, die physikalische Grundlage für das Periodensystem zu schaffen (Moseley-Gesetz).

In seinen Untersuchungen benutzte H.G.J. Moseley eine zerlegbare Röntgenröhre [50], wo Anoden aus unterschiedlichen Materialien eingesetzt werden konnten. Für die Schule ist ein solcher Aufwand nicht vertretbar, deswegen kann das Moseley-Gesetz für die charakteristischen Linien nur anhand der Röntgenfluoreszenz-Spektren geprüft werden.

Die Schulröntengeräte können dazu benutzt werden, durch die emittierte Strahlung in Materialproben außerhalb der Röhre Fluoreszenzstrahlung anzuregen. Allerdings kann diese aufgrund der Gerätekonstruktion nicht mit Hilfe des Bragg-Spektrometers analysiert werden. Die Spektralanalyse mit einem Szintillationszäh-

ler ist auch nicht möglich, da der Detektor nicht in den Experimentierraum von Schulröntengeräten eingebaut werden kann.

In der Schule können als Quellen ionisierender Strahlung zur Anregung der Röntgenfluoreszenz-Spektren geeignete γ - oder β -Strahler dienen. Die Energie der angeregten Fluoreszenzstrahlung wird dann mit dem Szintillationszähler und Vielkanal-Analysator gemessen [21], [31]. Die dabei ermittelten Energien der charakteristischen Linien können Grundlage zur Prüfung des Moseley-Gesetzes darstellen.

Ganz befriedigend ist diese Methode allerdings nicht. Einer der wesentlichen Nachteile liegt in dem nicht ausreichenden Auflösungsvermögen des Szintillationszählers — damit können nicht die $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien aufgelöst werden. Sogar die Andeutung der komplexen Struktur der K -Serie wird erst für die Elemente wahrgenommen, die schwerer als ${}_{62}\text{Sm}$ sind [31]. Außerdem lässt das Eintrittsfenster des Zählers Röntgenstrahlen mit Energien kleiner ca. 12 keV nicht durch. Damit können nur die K -Linien schwererer Elemente untersucht werden und die Untersuchung von L -Linien ist kaum möglich. Dazu kommt noch, dass wegen der Natur der Quelle die Energie der anregenden Strahlung nicht variierbar ist, was Experimente zur Feststellung der Schwellenenergien für die Anregung von charakteristischen Linien nicht zulässt.

4.6 Neue Möglichkeiten durch den Einsatz des energieauflösenden Halbleiterdetektors für Röntgenstrahlen

In Rahmen der vorgestellten Arbeit wurde ein energieauflösender Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen entwickelt. Er ist speziell für den Einsatz mit dem Schulröntengerät von Leybold Didactic bestimmt und wird demnächst von dieser Firma für den Lehrmittel-Markt angeboten. Für seinen Betrieb braucht der Detektor kein flüssiges Stickstoff zur Kühlung.

Der Kern des Detektors ist eine Silizium-PIN-Diode. Ein ankommendes Röntgen-Photon produziert darin eine Anzahl von Elektronen-Loch-Paaren, die zur Energie des Photons in direkter Proportionalität steht. Die der erzeugten Ladung entspre-

chende Spannung wird verstärkt und als Spannungsimpuls ausgegeben. Ein Vielkanalanalysator sortiert die Impulse nach ihrer Amplitude ein und erzeugt damit das Spektrum.

Der Detektor ist für den Einsatz zusammen mit dem Computer-Interface Sensor-CASSY von Leybold Didactic gedacht. Die nötige Vielkanalanalyse wird mit der VKA-Box und der Software *CASSY Lab* realisiert.

Es wurde auch eine alternative Variante der Vielkanalanalyse verwirklicht: mit zusätzlicher Elektronik wurde der Detektor auch an die Benutzung mit einer Soundkarte eines Computers angepasst und die erforderliche Software *VKA Lab* wurde vom Autor entwickelt. Die Software ermöglicht den Einsatz von Standard-Soundkarten für die Aufnahme energieaufgelöster Röntgenspektren und stellt zahlreiche Möglichkeiten der anschließenden Spektrumauswertung zur Verfügung.

Das komplette Röntgenspektrometer-System kann somit in zwei Varianten realisiert werden:

1. *Detektor* + *Sensor-CASSY und VKA-Box* + *Computer mit der Software CASSY Lab* oder
2. *Detektor* + *Computer mit einer Soundkarte und der Software VKA Lab*.

In den beiden Varianten hat das komplette System die Energieauflösung $\Delta E \approx 0,4$ keV (Halbwertsbreite).

In dieser Arbeit wird vorwiegend die zweite Röntgenspektrometer-Variante beschrieben, da die Software *VKA Lab* speziell für den Einsatz mit dem vorgestellten energieauflösenden Halbleiterdetektor entwickelt worden ist und zurzeit wesentlich mehr Möglichkeiten der Spektrenauswertung bietet.

Durch den Einsatz dieses Röntgenspektrometer-Systems können viele Demonstrationsexperimente zu Röntgenstrahlen, Quanten- und Atomphysik leicht im Unterricht durchgeführt werden. Die im Abschnitt 4.5.3 zusammengefassten Probleme werden damit weitgehend gelöst, was mit den unten angegebenen Beispielen illustriert wird.

Das mit dem Halbleiterdetektor aufgenommene Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode ist in Fig. 4.2 dargestellt, seine Messzeit betrug 1 Minute. Zum Vergleich ist auch das nach der Drehkristall-Methode aufgenommene Spektrum von derselben Röntgenröhre präsentiert. Diese Aufnahme dauerte allerdings 25 Minuten.

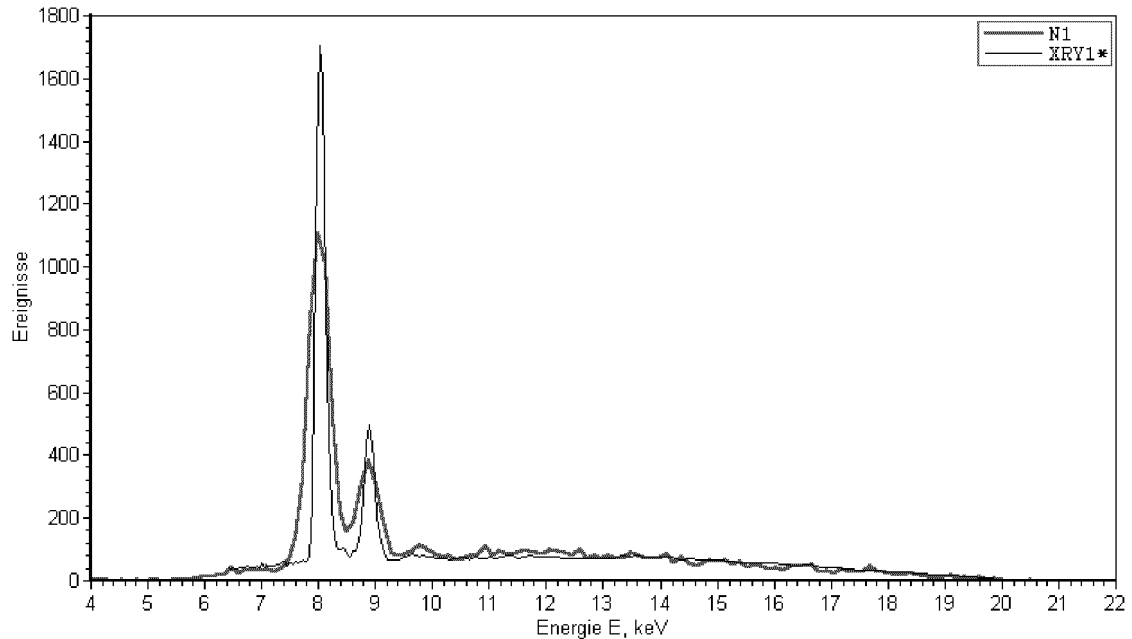


Fig. 4.2: Spektren einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei der Anodenspannung $U_A = 20$ kV: *N1* aufgenommen mit dem Halbleiterdetektor, Messdauer: 60 s; *XRY1** aufgenommen nach der Bragg-Methode, Messdauer: 1500 s. Aufbau siehe Abschnitt 7.4.1.

Fig. 4.3 zeigt die Aufnahmen zur Demonstration des Compton-Effekts an der Molybdän $K\alpha$ -Linie, wie in der Originalarbeit von A.H. Compton. Die Verkleinerung der Energie der gestreuten Röntgenstrahlung sowie die Abhängigkeit vom Streuwinkel ist deutlich zu erkennen. Die Messdauer der Spektren betrug jeweils 1 Minute.

Beispiele von Fluoreszenzspektren bei der Anregung durch die Strahlung einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode sind in Fig. 4.4 dargestellt. Die Spektren von Kupfer und Blei weisen nur die K -Serie bzw. nur die L -Serie auf, im Spektrum von Silber sind sowohl die K -Linien als auch die L -Linien präsent. Die Fluoreszenzspektren können zur Überprüfung des Moseley-Gesetzes sowie für die Analyse der chemischen Zusammensetzung benutzt werden.

Der Einsatz des energieauflösenden Halbleiterdetektors bietet viele weitere Experimentiermöglichkeiten, die zuvor nicht realisierbar waren. Dazu zählen z.B.

- Untersuchungen verschiedener Beugungsordnungen bei der Beugung an Kristall nach Bragg;
- Untersuchung der Verhältnis von Intensitäten der Compton- und Rayleigh-gestreuerten Strahlung für Streukörper aus unterschiedlichen Materialien;

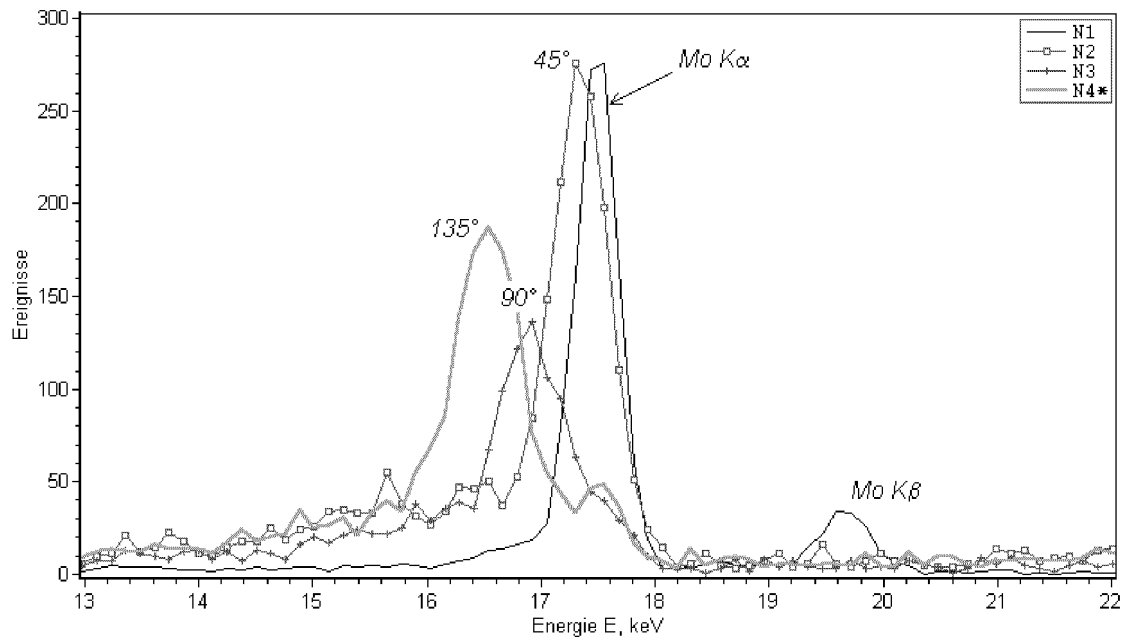


Fig. 4.3: Compton-Streuung an Plexiglas für die $K\alpha$ -Strahlung von Molybdän. Strahlungsquelle: Röntgenröhre mit Molybdän-Anode, mit Zr-Filter. $N1$ – K -Fluoreszenzstrahlung von Molybdän als Referenz (ungefiltert), $N2$ – Streuung bei 45° , $N3$ – Streuung bei 90° , $N4$ – Streuung bei 135° . Messdauer: 60 s pro Spektrum. Im Spektrum $N4$ sind sowohl die Compton-gestreuete Komponente (bei $E = 16,5$ keV) als auch die Rayleigh-gestreuete Komponente (bei $E = 17,5$ keV) sichtbar. Aufbau siehe Abschnitt 8.2.3.

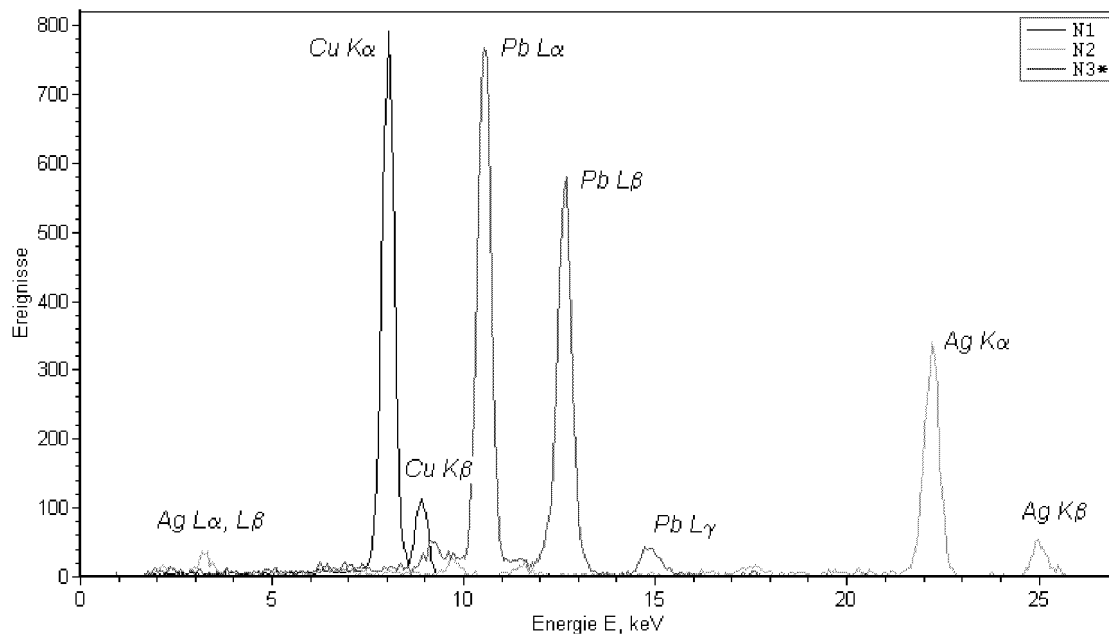


Fig. 4.4: Röntgenfluoreszenz-Spektren von Kupfer ($N1$), Silber ($N2$) und Blei ($N3$). Anregung: Röntgenröhre mit Molybdän-Anode bei der Anodenspannung $U_A = 35$ keV. Messdauer: 60 s pro Spektrum. Aufbau siehe Abschnitt 7.5.1.

- Analyse der chemischen Zusammensetzung unterschiedlicher Objekte, die unter anderem interessante Anwendungen beim fachübergreifenden Experimentieren in den Fächern Chemie, Biologie, Geographie und Geschichte ermöglicht.

Viele dieser Möglichkeiten sind in Kapitel 7 und 8 in Form von Praktikums- und Demonstrationsexperimenten dargestellt. Die Kapitel 5 und 6 geben eine detaillierte Beschreibung der Funktion des Halbleiterdetektors bzw. des Umgangs mit der entwickelten Software *VKA Lab*.

5. DER NEUE HALBLEITERDETEKTOR FÜR SCHULEN

5.1 Das Problem und seine Lösung

Wie aus der Analyse in Abschnitt 4.5.3 klar geworden ist, können einige Schlüsselexperimente zur Quanten- und Atomphysik im Schulunterricht nicht durchgeführt werden. Es betrifft am stärksten die Demonstrationsexperimente zu Compton-Effekt, Röntgenfluoreszenz und Moseley-Gesetz.

Zu ihrer Durchführung mit Schulröntgengeräten müssen Röntgenspektren ohne Kristall-Dispersion aufgenommen werden können. Dementsprechend muss ein energieauflösender Detektor für Röntgenstrahlen vorhanden sein, der eine adäquate Energieauflösung hat, kompakt genug aufgebaut ist, um in den Experimentierraum der Schulröntgengeräte zu passen, und schulgerecht in der Instandhaltung ist. Dazu kommt noch ein wichtiges Kriterium — sein Preis muss für Schulen erschwinglich sein.

Die Anforderungen an die Energieauflösung sind durch die Merkmale der gewünschten Experimente gegeben:

- beim Compton-Effekt sollte die Energieverschiebung der unelastisch gestreuten $K\alpha$ -Linie von Molybdän unter dem Streuwinkel $\vartheta = 90^\circ$ beobachtbar sein — $\Delta E \approx -0,6$ keV;
- es sollten die $K\alpha$ und $K\beta$ -Linien zumindest für die Anodenmaterialien der Röntgenröhren aufgelöst sein: für Molybdän $E_{K\beta} - E_{K\alpha} = 2,5$ keV; für Kupfer $E_{K\beta} - E_{K\alpha} = 0,8$ keV;
- bei der Untersuchung der Röntgenfluoreszenz sollten die $K\alpha$ -Linien von Kobalt

und Nickel¹ aufgelöst sein: $E_{Ni\ K\alpha} - E_{Co\ K\alpha} \approx 0,55\text{ keV}$.

Es ergibt sich damit die nötige Energieauflösung des Detektors $\Delta E \leq 0,5\text{ keV}$.

Als mögliche Varianten können der Silizium PIN-Detektor, der Silizium Drift-Detektor und der Gas Proportional Scintillation Counter (GPSC) betrachtet werden, da sie die nötige Energieauflösung bieten und keine Flüssiggaskühlung brauchen.

Kommerziell vorhandene Si PIN-Detektoren und Si Drift-Detektoren können für den Preis ca. 3000€ erworben werden. Dabei handelt es sich um einen PIN-Detektor mit Vorverstärker bzw. einen Drift-Detektor ohne jegliche Elektronik. Für die kompletten Systeme muss mit einem Preis bis 10000€ gerechnet werden, was für die Schule zu hoch ist.

Obwohl ein GPSC einen relativ einfachen Aufbau hat, muss dieser Detektor einen geeigneten Photomultiplier (mit MgF_2 -Fenster) und ein stabilisiertes Hochspannungsnetzgerät beinhalten. Der Preisaufwand allein für diese zwei Teile liegt bei ca. 2000€.

Es ist dem Autor gelungen, ein Si-PIN-Detektorsystem aufzubauen, ohne auf teure Spezialbauteile zuzugreifen. Als Detektor wurde eine kommerzielle Photodiode eingesetzt, die in einem Gehäuse zusammen mit der kompletten Verstärker-Elektronik untergebracht ist. Die Energieauflösung des Detektors beträgt $\Delta E \approx 0,4\text{ keV}$ (Halbwertsbreite) für die $Fe\ K\alpha$ -Linie bei $E = 6,4\text{ keV}$. Demnächst wird der Detektor für den Lehrmittelmarkt von der Firma Leybold Didactic angeboten.

Eine gute Energieauflösung des Detektors konnte dadurch erreicht werden, dass bei der Entwicklung der elektronischen Schaltung, des Layouts und des mechanischen Aufbaus konsequent das Signal-Rauschen-Verhältnis optimiert wurde und dass einige eigene Lösungen bei der Realisierung der elektronischen Schaltung eingesetzt wurden.

¹ Durch den Vergleich der Fluoreszenzspektren von Kobalt und Nickel konnte H.G.J. Moseley diese zwei Elemente richtig im Periodensystem platzieren. Früher war wegen der kleineren Masse Nickel vor Kobalt angeordnet. Es erscheint dem Autor wichtig, diese beeindruckende Illustration zur Atomphysik experimentell reproduzieren zu können.

5.2 Technische Daten

In diesem Abschnitt sind die technischen Daten des entwickelten Detektor und die Information zu seinem Aufbau zusammengestellt. Das Aussehen des Detektors ist in Fig. 5.1 dargestellt, seine technischen Daten sind in Tab. 5.1 angegeben.

Tab. 5.1: Technische Daten des energieauflösenden Halbleiterdetektors.

Detektor	Si-PIN
Aktive Fläche des Detektors	0,8 mm Durchmesser
Dicke des Detektors	ca. 150 μm
Kühlung des Detektors	thermoelektrisch (Peltier-Element)
Arbeitstemperatur	ca. -15°C
Energieauflösung bei $E = 6,40\text{ keV}$ ($Fe\ K\alpha$ -Linie)	0,4 keV Halbwertsbreite
Eintrittsfenster	Kunststoff. Absorption äquivalent zu Graphit mit $d = 40\ \mu\text{m}$
Nachweisbarer Energiebereich	ca. 2 keV bis 60 keV
Ladungsempfindlicher Vorverstärker	integriert
Linearer Hauptverstärker mit Pulsformer	integriert
Totzeit pro Impuls	ca. 250 μs beim Einsatz mit der VKA-Box ca. 460 μs beim Einsatz mit einer Soundkarte
Speisespannung	Steckernetzgerät: $\pm 15\text{ V}$, $+5\text{ V}$
Ausgang	BNC-Buchse zum Anschluss an die VKA-Box und Sensor-CASSY <i>oder</i> Klinken-Buchse zum Anschluss an eine PC Soundkarte
Abmessungen (B×H×T)	60 mm×120 mm×60 mm
Masse	450 g

Der Detektor besteht aus dem Gehäuse mit zylindrischem Ansatz mit dem Eintrittsfenster für die Röntgenstrahlen. Der Ansatz dient zur Befestigung des Detek-

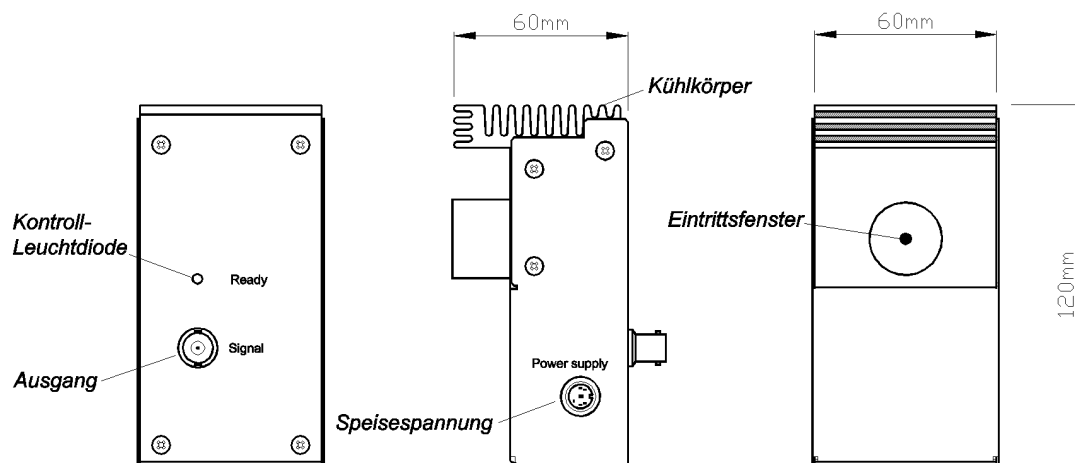


Fig. 5.1: Im Rahmen der Arbeit entwickelter energieauflösender Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen.

tors auf dem Sensorarm des Goniometers, so dass das sich Eintrittsfenster in der Strahlfläche befindet². Zu Abfuhr der entwickelten Wärme ist ein Kühlkörper an das Gehäuse angebracht.

Zum Anschließen der Speisespannung aus einem Steckernetzgerät und des Ausgangskabels sind eine Mini-DIN-Buchse bzw. eine BNC-Buchse vorgesehen. Die Kontroll-Leuchtdiode signalisiert das Erreichen der Arbeitstemperatur durch Farbwechsel von rot auf grün.

Der Detektor ist für den Einsatz zusammen mit dem Computer-Interface Sensor-CASSY von Leybold Didactic gedacht. Die nötige Vielkanalanalyse wird mit der VKA-Box und der Software *CASSY Lab* realisiert.

Es wurde auch eine alternative Variante der Vielkanalanalyse verwirklicht: mit zusätzlicher Elektronik wurde der Detektor auch an die Benutzung mit einer Soundkarte eines Computers angepasst und die erforderliche Software *VKA Lab* wurde vom Autor entwickelt. In dieser Variante erhielt der Detektor statt der BNC-Ausgangsbuchse eine Klinken-Buchse, die mit einem Stereo Klinken-Kabel direkt an die Line-In-Eingang einer PC Soundkarte angeschlossen wird.

Zum Einsatz des Detektors mit dem Röntgengerät von Leybold Didactic (LD-Kat.-Nr. 554811) wird außer dem Steckernetzgerät auch das in Fig. 5.2 abgebildete

² Benutzung des Goniometers ist für die Aufnahme der Röntgenspektren nicht zwingend, aber vorteilhaft, da sie die Untersuchung der Winkelabhängigkeit ermöglicht.

Zubehör benötigt. Dazu zählen

- die Abschwächerblende, die durch ihren sehr kleinen Spalt den direkten Strahl der Röntgenröhre stark genug abschwächt, um sein Spektrum mit dem Detektor zu vermessen;
- der Kreiskollimator, der eine große kreisförmige Öffnung hat (Durchmesser 8,5 mm) und in Experimenten mit kleiner Intensität der Röntgenstrahlen statt des Schlitzkollimators eingesetzt werden kann;
- der Sensorhalter zur Befestigung des Detektors auf dem Goniometer.

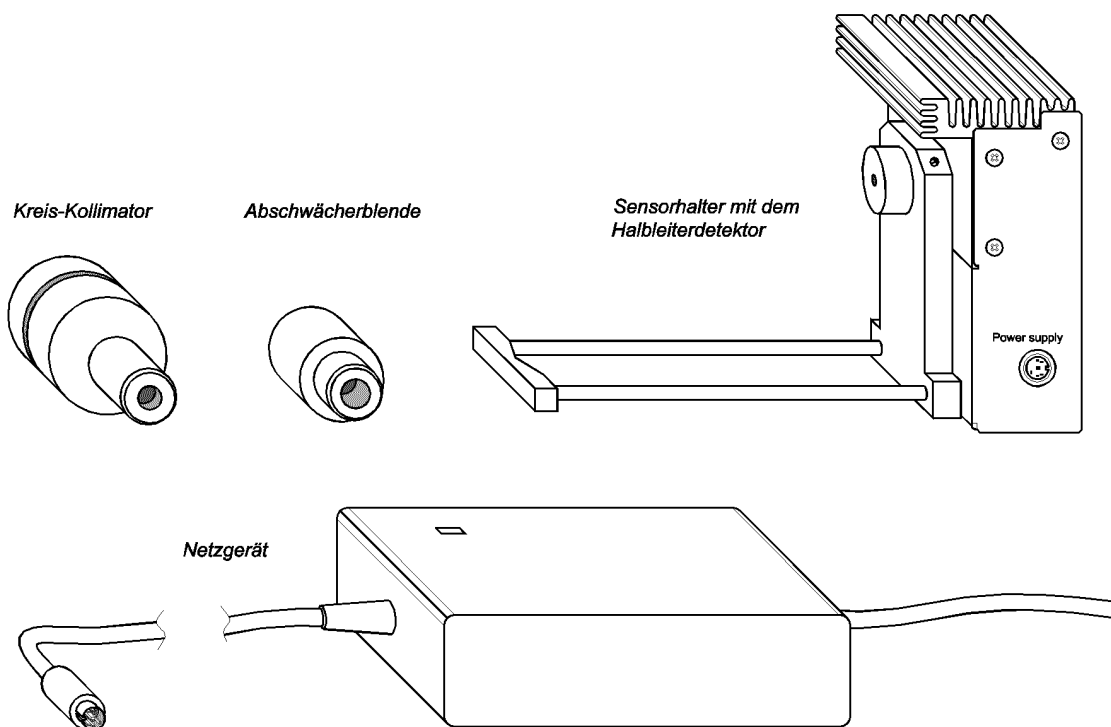


Fig. 5.2: Halbleiterdetektor und Zubehör zum Einsatz mit dem Röntgengerät von Leybold Didactic (LD-Kat.-Nr. 554811).

5.3 Funktionsprinzip

Der Kern des Detektors ist eine Silizium PIN-Diode. Die Abkürzung PIN bezeichnet die Struktur der Diode — sie hat eine ziemlich dicke *intrinsische* (undotierte) Zone zwischen der p- und der n-Zone. Ihre Dicke beträgt ungefähr $150 \mu\text{m}$, damit ist die I-Zone ein relativ guter Absorber für Röntgenstrahlen.

Ein einfallendes Röntgenphoton wird in der Diode absorbiert und löst dabei ein schnelles Photoelektron aus. Dieses Elektron verliert seine Energie in Stößen mit Atomen im Kristall, wobei die Atome ionisiert werden und somit Elektron-Loch-Paare entstehen. Durch das angelegte elektrische Feld werden die Elektronen und die Löcher auseinander gezogen und an den Elektroden gesammelt, bevor sie rekombinieren können.

Im Silizium wird eine mittlere Energie von $\epsilon \approx 3,8$ eV gebraucht, um ein Elektron-Loch-Paar zu erzeugen. Somit beträgt die an der Kathode gesammelte mittlere Ladung nach der Absorption eines $Fe K\alpha$ Photons ($E \approx 6400$ eV) nur $dq = e \cdot E/\epsilon \approx 1680$ Elektronen oder etwa 10^{-16} Coulomb. Dieses Signal ist außerordentlich klein und muss vielfach mit einem sehr rauscharmen linearen Verstärker elektronisch verstärkt werden.

Das elektronische Rauschen der PIN-Diode wird durch Kühlung vermindert, die mittels eines Peltier-Elementes geschieht, so dass bei der Umgebungstemperatur $T_0 = 25^\circ$ C die Temperatur an der Diode ungefähr $T \approx -15^\circ$ C ist.

Nach Absorption eines Röntgenphotons mit der Energie E gelangt die Ladung $dq = e \cdot E/\epsilon$, die in der Diode erzeugt wurde, in einen ladungsempfindlichen Vorverstärker und wird im Rückkopplungskondensator $C_f \approx 1$ pF aufgesammelt (vgl. Fig. 5.3). Die Ausgangsspannung des Vorverstärkers ändert sich damit stufenweise auf $dU = dq/C_f$ (vgl. Signalform 1a in Fig. 5.4). Die Höhe einer solchen Stufe für ein $Fe K\alpha$ Photon ist $dU \approx 100$ μ V.

Der Spannungsverlauf am Ausgang des Vorverstärkers nach Absorption mehrerer Photonen ist in Fig. 5.4 (Signalform 1b) dargestellt. Der treppenähnliche Anstieg muss ab und zu zurückgesetzt werden. Diese Aufgabe wird vom Reset Komparator übernommen (B in Fig. 5.3), der den Rückkopplungskondensator kurzschließt, sobald die Ausgangsspannung des Vorverstärkers einen bestimmten Pegel erreicht hat.

Die stufenähnlichen Pulse müssen vielfach verstärkt und durch Integrieren und Differenzieren geformt werden (vgl. Hauptverstärker C in Fig. 5.3), bevor sie vermessen werden können. Die Verstärkung muss zu einem sehr rauscharm sein, um die Energieauflösung nicht zu verschlechtern, und zum anderem muss sie möglichst linear und stabil sein. Die Impulsform nach dem Hauptverstärker ist in Fig. 5.4 (Kurve 2) dargestellt.

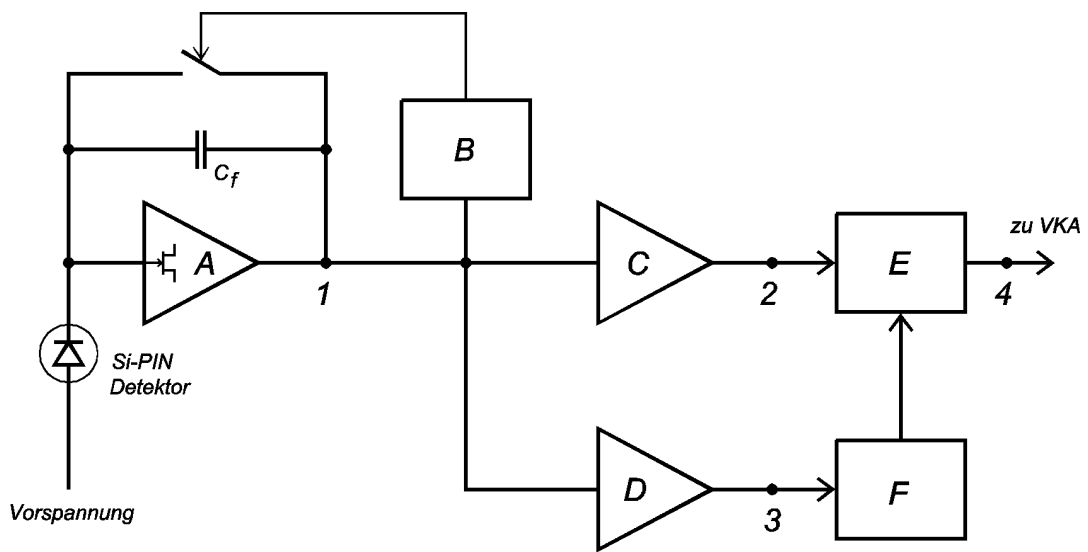


Fig. 5.3: Blockdiagramm des energieauflösenden Detektors. *A*: ladungsempfindlicher Vorverstärker mit Feldeffekttransistor-Eingang; C_f : Rückkopplungskondensator; *B*: Reset Komparator; *C*: linearer Hauptverstärker mit Pulsformer; *D*: schneller Verstärker; *E*: Ausgangsimpuls-Vorbereitung; *F*: Pile-Up Rejector. Die Signalform an den Punkten 1 bis 4 ist in Fig. 5.4 dargestellt.

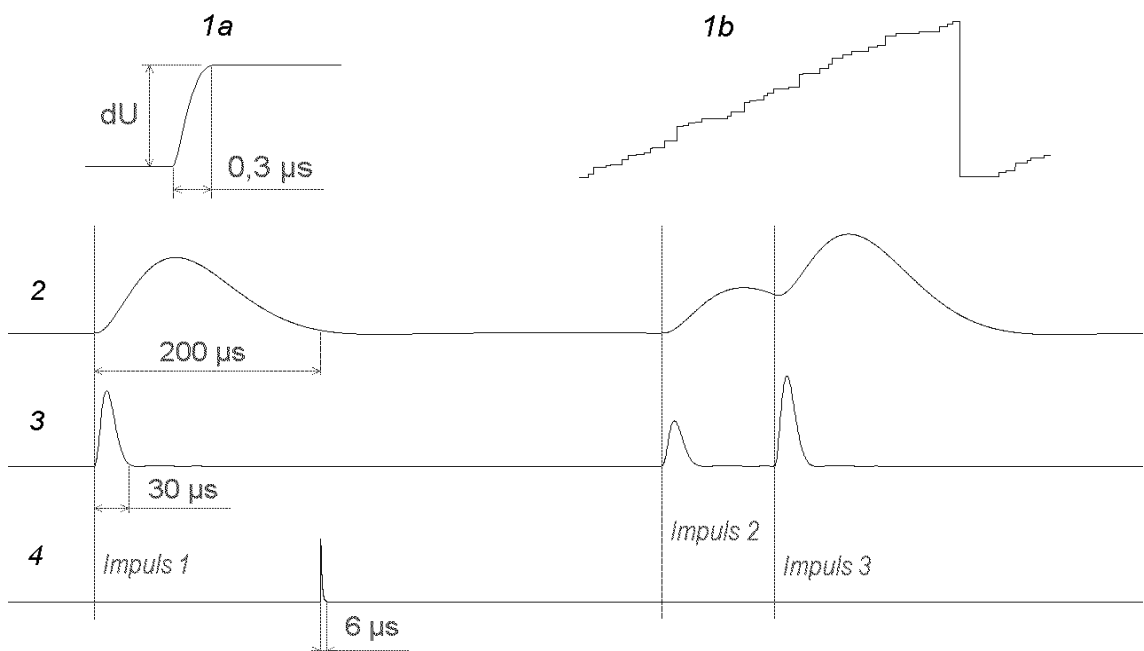


Fig. 5.4: Spannungsverlauf in Punkten 1 bis 4 der Fig. 5.3. Kurven 1a und 1b: nach dem Vorverstärker; 2: nach dem Hauptverstärker; 3: Impulse des schnellen Kanals; 4: Ausgangsimpulse. Die vertikalen Linien *Impuls 1*, *Impuls 2* und *Impuls 3* markieren das Ankommen der Impulse des Vorverstärkers.

Um diese Impulse für die Messung im Vielkanal-Analysator (VKA) vorzubereiten, werden sie verkürzt (E in Fig. 5.3). Die Signalform, die damit am Detektorausgang zur Verfügung steht, ist in Fig. 5.4 (Kurve 4) gezeigt.

Der Vielkanal-Analysator sortiert die Ausgangsimpulse des Detektors nach ihren Höhen ein und erzeugt eine *Impulshöhen-Verteilung*. Auf deren X-Achse stehen die Amplituden der Impulse, auf der Y-Achse wird die Anzahl der registrierten Impulse mit bestimmter Amplitude dargestellt. Da die Amplituden der Impulse zur Energie des im Detektor absorbierten Röntgenphotons proportional sind, stellt diese Impulshöhen-Verteilung nach der Energiekalibrierung ein Energiespektrum der Strahlungsquelle dar. Die Vielkanal-Analyse geschieht mit Hilfe von Sensor-CASSY mit einer VKA-Box und der Software *CASSY Lab* oder mit Hilfe von einer PC Soundkarte und der Software *VKA Lab* (siehe Kapitel 6).

5.4 Pile-Up Rejection

Um besseres Signal-zum-Rauschen-Verhältnis zu haben, sind die Impulse nach dem Hauptverstärker ziemlich breit (ungefähr $200 \mu\text{s}$) und können sich bei einer hohen Photonenrate überlagern („*Pile-Up*“ bilden), was zu Fehlern bei der Amplitudenmessung führen kann. Eine solche Situation ist in Fig. 5.4 in Kurve 2 abgebildet: der Impuls 3 vom Vorverstärker kommt $100 \mu\text{s}$ nach dem Impuls 2 an den Eingang des Hauptverstärkers (vgl. vertikale Markierungen). Zu diesem Zeitpunkt ist der Impuls 2 noch nicht beendet und am Ausgang des Hauptverstärkers erscheint ein überlagerter Impuls, dessen Höhe weder dem Impuls 2 noch dem Impuls 3 entspricht.

Um dieser Fehlerquelle entgegenzuwirken, werden der schnellere Verstärker und der Pile-Up Rejector eingesetzt (D bzw. F in Fig. 5.3). Die Impulse nach dem schnellen Verstärker sind kürzer (vgl. Kurve 3 in Fig. 5.4) und erleiden mit großer Wahrscheinlichkeit keine Überlagerung, wenn die Impulse des Hauptverstärkers sich gegenseitig stören. Der Pile-Up Rejector überwacht den zeitlichen Abstand zwischen Impulsen des schnellen Kanals und schaltet den Ausgang aus, wenn dieser Abstand kleiner als die Impulsbreite des Hauptverstärkers ist. Die Zeit, in der der Ausgang ausgeschaltet war, wird in der gesamten Totzeit berücksichtigt (siehe unten). Die Überwachung von Pile-Up und das „Verwerfen“ von überlagerten Impulsen erfolgt

in der Software (*VKA Lab*).

In Fig. 5.5 ist unter anderem die Auswirkung von Pile-Up auf das Spektrum illustriert. Die gezeigten Spektren der Röntgenfluoreszenz von Kupfer wurden in *VKA Lab* bei einer Eingangszählrate von ungefähr 600 Ereignissen/s ohne Pile-Up Rejection (Spektrum *N1*) und mit Pile-Up Rejection (Spektrum *N2*) aufgenommen. Es ist ersichtlich, dass durch das Verwerfen von überlagerten Impulsen das Pile-Up Spektrum fast um das Zehnfache reduziert wird und dass sich dabei die Auflösung der $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien von Kupfer verbessert.

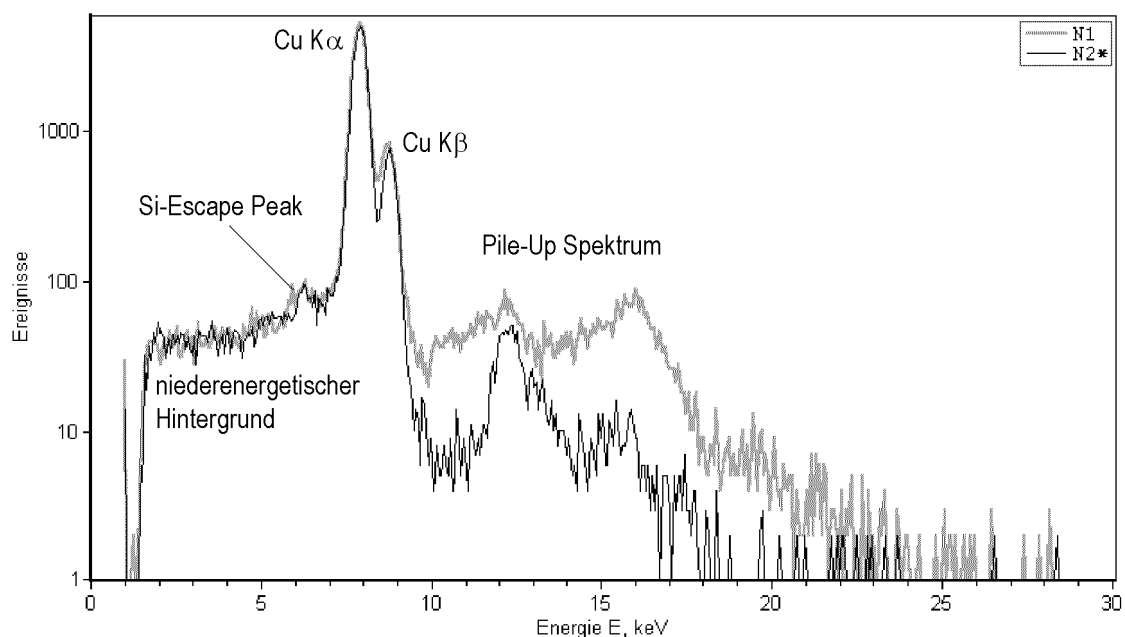


Fig. 5.5: Spektrumartefakte: Pile-Up Spektrum, niederenergetischer Hintergrund, Si-Escape Peak. *N1*: Röntgenfluoreszenz-Spektrum von Kupfer ohne Pile-Up Rejection; *N2*: mit Pile-Up Rejection. Das Pile-Up Spektrum im zweiten Fall ist erheblich reduziert (Man beachte die logarithmische Darstellung. Der Peak bei $E = 12$ keV ist auf einen elektronischen Effekt zurückzuführen, der hier nicht genauer erklärt werden soll). Eingangszählrate: 600 Ereignisse/s. Messdauer: 120 s pro Spektrum.

5.5 Spektrumartefakte

Theoretisch sollte jeder Peak im Energiespektrum die Form einer Gauss-Kurve haben, mit einer Halbwertsbreite, die von der Energie des registrierten Photons und von den Parametern des Detektors abhängt. In der Realität weicht die experimen-

telle Peakform von der theoretischen etwas ab. Diese Abweichung ist auf Prozesse im Detektor sowie auf die Signalverarbeitung zurückzuführen. Die am stärksten auftretenden Erscheinungen sind in Fig. 5.5 dargestellt, dazu zählen außer dem oben behandelten Pile-Up Spektrum der niederenergetische Hintergrund und der Silizium-Escape-Peak.

Der *niederenergetische Hintergrund* erscheint in Spektren bei den Energien, die kleiner als die Energie der starken Linien sind. Die Ursache liegt zu einem daran, dass die nach der Absorption eines Röntgenphotons erzeugte Ladung abhängig vom Ort der Absorption nicht immer vollständig an den Elektroden des Detektors gesammelt werden kann. Solche Detektor-Impulse haben eine kleinere Amplitude und tragen zum niederenergetischen Hintergrund sowie zur Verzerrung der niederenergetischen Peakseite bei.

Die zweite Ursache liegt in der Erzeugung von kontinuierlicher Röntgenstrahlung durch das schnelle Photoelektron, wenn es im Detektor unelastisch gestreut wird. Wenn diese Strahlung nicht im Detektor absorbiert wird, wird die Anzahl der erzeugten Elektron-Loch-Paare kleiner, was wiederum zur Verkleinerung der Impulsamplitude und dementsprechend zum niederenergetischen Hintergrund führt.

Die Erzeugung eines Photoelektrons bei der Absorption eines Röntgenphotons lässt das Silizium-Atom im ionisierten Zustand. Wenn das Photoelektron aus der K -Schale stammt, wird anschließend aus dem Atom ein Silizium K -Röntgenphoton oder ein Auger-Elektron emittiert. Das Röntgenphoton kann mit einer endlichen Wahrscheinlichkeit den Detektor verlassen, so dass seine Energie ($E = 1,74$ keV) nicht zur Erzeugung der Elektron-Loch-Paare verwendet wird. Somit erscheint der so genannte *Silizium-Escape-Peak* im Spektrum bei der Energie, die um $\Delta E = 1,74$ keV unter der Energie der Hauptlinie liegt (vgl. Fig. 5.5).

5.6 Energieauflösung

Trotz einiger Spektrumartefakte, die oben behandelt wurden, kann die Form eines Peaks im Energiespektrum mit guter Genauigkeit mit einer Gauss-Funktion angenähert werden. Die Energieauflösung des Detektors wird dann entweder als die Standardabweichung der Gauss-Verteilung σ_E oder als die Halbwertsbreite $\Delta E \approx$

$2,35 \cdot \sigma_E$ angegeben.

Wie bei anderen Halbleiterdetektoren ist die Energieauflösung des entwickelten Si-PIN-Detektors durch

$$\sigma_E = \sqrt{\sigma_{el}^2 + \epsilon FE}$$

gegeben (vgl. Abschnitt 3.4.5). Dabei charakterisiert σ_{el} das elektronische Rauschen des Detektorsystems, E ist die Energie der Röntgenstrahlung, $\epsilon \approx 3,8$ eV ist die mittlere Energie für die Erzeugung eines Elektron-Loch-Paares im Silizium, F ist der Fano-Faktor.

Der vorgestellte Detektor weist den effektiven Wert des elektronischen Rauschen $\sigma_{el} \approx 0,16$ keV und den Fano-Faktor $F \approx 0,17$ auf. Damit dominiert das elektronische Rauschen bei der Zusammensetzung der Peakbreite: z.B. für die Halbwertsbreite ΔE der $K\alpha$ -Linie von Eisen ($E = 6,4$ keV) gilt

$$\begin{aligned}\sigma_E &= \sqrt{\sigma_{el}^2 + \epsilon FE} \approx \sqrt{2,56 \cdot 10^{-2} + 4,1 \cdot 10^{-3}} \text{ keV} \approx 0,17 \text{ keV}, \\ \Delta E &\approx 2,35 \cdot \sigma_E \approx 0,4 \text{ keV}.\end{aligned}$$

Obwohl das elektronische Rauschen für die Peakbreite entscheidend ist, beträgt seine Halbwertsbreite nur

$$\Delta E_{el}/\epsilon \approx 2,35 \cdot \sigma_{el}/\epsilon \approx 100 \text{ Elektronen},$$

was auf eine sehr gute erreichte Genauigkeit bei der Ladungsmessung hindeutet.

5.7 Abhängigkeit von der Zählrate

Einige Merkmale des gemessenen Energiespektrums hängen von der Zählrate ab, mit der es aufgenommen wurde. Einer der Gründe dafür ist die *Totzeit* des Detektorsystems. Die Totzeit ist das Zeitintervall nach der Registrierung eines Röntgenphotons, in dem keine weiteren eingehenden Photonen registriert werden können. Bei dem vorgestellten Detektor wird die Totzeit fast ausschließlich durch die Zeitkonstante des Hauptverstärkers bestimmt.

Die praktische Auswirkung der Totzeit besteht darin, dass einige Photonen „verloren“ gehen, da sie während der inaktiven Zeit im Detektor ankommen. Anders ausgedrückt ist die Zeit, in der das Detektorsystem aktiv ist und die Impulse zählen kann, etwas kürzer als die tatsächlich abgelaufene Messzeit.

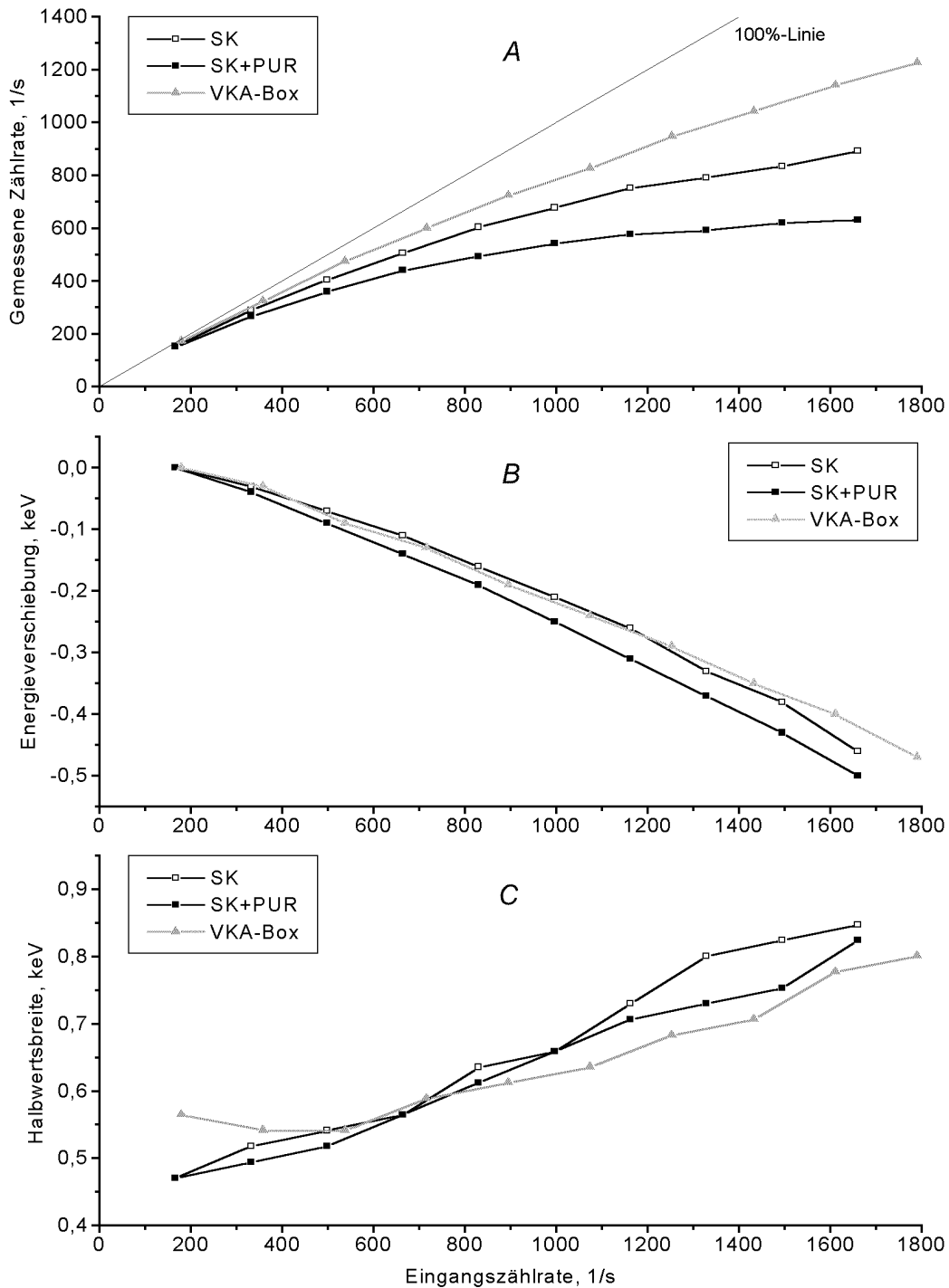


Fig. 5.6: Zählratenabhängige Parameter des Detektors für unterschiedliche Varianten der Vielkanal-Analyse: **SK** – mit Hilfe einer PC Soundkarte ohne Pile-Up Rejection; **SK+PUR** – mit Hilfe einer PC Soundkarte mit Pile-Up Rejection; **VKA-Box** – mit Hilfe der VKA-Box und CASSY.
A – gemessene Zählrate; *B* – Energieverschiebung des gemessenen Spektrums; *C* – Halbwertsbreite der $K\alpha$ -Linie von Molybdän.

In Fig. 5.6 Teilbild A ist der Effekt der Verminderung der gemessenen Zählrate R' bei Erhöhung der Eingangszählrate R gezeigt. Die Datenpunkte wurden durch Vermessung der integralen Intensität des Spektrums einer Röntgenröhre bei Erhöhung ihres Emissionsstromes I_A gewonnen. Die Proportionalitätskonstante $k = R/I_A$ zwischen der Eingangszählrate und dem Emissionsstrom wurde durch Extrapolieren der Werte $k' = R'/I_A$ zu $I_A = 0$ ermittelt (bei $I_A \rightarrow 0$ geht R'/I_A in R/I_A über, da bei sehr kleinen Zählraten die Totzeiteffekte vernachlässigt werden können).

Aus diesen Daten kann die Totzeit des Detektors ausgerechnet werden. Sie beträgt $t_{dead} \approx 250 \mu\text{s}$ pro Impuls beim Einsatz des Detektors mit der VKA-Box und Sensor-CASSY und $t_{dead} \approx 460 \mu\text{s}$ pro Impuls bei Benutzung einer PC Soundkarte für die Vielkanal-Analyse. Wenn im zweiten Fall die Pile-Up Rejection gewählt ist, wird die gesamte Totzeit der Aufnahme zusätzlich um die Zeit, in der das Detektorsystem mit den „veworfenen“ überlagerten Impulsen beschäftigt war, erhöht.

Die Auswirkung der Totzeit auf die gemessene Intensität J kann durch eine *Totzeitkorrektur* ausgeglichen werden:

$$J_{korrigiert} = \frac{\text{Messzeit}}{\text{Messzeit} - \text{Totzeit}} \cdot J_{gemessen}$$

Dabei versteht sich die *Totzeit* als gesamte Totzeit der Aufnahme, die in der Software *VKA Lab* nach jeder Messung festgehalten wird.

Ein anderer Effekt, der bei der Erhöhung der Eingangszählrate auftritt, ist die Verschiebung des Spektrums „als ganzes“ auf der Energieskala (vgl. Fig 5.6 Teilbild B). Dieser Effekt hat seinen Ursprung in der Elektronik des Detektors: die Grundlinie des Impulses, die der Energie $E = 0$ entspricht, verschiebt sich von $U = 0$ bei Erhöhung der Rate der Impulse wegen der AC-Kopplung zwischen den Verstärkerstufen. Da diese Grundlinie durch eine spezielle Schaltung („base-line restoration“) aktiv zurück zu $U = 0$ geregelt wird, ist ihre Änderung mit der Zählrate relativ klein: sie beträgt umgerechnet für die $K\alpha$ -Strahlung von Molybdän ($E = 17,48 \text{ keV}$) ca. 0,3% bei der in den Fluoreszenzspektren erreichbaren Zählrate $R \approx 400/\text{s}$. Bei der maximalen Zählrate $R \approx 1500/\text{s}$ verschiebt sich das Spektrum um ca. 2,3% (umgerechnet für die $Mo K\alpha$ -Linie).

Bedingt durch die größeren Schwankungen der Grundlinie der Impulse wird auch die Energieauflösung bei erhöhten Zählraten etwas schlechter. Die Änderung der

Halbwertsbreite der Molybdän- $K\alpha$ -Linie mit der Eingangszählrate ist in Fig. 5.6 Teilbild *C* dargestellt.

5.8 Fluoreszenz des Gehäusematerials

Die als Detektor eingesetzte Si-PIN-Photodiode stellt einen Silizium-Einkristall dar, der in ein metallisches Gehäuse eingebaut ist. Das Gehäuse ist aus einer Eisenlegierung gefertigt und zur Verbesserung der Hochfrequenz-Eigenschaften mit einer Goldlegierung beschichtet.

Ein bestimmter Teil der einfallenden Röntgenstrahlen dringt durch den Silizium-Kristall, trifft auf die darunterliegenden Materialien und regt sie zur Röntgenfluoreszenz an. Die charakteristischen Röntgenstrahlen des Gehäusematerials gelangen in den Silizium-Kristall und werden zusammen mit der primären Röntgenstrahlung registriert. Damit beinhaltet das gemessene Spektrum immer auch die charakteristischen Linien der Elemente des Gehäusematerials.

In Fig. 5.7 ist das Fluoreszenzspektrum des Gehäuses dargestellt (Extremfall). Zur Anregung wurde die Röntgenstrahlung der Energie $E \approx 31$ keV benutzt, die aus dem Bremsstrahlungskontinuum mit Hilfe der Bragg-Beugung an einem *NaCl*-Kristall gewonnen wurde. Das Spektrum weist die charakteristischen Linien von Eisen, Kobalt, Nickel, Kupfer, Zink, Gold und Silber auf, die unterschiedlich stark ausgeprägt sind.

Die Intensität dieser Linien beträgt nur ein Bruchteil der Intensität der primären Strahlung und hängt stark von ihrer Energie ab, wobei die Fluoreszenz gar nicht angeregt wird, wenn die Energie der primären Strahlung einen bestimmten Wert unterschreitet — die Energie der *K*- bzw. *L*-Kante. So können z.B. die *Ag K*-Linien nur durch Strahlung mit der Energie $E > 25$ keV angeregt werden. Bei den Aufnahmen der Fluoreszenzspektren leichterer Elemente — z.B. von Eisen ($E_{K\alpha} = 6,4$ keV) — ist die Gehäusefluoreszenz nur durch die schwachen *L*-Linien von Silber vertreten.

Die Erfahrung zeigt, dass von allen charakteristischen Linien des Gehäusematerials am häufigsten die *L*-Linien von Gold im Spektrum präsent sind und bei der Interpretation der Ergebnisse berücksichtigt werden müssen. Am seltensten sind die

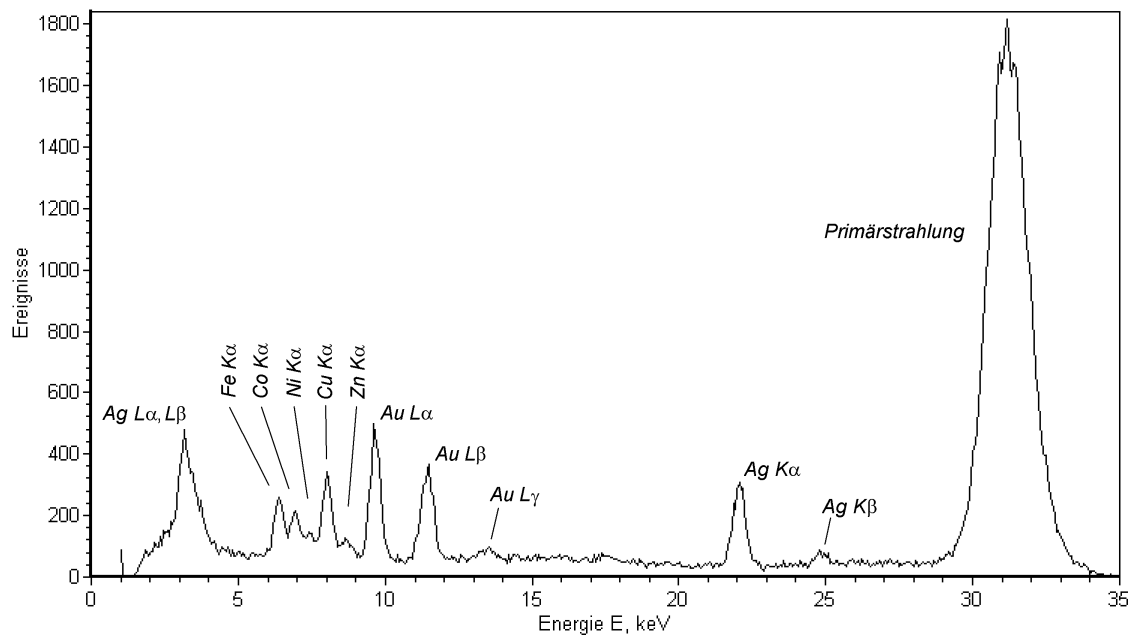


Fig. 5.7: Charakteristische Linien der Elemente des Gehäusematerials. Anregung durch monochromatisierte Röntgenstrahlung mit $E \approx 31$ keV.

K -Linien von Silber zu beobachten.

Die Fluoreszenzlinien des Gehäusematerials sind nicht nur als Störung zu betrachten — sie können erfolgreich als interner Standard für die Energiekalibrierung eingesetzt werden. Von Vorteil ist dabei, dass dieser Standard „immer bei der Hand“ ist und direkt im zu untersuchenden Spektrum „mit aufgenommen“ wird.

5.9 Ansprechwahrscheinlichkeit

Die Ansprechwahrscheinlichkeit $\eta(E)$ des Detektors ist eine Funktion der Energie, die im wesentlichen durch die Absorption im Eintrittsfenster und durch die endliche Dicke des Detektors definiert ist.

Wegen der Absorption im Eintrittsfenster des Detektors kann Röntgenstrahlung kleiner Energie den Detektor nicht erreichen. Der Teil, der in den Detektor gelangt, ist durch

$$\eta_1(E) = e^{-\mu_F \cdot d_F}$$

gegeben. Dabei ist μ_F und d_F der lineare Schwächungskoeffizient bzw. die Dicke des Eintrittsfensters.

Da der Detektor als dünner Silizium-Einkristall beschaffen ist, werden hochener-

getische Röntgenstrahlen in ihm mit einer nicht sehr hohen Wahrscheinlichkeit $\eta_2(E)$ nachgewiesen:

$$\eta_2(E) = 1 - e^{-\mu_D \cdot d_D},$$

wobei μ_D und d_D der lineare Schwächungskoeffizient bzw. die Dicke des Detektor-Kristalls ist.

Die Ansprechwahrscheinlichkeit $\eta(E)$ des Detektors wird als

$$\eta = \eta_1 \cdot \eta_2$$

zusammengesetzt. Ihre Zahlenform wurde durch Vermessung der Absorption des Fensters und der geometrischen Parameter des Detektors mit der Formel

$$\eta(E) = \exp\left\{-\frac{8,87}{E^{2,81}}\right\} \cdot \left(1 - \exp\left\{-\frac{683}{E^{2,77}}\right\}\right)$$

angenähert (grafische Darstellung siehe Fig. 6.13). Dabei ist E in keV ausgedrückt. Die Energieabhängigkeit der Schwächungskoeffizienten wurde aus [67] entnommen.

5.10 Langzeitstabilität

Beim Experimentieren mit Röntgenstrahlen befindet sich der Halbleiterdetektor im Experimentierraum des Röntgengerätes. Der Raum ist geschlossen und zudem noch durch die in der Röntgenröhre entwickelte Wärme geheizt. Damit erschwert sich die Kühlung des Detektors — die Arbeitstemperatur der Si-PIN Diode steigt. Auch die Elektronik des Detektors ist damit während langer Experimente einer wachsender Umgebungstemperatur ausgesetzt.

Diese äußeren Einflüsse verursachen eine langsame Veränderung der Amplitude der Ausgangsimpulse, die sich als Änderung der Positionen der charakteristischen Linien im Spektrum zeigt. Das Ausmaß des temperaturbedingten Driftens ist für verschiedene Energien der Röntgenstrahlen unterschiedlich und beträgt nicht mehr als 3% des Energiewertes in 4 Stunden ununterbrochener Arbeit bei der Temperatur im Labor $T \approx 25^\circ \text{C}$ (vgl. Fig. 5.8).

Da die typischen in dieser Arbeit beschriebenen Demonstrationsexperimente zu ihrer Durchführung eine Messzeit von wenigen Minuten erfordern, ist die Langzeitstabilität des Detektors dabei nicht sehr wichtig. Bei der Spektromaufnahme mit

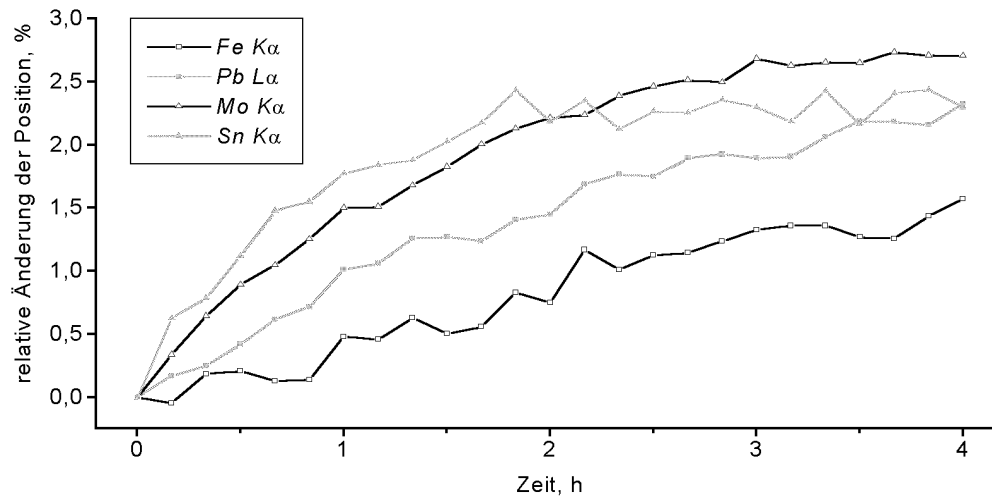


Fig. 5.8: Änderung der Amplituden der Ausgangsimpulse des Detektors während einer Langzeitmessung. Dargestellt sind die Positionen der *Fe Kα*-Linie ($E = 6,40$ keV), der *Pb Lα*-Linie ($E = 10,56$ keV), der *Mo Kα*-Linie ($E = 17,47$ keV) und der *Sn Kα*-Linie ($E = 25,28$ keV) nach der Vielkanal-Analyse

der Messdauer größer als 30 min sollte allerdings berücksichtigt werden, dass sich die Energieauflösung wegen des Driftens verschlechtert. So würde z.B. bei einer dreistündiger Aufnahme die Halbwertsbreite der *Fe Kα*-Linie $\Delta E \approx 0,42$ keV betragen statt $\Delta E \approx 0,38$ keV bei einer Dreiminutenaufnahme; die Halbwertsbreite der *Mo Kα*-Linie würde $\Delta E \approx 0,63$ keV statt $\Delta E \approx 0,52$ keV betragen.

5.11 Linearität

Die Linearität des Detektorsystems hängt nicht nur von der Linearität des Vorverstärkers und des Hauptverstärkers sondern auch von der Linearität des Vielkanal-Analysators ab. Von praktischem Interesse ist die „Endlinearität“, die das mit dem Detektorsystem aufgenommene Energiespektrum aufweist.

Zur Bestimmung der Linearität des Detektorsystems kann das Röntgenfluoreszenz-Spektrum einer Probe mit einer bekannten chemischen Zusammensetzung benutzt werden. Da die genauen Energien der charakteristischen Linien aller Elemente bekannt sind, kann die tatsächliche Äquivalenz der VKA-Kanäle zur Energie durch Vergleichen der Peakpositionen im Spektrum (in Kanälen ausgedrückt) mit den ent-

sprechenden Energien ermittelt werden. Das Spektrum einer solchen Probe sollte die Fluoreszenz-Linien im ganzem zu vermessenden Energiebereich aufweisen. Außerdem sollten diese Linien sich nicht gegenseitig stören.

In Fig. 5.9 ist das Fluoreszenzspektrum eines Kalibriertargets dargestellt. Das Target bestand aus Streifen der Materialien Eisen, Kupfer, Molybdän, Zinn und Blei mit dem Flächenverhältnis 2 : 1 : 1 : 10 : 2. Die in seinem Spektrum vorhandenen charakteristischen Linien decken den Energiebereich von $E = 3,55 \text{ keV}$ (*Sn L*-Linien) bis $E = 28,50 \text{ keV}$ (*Sn K β*) ab.

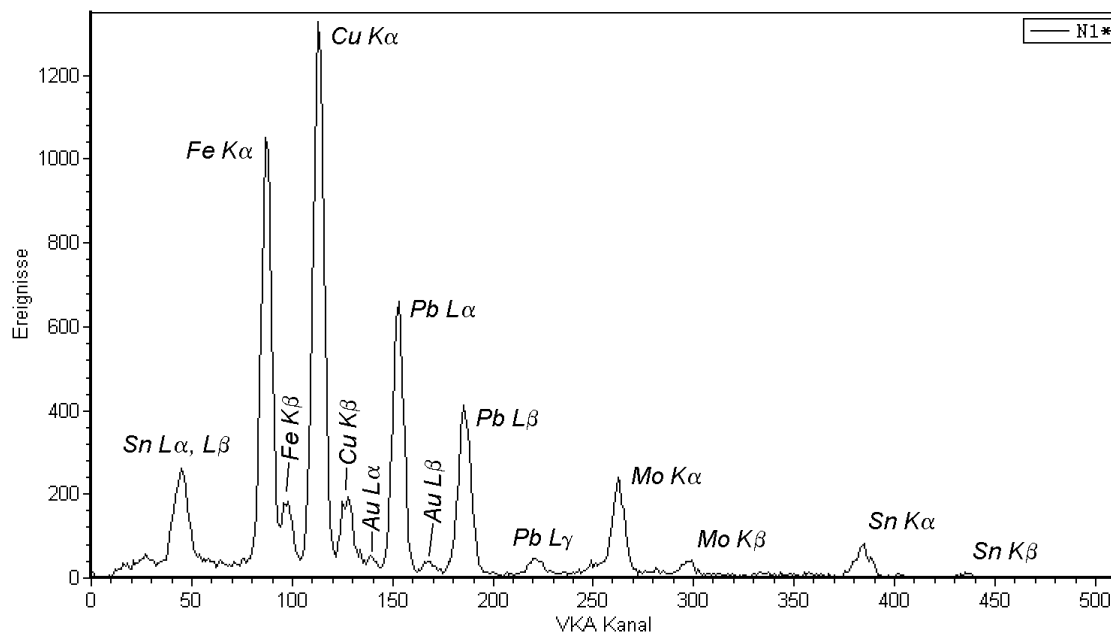


Fig. 5.9: Röntgenfluoreszenz-Spektrum des Kalibriertargets mit der Zusammensetzung $Fe : Cu : Mo : Sn : Pb = 2 : 1 : 1 : 10 : 2$. Die kleinen Peaks der *L*-Linien von Gold sind auf die Fluoreszenz des Detektor-Gehäuses zurückzuführen. Anregung: Strahlung einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode bei $U_A = 35 \text{ kV}$ und $I_A = 1 \text{ mA}$. Messdauer: 10 min.

Nachdem die lineare Energiekalibrierung des Spektrums an zwei Punkten (hier die $K\alpha$ -Linie von Eisen bei $E = 6,40 \text{ keV}$ und die $K\alpha$ -Linie von Molybdän bei $E = 17,48 \text{ keV}$) durchgeführt worden ist, kann die Abweichung der tatsächlichen Positionen der charakteristischen Linien vom linearen Zusammenhang ausgerechnet werden (vgl. Fig. 5.10). Es ist ersichtlich, dass eine gute Linearität in einem breiten Energiebereich angenommen werden kann. Bei kleineren Energien — $E < 5 \text{ keV}$ für die Soundkarte und $E < 3 \text{ keV}$ für die VKA-Box — muss allerdings mit Abweichun-

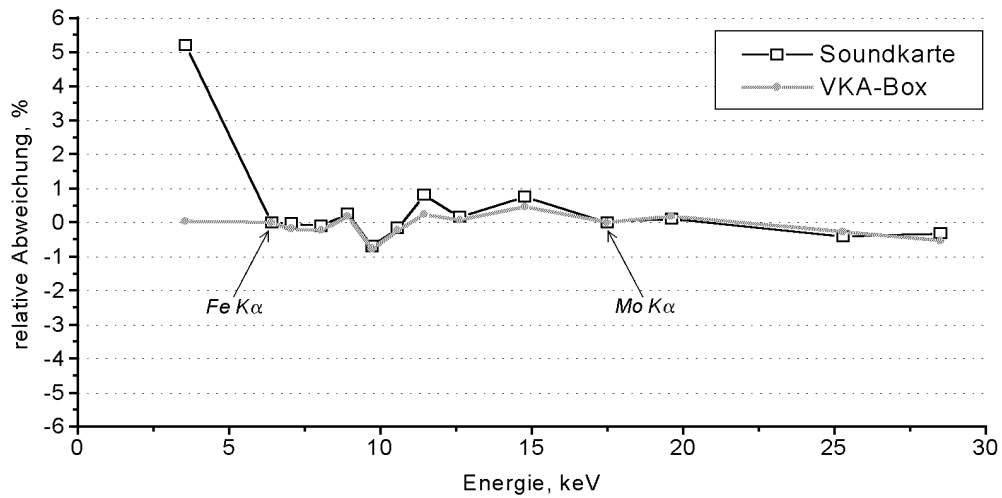


Fig. 5.10: Relative Abweichung der Positionen der charakteristischen Linien im Spektrum vom linearen Zusammenhang. Die lineare Energiekalibrierung ist durch die Position der $Fe K\alpha$ -Linie ($E = 6,40$ keV) und der $Mo K\alpha$ -Linie ($E = 17,48$ keV) gegeben.

gen von der Linearität gerechnet werden.

Nach einjähriger Erfahrung bleibt die einmal für den Detektor ermittelte Energiekalibrierung mit einer guten Genauigkeit in der Zeit konstant. Beim Einsatz einer Soundkarte für die Vielkanal-Analyse muss damit gerechnet werden, dass die Linearität des Systems von der konkreten Soundkarte abhängt.

6. SOFTWARE

Energieauflösende Detektoren benötigen zu ihrem Einsatz immer einen rauscharmen Verstärker mit hoher Linearität, einen Vielkanal-Analysator (VKA) und ein Gerät zur Visualisierung der Spektren. Der Verstärker und der VKA können als „stand-alone“-Geräte oder als Bestandteile eines Multifunktionsgerätes realisiert werden. Die Spektren werden heutzutage mit Hilfe eines Computers und einer geeigneten Software dargestellt und bearbeitet.

Der im Rahmen dieser Arbeit entwickelte energieauflösende Halbleiterdetektor beinhaltet alle nötigen Verstärkerstufen und liefert ein Ausgangssignal, das von einem VKA weiterverarbeitet werden kann. Der „Standard“ Vielkanalanalysator ist das Computer-Interface Sensor-CASSY von Leybold Didactic mit der VKA-Box und der Software *CASSY Lab*.

Für diese Dissertation hat der Autor auch eine alternative Variante der Vielkanalanalyse verwirklicht: mit zusätzlicher Elektronik wurde der Detektor auch an die Benutzung mit einer Soundkarte des Computers angepasst und die erforderliche Software *VKA Lab* wurde entwickelt. Die Software ermöglicht den Einsatz von Standard-Soundkarten für die Aufnahme energieaufgelöster Röntgenspektren und stellt zahlreiche Möglichkeiten der anschließenden Spektrumauswertung zur Verfügung, die zurzeit in *CASSY Lab* noch nicht realisiert sind.

Zudem bietet der Einsatz einer Soundkarte auch die Möglichkeit, die ankommenden Röntgenphotonen zu „hören“. Jeder Ausgangsimpuls des Detektors wird von einem PC Lautsprecher-System in einen „Klick“ umgewandelt. Dabei ist die Schallamplitude zur Energie des Röntgenphotons proportional.

Dieses Kapitel gibt eine Beschreibung der entwickelten Software *VKA Lab*, in dem Umfang, der zur Durchführung der in Kapitel 7 und 8 dargestellten Experimenten ausreicht.

6.1 Hardware Voraussetzungen

Der eingesetzte PC muss folgende Voraussetzungen erfüllen:

- Betriebssystem: ab Windows 95;
- Pentium-Prozessor ab 200 MHz empfehlenswert;
- Monitor-Auflösung: 1024×768 Pixel oder höher empfehlenswert;
- Zur Aufnahme der Spektren: eine Soundkarte mit „Line-In“-Eingang.

6.2 Grundsätzliche Bedienung

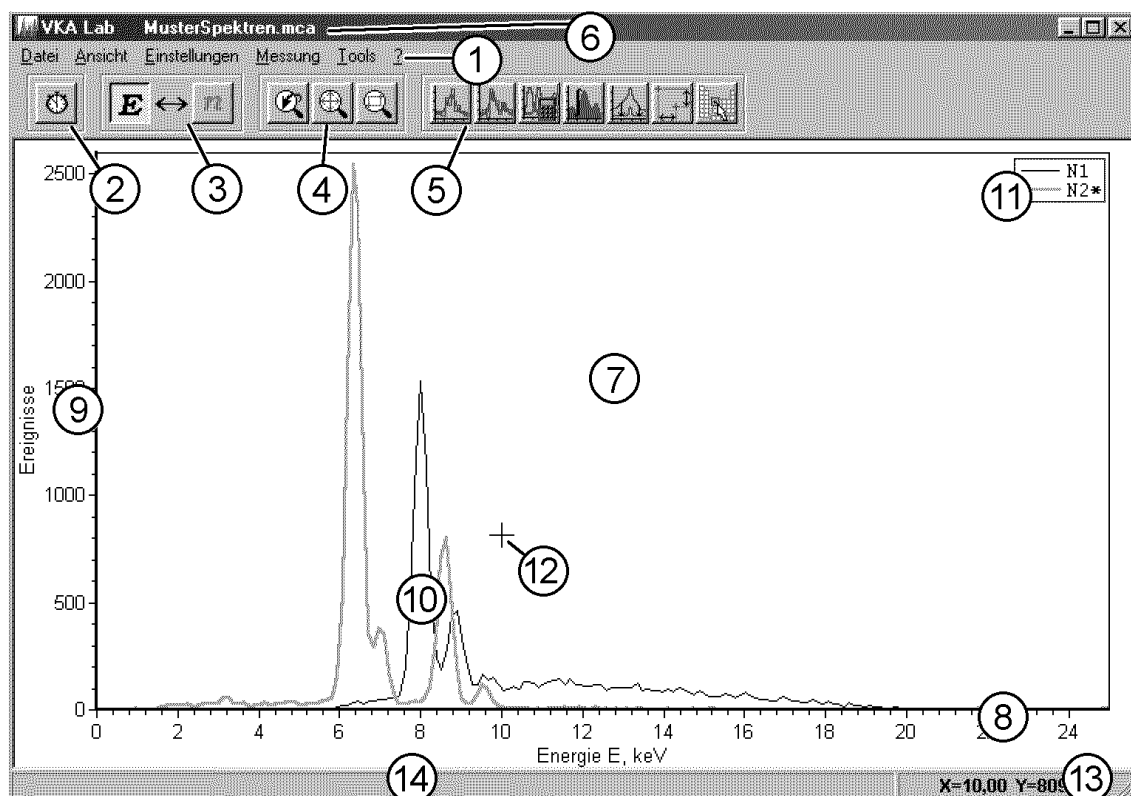


Fig. 6.1: Das Hauptfenster von *VKA Lab*.

Die grundsätzliche Bedienung der *VKA Lab* ist ähnlich, wie bei anderen Windows-Programmen implementiert. Die Funktionen werden durch Anklicken der Menüpunkte (① in Fig. 6.1) oder der Buttons (Felder ②, ③, ④ und ⑤) im Hauptfenster aktiviert. Der aktuelle Dateiname (ggf. auch mehrere) wird in der Titelleiste




angezeigt (6), die Spektren (10) werden im Grafik-Feld (7) dargestellt. Das Grafik-Feld zeigt die X-Achse (8), die in *Kanäle* oder *Energie* dargestellt werden kann, die Y-Achse (9) und die Legende (11) an. Der Cursor (12) wird in diesem Feld als Kreuz abgebildet, seine aktuellen Koordinaten (13) werden in der Statuszeile rechts angezeigt. Der linke Teil der Statuszeile (14) wird zur Darstellung der „Schritt-für-Schritt“ Anweisungen zur Durchführung der Auswertungen bzw. zur Darstellung der Ergebnisse der Auswertungen benutzt.

Menü

Die Befehle des *VKA Lab* sind in sechs Menüs (1) in Fig. 6.1) zusammengefasst: **Datei**, **Ansicht**, **Einstellungen**, **Messung**, **Tools** und **Hilfe**. Die Befehle sind mit kurzen Beschreibungen unten aufgelistet.


- Menü **Datei**

- **Neu**: erstellt eine neue Datei mit den aktuellen Einstellungen. Vorhandene Spektren werden gelöscht, wenn das Speichern im angezeigten Dialogfenster nicht ausgewählt wird.
- **Öffnen...** (Shortcut **F3**): ruft ein Windows-Dialogfenster *Öffnen* auf, zum Öffnen einer früher gespeicherten Datei unter Beibehalten vorhandener Spektren. Der voreingestellte Dateityp ist *MCA Dateien (*.mca)* — die Dateien des *VKA Lab*. Es können alternativ die Dateien der Software *Röntgengerät* von Leybold Didactic (*Röntgengerät Import (*.xry)*) oder Daten im Textformat (*ASCII Import (*.txt)*) importiert werden.
In dem Fall, dass der Name eines vorhandenen Spektrums mit einem zu ladenden übereinstimmt, wird der letzte durch das Dazuschreiben des Symbols „I“ von dem vorhandenen unterscheidbar gemacht (z.B. N1 → N1I).
- **Speichern unter** (Shortcut **F2**): ruft ein Windows-Dialogfenster *Speichern unter* auf, zum Speichern vorhandener Spektren als *MCA Datei (*.mca)*.
- **Drucken...** : ruft ein Windows-Dialogfenster *Drucken* auf, zum Drucken des Grafik-Feldes.


- **Grafik exportieren...** : ruft ein Dialogfenster *Grafik exportieren* auf, zum Speichern des Grafik-Feldes als eine *Bitmap- (*.bmp)*, *Windows Metafile- (*.wmf)* oder *Enhanced Metafile- (*.emf)* Datei.
 - **Beenden**: schließt das Programm *VKA Lab*. Vorhandene Spektren werden gelöscht, wenn das Speichern im angezeigten Dialogfenster nicht ausgewählt wird.
- Menü **Ansicht**
 - **Zoom Fenster** (Shortcut **Alt-Z** oder Button ): vergrößert einen ausgewählten rechteckigen Bereich auf die volle Größe des Grafik-Feldes. Der Bereich wird durch Anklicken zweier diagonaler Ecken definiert und während der Auswahl als Rahmen angezeigt.
 - **Zoom Vorher** (Button ): geht zu den vorherigen Zoom-Parametern zurück. Es werden bis zu zwanzig Zoom-Schritte gespeichert.
 - **Zoom Alles** (Shortcut **Alt-A** oder Button ): skaliert die Grafik zur Darstellung aller Datenpunkte der Spektren.
 - **Spektrum Einstellungen** (Shortcut **F4**): ruft das Fenster *Spektrum Einstellungen* auf, das die Darstellung der Spektren im Grafik-Feld anpassen lässt (siehe Abschnitt 6.2).
 - **Buttons zeigen**: Passt die Größe des Grafik-Feldes so an, dass die Buttons (Felder ②, ③, ④ und ⑤ in Fig. 6.1) angezeigt bzw. versteckt werden, abhängig von den in diesem Menüpunkt gesetzten Häkchen. Die Voreinstellung ist Anzeigen der Buttons.
 - Menü **Einstellungen** (Shortcut **F5**)

ruft das Fenster *Einstellungen* auf, das die Parameter zur Aufnahme der Spektren, zur Darstellung der Grafik und zur Durchführung der Anpassung einstellen lässt. Zur Beschreibung einzelner Funktionen siehe entsprechende Abschnitte (6.3, 6.2 bzw. 6.4.1)
 - Menü **Messung**

Die vollständige Beschreibung der Funktionen ist in Abschnitt 6.3 gegeben.

- **Starten** (Shortcut **F9** oder Button 
 - Menü **Tools**

- **Energie-Darstellung** (oder Button

- **Baseline-Korrektur** (oder Button - Menü **Hilfe**
 - **Inhalt**: ruft die Beschreibung des *VKA Lab* als PDF-Datei auf.
 - **Info**: zeigt die Version der Software *VKA Lab* an.

Grafik-Feld

Die Registerkarte **Grafik** des Fensters **Einstellungen** lässt das allgemeine Aussehen des Grafik-Feldes anpassen (Fig. 6.2). Die Registerkarte beinhaltet zwei Kontrollkästchen: *Rasterlinien anzeigen* und *Gemessene Spektren mit Stufen darstellen* sowie ein Feld zur Eingabe, wie oft die Grafik während der Aufnahme aktualisiert werden soll.

Die angezeigten Rasterlinien erleichtern das Ablesen der Spektrenmerkmale, insbesondere in ausgedruckten Grafiken. Die stufenähnliche Darstellung ist bei der Erläuterung des Sinns der Vielkanal-Analyse hilfreich: die Spektren werden als Histogramme dargestellt. Die *berechneten* Daten (z.B. die Anpassungen) werden unabhängig vom Aktivieren des Kontrollkästchens *ohne* Stufen dargestellt.

Die Aktualisierung der Grafik sollte bei älteren Rechnern (die langsamer sind als ca. 200 MHz) nicht öfter als jede 2. bis 5. Sekunde geschehen. Sonst wird die tatsächliche Aufnahmedauer durch das häufige Neuzeichnen erheblich länger.

Die Parameter der Achsen werden in Fenstern eingestellt, die durch Rechtsklick auf die entsprechende Achse oder mit dem Shortcut Alt-X bzw. Alt-Y aufzurufen

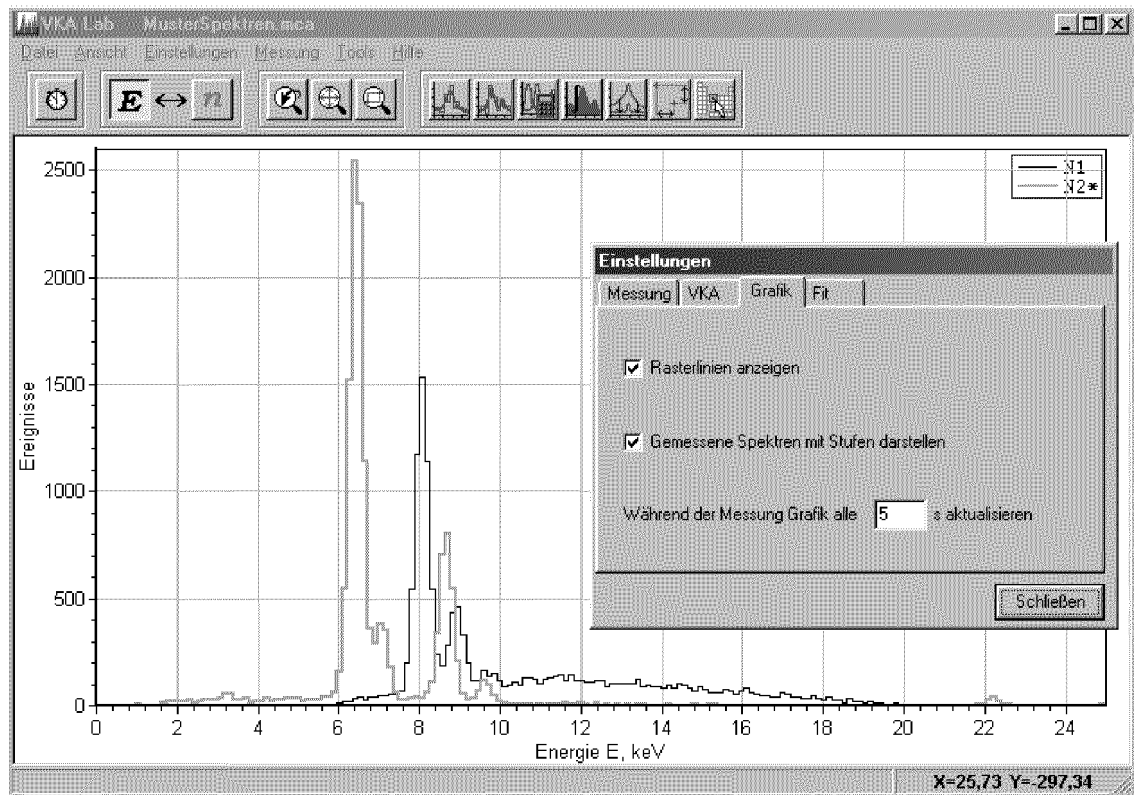


Fig. 6.2: Registerkarte *Grafik* des Fensters *Einstellungen* und Aussehen des Grafik-Feldes beim Aktivieren der Kontrollkästchen *Rasterlinien anzeigen* sowie *Gemessene Spektren mit Stufen darstellen* (vgl. mit den gleichen Spektren in Fig. 6.1).

sind (Fig. 6.3). Das Minimum und das Maximum der Achse werden in die zugehörigen Felder dieser Fenster über die Tastatur eingegeben. Alternativ kann die Achse mit dem Button *Min. und Max. suchen* so skaliert werden, dass sie alle in den Spektren vorhandenen Datenpunkte umfasst.

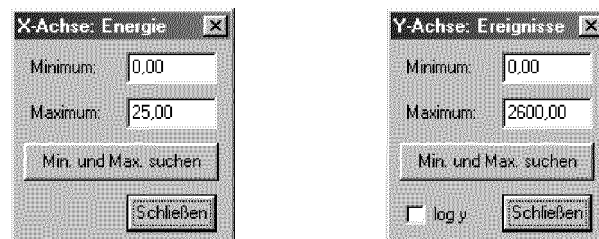


Fig. 6.3: Fenster zur Eingabe der Achsenparameter (Zahlenwerte wie in Fig. 6.2).

Das Fenster der Y-Achse hat ein zusätzliches Kontrollkästchen *log y*, das die logarithmische Darstellung dieser Achse aktiviert.

Das Fenster *Spektrum Einstellungen* wird durch das Rechtsklick auf die Legende oder mit dem Shortcut F4 aufgerufen (vgl. Fig. 6.4). Das zu verwaltende Spektrum kann im Feld *Spektrum* ausgewählt werden. Wobei beim Erscheinen des Fensters automatisch genau das Spektrum gezeigt wird, auf dessen Symbol in der Legende geklickt wurde. Das Feld *Messdauer* dient zur Eingabe der gewünschten Dauer der Aufnahme, unter *Messzeit* wird die schon abgelaufene Zeit angezeigt.

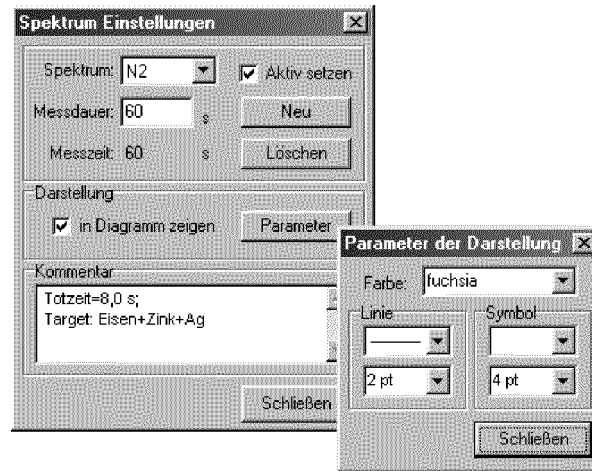


Fig. 6.4: Fenster *Spektrum Einstellungen* und *Parameter der Darstellung* (Inhalt entspricht Fig. 6.2).

Das Kontrollkästchen *Aktiv setzen* legt das Spektrum fest, mit dem die Auswertungen zu machen sind; dieses Spektrum wird in der Legende mit „*“ markiert. Ein Spektrum kann auch durch Doppelklick auf sein Symbol in der Legende aktiv gesetzt werden, ohne das Fenster *Spektrum Einstellungen* aufzurufen.

Der Button *Neu* erzeugt ein neues „leeres“ Spektrum, der Button *Löschen* löscht das gewählte Spektrum. Allerdings muss zum Löschen zusätzlich die Taste *Strg* gedrückt gehalten werden.

In das Feld *Kommentar* werden einige Daten von der Software automatisch geschrieben, wie z.B. die gesamte Totzeit bei der Spektromaufnahme oder die Anpassungsparameter bei einem Fit. Die vom Benutzer eingegebenen Kommentare (z.B. „Target: Fe+Zn+Ag“ in Fig. 6.4) werden auch mitgespeichert.

Das Kontrollkästchen *In Diagramm zeigen* bestimmt, ob das gewählte Spektrum dargestellt wird. Ein Spektrum kann auch durch Klicken auf sein Symbol in der Legende bei gleichzeitig gedrückter Taste *Strg* ein- und ausgeschaltet werden, ohne das Fenster *Spektrum Einstellungen* aufzurufen.

Der Button *Parameter* ruft das Fenster *Parameter der Darstellung* auf, das das Aussehen des gewählten Spektrums verwaltet (vgl. Fig. 6.4).

In diesem Fenster können folgende Merkmale des Spektrums festgelegt werden:

die **Farbe**: schwarz, rot, grün, blau, fuchsia, aqua;


die **Linienform**: —————, — — —, - - - - - oder ohne Linie;

die **Linienbreite**: von 1 pt bis 5 pt;

das **Symbol des Datenpunktes**: □, ■, ○, ●, ▽, ▼, △, ▲, +, ×;

die **Größe des Symbols**: von 1 pt bis 5 pt.

6.3 Aufnahme von Röntgenspektren

Registerkarte *Messung* des Fensters *Einstellungen*. Der Wert im Eingabefeld *Standardwert der Messdauer* legt für alle neu erzeugten Spektren die voreingestellte Länge der Aufnahme (in Sekunden) fest. Bei aktiviertem Kontrollkästchen *Messung direkt starten* wird nach Klicken des Buttons  (oder Taste F9) ein neues Spektrum mit der eingestellten Messdauer erzeugt und die Aufnahme gestartet. Anderenfalls wird nach Erzeugung des Spektrums das Fenster *Spektrum Einstellungen* aufgerufen, in dem die Messdauer korrigiert oder ein Kommentar eingegeben werden kann. Zum Starten der Aufnahme muss noch mal die Taste F9 gedrückt werden.

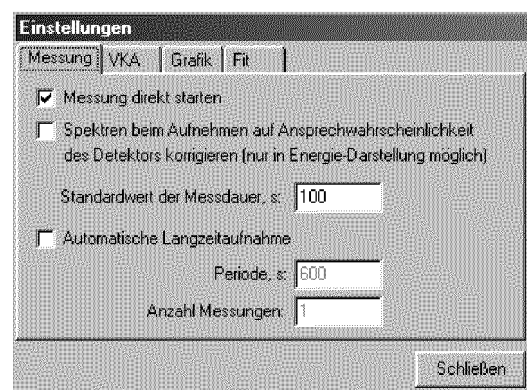


Fig. 6.5: Registerkarte *Messung* des Fensters *Einstellungen*.

Bei der Aktivierung des Kontrollkästchens *Spektren beim Aufnehmen auf Ansprechwahrscheinlichkeit des Detektors korrigieren* werden die ankommenden Impulse bei der Vielkanalanalyse mit der energieabhängigen Ansprechwahrscheinlichkeit des Detektors gewichtet (s.a. Abschnitt 6.4.9).

Bei der *Langzeitaufnahme* handelt es sich um eine Reihe von Messungen, bestehend aus mehreren (Feld *Anzahl Messungen*) Spektren mit Standardmessdauer, die mit der eingegebenen *Periode* automatisch erzeugt und aufgenommen werden.

Die Registerkarte **VKA** des Fensters **Einstellungen** dient zur Einstellung der Anzahl und der Breite der Kanäle des Vielkanal-Analysators. Da die Hardware-Basis des Analysators die Soundkarte des Computers ist, wird die allgemeine Einstellung der Signalamplitude mit der Lautstärkeregelung von Windows gemacht. Die

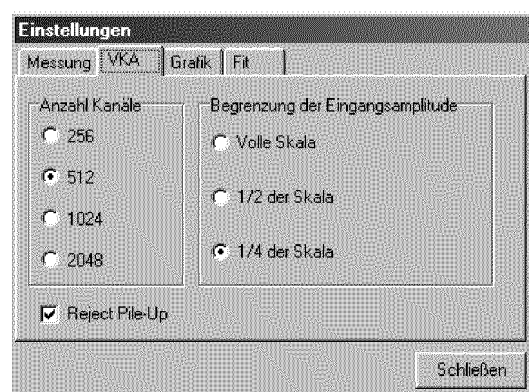




Fig. 6.6: Registerkarte *VKA* des Fensters *Einstellungen*.

Auswahl im Feld *Begrenzung der Eingangsamplitude* legt den zu benutzenden Teil des Eingangsbereichs (16 bit) der Soundkarte fest. Das Feld *Anzahl Kanäle* definiert, in wieviel Kanäle dieser Teil geteilt wird.

Beim Aktivieren des Kontrollkästchens *Reject Pile-Up* werden die zu dicht nacheinander folgenden Impulse ignoriert und die entsprechende Totzeitkorrektur durchgeführt (s.a. Abschnitt 5.4).

Starten und Stoppen einer Aufnahme. Die Aufnahme wird mit dem Button , der Taste F9 oder durch Auswählen des Menüpunktes **Messung/Starten** gestartet. Der Name des neu erzeugten Spektrums in der Legende besteht aus dem Buchstaben *N* und einer laufenden Nummer, seine Farbe im Diagramm wird vorerst automatisch vergeben. Während der Aufnahme wird in der Statuszeile der Name des Spektrums, die Messdauer, die abgelaufene Messzeit, die Zählrate und die Totzeit angezeigt. Die Zählrate entspricht den Impulsen des „schnellen“ Ausgangs-Kanals des Detektors, die Totzeit aber den längeren Impulsen des Hauptverstärkers. So-

mit kann die Zählrate zum Abschätzen der realen Eingangszählrate des Detektors benutzt werden.

Die Aufnahme wird automatisch nach dem Ablauf der eingestellten Messdauer gestoppt. Alternativ kann die Aufnahme mit dem Button , der Taste F9 oder durch Auswählen des Menüpunktes **Messung/Stoppen** angehalten werden. Nach Vollendung der Aufnahme eines Spektrums wird in dem im Fenster *Spektrum Einstellungen* angezeigten Feld *Kommentar* die gesamte Totzeit in Sekunden für das Spektrum dargestellt.

Die Langzeitaufnahme wird durch Wählen des Menüpunktes **Messung/Starten Langzeit** gestartet und durch Wählen des Menüpunktes **Messung/Stoppen Langzeit** angehalten.

Bei einer laufenden Langzeitaufnahme wird während der Zeit zwischen einzelnen Messungen in der Statuszeile die verbleibende Zeit bis zur nächsten Messung und die Anzahl der noch aufzunehmenden Spektren angezeigt.

6.4 Auswertung von Messungen

6.4.1 Anpassung mit Gauss-Kurven (*Gauss-Fit*)

Das experimentelle Spektrum, das bei der Vielkanal-Analyse in N Kanäle aufgeteilt wurde, ist in Form paarweise angeordneter diskreter Werte (x_n, y_n) vorhanden, wobei $n \in (1, n_{max})$ die Nummer des Kanals ist. Für die Koordinate x_n gilt $x_n = n$ im Fall der Kanal-Darstellung und $x_n = a \cdot n + b$ bei der Energie-Darstellung, wobei die Parameter $a = \frac{dE}{dn}$ und $b = E|_{n=0}$ bei der Energiekalibrierung berechnet werden.

Die anzupassende Funktion $f(x_n)$ wird als Summe etlicher Gauss-Funktionen geschrieben:

$$f(x_n) = \sum_i A_i \cdot \exp \left\{ -\frac{(x_n - \mu_i)^2}{2\sigma_i^2} \right\} + B.$$

Dabei wird die Summierung über die Anzahl der Gauss-Funktionen durchgeführt; A_i , μ_i und σ_i sind die Amplitude bzw. das Zentrum und die Standardabweichung der Gauss-Funktion, B ist eine Konstante. Bedingt durch das Aufnahmeverfahren sind die Standardabweichungen einzelner Gauss-Funktionen nicht voneinander unabhängig (vgl. Abschnitt 5.6):

$$\sigma_i^2 = \sigma_{el}^2 + \epsilon \cdot F \cdot \mu_i.$$

Wobei σ_{el} das Rauschen der Verstärker-Elektronik darstellt, $\epsilon \approx 3,8$ eV ist die mittlere Energie zur Erzeugung eines Elektron-Loch-Paares im Silizium und $F \approx 0,17$ ist der Fano-Faktor. Im Fall der Kanal-Darstellung wird σ_{el} , σ_i und μ_i in Kanälen repräsentiert und in F wird der Zusammenhang zwischen Energie und Kanälen des VKA berücksichtigt.


Beim Anfitten wird in einem Iterationsprozess die Funktion

$$\chi^2 = \sum_{n=n_1}^{n_2} \frac{1}{y_n} (y_n - f(x_n))^2$$

in dem Anpassungsbereich von x_{n_1} bis x_{n_2} minimiert ([64], S. 465). Durch Einsetzen der obigen Bedingung an σ_i wird die Zahl der zu variierenden Parameter verkleinert und gleichzeitig die Genauigkeit bei der Anpassung mehrerer Peaks erhöht. Dementsprechend werden bei der Iteration nur die Parameter μ_i , A_i , B , σ_{el} und F variiert.

Die für den Iterationsprozess nötigen Anfangswerte werden teils vom Benutzer angegeben, teils aus dem experimentellen Spektrum bestimmt. So muss der Benutzer die annähernde Peakpositionen und den Anpassungsbereich angeben, darauf basierend werden in der Software die Anfangswerte für A_i und B aus dem Spektrum abgeschätzt. Für σ_{el} und F werden standardmäßig die Anfangswerte 0,16 keV bzw. 0,17 genommen.

Die Durchführung der Anpassung erfolgt in der Software *VKA Lab* in vier Schritten:

- das anzupassende Spektrum wird aktiv gesetzt (z.B. durch Doppelklick auf sein Symbol in der Legende);
- die Anpassungsfunktion wird durch Klicken des Buttons  oder des Menüpunktes **Tools/Gauss-Fit** aktiviert. Dabei wird der Cursor in Form einer senkrechten Linie dargestellt;
- die anzupassenden Peakpositionen (höchstens 20 Peaks) werden angeklickt. Die angeklickten Peaks werden automatisch mit Strichen in gleicher Farbe

wie das Spektrum markiert. Nach dem Auswählen der gewünschten Peaks wird durch einen Rechtsklick zum nächsten Schritt — Bestimmung des Fit-Bereiches — übergegangen;

- nachdem der Anfang des Fit-Bereiches angeklickt wurde, wird das Spektrum zwischen diesem Punkt und dem Cursor gelb dargestellt. Der zweite Klick legt das Ende des Fit-Bereiches fest und startet die Anpassungsiterationen. Während des Rechnens wird in der Statuszeile der Hinweis „*Iterationsprozess läuft*“ angezeigt. Nach der Vollendung der Iterationen wird im Diagramm das Fit-Spektrum angezeigt, seine Parameter (μ_i , A_i , B , σ_{el} und F) werden im Feld *Kommentar* (Fenster *Spektrum Einstellungen*) dargestellt. Der Name des neu erzeugten Spektrums in der Legende besteht aus dem Wort *Fit* und einer laufenden Nummer.

Die Anweisungen zur Durchführung der Anpassung werden in der Statuszeile angezeigt.

Die Registerkarte *Fit* des Fensters *Einstellungen* dient zur Einstellung der Parameter der Anpassung. Der voreingestellte Wert der maximalen Zeit für das Ausrechnen der Anpassungskurve (5 s) kann wenn nötig, z.B. bei vielen anzupassenden Peaks oder einem langsamen Rechner, vergrößert werden.

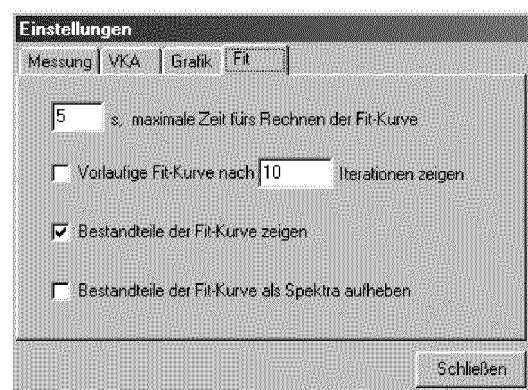


Fig. 6.7: Registerkarte *Fit* des Fensters *Einstellungen*.

Durch Aktivieren des entsprechenden Kontrollkästchens kann der Iterationsprozess verfolgt werden — er wird nach der eingegebenen Anzahl der Iterationen gestoppt und die vorläufige Kurve wird angezeigt. Die Fortsetzung des Prozesses erfolgt

nach Klicken des Buttons *OK* im angezeigten Dialogfenster. Die maximale Zeit für das Rechnen sollte dabei vergrößert werden.


Die einzelnen Gauss-Funktionen der Anpassungskurve werden im Diagramm angezeigt, wenn das entsprechende Kontrollkästchen aktiviert ist. Für die Benutzung dieser Gauss-Kurven in weiteren Auswertungen muss das Kästchen *Bestandteile der Fit-Kurve als Spektren Aufheben* aktiviert werden.

6.4.2 Anpassung mit den Elementenspektren (*Element-Fit*)

Diese Variante der Anpassung kann dann eingesetzt werden, wenn es um das Fluoreszenzspektrum eines Objektes handelt, dessen chemische Zusammensetzung bekannt ist. Im Gegensatz zum *Gauss-Fit* werden die Energien der Linien μ_i als Konstanten behandelt, da sie für alle Elemente bekannt sind. Als variierbare Parameter werden im Iterationsprozess A_i , B , σ_{el} , F sowie $\frac{dE}{dn}$ und $E|_{n=0}$ genommen. Damit wird die Anzahl der anzupassenden Parameter schon bei zwei Elementen im Spektrum kleiner als beim *Gauss-Fit*. Außerdem wird die ganze im Spektrum vorhandene Information zum Ausrechnen der $E|_{n=0}$, $\frac{dE}{dn}$, σ_{el} und F (und dementsprechend der Peakpositionen und -breiten) benutzt, was auch die kleinen, überlappenden Peaks bei niedriger Statistik anfitzen lässt, wenn es im Fit-Bereich gut definierte Peaks gibt ([64], S. 468).

Die Anfangswerte der zu variierenden Parameter werden wie bei dem *Gauss-Fit* aus den Benutzereingaben abgeleitet. Der Benutzer muss eine Abschätzung der Energiekalibrierung angeben und die im Objekt erwarteten Elemente nennen.

Die Durchführung der Anpassung wird in folgenden Schritten gemacht:

- das anzupassende Spektrum wird aktiv gesetzt (z.B. durch Doppelklick auf sein Symbol in der Legende);
- die Anpassungsfunktion wird durch Anklicken des Buttons  oder des Menüpunktes **Tools/Element-Fit** aktiviert. Dabei wird das Fenster *Energiekalibrierung* aufgerufen, in dem eine Abschätzung der Energiekalibrierung eingegeben werden muss. Nach der Bestätigung mit dem Button *OK* wird das Fenster des interaktiven Periodensystem der Elemente angezeigt.

- durch Wählen des Feldes eines Elements im Periodensystem, Aktivieren der Kontrollkästchen der gewünschten Spektralserie (K oder L) und anschließendem Klicken auf den Button *Hinzufügen* wird die Liste der erwarteten Elemente zusammengestellt (vgl. Fig 6.8). Bei einer Fehleingabe kann die Liste

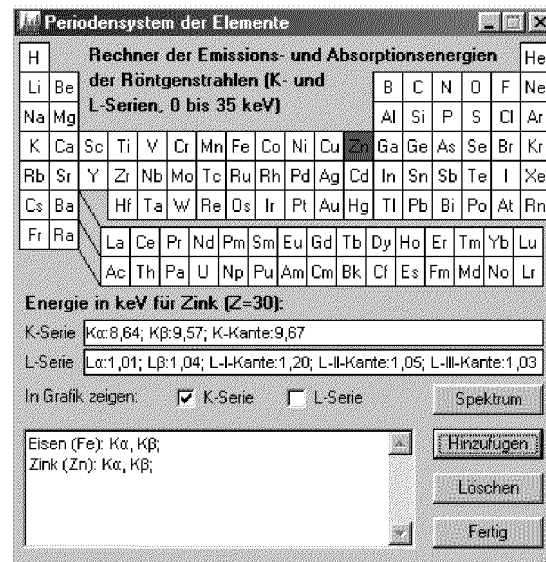



Fig. 6.8: Eingabe der Liste der im Spektrum erwarteten Elemente im Fenster *Periodensystem der Elemente* (siehe auch Abschnitt 6.4.7).

mit dem Button *Löschen* geleert werden. Nach Eingabe der Elemente wird durch Anklicken des Buttons *Fertig* zum nächsten Schritt — Bestimmung des Fit-Bereiches — übergegangen;

- nachdem der Anfang des Fit-Bereiches angeklickt wurde, wird das Spektrum zwischen diesem Punkt und dem Cursor gelb dargestellt. Der zweite Klick legt das Ende des Fit-Bereiches fest und startet die Anpassungsiterationen. Während des Rechnens wird in der Statuszeile der Hinweis „*Iterationsprozess läuft*“ angezeigt. Nach der Vollendung der Iterationen wird im Diagramm das Fit-Spektrum angezeigt, seine Parameter (μ_i , A_i , B , σ_{el} , F sowie $\frac{dE}{dn}$ und $E|_{n=0}$) werden im Feld *Kommentar* (Fenster *Spektrum Einstellungen*) dargestellt. Der Name des neu erzeugten Spektrums in der Legende besteht aus dem Wort *Fit* und einer laufenden Nummer. Die Energie wird nach den ausgerechneten $\frac{dE}{dn}$ und $E|_{n=0}$ kalibriert.

Die Anweisungen zur Durchführung der Anpassung werden in der Statuszeile angezeigt.

6.4.3 Spektrum-Rechner

Der Spektrum-Rechner dient zur Durchführung arithmetischer Operationen an ausgewählten Spektren. Sein Fenster ist mit dem Button  oder unter dem Menüpunkt **Tools/Spektrum-Rechner** aufzurufen (vgl. Fig 6.9). Es sind die Berechnungen der Form

$$(A \cdot N_a) + (B \cdot N_b) + C$$

$$(A \cdot N_a) - (B \cdot N_b) + C$$

$$(A \cdot N_a) \cdot (B \cdot N_b) + C$$

$$(A \cdot N_a) / (B \cdot N_b) + C$$

erlaubt. Wobei N_a und N_b zwei der in der Legende dargestellten Spektren sind, A , B und C sind Konstanten.

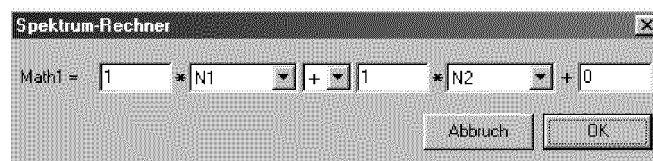


Fig. 6.9: Fenster *Spektrum-Rechner*.

Nachdem die Spektren und die arithmetische Operation ausgewählt und die Konstanten eingegeben sind, wird durch Anklicken des Buttons *OK* die Durchführung der Operation bestätigt. Dabei wird ein neues Spektrum erzeugt, dessen Werte aus den Werten der Ausgangsspektren nach der gewählten Formel zusammengesetzt sind (die Operation wird an Werten bei gleichen X-Koordinaten durchgeführt). Der Name des neu erzeugten Spektrums in der Legende besteht aus dem Wort *Math* und einer laufenden Nummer. Im Feld *Kommentar* (Fenster *Spektrum Einstellungen*) wird die durchgeführte Operation dokumentiert.

Der Spektrum-Rechner kann z.B. für Folgendes benutzt werden:

- zum Skalieren der Spektren zueinander für einen besseren Vergleich;
- zur Korrektur der aufgenommenen Spektren an die Ansprechwahrscheinlichkeit des Detektors: das Spektrum mit der Detektor-Kurve multiplizieren (s.a. Abschnitt 6.4.9);

- zum Abziehen einzelnen angefitteter Linien bzw. Spektren einzelner Elemente aus dem komplexen Spektrum.


6.4.4 Integralberechnung

Durch das Integrieren wird die Anzahl der in einem Spektrum bzw. unter einer Linie gezählten Ereignisse bestimmt. Das Integral wird nach der Formel

$$\Upsilon = \sum_{n=n_1}^{n_2} (y_n - y_{n_1}) \cdot \Delta x_n$$

berechnet. Dabei sind n_1 und n_2 der Anfang bzw. das Ende des Bereiches, an dem das Spektrum integriert werden soll, y_{n_1} ist die Y-Koordinate des Anfangs des Bereiches, $\Delta x_n = x_n - x_{n-1}$ ist die Breite des Kanals.

Zur Berechnung eines Integrals sind folgende Schritten nötig:

- das zu integrierende Spektrum wird aktiv gesetzt (z.B. durch Doppelklick auf sein Symbol in der Legende);
- die Integral-Funktion wird durch Anklicken des Buttons  oder des Menüpunktes **Tools/Integral** aktiviert. Danach muss der Bereich bestimmt werden, an dem das Spektrum integriert werden soll;
- nachdem der Anfang des Bereiches angeklickt wurde, wird das Spektrum zwischen diesem Punkt und dem Cursor gelb dargestellt. Der zweite Klick legt das Ende des Bereiches fest. Danach wird in der Statuszeile der ausgewählte Bereich und das Ergebnis der Integrierung angezeigt, im Diagramm wird die entsprechende Fläche farbig markiert.

Die Anweisungen zur Durchführung der Integration werden in der Statuszeile angegeben.

6.4.5 Baseline-Korrektur

Die Baseline-Korrektur ermöglicht das Abziehen des Untergrunds in einem Spektrum. Damit können zum Beispiel das Bremsstrahlungskontinuum und die charakteristischen Linien getrennt werden. Der Korrektur-Vorgang und sein Ergebnis sind in Fig. 6.10 illustriert.

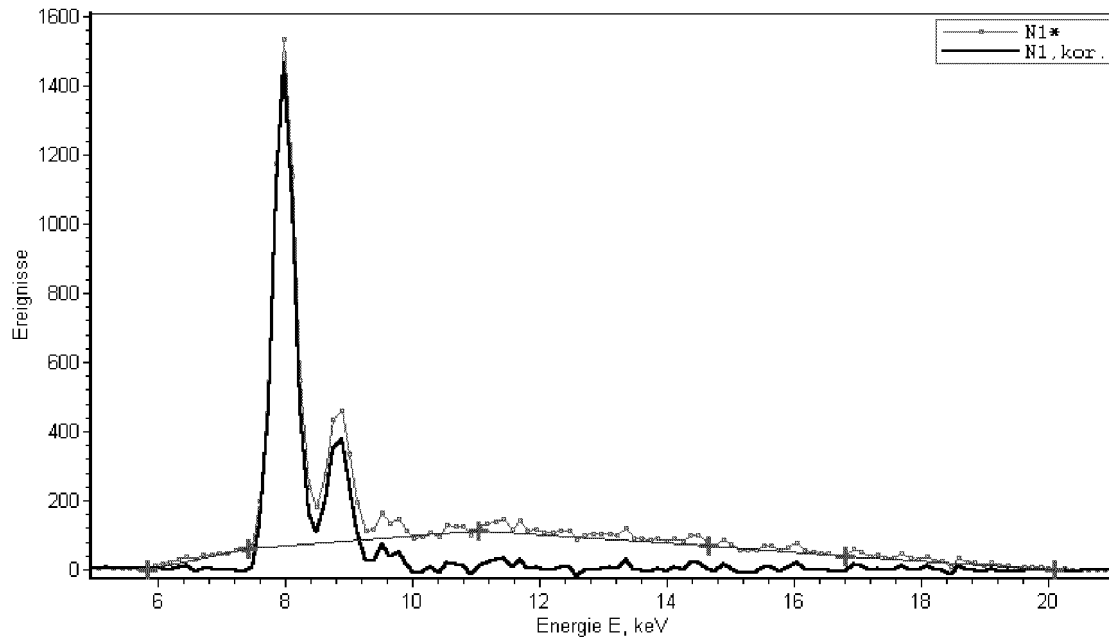




Fig. 6.10: Das Ausgangsspektrum $N1$ mit dem eingegebenen gebrochen-linearen Hintergrund und das Ergebnis der Baseline-Korrektur $N1, kor.$

Der Untergrund wird in *VKA Lab* in Form einer gebrochen-linearen Funktion (maximal 20 Abschnitte) dargestellt. Der Verlauf dieser Funktion wird mit dem Cursor im Diagramm definiert. Zur Durchführung der Baseline-Korrektur sind folgende Schritte nötig:

- das zu korrigierende Spektrum wird aktiv gesetzt (z.B. durch Doppelklick auf sein Symbol in der Legende);
- die Baseline-Korrektur wird durch Anklicken des Buttons  oder des Menüpunktes **Tools/Baseline Korrektur** aktiviert;
- der Anfang und die Positionen der Knickpunkte der gebrochen-linearen Funktion werden angeklickt (in beliebiger Folge). Dabei werden die angeklickten Punkte mit Kreuzen gleicher Farbe wie das Spektrum markiert und mit Geraden verbunden. Auch zwischen dem Cursor und dem zuletzt angeklickten Punkt wird eine Hilfslinie angezeigt. Nach dem Anklicken aller gewünschten Punkte wird die Auswahl durch einen Rechtsklick bestätigt und die Korrektur durchgeführt. Im Diagramm wird das korrigierte Spektrum angezeigt, sein Name in der Legende besteht aus dem Namen des Ausgangsspektrums mit dem Zusatz *kor.*


Die Anweisungen zur Durchführung der Baseline-Korrektur werden in der Statuszeile angegeben.

6.4.6 Abstandsmessung

Die Abstandsmessung wird durch Anklicken des Buttons  oder des Menüpunktes **Tools/Abstandsmessung** aktiviert. Beim Anklicken zweier Punkte im Diagramm werden diese mit Kreuzen markiert und in der Statuszeile wird ihr Abstand in der X-Richtung (in Kanälen oder keV) und in der Y-Richtung (in Ereignissen) angezeigt.

6.4.7 Vergleich mit den Tabellenwerten

Die Auswertung der gemessenen Spektren wird erheblich dadurch erleichtert, dass man einfach auf Tabellenwerte für chemische Elemente zugreifen kann. Es erschien sinnvoll, ein solches Nachschlagewerk direkt ins Programm zu integrieren. Damit ist es möglich, die Energie der Röntgenemissionslinien nicht nur als Zahlenwert schnell in die Hand zu bekommen, sondern diese auch als grafische Hilfe im Spektrum dargestellt zu sehen.

Dieses Nachschlagewerk ist im Programm als separates Fenster realisiert (vgl. Fig. 6.11), das unter dem Menüpunkt **Tools/Mendelejew-Tabelle** (oder mit dem Button ) zu erreichen ist. Alle chemischen Elemente sind in einem Periodensystem dargestellt. Nach einem Mausklick auf ein Element erscheinen in den Textfeldern *K-Serie* und *L-Serie* die Energiewerte der α - und β -Emissionslinien und der Absorptionskanten für das gewählte Element. Diese Energiewerte können wahlweise für die *K-Serie* oder die *L-Serie* (oder für beide) als Marker im gemessenen Spektrum dargestellt werden. Damit ist es einfach, auch die Emissionslinien unbekannter Elemente im Spektrum zu identifizieren. Außerdem wird nach dem Drücken des Buttons *Spektrum* ein Modellspektrum der *K*-Emission des ausgewählten Elements ausgerechnet und gezeigt, dessen Amplitude mit dem Mauszeiger definiert wird (Fig. 6.11).

Die für alle Elemente angezeigten Energiewerte für die Emissionslinien bzw. Absorptionskanten werden aus exponentiellen Polynomen ausgerechnet, die die Form

$$\text{Energiewert} = \exp(a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4 + a_5x^5)$$

haben. Hier $x = \ln(Z)$, Z ist Elementordnungszahl, *Energiewert* entspricht der

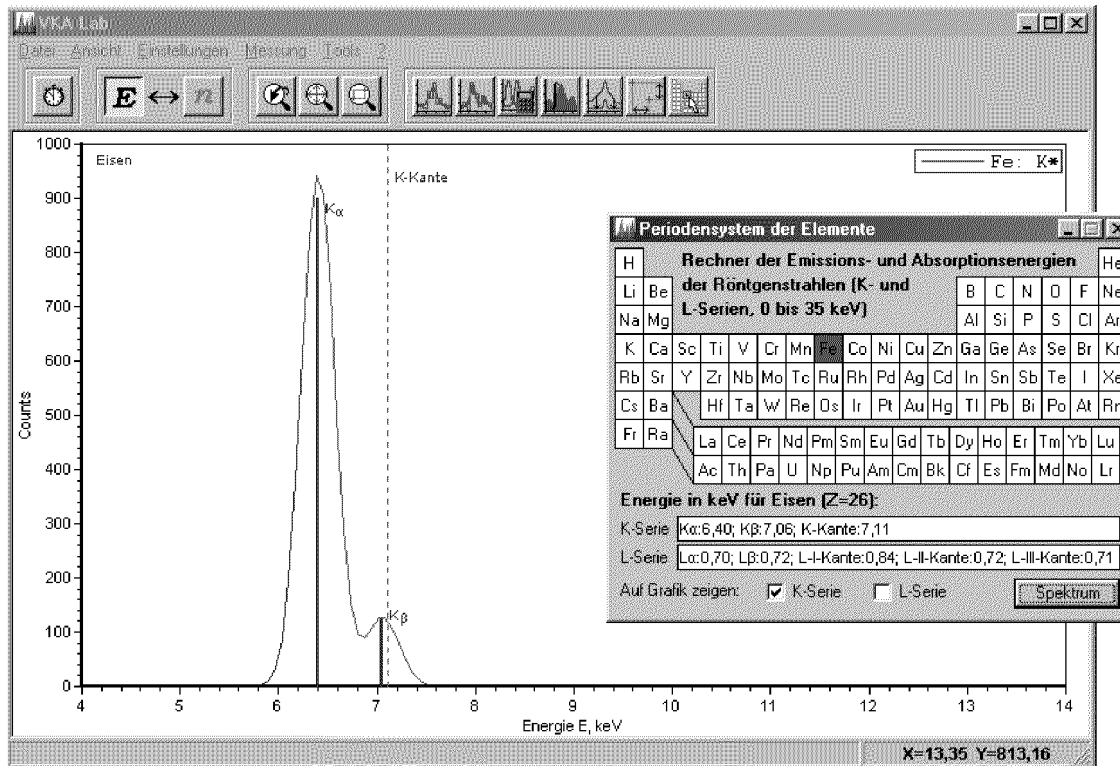


Fig. 6.11: Das interaktive Periodensystem der Elemente gibt Energiewerte der α - und β -Emissionslinien und der Absorptionskanten für das gewählte Element aus und ermöglicht deren graphische Darstellung im Spektrum. Das im Diagramm gezeigte Modellspektrum der Eisen K -Emission entspricht den theoretischen Energiewerten und den Parametern des Detektors.

gewünschten Linie, a_0 bis a_5 sind Koeffizienten für die betreffende Emissionslinie bzw. Absorptionskante. Für den Energiebereich von 0,05 keV bis 35 keV¹ sind die Koeffizienten aus der Literatur bekannt [67] (allerdings sind die Daten dort für Wellenlängenspektren angegeben).

Das Modellspektrum zeigt (vgl. Fig. 6.11 für Eisen), wie die K -Emission eines Elements theoretisch auszusehen hat, wenn sie mit dem beschriebenen Detektor aufgenommen ist. Das heißt, außer den Energien der $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien wird auch deren Intensitätsverhältnis und die Detektorauflösung bei der Energie berücksichtigt. Die Detektorauflösung wird wie in Abschnitt 5.6 definiert, konkrete Werte für σ_{el} und F werden automatisch aus dem letzten im Spektrum durchgeführten Fit

¹ Da mit einem Schulröntgengerät keine Röntgen-Emissionslinien mit Energien über 35 keV angeregt werden können, ist dieser Energiebereich ausreichend.

entnommen.

Die relativen Intensitäten der $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien ändern sich mit der Ordnungszahl, weil sie den relativen Wahrscheinlichkeiten der Elektronenübergänge entsprechen, die ihrerseits nicht alle konstant sind. Während z.B. das Verhältnis- $K\alpha_1:K\alpha_2$ immer sehr nah an 2:1 ist, ändert sich Verhältnis- $K\alpha_1:K\beta$ mit der Energie: es ist 25:1 für Aluminium, 5:1 für Kupfer und 3:1 für Zinn. Dieses ist der Fall, weil die $K\beta$ -Linie aus Übergang $M \rightarrow K$ kommt, und die M Schale bei leichteren Elementen nicht voll besetzt ist, was die Übergangswahrscheinlichkeit herabsetzt [9]. Obwohl die einzelnen Komponenten der $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien nah beieinander liegen und mit einem Si-PIN-Detektor nicht aufzulösen sind, muss man ihre Intensitäten berücksichtigen. Die Intensitätsverhältnisse der Linien aus der K -Serie wurden aus der Quelle [35] entnommen. Die Intensitäten der einzelnen vom beschriebenen Detektor nicht aufgelösten Linien wurden addiert und in der Form $K\beta:K\alpha$ in Fig. 6.12 dargestellt mit den Energien der $K\alpha$ -Linien als X-Achse. Die Literaturwerte (als Quadrate gezeigt) wurden in drei Teilbereichen mit Polynomen bzw. Rationalfunktion angepasst.

Die Funktion F_1 gilt für Bereich von 1,49 keV bis 5,41 keV (das entspricht $_{13}Al$ bis $_{24}Cr$) und hat die Form

$$F_1 = b_0 + b_1x + b_2x^2 + b_3x^3 + b_4x^4 + b_5x^5,$$

$b_0 = 0,55141$, $b_1 = -0,96284$, $b_2 = 0,61866$, $b_3 = -0,17341$, $b_4 = 0,02258$, $b_5 = -0,001122$, x ist die Energie der $K\alpha$ -Linie in keV.

Die Funktion F_2 der Form

$$F_2 = c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3 + c_4x^4$$

gilt für den Bereich von 5,41 keV bis 11,92 keV (das entspricht $_{24}Cr$ bis $_{35}Br$). Hier ist $c_0 = -0,19188$, $c_1 = 0,17728$, $c_2 = -0,03503$, $c_3 = 0,002966$ und $c_4 = -8,958 \cdot 10^{-5}$.

Die Funktion F_3 hat die Form

$$F_3 = \frac{d_0 + d_1x}{1 + d_2x}$$

mit $d_0 = 0,0573$, $d_1 = 0,01912$, $d_2 = 0,05724$ und gilt für den Bereich von 12,64 keV bis 36,02 keV (das entspricht $_{36}Kr$ bis $_{59}Pr$).

Das im Experiment gemessene Intensitätsverhältnis stimmt aber nicht immer mit dem theoretischen überein. Es hängt noch von verschiedenen Faktoren ab, u.a.

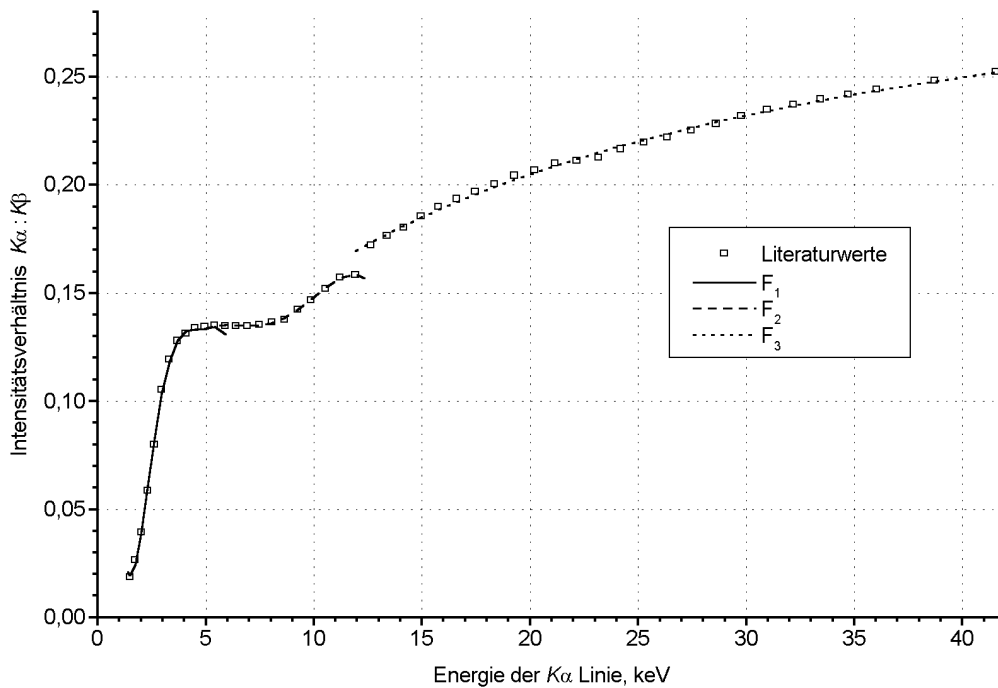


Fig. 6.12: Literaturwerte für das Intensitätsverhältnis $K\beta:K\alpha$ in Abhängigkeit von der Energie der $K\alpha$ und daran im Teilbereiche angepasste Funktionen F_1 , F_2 und F_3 (näheres siehe Text), die im Programm zum Rechnen des Modellspektrums benutzt werden.

vom Anodenpotential und Anodenmaterial der Röntgenröhre, von der Ansprechwahrscheinlichkeit des Detektors, von der Absorption primärer Strahlung und der Fluoreszenzstrahlung in Luft, von der chemischen Zusammensetzung und der Form des zu untersuchenden Objektes.

Diese Faktoren haben noch stärkere Wirkung bei den L -Linien schwerer Elemente, da sie aus unterschiedlichen Unterniveaus stammen. Hinzu kommt noch die Tatsache, dass im L -Spektrum oft auch die γ -Linien zu sehen sind und sogar einzelne Komponenten der β -Linien (siehe z.B. Experiment 9.1.1). Es macht die Modelle der L -Spektren komplex und wenig didaktisch interessant. Aus dem Grund wurde darauf verzichtet, deren Ausrechnung ins Programm zu integrieren.

6.4.8 Kurvenglättung

Bei der Kurvenglättung wird ein neues Spektrum erzeugt, dessen Werte y_n^{Mtlg} durch Mittelung der nebenstehenden Werte des Ausgangsspektrum nach der Formel

$$y_n^{Mtlg} = \frac{1}{2k+1} \sum_{i=n-k}^{n+k} y_i$$

berechnet werden. Dabei ist $2k+1$ die Anzahl der Punkte, über die die Mittelung durchgeführt wird. Diese Anzahl kann in *VKA Lab* wahlweise auf 3, 5, 9, 15 oder 25 eingestellt werden.

Die Kurvenglättung kann bei der Auswertung der Spektren mit kleiner Statistik hilfreich sein. Zu ihrer Durchführung sind die folgenden Schritte nötig:

- das zu glättende Spektrum wird aktiv gesetzt (z.B. durch Doppelklick auf sein Symbol in der Legende);
- die Glättungsfunktion wird durch Wählen des Menüpunktes **Tools/Glättung** aktiviert;
- im angezeigten Dialogfenster wird die Anzahl der Punkte ausgewählt, über die die Mittelung durchzuführen ist. Nach der Bestätigung mit dem Button *OK* wird im Diagramm das geglättete Spektrum angezeigt. Sein Name in der Legende besteht aus der Abkürzung *Mtlg* und einer laufenden Nummer. Im Feld *Kommentar* (Fenster *Spektrum Einstellungen*) wird das Ausgangsspektrum und die Anzahl der gemittelten Punkte dokumentiert.

6.4.9 Erzeugung der Ansprechwahrscheinlichkeitskurve des Detektors

Die Ansprechwahrscheinlichkeit $\eta(E)$ des Detektors ist eine Funktion der Energie, die im wesentlichen durch die Absorption im Eintrittsfenster und durch die endliche Dicke des Detektors definiert ist. Wenn z.B. das Verhältnis der Intensitäten von zwei Linien bei unterschiedlichen Energien vermessen oder die absolute Intensität bestimmt werden soll, kann eine Korrektur unter Berücksichtigung der Ansprechwahrscheinlichkeit $\eta(E)$ durchgeführt werden².

² Bei der Aufnahme der Röntgenspektren mit Linien bei $E < 3$ keV kann auch die Absorption in der Luftstrecke von der Quelle bis zum Detektor erheblich sein.

Die Ansprechwahrscheinlichkeit des Detektors ist durch die Formel

$$\eta(E) = \exp\left\{-\frac{8,87}{E^{2,81}}\right\} \cdot \left(1 - \exp\left\{-\frac{683}{E^{2,77}}\right\}\right)$$

gegeben (Herleitung siehe Abschnitt 5.9). Dabei ist E in keV ausgedruckt.

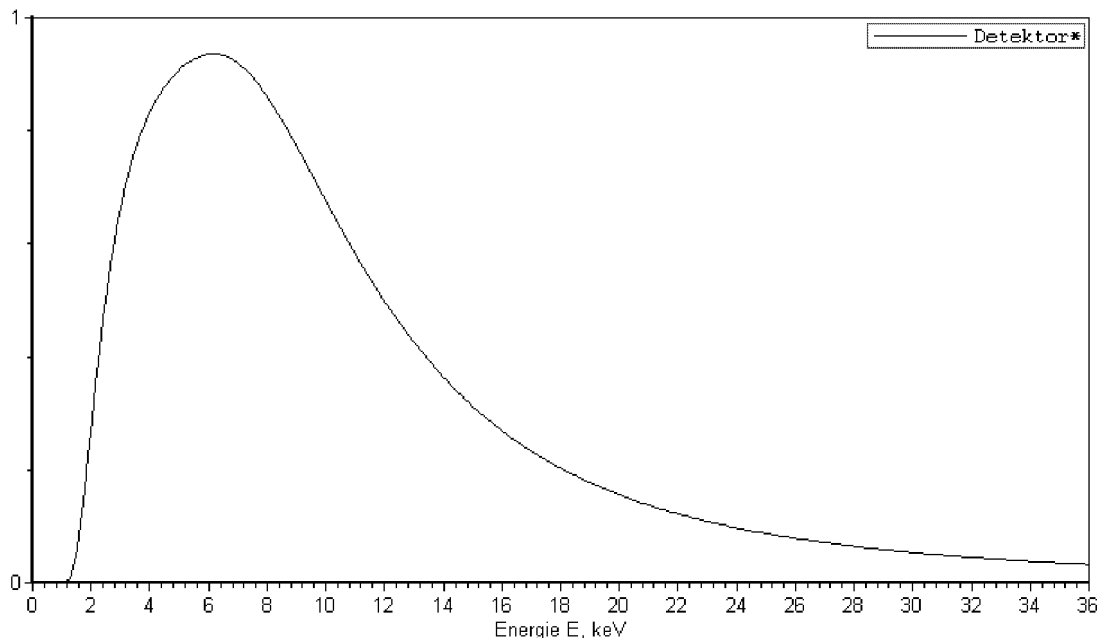


Fig. 6.13: Die in *VKA Lab* erzeugte Kurve der Ansprechwahrscheinlichkeit des Detektors.

Diese Funktion ist grafisch in Fig. 6.13 dargestellt. Sie kann in *VKA Lab* durch Wählen des Menüpunktes **Tools/Detektor-Kurve** erzeugt werden. Das entsprechende Spektrum wird unter dem Namen *Detektor* in der Legende angezeigt.

6.4.10 Eigenheiten bei der Auswertung der importierten Dateien der Software *Röntgengerät*

Es ist möglich, in *VKA Lab* die Dateien der Software *Röntgengerät* zum Vergleich oder zur Auswertung zu importieren. Diese Dateien repräsentieren auch Röntgenspektren, die allerdings nach dem winkeldispersiven Bragg-Verfahren aufgenommen worden sind. Folglich müssen sie aus ihrer $J_\lambda(\lambda)$ -Darstellung in die $J_E(E)$ -Darstellung konvertiert werden (s.a. Abschnitt 3.1.2):

$$E = \frac{Const}{\lambda}; \quad J_E = -\frac{Const}{E^2} J_\lambda.$$

Es ist klar, dass die X-Koordinaten der Datenpunkte des konvertierten Spektrums nicht gleichmäßig verteilt sind. Somit können diese Spektren z.B. nicht mit den

„Originalspektren“ von *VKA Lab* addiert werden.

Um die importierten Spektren besonders zu kennzeichnen, bestehen ihre Namen in der Legende aus dem Wort *XRY* und einer laufenden Nummer. Auch die an ihnen durchgeführten Auswertungen werden entsprechend gekennzeichnet: z.B. *XRYFit* und *XRYMath*. Es ist nicht möglich, mit dem Spektrum-Rechner Operationen an Spektren gemischter Herkunft (*N* und *XRY*) durchzuführen.

Die *Röntgengerät*-Spektren können nur bei der eingestellten Energiekalibrierung importiert werden, außerdem muss die zu importierende Datei die Daten über den Netzebenenabstand des benutzten Kristalls beinhalten. Das Speichern einer Datei mit *XRY*-Spektren ist nicht möglich.

Die Durchführung eines Gauss-Fit an einem *XRY*-Spektrum ist nur mit einer Gauss-Funktion möglich, der Element-Fit kann nicht angewendet werden.

6.5 Vorbereitung der Vorlagen — keine Zeit im Unterricht verlieren

Im Unterricht ist es wichtig, unnötigen Zeitaufwand zu vermeiden. Beim Experimentieren kann dies dadurch erreicht werden, dass die Vorbereitungsschritte möglichst in der Zeit vor dem Unterricht stattfinden.

Die Software *VKA Lab* erlaubt es, Vorlagen für die zukünftigen Messungen zu gestalten. Die Vorlage ist eine Datei, die noch keine gemessenen Daten enthält, in der aber die nötigen Parameter voreingestellt sind. In den *VKA Lab*-Dateien werden die folgenden Parameter mitgespeichert und beim Öffnen der Datei übernommen:

- die Kanalbreite: definiert durch die Felder *Begrenzung der Eingangsamplitude* und *Anzahl Kanäle* in der Registerkarte *VKA* des Fensters *Einstellungen*;
- die Messdauer: definiert durch das Feld *Standardwert der Messdauer* in der Registerkarte *Messung* des Fensters *Einstellungen*;
- die Energiekalibrierung: definiert durch Angaben im Fenster *Energiekalibrierung*;
- die Korrektur an die Ansprechwahrscheinlichkeit des Detektors: definiert durch das Kontrollkästchen in der Registerkarte *Messung* des Fensters *Einstellungen*.

Die Vorbereitung einer Vorlage wird in folgenden Schritten durchgeführt:

- das Programm *VKA Lab* wird gestartet;
- in den Fenstern *Einstellungen* und *Energiekalibrierung* werden die nötigen Werte der oben aufgelisteten Parameter eingestellt;
- durch Wählen des Menüpunktes **Datei/Neu** wird eine neue Datei erzeugt;
- die erzeugte Datei wird unter einem passenden Namen gespeichert.

Diese Datei wird vor der Durchführung des Experiments geladen und ist für die Aufnahme der Spektren bereit.

7. EXPERIMENTE MIT DEM ENERGIEAUFLÖSENDEN HALBLEITERDETEKTOR: VIELFALT DER MÖGLICHKEITEN

7.1 Zielsetzung des Kapitels

In diesem Kapitel sind Experimente mit dem energieauflösenden Halbleiterdetektor dargestellt, mit dem Ziel die vielfältigen Experimentiermöglichkeiten zu demonstrieren.

Die Experimente sind nach Themen des gymnasialen Unterrichtsstoffes geordnet (vgl. Abschnitt 4.1.2), um eine einfachere Anpassung zum Unterricht zu ermöglichen. Einige Experimente bieten mehr Material, als in einer Unterrichtsstunde unterzubringen möglich ist, und eignen sich damit mehr zum Einsatz im Praktikumsbereich sowohl in Gymnasien als auch in Universitäten.

Aufgeführt sind in diesem Kapitel jeweils eigenständige Experimentieranleitungen im Stil der „LEYBOLD Handblätter Physik“. Daher sind Wiederholungen in den Grundlagen oder den Aufbauhinweisen gewollt.

Die aufgeführten Experimente sind ausführlich beschrieben, die Beschreibungen setzen jedoch voraus, dass der Experimentierende aktiv und bewusst handelt und die Details, wie z.B. mit welcher Taste die Hochspannung am Röntgengerät einzuschalten ist, für sich selbstständig klärt. Somit geben diese Beschreibungen keine Schritt-für-Schritt Handlungsanweisungen, sondern nähern das Experimentieren etwas der Situation des „wissenschaftlichen Alltags“ an. In den Kommentaren sind auch die Hintergedanken zu den Experimenten und die Anregungen zum weiteren Experimentieren gegeben.

Die Experimente sind so ausgelegt, dass die gemessenen Daten einer quantitativen Auswertung unterzogen werden können, um einen Vergleich mit der theoretischen Vorhersagen bzw. mit den Literaturquellen zu ermöglichen. Bei mehreren nötigen Messungen wurde ihre Anzahl möglichst klein gehalten aber noch hoch genug, um einen sinnvollen Vergleich mit der Theorie durchführen zu können.

Aus den in diesem Kapitel beschriebenen Experimenten wurden einige ausgewählt, die dem Autor besonders wichtig und interessant erschienen, um als Demonstrationsexperimente im Physikunterricht durchgeführt zu werden. Solche Vorschläge sind im Kapitel 8 gegeben.

Obwohl die Themen der Experimente sich zum Teil wiederholen, ist der Autor der Meinung, dass das Zusammenfügen von beiden Kapiteln nicht sinnvoll ist. Die wichtigsten Gründe dafür sind folgende:

- Die Durchführung eines Demonstrationsexperimentes ist an das „Vorführen“ eines Effektes mit der Messzeit von wenigen Minuten angepasst. Die Logik eines solchen Experimentes passt häufig nicht in das Schema eines „Praktikums“-Experimentes;
- Die Experimente in *beiden* Kapiteln sollten so beschrieben sein, dass sie abgeschlossene Anleitungen anbieten und einen direkten Einsatz des Experimentes im Unterricht bzw. im Praktikum ermöglichen;
- Die Beschreibungen der Demonstrationsexperimente in Kapitel 8 geben sowohl *alle* nötigen Schritte für ihre Vorbereitung, Durchführung und Auswertung als auch Vorschläge zur Unterrichtsgestaltung.

7.2 Bemerkungen zur energieauflösenden

Spektrumaufnahme

Es ist durch die historische Entwicklung der Röntgenphysik gegeben, dass die Röntgenstrahlen zuerst durch die Wellenlänge und nicht durch die Energie charakterisiert wurden, da die Bragg-Methode der Kristalldispersion bequemer und logischer in Wellenlängendarstellung zu beschreiben ist. Energieauflösende Detektoren, mit denen die Trennung der α - und β -Linien der leichteren Elemente möglich war, wurden

erst Ende der 1960-er Jahre entwickelt.

Obwohl diese Detektoren zurzeit im wissenschaftlichen Alltag häufig benutzt werden, ist deren Anschaffungspreis für Schulen zu hoch. In der Schule werden alle Experimente, in denen ein Röntgenspektrum aufgenommen werden muss, noch heute ausschließlich nach der Drehkristallmethode durchgeführt¹. Mit dem neuen energieauflösenden Halbleiterdetektor wird es möglich, im Physikunterricht einige klassische Experimente durchzuführen, die mit Schulröntengeräten bisher nicht möglich waren, z.B. die Überprüfung des Moseley-Gesetzes an den charakteristischen Linien mehrerer Elemente oder die quantitative Untersuchung des Compton-Effektes an der Molybdän- $K\alpha$ -Linie, wie in der Originalarbeit von Compton.

Es sollen hier die grundlegenden Unterschiede eines mit dem Halbleiterdetektor aufgenommenen Spektrums zu einem nach der Drehkristallmethode gemessenen noch einmal betont werden:

- In der Bragg-Anordnung wird das Spektrum *Punkt für Punkt* aufgenommen - in jedem Zeitintervall wird nur die Zählrate in einem schmalen, mit dem Kristall selektierten Wellenlängenbereich (gleich Energiebereich) des Spektrums gemessen. Der volle zu messende Spektralbereich ist durch den Anfangs- und Endwinkel des Goniometers gegeben. Mit dem energieauflösenden Detektor, im Gegensatz dazu, wird das volle aus der Quelle emittierte Spektrum *gleichzeitig* erfasst. Dabei ist es möglich, schon nach den ersten Sekunden der Messung wesentliche Merkmale des Spektrums zu erkennen, und die Aufnahme dann zu stoppen, wenn die erwünschte statistische Genauigkeit erreicht ist. Damit wird die Messdauer vieler Experimente kürzer.
- Die Auflösung des vorgestellten Halbleiterdetektors im Bereich der Molybdän K -Linien ist annähernd 1,5-mal besser als die in 1. Beugungsordnung mit modernen Schulröntengeräten erreichbare Auflösung². Für die K -Linien von Kupfer ist sie ungefähr zwei- bis dreimal schlechter als die Auflösung mit der Drehkristallmethode in 1. Ordnung.

¹ Eine Ausnahme kann in dem von W. Kuhn verfassten *Handbuch der experimentellen Physik* [31] gefunden werden. Da ist die Aufnahme von Radioisotop-angeregten Röntgenfluoreszenzspektren einiger Elemente mit einem Szintillationszähler beschrieben.

² Es ist vorausgesetzt, dass im zweiten Fall das Röntengerät mit einem Goniometer, mit einem Kristall und einem Fensterzählrohr ausgerüstet ist.

Das nicht konstante Verhältnis beider Auflösungsvermögen ist damit zu erklären, dass die Drehkristallmethode eine *konstante Winkelauflösung* hat, die einer mit der Energie der Strahlen wachsenden Energieauflösung entspricht, und der Halbleiterdetektor annähernd *konstante Energieauflösung* im ganzen messbaren Bereich aufweist. Für die beiden gewöhnlich in den Schulröntengeräten verwendeten Kupfer- und Molybdän-Röhren ist die Auflösung des Halbleiterdetektors ausreichend, um die $K\alpha$ - und $K\beta$ -Strahlung zu trennen.

- Im Gegensatz zu den Bragg-Spektren sind die Halbleiterdetektor-Spektren von der Überlappung unterschiedlicher Beugungsordnungen frei.
- Es ist darauf zu achten, dass das mit dem Halbleiterdetektor aufgenommene Spektrum Röntgenfluoreszenzlinien enthält, die dem Gehäusematerial des Detektors zuzuordnen sind (z.B. $L\alpha$ -, $L\beta$ - und $L\gamma$ -Linien von Gold, vgl. Abschnitt 5.8). Am stärksten sind diese Linien in Experimenten zum Compton-Effekt und in den Aufnahmen des Spektrums einer Röntgenröhre sichtbar.
- Da das Ausgangssignal des Halbleiterdetektors grundsätzlich zur Energie der einfallenden Röntgenquanten proportional ist, sind alle mit dem Detektor aufgenommenen Spektren als abhängig von der Energie zu betrachten, im Gegensatz zu den Bragg-Spektren, die die Wellenlänge als Grundgröße haben. Damit ist die Interpretation einiger Experimente einfacher: z.B. bei der Untersuchung der kurzwelligen Grenze (gleich höchste vertretene Energie) des Röntgenkontinuums ist das Ergebnis direkt in Kiloelektronenvolt (keV) präsentiert und keine Umrechnung nötig, wie bei einem Bragg-Spektrum. Andererseits ist es nicht möglich, aus einem solchen Ergebnis den Wert des Planckschen Wirkungsquantums auszurechnen, da die Energie der Photonen und nicht die Frequenz gemessen wird.

7.3 Experimente zur Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen

7.3.1 Untersuchung der Bragg-Reflexion

Ziele des Experimentes

- Demonstration der Beugung erster und höherer Ordnungen an einem Einkristall.
- Überprüfung des Verhältnisses der Energien der Röntgenstrahlen in unterschiedlichen Beugungsordnungen.
- Bestimmung des Netzebenenabstandes des *NaCl*-Kristalls.

Grundlagen

Nach einer zuerst von W.H. und W.L. Bragg im Jahr 1913 vorgenommenen Betrachtung kann die regelmäßige Anordnung von Atomen in einem Kristall so interpretiert werden, dass sie auf parallel zueinander verlaufenden Netzebenen angeordnet sind.

Die parallel auf den Kristall treffenden Röntgenstrahlen werden an jedem Atom elastisch gestreut. Bei Erfüllung zweier Bedingungen interferieren die an den einzelnen Atomen gestreuten Wellen konstruktiv miteinander. Diese Bedingungen lauten:

$$\text{Einfallswinkel } \alpha_1 = \text{Ausfallswinkel } \alpha_2 = \alpha$$

und

$$n \cdot \lambda = 2 \cdot d \cdot \sin \alpha, \quad (7.1)$$

wobei d der Netzebenenabstand und die Beugungsordnung n eine ganze Zahl ist.

Zur Herleitung der Gl. (7.1) müssen die an zwei Netzebenen gestreuten Strahlen betrachtet werden. In Fig. 7.1 (a) sind die einfallenden Strahlen mit 1 und 2 und die gestreuten mit 1' und 2' bezeichnet. Die Strahlen 1' und 2' interferieren miteinander konstruktiv, wenn der Gangunterschied $\Delta L = AB + BC$ einem ganzzahligen Vielfachen der Wellenlänge entspricht. Da der Winkel $\angle ADB = \angle BDC = \alpha$ ist, wird der Gangunterschied zu $\Delta L = 2d \sin \alpha$.

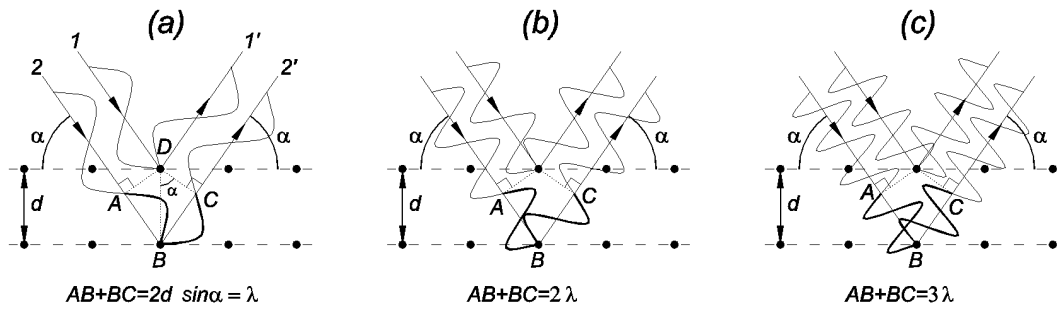


Fig. 7.1: Schematische Darstellung der Bragg-Reflexion und Herleitung der Bragg-Bedingung. (a): erste Beugungsordnung ($n = 1$); (b): zweite Beugungsordnung ($n = 2$); (c): dritte Beugungsordnung ($n = 3$).

In Fig. 7.1 ist die Situation für drei Beugungsordnungen skizziert: Teilbild (a) entspricht der ersten Beugungsordnung $\Delta L = 1 \cdot \lambda$, (b) der zweiten $\Delta L = 2 \cdot \lambda$ und (c) der dritten Beugungsordnung $\Delta L = 3 \cdot \lambda$.

Bei Aufnahme des Spektrums mit Hilfe eines energieauflösenden Detektors werden nicht die Wellenlängen, sondern die Energien erfasst. Dafür kann die Bragg-Bedingung Gl. (7.1) unter Berücksichtigung von $E = h\nu = hc/\lambda$ wie folgt umgeschrieben werden:

$$E_n = n \frac{hc}{2 \cdot d \cdot \sin \alpha}. \quad (7.2)$$

Dabei ist E_n die Energie der in Beugungsordnung n reflektierten Röntgenstrahlung. Es ist ersichtlich, dass bei festem Winkel α die kleinste Energie E_1 die Strahlung in der ersten Beugungsordnung hat. Das Verhältnis der Strahlungsenergie in der Beugungsordnung n zur Strahlungsenergie in der ersten Ordnung $E_n/E_1 = n$ gibt die Beugungsordnung wieder.

Aus Gl. (7.2) folgt, dass das Verhältnis E_n/n für jede Netzebenenschar konstant ist:

$$\frac{E_n}{n} = \frac{hc}{2d \sin \alpha} \approx \frac{620 \text{ pm} \cdot \text{keV}}{d \sin \alpha}. \quad (7.3)$$

Mit Hilfe dieser Gleichung kann aus den gemessenen Energien der Netzebenenabstand d berechnet werden.

Benötigte Geräte

- Röntgengerät mit Goniometer (LD-Kat.-Nr. 554811) und Röntgenröhre mit Kupfer-Anode (LD-Kat.-Nr. 55485)
- *NaCl*-Einkristall
- Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen (LD-Kat.-Nr. 559938)
- PC mit Windows 95/.. /XP und einer Soundkarte
- Software *VKA Lab*

Aufbau

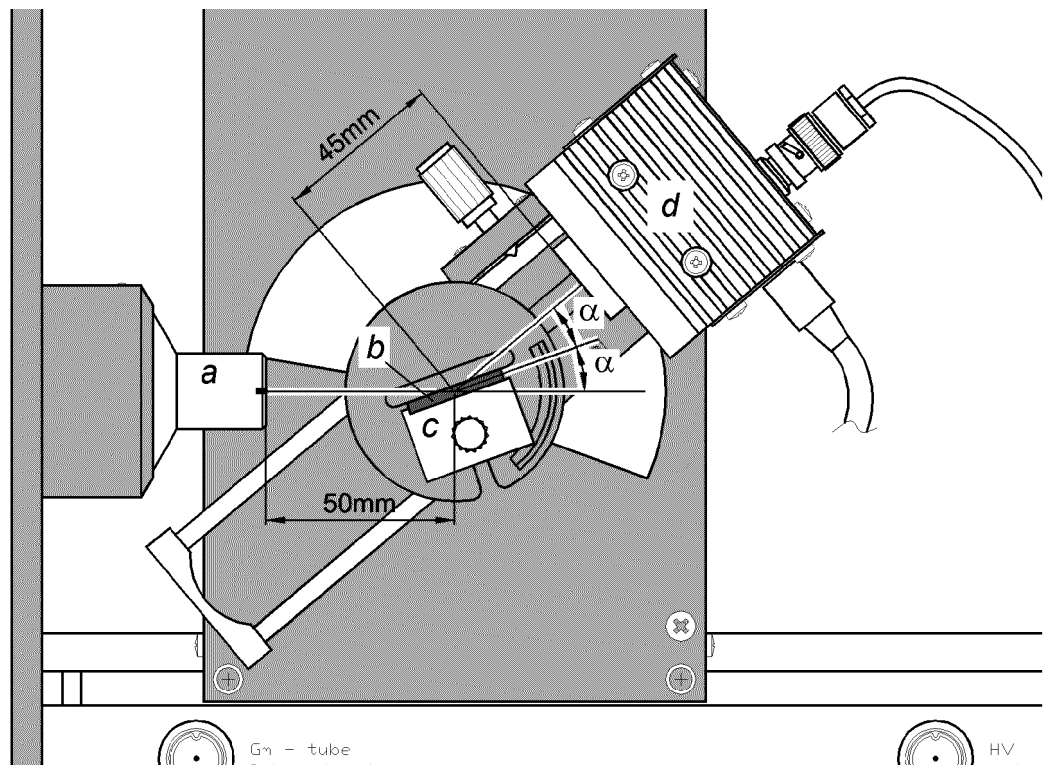


Fig. 7.2: Aufbau des Experimentes: *a* – Kollimator, *b* – *NaCl*-Kristall, *c* – Targettisch, *d* – Detektor.

Nach Ausbau des Sensorhalters mit dem Geiger-Müller-Zählrohr wird der Sensorhalter mit dem Halbleiterdetektor auf dem Goniometer montiert und das Versorgungskabel sowie das Ausgangskabel an den Halbleiterdetektor angeschlossen. Das Netzgerät des Detektors wird ans Netz angeschlossen, und nach ca. 1 Minute ist der Detektor betriebsbereit, die Leuchtdiode leuchtet „grün“.

Das Goniometer wird an den Führungsstangen so befestigt, dass der Abstand zwischen der Spaltblende des Kollimators und dem Targetarm ca. 5 cm beträgt (vgl. Fig. 7.2). Der Targethalter mit dem Targettisch werden eingebaut und der *NaCl*-Kristall wird darauf vorsichtig eingespannt. Am Röntgengerät wird nach dem Drücken der Taste *ZERO* die 2:1-Kopplung von Detektor- zu Kristallwinkel eingeschaltet (Taste *COUPLED*), die Hochspannung wird auf 35 kV und der Emissionsstrom auf 0,2 mA eingestellt.

Durchführung


Nach Starten von *VKA Lab* wird eine vorbereitete Vorlage geladen, die die folgenden Merkmale hat: die Kanalbreite ist auf 0,1 – 0,15 keV eingestellt, die höchste messbare Energie ist ungefähr 35 keV, die Energiekalibrierung ist eingegeben, die Energie-Darstellung ist gewählt und der Standardwert der Messdauer ist auf 60 s eingestellt. Am Röntgengerät wird der Kristallwinkel $\alpha = 5^\circ$ eingestellt, die Hochspannung eingeschaltet und die Aufnahme in *VKA Lab* gestartet.

Nach dem Ablauf der Messzeit werden die Aufnahmen für die Winkel $\alpha = 10^\circ$, 15° und 20° durchgeführt.

Auswertung

Im Messbeispiel (vgl. Fig. 7.3) sind die Röntgenspektren dargestellt, die in der Bragg-Anordnung bei den Kristallwinkeln $\alpha = 5^\circ$, 10° , 15° und 20° aufgenommen wurden. Es ist ersichtlich, dass außer der 1. Beugungsordnung (der Peak mit der kleinsten Energie) auch die höheren Beugungsordnungen im Spektrum präsent sind.

Zur Bestätigung, dass die Peaks in Fig. 7.3 zu den verschiedenen Ordnungen bei Beugung an der gleichen Netzebenenchar gehören, müssen die Verhältnisse der Peakenergien analysiert werden.

Zur genauen Bestimmung der Energien werden Gauss-Funktionen an die Beugungspeaks angefitet. Nach Anklicken des Buttons  werden – den Anweisungen in der Statuszeile folgend – die ungefähre Peakposition und der Anpassungsbereich angegeben. Die Koordinate μ des Maximums ist dann im Feld *Kommentar* des Fensters *Spektrum Einstellungen* abzulesen (durch einen Rechtsklick auf das Symbol des Fits in der Legende aufzurufen).

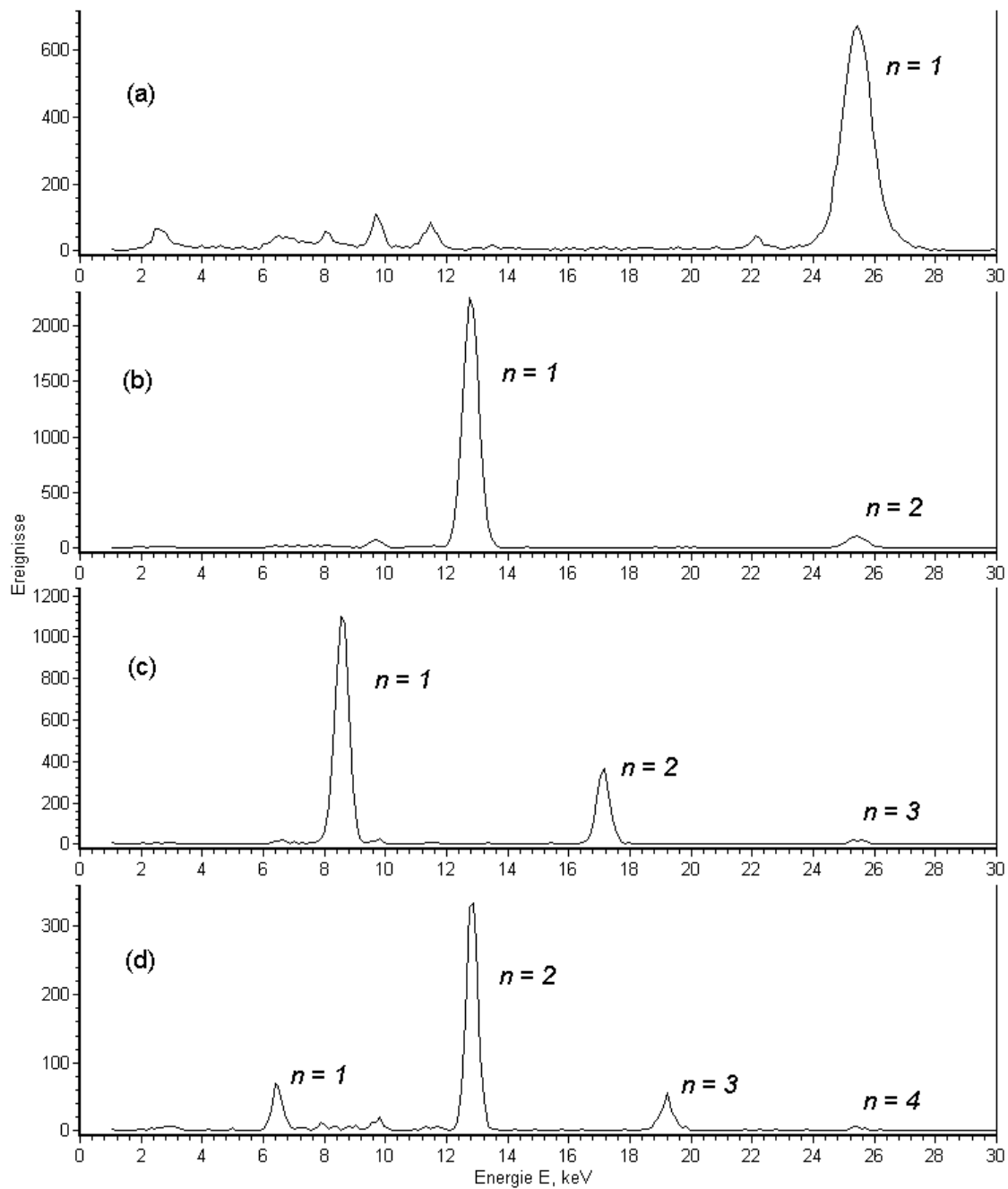


Fig. 7.3: Spektren der in der Bragg-Anordnung reflektierten Röntgenstrahlen. Quelle: Röntgenröhre mit Kupfer-Anode; Kristall: $NaCl$. Messdauer: 60 s pro Spektrum.

Teilbild (a): Kristallwinkel $\alpha = 5^\circ$; (b): $\alpha = 10^\circ$; (c): $\alpha = 15^\circ$; (d): $\alpha = 20^\circ$. Die Beugungsordnungen sind beschriftet. Die kleinen Peaks bei $E = 9,7$ keV, $11,4$ keV und $22,2$ keV sind durch die Fluoreszenz des Gehäuses ($Au L\alpha$, $L\beta$ bzw. $Ag K\alpha$) und bei $E = 8,1$ keV durch die Streuung der $Cu K\alpha$ -Linie aus dem Primärspektrum der Röntgenröhre verursacht.

Tab. 7.1: Energien E_n für verschiedene Kristallwinkel α und Beugungsordnungen n

Kristallwinkel α	E_n			
	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$
5°	25,45 keV $E_n/E_1 = 1$			
10°	12,79 keV $E_n/E_1 = 1$	25,42 keV $E_n/E_1 = 1,99$		
15°	8,57 keV $E_n/E_1 = 1$	17,12 keV $E_n/E_1 = 2,00$	25,47 keV $E_n/E_1 = 2,97$	
20°	6,50 keV $E_n/E_1 = 1$	12,95 keV $E_n/E_1 = 1,99$	19,41 keV $E_n/E_1 = 2,99$	25,71 keV $E_n/E_1 = 3,95$

Die ermittelten Energien der Peaks sind nach der Beugungsordnung n sortiert in Tab. 7.1 aufgeführt. Zusätzlich sind die Verhältnisse E_n/E_1 der Strahlungsenergie in der Beugungsordnung n zur Strahlungsenergie in der ersten Ordnung angegeben. Sie haben annähernd ganzzahlige Werte, was unter Berücksichtigung der Gl. (7.2) die Annahme bestätigt, dass sie zu verschiedenen Ordnungen bei der Beugung an der gleichen Netzebenenschar gehören.

Tab. 7.2: Zahlenbeispiel zur Ermittlung des Netzebenenabstandes d nach Gl. (7.3)

Kristallwinkel α	E_n/n , keV				$\langle E_n/n \rangle$, keV	d , pm
	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$		
5°	25,45				25,45	280
10°	12,79	12,71			12,75	280
15°	8,57	8,56	8,49		8,54	281
20°	6,50	6,47	6,47	6,43	6,47	280

Bildet man jetzt für die beobachteten Peaks das Verhältnis E_n/n , lässt sich daraus nach Gl. (7.3) der Netzebenenabstand d des verwendeten $NaCl$ -Kristalls ermitteln (vgl. Tab. 7.2). Die angegebenen Werte für d wurden für jeden Kristallwinkel aus den gemittelten Werten $\langle E_n/n \rangle$ ausgerechnet. Wie es aus der Tab. 7.2 ersichtlich ist, wurde bei allen Winkeln die Beugung an der Netzebenenschar mit dem Abstand $d \approx 280$ pm beobachtet. Der Vergleich mit den Literaturdaten für $NaCl$

(Gitterkonstante $a_{NaCl} = 564,0$ pm) zeigt, dass es sich hier um die Beugung an den (200)-Netzebenen handelt ($d_{200} = a_{NaCl}/2 \approx 282$ pm). Dieses Ergebnis stimmt mit den Herstellerangaben über die Schnittebene des Kristalls überein.

Bei der Bragg-Aufnahme mit einem Geiger-Müller-Zählrohr als Detektor werden die Photonen, die in verschiedenen Beugungsordnungen reflektiert wurden, *gemeinsam* gezählt. Ein so aufgenommenes Spektrum ist also eine Zusammensetzung von mehreren Komponenten, die nicht einfach voneinander getrennt werden können. Aus dem Teilbild (d) in Fig. 7.3 ist es besonders klar sichtbar, wie falsch die Aussage über die Intensität der Strahlung sein könnten, wenn man sich nur an der erste Beugungsordnung orientieren würde und das Vorhandensein höherer Beugungsordnungen vernachlässigen würde. Hier hat die Strahlung in der ersten Beugungsordnung (bei $E \approx 6,5$ keV) nur ein Viertel der Intensität der zweiten Beugungsordnung und ungefähr die gleiche Intensität wie die dritte Beugungsordnung.

Kommentar

Für das Experiment wurde eine Röntgenröhre mit Kupfer-Anode (LD-Kat.-Nr. 55485) eingesetzt, weil sie dank des dünneren Fensters die Strahlung in einem weitem Energiebereich liefert: ca. 5 bis 35 keV bei der Hochspannung 35 kV. Die Kristallwinkel müssen allerdings so gewählt werden, dass nur die Bremsstrahlung und nicht die charakteristischen Linien am Kristall reflektiert werden. Anderenfalls kann die viel größere Intensität in der charakteristischen Linie die Intensitätsverhältnisse verschiedener Beugungsordnungen erheblich verfälschen.

Die messtechnische Nullpunktposition des Goniometers sollte nach der Gebrauchsanweisung zum Goniometer eingestellt sein. Damit sind gute quantitative Ergebnisse gewährleistet.

Als Alternative zur Benutzung einer Vorlage mit voreingestellter Energiekalibrierung kann diese Kalibrierung auch anhand des ersten Spektrums erfolgen. Dafür können die Peaks der Gehäusefluoreszenz — ein sozusagen „eingebauter Energiestandard“ — genommen werden, z.B. $Au L\alpha$ bei $E = 9,7$ keV und $Ag K\alpha$ bei $E = 22,2$ keV (vgl. Fig. 7.3, a).

7.3.2 Kristallstruktur-Analyse mit Hilfe eines energieauflösenden Detektors

Ziele des Experimentes

- Aufnahme der energiedispersiven Beugungsspektren polykristalliner Proben: *Al* und *KCl*.
- Bestimmung der Gitterstruktur und der Gitterkonstanten von *Al* und *KCl*.

Grundlagen

Eine der wichtigsten Anwendungen der Röntgenstrahlen ist die Strukturanalyse. Röntgenstrahlung wird unter anderem zur Charakterisierung mineralogischer Proben, von Metalllegierungen oder künstlich gezüchteten Kristallen eingesetzt. Auch die Struktur biologischer Objekte lässt sich untersuchen: so wurde z.B. die Doppelhelix-Struktur der DNA damit entdeckt (F.H. Crick und J.D. Watson, Nobelpreis 1962).

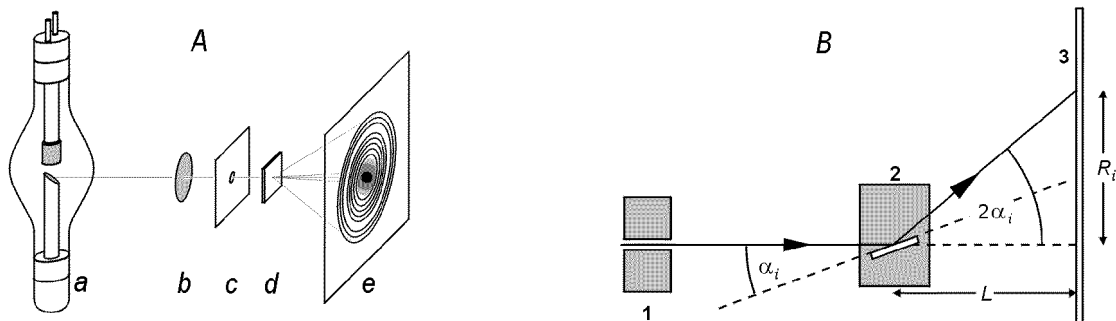


Fig. 7.4: A) Schematischer Aufbau zur „klassischen“ Debye-Scherrer-Aufnahme: *a* – Röntgenröhre, *b* – Filter zu Monochromatisierung der Strahlung, *c* – Kollimator, *d* – Probe, *e* – Röntgenfilm.

B) Bragg-Reflexion an einer „passenden“ Netzebenen-schar eines ausgewählten Kristallites in der Pulverprobe: 1 – Kollimator, 2 – Probe, 3 – Röntgenfilm.

Zur Untersuchung der Struktur polykristalliner Proben kann die Debye-Scherrer-Methode angewendet werden (vgl. Fig. 7.4, A). Dabei wird eine pulverförmige kristalline Probe mit monochromatischen Röntgenstrahlen der Wellenlänge λ_0 durchleuchtet und das Interferenzmuster der Streustrahlung auf einem Röntgenfilm festgehalten. Die Probe enthält kleine Kristallite mit Abmessungen von etwa 1–10 μm ,

die im allgemeinem völlig zufällig orientiert sind. Damit gibt es immer einige, die zum Primärstrahl so orientiert sind, dass für sie die Bragg-Bedingung

$$n \cdot \lambda_0 = 2 \cdot d_i \cdot \sin \alpha_i,$$

erfüllt ist (vgl. Fig. 7.4, B). Dabei ist d_i der Netzebenenabstand im Kristall bzw. α_i der Glanzwinkel, n ist die Beugungsordnung.

Das Gesamtbeugungsmuster von vielen Kristalliten ist axialsymmetrisch: jeder Netzebenenschar mit dem Netzebenenabstand d_i entspricht ein Kreis mit dem Radius $R_i = L \cdot \tan 2\alpha_i$, wobei L der Abstand zwischen der Probe und dem Film ist.

Alternativ zur „klassischen“ Verwendung monochromatischer Strahlung und der Erfassung mehrerer Beugungswinkel kann eine *polychromatische* Quelle eingesetzt und das Energiespektrum bei *einem festgehaltenen* Beugungswinkel aufgenommen werden. Damit kommt man zu einem *energiedispersiven* Untersuchungsverfahren (vgl. Fig. 7.5).

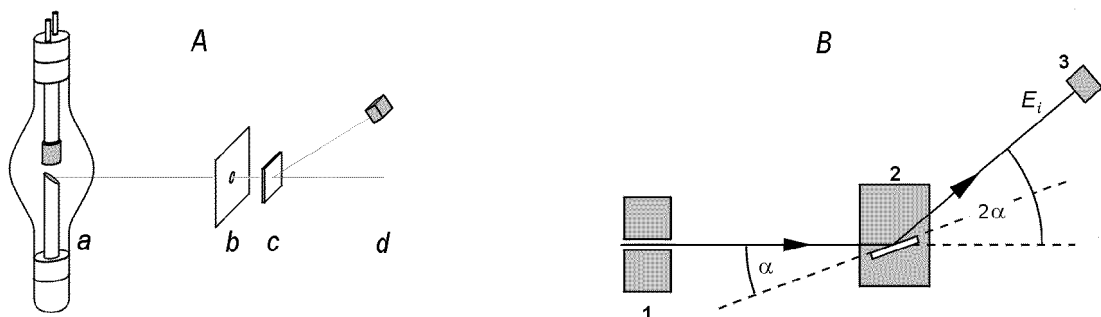


Fig. 7.5: A) Schematischer Aufbau zur „energiedispersiven“ Strukturanalyse: *a* – Röntgenröhre, *b* – Kollimator, *c* – Probe, *d* – energieauflösender Detektor.

B) Bragg-Reflexion an einer „passenden“ Netzebenenschar eines ausgewählten Kristallites in der Pulverprobe: 1 – Kollimator, 2 – Probe, 3 – Detektor.

Dafür wird die Bragg-Bedingung unter Berücksichtigung von $E = h\nu = hc/\lambda$ wie folgt umgeschrieben:

$$E_i = n \frac{hc}{2 \cdot d_i \cdot \sin \alpha}. \quad (7.4)$$

Sie definiert in diesem Fall die Photonenenergien E_i , für die bei dem vorgegebenen festen Winkel $\vartheta = 2\alpha$ die Beugung an der Netzebenenschar mit dem Abstand d_i

erfolgen kann. Solche Energien E_i werden aus der breitbandigen primären Strahlung von der Probe entsprechend der in ihr vorhandenen Netzebenenabständen d_i „aussortiert“.

Beschränkt man sich auf kubische Kristalle, so lässt sich der Netzebenenabstand in der Form

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (7.5)$$

darstellen. Dabei ist a die Gitterkonstante, die ganzzahligen h, k, l sind die Millerschen Indizes der betrachteten Netzebene. Einsetzen von (7.5) in (7.4) ergibt den Ausdruck

$$E_{hkl}^2 = \left(\frac{hc}{2a \sin \alpha} \right)^2 \cdot (h^2 + k^2 + l^2),$$

oder abgekürzt:

$$E_{hkl}^2 = A \cdot N, \quad (7.6)$$

mit

$$A = \left(\frac{hc}{2a \sin \alpha} \right)^2 \approx \left(\frac{620 \text{ pm} \cdot \text{keV}}{a \sin \alpha} \right)^2 \quad (7.7)$$

und

$$N = (h^2 + k^2 + l^2)$$

ist eine ganze Zahl.

Die kubische Struktur ist in drei Untergruppen eingeteilt: primitiv, raumzentriert und flächenzentriert. Für Kristalle mit primitiver kubischer Struktur (z.B. $CsCl$) ist jede Kombination ganzzahliger h, k und l erlaubt. Bei der Beugung an Kristallen der beiden anderen Untergruppen werden nicht für alle Kombinationen von h, k und l Reflexe beobachtet, weil sie durch destruktive Interferenzen der „zusätzlichen“ Atome in den Flächen bzw. in der Mitte der Elementarzelle aufgehoben werden.

So wird für die flächenzentrierten kubischen Kristalle Reflexion nur von den Netzebenen beobachtet, für die die Indizes h, k, l alle gerade oder alle ungerade sind. Eine solche Struktur haben z.B. KCl und Al . Im Fall eines raumzentrierten kubischen Kristalls (z.B. Na) muss die Summe $h + k + l$ einen ungeraden Wert haben. Die möglichen Reflexe für kubische Kristalle sind in Tab. 7.3 gegeben.

In diesem Experiment wird das Verfahren zur Bestimmung der Kristallstruktur und der Gitterkonstante von Festkörpern angewendet; als polychromatische Quelle wird das Bremsstrahlungskontinuum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode eingesetzt.

Tab. 7.3: Beugung an kubischen Kristallen: Millersche Indizes der Netzebenenscharen mit konstruktiver Interferenz

primitiv	raumzentriert	flächenzentriert	$h^2 + k^2 + l^2$
100	—	—	1
110	110	—	2
111	—	111	3
200	200	200	4
210	—	—	5
211	211	—	6
220	220	220	8
221, 300	—	—	9
310	310	—	10
311	—	311	11
222	222	222	12

Benötigte Geräte

- Röntgengerät mit Goniometer (LD-Kat.-Nr. 554811) und Röntgenröhre mit Kupfer-Anode (LD-Kat.-Nr. 55485)
- Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen (LD-Kat.-Nr. 559938)
- polykristalline Proben: *Al* (Dicke 1 mm) und *KCl* (Dicke 0,5 mm)
- Lochblende 1 mm (aus dem Filmhalter X-Ray, LD-Kat.-Nr. 554838)
- *Fe*-Filter (aus dem Foliensatz Absorber, LD-Kat.-Nr. 554832)
- PC mit Windows 95/./XP und einer Soundkarte
- Software: *VKA Lab*

Aufbau

Das Goniometer wird so fixiert, dass der Abstand von seiner Achse zum Kollimator ca. 4 cm beträgt (Fig. 7.6). Der Sensorhalter mit dem Geiger-Müller-Zählrohr wird

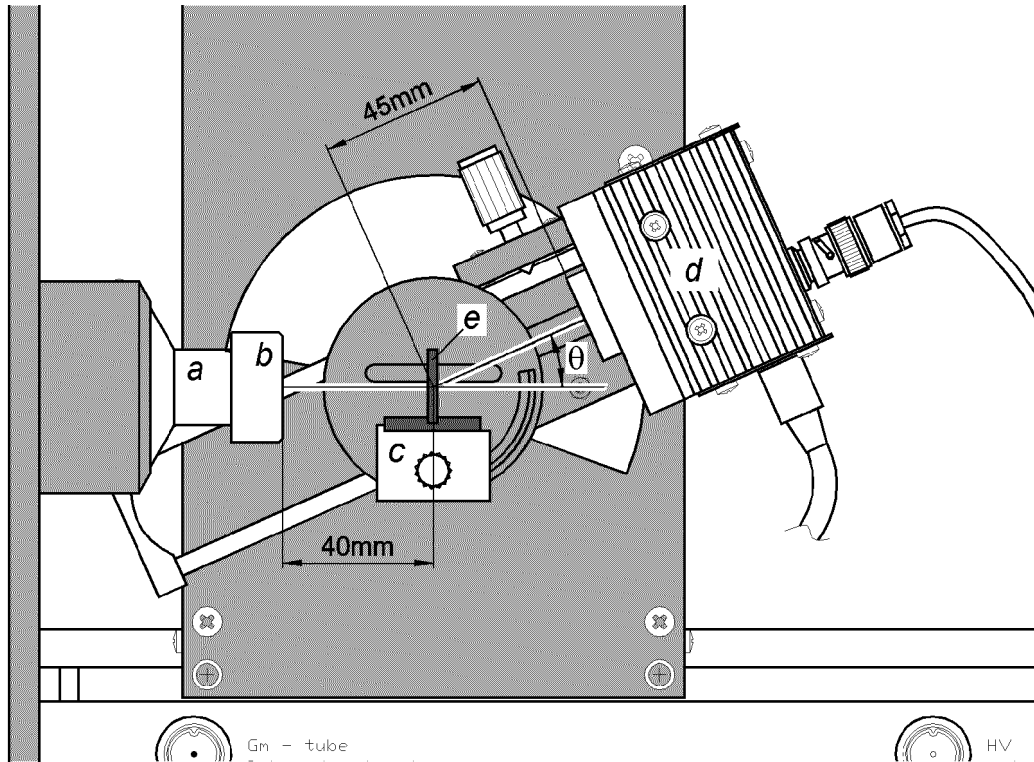


Fig. 7.6: Aufbau des Experimentes: *a* – Kollimator, *b* – Lochblende, *c* – Targettisch, *d* – Detektor, *e* – Probe.

gegen den Sensorhalter mit dem Halbleiterdetektor getauscht und an den Halbleiterdetektor das Versorgungs- und das Ausgangskabel angeschlossen. Der Targettisch wird vorerst nicht installiert.

Am Röntgengerät werden die Hochspannung $U_A = 35 \text{ kV}$, der Emissionsstrom $I_A = 1 \text{ mA}$ und der Sensorwinkel $\theta = 0^\circ$ eingestellt. Das Netzgerät des Detektors wird ans Netz angeschlossen, und nach ca. 1 Minute ist der Detektor betriebsbereit (die Leuchtdiode leuchtet „grün“).

Zur Bestimmung der messtechnischen Nullposition des Goniometers wird der Kollimator ausgebaut, um auf seiner Strahleintrittsseite den *Fe*-Filter und auf der Austrittsseite die Lochblende 1 mm zu montieren.

Nach Wiedereinbau des Kollimators wird die Hochspannung am Röntgengerät eingeschaltet und die Messung in *VKA Lab* gestartet. Startend bei der aktuellen Nullposition wird der Sensorwinkel θ variiert und die in der Statuszeile von *VKA Lab* angezeigte Zählrate kontrolliert. Die maximale Zählrate ergibt sich bei der tatsächlichen Nullposition des Sensors θ_0 . Die ermittelte Nullposition kann im Mikroprozessor-Speicher des Röntgengerätes gespeichert werden (siehe Gebrauchs-

anweisung zum Goniometer). Alternativ kann der Wert des Sensorwinkels auf θ_0 beim Einstellen korrigiert werden.

Der Sensorwinkel wird auf $\theta = 24^\circ$ eingestellt, vom Kollimator wird der *Fe*-Filter entfernt. Der Targettisch mit der *Al*-Probe wird entsprechend Fig. 7.6 montiert.

Durchführung


Nach Starten von *VKA Lab* wird eine vorbereitete Vorlage geladen, die die folgenden Merkmale hat: die Kanalbreite ist auf 0,1 – 0,15 keV eingestellt, die höchste messbare Energie ist ungefähr 35 keV, die Energiekalibrierung ist eingegeben, die Energiedarstellung ist gewählt. Die Messdauer wird auf 1800 s (30 min) eingestellt. Am Röntgengerät wird die Hochspannung eingeschaltet und die Aufnahme in *VKA Lab* gestartet.

Nach Abschluss der Aufnahme des Beugungsspektrums von *Al* wird zur *KCl*-Probe gewechselt und ein Spektrum mit der Messdauer 3600 s (1 h) aufgenommen.

Auswertung

A. Strukturanalyse von Aluminium

Ein Messbeispiel für das energiedispersive Beugungsspektrum von Aluminium ist in Fig. 7.7 dargestellt. Es sind die Beugungspeaks bei $E \approx 12,6$ keV, 14,7 keV, 20,6 keV und 25,1 keV ersichtlich (Peaks 1 bis 4). Außerdem sind die Fluoreszenz-Peaks des Detektor-Gehäuses im Spektrum präsent: *Fe K α* bei $E = 6,4$ keV, *Au L α* bei 9,7 keV und *Au L β* bei 11,4 keV (Peaks *a*, *b* bzw. *c*).

Zur genauen Bestimmung der Energien werden Gauss-Funktionen an die Beugungspeaks angefitet. Nach Anklicken des Buttons  werden – den Anweisungen in der Statuszeile folgend – die ungefähre Peakposition und der Anpassungsbereich angegeben. Die Koordinate μ des Maximums ist dann im Feld *Kommentar* des Fensters *Spektrum Einstellungen* abzulesen (durch einen Rechtsklick auf das Symbol von Fit in der Legende aufzurufen).

Zur Auswertung wird eine kubische Struktur des Aluminiums angenommen. Die ermittelten Werte für die Energien der Beugungspeaks E_i werden in einer Tabelle zusammengefasst (Tab. 7.4). Daraus werden die Werte E_i^2 berechnet und anschließend nach Gl. (7.6) die Konstante A gefunden, so dass für alle Peaks $N = E_i^2/A$

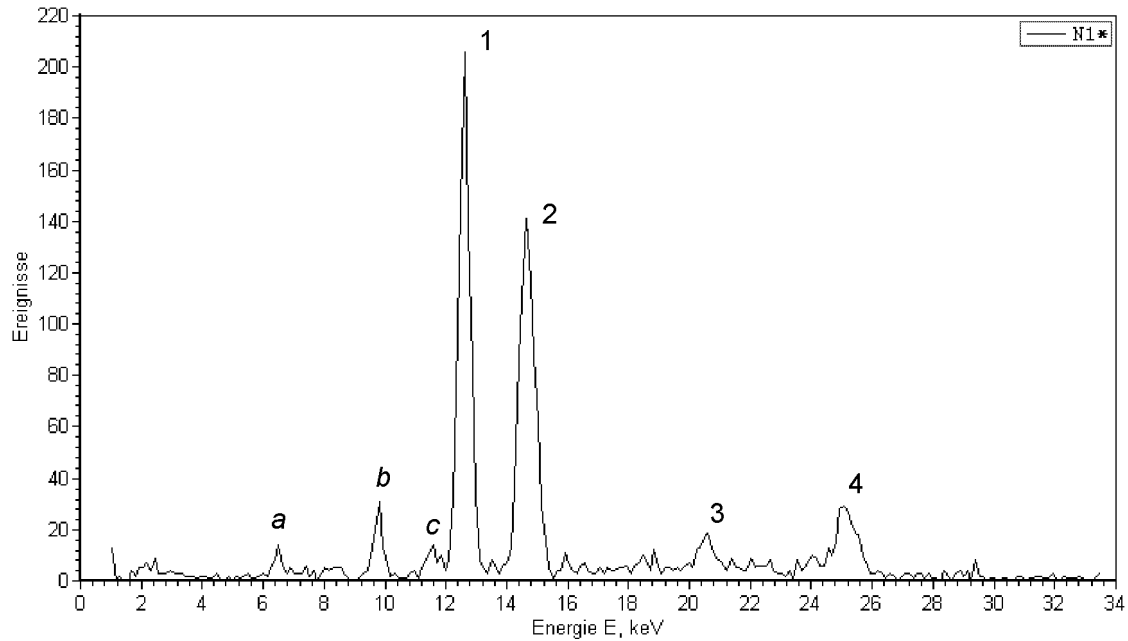


Fig. 7.7: Energiedispersives Beugungsspektrum einer polykristallinen *Al*-Probe. Dicke der Probe: 1 mm. Strahlungsquelle: Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 35$ kV, $I_A = 1$ mA. Aufnahmezeit: 30 min. Beugungspeaks: $E \approx 12,6$ keV (Peak 1), $14,7$ keV (Peak 2), $20,6$ keV (Peak 3) und $25,1$ keV (Peak 4). Die kleinen Peaks *a*, *b* und *c* (bei $E = 6,4$ keV, $9,7$ keV bzw. $11,4$ keV) sind durch die Fluoreszenz des Gehäuses (*Fe* $K\alpha$ bzw. *Au* $L\alpha$ und $L\beta$) verursacht.

ganzzahlig ist.

Für die Bestimmung von A wird zuerst angenommen, dass das Peak Nr. 1 dem Wert $N = 1$ entspricht. Dann sollte für A gelten $A = E_1^2$ und für alle Peaks sollte $N' = E_i^2/E_1^2$ ein annähernd ganzzahligen Wert haben. Trifft dies nicht zu, wird für den Peak Nr. 1 die nächstgrößere ganze Zahl genommen. Im Messbeispiel muss für den Peak Nr. 1 der Wert $N = 3$ angenommen werden. Die daraus folgenden Werte für N' sind in Tab. 7.4 ebenfalls angegeben.

Tab. 7.4: Zahlenauswertung des energiedispersiven Beugungsspektrums von Aluminium

Peak Nr.	E , keV	E^2 , keV ²	N'	N	(hkl)	A , keV ²
1	12,6	159,0	3	3	(111)	53,0
2	14,7	215,2	4,1	4	(200)	53,8
3	20,6	422,3	8,0	8	(220)	52,8
4	25,1	632,0	11,9	12	(222)	52,7

Da die (hkl) -Werte für die beobachteten Beugungspeaks alle gerade oder alle ungerade sind, lässt sich die Schlussfolgerung ziehen, dass die Aluminium Kristalle flächenzentrierte kubische Struktur (fcc) besitzen. Diese Folgerung stimmt mit der in Literatur angegebenen Kristallstruktur von Aluminium überein.

Zur Bestimmung der Gitterkonstante a von Al wird der Mittelwert für A aus Tab. 7.4 berechnet: $\langle A \rangle = 53,1 \text{ keV}^2$. Aus Gl. (7.7) folgt unter Berücksichtigung, dass der Beugungswinkel α die Hälfte des eingestellten Sensorwinkels $\theta = 24^\circ$ beträgt

$$a \approx \frac{620 \text{ pm} \cdot \text{keV}}{\sqrt{\langle A \rangle} \sin 12^\circ} \approx 409 \text{ pm}.$$

Auch der experimentelle Wert der Gitterkonstante stimmt mit dem Literaturwert $a_{Al} = 405 \text{ pm}$ gut überein.

B. Strukturanalyse von Kaliumchlorid

Das energiedispersive Beugungsspektrum von KCl ist in Fig. 7.8 dargestellt. Dieses Spektrum weist wesentlich mehr Peaks auf als das Beugungsspektrum von Aluminium (vgl. Fig. 7.7). Allerdings ist ein Teil von ihnen nicht durch die Beugung an KCl verursacht: so sind die Peaks b und c bei $E = 8,1 \text{ keV}$ bzw. $8,9 \text{ keV}$ der Streuung der $Cu K\alpha$ - bzw. $K\beta$ -Linien aus dem Primärspektrum der Röntgenröhre zuzuschreiben. Die Peaks bei $E = 6,4 \text{ keV}$, $9,7 \text{ keV}$ und $11,4 \text{ keV}$ (Peaks a , d bzw. e) sind durch Fluoreszenz des Gehäuses — $Fe K\alpha$ bzw. $Au L\alpha$ und $L\beta$ — verursacht³. Zusätzlich kommt der $Fe K\alpha$ -Peak (a) zum Teil aus der Röntgenfluoreszenz-Strahlung der Lochblende (Stahl), die im direkten Weg durch die KCl -Probe in den Detektor gelangt. Die Unterschied zum Spektrum von Fig. 7.7 ist auf die unterschiedlichen Dicken der Proben zurückzuführen: die KCl -Probe ($d = 0,5 \text{ mm}$) absorbiert weniger niederenergetische Röntgenphotonen (K -Linien von Eisen und Kupfer) als die Al -Probe ($d = 1 \text{ mm}$). Von allen diesen Peaks muss bei der Auswertung des Beugungsspektrums abgesehen werden.

Die Auswertung des Beugungsspektrums von KCl geschieht in der gleichen Weise, wie bei dem Al -Beugungsspektrum. Die ermittelten Zahlenwerte sind in Tab. 7.5

³ Die Fluoreszenz-Peaks des Detektor-Gehäuses und die Streupeaks der primären Strahlung sind im Spektrum immer anwesend. Sie werden aber auffälliger, wenn sich die dem zu untersuchenden Effekt entsprechende Zählrate vermindert. Da ihre Positionen bekannt sind, können diese Peaks bei der Auswertung ziemlich einfach erkannt werden.

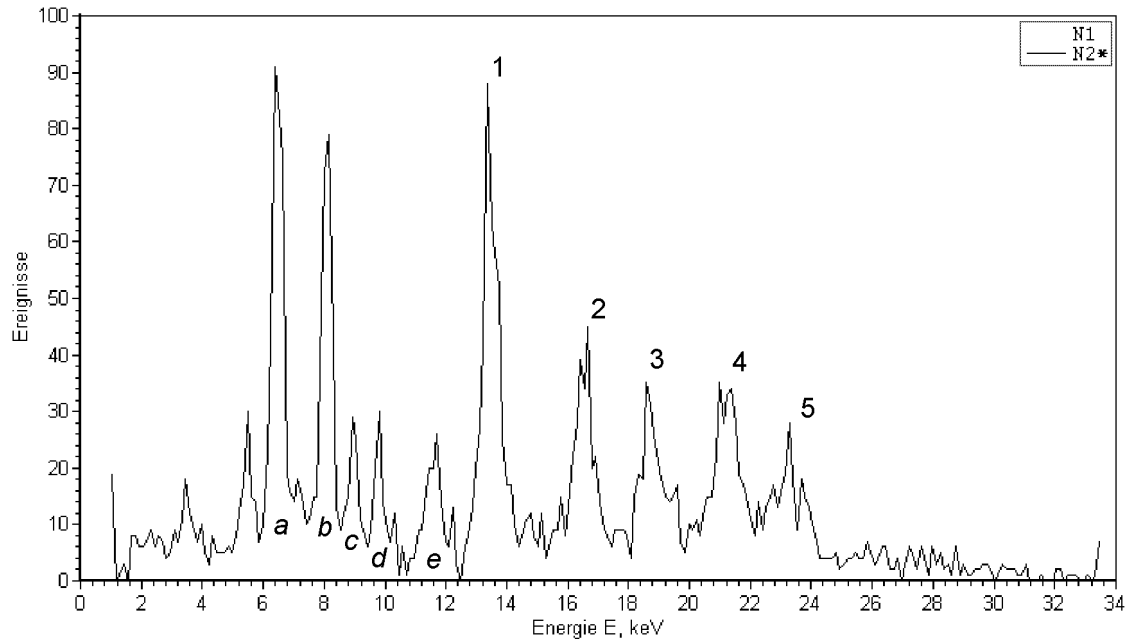


Fig. 7.8: Energiedispersives Beugungsspektrum einer polykristallinen *KCl*-Probe. Dicke der Probe: 0,5 mm. Strahlungsquelle: Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 35$ kV, $I_A = 1$ mA. Aufnahmezeit: 60 min. Beugungspeaks 1 bis 5: $E \approx 13,5$ keV, 16,5 keV, 18,7 keV, 21,2 keV bzw. 23,1 keV. Die Peaks *a* bis *e* sind durch Fluoreszenz des Detektor-Gehäuses und durch die Streuung der primären Strahlung der Röntgenröhre verursacht (siehe Text).

dargestellt.

Für den aus Tab. 7.5 bestimmten Mittelwert der Konstante A gilt $\langle A \rangle = 89,6 \text{ keV}^2$. Damit wird die Gitterkonstante mit Hilfe von Gl. (7.7) zu $a' \approx 315$ pm berechnet. Aus den Werten für N (vgl. Tab. 7.5), die nacheinander ohne Lücken kommen⁴, kann geschlossen werden, dass die untersuchte Probe primitive kubische Struktur hat.

In Wirklichkeit hat Kaliumchlorid, wie Aluminium, flächenzentrierte kubische Struktur. Da aber die Ionen Cl^- und K^+ die gleiche Elektronenzahl haben und damit sehr ähnliche Eigenschaften bezüglich der Streuung von Röntgenstrahlung besitzen, wirkt der *KCl*-Kristall im Beugungsbild wie ein Kristall mit primitiver kubischer Struktur und halbiert Gitterkonstante $a_{KCl}/2$. Deswegen wird die Struktur von

⁴ Der Beugungspeak für $N = 1$ müsste bei der Energie $E = \sqrt{\langle A \rangle} \approx 9,5$ keV liegen. Diese Energie wird aber beim Durchgang durch die Probe stärker absorbiert. Somit ist der Peak von den Gehäusefluoreszenz-Linien vollständig maskiert worden.

Tab. 7.5: Zahlenauswertung des energiedispersiven Beugungsspektrums von Kaliumchlorid

Peak Nr.	E , keV	E^2 , keV ²	N'	N	(hkl)	A , keV ²
1	13,5	182,2	2	2	(110)	91,1
2	16,5	272,2	3,0	3	(111)	90,7
3	18,7	349,7	3,8	4	(200)	87,4
4	21,2	449,4	4,9	5	(210)	89,9
5	23,1	533,6	5,9	6	(211)	88,9

KCl als *pseudoprimitiv* bezeichnet.

Der Literaturwert der Gitterkonstante von Kaliumchlorid-Kristall beträgt $a_{KCl} = 629,0$ pm. Der experimentelle Wert $a = 2 \cdot a' \approx 630$ pm zeigt damit eine gute Übereinstimmung.

Kommentar

Für das Experiment wird eine Röntgenröhre mit Kupfer-Anode eingesetzt, weil ihre charakteristischen Linien bei $E < 9$ keV liegen und somit das Bremsstrahlungskontinuum im Bereich $9 \text{ keV} < E < 35 \text{ keV}$ als polychromatische Röntgenquelle eingesetzt werden kann.

Als Aluminium-Probe wird ein Stück Blech mit der Dicke 1 mm eingesetzt; seine polykristalline Struktur ist produktionsbedingt. Für die Herstellung der Kaliumchlorid-Probe muss das trockene Salz sorgfältig gemörsert und in einer Schicht der Dicke 0,5–1 mm zwischen z.B. zwei Klebeband-Streifen fixiert werden.

Obwohl die beiden beschriebenen Aufnahmen zeitaufwendig sind (0,5 bzw. 1 Stunde), führt das energiedisperive Strukturanalyse-Verfahren schneller zum Ergebnis als die „klassische“ Debye-Scherrer-Aufnahme mit einem Röntgenfilm. Die letztere braucht eine Aufnahmezeit am selben Gerät von 3 Stunden, dazu kommt noch die Zeit, die für das Entwickeln des Films nötig ist.

Das energiedisperive Verfahren wird z.B. in modernen Anlagen zur Gepäckkontrolle an Flughäfen verwendet [63]. Es ermöglicht die automatische Detektion von Spengstoffen und Drogen anhand der Beugungsspektren.

7.4 Experimente mit Röntgenstrahlen zur Einführung in die Quantenphysik

7.4.1 Aufnahme eines Röntgenspektrums: energieaufgelöst vs. wellenlängenaufgelöst

Ziele des Experimentes

- Aufnahme eines energieaufgelösten Spektrums mittels eines Halbleiterdetektors und eines Vielkanalanalysators.
- Feststellung des Vorhandenseins von Kontinuum und charakteristischen Linien im Röntgenspektrum.
- Demonstration der Gleichwertigkeit von Photonen- und Wellenmodell für Röntgenstrahlen durch den Vergleich eines energieaufgelösten-Spektrums mit einem nach der Drehkristallmethode aufgenommenen Spektrum.

Grundlagen

Das Spektrum einer Röntgenröhre besteht im allgemeinen aus dem Bremsstrahlungskontinuum und der charakteristischen Strahlung der Anode (tiefer im Experiment 7.4.2 behandelt). Die Bremsstrahlung entsteht bei der Abbremsung von Elektronen in der Anode und hat ein breites kontinuierlich unter einer bestimmter Maximalenergie verlaufendes Spektrum. Die charakteristische Strahlung dagegen wird in schmalen Linien ausgestrahlt, da sie bei den Elektronenübergängen in den inneren Schalen der Atome der Anode entsteht.

Das Röntgenspektrum kann nach zwei Methoden aufgenommen werden, die sich voneinander grundlegend unterscheiden: nach der Wellenlängen-Dispersion und nach der Energie-Dispersion.

Nach der ersten Methode, die sich historisch viel früher etabliert hatte, wird die wellenlängenabhängige Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen zunutze gemacht (*Bragg-Aufnahme* oder *Drehkristallmethode*). Die zweite Methode basiert auf der Vermessung der Energie jedes einzelnen ankommenden Röntgenquants mit einem energieempfindlichen Detektor.

Die Interpretation der Prozesse, die bei einer Bragg-Aufnahme ablaufen, ist im *Wellen-Modell* der Röntgenstrahlung einfacher. Die Prozesse, die in den energieauflösenden Detektoren stattfinden, werden dagegen am besten mit dem Photonenbild (*Teilchen-Modell*) interpretiert.

In der Tat können das Funktionsprinzip des Halbleiterdetektors und die damit gewonnenen Ergebnisse als Beispiel für das Photonenmodell der Strahlung dienen. Jeder Ausgangsimpuls des Detektors ist eine Reaktion auf ein *einzelnes* registriertes Röntgenphoton, das im Detektor eine Anzahl von Elektronen-Loch-Paaren produziert, die zur Energie des Photons in direkter Proportionalität steht. Die der erzeugten Ladung entsprechende Spannung wird verstärkt und als Spannungsimpuls ausgegeben. Der Vielkanalanalysator sortiert die Impulse nach ihrer Amplitude ein und erzeugt damit das Spektrum.

Bei einem niedrigen Anodenstrom (oder Anodenspannung) der Röntgenröhre ist die Anzahl der in einer Sekunde registrierten Photonen klein, und es ist möglich jedes auftretende Photon zu „sehen“. Es kann beobachtet werden, wie bei der Spektrumaufnahme aus einzelnen erst scheinbar ganz unregelmäßigen Peaks ein ausgeprägtes Muster entsteht: mehrere unabhängige Ereignisse addieren sich zu einem kontinuierlich verlaufenden Spektrum.

Bei der Beugung an einem Kristall kann Röntgenstrahlung als eine Welle betrachtet werden, die von den einzelnen Atomen des Kristallgitters nach dem Huygens-Prinzip weiter ausgestrahlt wird. Durch die regelmäßige Atomanordnung interferieren nur die Wellen bestimmter Wellenlängen in bestimmten Richtungen konstruktiv miteinander. So geschieht die Auswahl der zu vermessenden Wellenlänge durch die Auswahl eines passenden Winkels.

Hier soll auf die Tatsache hingewiesen werden, dass die beiden Methoden der Spektrumaufnahme das gleiche Spektrum liefern, obwohl die Röntgenstrahlung dabei aus unterschiedlichen Gesichtspunkten betrachtet wird: als *Wellen* in der Methode nach Bragg und als Photonen (*Teilchen*) bei der energieauflösenden Spektrumaufnahme. Das beweist die Notwendigkeit einer quantenphysikalischen Behandlung der Strahlung, deren kleinste Energieportionen – die Photonen – Quantenobjekte sind und anhand der klassischen Modellen nicht richtig beschrieben werden können.

Benötigte Geräte

- Röntgengerät mit Goniometer, NaCl-Einkristall (LD-Kat.-Nr. 554811) und Röntgenröhre mit Kupfer-Anode (LD-Kat.-Nr. 55485)
- Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen mit Abschwächerblende (LD-Kat.-Nr. 559938)
- Fensterzählrohr für α -, β -, γ - und Röntgenstrahlen (LD-Kat.-Nr. 55901)
- PC mit Windows 95/./XP und einer Soundkarte
- Software: *Röntgengerät* und *VKA Lab*

Aufbau

A. Aufnahme mit dem Halbleiterdetektor

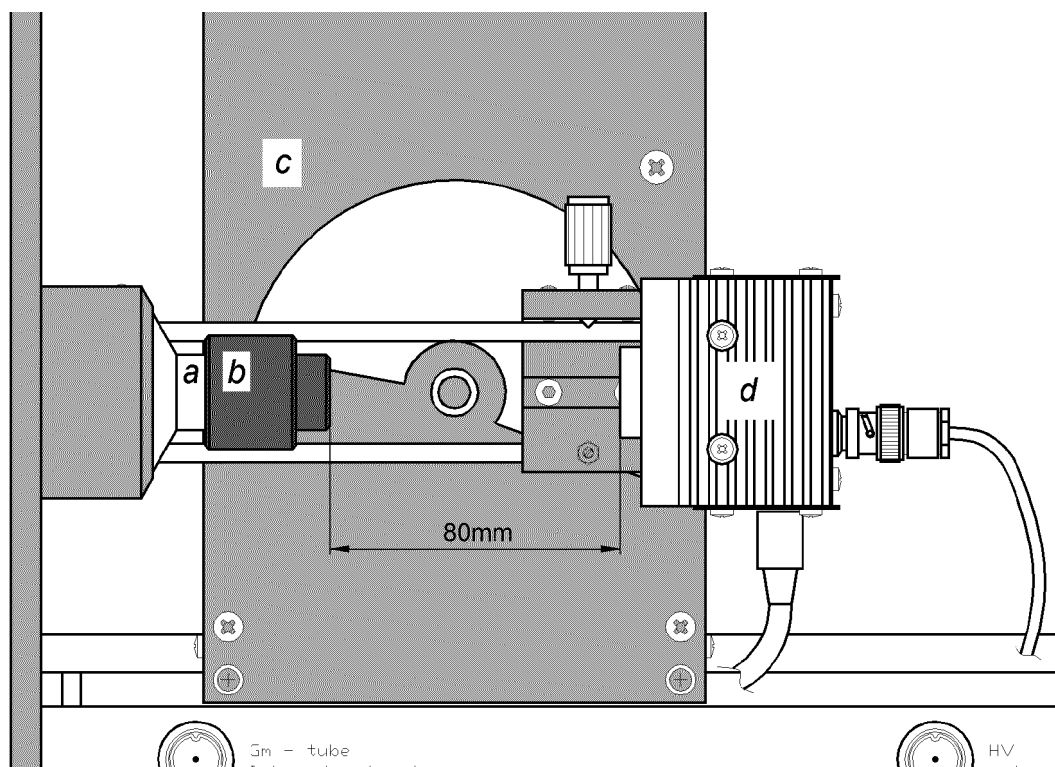


Fig. 7.9: Aufbau des Experimentes für die Aufnahme mit dem Halbleiterdetektor: *a* – Kollimator, *b* – Abschwächerblende, *c* – Goniometer, *d* – Detektor.

Nach Ausbau des Sensorhalters mit dem Geiger-Müller-Zählrohr wird der Sensorhalter mit dem Halbleiterdetektor auf dem Goniometer montiert und das Versorgungskabel sowie das Ausgangskabel an den Halbleiterdetektor angeschlossen.

Weiterhin wird die Abschwächerblende auf den Kollimator gesetzt und am Röntgengerät der Sensorwinkel $\theta = 0^\circ$ eingestellt (siehe Fig. 7.9). Das Netzgerät des Detektors wird ans Netz angeschlossen, und nach ca. 1 Minute ist der Detektor betriebsbereit, die Leuchtdiode leuchtet „grün“.

B. Aufnahme nach der Drehkristallmethode⁵

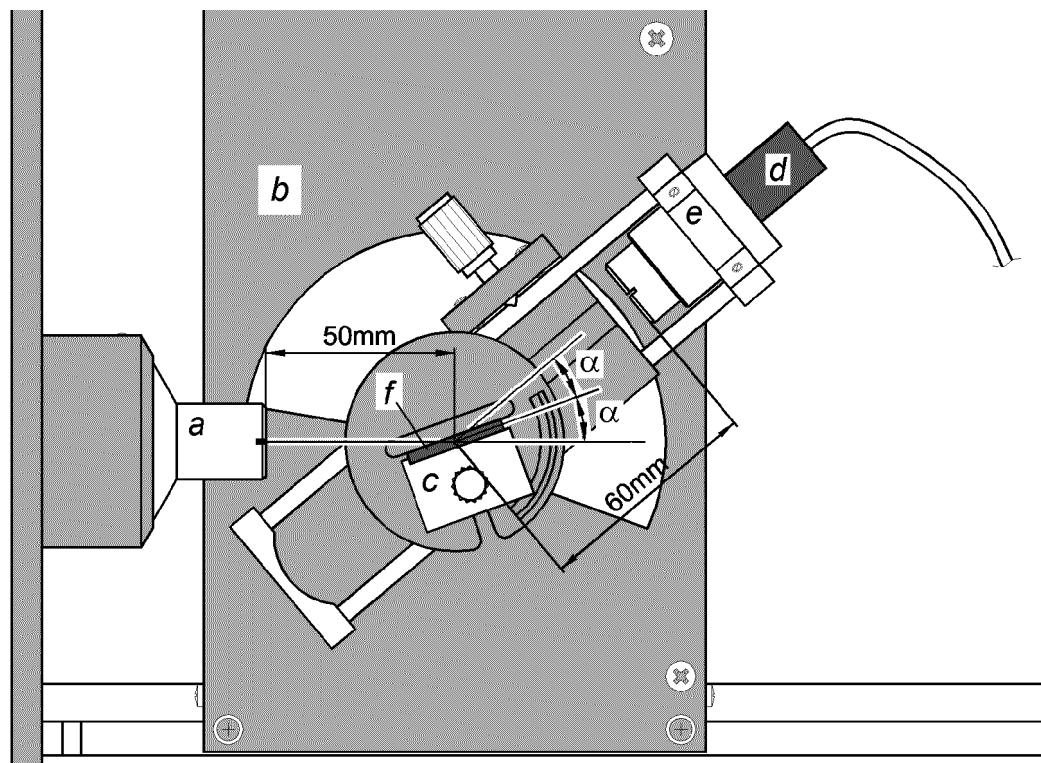


Fig. 7.10: Aufbau des Experimentes für die Aufnahme nach der Drehkristallmethode:

a – Kollimator, *b* – Goniometer, *c* – Targettisch, *d* – Zählrohr, *e* – Sensorhalter, *f* – NaCl-Kristall.

Das Goniometer wird an den Führungsstangen so befestigt, dass der Abstand zwischen der Spaltblende des Kollimators und dem Targetarm ca. 5 cm beträgt (vgl. Fig. 7.10). Das Fensterzählrohr wird in die Sensoraufnahme eingesetzt und

⁵ Die Messung nach der Drehkristallmethode kann eventuell früher bei der Behandlung der Beugung am Kristall gemacht werden und hier als eine bekannte Referenz eingesetzt werden. Es ist nur darauf zu achten, dass die Parameter der Aufnahme möglichst mit den hier benutzten übereinstimmen. Alternativ kann auf das Spektrum *BraggCuTube15kVNaCl.xry* aus der Spektren-Datenbank zugegriffen werden (siehe Anhang).

das Zählrohrkabel an die Buchse GM-Tube angeschlossen. Durch Verschieben des Sensorhalters wird der Abstand zwischen dem Targetarm und der Spaltblende der Sensoraufnahme auf ca. 6 cm eingestellt. Der Targethalter mit dem Targettisch wird eingebaut und der *NaCl*-Kristall darauf vorsichtig eingespannt. Am Röntgengerät wird nach Drücken der Taste *ZERO* die 2:1-Kopplung von Detektor- zum Kristallwinkel eingeschaltet (Taste *COUPLED*), die Hochspannung wird auf $U_A = 15$ kV und der Emissionsstrom auf $I_A = 0,5$ mA eingestellt.

Durchführung

A. Aufnahme mit dem Halbleiterdetektor

Nach Starten von *VKA Lab* wird die vorbereitete Vorlage geladen, die folgende Merkmale hat: die Kanalbreite ist ungefähr auf 0,1 keV eingestellt, die Energiekalibrierung ist eingegeben, die Energie-Darstellung ist gewählt, die Messdauer beträgt 300 s.

Am Röntgengerät werden die Röhren-Hochspannung $U = 15$ kV und der Emissionsstrom $I = 0,1$ mA eingestellt. Die Röhren-Hochspannung wird am Röntgengerät eingeschaltet und die Messung in *VKA Lab* gestartet (F9). Eventuell muss der Sensorwinkel (oder der Emissionsstrom) nachgestellt werden, so dass die in der Statuszeile angezeigte Zählrate zwischen 100 und 300 Ereignisse/s liegt. Nach dem Ablauf der Messzeit wird das Spektrum unter einem passenden Namen gespeichert.

B. Aufnahme nach der Drehkristallmethode

Der Experiment wird wie im Experiment P6.3.3.1 der LEYBOLD Handblätter Physik [46] durchgeführt. Abweichend davon ist der Einsatz von einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode, die Einstellung der Röhren-Hochspannung $U = 15$ kV und des Emissionsstromes $I = 0,5$ mA. Der untere Grenzwert des Targetwinkels ist gleich 6° , und der obere Grenzwert gleich 20° gewählt, um die nötige Messzeit möglichst kurz zu halten. Damit wird das Spektrum auf den Bereich von 6,4 keV bis 21 keV begrenzt und enthält nicht die 2. Beugungsordnung.

Aus Zeitgründen empfiehlt sich die automatische Spektromaufnahme mit der Funktion „automatischer Scan“ des Röntgengeräts. Dabei werden die Daten in einen PC übertragen und vom Programm „Röntgengerät“ erfasst. Nach der Messung muss

der Gitterebenenabstand des Kristalls im Fenster *Einstellungen* eingetragen werden (am einfachsten mit einem Click auf den Button *NaCl eintragen*) und das Spektrum muss unter einem passenden Namen gespeichert werden.

Auswertung

Die nach beiden Methoden bei der Anodenspannung $U_A = 15$ kV aufgenommenen Spektren der Röntgenröhre mit Kupfer-Anode werden in derselben Grafik dargestellt (vgl. Messbeispiel in Fig. 7.11)⁶.

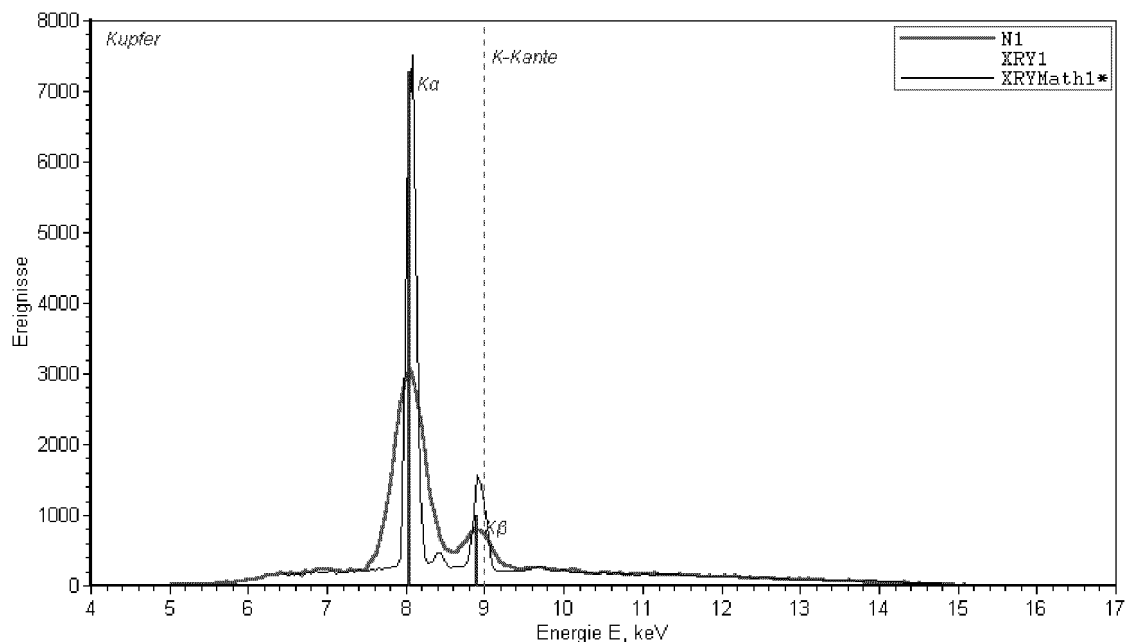


Fig. 7.11: Direkter Vergleich eines mit dem Halbleiterdetektor (*N1*, fette Linie) und eines mit der Bragg-Anordnung aufgenommenen Spektrums: Röntgenröhre mit Kupfer-Anode, Röhren-Hochspannung $U_A = 15$ kV, Emissionsströme $I = 0,5$ mA (Bragg-Anordnung) und $I = 0,1$ mA (Halbleiterdetektor). $XRYMath1 = 2,7 \cdot XRY1$, das Originalspektrum *XRY1* ist zur Übersichtlichkeit nicht eingeblendet. Die kleinen Peaks bei 8,4 keV und 9,6 keV sind Wolfram-*L*-Linien. Die vertikalen Balken entsprechen Tabellenwerten für die *K*-Serie von Kupfer aus der interaktiven Mendelejew-Tabelle.

⁶ Um die beiden aufgenommenen Spektren direkt vergleichen zu können, wird in *VKA Lab* zu dem „Halbleiterdetektor“-Spektrum das nach der Drehkristallmethode aufgenommene Spektrum geladen. Dafür wird im Fenster *Öffnen* (F3) der Dateityp *Röntgenerät Import (*.xry)* ausgewählt, um die mit dem Programm „Röntgenerät“ aufgenommenen Spektren einzublenden.

Beide Spektren in der Fig. 7.11 weisen zwei Hauptmaxima auf, die den $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien von Kupfer entsprechen, wie es mit dem interaktiven Periodensystem der Elemente leicht zu prüfen ist. Da die Drehkristallmethode eine bessere Energieauflösung in diesem Energiebereich liefert, sind die $K\alpha$ - und $K\beta$ -Peaks in XRYMath1 schmäler und höher. Eine leichte Verschiebung dieser Peaks gegen die Tabellenwerte ist auf eine nicht ideale Nullpunkteinstellung des Goniometers zurückzuführen. Der Verlauf des Bremsstrahlungskontinuums ist in beiden Spektren gleich, mit dem höchsten Energiewert $E_{max} = 15$ keV.

Im allgemeinen Fall haben die beiden Spektren unterschiedliche Höhen. Zum Skalieren der Spektren zueinander kann eines von ihnen mit einem Koeffizienten multipliziert werden, der aus dem Amplitudenverhältnis der Bremsstrahlungskontinua beider Spektren errechnet werden kann. In dem in Fig. 7.11 dargestellten Messbeispiel wurden die Höhen beider Spektren bei $E \approx 11$ keV gemessen (durch Ablesen der Kursorkoordinaten in der Statuszeile). Es ergab sich der Koeffizient $k \approx 2,7$ für XRY1. Danach wurde mit dem Spektrum-Rechner das abgeleitete Spektrum XRYMath1 berechnet: $XRYMath1 = 2,7 \cdot XRY1$.

Das Bragg-Spektrum (XRYMath1 in Fig. 7.11) weist einen kleinen Peak bei $E = 8,4$ keV auf. Der Peak ist die $L\alpha$ -Linie von Wolfram und entsteht, weil die Anode der Röntgenröhre eine kleine Menge von aufgedampften Wolfram aus der Heizwendel auf ihrer Oberfläche hat. Im Spektrum des Halbleiterdetektors (N1 in Fig. 7.11) ist dieser Peak wegen der schlechteren Auflösung nicht direkt sichtbar.

Hier stellt sich die Frage, ob man die Anwesenheit dieses Peaks auch allein aus dem Spektrum N1 ableiten kann. Wird versucht, das Spektrum mit zwei Gauss-Kurven für die Kupfer- $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien anzufitten, stellt sich heraus, dass der Fit im Bereich zwischen den Linien merklich unter dem experimentellen Spektrum liegt und dass der Wert für das elektronischen Rauschen mit $\sigma_{el} = 0,19$ keV über dem aus den Detektorspezifikationen erwarteten $\sigma_{el} = 0,16 \div 0,17$ keV liegt (vgl. Abschnitte 5.6 und 6.4.1). So liegt der Gedanke nahe, dass in diesem Spektrum ein kleinerer Peak zwischen den $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien von Kupfer liegt. Wenn das Spektrum N1 im Bereich von 7 keV bis 11 keV mit vier Gauss-Funktionen angefitet wird, dann ist die Übereinstimmung des Fits mit dem experimentellen Spektrum gut und der Wert des elektronischen Rauschens $\sigma_{el} = 0,17$ keV, wie aus den Detektorspezi-

fikationen erwartet wurde. Es lässt sich leicht mit dem interaktiven Periodensystem der Elemente prüfen, dass die bei $E=8,35$ keV und $9,7$ keV gefundenen Peaks die $L\alpha$ - und $L\beta$ -Linien von Wolfram sind (Fig. 7.12). Die Startparameter der Peakpositionen waren im Messbeispiel wie folgt gewählt: beide Kupfer-Peaks bei ca. 8 keV und $8,9$ keV und die zusätzlichen Peaks bei $8,6$ keV und 10 keV.

Eine ähnliche Methode der Spektrumentfaltung wird in modernen XRF-Analysatoren (XRF = X-Ray Fluorescence = Röntgenfluoreszenz) benutzt zur Identifizierung und quantitativen Erfassung kleiner Mengen in einer Probe vorhandener chemischer Elemente an Hand der Röntgenfluoreszenz-Spektren (vgl. auch Experimente aus den Abschnitten 7.5 und 9.2). Allerdings, ist dieses Verfahren in wissenschaftlichen Geräten automatisiert, und es wird nach allen (oder allen erwarteten) Elementen im untersuchten Energiebereich gesucht.

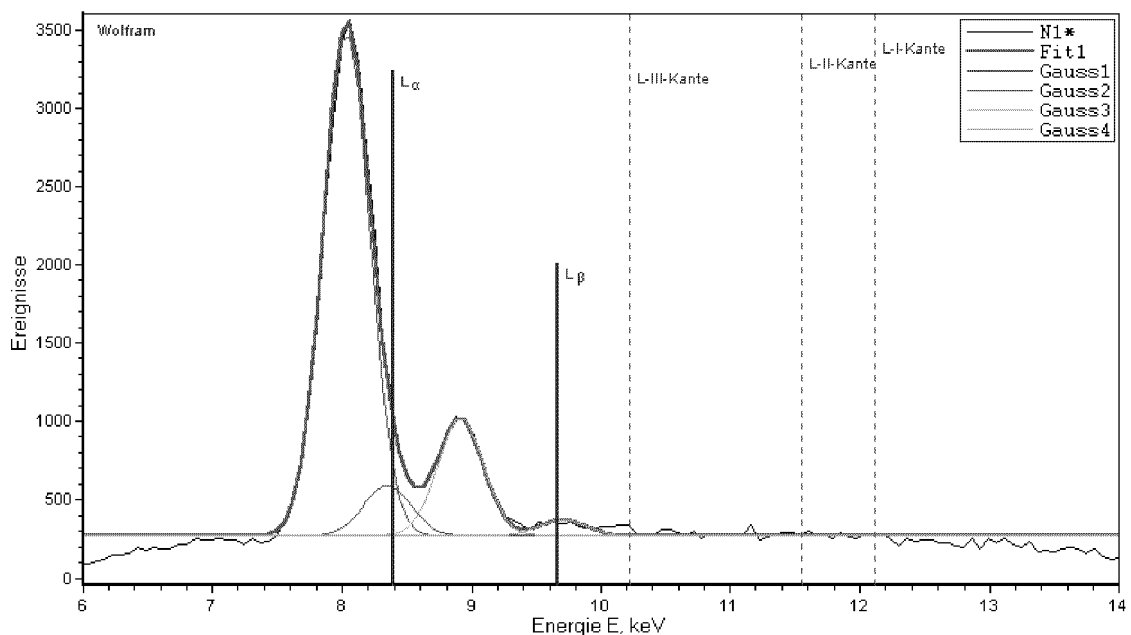


Fig. 7.12: Der Fit des Halbleiterdetektor-Spektrums mit vier Gauss-Kurven weist die $L\alpha$ - und $L\beta$ -Linien von Wolfram auf (näheres siehe Text).

Kommentar

Für dieses Experiment wurde eine Röntgenröhre mit Kupfer-Anode gewählt, weil es damit einfacher ist, die intrinsischen Unterschiede im Aussehen der nach beiden Methoden gemessenen Spektren zu eliminieren und eine gute Übereinstimmung der Spektren zu bekommen. Diese unterschiedlichen Merkmale sind die Überlagerung

der Beugungsordnungen bei der Drehkristallmethode und die charakteristischen Linien des Gehäusematerials beim Halbleiterdetektor. Der Einfluss dieser spezifischen Eigenschaften der Spektren wird dadurch verkleinert, dass die Anodenspannung der Röntgenröhre relativ niedrig gehalten wird. Bei einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode könnte dies aber zum Wegfall der charakteristischen Strahlung der Anode führen, da diese mit einer Spannung weniger als 20 kV nicht angeregt wird.

Folglich wurde die Hochspannung der Röntgenröhre gleich 15 kV gewählt: damit findet noch keine Überlagerung der 1. und 2. Beugungsordnungen im Bereich der Kupfer *K*-Linien im Bragg-Spektrum statt, und die Energie des Bremsstrahlungskontinuums ist noch nicht ausreichend, um die charakteristischen Linien des Gehäusematerials im Halbleiterdetektor nennenswert anzuregen.

Die Zählrate im Halbleiterdetektor soll nicht weit von derjenigen abweichen, mit der die Energiekalibrierung bestimmt war, um merkliche zählratebedingte Verschiebungen der Linien (vgl. Abschnitt 5.7) zu vermeiden. Als Richtwerte dafür können 100 bis 300 Ereignisse/s angegeben werden.

Es sollte bei der Auswahl der Einstellungen von *VKA Lab* (Vorlage) berücksichtigt werden, dass eine Erhöhung der Kanalbreite die Aufnahmezeit verkürzt, die fürs Erreichen einer bestimmten statistischen Genauigkeit nötig ist, aber gleichzeitig die Auflösung verschlechtert. Am geeinigsten ist eine Vorlage, die für die Messungen mit einer Kanalbreite der Größenordnung 0,1 keV gemacht ist (das als Messbeispiel gezeigte Spektrum wurde mit der Kanalbreite von 0,06 keV gemessen).

7.4.2 Untersuchung des Energiespektrums einer Röntgenröhre in Abhängigkeit von Hochspannung, Emissionsstrom und Anodenmaterial

Ziele des Experimentes

- Demonstration der hochenergetischen Grenze des Bremsstrahlungskontinuums.
- Untersuchung der Abhängigkeit des emittierten Röntgenspektrums von der Energie der anregenden Elektronen.
- Untersuchung der Abhängigkeit des emittierten Röntgenspektrums vom Emissionsstrom.
- Untersuchung der Abhängigkeit des emittierten Röntgenspektrums vom Material der Anode.

Grundlagen

In diesem Experiment werden die wichtigsten Merkmale des Spektrums einer Hochvakuum-Röntgenröhre untersucht: das Bremsstrahlungskontinuum und das charakteristische Spektrum.

In der Röntgenröhre werden die aus der geheizten Kathode emittierten Elektronen zu der sich auf hohem positiven Potenzial befindenden Anode beschleunigt. Bei der Wechselwirkung von diesen hochenergetischen Elektronen mit den Atomen des Anodenmaterials entsteht Röntgenstrahlung in Form eines Kontinuums mit überlagerten Emissionslinien.

Nach der klassischen Strahlungstheorie sollte das *Kontinuum*, das beim Abbremsen der an der Anode ankommenden Elektronen entsteht, beliebig hohe Frequenzen (Energien) beinhalten. Die in diesem Experiment aufgenommenen Spektren weisen aber eine hochenergetische Grenze (E_{max}) auf, die von der Hochspannung U_A an der Röntgenröhre abhängt (Duane-Huntsches Verschiebungsgesetz). Dieses experimentelle Ergebnis lässt sich durch die quantenhafte Natur der elektromagnetischen Strahlung erklären. Danach gilt für $E_{max} = hf_{max}$:

$$E_{max} = e \cdot U_A,$$

und diese Energie wird nur dann ausgestrahlt, wenn ein Elektron seine ganze Energie in einem einzigen Stoß abgibt. Niedrigere Energien im Spektrum stammen von den Elektronen, die in kleineren Schritten ihre kinetische Energie abgeben.

Die integrale Intensität des Bremsstrahlungskontinuums ist mit der Formel nach Beatty [7] gegeben

$$J_{int} \approx (1,4 \cdot 10^{-9} \frac{1}{V}) \cdot I_A \cdot Z \cdot U_A^2.$$

Die Strahlungsstärke J_{int} ist hier in Watt, der Anodenstrom I_A in Ampere, die Hochspannung an der Röntgenröhre U_A in Volt angegeben, Z ist die Elementordnungszahl des Anodenmaterials.

Die Abhängigkeit $J_{int} \sim I_A$ kann einfach experimentell geprüft werden, die Zusammenhänge $J_{int} \sim U_A^2$ und $J_{int} \sim Z$ dagegen lassen sich leider nicht mit den für die Schule zugänglichen Experimentieranordnungen bestätigen. Das hängt damit zusammen, dass J_{int} für alle Energien, über den vollen Raumwinkel und *ohne* Absorption⁷ in der Glaswand der Röntgenröhre zu integrieren ist. Da die Stromänderung allein nicht die spektrale Verteilung beeinflusst, sind diese Faktoren für die dabei entstehende Änderung der integralen Intensität ohne Wirkung.

Ein bestimmter Teil der hochenergetischen Elektronen, die in einer Röntgenröhre zur Anode beschleunigt werden, schlägt Elektronen aus den inneren Schalen der Targetatome heraus. Das dabei ionisierte Atom hat dann eine Vakanz (Elektronenloch) in einer zuvor abgeschlossenen Unterschale. Diese Elektronenlöcher können mit Elektronen aus anderen schwächer durch den Atomkern gebundenen Schalen des Atoms aufgefüllt werden: z.B. kann die *K*-Schale dadurch geschlossen werden, dass ein Elektron aus der *L*-Schale dahin übergeht. Ein solcher Übergang ist mit der Emission eines Photons verbunden. Die dabei entstehende Strahlung des Targetatoms weist nur bestimmte diskrete Photonenenergien auf und ist für das Targetelement charakteristisch. Sie wird als *charakteristische Strahlung* bezeichnet.

Im Gegensatz zum Bremsstrahlungskontinuum werden die charakteristischen Linien des Anodenmaterials erst ab einer bestimmten Energie der ankommenden Elektronen angeregt. Es ist die Ionisationsenergie der *K*-Schale (bzw. *L*-, *M*- usw. Schalen) des Elements der Anode, als *K*-Absorptionskante bezeichnet. Für Molybdän

⁷ Wie stark die Absorption in der Glaswand die spektrale Verteilung der Bremsstrahlung beeinflusst, kann aus der Fig. 3.5 vom Abschnitt 3.1.2 entnommen werden.

beträgt diese Energie 19,98 keV: das Spektrum einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode weist bei den Spannungen unter 20 kV *ausschließlich* das Bremsstrahlungskontinuum auf.

Benötigte Geräte

- Röntengerät (LD-Kat.-Nr. 554811) mit Molybdän-Röntgenröhre (LD-Kat.-Nr. 55482)
- Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen mit Abschwächerblende (LD-Kat.-Nr. 559938)
- PC mit Windows 95/./XP und einer Soundkarte
- Software: *VKA Lab*

Aufbau

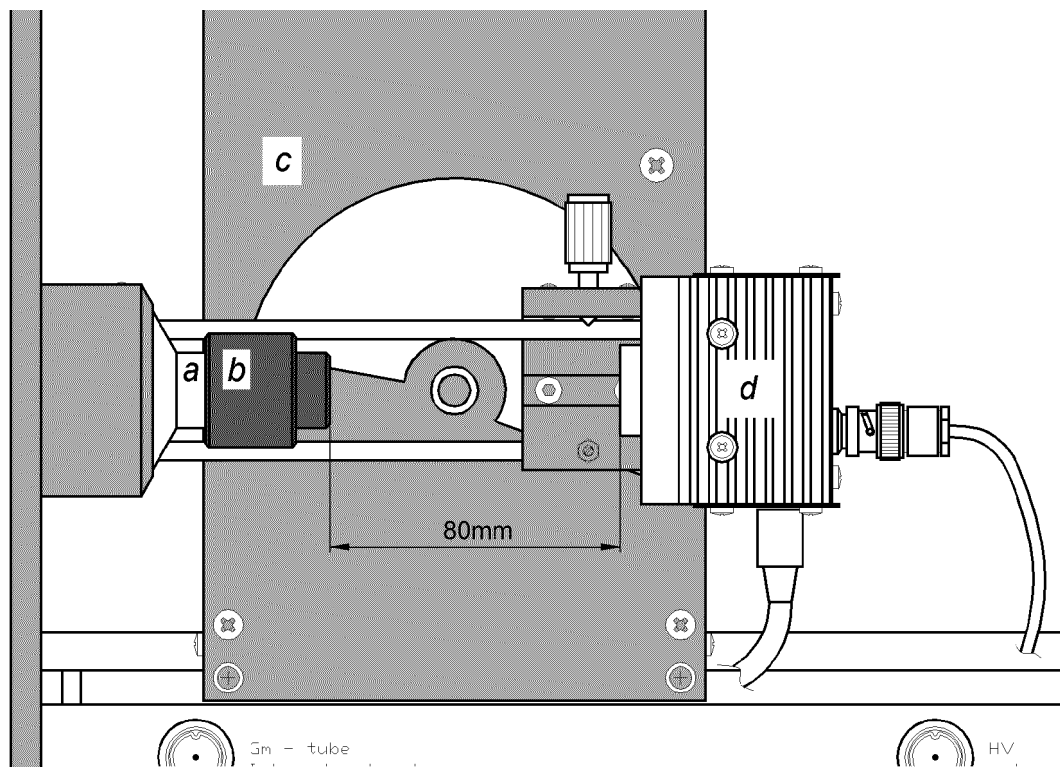


Fig. 7.13: Aufbau des Experimentes: *a* – Kollimator, *b* – Abschwächerblende, *c* – Goniometer, *d* – Detektor.

Nach Ausbau des Targethalters und des Sensorhalters mit dem Geiger-Müller-Zählrohr wird der Sensorhalter mit dem Halbleiterdetektor auf dem Goniometer montiert und das Versorgungskabel und das Ausgangskabel an den Halbleiterdetektor angeschlossen. Weiterhin wird die Abschwächerblende auf den Kollimator gesetzt, der Sensorwinkel $\theta = 0^\circ$ (siehe Fig. 7.13) am Röntgengerät eingestellt und das Netzgerät des Detektors ans Netz angeschlossen. Nach ca. 1 Minute ist der Detektor betriebsbereit, die Leuchtdiode leuchtet „grün“.

Durchführung

A. Variation der Anodenspannung U_A

Nach Starten von *VKA Lab* wird eine vorbereitete Vorlage geladen, die die folgenden Merkmale hat: die Kanalbreite ist ungefähr auf 0,15 keV eingestellt, die höchste messbare Energie ist ungefähr 50 keV, die Energiekalibrierung ist eingegeben, die Energie-Darstellung ist gewählt, die Messdauer beträgt 300 s.

Am Röntgengerät werden die Röhren-Hochspannung $U_A = 35$ kV und der Emissionsstrom $I = 0,25$ mA eingestellt. Die Röhren-Hochspannung wird am Röntgengerät eingeschaltet und die Messung in *VKA Lab* gestartet (F9). Bei der ersten Messung ($U_A = 35$ kV) muss eventuell der Sensorwinkel (oder der Emissionsstrom) nachgestellt werden, so dass die in der Statuszeile angezeigte Zählrate ungefähr 500 Ereignisse/s beträgt. Nach der Messung mit $U_A = 35$ kV werden die Aufnahmen für die Anodenspannungen $U_A = 30$ kV, 25 kV, 20 kV und 15 kV gemacht. Danach wird das Spektrum unter einem passenden Namen gespeichert.

B. Variation des Emissionsstroms I_A

In *VKA Lab* wird das Menüpunkt **Datei/Neu** gewählt, danach wird die Vorlage geladen (gleiche wie in Punkt A).

Am Röntgengerät werden die Röhren-Hochspannung $U_A = 25$ kV und der Emissionsstrom $I = 1,0$ mA eingestellt. Die Röhren-Hochspannung wird am Röntgengerät eingeschaltet und die Messung in *VKA Lab* gestartet (F9). Bei der ersten Messung ($I_A = 1,0$ mA) muss eventuell der Sensorwinkel nachgestellt werden, so dass die in der Statuszeile angezeigte Zählrate ungefähr 300 Ereignisse/s beträgt. Nach der Messung mit $I_A = 1,0$ mA werden die Aufnahmen für die Emissionsströme

$I_A = 0,8 \text{ mA}$, $0,6 \text{ mA}$, $0,4 \text{ mA}$ und $0,2 \text{ mA}$ gemacht. Danach wird das Spektrum unter einem passenden Namen gespeichert.

C. Variation des Anodenmaterials

In *VKA Lab* wird das Menüpunkt **Datei/Neu** gewählt, danach wird die Vorlage geladen (gleiche wie in Punkt A).

Die Abschwächerblende wird vom Kollimator entfernt, am Röntgengerät werden die Röhren-Hochspannung $U_A = 15 \text{ kV}$ und der Emissionsstrom $I = 0,1 \text{ mA}$ eingestellt. Die Röhren-Hochspannung wird am Röntgengerät eingeschaltet und die Messung in *VKA Lab* gestartet (F9). Der Sensorwinkel (oder der Emissionsstrom) muss eventuell nachgestellt werden, so dass die in der Statuszeile angezeigte Zählrate ungefähr 200 Ereignisse/s beträgt. Nach der Messung wird das Spektrum unter einem passenden Namen gespeichert.

Zum Vergleich wird das in Experiment 7.4.1 gemessene Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode genommen. Wenn das Experiment nicht durchgeführt wurde, wird dieses Spektrum wie unten beschrieben aufgenommen oder aus der Spektren-Datenbank geladen (siehe Anhang, *CuTube15kV.mca*).

Falls die Messung mit der Kupferanode durchgeführt werden soll, wird die Röntgenröhre mit Molybdän-Anode gegen die Röntgenröhre mit Kupfer-Anode getauscht⁸. Am Röntgengerät werden die Röhren-Hochspannung $U_A = 15 \text{ kV}$, der Emissionsstrom $I = 0,1 \text{ mA}$ eingestellt, die Abschwächerblende wird auf den Kollimator gesetzt. Die Röhren-Hochspannung wird am Röntgengerät eingeschaltet und die Messung in *VKA Lab* gestartet (F9). Der Sensorwinkel (oder der Emissionsstrom) muss eventuell nachgestellt werden, so dass die in der Statuszeile angezeigte Zählrate ungefähr 200 Ereignisse/s beträgt. Nach der Messung wird das Spektrum unter einem passenden Namen gespeichert.

Auswertung

A. Variation der Anodenspannung U_A

Wie aus dem in Fig. 7.14 dargestellten Messbeispiel klar zu sehen ist, fällt das Kontinuum in allen aufgenommenen Spektren bei höheren Energien auf Null ab.

⁸ Siehe die Gebrauchsanweisung zur Röntgengerät.

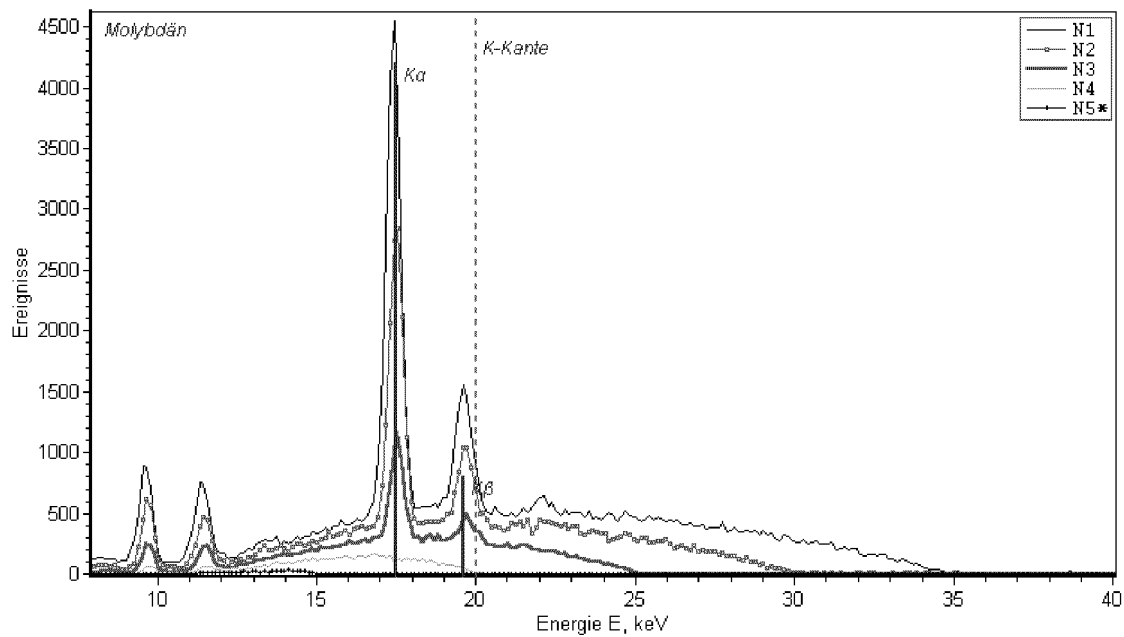



Fig. 7.14: Spektren einer Molybdän-Röntgenröhre bei unterschiedlichen Anodenspannungen U_A : 35 kV (N1), 30 kV (N2), 25 kV (N3), 20 kV (N4), 15 kV (N5). Emissionsstrom $I = 0,25$ mA, Messdauer: 300 s pro Spektrum. Die hochenergetische Grenze des Bremsstrahlungskontinuums liegt jeweils bei $E_{max} = e \cdot U_A$. Die Peaks bei 17,5 keV und 19,7 keV sind die $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien von Molybdän, diese charakteristischen Linien werden nur bei $U_A > 20$ kV angeregt. Vertikale Marker zeigen die Literaturwerte für die charakteristische Strahlung von Molybdän. Die Peaks bei 9,7 keV und 11,4 keV sind die $L\alpha$ - und $L\beta$ -Linien von Gold aus dem Detektor-Gehäuse.

Der Wert für E_{max} wird an der X-Achse abgelesen. Offensichtlich stimmt er mit der Anodenspannung der Röntgenröhre überein, wie es aus den quantenmechanischen Vorstellungen erwartet wurde.

Die Identifizierung der charakteristischen Molybdän-Strahlung kann mittels Vergleich mit den Tabellenwerten durchgeführt werden. Das interaktive Periodensystem der Elemente kann hierzu unter dem Menüpunkt **Tools/Mendelejew-Tabelle** (oder mit dem Button ) aufgerufen werden. Durch Klicken auf die Elementschaltfläche (*Mo* für Molybdän) werden die Zahlenwerte angezeigt ($K\alpha = 17,48$ keV; $K\beta = 19,61$ keV) und die Marker im gemessenen Spektrum dargestellt (Fig. 7.14). Der Vergleich mit dem Spektrum zeigt, dass die Peaks bei ungefähr 17,5 keV und 19,7 keV die $K\alpha$ - bzw. $K\beta$ -Linien von Molybdän sind.

Die Position der charakteristischen Linien ändert sich nicht mit der Änderung der Anodenspannung. Diese Linien erscheinen aber nur in Spektren, die mit einer Anodenspannung $U_A > 20$ kV aufgenommen sind, weil die Ionisationsenergie der K -Schale von Molybdän bei ungefähr 20 keV liegt.

Das dargestellte Messbeispiel zeigt, dass die Intensität der Bremsstrahlung mit steigender Röhrenspannung wächst. Die Überprüfung der theoretischen Abhängigkeit $J_{int} \sim U_A^2$ ist hier nicht möglich, da außer der Korrektur an die Detektor-Ansprechwahrscheinlichkeit auch die starke Absorption der niederenergetischen Strahlung in der Glaswand der Röntgenröhre berücksichtigt werden müsste.

B. Variation des Emissionsstroms I_A

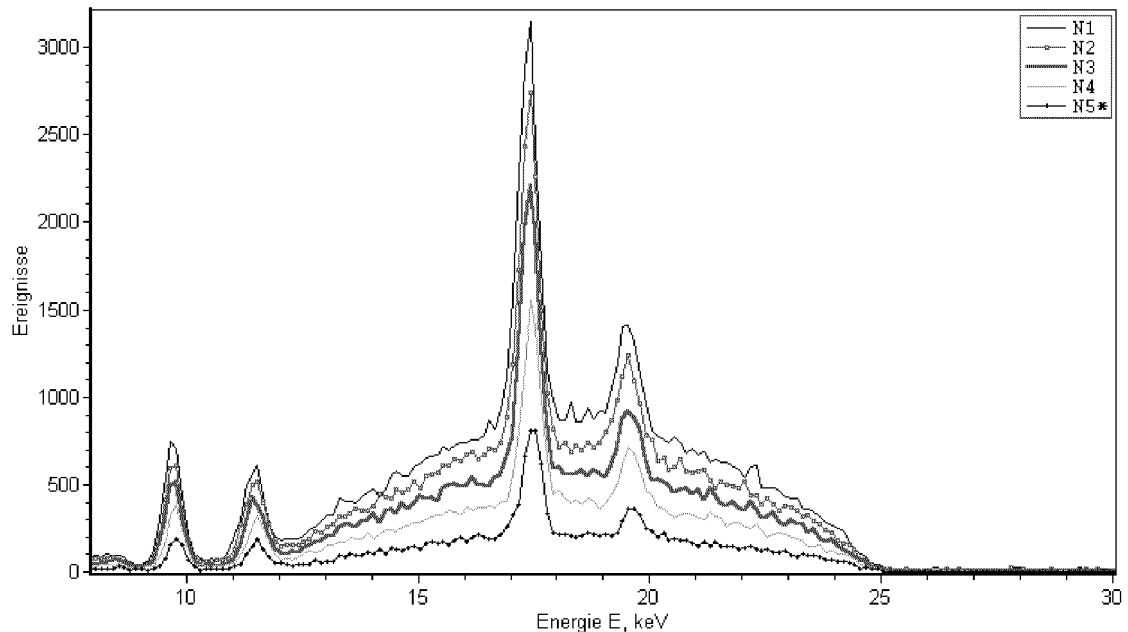



Fig. 7.15: Spektren einer Molybdän-Röntgenröhre bei unterschiedlichen Emissionsströmen I_A : 1 mA ($N1$), 0,8 mA ($N2$), 0,6 mA ($N3$), 0,4 mA ($N4$), 0,2 mA ($N5$). Anodenspannung: $U_A = 25$ kV, Messdauer: 300 s pro Spektrum. Die Peaks bei 17,5 keV und 19,7 keV sind die $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien von Molybdän, die Peaks bei 9,7 keV und 11,4 keV sind die $L\alpha$ - und $L\beta$ -Linien von Gold aus dem Detektor-Gehäuse.

Ein Messbeispiel zur Abhängigkeit des Röntgenspektrums vom Emissionsstrom ist in Fig. 7.15 dargestellt. Wie aus der Fig. 7.15 zu ersehen ist, wächst die Intensität der Strahlung mit steigendem Emissionsstrom, die spektrale Verteilung aber bleibt gleich.

Zur Ermittlung der funktionalen Abhängigkeit der Strahlungsintensität vom Emissionsstrom werden die integralen Intensitäten unter den $K\alpha$ -, $K\beta$ -Linien und im Kontinuum für die unterschiedlichen Stromwerte berechnet:

- das Spektrum N1 wird aktiv gesetzt (Doppelklick auf sein Symbol in der Legende);
- das Integral Υ_{Σ} von 12 keV bis 25 keV wird berechnet (durch Anklicken des Buttons  und anschließend des Bereichs von 25 keV bis 12 keV⁹);
- der Zahlenwert wird um die Totzeit des Detektors korrigiert:

$$\Upsilon'_{\Sigma} = \frac{\text{Messzeit}}{\text{Messzeit} - \text{Totzeit}} \cdot \Upsilon_{\Sigma}.$$

Die Messzeit und die Totzeit sind im Fenster *Spektrum Einstellungen* angegeben, das durch Klicken mit der rechten Maustaste auf die Legende aufgerufen wird;

- ähnlich werden die Integrale unter den $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien von Molybdän berechnet und ihre Werte auf die Totzeit korrigiert;
- der Wert für das Integral im Kontinuum ergibt sich als

$$\Upsilon'_{\text{Kontinuum}} = \Upsilon'_{\Sigma} - \Upsilon'_{K\alpha} - \Upsilon'_{K\beta},$$

die Striche stehen für die totzeit-korrigierten Integrale;

- ebenso werden die Integrale für die anderen Stromwerte berechnet. Anschließend werden sie in einer Tabelle zusammengefasst (Tab. 7.6) und grafisch dargestellt (Fig. 7.16).

Wie aus Fig. 7.16 ersichtlich ist, stimmt die experimentelle Abhängigkeit der Intensität der Bremsstrahlung und der charakteristischen Linien mit der theoretisch erwarteten Proportionalität $J \sim I_A$ überein.

⁹ Der Bereich sollte „von oben nach unten“ gewählt werden, weil VKA Lab bei der Integralberechnung den *ersten* Punkt zum Definieren der Nullposition in Y-Richtung benutzt. Als untere Grenze wird 12 keV gewählt, um den Einfluss der Fluoreszenzlinien des Detektormaterials (Gold) zu eliminieren.

Tab. 7.6: Intensität der registrierten Röntgenbremsstrahlung ($\Upsilon'_{Kontinuum}$) und der charakteristischen Linien ($\Upsilon'_{K\alpha}$ und $\Upsilon'_{K\beta}$) in Abhängigkeit vom Emissionsstrom I_A .

I_A , mA	$\Upsilon'_{Kontinuum}$, Ereignisse	$\Upsilon'_{K\alpha}$, Ereignisse	$\Upsilon'_{K\beta}$, Ereignisse
0,2	1954	323	82
0,4	3785	594	182
0,6	5570	935	235
0,8	7245	1226	324
1,0	9067	1446	367

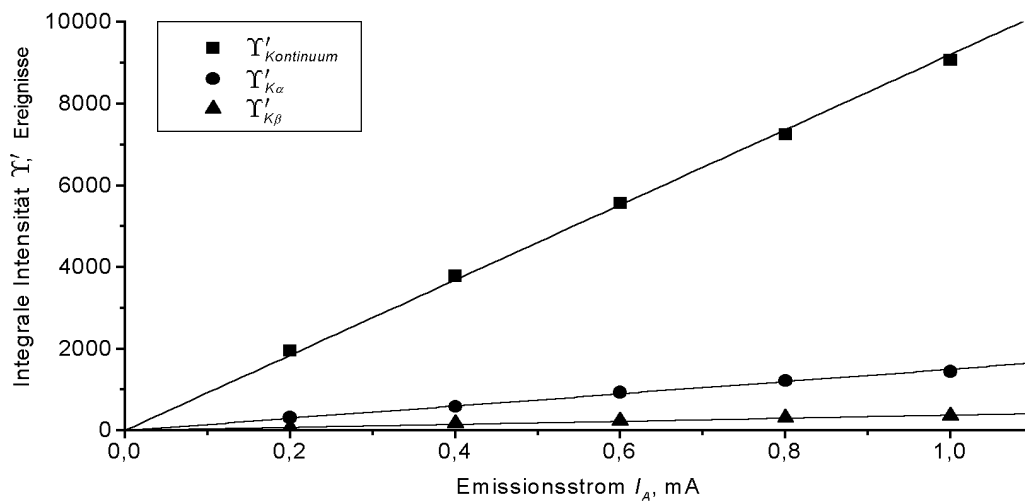


Fig. 7.16: Intensität der Röntgenstrahlung in Abhängigkeit vom Emissionsstrom für das Bremspektrum und die charakteristischen Linien von Molybdän. Die eingezeichneten Geraden sind Ursprungsgeraden.

C. Variation des Anodenmaterials

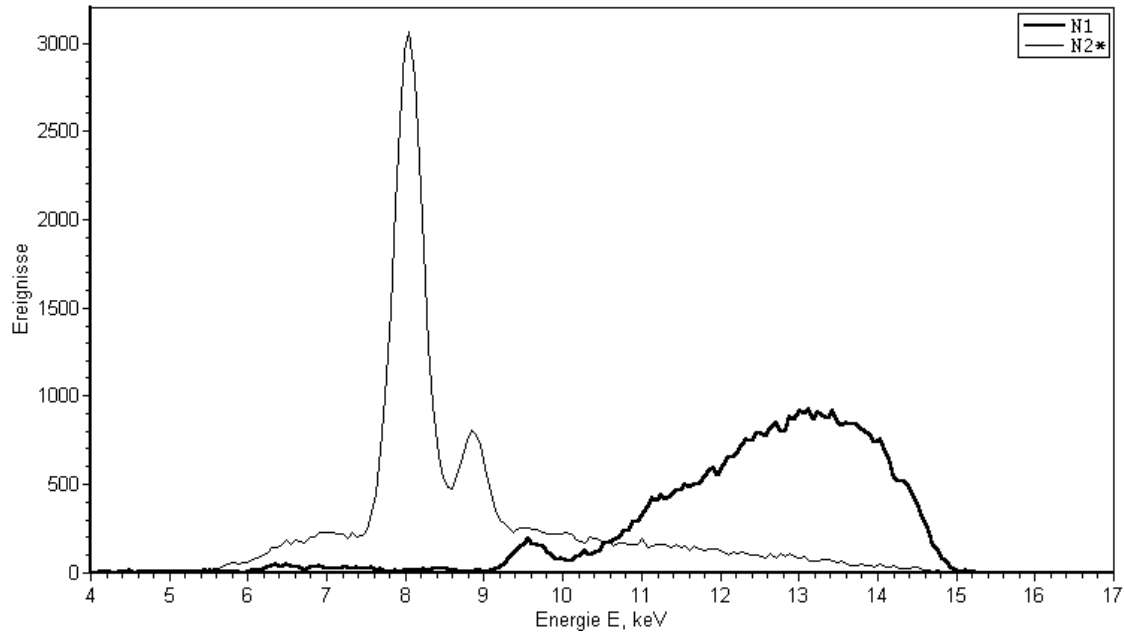


Fig. 7.17: Spektrum einer Molybdän-Röntgenröhre ($N1$) und einer Kupfer-Röntgenröhre ($N2$) bei der Anodenspannung $U_A = 15$ kV. Messdauer: 300 s pro Spektrum. Die charakteristischen Linien sind bei $U_A = 15$ kV nur im Spektrum der Kupfer-Röhre präsent. Die maximale Energie $E_{max} = 15$ keV ist für beide Spektren gleich. Die $L\alpha$ - und $L\beta$ -Linien von Gold aus dem Detektor-Gehäuse (bei 9,7 keV bzw. 11,4 keV) werden bei $U_A = 15$ keV nur wenig angeregt.

Ein Messbeispiel zur Abhängigkeit des Röntgenspektrums von der Elementordnungsnummer des Anodenmaterials ist in Fig. 7.17 dargestellt. Die Anodenspannung $U_A = 15$ keV wurde für die beiden Röhren gleich gehalten.

Aus Fig. 7.17 folgt, dass die höchste Energie des Bremsstrahlungskontinuums E_{max} , wie theoretisch zu erwarten war, ausschließlich von der Anodenspannung U_A abhängt mit $E_{max} = e \cdot U_A = 15$ keV und nicht vom Material der Anode. Die charakteristische Strahlung dagegen wird vom Anodenmaterial bestimmt: das Spektrum der Kupfer-Röhre weist die charakteristischen Linien bei 8,1 keV und 8,9 keV auf, während im Spektrum der Molybdän-Röhre wegen $U_A < 20$ keV nur die Bremsstrahlung präsent ist.

Noch ein merklicher Unterschied zwischen den beiden Spektren aus Fig. 7.17 ist die Form des Kontinuums: im Spektrum der Röntgenröhre mit Kupfer-Anode kommen wesentlich kleinere Energien vor. Diese Tatsache ist aber nicht auf die

unterschiedlichen Anodenmaterialien zurückzuführen, sondern auf die unterschiedlichen Austrittsfensterdicken der eingesetzten Röntgenröhren (siehe auch Fig. 3.5). Die Strahlung kommt aus der Kupfer-Röhre durch ein Glasfenster mit 0,2 mm Dicke und bei der Molybdän-Röhre durch eine 2 mm dicke Glaswand.

Kommentar

Es wurde die Röntgenröhre mit Molybdän-Anode für die beiden ersten Experimente ausgewählt, weil sie eine größere Intensität des Bremsstrahlungskontinuums im Vergleich zur Röntgenröhre mit der Kupfer-Anode hat (vgl. Abschnitt 3.1.2). Außerdem fallen bei der Reduzierung der Hochspannung die charakteristischen K -Linien von Molybdän schon bei der Energie $E < 20$ keV weg, wo das Kontinuum noch eine beträchtliche Intensität hat.

Die hier beschriebenen Experimente können auch nach der Drehkristallmethode durchgeführt werden. Allerdings ist der Zeitaufwand der Halbleiterdetektor-Aufnahme kleiner und die Interpretation eines mit dem Halbleiterdetektor aufgenommenen Spektrums einfacher: das Spektrum wird direkt mit der Energie als X-Achse präsentiert, und es ist offensichtlich, dass seine hochenergetische Grenze gleich der Anodenspannung der Röntgenröhre ist. Der Ausdruck für das Duane-Huntsches Verschiebungsgesetz ist im Fall der Energiedarstellung trivial: $\frac{1}{\lambda_{min}} \sim E_{max}$ und $E_{max} = e \cdot U_A$.

7.4.3 Untersuchung der Energieverschiebung der unelastisch gestreuten Photonen in Abhängigkeit vom Streuwinkel und vom Material des Streukörpers (Compton-Effekt)

Ziele des Experimentes

- Aufnahme der Spektren der an einem Streukörper unter verschiedenen Winkel gestreuten Röntgenstrahlung.
- Quantitative Überprüfung der theoretischen Energieabhängigkeit bei der Compton-Streuung.
- Vergleich der Energieverschiebung und der Intensitäten bei der Streuung an unterschiedlichen Materialien.

Grundlagen

Beim Durchgang durch Materie wird ein bestimmter Teil der Röntgenstrahlung gestreut. Im klassischen Wellenbild kann die Streuung wie folgt beschrieben werden. Unter dem Einfluss der elektrischen Feldkomponente der Strahlung beginnen im Atom die elastisch gebundenen Elektronen zu oszillieren und strahlen ab. Diese Abstrahlung erfolgt in einem weiten Winkelbereich, ihre Frequenz stimmt mit der Frequenz der einfallenden Welle überein. Da dabei keine Frequenzänderung geschieht, wird diese Streuung als *elastisch* bezeichnet (Rayleigh-Streuung).

Der amerikanische Physiker A.H. Compton beobachtete 1923 eine Verminderung der Frequenz der Strahlung bei der Streuung. Dieses Ergebnis kann nicht mit Hilfe der klassischen Physik verstanden werden — zur theoretischen Erklärung der *unelastischen* Streuung muss der ganze Streuprozess aus quantenphysikalischer Sicht betrachtet werden.

Es wird angenommen, dass die streuenden Elektronen frei sind, was für die äußeren Elektronenschalen bei Energien im Bereich der Röntgenstrahlen eine gute Näherung ist. Die Strahlung wird im Korpuskularbild behandelt. Somit wird der Streuprozess wie folgt beschrieben: ein Photon der Frequenz ν , also mit der Energie $E = h\nu$ und dem Impuls $h\nu/c$, trifft auf ein ruhendes freies Elektron der Masse m , das nach dem Stoß die Geschwindigkeit v hat. Das Photon wird dabei um den

Winkel ϑ gestreut und hat die Frequenz $\nu' < \nu$ ($E' < E$), das Elektron bewegt sich unter dem Winkel φ zur Richtung des einfallenden Photons (Fig. 7.18). Für diesen Stoßvorgang wird die Erhaltung von Energie und Impuls verlangt, wie beim elastischen Stoß zweier klassischer Teilchen.

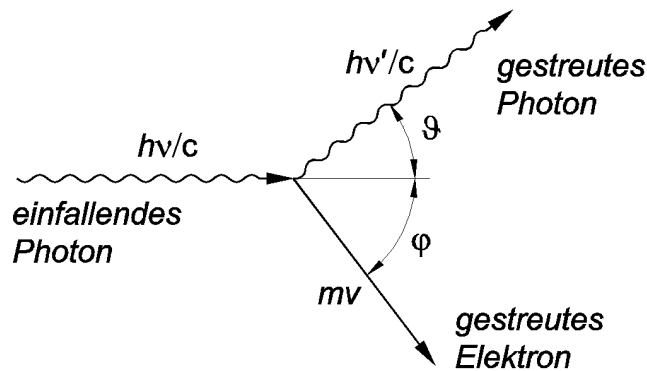


Fig. 7.18: Schematische Darstellung der Compton-Streuung.

Aus den Gleichungen für die Energie- und Impulserhaltung unter Berücksichtigung der relativistischen Ansätze wird die Abhängigkeit der Energie E' des gestreuten Photons vom Streuwinkel abgeleitet (vgl. Abschnitt 3.3.3):

$$E' = \frac{E}{1 + \frac{E}{m_e c^2} (1 - \cos \vartheta)}. \quad (7.8)$$

Dabei ist E die Energie des primären Photons, $m_e c^2$ ist die Ruheenergie des Elektrons und ϑ ist der Streuwinkel.

Es muss hier aber betont werden, dass der Compton-Effekt kein „Nachweis“ der korpuskularer Natur der Strahlung darstellt, er kann auch ohne Annahme des Photons erklärt werden, allerdings wieder nur quantenphysikalisch (vgl. z.B. [33]).

Da die Streuung an „freien“ Elektronen statt findet, hängt die Energieverschiebung nicht von Material des Streukörpers ab. Das Intensitätsverhältnis der Compton-gestreuten Strahlung zu der elastisch-gestreuten fällt allerdings mit wachsender Ordnungszahl des streuenden Elements. Die Gründe dafür liegen in der mit der Ordnungszahl wachsenden Bindungsenergie der Elektronen im Atom — sie können nicht mehr als frei angesehen werden [9].

Compton setzte in seinen Untersuchungen eine Röntgenröhre mit Molybdän-Anode als Strahlungsquelle ein. Nach dem Durchgang durch ein Zirkon-Filter wur-

de die (*primäre*) Strahlung monochromatisiert — ihr Spektrum besteht dann im wesentlichen nur aus der $K\alpha$ -Linie von Molybdän. Nach der Streuung an einem Graphit-Target wurde das Spektrum für unterschiedliche Streuwinkel mit Hilfe eines Bragg-Spektrometers und einer Ionisationskammer aufgenommen [15]. Die Streuspektren wiesen neben der elastisch-gestreuten auch Strahlung mit verminderter Frequenz auf, wobei die Frequenzänderung vom Winkel abhing. In weiteren Experimenten hat Compton auch festgestellt, dass das Material des Streukörpers keinen Einfluß auf die Frequenzverschiebung hat.

Im vorliegenden Experiment werden die Untersuchungen von A.H. Compton wiederholt und ihre Ergebnisse mit der theoretischen Abhängigkeit aus Gl. (7.8) verglichen. Zur Spektromaufnahme wird der energieauflösende Halbleiterdetektor eingesetzt.

Benötigte Geräte

- Röntgengerät (LD-Kat.-Nr. 554811) mit Molybdän-Röntgenröhre (LD-Kat.-Nr. 55482)
- Kreis-Kollimator
- Streukörper aus Graphit, Aluminium, Silber und Blei
- Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen mit Abschwächerblende (LD-Kat.-Nr. 559938)
- PC mit Windows 95/./XP und einer Soundkarte
- Software: *VKA Lab*

Aufbau

Zunächst wird der Sensorhalter mit dem Halbleiterdetektor anstelle des Sensorhalters mit dem Geiger-Müller-Zählrohr auf dem Goniometer montiert und das Versorgungskabel sowie das Ausgangskabel an den Halbleiterdetektor angeschlossen. Der Targethalter mit dem Targettisch und den Streukörpern werden für die Montage während des Experimentes bereit gehalten.

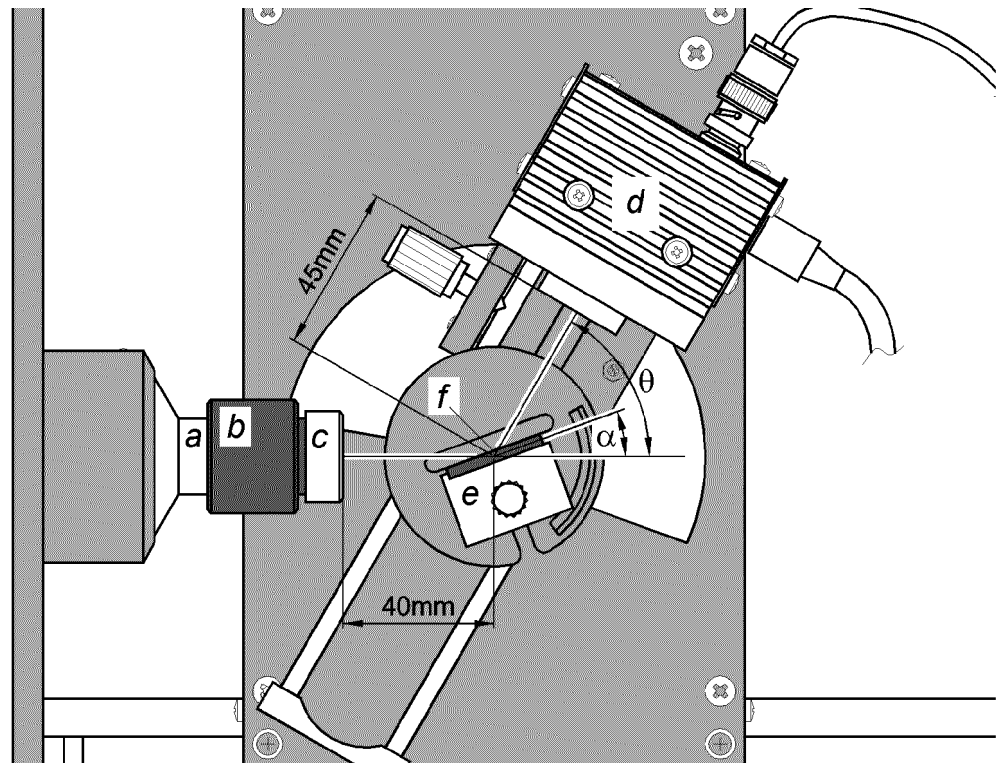


Fig. 7.19: Aufbau des Experimentes: *a* – Kreiskollimator, *b* – Abschwächerblende, *c* – Zirkon-Filter, *d* – Detektor, *e* – Targettisch, *f* – Streukörper.

In die Kollimatoraufnahme wird der Kreis-Kollimator eingebaut und darauf die Abschwächerblende und der Zirkon-Filter (aus dem Lieferumfang des Röntgengeräts) gesetzt (siehe Fig. 7.19). Am Röntgengerät wird der Sensorwinkel $\theta = 0^\circ$ eingestellt. Das Netzgerät des Detektors wird an Netz angeschlossen, und nach ca. 1 Minute ist der Detektor betriebsbereit, die Leuchtdiode leuchtet „grün“.

Durchführung

A. Aufnahme der Streuspektren für verschiedene Streuwinkel

Nach Starten von *VKA Lab* wird eine vorbereitete Vorlage geladen, die die folgenden Merkmale hat: die Kanalbreite ist auf $0,1 - 0,15$ keV eingestellt, die höchste messbare Energie ist ungefähr 35 keV, die Messdauer beträgt 120 s.

Zur Aufnahme des primären Spektrums werden am Röntgengerät die Röhren-Hochspannung $U_A = 35$ kV und der Emissionsstrom $I = 0,1$ mA eingestellt. Die Hochspannung wird am Röntgengerät eingeschaltet und die Messung in *VKA Lab* gestartet (F9). Bei der Messung muss eventuell der Sensorwinkel (oder der Emissionsstrom) nachgestellt werden, so dass die in der Statuszeile angezeigte Zählrate

ungefähr 100 Ereignisse/s beträgt.

Da die gestreute Strahlung eine viel kleinere Intensität als die primäre hat, wird anschließend zur Aufnahme der Compton-Spektren die Abschwächer-Blende vom Kollimator entfernt und der Zirkon-Filter direkt auf den Kollimator gesetzt. Außerdem wird der Targethalter mit dem Graphit-Streukörper auf das Goniometer montiert. Der Targetwinkel (Ausrichtung des Streukörpers) wird auf 20° und der Sensorwinkel auf 30° eingestellt. Am Röntgengerät wird der Emissionsstrom auf $I_A = 1$ mA eingestellt und die Hochspannung eingeschaltet. In *VKA Lab* wird ein neues Spektrum aufgenommen.

Anschließend werden bei dem konstanten Targetwinkel die Messungen für die Sensorwinkel 60° , 90° , 120° und 140° durchgeführt. Danach wird die Datei unter einem passenden Namen gespeichert.

B. Untersuchung der Abhängigkeit vom Material des Streukörpers

Nach der Auswahl des Menüpunktes **Datei/Neu** wird in *VKA Lab* die gleiche Vorlage wie in Punkt A geladen.

Der Targetwinkel wird auf 45° und der Sensorwinkel auf 140° eingestellt. Es werden die Spektren mit dem Graphit-Streukörper und anschließend mit dem Aluminium-, dem Silber- und dem Blei-Streukörper aufgenommen. Danach wird die Datei unter einem passenden Namen gespeichert.

Auswertung

A. Streuspektren für verschiedene Streuwinkel

Ein Messbeispiel für das Spektrum der primären Strahlung ist in Fig. 7.20 dargestellt. Es sind außer der $K\alpha$ -Linie von Molybdän (Hauptpeak bei $E = 17,5$ keV) auch die $Mo K\beta$ -Linie ($E = 19,6$ keV) und das Bremsstrahlungskontinuum präsent, die allerdings durch den Zirkon-Filter abgeschwächt sind.

Die weiteren kleinen Peaks sind durch die Fluoreszenz des Detektor-Gehäuses (*Ag* $L\alpha, \beta$ bei 3 keV; *Fe* $K\alpha$ bei 6,4 keV; *Au* $L\alpha$ bei 9,7 keV; *Au* $L\beta$ bei 11,4 keV und *Ag* $K\alpha$ bei 22,2 keV) und des Kollimator-Materials (*Cu* $K\alpha$ bei 8,1 keV) verursacht. Die *Au* $L\alpha$ - und die *Mo* $K\alpha$ -Linie werden zur Energiekalibrierung der ganzen Messreihe genommen.

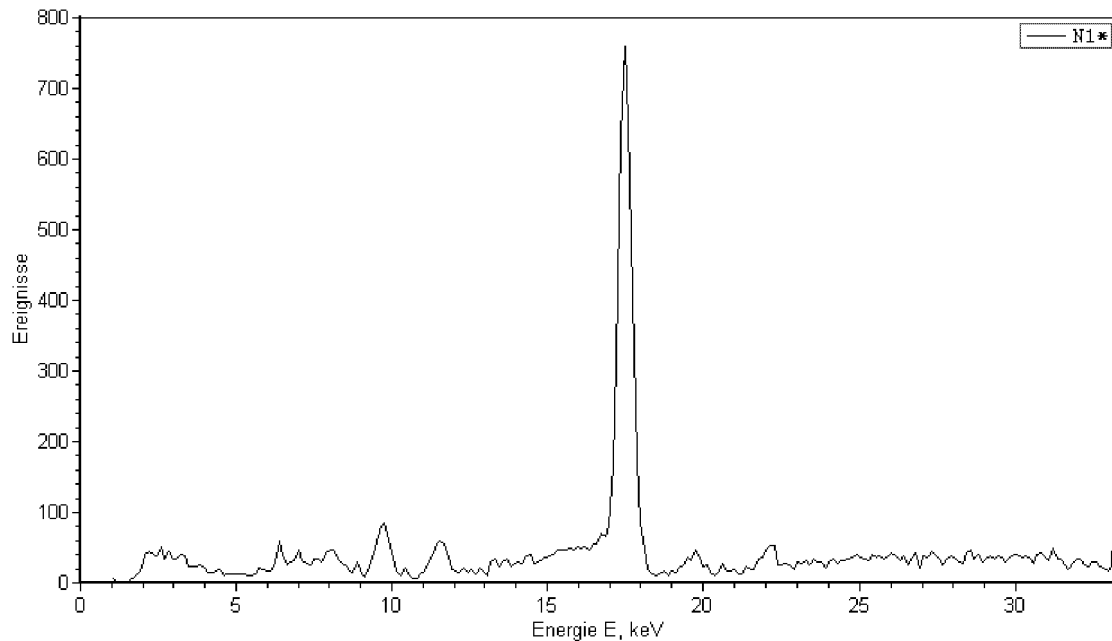



Fig. 7.20: Spektrum der primären Strahlung. Quelle: Röntgenröhre mit Molybdän-Anode, monochromatisiert mit Zirkon-Filter. Der Peak bei $E = 17,5$ keV ist die $K\alpha$ -Linie von Molybdän. Die $K\beta$ -Linie von Molybdän ($E = 19,6$ keV) ist durch den Zirkon-Filter stark abgeschwächt. Die kleinen Peaks sind durch die Röntgenfluoreszenz des Detektor-Gehäuses verursacht (siehe Text). Messdauer: 120 s.

In Fig. 7.21 ist das Messbeispiel der für verschiedene Streuwinkel aufgenommenen Spektren dargestellt. Es ist ersichtlich, dass sich die Energie der gestreuten Strahlung mit wachsendem Winkel verkleinert.

Zur Ermittlung der funktionalen Abhängigkeit werden die Positionen der Peaks vermessen:

- das zu vermessende Spektrum wird aktiv gesetzt (Doppelklick auf sein Symbol in der Legende);
- eine Gauss-Kurve wird an den Peak angefitet (durch Anklicken des Buttons  und anschließend der Peakposition und des Anpassungsbereiches folgend der Anweisungen in der Statuszeile);
- die Koordinate des Maximums der Gauss-Kurve E' wird im Feld *Kommentar* des Fensters *Spektrum Einstellungen* abgelesen (durch einen Rechtsklick auf das Symbol von Fit in der Legende aufzurufen);
- ebenso werden die Streustrahlungsenergien für die anderen Winkel ermittelt.

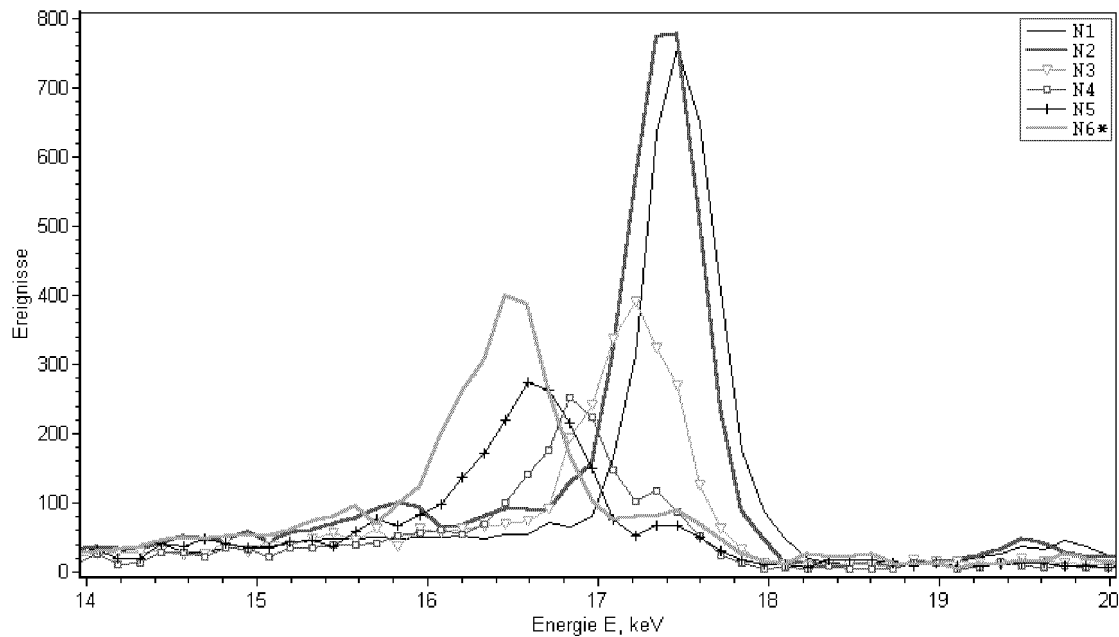


Fig. 7.21: Spektren der Primärstrahlung ($N1$) und der am Graphit-Streukörper unelastisch (Compton-) gestreuten Strahlung: $N2$ für den Streuwinkel 30° , $N3$ für 60° , $N4$ für 90° , $N5$ für 120° und $N6$ für 140° . In den Spektren $N4$, $N5$ und $N6$ ist bei $E = 17,5$ keV auch die elastisch gestreute Strahlung sichtbar. Messdauer: 120 s pro Spektrum.

Tab. 7.7: Gemessene Energien unelastisch gestreuter Photonen E'_{exper} und ihre theoretischen Werte E'_{theor} für die unterschiedlichen Streuwinkel.

Spektrum	Streuwinkel	E'_{exper} , keV	E'_{theor} , keV
$N1$	0°	17,48	17,48
$N2$	30°	17,38	17,40
$N3$	60°	17,19	17,19
$N4$	90°	16,85	16,90
$N5$	120°	16,62	16,63
$N6$	140°	16,45	16,48

Die ermittelten Werte werden in einer Tabelle zusammengefasst (Tab. 7.7 für das Messbeispiel) und in graphischer Form zum Vergleich mit der theoretischen Kurve dargestellt (Fig. 7.22). Die theoretischen Werte in der Tab. 7.7 und die theoretische Kurve in der Fig. 7.22 sind nach Gl. (7.8) berechnet.

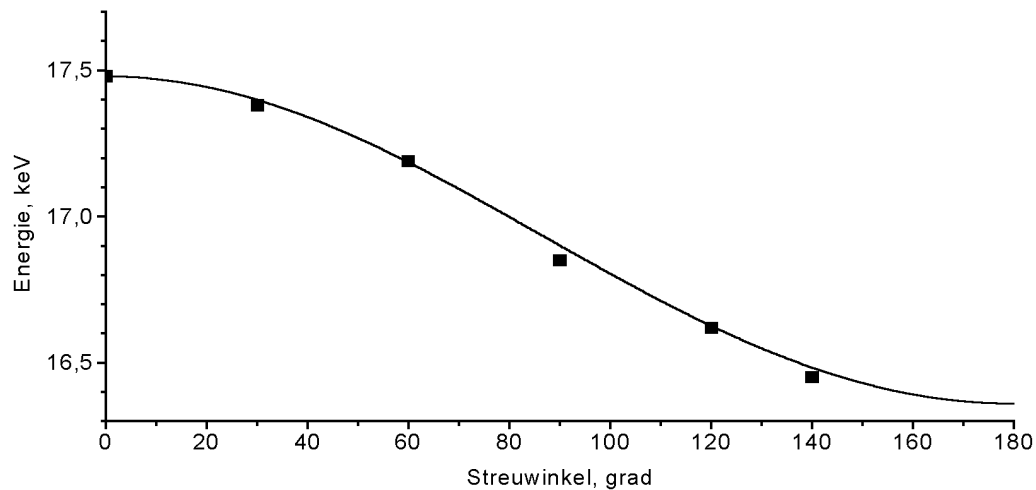


Fig. 7.22: Änderung der Energie der unelastisch-gestreuten Photonen in Abhängigkeit vom Streuwinkel. Rechtecke: experimentelle Werte, Kurve: theoretische Abhängigkeit.

Wie aus Fig. 7.22 ersichtlich ist, liegen die experimentell gemessenen Werte der Energie der Compton-gestreuten Photonen auf der theoretischen Kurve.

B. Abhängigkeit vom Material des Streukörpers

Die Spektren der Streuung von Molybdän- $K\alpha$ an Streukörpern aus unterschiedlichen Materialien sind in Fig. 7.23 dargestellt. Die Streuspektren weisen zwei Peaks auf, diese entsprechen

- der elastisch (Rayleigh-) gestreuten Strahlung bei der Energie der $K\alpha$ -Linie von Molybdän ($E = 17,48$ keV) und
- der unelastisch (Compton-) gestreuten Strahlung mit der verminderten Energie (theoretischer Wert für den Streuwinkel $\vartheta = 140^\circ$ $E'_{theor} = 16,48$ keV).

Diese beiden Peaks sind allerdings unterschiedlich stark ausgeprägt. So werden bei der Streuung an Graphit ($Z = 6$) fast alle Photonen Compton-gestreuert, bei Aluminium ($Z = 13$) wächst der Anteil der elastisch gestreuten Photonen. Bei der Streuung

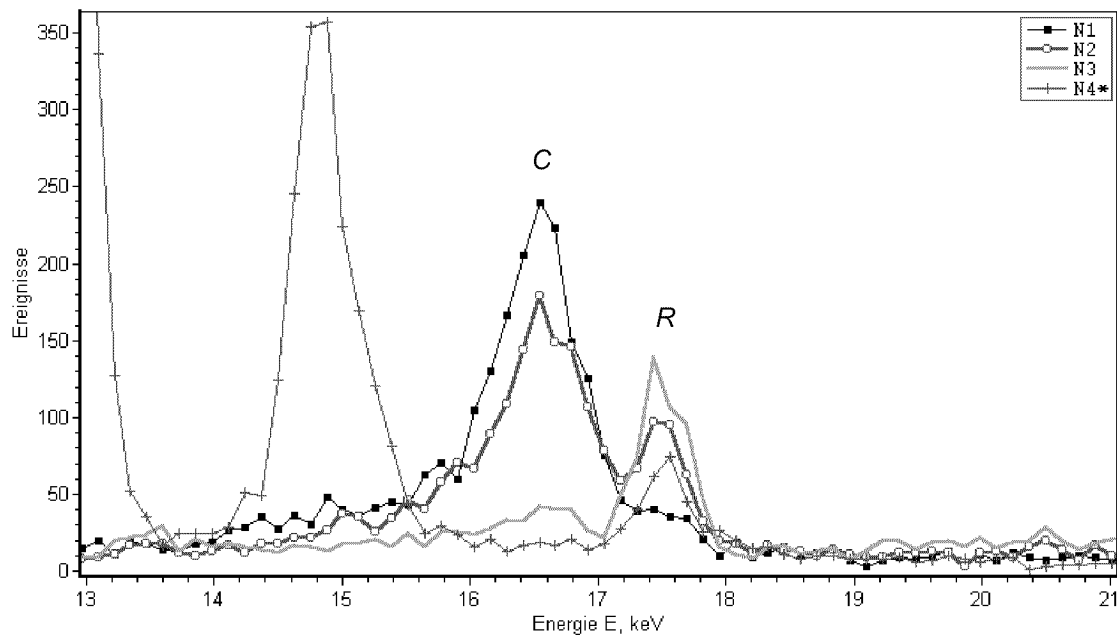


Fig. 7.23: Streuung an unterschiedlichen Materialien, Streuwinkel $\vartheta = 140^\circ$, Primärstrahlung: $Mo\ K\alpha$. R : Rayleigh-Peak ($E = 17,48\text{ keV}$). C : Compton-Peak ($E'_{theor} = 16,48\text{ keV}$). Streukörper: $N1$ – Graphit ($Z = 6$), Messdauer $T = 50\text{ s}$; $N2$ – Aluminium ($Z = 13$), $T = 300\text{ s}$; $N3$ – Silber ($Z = 47$), $T = 300\text{ s}$; $N4$ – Blei ($Z = 82$), $T = 300\text{ s}$. Im Spektrum von Blei ($N4$) ist die $L\gamma$ -Linie bei $E = 14,76\text{ keV}$ und ein Teil der $L\beta$ -Linie bei $E = 12,61\text{ keV}$ sichtbar.

an Silber ($Z = 47$) ist die Intensität des Compton-Peaks deutlich kleiner als die des Rayleigh-Peaks. Das Streuspektrum für Blei ($Z = 82$) weist *keinen* Compton-Peak auf — die $Mo\ K\alpha$ -Photonen werden an Blei fast ausschließlich elastisch gestreut.

Dieses Verhalten kann durch die Verhältnis der Energie der einfallenden Strahlung ($E_{Mo\ K\alpha} = 17,48\text{ keV}$) zur Bindungsenergie der Elektronen im Atom erklärt werden. Im Kohlenstoffatom ist die höchste Bindungsenergie der Elektronen $E_{K-Kante} = 0,3\text{ keV} \ll E_{Mo\ K\alpha}$, somit können die Elektronen als frei betrachtet werden. Im Blei-atom dagegen sind die Elektronen viel stärker an den Kern verbunden, daher nimmt die Wahrscheinlichkeit für Compton-Streuung ab.

Kommentar

Der höchste Streuwinkel, der in dieser Experimentieranordnung realisiert werden kann, beträgt aus mechanischen Gründen $\theta_{max} = 157^\circ$. Allerdings muss der Abstand vom Kollimator zum Goniometer vergrößert werden und der Sensorhalter mit dem

Detektor weiter vom Streukörper verschoben werden. Dadurch steigen die nötigen Aufnahmezeiten.

Mit der vorgeschlagenen Experimentieranordnung ist es möglich, auch den *differentiellen Wirkungsquerschnitt* der Compton-Streuung *quantitativ* zu bestimmen und mit dem theoretischen Ergebnis der Klein-Nishina Formel zu vergleichen. Dabei ist bei der Streuung an Graphit die Genauigkeit ca. 10% für die Streuwinkel $\vartheta > 90^\circ$ erreichbar. Bessere Ergebnisse sollten mit Streukörpern aus *Li* oder *LiH* erreichbar sein.

Bei der Auswahl der Streukörper muss berücksichtigt werden, dass ihre eigene Fluoreszenz möglichst wenig durch die primäre Strahlung angeregt wird. Bei Kupfer als Streukörper ist z.B. die Intensität der *Cu K α* -Linie so groß, dass die Intensität der primären Strahlung reduziert werden muss, um die zählratebedingten Verschiebungen im Spektrum zu vermeiden. Dabei wächst aber die für die Beobachtung der Streupeaks nötige Messzeit erheblich.

7.5 Experimente zur Physik der Atomhülle

7.5.1 Untersuchung der charakteristischen Spektren in Abhängigkeit von der Ordnungszahl des Elements (Moseley-Gesetz)

Ziele des Experimentes

- Demonstration der Röntgenfluoreszenz.
- Aufnahme von Röntgenfluoreszenz-Spektren mehrerer Elemente und Überprüfung des Moseley-Gesetzes für die K - und die L -Linien des charakteristischen Spektrums.
- Bestimmung der Abschirmkonstanten für die Elektronen aus den K - und L -Schalen.

Grundlagen

Beim Betrieb einer Röntgenröhre wird neben dem Bremsstrahlungskontinuum auch die charakteristische Strahlung ausgesendet (vgl. Experiment 7.4.2). Im Gegensatz zur Bremsstrahlung weist sie keine kontinuierliche Verteilung der Strahlungsstärke im Spektrum auf — ihr Spektrum setzt sich aus scharfen Linien zusammen.

Die charakteristische Strahlung entsteht, wenn die Elektronen, die in einer Röntgenröhre zur Anode beschleunigt werden, die Elektronen aus den inneren Schalen der Atome des Anodenmaterials herausschlagen. Das dabei ionisierte Atom hat dann eine Vakanz (Elektronenloch) in einer zuvor abgeschlossenen Unterschale. Diese Elektronenlöcher können mit Elektronen aus anderen schwächer durch den Atomkern gebundenen Schalen des Atoms aufgefüllt werden: z.B. kann die K -Schale dadurch geschlossen werden, dass ein Elektron aus der L -Schale dahin übergeht. Ein solcher Übergang ist mit der Emission eines Photons verbunden. Diese Strahlung weist nur bestimmte diskrete Photonenenergien auf und ist für jedes chemische Element charakteristisch.

Die Bezeichnungen der charakteristischen Röntgenlinien werden aus dem Symbol der Elektronenschale (K , L , M usw.) und einem griechischen Buchstaben zusam-

mengesetzt (α , β , γ usw.). Dabei ist die Elektronenschale gemeint, die vor dem Elektronenübergang ionisiert war. So steht die Bezeichnung $K\alpha$ -Linie für den Übergang aus der L -Schale in die K -Schale, $K\beta$ — für den Übergang aus der M -Schale in die K -Schale. Die $L\alpha$ - und $L\beta$ -Linien bezeichnen die Übergänge aus der M -Schale in die L -Schale, allerdings zwischen unterschiedlichen Unterniveaus¹⁰.

Außer der oben beschriebenen *primären* Anregung durch Elektronen in einer Röntgenröhre können die charakteristischen Linien auch bei der Bestrahlung eines Targets mit Photonen hoher Energie angeregt werden. Dabei wird die Ionisation des Targetatoms durch die Absorption eines Röntgenphotons verursacht. Dieser Prozess der *sekundären* Anregung wird auch als *Röntgenfluoreszenz* bezeichnet.

Um die Energien der charakteristischen Linien ausrechnen zu können, müssen die Energieniveaus im Atom (Bindungsenergien der Elektronenschalen) bekannt sein. Die letzteren können wasserstoffähnlich behandelt werden, indem statt der realen Kernladung Z eine effektive Kernladung $Z_{eff} = Z - \sigma_n$ mit einer Abschirmkonstanten σ_n eingesetzt wird. Der Energiezustand eines Elektrons einer inneren Schale wird dann approximativ durch eine modifizierte Bohrsche Formel mit der Hauptquantenzahl n und $Z - \sigma_n$ dargestellt:

$$E_n = -Rhc \frac{(Z - \sigma_n)^2}{n^2},$$

hierbei ist R die Rydberg-Konstante, $R = m_e e^4 / 8 \epsilon_0^2 h^3 c$. Die Hauptquantenzahl bezeichnet die Elektronenschalen: $n = 1$ für die K -Schale, $n = 2$ für die L -Schale, $n = 3$ für die M -Schale usw. Diese Formel beschreibt die Grobstruktur der Energie eines Elektrons einer inneren Schale. Die Abschirmkonstante σ_n hängt im allgemeinen Fall von n und Z ab.

Für die Frequenzen der charakteristischen Linien $\nu = (E_2 - E_1) / h$ bei den Übergängen $n_2 \rightarrow n_1$ ($n_2 > n_1$) gilt

$$\nu = cR \left[\frac{(Z - \sigma_{n_1})^2}{n_1^2} - \frac{(Z - \sigma_{n_2})^2}{n_2^2} \right].$$

Wird statt σ_{n_1} und σ_{n_2} eine einzige mittlere Abschirmkonstante $\sigma_{2,1}$ für Übergänge von n_2 nach n_1 eingeführt, lässt sich diese Formel zum *Moseleyschen Gesetz* um-

¹⁰ Näheres über die erlaubten Elektronenübergänge und die Linien-Bezeichnung siehe Abschnitt 3.1.3.

schreiben:

$$\sqrt{\frac{\nu}{\nu_R}} = (Z - \sigma_{2,1}) \sqrt{\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)}, \quad (7.9)$$

mit der Rydberg-Frequenz $\nu_R = cR$. Danach hängt die Quadratwurzel der Frequenz der charakteristischen Linien einer Serie linear von der Ordnungszahl Z ab. Umgeschrieben für die Energie der charakteristischen Linie lautet Gl. (7.9):

$$\sqrt{\frac{E}{Rhc}} = (Z - \sigma_{2,1}) \sqrt{\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}}. \quad (7.10)$$

Dabei ist der Zahlenwert von $Ry = Rhc \approx 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J} \approx 13,6 \text{ eV}$.

Für die $K\alpha$ -Linien leichterer Elemente ($Z < 30$) ist die Abschirmkonstante $\sigma_{2,1} \approx 1$ und somit

$$\sqrt{\frac{\nu}{\nu_R}} = (Z - 1) \sqrt{\frac{3}{4}}.$$

Mit wachsender Ordnungszahl wird $\sigma_{2,1}$ kleiner und für $Z \geq 55$ sogar negativ, d.h. bei diesen Z überwiegt der Einfluss der äußeren Elektronen die Abschirmung durch die inneren.

Benötigte Geräte

- Röntgengerät (LD-Kat.-Nr. 554811) mit Molybdän-Röntgenröhre (LD-Kat.-Nr. 55482) oder Kupfer-Röntgenröhre (LD-Kat.-Nr. 55485)
- Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen (LD-Kat.-Nr. 559938)
- Proben für Aufnahme der charakteristischen Spektren von *Ti*, *Cr*, *Fe*, *Co*, *Ni*, *Zn*, *Ge*, *Br*, *Sr*, *Zr*, *Mo*, *Ag*, *Sn*, *Ba*, *W*, *Au*, *Pb* (Elemente oder ihre chemischen Verbindungen)
- PC mit Windows 95/./XP und einer Soundkarte
- Software: *VKA Lab*

Aufbau

Nach Ausbau des Targethalters und des Sensorhalters mit dem Geiger-Müller-Zählrohr wird der Sensorhalter mit dem Halbleiterdetektor auf dem Goniometer montiert und das Versorgungskabel und das Ausgangskabel an den Halbleiterdetektor angeschlossen. Weiterhin wird der Targethalter mit dem Targettisch auf dem Goniometer montiert und der Kollimator in die Kollimatoraufnahme eingebaut (siehe Fig. 7.24). Am

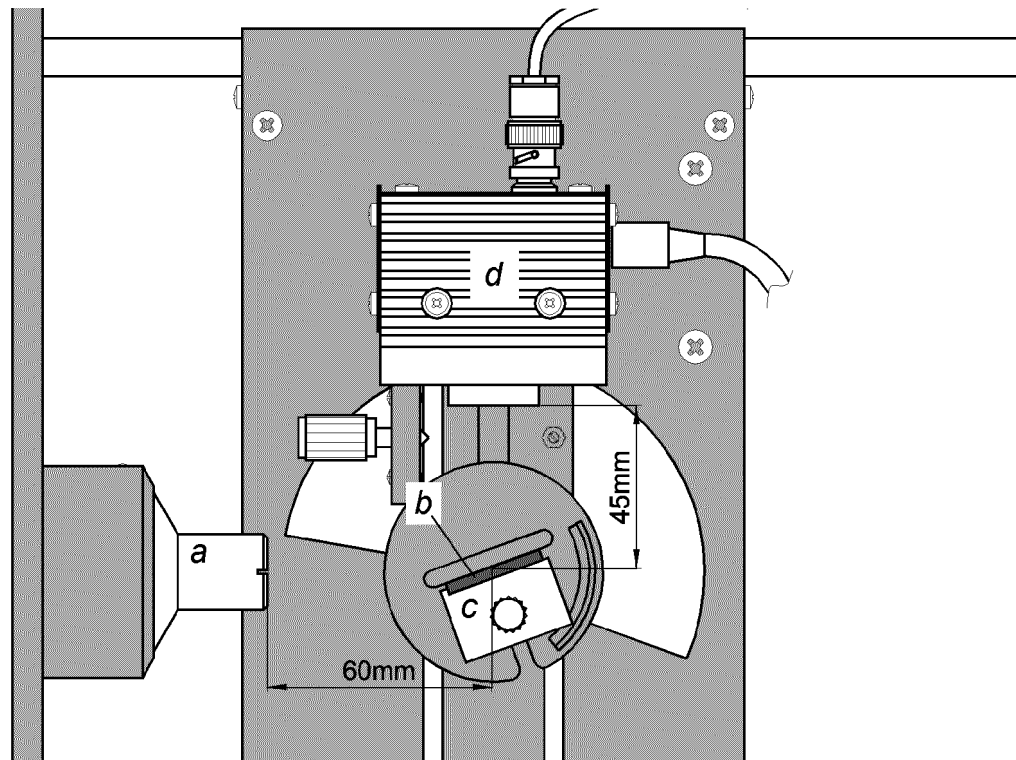


Fig. 7.24: Aufbau des Experimentes: *a* – Kollimator, *b* – Probe, *c* – Targettisch, *d* – Detektor.

Röntgengerät wird die Hochspannung $U_A = 35 \text{ kV}$, der Emissionsstrom $I_A = 1 \text{ mA}$, der Sensorwinkel $\theta = 90^\circ$ und der Targetwinkel $\alpha = 20^\circ$ eingestellt, das Netzgerät des Detektors wird ans Netz angeschlossen. Nach ca. 1 Minute ist der Detektor betriebsbereit, die Leuchtdiode leuchtet „grün“.

Durchführung

Nach Starten von *VKA Lab* wird eine vorbereitete Vorlage geladen, die die folgenden Merkmale hat: die Kanalbreite ist auf $0,05 - 0,1 \text{ keV}$ eingestellt, die höchste messbare Energie ist ungefähr 35 keV , die Energiekalibrierung ist eingegeben, die Energiedarstellung ist gewählt, die Messdauer beträgt 60 s .

Auf dem Targettisch wird die *Ti*-Probe platziert, die Hochspannung am Röntgengerät wird eingeschaltet und die Messung in *VKA Lab* gestartet. Nach der Vollendung der Aufnahme werden die Fluoreszenzspektren aller weiteren Proben nacheinander aufgenommen. Während der Aufnahmen muss evtl. der Emissionsstrom vermindert werden, so dass die in der Statuszeile angezeigte Zählrate 300 Ereignisse/s nicht überschreitet.

Auswertung

Das Messbeispiel ist in Fig. 7.25, Fig. 7.26 und Fig. 7.27 dargestellt. In den ersten zwei Grafiken sind die K -Linien, in der dritten die L -Linien zusammengefasst. Es ist ersichtlich, dass die Energie der charakteristischen Linien sowie die Aufspaltung zwischen der α - und der β -Komponenten einer Spektralserie mit wachsender Ordnungszahl zunimmt.

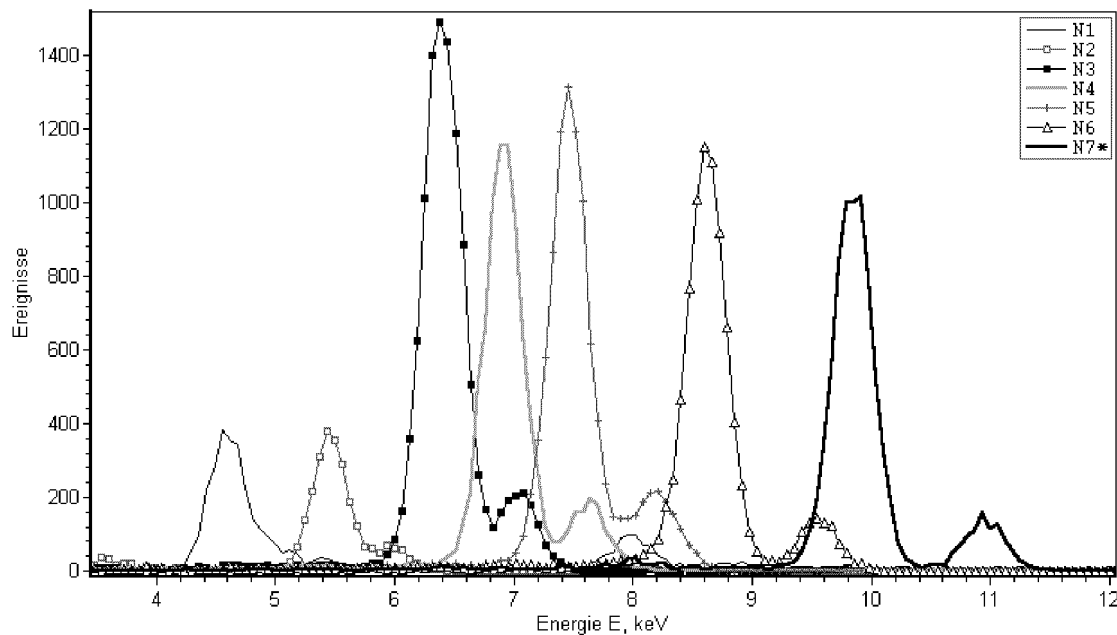



Fig. 7.25: Röntgenfluoreszenz-Spektren, K -Linien. $N1$: ${}_{22}\text{Ti}$, $N2$: ${}_{24}\text{Cr}$, $N3$: ${}_{26}\text{Fe}$, $N4$: ${}_{27}\text{Co}$, $N5$: ${}_{28}\text{Ni}$, $N6$: ${}_{30}\text{Zn}$, $N7$: ${}_{32}\text{Ge}$. Die α - und β -Komponenten im Spektrum von Titan sind wegen ihrer kleinen Aufspaltung nicht aufgelöst. Messdauer: 60 s pro Spektrum.

Die Ermittlung der Energien der charakteristischen Linien erfolgt durch Anpassung zweier Gauss-Funktionen an das Spektrum (für die α - und für die β -Komponente):

- das zu vermessende Spektrum wird aktiv gesetzt (Doppelklick auf sein Symbol in der Legende);
- zwei Gauss-Kurven werden an die Peaks angefitet (durch Anklicken des Buttons  und anschließend der Peakpositionen und des Anpassungsbereiches den Anweisungen in der Statuszeile folgend);

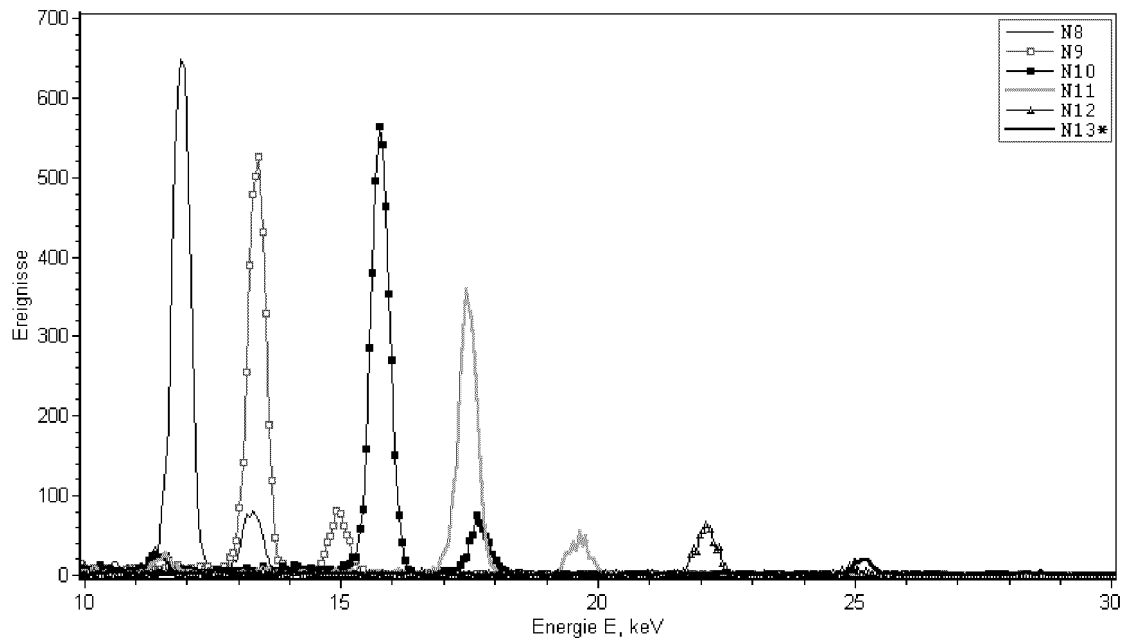


Fig. 7.26: Röntgenfluoreszenz-Spektren, *K*-Linien. N8: ^{35}Br , N9: ^{37}Rb , N10: ^{40}Zr , N11: ^{42}Mo , N12: ^{47}Ag , N13: ^{50}Sn . Messdauer: 60 s pro Spektrum.

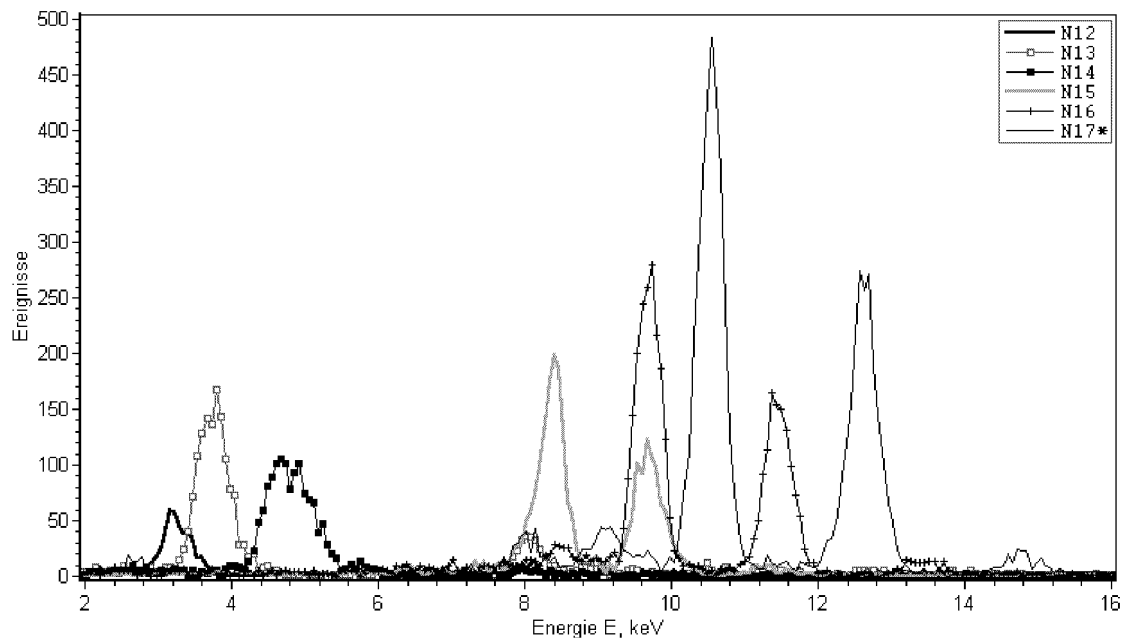


Fig. 7.27: Röntgenfluoreszenz-Spektren, *L*-Linien. N12: ^{47}Ag , N13: ^{50}Sn , N14: ^{56}Ba , N15: ^{74}W , N16: ^{79}Au , N17: ^{82}Pb . Die α - und β -Komponenten in den Spektren von Silber, Zinn und Barium sind wegen ihrer kleinen Aufspaltung nicht aufgelöst. Messdauer: 60 s pro Spektrum.

- die Koordinaten der Maxima der Gauss-Kurven μ_1 und μ_2 werden im Feld *Kommentar* des Fensters *Spektrum Einstellungen* abgelesen (durch einen Rechtsklick auf das Symbol von Fit in der Legende aufzurufen);
- ebenso werden die Energien für die weiteren Spektren ermittelt.

Die ermittelten Werte werden in Tabellen zusammengefasst (vgl. Tab. 7.8 für die K -Linien und Tab. 7.9 für die L -Linien). Für jede Linie wird der Ausdruck $\sqrt{E/Rhc}$ gebildet und die Abschirmkonstanten $\sigma_{i,j}$ nach Gl. (7.10) ausgerechnet (dabei bezeichnet $\sigma_{i,j}$ den Übergang von $n_2 = i$ nach $n_1 = j$). Die Werte von $\sqrt{E/Rhc}$ und $\sigma_{i,j}$ sind in grafischer Form in Fig. 7.28 bzw. Fig. 7.29 dargestellt.

Tab. 7.8: Experimentelle Energien E der K -Linien und die daraus ausgerechneten Abschirmkonstanten $\sigma_{i,j}$ für die entsprechenden Elektronenübergänge ($n = i \rightarrow j$).

Spektrum	Element	$K\alpha$ -Linie			$K\beta$ -Linie		
		E , keV	$\sqrt{E/Rhc}$	$\sigma_{2,1}$	E , keV	$\sqrt{E/Rhc}$	$\sigma_{3,1}$
$N1$	Ti ($Z = 22$)	4,60	18,39	0,76	5,05	19,27	1,57
$N2$	Cr ($Z = 24$)	5,45	20,02	0,88	5,97	20,95	1,78
$N3$	Fe ($Z = 26$)	6,39	21,68	0,97	7,04	22,75	1,87
$N4$	Co ($Z = 27$)	6,91	22,54	0,97	7,62	23,67	1,90
$N5$	Ni ($Z = 28$)	7,46	23,42	0,96	8,19	24,54	1,98
$N6$	Zn ($Z = 30$)	8,61	25,16	0,95	9,54	26,49	1,91
$N7$	Ge ($Z = 32$)	9,85	26,91	0,92	10,95	28,38	1,91
$N8$	Br ($Z = 35$)	11,87	29,54	0,89	13,25	31,21	1,90
$N9$	Rb ($Z = 37$)	13,34	31,32	0,83	14,93	33,13	1,86
$N10$	Zr ($Z = 40$)	15,76	34,04	0,69	17,69	36,07	1,75
$N11$	Mo ($Z = 42$)	17,47	35,84	0,61	19,64	38,00	1,7
$N12$	Ag ($Z = 47$)	22,10	40,31	0,45	24,97	42,85	1,56
$N13$	Sn ($Z = 50$)	25,18	43,03	0,31	28,37	45,67	1,57

Aus Fig. 7.28 ist es ersichtlich, dass die experimentellen Werte von $\sqrt{E/Rhc}$ für alle aufgeführten charakteristischen Linien sich annähernd linear mit der Ordnungszahl Z ändern. Zum Vergleich sind auch zwei theoretische Moseley-Geraden $f_1(Z)$ und $f_2(Z)$ für die $K\alpha$ - bzw. $K\beta$ -Linien dargestellt. Sie wurden nach der Gl. (7.10)

Tab. 7.9: Experimentelle Energien E der L -Linien und die daraus ausgerechneten Abschirmkonstanten $\sigma_{i,j}$ für die entsprechenden Elektronenübergänge ($n = i \rightarrow j$).

Spektrum	Element	$L\alpha$ -Linie			$L\beta$ -Linie		
		E , keV	$\sqrt{E/Rhc}$	$\sigma_{3,2}$	E , keV	$\sqrt{E/Rhc}$	$\sigma_{3,2}$
N12	<i>Ag</i> ($Z = 47$)	3,19	15,32	5,94	3,46	15,95	4,24
N13	<i>Sn</i> ($Z = 50$)	3,66	16,40	6,02	3,90	16,93	4,60
N14	<i>Ba</i> ($Z = 56$)	4,58	18,35	6,80	4,98	19,14	4,70
N15	<i>W</i> ($Z = 74$)	8,37	24,81	7,49	9,70	26,71	2,40
N16	<i>Au</i> ($Z = 79$)	9,68	26,68	7,47	11,45	29,02	1,21
N17	<i>Pb</i> ($Z = 82$)	10,53	27,83	7,40	12,62	30,46	0,33

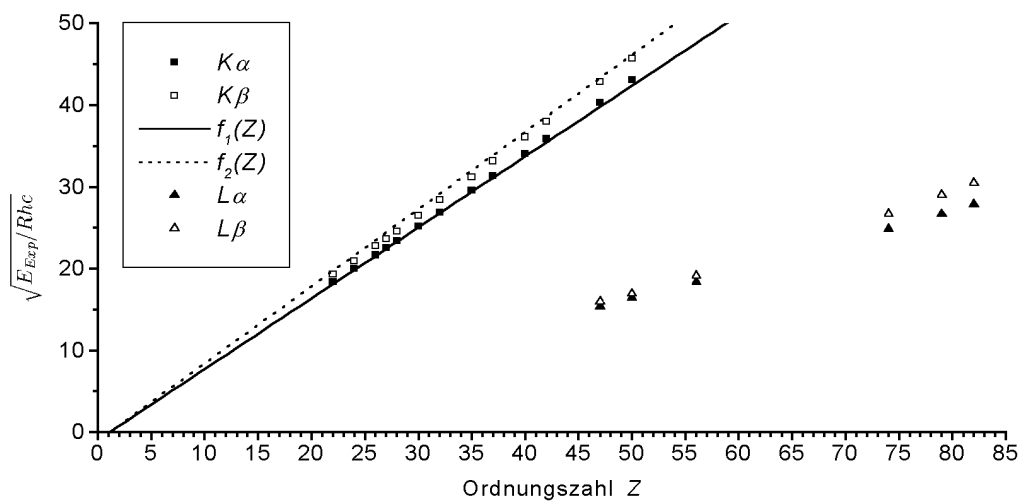


Fig. 7.28: Grafische Darstellung zum Moseley-Gesetz. Punkte: experimentelle Werte von $\sqrt{E/Rhc}$; $f_1(Z)$ und $f_2(Z)$: Moseley-Geraden für die $K\alpha$ - bzw. $K\beta$ -Linien nach Gl. (7.10).

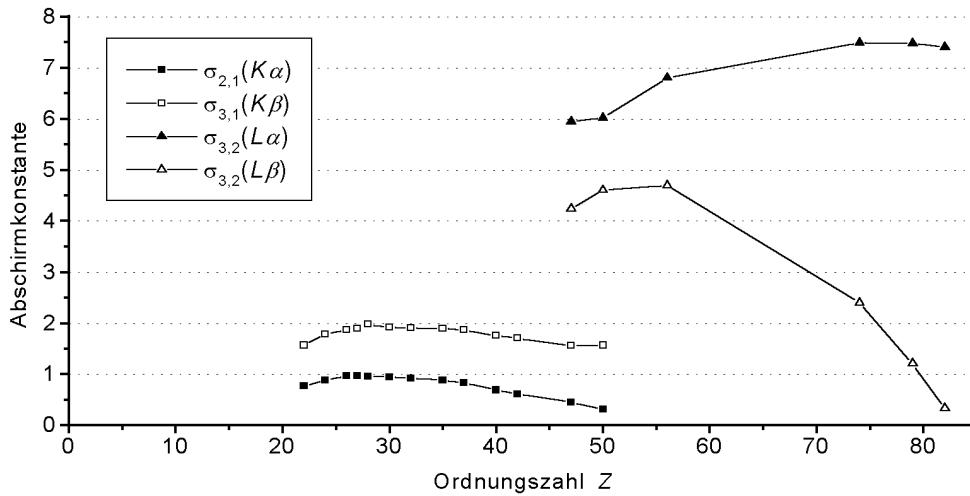


Fig. 7.29: Effektive Abschirmkonstanten für die Elektronenübergänge der K - und L -Serien nach Gl. (7.10). Dabei bezeichnet $\sigma_{i,j}$ den Übergang von $n_2 = i$ nach $n_1 = j$.

mit $n_1 = 1$, $n_2 = 2$, $\sigma_{2,1} = 1$ bzw. mit $n_1 = 1$, $n_2 = 3$, $\sigma_{3,1} = 1$ ausgerechnet. Wie die Fig. 7.28 zeigt, liegen die experimentellen Werte sehr nah, aber nicht exakt auf der theoretischen Geraden, was auf die Abweichung der Abschirmkonstanten von 1 zurückzuführen ist.

Die aus den experimentellen Werten nach der Gl. (7.10) ausgerechneten Werte $\sigma_{2,1}$ für die $K\alpha$ -Linien (vgl. Fig. 7.29) zeigen, dass die Abweichung von der theoretisch erwarteten $\sigma = 1$ mit wachsender Ordnungszahl Z größer wird¹¹. Das ist damit zu erklären, dass der Einfluss der äußeren Elektronen mit steigender Elektronenzahl größer wird.

Die Abschirmkonstanten $\sigma_{3,1}$ für die $K\beta$ -Linien haben Zahlenwerte ≈ 2 , was wie erwartet eine größere effektive Abschirmung der Kernladung für die Elektronenübergänge aus dem höheren Niveau $n_2 = 3$ zeigt (vgl. Fig. 7.29).

Die Abschirmung des Kerns für die Übergänge der L -Linien ist noch größer (Fig. 7.29). Die sehr unterschiedliche Abhängigkeit der Abschirmkonstanten für die α - und β -Komponenten von der Ordnungszahl Z weist auf Unterschiede im Aufbau der Unterniveaus der M - und L -Schalen hin. Es ist bemerkenswert, dass die Abschirmkonstante für die $L\alpha$ -Linien den Wert $\sigma_{3,2} \approx 7$ hat. Das bedeutet, dass

¹¹ Bei den kleineren Z ($K\alpha < 4$ keV) soll berücksichtigt werden, dass die Nichtlinearität des Detektors zu größeren Abweichungen führt, vgl. Abschnitt 5.11.

die Abschirmung durch die sieben nach der Ionisation in der L -Schale verbliebenen Elektronen erfolgt. Was wiederum darauf hinweist, dass die p - und s -Orbitale (L - bzw. K -Schalen) so geformt sind, dass die zwei sich in der K -Schale befindenden Elektronen für die Abschirmung des $L\alpha$ -Übergangs unwirksam sind.

Kommentar

Da es möglich ist, die Röntgenfluoreszenz-Spektren mit ausreichender Statistik in 1 min (oder weniger) aufzunehmen, bietet es sich an, die Messungen an mehreren Elementen durchzuführen. Als Proben können reine Elemente (z.B. Metalle) oder ihre chemische Verbindungen eingesetzt werden. Im zweiten Fall sollten die anderen Komponenten der Verbindung kleine Ordnungszahlen haben, um im Spektrum nicht oder wenig sichtbar sein: Erfahrungswert $Z < 19$ (Kalium). Mögliche Varianten für die Proben sind in Tab. 7.10 aufgelistet.

Tab. 7.10: Varianten zur Auswahl der Proben für die Überprüfung des Moseley-Gesetzes.

Element	Probe	Element	Probe
<i>Ti</i> ($Z = 22$)	<i>TiO</i> ₂	<i>Zr</i> ($Z = 40$)	metallisch
<i>Cr</i> ($Z = 24$)	<i>Cr</i> ₂ <i>O</i> ₃	<i>Mo</i> ($Z = 42$)	metallisch
<i>Fe</i> ($Z = 26$)	Stahl	<i>Ag</i> ($Z = 47$)	metallisch
<i>Co</i> ($Z = 27$)	<i>CoCl</i> ₂ · 6 <i>H</i> ₂ <i>O</i>	<i>Sn</i> ($Z = 50$)	metallisch
<i>Ni</i> ($Z = 28$)	metallisch	<i>Ba</i> ($Z = 56$)	<i>BaCl</i> ₂
<i>Zn</i> ($Z = 30$)	metallisch	<i>W</i> ($Z = 74$)	metallisch
<i>Ge</i> ($Z = 32$)	rein	<i>Au</i> ($Z = 79$)	metallisch
<i>Br</i> ($Z = 35$)	<i>KBr</i>	<i>Pb</i> ($Z = 82$)	metallisch
<i>Rb</i> ($Z = 37$)	<i>RbCl</i>		

Eine wichtige Anwendung des Moseley-Gesetzes kann am Beispiel der Fluoreszenzspektren von Kobalt ($_{27}\text{Co}$) und Nickel ($_{28}\text{Ni}$) demonstriert werden (vgl. Spektren $N4$ bzw. $N5$ in Fig. 7.25). Durch ihren Vergleich konnte H.G.J. Moseley diese zwei Elemente richtig im Periodensystem platzieren. Früher war wegen des kleineren Atomgewicht Nickel (58,7 g/mol) vor Kobalt (58,9 g/mol) angeordnet.

7.5.2 Untersuchung der chemischen Zusammensetzung mit Hilfe der Röntgenfluoreszenz-Spektren

Ziele des Experimentes

- Aufnahme des Röntgenfluoreszenz-Spektrums einer Messing-Probe.
- Qualitative Analyse des Fluoreszenzspektrums: Bestimmung der in der Legierung vorhandenen Elemente.
- Bestimmung der Massenanteile einzelner Komponenten der Legierung.

Grundlagen

Beim Bestrahlen einer Probe mit hochenergetischen Röntgenphotonen emittiert diese charakteristische Röntgenlinien, deren Energie von der Ordnungszahl des Elementes der Probenmaterials abhängt. Diese Abhängigkeit (Moseley-Gesetz) wurde zusammen mit der Röntgenfluoreszenz-Spektren einiger Elemente im Experiment 7.5.1 behandelt.

Wenn die Probe eine chemische Verbindung oder Gemisch darstellt, ist auch ihr Fluoreszenzspektrum von komplexer Natur. Da die Elektronenschalen, zwischen denen die Röntgen-Übergänge statt finden, nicht in die chemische Bindung eingezogen werden, sind auch die charakteristischen Linien *von der chemischen Bindung des Elementes unabhängig*. Somit sind die Röntgenfluoreszenz-Spektren einer chemischen Verbindung in erster Näherung eine Überlagerung von Spektren ihrer Komponenten.

Zur qualitativen Analyse der chemischen Zusammensetzung einer Probe werden alle im Fluoreszenzspektrum vorhandenen Peaks den Elementen zugeordnet. Dies geschieht mit Hilfe der Tabellenwerte für die Energien der charakteristischen Linien. Für die Zuordnung wird auch das „Muster“ jeder Spektralserie berücksichtigt: so muss zusammen mit der $K\alpha$ -Linie die $K\beta$ -Linie mit kleinerer (ca. 5- bis 10-mal) Intensität im Spektrum vorhanden sein; die $L\alpha$ -Linie erscheint in Begleitung von der $L\beta$ -Linie mit ähnlicher Intensität und der $L\gamma$ -Linie kleiner Intensität. Die Aussagen über die relativen Anteile einzelner Elemente in der Verbindung können anhand der relativen Intensitäten ihrer Fluoreszenz-Linien gemacht werden.

Bei einer quantitativen Analyse müssen allerdings viele weiteren Faktoren in Betracht gezogen werden, die die Relation der Intensitäten der Linien verschiedener Elemente beeinflussen. So spielen z.B. die Matrixeffekte eine große Rolle, wobei unter der „Matrix“ die physikalische und chemische Umgebung des zu untersuchenden Elements verstanden wird. Auch die Oberflächenqualität und die geometrischen Eigenschaften der Probe müssen berücksichtigt werden. Dazu kommen noch die Einflüsse des Messsystems wie die Ansprechwahrscheinlichkeit des Detektors und die Totzeit.

Am Beispiel von Kupfer-Zink-Legierungen (Messing) kann demonstriert werden, wie die *sekundäre Fluoreszenz* die Form des Spektrums verändern kann. Bei Bestrahlung einer solchen Probe mit Röntgenphotonen werden die K -Linien sowohl von Kupfer als auch von Zink angeregt. Da aber die $K\beta$ -Linie von Zink über der K -Kante von Kupfer liegt ($E = 9,57$ keV bzw. $8,99$ keV), kann sie auch die K -Linien von Kupfer anregen. Deswegen ist in der aus der Probe emittierten Fluoreszenzstrahlung die Intensität der Kupfer-Linien auf Kosten der $Zn K\beta$ -Linie höher, und das Verhältnis der Intensitäten der $Zn K\alpha$ - und der $K\beta$ -Linien stimmt nicht mit diesem Verhältnis in der Probe aus reinem Zink überein.

Da die Intensität des Peaks nicht nur von der Konzentration des Elementes sondern auch von der Position seiner Absorptionskanten zum anregenden Spektrum abhängt, treten die Matrixeffekte auch durch die Absorption (insbesondere durch die Kantenabsorption) der primären Strahlung durch die anderen Elementen der Verbindung auf. Auch die Fluoreszenzstrahlung des zu untersuchenden Elements wird zum Teil erheblich von der Matrix absorbiert, bevor sie zum Detektor gelangt.

Benötigte Geräte

- Röntgengerät (LD-Kat.-Nr. 554811) mit Molybdän-Röntgenröhre (LD-Kat.-Nr. 55482) oder Kupfer-Röntgenröhre (LD-Kat.-Nr. 55485)
- Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen (LD-Kat.-Nr. 559938)
- Proben: Messing (CuZn39Pb3), Kupfer, Zink, Blei
- PC mit Windows 95/./XP und einer Soundkarte
- Software: *VKA Lab*

Aufbau

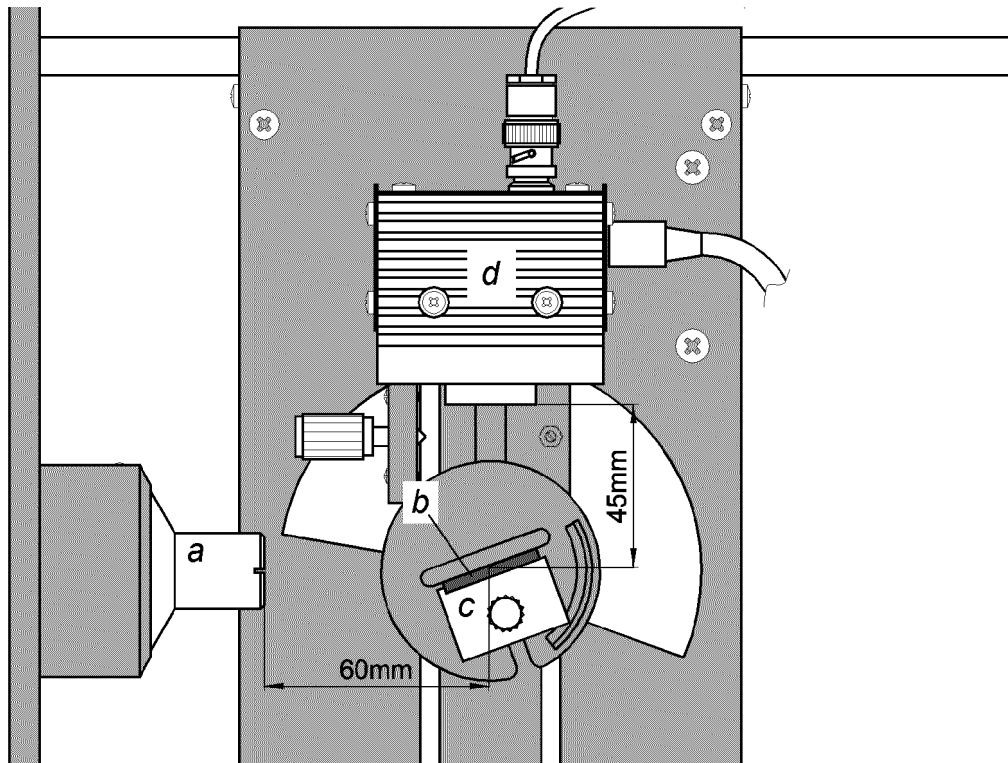


Fig. 7.30: Aufbau des Experimentes: *a* – Kollimator, *b* – Probe, *c* – Targettisch, *d* – Detektor.

Nach Ausbau des Targethalters und des Sensorhalters mit dem Geiger-Müller-Zählrohr wird der Sensorhalter mit dem Halbleiterdetektor auf dem Goniometer montiert und das Versorgungskabel und das Ausgangskabel an den Halbleiterdetektor angeschlossen. Weiterhin wird der Targethalter mit dem Targettisch auf dem Goniometer montiert und der Kollimator in die Kollimatoraufnahme eingebaut (siehe Fig. 7.30). Am Röntgengerät wird die Hochspannung $U_A = 35 \text{ kV}$, der Emissionsstrom $I_A = 1 \text{ mA}$, der Sensorwinkel $\theta = 90^\circ$ und der Targetwinkel $\alpha = 20^\circ$ eingestellt, das Netzgerät des Detektors wird ans Netz angeschlossen. Nach ca. 1 Minute ist der Detektor betriebsbereit, die Leuchtdiode leuchtet „grün“.

Durchführung und Auswertung

Nach Starten von *VKA Lab* wird eine vorbereitete Vorlage geladen, die die folgenden Merkmale hat: die Kanalbreite ist auf $0,05 - 0,1 \text{ keV}$ eingestellt, die höchste messbare Energie beträgt ungefähr 35 keV , die Energiekalibrierung ist eingegeben, die Energiedarstellung ist gewählt, die Messdauer beträgt 120 s .

Auf dem Targettisch wird die Messing-Probe platziert, die Hochspannung am Röntgengerät wird eingeschaltet und die Messung in *VKA Lab* gestartet (F9). Das Messbeispiel ist in Fig. 7.31 dargestellt.

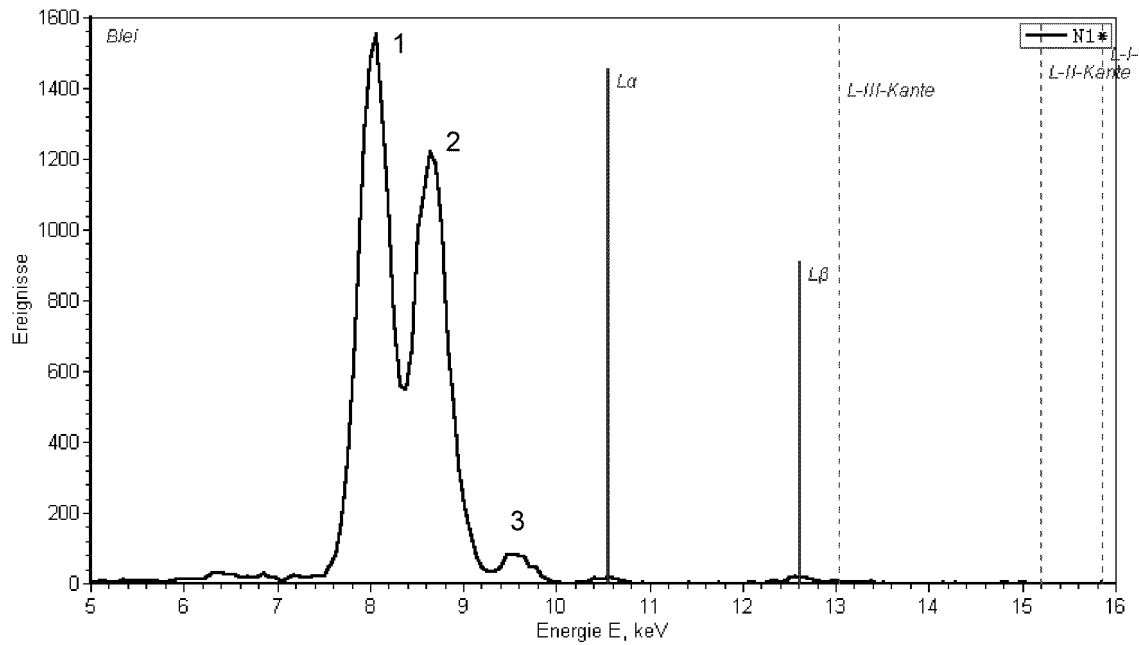


Fig. 7.31: Fluoreszenzspektrum einer Messing-Probe. Das Spektrum weist die Peaks der $Cu K\alpha$ - (Peak 1), $Zn K\alpha$ - (Peak 2) und $K\beta$ -Linien (Peak 3) auf bei $E = 8$ keV, 8,6 keV bzw. 9,6 keV. Außerdem sind kleine Peaks der $L\alpha$ - und $L\beta$ -Linien von Blei ersichtlich ($E = 10,6$ keV bzw. 12,6 keV). Die dargestellten Marker der L -Serie von Blei illustrieren, wie die Identifizierung der Peaks mit Hilfe des *interaktiven Periodensystem der Elemente* von *VKA Lab* durchgeführt wird. Messdauer 120 s.

Die Identifizierung der Peaks erfolgt am einfachsten durch Anklicken der Schaltflächen unterschiedlicher Elemente im Fenster des *interaktiven Periodensystem der Elemente* und Vergleichen der dargestellten Marker der Tabellenwerte mit dem experimentellen Spektrum (vgl. Beispiel für Blei in Fig. 7.31). Die Peaks im Spektrum sind damit als $Cu K\alpha$ -, $Zn K\alpha$ -, $Zn K\beta$ -, $Pb L\alpha$ - und $Pb L\beta$ -Linien identifiziert.

Die $K\beta$ -Linie von Kupfer ($E = 8,9$ keV) ist durch die größere $K\alpha$ -Linie von Zink bei $E = 8,6$ keV kaschiert. Damit ist der zweitgrößte Peak (bei $E = 8,6$ keV) im Spektrum eigentlich eine Überlagerung dieser zwei Linien, was bei der quantitativen Analyse berücksichtigt werden muss.

Um die quantitative¹² Analyse der Zusammensetzung der Messing-Probe durchführen zu können, werden zusätzlich die Referenz-Spektren aufgenommen. Als Referenz dienen die mit den gleichen Parameter aufgenommenen Röntgenfluoreszenz-Spektren reiner Elemente, die bei der qualitativen Untersuchung der Probe festgestellt wurden: Kupfer, Zink und Blei (vgl. Fig. 7.32).

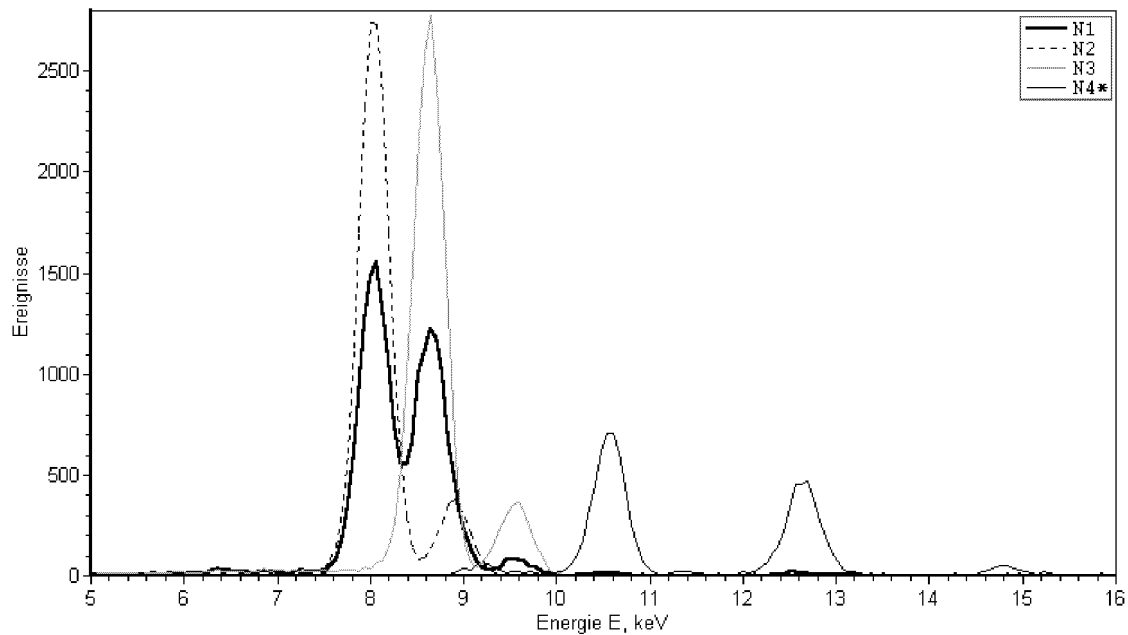



Fig. 7.32: Fluoreszenzspektrum von Messing ($N1$) und Referenzspektren einzelner Komponenten der Legierung: Kupfer ($N2$), Zink ($N3$) und Blei ($N4$). Das Intensitätsverhältnis der Peaks in Proben- und Referenzspektren lässt die Massenanteile der Komponenten bestimmen. Messdauer: 120 s pro Spektrum.

Zum Ausrechnen der relativen Massenanteile der Legierungskomponenten werden die $K\alpha$ -Linien von Kupfer und Zink und die $L\alpha$ -Linie von Blei benutzt. Da im Spektrum der Probe diese Linien nicht frei von Überlagerung sind, werden ihre Höhen durch Anpassung einer entsprechenden Anzahl von Gauss-Kurven an das Spektrum festgestellt. Demnach wird die Anpassung im Bereich von $E \approx 7,5$ keV bis 11,5 keV mit 5 Gauss-Funktionen durchgeführt. Als Anfangswerte der Peak-Positionen werden die Energien von $Cu K\alpha$ - ($E = 8$ keV), $Zn K\alpha$ - ($E = 8,6$ keV), $Cu K\beta$ - ($E = 8,9$ keV), $Zn K\beta$ - ($E = 9,6$ keV) und $Pb L\alpha$ -Linien ($E = 10,6$ keV) eingegeben:

¹² Streng gesagt geht es hier um eine halbquantitative Analyse, da keine Korrektur an die Matrixabsorption und an die sekundäre Fluoreszenz gemacht wird.

- das Spektrum von Messing ($N1$ in Fig 7.31) wird aktiv gesetzt (Doppelklick auf sein Symbol in der Legende);
- fünf Gauss-Kurven werden an das Spektrum angefitet (durch Anklicken des Buttons  und anschließend der Peakpositionen und des Anpassungsbereiches den Anweisungen in der Statuszeile folgend);
- für die $K\alpha$ -Linien von Kupfer und Zink und die $L\alpha$ -Linie von Blei werden die Höhen der Gauss-Kurven (A_1 , A_2 bzw. A_5) im Feld *Kommentar* des Fensters *Spektrum Einstellungen* abgelesen (durch einen Rechtsklick auf das Symbol von Fit in der Legende aufzurufen);

Die Höhen der $K\alpha$ -Linien von Kupfer und Zink und der $L\alpha$ -Linie von Blei in Referenzspektren werden durch Anpassung einzelner Gauss-Funktionen an diese Linien ermittelt.

Zum Ausrechnen der Massenanteile wird die Tatsache ausgenutzt, dass die Höhe eines Peaks zur Anzahl der strahlenden Atomen n proportional ist. Im Referenzspektrum ist diese Anzahl n_0 durch die Dichte des Stoffes ρ , sein Atomgewicht A , die bestrahlte Fläche S und die effektive Dicke d der durchgestrahlten Schicht bestimmt:

$$n_0 = S \cdot d \cdot \frac{\rho}{A}.$$

Für die Anzahl der Atome jeder Sorte in der Legierung kann in der ersten Näherung der Ausdruck

$$n = n_0 \cdot \frac{H}{H_0} = V \cdot \frac{\rho}{A} \cdot \frac{H}{H_0}$$

benutzt werden. Dabei sind H und H_0 die Höhen entsprechender Peaks im zu analysierenden Spektrum bzw. im Referenzspektrum, $V = S \cdot d$ ist das bestrahlte Volumen. Damit wird der Massenanteil C_i der Element Nummer i in der Legierung zu

$$C_i = \frac{n_i \cdot A_i}{\sum_i n_i \cdot A_i} = \frac{\rho_i \cdot \frac{H_i}{H_{0i}}}{\sum_i \rho_i \cdot \frac{H_i}{H_{0i}}}. \quad (7.11)$$

In Tab. 7.11 sind die für das Messbeispiel ermittelten Peakhöhen der Cu $K\alpha$ -, Zn $K\alpha$ - und Pb $L\alpha$ -Linien im Spektrum der Probe (H) und in den Referenzspektren (H_0) angegeben. Die Ausdrücke $\rho \cdot H/H_0$ dienen zur Bestimmung der Massenanteile nach Gl. (7.11). Die Massenanteile zeigen gute Übereinstimmung mit der angegebenen Zusammensetzung der Probe, die 58% Kupfer, 39% Zink und 3% Blei beinhalten soll (CuZn39Pb3).

Tab. 7.11: Zahlenwerte zur Bestimmung der Massenanteile der Legierungskomponenten in der Messing-Probe.

Element	Linie	H , 1/s	H_0 , 1/s	ρ , g/cm ³	$\rho \cdot H/H_0$	Massenanteil
Kupfer	$K\alpha$	1530	2720	8,96	5,03	59,3%
Zink	$K\alpha$	1210	2700	7,10	3,19	37,6%
Blei	$L\alpha$	16	701	11,34	0,26	3,1%

Kommentar

Es können auch andere Proben zur Analyse genommen werden. Sie sollten allerdings so gewählt werden, dass die einzelnen Komponenten der Verbindung in einer Form vorhanden sind, die die einfache Aufnahme der Referenzspektren ermöglicht (es wäre z.B. bei den Alkalimetallen nicht der Fall). Es ist auch nicht zu vergessen, dass die Totzeitkorrektur gemacht werden sollte, wenn die Zählraten bei der Aufnahmen des Probenspektrums und der Referenzspektren sehr unterschiedlich sind.

Beim Vergleichen des Probenspektrums mit den Referenzspektren von Kupfer und Zink (oder mit den Modellspektren aus dem interaktiven Periodensystem) wird es ersichtlich, dass die Höhe (Intensität) der $K\beta$ -Linie von Zink $H_{K\beta}$ in der Legierung ungefähr zweimal kleiner ist als aus dem theoretischen Verhältnis $H_{K\beta}/H_{K\alpha}$ zu erwarten wäre. Diese Tatsache wird durch die sekundäre Fluoreszenz erklärt: die $Zn K\beta$ -Linie wird zum Teil zur Anregung der K -Linien von Kupfer „aufgebraucht“, dadurch werden gleichzeitig die Peaks der Kupfer-Linien höher.

8. VORSCHLÄGE FÜR DEMONSTRATIONSEXPERIMENTE MIT DEM HALBLEITERDETEKTOR IM SCHULUNTERRICHT

8.1 Zielsetzung des Kapitels

Die Analyse von Lehrplänen und Schulbüchern zeigt, dass Röntgenstrahlung eine wichtige Stellung im gymnasialen Physikunterricht hat, besonders bei der Vermittlung von Grundlagen der Quanten- und Atomphysik (vgl. Kapitel 4.1.1). Experimente haben dabei besondere Vorteile, da sie unter anderem die „lebenden“ Beispiele komplexer physikalischen Phänomene zeigen und das Interesse der Schüler wecken.

Da es sich bei der Röntgenstrahlung um eine *ionisierende Strahlung* handelt, müssen in der Schule entsprechende gesetzliche Richtlinien eingehalten werden (vgl. Anhang B). Die Röntgenverordnung gestattet das Experimentieren mit Röntgenstrahlen in der Schule nur mit zugelassenen Schulröntengeräten, aber auch mit ihnen dürfen die Schüler nur in Anwesenheit des strahlenschutzbeauftragten Lehrers bei der Durchführung eines Experimentes mitwirken. Diese Forderung stellt ziemlich enge Grenzen für die Möglichkeiten des experimentellen Einsatzes der Röntgenstrahlung im Unterricht: es werden praktisch nur Demonstrationsexperimente erlaubt.

Demonstrationsexperimente sind oft Teil einer Lehrer-Darbietung, wobei die Schüler in der Rolle mehr oder weniger passiver Zuschauer sind. Die Lernaktivitäten der Schüler sind dabei rezeptiver Natur: sie können zuhören, mitdenken und Argumentationen nachvollziehen. Bei einem rein darbietenden Unterricht können allerdings nur die Lernziele aus dem Wissensbereich erreicht werden ([10], S. 254).

Es ist aber möglich, auch mit Einsatz allein des Lehrerexperimentes die Stunde

in Form eines entdeckenden Unterrichts zu gestalten. So können die Schüler am Planen eines Experimentes teilnehmen, das später vom Lehrer durchgeführt wird, oder anhand ausgedruckter Spektren oder mit Hilfe eines Computerprogramms die Auswertung eines Demonstrationsexperimentes selbständig durchführen. Dabei können Ziele wie „die Fähigkeit, Experimente zu planen“ oder „die Fähigkeit, die Ergebnisse zu interpretieren“ erreicht werden.

In diesem Kapitel werden Vorschläge für mögliche Demonstrationsexperimente mit dem energieauflösenden Halbleiterdetektor präsentiert. Diese Experimente wurden so konzipiert, dass sie eine Zeit von einigen Minuten zur Durchführung brauchen, aber trotzdem aussagekräftig sind. Außer der Tatsache, dass sie für die physikalischen Phänomene eine Demonstration bieten, wovon es besonders im Themenkreis Quanten- und Atomphysik nicht viele gibt, lassen sie genügend Zeit im Unterricht für die theoretische Behandlung oder die Auswertung.

Es wurde darauf geachtet, dass in den Messreihen jede durchzuführende Messung etwas *Neues* darstellt, was nicht aus den früheren Messungen abgeleitet werden kann, so dass das Interesse der Schüler während der Aufnahme der Messreihe erhalten bleibt und ihre Konzentration nicht nachlässt. Um die Zeit effizient zu nutzen, sind die Experimente so angeordnet, dass das nachfolgende Experiment die mit dem vorstehenden gewonnenen Ergebnisse logisch weiter entwickelt bzw. dass der Vergleich mit dem Ergebnis eines früheren Experimentes wichtige Aussagen machen lässt.

Obwohl die für die Experimente eingeplante Zeit möglichst kurz gehalten wurde, liefern sie ein eindeutiges, gut interpretierbares Ergebnis. Wenn eine bessere statistische Genauigkeit erreicht werden sollte, können die Messzeiten einfach verlängert werden.

Die Beschreibungen der vorgeschlagenen Demonstrationsexperimente sind mit der Zusammenfassung von Grundlagen, detaillierten Anweisungen, Messbeispielen, Zeitangaben und Kommentaren versehen. Die Grafiken, die die aufgenommene Spektren darstellen, sind direkt aus der Software *VKA Lab* exportiert.

Die Beschreibungen von Schritten im Aufbau des Experimentes sind so gemacht, dass jedes Experiment unabhängig davon, ob die vorhergehenden durchgeführt worden sind, zusammengebaut und durchgeführt werden kann.

8.2 Demonstrationsexperimente mit Röntgenstrahlen zur Einführung in die Quantenphysik

8.2.1 Aufnahme des Spektrums einer Röntgenröhre mit dem Halbleiterdetektor

Lernziele

Die Schüler sollen:

1. beobachten, dass die Frequenz elektromagnetischer Strahlung auch für ihre kleinste Energieportion – Photon – bestimmt und messbar ist;
2. das Röntgenspektrum als Zusammensetzung des Bremsstrahlungskontinuums und der charakteristischen Linien beschreiben;
3. beobachten, dass das Spektrum einer Röntgenröhre eine bestimmte maximale Energie aufweist;
4. in der Lage sein, die allgemeine Form des Röntgenspektrums zu skizzieren.

Grundlagen

Nach der Photonenhypothese besteht elektromagnetische Strahlung aus einzelnen Photonen der Energie $E_{ph} = h \cdot f$, dabei ist h die Plancksche Konstante und f die Frequenz der Strahlung. Die Frequenz ist messbar selbst bei nur einem Photon.

Zur Illustration dafür, können das Funktionsprinzip des Halbleiterdetektors und die damit gewonnenen Ergebnisse einbezogen werden: jeder Ausgangsimpuls des Detektors ist eine Reaktion auf ein *einzelnes* registriertes Röntgenphoton, das im Detektor eine Anzahl von Elektronen-Loch-Paaren produziert, die zur Energie des Photons in direkter Proportionalität steht. Die der erzeugten Ladung entsprechende Spannung wird verstärkt und als Spannungsimpuls ausgegeben. Der Vielkanalanalysator sortiert die Impulse nach ihrer Amplitude ein und erzeugt damit das Spektrum.

In der Röntgenröhre werden die aus der geheizten Kathode emittierten Elektronen zu der sich auf hohem positiven Potenzial (>10 kV) befindenden Anode

beschleunigt. Beim Aufprallen auf die Anode verlieren sie ihre Energie. Zum größten Teil wird diese Energie in Wärme konvertiert und heizt die Anode auf. Bei der Wechselwirkung der Elektronen mit dem Anodenmaterial kommen aber auch andere Prozesse zustande.

Ein Teil der Elektronen (<1%) gibt seine Energie in Form von Strahlung beim Abbremsen im Material der Anode ab (*Bremsstrahlung*). Die experimentellen Spektren der Bremsstrahlung weisen eine hochenergetische Grenze (E_{max}) auf, die von der Hochspannung U_A an der Röntgenröhre abhängt. Dieses experimentelle Ergebnis lässt sich durch die quantenhafte Vorstellung der elektromagnetischen Strahlung erklären. Danach gilt für die Photonenenergie $E_{max} = hf_{max}$:

$$E_{max} = e \cdot U_A,$$

und sie wird nur dann ausgestrahlt, wenn ein Elektron seine ganze Energie in einem einzigen Stoß abgibt. Ein solcher Prozess wird als *Umkehr des Photoeffekts* angesehen. Nach der klassischen Strahlungstheorie kann eine solche hochenergetische Grenze nicht erklärt werden.

Viele Elektronen geben ihre kinetische Energie in kleineren Schritten ab, dabei werden Photonen mit $E < E_{max}$ ausgestrahlt. Das Bremsspektrum verläuft somit kontinuierlich bis zu Grenzenergie E_{max} , wobei die Grenzenergie nur von der Anodenspannung und nicht vom Anodenmaterial oder Anodenstrom abhängt.

Außer der kontinuierlichen Bremsstrahlung wird aus der Anode die so genannte *charakteristische Strahlung* ausgesendet. Sie zeigt sich im Spektrum in Form schmaler Emissionslinien, was auf die Quantengesetze in den Atomen hindeutet. Diese Strahlung ist für jedes chemische Element charakteristisch und kann, z.B. für die Identifikation der Elemente aufgrund ihrer Röntgenspektren eingesetzt werden.

Benötigte Geräte

- Röntgengerät (LD-Kat.-Nr. 554811) und Röntgenröhre mit Kupfer-Anode (LD-Kat.-Nr. 55485)
- Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen mit Abschwächerblende (LD-Kat.-Nr. 559938)
- PC mit Windows 95/./XP und einer Soundkarte, vorzugsweise mit einem

Beamer

- Software: *VKA Lab*

Aufbau und Vorbereitung des Experimentes

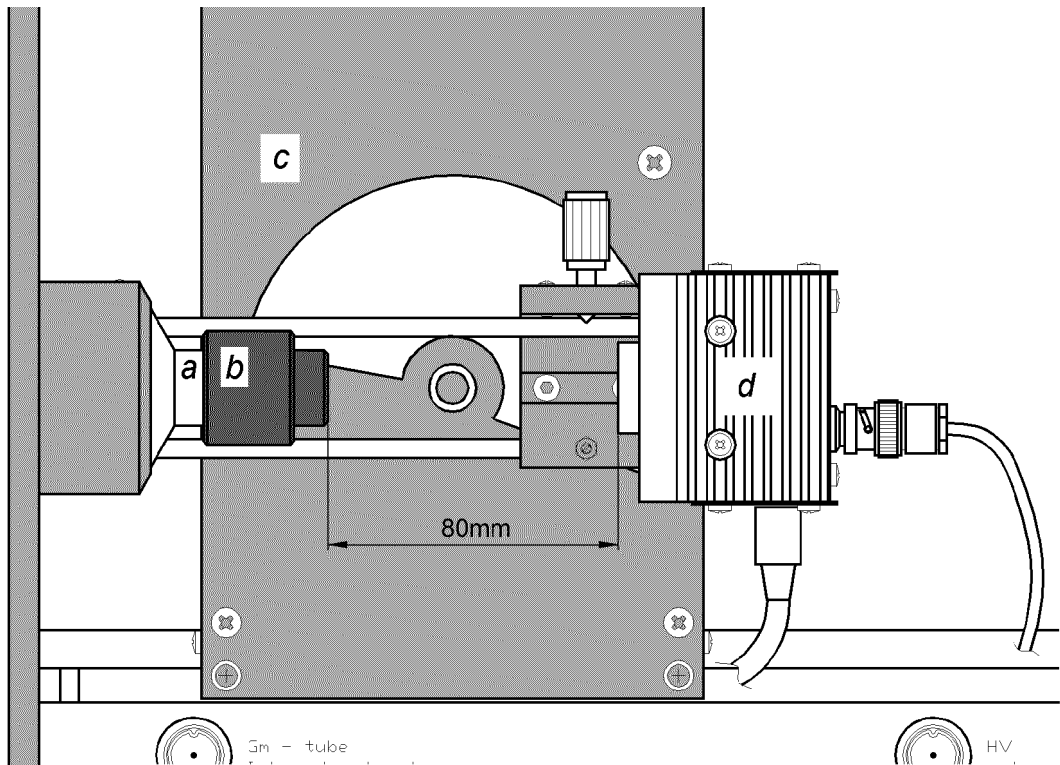


Fig. 8.1: Aufbau des Experimentes: *a* – Kollimator, *b* – Abschwächerblende, *c* – Goniometer, *d* – Detektor.

Nach Ausbau des Targethalters und des Sensorhalters mit dem Geiger-Müller-Zählrohr wird der Sensorhalter mit dem Halbleiterdetektor auf dem Goniometer montiert und das Versorgungskabel sowie das Ausgangskabel an den Halbleiterdetektor angeschlossen. Die Abschwächerblende wird auf den Kollimator gesetzt, am Röntgengerät wird der Sensorwinkel $\theta = 0^\circ$ eingestellt (siehe Fig. 8.1). Das Netzgerät des Detektors wird ans Netz angeschlossen, und nach ca. 1 Minute ist der Detektor betriebsbereit, die Leuchtdiode leuchtet „grün“.

Vor der Durchführung des Experimentes werden die nötigen Detektor-Positionen und der Emissionsstrom ermittelt:


- am Röntgengerät wird die Anodenspannung auf $U_A = 20 \text{ kV}$ und der Emissionsstrom auf $I_A = 0,1 \text{ mA}$ eingestellt, die Hochspannung wird eingeschaltet;

- im Programm *VKA Lab* wird eine Spektromaufnahme gestartet (Messdauer ca. 300 s);
- Zur Ermittlung der maximalen Zählrate wird der Sensorwinkel θ variiert und die in der Statuszeile angezeigte Zählrate kontrolliert. Für die maximale Zählrate wird der Winkel θ_1 notiert;
- der Sensorwinkel $\theta = \theta_1$ wird eingestellt und ggf. der Emissionsstrom I_A so verändert, dass die Zählrate bei ca. 200 Ereignisse/s liegt. Der ermittelte Wert des Emissionsstroms I_{A0} ist bei der Durchführung des Experimentes einzustellen;
- jetzt wird der Sensorwinkel so verändert, dass die Zählrate bei ca. 10 bis 20 Ereignisse/s liegt. Dieser Winkel θ_2 wird notiert;


Wenn das eigentliche Experiment nicht direkt stattfinden muss, sollten der Detektor und die Hochspannung ausgeschaltet werden.

Es sollten folgende Einstellungen in *VKA Lab* gemacht werden und ggf. als Vorlage gespeichert werden. Im Fenster *Einstellungen* (Taste F5):

- Registerkarte *Messung*: Standardwert der Messdauer auf 1 s eingestellt;
- Registerkarte *VKA*: Anzahl Kanäle auf 256, Begrenzung der Eingangsamplitude auf 1/4 der Skala eingestellt;
- Registerkarte *Grafik*: „Während der Messung Grafik jede Sekunde aktualisieren“ eingestellt;

Im Fenster *Energiekalibrierung* (Button *Energie-Darstellung* ) werden die Werte für die Kalibrierung eingetragen¹ und mit dem Button *OK* bestätigt.

Durchführung

Zuerst wird der Sensorwinkel $\theta = \theta_2$ und der Emissionsstrom $I_A = I_{A0}$ eingestellt und die Hochspannung $U_A = 20$ kV am Röntgengerät eingeschaltet; eine Messung in *VKA Lab* wird mit der Taste F9 oder dem Button *Start*  gestartet. Nach der

¹ Es ist vorausgesetzt, dass diese Werte mit einem Kalibriertarget nach der Anschaffung des Detektors ermittelt wurden.

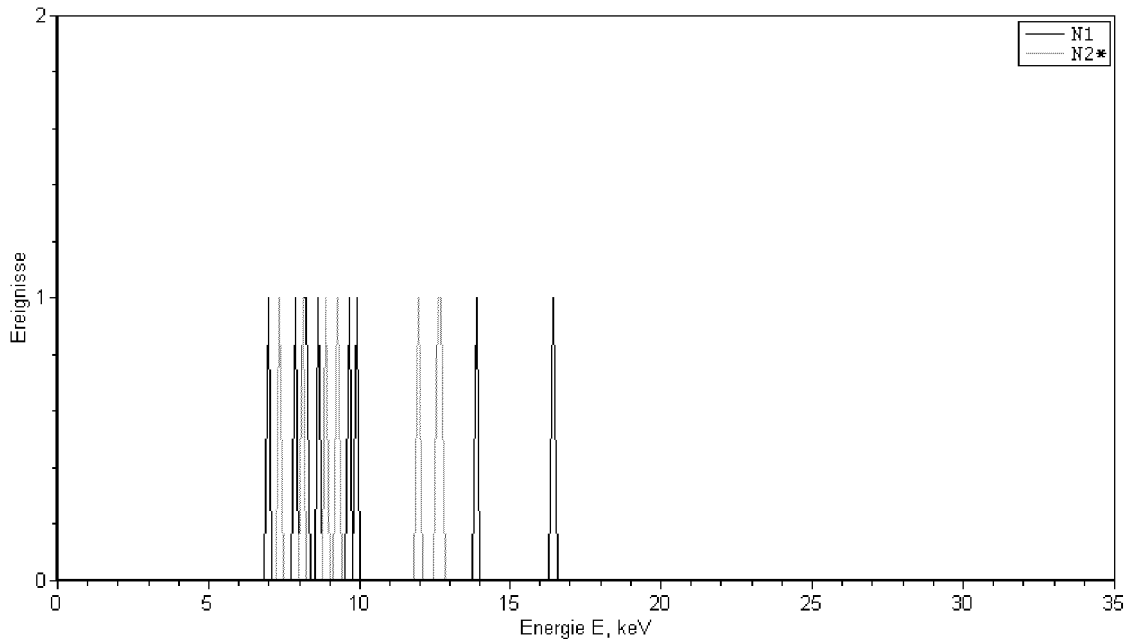



Fig. 8.2: Ergebnisse zweier Messungen der Röntgenstrahlung einer Kupfer-Röhre mit der Messdauer 1 s bei einer kleinen Zählrate. Spektrum $N1$: 10 Ereignisse, Spektrum $N2$: 7 Ereignisse. Jeder Peak entspricht einem registrierten Photon, die Position auf X-Achse zeigt, welche Energie das Photon hatte.

Messung (Button *Start* geht hoch) wird das Ergebnis mit dem Button *Zoom Alles*  auf den vollen Bildschirm skaliert.

Da die Zählrate bei $\theta = \theta_2$ ca. 10 s^{-1} ist und die Messdauer 1 s beträgt, sind nur wenige Ereignisse zu sehen, von denen jedes der Registrierung eines Photons entspricht (vgl. Messbeispiel: Spektrum $N1$ in Fig. 8.2). Die Position eines solches Ereignisses auf der X-Achse zeigt, welche Energie das registrierte Photon hatte. Die Anzahl der Photonen kann in der Statuszeile abgelesen werden (sie betrug im Messbeispiel 10 Ereignisse).

Es wird noch eine Messung durchgeführt, ohne irgendwelche Änderungen zu machen (vgl. Spektrum $N2$ in Fig. 8.2, hier 7 Ereignisse). Aus der Grafik ist es schwierig, eine Gesetzmäßigkeit zu ersehen. Hier kann die Frage gestellt werden, wie das Bild sich entwickeln wird, wenn die Zählrate oder die Messdauer erhöht wird.

Um eine Antwort zu bekommen, wird der Sensorwinkel $\theta = \theta_1$ eingestellt, so dass die Zählrate ca. 200 s^{-1} beträgt, und noch eine Aufnahme durchgeführt (Spektrum $N3$ in Fig. 8.3). Dieses Spektrum weist schon eine bestimmte Struktur auf, die allerdings großen statistischen Schwankungen unterliegt.

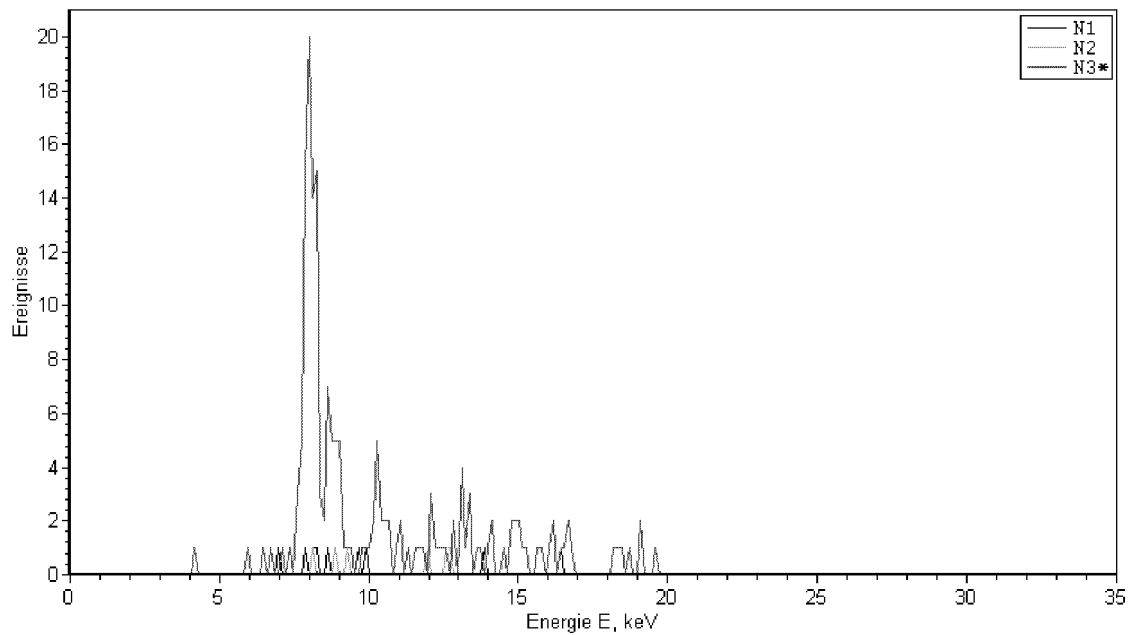


Fig. 8.3: Zu den aufgenommenen $N1$ und $N2$ wird eine Messung gleicher Messdauer (1 s) aber bei der Zählrate ca. 200 s^{-1} gemacht. Die Struktur des Spektrums einer Kupfer-Röntgenröhre mit $U_A = 20 \text{ kV}$ kann erkannt werden.

Jetzt wird die Messdauer erhöht: durch Klicken mit der rechten Maustaste auf das Symbol des Spektrums $N3$ in der Legende wird das Fenster *Spektrum Einstellungen* aufgerufen, die Messdauer des $N3$ auf 60 s erhöht und, nach dem Schließen des Fensters, eine Aufnahme gestartet. Die Änderung des Ergebnisses wird auf dem Bildschirm verfolgt (dafür ist es zweckmäßig, das Maximum der Y-Achse – mit einem Rechtsklick auf die Achse – auf ca. 1000 Ereignisse zu erhöhen). Das Ergebnis dieser Aufnahme ist in Fig. 8.4 präsentiert.

Mit der Messdauer 60 s hat $N3$ eine hinreichende statistische Genauigkeit, um Aussagen über Struktur des Spektrums einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode zu ermöglichen. So kann man ersehen, dass

- das Spektrum aus einem relativ niedrigen kontinuierlich verlaufenden Teil und zwei schmalen Peaks besteht. Es handelt sich um das *Bremsstrahlungskontinuum* bzw. die *charakteristischen Linien* von Kupfer.
- Die Bremsstrahlung ist sowohl nach oben als auch nach unten in ihrer Energie begrenzt: mit E_{max} bzw. E_{min} . Wobei die Grenzenergie $E_{max} = 20 \text{ keV}$ genau mit der Elektronenenergie in der Röntgenröhre bei der eingesetzten Anoden-

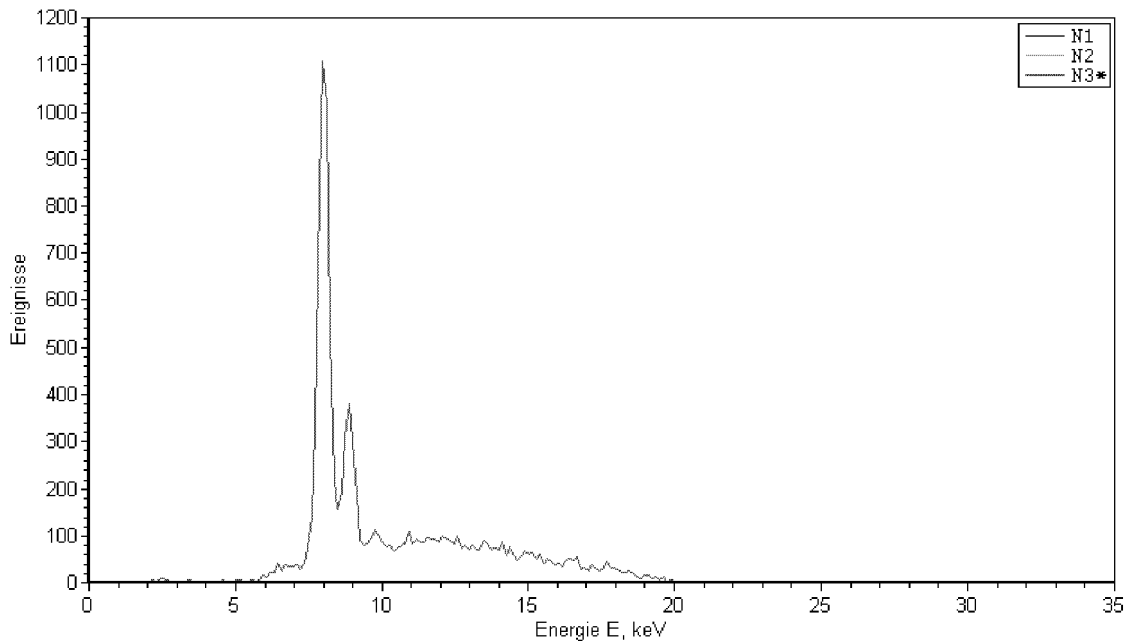


Fig. 8.4: Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 20$ kV, $I_A = I_{A0} = 0,3$ mA ($N3$). Zählrate: ~ 200 s $^{-1}$, Messdauer: 60 s. Ersichtlich ist das Kontinuum mit der Grenzenergie $E_{max} = 20$ keV und die charakteristischen Kupfer-Linien bei 8,1 keV und 8,9 keV. Die Messungen $N1$ und $N2$ sind wegen der viel kleineren Zahl der Ereignisse nicht sichtbar.

spannung $U_A = 20$ kV übereinstimmt. Die untere Grenze E_{min} ist durch die Absorption weicherer Röntgenstrahlung im Röhren-Austrittsfenster bestimmt.

Das gemessene Spektrum wird unter einem passenden Namen gespeichert (Taste F2).

Zeitangabe

Die gesamte Messzeit für die drei Messungen beträgt weniger als 2 Minuten.

Kommentar

Da mit Hilfe des vorgeschlagenen Demonstrationsexperimentes eine ziemlich große Menge an neuen Informationen an die Schüler vermittelt wird, bietet es sich an, den Unterricht in einer darbietenden Form zu gestalten. Nach dem Experiment sollte vertieft auf die Quantisierung der Strahlung eingegangen werden, das Vorhandensein der Grenzenergie der Bremsstrahlung als Beweis für die Notwendigkeit der quantenphysikalischen Beschreibung dargestellt werden und die Entstehung dieser Grenze

als Umkehr des Photoeffekts präsentiert werden.

In dem Fall, dass die Beugung von Röntgenstrahlen am Kristall bereits früher behandelt wurde, und wenn die verfügbare Zeit des Unterrichts es zulässt, kann anschließend zur Aufnahme des Spektrums *N3* sein Vergleich mit einem nach der Drehkristallmethode aufgenommenes Spektrum erfolgen. Dafür kann die Datei *BraggCu-Tube20kVNaCl.xry* aus der Datenbank benutzt werden. Die Datei enthält ein mit der Bragg-Anordnung aufgenommenes Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 20$ kV. Die beiden Spektren sind in Fig. 8.5 dargestellt.

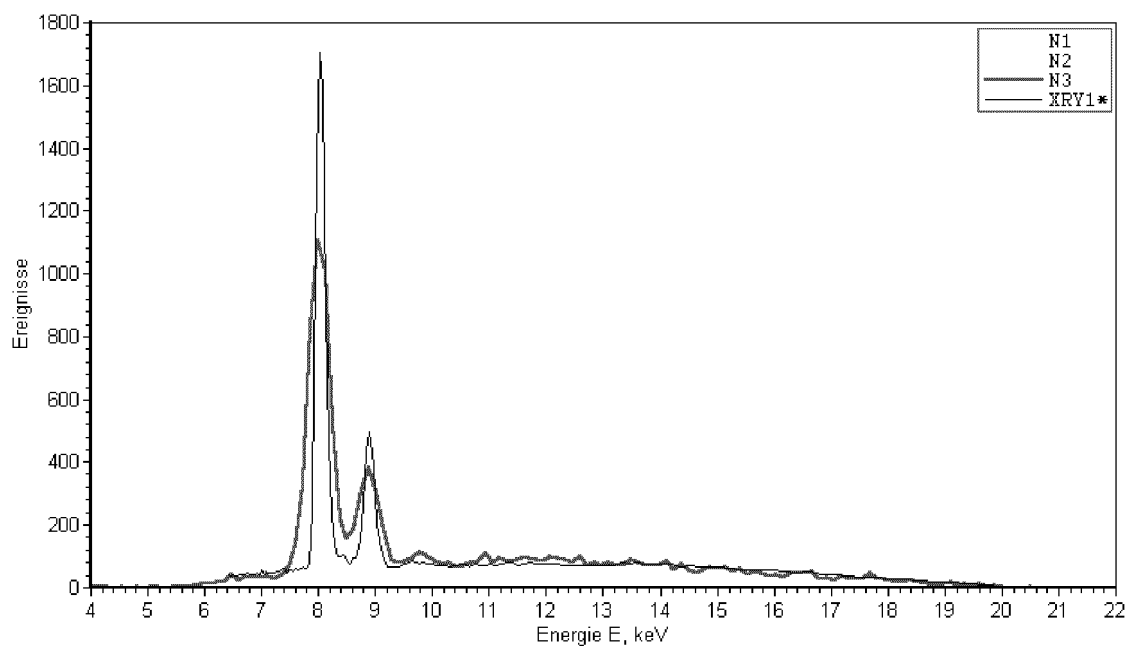


Fig. 8.5: Spektren einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 20$ kV: *N3* aufgenommen mit dem Halbleiterdetektor, Messdauer: 60 s; *XRY1* aufgenommen nach der Bragg-Methode, Messdauer: 1500 s.

Zum Öffnen dieser Datei in *VKA Lab* wird im Fenster *Öffnen* (Taste F3) der Dateityp *Röntgengerät Import (*.xry)* ausgewählt, um die mit dem Programm „Röntgengerät“ aufgenommenen Spektren einzublenden.

Die beiden Spektren sehen sehr ähnlich aus und weisen Bremsstrahlungskontinua mit $E_{max} = 20$ kV und die charakteristischen Kupfer-Linien auf. Es muss aber betont werden, dass zur Aufnahme nach der Bragg-Methode die *Welleneigenschaften* der Röntgenstrahlung ausgenutzt werden, der Halbleiterdetektor aber misst die Energien einzelner Photonen (*Teilcheneigenschaften*). Damit ist die komplexe Natur des Photons als Quantenobjekt bestätigt.

8.2.2 Abhängigkeit des Spektrums einer Röntgenröhre von Anodenspannung und Emissionsstrom

Lernziele

Die Schüler sollen:

1. die Zusammenhänge zwischen den Betriebsparametern der Röhre und der Form des Röntgenspektrums beobachten und beschreiben;
2. begründen, warum
 - die Anodenspannung die Grenzenergie der Bremsstrahlung festlegt,
 - die Intensität der Strahlung zum Anodenstrom proportional ist;
3. die Änderungen im Aussehen des Spektrums anhand von geänderten Betriebsbedingungen der Röntgenröhre voraussagen können.

Grundlagen

In der Röntgenröhre werden die aus der geheizten Kathode emittierten Elektronen zu der sich auf hohem positiven Potenzial befindenden Anode beschleunigt. Bei der Wechselwirkung von diesen hochenergetischen Elektronen mit den Atomen des Anodenmaterials entsteht Röntgenstrahlung in Form eines Kontinuums mit überlagerten Emissionslinien.

Der kontinuierliche Teil des Emissionsspektrums einer Röntgenröhre — das *Bremsstrahlungskontinuum* — ist durch die maximale Energie E_{max} (oder anders ausgedrückt, durch die minimale Wellenlänge λ_{min}) charakterisiert. Der Zusammenhang zwischen der Anodenspannung an der Röhre und der Grenzwellenlänge wurde 1915 von W. Duane und F.L. Hunt festgestellt (Duane-Huntsches Verschiebungsgesetz):

$$\lambda_{min} \sim \frac{1}{U_A}.$$

Dieser Ausdruck kann für die Frequenz der Strahlung umgeschrieben werden: $f_{max} \sim U_A$, oder, mit Hilfe der quantenphysikalischen Photonen-Vorstellung ($E_{ph} = h \cdot f$), in der Form

$$E_{max} = e \cdot U_A.$$

E_{max} ist die maximale Energie der Photonen, die bei der Wechselwirkung der hochenergetischen Elektronen mit der Anode in der Röntgenröhre entstehen. Photonen mit dieser Energie entstehen nur dann, wenn ein Elektron seine ganze Energie in einem einzigen Stoß abgibt. Ein solcher Prozess wird als *Umkehr des Photoeffekts* angesehen.

Viele Elektronen geben ihre kinetische Energie in kleineren Schritten ab, dabei werden Photonen mit $E < E_{max}$ ausgestrahlt. Das Bremspektrum verläuft somit unterhalb der Grenzenergie E_{max} kontinuierlich, wobei die Grenzenergie nur von der Anodenspannung und nicht vom Anodenmaterial oder dem Anodenstrom abhängt.

Die Intensität der Strahlung wird quantenphysikalisch durch die Anzahl der Photonen ausgedrückt. Für die Bremsstrahlung ist die Photonenanzahl zur Anzahl der anregenden Elektronen proportional, d.h. zum Emissionsstrom der Röntgenröhre. Die empirische Formel für die integrale Intensität des Bremsstrahlungskontinuums ist nach Beatty [7] mit

$$J_{int} \approx (1,4 \cdot 10^{-9} \frac{1}{V}) \cdot I_A \cdot Z \cdot U_A^2.$$

gegeben. Die Strahlungsstärke J_{int} ist hier in Watt, der Anodenstrom I_A in Ampere, die Hochspannung an der Röntgenröhre U_A in Volt angegeben, Z ist die Elementarordnungszahl des Anodenmaterials. Diese Formel bestätigt die Proportionalität der Intensität der Bremsstrahlung zum Emissionsstrom.

Ein bestimmter Teil der hochenergetischen Elektronen, die in einer Röntgenröhre zur Anode beschleunigt werden, schlagen Elektronen aus den inneren Schalen der Targetatome heraus. Das dabei ionisierte Atom hat dann eine Vakanz (Elektronenloch) in einer zuvor abgeschlossenen Unterschale. Diese Elektronenlöcher können mit Elektronen aus anderen schwächer durch den Atomkern gebundenen Schalen des Atoms aufgefüllt werden: z.B. kann die K -Schale dadurch geschlossen werden, dass ein Elektron aus der L -Schale dahin übergeht. Ein solcher Übergang ist mit der Emission eines Photons verbunden. Die dabei entstehende Strahlung des Targetatoms weist nur bestimmte diskrete Photonenenergien auf und ist für das Targetelement charakteristisch. Sie wird als *charakteristische Strahlung* bezeichnet.

Im Gegensatz zum Bremsstrahlungskontinuum werden die charakteristischen Linien des Anodenmaterials erst ab einer bestimmten Energie der ankommenden Elektronen angeregt. Es ist die Ionisationsenergie der K -Schale (bzw. L -, M - usw. Scha-

len) des Elements der Anode, als K -Absorptionskante bezeichnet. Für Molybdän beträgt diese Energie 19,98 keV: das Spektrum einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode weist bei Spannungen unter 20 kV *ausschließlich* das Bremsstrahlungskontinuum auf.

Benötigte Geräte

- Röntgengerät (LD-Kat.-Nr. 554811) und Röntgenröhre mit Molybdän-Anode (LD-Kat.-Nr. 55482)
- Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen mit Abschwächerblende (LD-Kat.-Nr. 559938)
- PC mit Windows 95/./XP und einer Soundkarte, vorzugsweise mit einem Beamer
- Software: *VKA Lab*

Aufbau und Vorbereitung des Experimentes

Die Röntgenröhre mit Kupfer-Anode wird unter Beachtung der Gebrauchsanweisung zur Röhre gegen die Röhre mit Molybdän-Anode getauscht.

Nach Ausbau des Targethalters und des Sensorhalters mit dem Geiger-Müller-Zählrohr wird der Sensorhalter mit dem Halbleiterdetektor auf dem Goniometer montiert und das Versorgungskabel und das Ausgangskabel an den Halbleiterdetektor angeschlossen. Weiterhin wird die Abschwächerblende auf den Kollimator gesetzt, der Sensorwinkel $\theta = 0^\circ$ (siehe Fig. 8.6) am Röntgengerät eingestellt und das Netzgerät des Detektors ans Netz angeschlossen. Nach ca. 1 Minute ist der Detektor betriebsbereit (die Leuchtdiode leuchtet „grün“).

Vor der Durchführung des Experimentes wird die nötige Detektor-Position ermittelt:

- am Röntgengerät wird die Anodenspannung auf $U_A = 20$ kV und der Emissionsstrom auf $I_A = 0,2$ mA eingestellt, die Hochspannung wird eingeschaltet;
- im Programm *VKA Lab* wird eine Spektromaufnahme gestartet (Messdauer ca. 100 s);

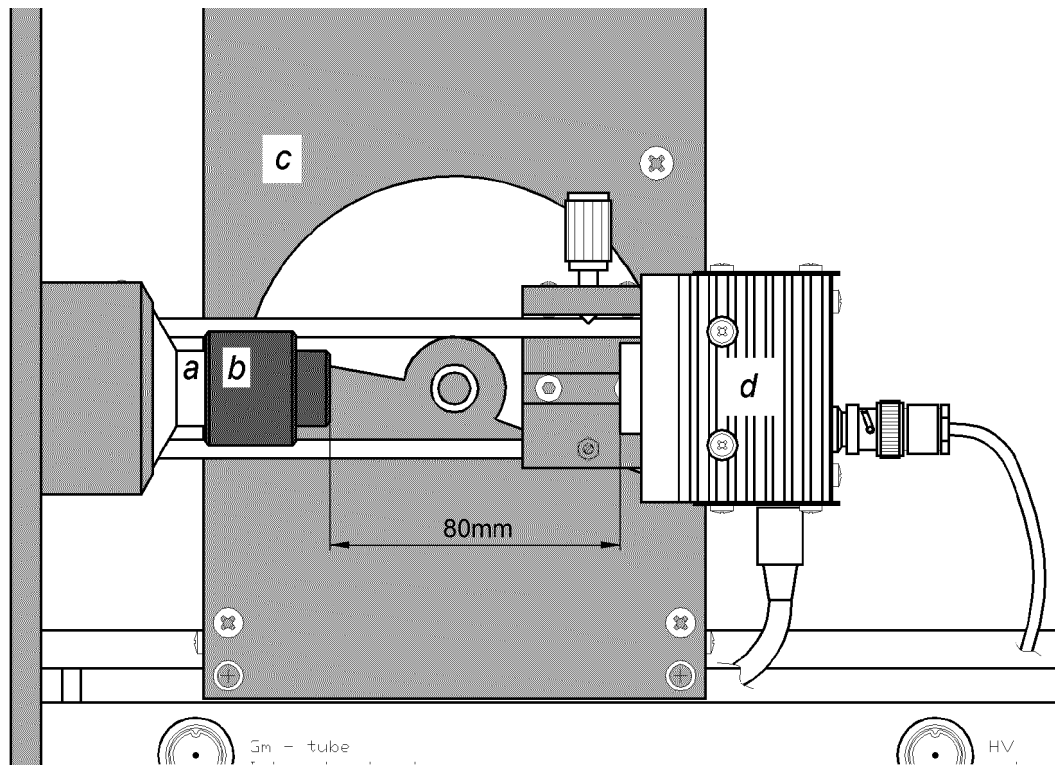




Fig. 8.6: Aufbau des Experimentes: *a* – Kollimator, *b* – Abschwächerblende, *c* – Goniometer, *d* – Detektor.

- beim Kontrollieren der in der Statuszeile angezeigten Zählrate wird der Sensorwinkel $\theta = \theta_1$ so eingestellt, dass die Zählrate dabei ca. 200 Ereignisse/s beträgt.

Wenn das eigentliche Experiment nicht direkt stattfinden muss, sollten der Detektor und die Hochspannung ausgeschaltet werden und ggf. der ermittelte Sensorwinkel θ_1 notiert werden.

Als Vorlage für die Einstellungen von *VKA Lab* wird die nach der Durchführung des Experimentes 8.2.1 gespeicherte Datei benutzt oder eine neue Vorlage vorbereitet. Für den zweiten Fall werden im Fenster *Einstellungen* (Taste F5) folgende Einstellungen vorgenommen:

- Registerkarte *Messung*: Standardwert der Messdauer auf 60 s eingestellt;
- Registerkarte *VKA*: Anzahl Kanäle auf 256, Begrenzung der Eingangsamplitude auf 1/4 der Skala eingestellt.

Im Fenster *Energiekalibrierung* (Button *Energie-Darstellung* ) werden die Werte für die Kalibrierung eingetragen und mit dem Button *OK*  bestätigt.

Durchführung

In *VKA Lab* wird die nach der Durchführung des Experimentes 8.2.1 gespeicherte Datei geladen. Sie dient zur Wiederholung des Unterrichtsstoffes und gleichzeitig als Vorlage für die weiteren Messungen.

Das Spektrum *N3* der Röntgenröhre mit Kupfer-Anode weist die hochenergetische Grenze des Bremsstrahlungskontinuums bei 20 keV und die charakteristischen Kupfer-Linien bei 8,1 keV und 8,9 keV auf. Die Frage wird gestellt, ob die Bremsstrahlung einer Röntgenröhre mit einer Anode aus einem anderen Material bei der selben Anodenspannung $U_A = 20$ kV die gleiche Grenzenergie $E_{max} = 20$ keV hat, was nach der quantenphysikalischen Beschreibung zu erwarten wäre.

Zur Prüfung wird ein Spektrum mit der Molybdän-Röntgenröhre aufgenommen. Dazu wird am Röntgengerät die Anodenspannung $U_A = 20$ kV, der Emissionsstrom $I_A = 0,2$ mA und der Sensorwinkel $\theta = \theta_1$ eingestellt und die Hochspannung eingeschaltet. In *VKA Lab* wird eine neue Messung mit der Taste F9 gestartet. Das Messbeispiel ist in Fig. 8.7 dargestellt (Spektrum *N4*).

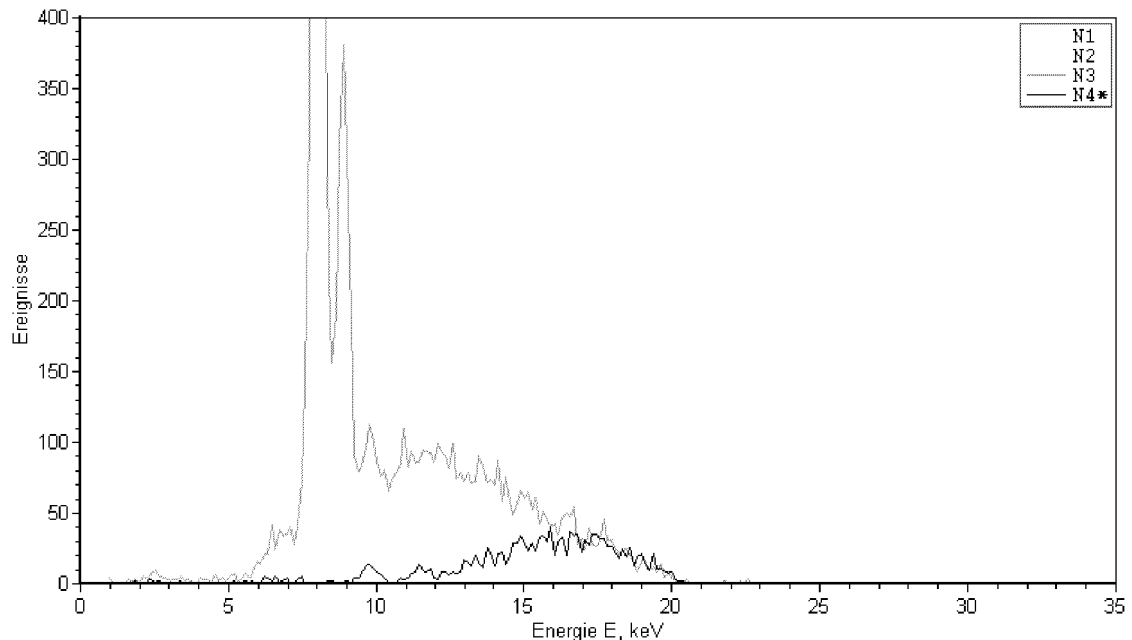


Fig. 8.7: Vergleich der Spektren von Röntgenröhren mit unterschiedlichen Anodenmaterialien: *N3* – Kupfer-Anode, *N4* – Molybdän-Anode. Anodenspannung jeweils $U_A = 20$ kV. Emissionsstrom $I_A = 0,2$ mA (*N4*). Messdauer: 60 s.

Wie erwartet, bleibt die Grenzenergie der Bremsstrahlung auch bei der Molybdän-Anode $E_{max} = e \cdot U_A = 20$ keV; das Spektrum weist jedoch keine ausgeprägten

charakteristischen Linien auf.

Als nächster Schritt wird ein Spektrum bei einer anderen Anodenspannung aufgenommen $U_A = 30$ kV, der Emissionsstrom bleibt dabei konstant. In diesem Spektrum sollte sich die Grenzenergie auf 30 keV verschieben.

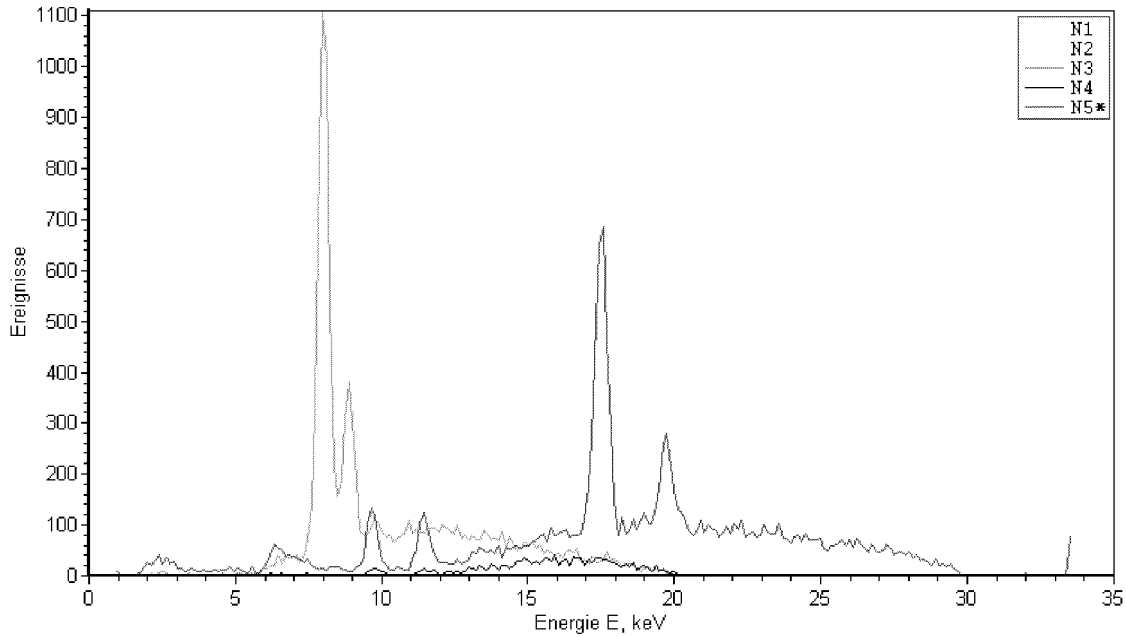


Fig. 8.8: Untersuchung des Spektrums einer Molybdän-Röntgenröhre in Abhängigkeit von der Anodenspannung U_A . $N5$: $U_A = 30$ kV, $N4$: $U_A = 20$ kV. Emissionsstrom: jeweils $I_A = 0,2$ mA. $N3$: Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode. Messdauer: 60 s.

Das Experiment zeigt (Messbeispiel in Fig. 8.8), dass tatsächlich $E_{max} = 30$ keV ist. Jetzt weist das Spektrum neben dem Kontinuum auch vier scharfe Peaks auf. Es sind die charakteristischen Linien von Molybdän ($E = 17,5$ keV und $19,6$ keV) und Gold ($E = 9,7$ keV und $11,4$ keV). Die Quellen der charakteristischen Linien sind unterschiedlich: die Molybdän-Strahlung kommt aus der Anode der Röntgenröhre, genauso wie das Kontinuum, die Gold-Linien sind die Fluoreszenz des Detektor-Gehäuses selbst und stammen nicht aus dem Röhrenspektrum.

Der Vergleich der Spektren $N4$ und $N5$ zeigt, dass zum Anregen der charakteristischen Linien eine bestimmte Energie überschritten werden muss: für Molybdän — $19,98$ keV — die Ionisationsenergie der K -Schale.

Im nächsten Schritt wird die Abhängigkeit des Spektrums vom Emissionsstrom I_A bei konstanter Anodenspannung U_A untersucht. Die einleitende Analyse macht

klar, dass die Grenzenergie ihren Wert behält, die Intensität der Strahlung — also die Anzahl der emittierten Photonen nach der Photonenhypothese — sollte aber mit dem Anodenstrom variieren.

Zur Prüfung wird der Emissionsstrom auf $I_A = 0,1$ mA reduziert und ein neues Spektrum aufgenommen ($N6$ im Messbeispiel, Fig. 8.9). Wie aus dem Messbeispiel ersichtlich ist, unterscheidet sich $N6$ von $N5$ nur in der Intensität, die proportional zum Emissionsstrom ungefähr zweimal kleiner geworden ist.

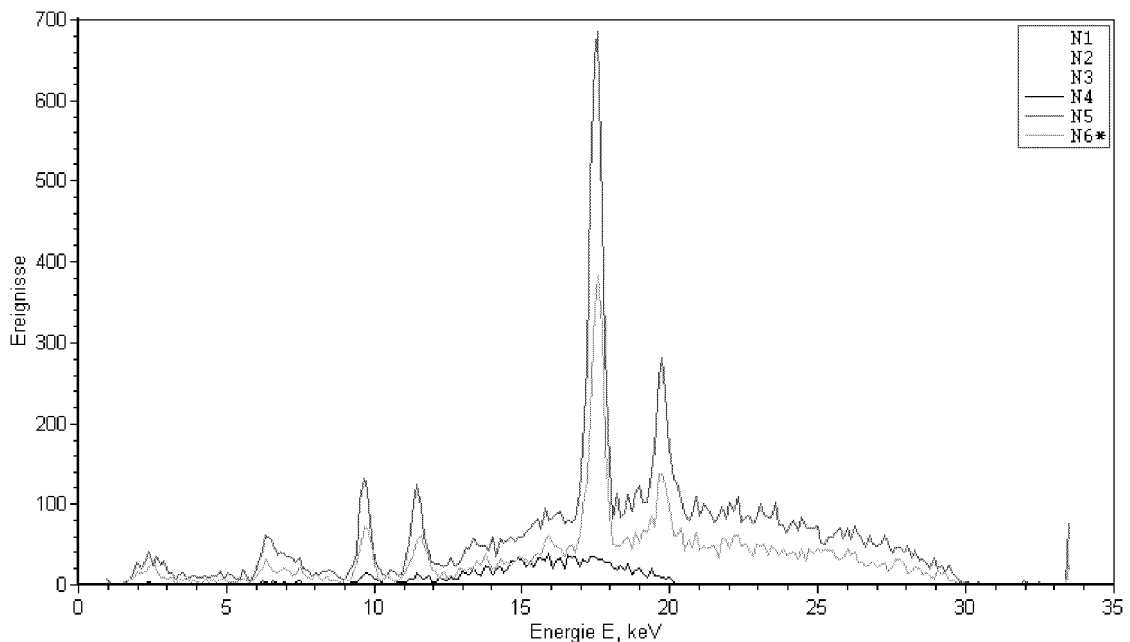


Fig. 8.9: Spektren einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode bei unterschiedlichen Anodenspannungen U_A und Emissionsströmen I_A . $N4$: $U_A = 20$ kV, $I_A = 0,2$ mA. $N5$: $U_A = 30$ kV, $I_A = 0,2$ mA. $N6$: $U_A = 30$ kV, $I_A = 0,1$ mA. Messdauer: 60 s.

Zeitangabe

Die gesamte Messzeit für die drei Aufnahmen beträgt 3 Minuten.

Kommentar

Durch Beginn des Experimentes mit den Ergebnissen des in der vorhergegangener Unterrichtsstunde durchgeführten Experimentes 8.2.1 wird die Wiederholung des Stoffes und die Aktivierung der Schüler realisiert. Die Wiederholung sollte aber

nicht den Charakter des bloßen Abfragens annehmen, sondern mehr in den Zusammenhang des Unterrichts einführen.

Es wird vorgeschlagen, die Durchführung dieses Demonstrationsexperimentes in Schritten zu gestalten, so dass die Schüler in den Prozess des Experimentierens möglichst einbezogen werden. Vor jeder nächsten Aufnahme können die Schüler gebeten werden, die Änderungen des Spektrums vorherzusagen — dafür wird von ihnen außer dem Grundwissen, das sie nach dem Experiment 8.2.1 haben, auch logisches Denken gefordert.

Wenn das Experiment 8.2.1 nicht durchgeführt wurde, kann die Abfolge der Aufnahmen geändert werden. Zum Beispiel kann mit der Aufnahme bei $U_A = 30$ kV, $I_A = 0,1$ mA begonnen werden, dann die Auswirkung der Stromerhöhung untersucht werden: Aufnahme bei $U_A = 30$ kV, $I_A = 0,2$ mA. Anschließend wird die Hochspannung reduziert und die erwartete Änderung der Grenzenergie der Bremsstrahlung beobachtet und auch der Wegfall der charakteristischen Linien notiert: Aufnahme $U_A = 20$ kV, $I_A = 0,2$ mA. Der Vergleich mit dem Spektrum einer Röntgenröhre mit Anode aus einem anderen Material (Kupfer) kann anhand des Spektrums *CuTube20kV.mca* aus der Spektrum-Datenbank (siehe Anhang) erfolgen.

8.2.3 Quantitative Demonstration des Compton-Effekts

Lernziele

Die Schüler sollen:

1. den Compton-Effekt mit der Annahme des Photonenimpulses beschreiben;
2. die Auswertung der aufgenommenen Spektren der Compton-Streuung durchführen;
3. in der Lage sein, die Abhängigkeit der Energie der unelastisch-gestreuten Photonen vom Streuwinkel zu skizzieren.

Grundlagen

Beim Durchgang durch Materie wird ein bestimmter Teil der Röntgenstrahlung gestreut. Im klassischen Wellenbild kann die Streuung wie folgt beschrieben werden. Unter dem Einfluss der elektrischen Feldkomponente der Strahlung beginnen die elastisch gebundenen Elektronen im Atom zu oszillieren und strahlen ab. Diese Abstrahlung erfolgt in einem weiten Winkelbereich, ihre Frequenz stimmt mit der Frequenz der einfallenden Welle überein. Da dabei keine Frequenzänderung geschieht, wird diese Streuung als *elastisch* bezeichnet.

Der amerikanische Physiker A.H. Compton beobachtete 1923 eine Verminderung der Frequenz der Strahlung bei der Streuung. Dieses Ergebnis kann nicht mit Hilfe der klassischen Physik verstanden werden — zur theoretischen Erklärung der *unelastischen* Streuung muss der ganze Streuprozess aus quantenphysikalischer Sicht betrachtet werden.

Es wird angenommen, dass die streuenden Elektronen frei sind, was für die äußeren Elektronenschalen bei Strahlungsenergien im Bereich der Röntgenstrahlen eine gute Näherung ist. Die Strahlung wird im Korpuskularbild behandelt. Somit wird der Streuprozess wie folgt beschrieben: ein Photon der Frequenz ν , also mit der Energie $E = h\nu$ und dem Impuls $h\nu/c$, trifft auf ein ruhendes freies Elektron der Masse m , das nach dem Stoß die Geschwindigkeit v hat. Das Photon wird dabei um den Winkel ϑ gestreut und hat die Frequenz $\nu' < \nu$ ($E' < E$), das Elektron

bewegt sich in die Richtung unter dem Winkel φ zur Richtung des einfallenden Photons (Fig. 8.10). Für diesen Stoßvorgang wird die Erhaltung von Energie und Impuls verlangt, wie bei dem elastischen Stoß zweier klassischer Teilchen.

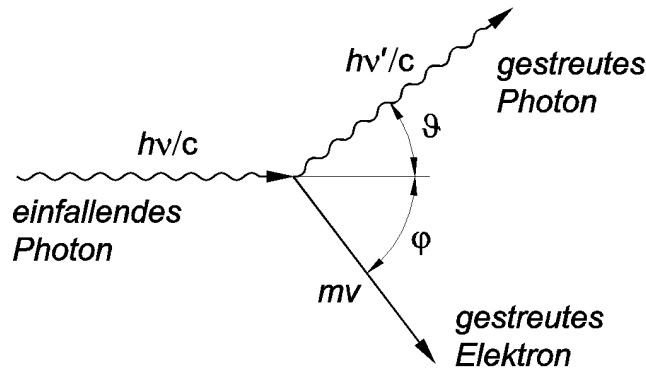


Fig. 8.10: Schematische Darstellung der Compton-Streuung.

Aus den Gleichungen für die Energie- und Impulserhaltung unter Berücksichtigung der relativistischen Ansätze wird die Abhängigkeit der Energie E' der gestreuten Photonen vom Streuwinkel abgeleitet (vgl. Abschnitt 3.3.3):

$$E' = \frac{E}{1 + \frac{E}{m_e c^2} (1 - \cos \vartheta)}. \quad (8.1)$$

Dabei ist E die Energie des primären Photons, $m_e c^2$ ist die Ruheenergie des Elektrons und ϑ ist der Streuwinkel.

Es muss hier aber betont werden, dass der Compton-Effekt kein „Nachweis“ der korpuskularen Natur der Strahlung darstellt, er kann auch ohne die Annahme des Photons erklärt werden, allerdings wieder nur quantenphysikalisch (vgl. z.B. [33]).

Compton setzte in seinen Untersuchungen eine Röntgenröhre mit Molybdän-Anode als Strahlungsquelle ein. Nach dem Durchgang durch ein Zirkon-Filter wurde die (*primäre*) Strahlung monochromatisiert — ihr Spektrum besteht dann im wesentlichen nur aus der $K\alpha$ -Linie von Molybdän. Nach der Streuung an einem Graphit-Target wurde das Spektrum für unterschiedliche Streuwinkel mit Hilfe eines Bragg-Spektrometers und einer Ionisationskammer aufgenommen [15]. Die Streuspektren wiesen neben der elastisch-gestreuten auch die Strahlung mit verminderter Frequenz auf, wobei die Frequenzänderung vom Winkel abhing. In weiteren Experimenten hat Compton auch festgestellt, dass das Material des Streukörpers keinen

Einfluß auf die Frequenzverschiebung hat.

Im vorliegenden Experiment werden die Untersuchungen von A.H. Compton wiederholt und ihre Ergebnisse mit der theoretischen Abhängigkeit aus Gl. (8.1) verglichen. Zur Spektromaufnahme wird der energieauflösende Halbleiterdetektor eingesetzt.

Benötigte Geräte

- Röntgengerät (LD-Kat.-Nr. 554811)
- Kreis-Kollimator
- Plexiglas-Streukörper
- Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen mit Abschwächerblende (LD-Kat.-Nr. 559938)
- PC mit Windows 95/./XP und einer Soundkarte, vorzugsweise mit einem Beamer
- Software: *VKA Lab*

Aufbau und Vorbereitung des Experimentes

Zunächst wird der Sensorhalter mit dem Halbleiterdetektor anstelle des Sensorhalters mit dem Geiger-Müller-Zählrohr auf dem Goniometer montiert und das Versorgungskabel sowie das Ausgangskabel an den Halbleiterdetektor angeschlossen. Der Targethalter mit dem Targettisch und dem Plexiglas-Streukörper werden für die Montage während des Experimentes bereit gehalten.

In die Kollimatoraufnahme wird der Kreis-Kollimator eingebaut, darauf werden die Abschwächerblende und der Zirkon-Filter (aus dem Lieferumfang des Röntgengeräts) gesetzt (siehe Fig. 8.11). Am Röntgengerät wird der Sensorwinkel $\theta = 0^\circ$ eingestellt. Das Netzgerät des Detektors wird an Netz angeschlossen, und nach ca. 1 Minute ist der Detektor betriebsbereit (die Leuchtdiode leuchtet „grün“).

Vor der Durchführung des Experimentes wird die für die Messung des Primärstrahls nötige Detektor-Position ermittelt:

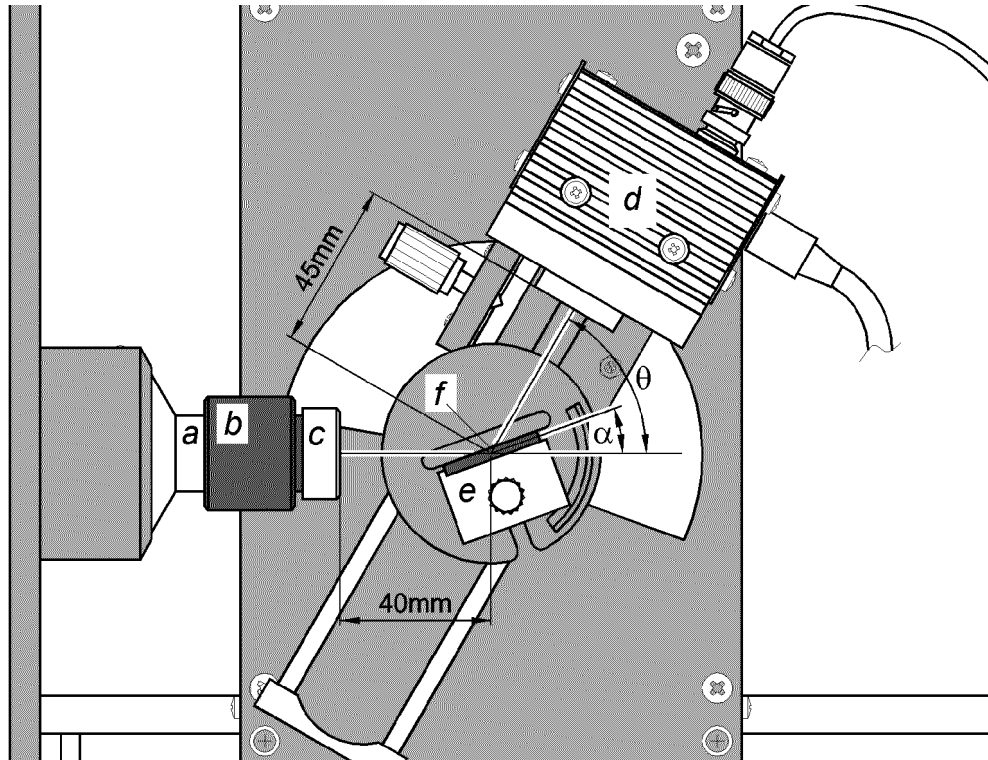



Fig. 8.11: Aufbau des Experimentes: *a* – Kreiskollimator, *b* – Abschwächerblende, *c* – Zirkon-Filter, *d* – Detektor, *e* – Targettisch, *f* – Streukörper.

- am Röntgengerät wird die Anodenspannung auf $U_A = 35 \text{ kV}$ und der Emissionsstrom auf $I_A = 1,0 \text{ mA}$ eingestellt, die Hochspannung wird eingeschaltet;
- im Programm *VKA Lab* wird eine Spektromaufnahme gestartet (Messdauer ca. 100 s);
- beim Kontrollieren der in der Statuszeile angezeigten Zählrate wird der Sensorwinkel $\theta = \theta_1$ so eingestellt, dass die Zählrate dabei ca. 50-100 Ereignisse/s beträgt.

Es sollen folgende Einstellungen in *VKA Lab* gemacht werden und ggf. als Vorlage gespeichert werden: Im Fenster *Einstellungen* (Taste F5)



- Registerkarte *Messung*: Standardwert der Messdauer auf 60 s eingestellt;
- Registerkarte *VKA*: Anzahl Kanäle auf 256, Begrenzung der Eingangsamplitude auf 1/4 der Skala eingestellt.

Zur Ermittlung der Energiekalibrierung wird bei dem eingestellten Sensorwinkel θ_1 die Hochspannung am Röntgengerät eingeschaltet und eine Messung in *VKA Lab*

gestartet. Im Fenster *Energiekalibrierung* (Button *Energie-Darstellung* ) werden die Energie- und die aus dem Spektrum entnommene Kanal-Werte für die Gold $L\alpha$ -Linie (9,71 keV) und die Molybdän $K\alpha$ -Linie (17,48 keV) eingetragen und mit dem Button *OK* bestätigt.

Wenn das eigentliche Experiment nicht direkt stattfinden muss, sollten der Detektor und die Hochspannung ausgeschaltet werden und ggf. der ermittelte Sensorwinkel θ_1 notiert werden.

Durchführung

Es wird zuerst das Spektrum des Primärstrahls aufgenommen. Dafür wird am Röntengerät der Sensorwinkel $\theta = \theta_1$ eingestellt und die Hochspannung eingeschaltet. Die Messung in *VKA Lab* wird mit der Taste F9 oder dem Button *Start*  gestartet. Nach der Messung (Button *Start* geht hoch) wird das Ergebnis mit dem Button *Zoom Alles*  auf den vollen Bildschirm skaliert.

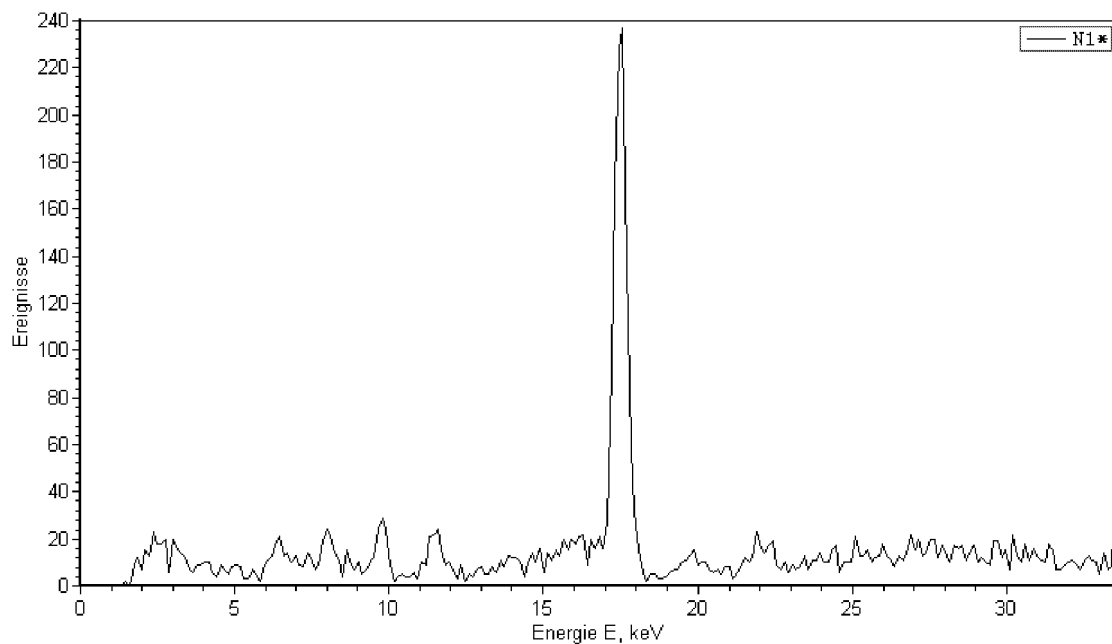


Fig. 8.12: Spektrum der primären Strahlung. Quelle: Röntgenröhre mit Molybdän-Anode, monochromatisiert mit Zirkon-Filter. Der Peak bei $E = 17,5$ keV ist die $K\alpha$ -Linie von Molybdän. Die $K\beta$ -Linie von Molybdän ($E = 19,6$ keV) ist durch den Zirkon-Filter stark abgeschwächt. Messdauer: 60 s.

Das Primär-Spektrum (vgl. Messbeispiel in Fig. 8.12) weist bei $E = 17,5$ keV die $K\alpha$ -Linie von Molybdän auf. Die $K\beta$ -Linie (bei $E = 19,6$ keV) und das Brems-

strahlungskontinuum sind durch den in den Strahlengang eingesetzten Zirkon-Filter stark abgeschwächt. Somit hat das Spektrum eine ganz einfache Struktur, die zur Übersichtlichkeit der Compton-Spektren beiträgt.

Im nächsten Schritt werden die Streuspektren aufgenommen. Da die gestreute Strahlung eine viel kleinere Intensität als die primäre hat, wird zur Aufnahme der Compton-Spektren die Abschwächer-Blende vom Kollimator entfernt und der Zirkon-Filter direkt auf den Kollimator eingesetzt. Der Targethalter mit dem Plexiglas-Streukörper wird auf dem Goniometer montiert. In *VKA Lab* wird der in der X-Achse dargestellte Bereich zur Übersichtlichkeit auf ca. 14 keV bis 20 keV verkleinert (durch Rechtsklick auf die X-Achse oder mit der Tastenkombination *Alt+X*).

Der Targetwinkel (Ausrichtung des Streukörpers) wird auf 30° und der Sensorwinkel auf 45° eingestellt. Am Röntgengerät wird die Hochspannung eingeschaltet und in *VKA Lab* ein neues Spektrum aufgenommen. Anschließend werden bei konstantem Targetwinkel die Messungen für die Sensorwinkel 90° und 135° durchgeführt (vgl. Messbeispiel Fig. 8.13).

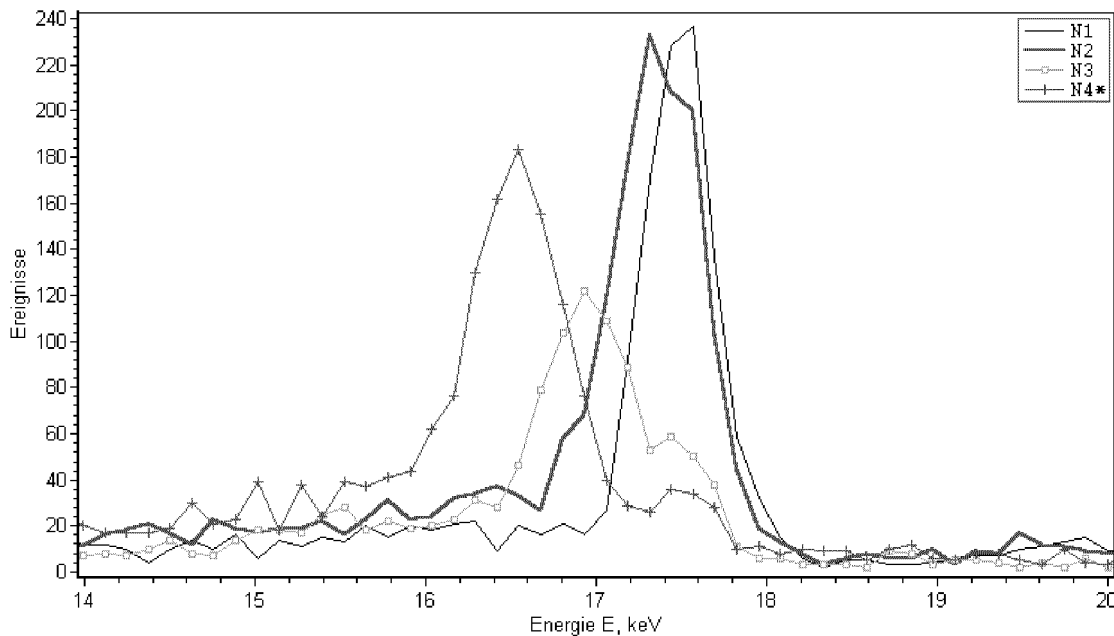



Fig. 8.13: Spektren der Primärstrahlung ($N1$) und der am Plexiglas-Streukörper unelastisch (Compton-) gestreuten Strahlung: $N2$ für den Streuwinkel 45° , $N3$ für 90° , $N4$ für 135° . In den Spektren $N3$ und $N4$ ist bei $E = 17,5$ keV auch die elastisch (Rayleigh-) gestreute Strahlung sichtbar. Messdauer: 60 s pro Spektrum.

Auswertung

Eine qualitative Aussage über das Verhalten der Energie der Compton-gestreuten Photonen in Abhängigkeit vom Streuwinkel kann direkt während der Aufnahmen formuliert werden: die Energie der Streustrahlung vermindert sich mit wachsendem Winkel.

Zur quantitativen Auswertung werden die Energien der gestreuten Strahlung für die unterschiedlichen Winkel ermittelt. Es bieten sich zwei Varianten der Vermessung von Peakpositionen an: eine einfache schnellere — durch Ablesen der Cursor-Koordinaten in der Statuszeile von *VKA Lab* während der Cursor nach „Augenmaß“ in der Mitte des Peaks positioniert ist — und eine genauere aber etwas längere Variante — durch Anpassen von Gauss-Funktionen an die Peaks. Es ist erwähnenswert, dass die Auflösung des Detektors ausreichend ist, um eine gute Genauigkeit auch bei dem schnelleren Verfahren zu bekommen.

Um die Gauss-Anpassung in *VKA Lab* durchzuführen, wird zuerst das anzupassende Spektrum durch einen Doppelklick auf sein Symbol in der Legende aktiv gesetzt (es ist dann mit „*“ markiert). Danach wird die Anpassung mit dem Button *Gauss-Fit*  gestartet, die Peakposition, der Anfang und das Ende des Fit-Bereiches werden angeklickt (die durchzuführende Operationen werden in der Statuszeile angezeigt). Das Programm erzeugt dann eine angepasste Gauss-Kurve, deren Mitte als μ im Fenster *Spektrum Einstellungen* abgelesen werden kann (das Fenster ist mit einem Rechtsklick auf das Symbol vom *Fit* zu aktivieren).

Die ermittelten Werte werden in einer Tabelle zusammengefasst (Tab. 8.1 für das Messbeispiel) und in graphischer Form zum Vergleich mit der theoretischen Kurve dargestellt (Fig. 8.14). Die theoretischen Werte in der Tab. 8.1 und die theoretische Kurve in der Fig. 8.14 sind nach der Formel (8.1) berechnet.

Bei großen Streuwinkeln ist auch ein kleinerer Peak bei der Energie der Primärstrahlung $E = 17,5$ keV zu sehen (vgl. *N3* und *N4* im Messbeispiel Fig. 8.13). Dieser Peak wird von den elastisch-gestreuten Photonen verursacht (Rayleigh-Streuung). Die Verhältnis der Compton- zu den Rayleigh-gestreuten Anteilen $J_{Compton}/J_{Rayleigh}$ fällt mit der Ordnungszahl des Elements: sie ist $J_{Compton}/J_{Rayleigh} \approx 5,5$ für ${}_6C$ (Plexiglas), ungefähr 0,5 für ${}_{26}Fe$ und ungefähr 0 für ${}_{82}Pb$ [1].

Tab. 8.1: Gemessene Energien der unelastisch gestreuten Photonen E'_{exper} und ihre theoretischen Werte E'_{theor} für die unterschiedliche Streuwinkel.

Spektrum	Streuwinkel	E'_{exper} , keV	E'_{theor} , keV
N1	0°	17,5	17,5
N2	45°	17,4	17,3
N3	90°	16,9	16,9
N4	135°	16,5	16,5

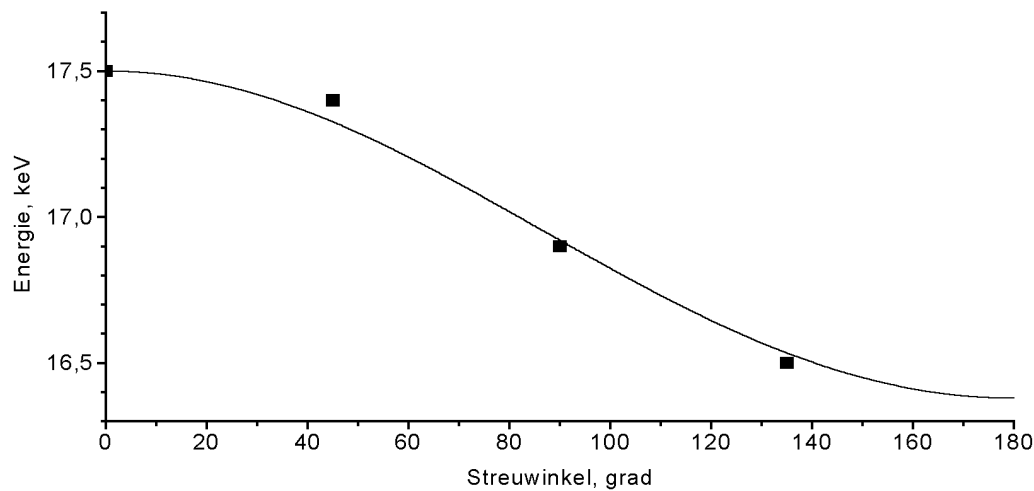


Fig. 8.14: Änderung der Energie der unelastisch-gestreuten Photonen in Abhängigkeit vom Streuwinkel. Rechtecke: experimentelle Werte; Kurve: theoretische Abhängigkeit.

Zeitangaben

Die gesamte Messzeit für die vier Aufnahmen beträgt 4 Minuten. Die Montage des Targethalters nach der ersten Spektromaufnahme nimmt zusätzlich ca. 1 min in Anspruch.

Kommentar

Der Compton-Effekt wird im Physikunterricht damit erklärt, dass der Energiesatz und der Impulsatz sowie die relativistischen Ansätze für Impuls und Energie auf die Wechselwirkung des Röntgenquants (im Teilchenbild) mit dem freien Elektron angewendet werden. Somit dient die experimentelle Prüfung des Effekts gleichzeitig

als Bestätigung für die Gültigkeit der gemachten Annahmen.

Aus dem Grund wird vorgeschlagen, die Unterrichtsstunde nach dem Schema:

$\boxed{\textit{theoretische Annahmen}} \rightarrow \boxed{\textit{Entwicklung des theoretischen Modells}} \rightarrow \boxed{\textit{Experiment}}$
 $\rightarrow \boxed{\textit{Bestätigung der Annahmen}}$ zu gestalten.

Die Schüler haben damit die nötigen theoretischen Grundlagen, um die Auswertung des Experimentes selbständig durchzuführen, die in diesem Fall als Hausaufgabe erfolgen kann. Die Schüler sollten die gerade vermessenen Energien der Compton-Peaks in ihren Heften notieren und zuhause eine Grafik aufzeichnen, die sowohl die experimentellen als auch die von den Schülern berechneten theoretischen Werte darstellt.

Alternativ können vom Lehrer die ausgedruckten Spektren aus der Spektrum-Datenbank an die Schüler verteilt werden, so dass sie zuhause die Peak-Positionen selbständig ermitteln. Das Beispiel der aus *VKA Lab* ausgedruckten Datenbank-Datei *ComptonDemo.mca* ist in Fig. 8.15 dargestellt.

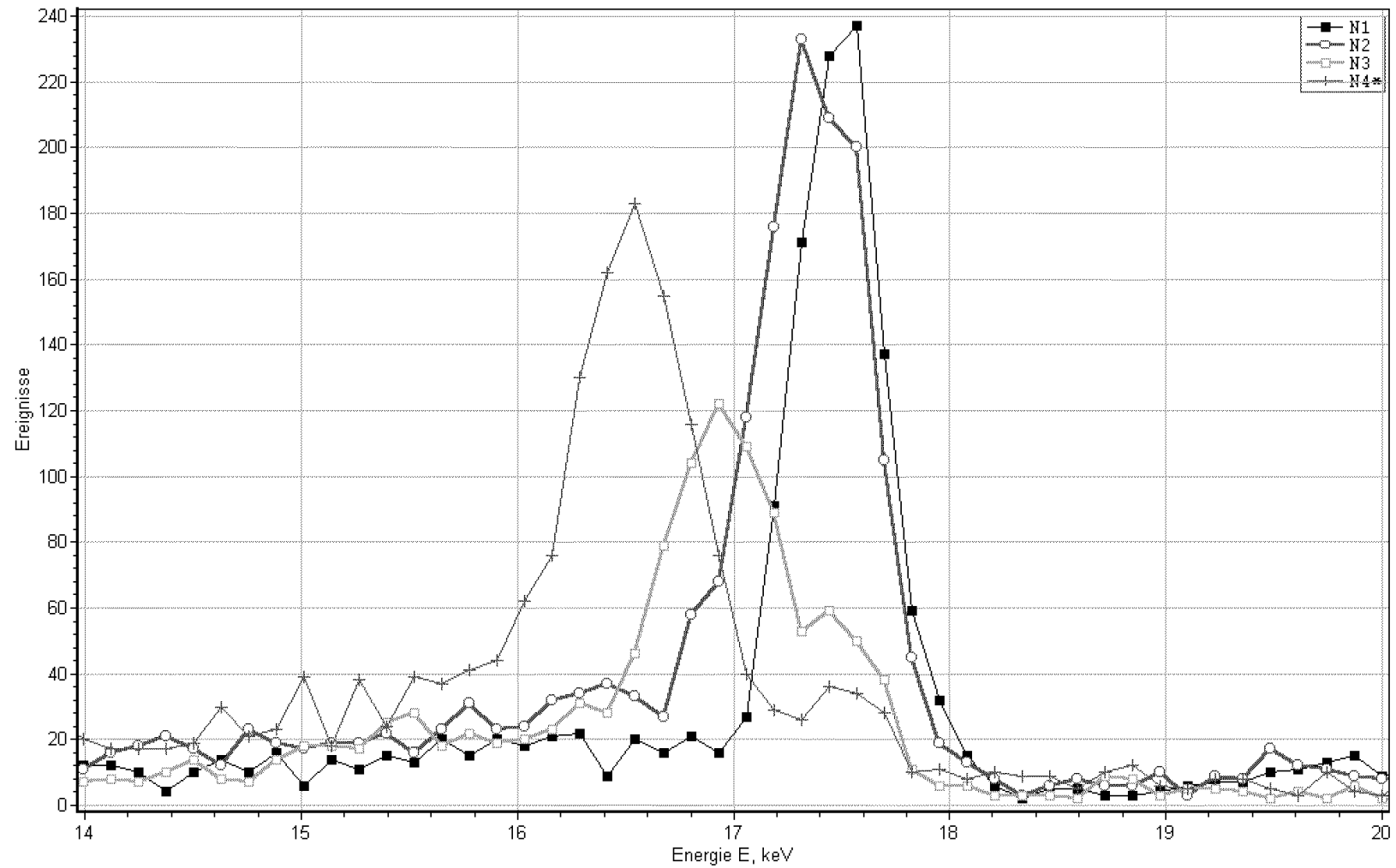


Fig. 8.15: Aus VKA Lab ausgedruckte Datenbank-Datei *ComptonDemo.mca*. Die Grafik kann kopiert und an die Schüler zur Auswertung verteilt werden.

8.3 Demonstrationsexperimente zur Atomphysik

8.3.1 Überprüfung des Moseley-Gesetzes

Lernziele

Die Schüler sollen:

1. unterschiedliche Röntgenfluoreszenz-Spektren beobachten und interpretieren;
2. den Zusammenhang zwischen der Ordnungszahl des Elementes und der Energie seiner charakteristischen Linien erklären;
3. die Auswertung der aufgenommenen charakteristischen Spektren durchführen.

Grundlagen

Beim Betrieb einer Röntgenröhre wird neben dem Bremsstrahlungskontinuum auch die charakteristische Strahlung ausgesendet (vgl. Experiment 8.2.2). Im Gegensatz zur Bremsstrahlung weist sie keine kontinuierliche Verteilung der Strahlungsstärke im Spektrum auf — sie wird in Linien emittiert.

Die charakteristische Strahlung entsteht, wenn die Elektronen, die in einer Röntgenröhre zur Anode beschleunigt werden, die Elektronen aus den inneren Schalen der Atome des Anodenmaterials herausschlagen. Das dabei ionisierte Atom hat dann eine Vakanz (Elektronenloch) in einer zuvor abgeschlossenen Unterschale. Diese Elektronenlöcher können mit Elektronen aus anderen, schwächer durch den Atomkern gebundenen Schalen des Atoms aufgefüllt werden: z.B. kann die *K*-Schale dadurch geschlossen werden, dass ein Elektron aus der *L*-Schale dahin übergeht. Ein solcher Übergang ist mit der Emission eines Photons verbunden. Diese Strahlung weist nur bestimmte diskrete Photonenenergien auf und ist für jedes chemische Element charakteristisch.

Außer der oben beschriebenen *primären* Anregung durch Elektronen in einer Röntgenröhre können die charakteristischen Linien auch bei der Bestrahlung eines Targets mit Photonen hoher Energie angeregt werden. Dabei wird die Ionisation des Targetatoms durch die Absorption eines Röntgenphotons verursacht. Dieser Prozess der *sekundären* Anregung wird auch als *Röntgenfluoreszenz* bezeichnet.

Das Photon wird dabei *vollständig* absorbiert und seine Energie in die Ionisationsenergie des Atoms und die kinetische Energie des Photoelektrons aufgeteilt. Da die anregenden Photonen nur in einem Schritt absorbiert werden, besteht das Röntgenfluoreszenzspektrum *ausschließlich aus charakteristischen Linien* und weist keinen kontinuierlichen Anteil auf.

Um die Energien der charakteristischen Linien berechnen zu können, müssen die Energieniveaus im Atom (Bindungsenergien der Elektronenschalen) bekannt sein. Diese können wasserstoffähnlich behandelt werden, indem statt der realen Kernladung Z eine effektive Kernladung $Z_{eff} = Z - \sigma$ mit einer Abschirmkonstanten σ eingesetzt wird. Der Energiezustand eines Elektrons einer inneren Schale wird dann approximativ durch eine modifizierte Bohrsche Formel mit der Hauptquantenzahl n und $Z_{eff} = Z - \sigma$ dargestellt:

$$E_n = -Rhc \frac{(Z - \sigma)^2}{n^2},$$

hierbei ist R die Rydberg-Konstante, $R = m_e e^4 / 8 \varepsilon_0^2 h^3 c$. Die Abschirmkonstante σ hängt im allgemeinen Fall von n und Z ab.

Für die Energie der charakteristischen Linie $E = E_2 - E_1$, die bei dem Übergang $n_2 \rightarrow n_1$ ($n_2 > n_1$) emittiert wird, gilt

$$E = Rhc (Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

oder

$$\sqrt{\frac{E}{Rhc}} = (Z - \sigma) \sqrt{\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}}. \quad (8.2)$$

Diese Formel wird als *Moseleysche Gesetz* bezeichnet. Danach hängt die Quadratwurzel der Energie der charakteristischen Linien einer Serie linear von der Ordnungszahl Z ab.

Die Übergänge von $n_2 = 2$ nach $n_1 = 1$ entsprechen den $K\alpha$ -Linien. Für diese Linien ist bei leichteren Elementen ($Z < 30$) die Abschirmkonstante $\sigma \approx 1$ und somit:

$$\sqrt{\frac{E}{Rhc}} = (Z - 1) \sqrt{\frac{3}{4}}. \quad (8.3)$$

Dabei ist der Zahlenwert von $Ry = Rhc \approx 2,18 \cdot 10^{-18} \text{ J} \approx 13,6 \text{ eV}$.

Mit wachsender Ordnungszahl wird σ allerdings kleiner, d.h. bei größeren Z überwiegt der Einfluss der äußeren Elektronen die Abschirmung durch die inneren.

Benötigte Geräte

- Röntengerät (LD-Kat.-Nr. 554811) und Röntgenröhre mit Molybdän-Anode (LD-Kat.-Nr. 55482) oder Kupfer-Anode (LD-Kat.-Nr. 55485)
- Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen (LD-Kat.-Nr. 559938)
- Proben für die Aufnahme der charakteristischen Spektren von Eisen, Zink, Molybdän und Silber
- PC mit Windows 95/./XP und einer Soundkarte, vorzugsweise mit einem Beamer
- Software: *VKA Lab*

Aufbau und Vorbereitung des Experimentes

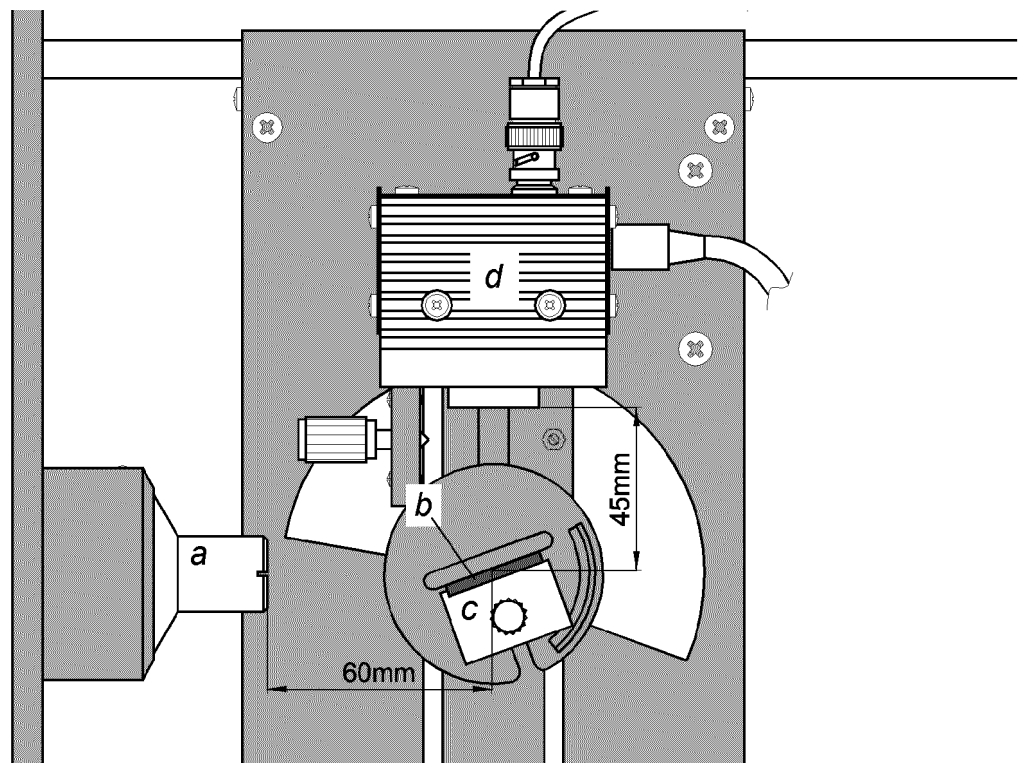



Fig. 8.16: Aufbau des Experimentes: *a* – Kollimator, *b* – Probe, *c* – Targettisch, *d* – Detektor.

Nach Ausbau des Targethalters und des Sensorhalters mit dem Geiger-Müller-Zählrohr wird der Sensorhalter mit dem Halbleiterdetektor auf dem Goniometer

montiert und das Versorgungskabel und das Ausgangskabel an den Halbleiterdetektor angeschlossen. Weiterhin wird der Targethalter mit dem Targettisch auf dem Goniometer montiert und der Kollimator in die Kollimatoraufnahme eingebaut (siehe Fig. 8.16). Am Röntgengerät wird die Hochspannung $U_A = 30$ kV, der Emissionsstrom $I_A = 0,25$ mA, der Sensorwinkel $\theta = 90^\circ$ und der Targetwinkel $\alpha = 20^\circ$ eingestellt. Das Netzgerät des Detektors wird ans Netz angeschlossen, und nach ca. 1 Minute ist der Detektor betriebsbereit (die Leuchtdiode leuchtet „grün“).

Als Vorlage für die Einstellungen von *VKA Lab* wird die nach der Durchführung des Experimentes 8.2.2 gespeicherte Datei benutzt oder die Datei aus der Spektren-Datenbank – *MoTube30kV_60s.mca* – genommen². Alternativ kann eine neue Vorlage vorbereitet werden. Dafür werden im Fenster *Einstellungen* (Taste F5) folgende Einstellungen vorgenommen:

- Registerkarte *Messung*: Standardwert der Messdauer auf 60 s eingestellt;
- Registerkarte *VKA*: Anzahl Kanäle auf 256, Begrenzung der Eingangsamplitude auf 1/4 der Skala eingestellt.

Im Fenster *Energiekalibrierung* (Button *Energie-Darstellung* ) werden die Werte für die Kalibrierung eingetragen und mit dem Button *OK* bestätigt.

Durchführung

In *VKA Lab* wird die Datei *MoTube30kV_60s.mca* aus der Spektren-Datenbank geladen. Sie stellt das Spektrum der Molybdän-Röntgenröhre dar, das den Schülern aus dem Experiment 8.2.2 bekannt ist und das mit dem anregenden *Primärspektrum* des vorliegenden Experimentes übereinstimmt. Diese Datei dient auch als Vorlage für die weiteren Messungen.

Das Primärspektrum (*N1* in Fig. 8.17) weist das Kontinuum und vier scharfe Peaks auf. Die Peaks bei $E = 17,5$ keV und 19,6 keV sind die charakteristischen $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien von Molybdän, die durch Aufprall von Elektronen auf die Molybdän-Anode der Röntgenröhre angeregt werden (*primäre Anregung*). Die Peaks bei $E =$

² Die Datei *MoTube30kV_60s.mca* aus der Spektren-Datenbank wurde mit den gleichen Einstellungen aufgenommen, wie das Spektrum *N5* aus dem Experiment 8.2.2. Sie stellt ein Spektrum der Molybdän-Röntgenröhre dar, das bei $U_A = 30$ kV, $I_A = 0,2$ mA und mit der Messdauer 60 s aufgenommen wurde.

9,7 keV und 11,4 keV sind die $L\alpha$ - und $L\beta$ -Linien von Gold und stammen nicht aus dem Spektrum der Röntgenröhre, sondern aus dem Detektor-Gehäuse. Diese Linien stellen die Fluoreszenz der Gold-beschichteten Unterlage des Detektor-Kristalls dar und werden von der einfallenden Röntgenstrahlung angeregt.

Es stellt sich die Frage, ob die Röntgenfluoreszenz ein „universeller“ Prozess ist und was zu erwarten wäre, wenn man andere Objekte mit dem Röntgenlicht bestrahlt. Um an die Antwort näher zu kommen, werden Spektren der Röntgenstrahlung aufgenommen, die aus der dem Röntgenlicht ausgesetzten Probe senkrecht zum Primärstrahl ausgesendet wird.

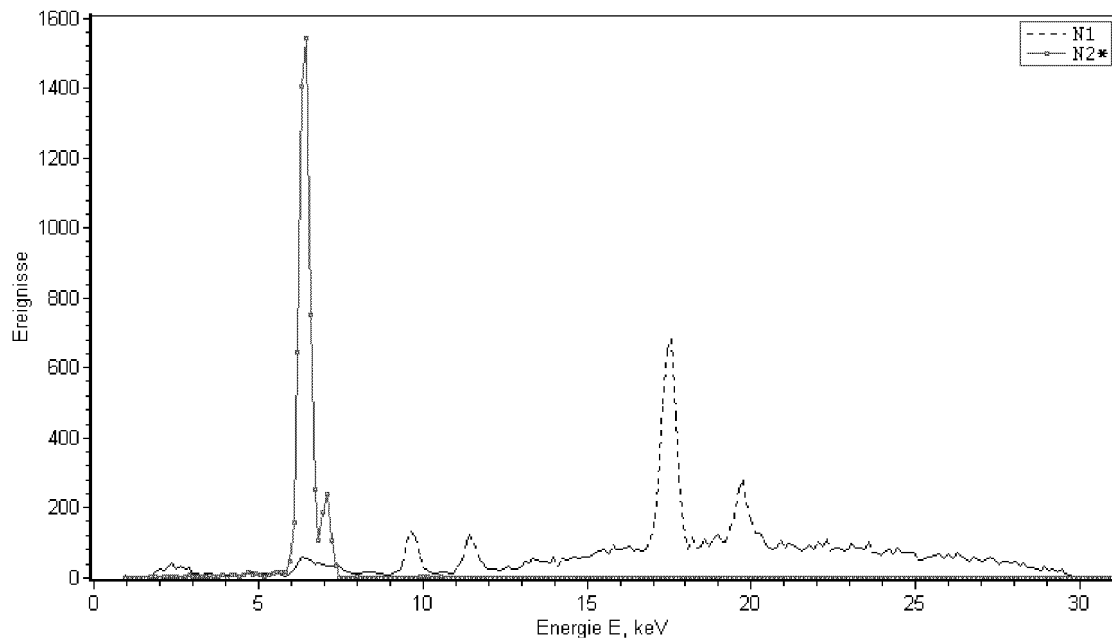




Fig. 8.17: Das Primärspektrum einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode $N1$ (bei $U_A = 30$ kV, $I_A = 0,25$ mA) und das damit angeregte Röntgenfluoreszenz-Spektrum von Eisen ($N2$). Die Peaks in $N2$ bei $E = 6,4$ keV und $7,1$ keV kommen nicht aus dem Primärspektrum — sie sind die charakteristischen $K\alpha$ - bzw. $K\beta$ -Linien von Eisen. Messdauer: 60 s pro Spektrum.

Zuerst wird eine Eisen-Probe (Stahlplatte) auf dem Targethalter platziert und nach Schließen der Glastür die Hochspannung am Röntgengerät eingeschaltet. Eine Messung in *VKA Lab* wird mit der Taste F9 oder dem Button *Start*  gestartet. Nach der Messung (Button *Start* geht hoch) wird das Ergebnis mit dem Button *Zoom Alles*  auf den vollen Bildschirm skaliert (vgl. Messbeispiel: Spektrum $N2$ in Fig. 8.17).

Aus dem Messbeispiel ist ersichtlich, dass das aufgenommene Spektrum — das Röntgenfluoreszenz-Spektrum von Eisen — sich grundlegend von dem Primärspektrum unterscheidet. Es weist zwei (nicht ganz aufgelöste) Peaks bei $E = 6,4$ keV und $7,1$ keV auf — die $K\alpha$ - bzw. $K\beta$ -Linien von Eisen.

Danach wird die Eisen-Probe gegen die Zink-Probe getauscht und ihr Fluoreszenzspektrum aufgenommen (vgl. Messbeispiel: Spektrum $N3$ in Fig. 8.18). Die Peaks in diesem Spektrum stimmen weder mit den Linien aus dem Spektrum $N1$ noch aus dem $N2$ überein: sie sind bei $E = 8,6$ keV und $9,6$ keV ($K\alpha$ - bzw. $K\beta$ -Linien von Zink) zu finden.

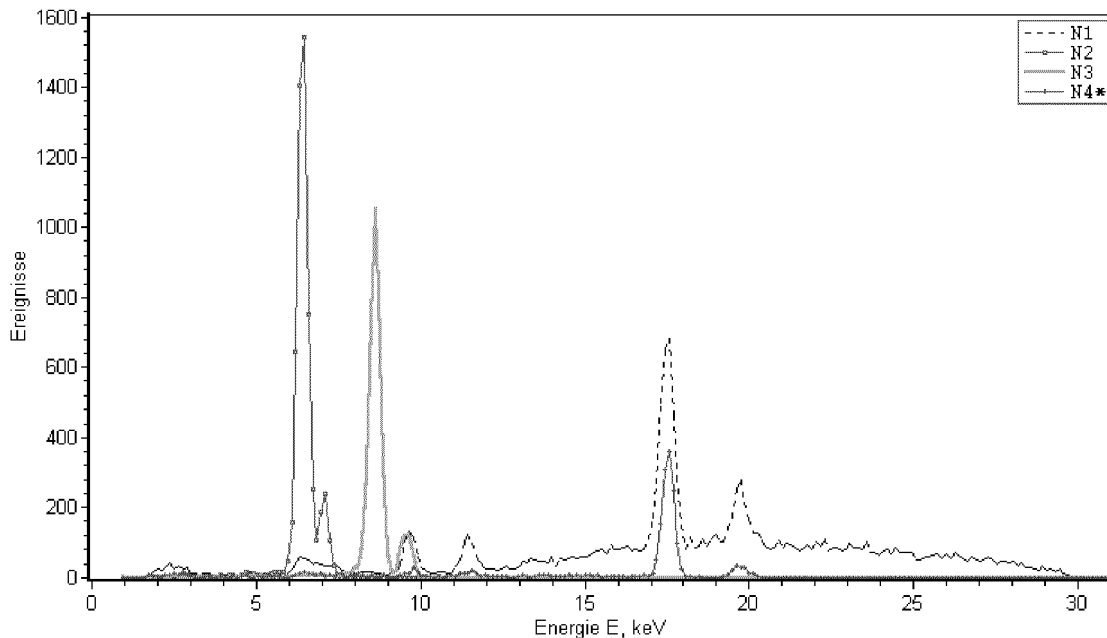


Fig. 8.18: Das Primärspektrum $N1$ (Molybdän-Röntgenröhre) und die Fluoreszenzspektren von Eisen ($N2$), Zink ($N3$) und Molybdän ($N4$). Die charakteristischen Linien von Molybdän sind in $N1$ und $N4$ bei den gleichen Energien zu finden, das Bremsstrahlungskontinuum ist aber nur im durch Elektronen angeregten Spektrum $N1$ vorhanden.

Zur Überprüfung, dass die Energie der charakteristischen Linien nicht von der Anregungsart abhängig ist, wird das Fluoreszenzspektrum von Molybdän aufgenommen. Dieses Röntgenfluoreszenz-Spektrum (vgl. $N4$ in Fig. 8.18) weist die Peaks bei den gleichen Energien wie im Primärspektrum auf: $E = 17,5$ keV und $19,6$ keV ($K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien von Molybdän). Allerdings ist es klar ersichtlich, dass im Fluoreszenzspektrum kein Bremsstrahlungskontinuum präsent ist, das auf die stufenhafte

Abbremsung der anregenden Teilchen zurückzuführen wäre.

Zum Schluß wird die Molybdän-Probe gegen die Silber-Probe getauscht und das Röntgenfluoreszenz-Spektrum aufgenommen. Da die $K\alpha$ und $K\beta$ -Linien von Silber von der primären Strahlung schlecht angeregt werden, wird die Messdauer auf 120 s erhöht. Dafür wird nach der Vollendung der Aufnahme in das Eingabefeld *Messdauer* des Fensters *Spektrum Einstellungen* „120“ eingetragen (das Fenster ist mit einem Rechtsklick auf das Symbol vom $N5$ zu aktivieren) und die Messung erneut gestartet.

Das Röntgenfluoreszenz-Spektrum von Silber (vgl. Messbeispiel: Spektrum $N5$ in Fig. 8.19) weist außer den $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien ($E = 22,2$ keV bzw. $24,9$ keV) auch die nicht aufgelösten $L\alpha$ - und $L\beta$ -Linien ($E \approx 3,2$ keV) auf. Damit ist auch die Ionisation der L -Schale demonstriert.

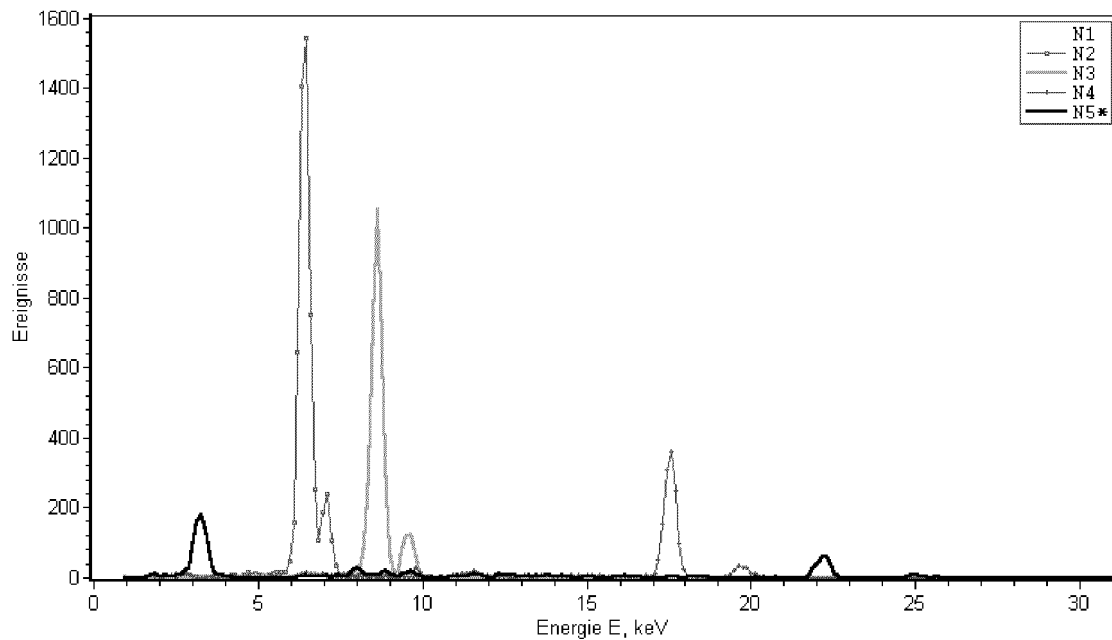



Fig. 8.19: Röntgenfluoreszenz-Spektren von Eisen $N2$ ($Z = 26$), Zink $N3$ ($Z = 30$), Molybdän $N4$ ($Z = 42$) und Silber $N5$ ($Z = 47$). Im Spektrum von Silber sind außer den $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien ($E = 22,2$ keV bzw. $24,9$ keV) auch die $L\alpha, \beta$ -Linien ($E \approx 3,2$ keV) ersichtlich. Messdauer: 60 s für $N2$, $N3$ und $N4$, 120 s für $N5$.

Auswertung

Eine qualitative Aussage über die Abhängigkeit der Energien E der charakteristischen Linien von der Ordnungszahl Z des Elements kann anhand der Fig. 8.19 leicht gemacht werden: E wächst mit Z .

Zur quantitativen Auswertung werden für alle Proben die Energien der $K\alpha$ -Linien (der höchste Peak im Spektrum) ermittelt. Es bieten sich zwei Varianten der Vermessung von Peakpositionen an: eine einfache schnellere — durch Ablesen der Cursor-Koordinaten in der Statuszeile von *VKA Lab* während der Cursor nach „Augenmaß“ in der Mitte des Peaks positioniert ist — und eine genauere aber etwas längere Variante — durch Anpassen von Gauss-Funktionen an die Peaks. Es ist erwähnenswert, dass die Auflösung des Detektors ausreichend ist, um eine gute Genauigkeit auch bei dem schnelleren Verfahren zu bekommen.

Um die Gauss-Anpassung in *VKA Lab* durchzuführen, wird zuerst das anzupassende Spektrum durch einen Doppelklick auf sein Symbol in der Legende aktiv gesetzt (es ist dann mit „*“ markiert). Danach wird die Anpassung mit dem Button *Gauss-Fit*  gestartet, die Peakposition, der Anfang und das Ende des Fit-Bereiches werden angeklickt (die durchzuführende Operationen werden in der Statuszeile angezeigt). Das Programm erzeugt dann eine angepasste Gauss-Kurve, deren Mitte als μ im Fenster *Spektrum Einstellungen* abgelesen werden kann (das Fenster ist mit einem Rechtsklick auf das Symbol vom *Fit* zu aktivieren).

Die ermittelten Werte werden in einer Tabelle zusammengefasst (Tab. 8.2 für das Messbeispiel). Für jede Linie wird der Ausdruck $\sqrt{E_{Exp}/Rhc}$ gebildet und in graphischer Form zum Vergleich mit der theoretischen Moseley-Gerade dargestellt (Fig. 8.20). Die Literaturwerte für die $K\alpha$ -Linien sind zum Vergleich mit den experimentellen Werten in der Tab. 8.2 ebenfalls angegeben. Die theoretische Moseley-Gerade in der Fig. 8.20 ist nach der Formel (8.3) berechnet.

Tab. 8.2: Experimentelle Energien E_{Exp} der $K\alpha$ -Linien und ihre Literaturwerte E_{Lit} für die gemessenen Proben.

Spektrum	Element	Ordnungszahl	E_{Exp} , keV	$\sqrt{E_{Exp}/Rhc}$	E_{Lit} , keV
N2	Eisen	$Z = 26$	6,42	21,7	6,40
N3	Zink	$Z = 30$	8,64	25,2	8,64
N4	Molybdän	$Z = 42$	17,54	35,9	17,48
N5	Silber	$Z = 47$	22,20	40,4	22,16

Aus Fig. 8.20 ist es ersichtlich, dass die experimentellen Werte $\sqrt{E_{Exp}/Rhc}$ für die $K\alpha$ -Linien bei größeren Z etwas über der Moseley-Gerade liegen. Diese Ab-

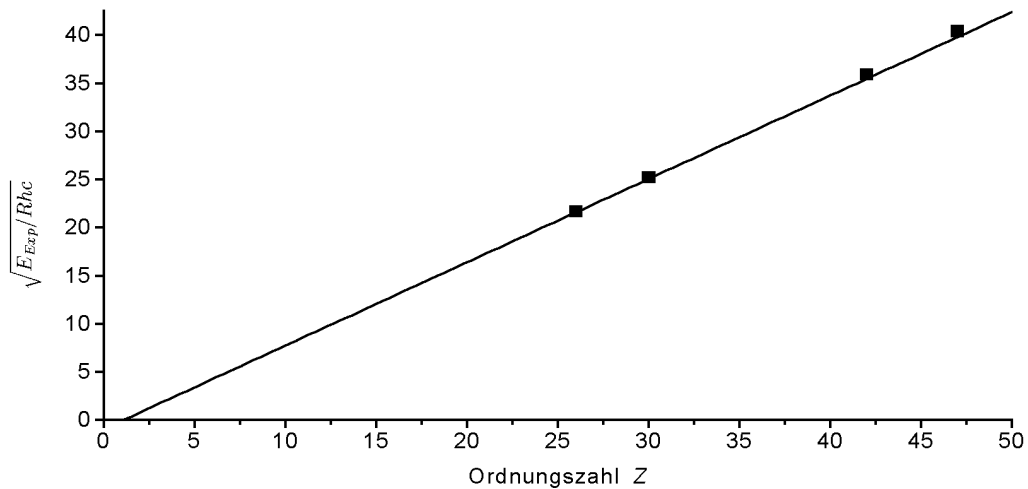


Fig. 8.20: Grafische Darstellung zum Moseley-Gesetz. Rechtecke: experimentelle Werte $\sqrt{E_{Exp}/Rhc}$ für die $K\alpha$ -Linien; Gerade: theoretische Abhängigkeit (Moseley-Gerade).

weichung ist durch die Verkleinerung der Abschirmkonstanten σ mit wachsender Ordnungszahl zu erklären — das einfache lineare Modell ist nicht ausreichend, um den experimentellen Verlauf im Detail wiederzugeben.

Zeitangaben

Die gesamte Messzeit für die vier Aufnahmen beträgt 5 Minuten. Der Wechsel der Proben nimmt zusätzlich ca. 1 min in Anspruch.

Kommentar

Im Unterricht kann die Durchführung des Experimentes sowohl in der Aktivierungsphase vor der theoretischen Behandlung als auch nach der theoretischen Behandlung erfolgen. In beiden Fällen ist es zweckmäßig, die quantitative Auswertung den Schülern als Hausaufgabe zu überlassen. Die Schüler sollten die gerade vom Lehrer vermessenen Energien der $K\alpha$ -Linien in ihren Heften notieren und zuhause eine Grafik aufzeichnen, die die experimentellen Werte sowie die theoretische Moseley-Gerade darstellt.

Alternativ können vom Lehrer die ausgedruckten Spektren aus der Spektrum-

Datenbank an die Schüler verteilt werden, so dass sie zuhause die Peak-Positionen selbständig ermitteln. Das Beispiel der aus *VKA Lab* ausgedruckten Datenbank-Datei *MoseleyDemo.mca* ist in Fig. 8.21 dargestellt.

Im Paragraph **Durchführung** wurde die Datei *MoTube30kV_60s.mca* aus der Spektren-Datenbank als Vorlage für die Messungen in *VKA Lab* genommen. Alternativ kann die nach der Durchführung des Experimentes 8.2.2 gespeicherte Datei eingesetzt werden. Im zweiten Fall besteht ein Vorteil, dass es sich um ein den Schülern bekanntes, früher im Unterricht aufgenommenes Spektrum handelt. Allerdings sind außer dem eigentlichen Primärspektrums (*N5*) fünf andere Spektren vorhanden (*N1* bis *N4* und *N6*, vgl. Experiment 8.2.2), die ausgeblendet werden müssen.

Die Intensität der Linien nimmt beim Erhöhen der Hochspannung auf 35 kV zu. In diesem Fall reicht die Aufnahmezeit von 60 s auch für die *K*-Linien von Silber aus. Allerdings sollte das Primärspektrum neu vermessen werden.

Alle vier Röntgenfluoreszenz-Spektren können auch bei dem gleichen Emissionsstrom $I_A = 1$ mA aufgenommen werden. Dabei liegen aber ihre Intensitätsverhältnisse für die Darstellung in der gleichen Grafik nicht günstig.

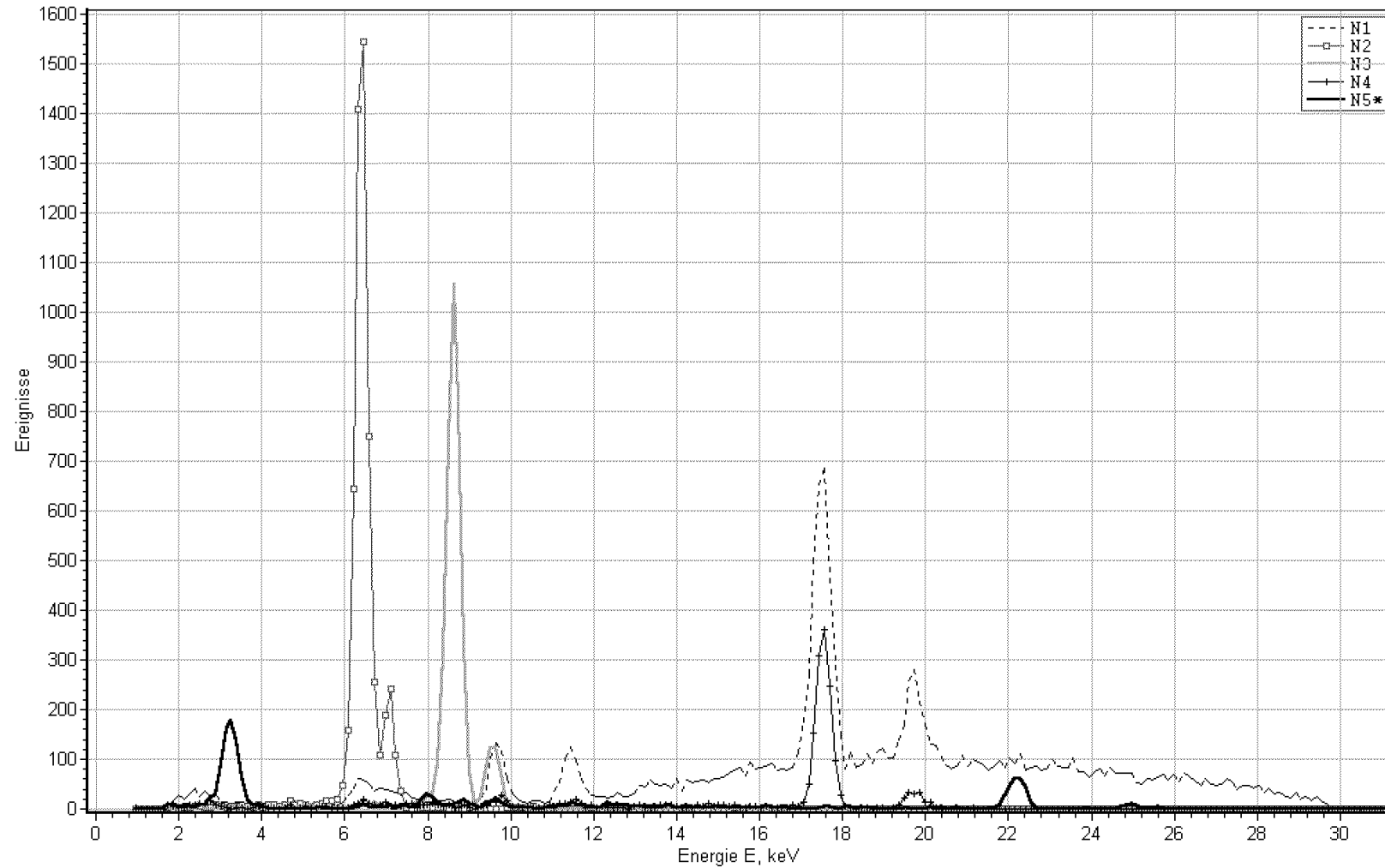


Fig. 8.21: Aus VKA Lab ausgedruckte Datenbank-Datei *MoseleyDemo.mca*. Die Grafik kann kopiert und an die Schüler zur Auswertung verteilt werden.

8.3.2 Analyse der chemischen Zusammensetzung von Alltagsobjekten

Lernziele

Die Schüler sollen:

1. die Anwendung der Röntgenfluoreszenz zur Analyse der chemischen Zusammensetzung kennenlernen;
2. den Zusammenhang zwischen der Zusammensetzung einer chemischen Verbindung und ihrem Röntgenfluoreszenz-Spektrum beschreiben;
3. die qualitative Analyse eines Objektes ihrer Wahl durchführen.

Grundlagen

Beim Bestrahlen einer Probe mit hochenergetischen Röntgenphotonen emittiert diese charakteristische Röntgenlinien, deren Energie von den Ordnungszahlen der Elemente des Probenmaterials abhängt. Diese Abhängigkeit (Moseley-Gesetz) wurde zusammen mit den Röntgenfluoreszenz-Spektren einiger Elemente im Experiment 8.3.1 behandelt.

Wenn die Probe eine chemische Verbindung oder ein Gemisch darstellt, ist auch ihr Fluoreszenzspektrum von komplexer Natur. Da die Elektronenschalen, zwischen denen die Röntgen-Übergänge statt finden, nicht in die chemische Bindung eingezogen werden, sind auch die charakteristischen Linien *von der chemischen Bindung des Elementes unabhängig*. Somit sind die Röntgenfluoreszenz-Spektren einer chemischen Verbindung in erster Näherung eine Überlagerung von Spektren ihrer Komponenten.

Zur qualitativen Analyse der chemischen Zusammensetzung einer Probe werden alle im Fluoreszenzspektrum vorhandenen Peaks den Elementen zugeordnet. Dies geschieht mit Hilfe der Literaturwerte für die Energien der charakteristischen Linien. Für die Zuordnung wird auch das „Muster“ jeder Spektralserie berücksichtigt: so muss zusammen mit der $K\alpha$ -Linie die $K\beta$ -Linie mit kleinerer (ca. 5- bis 10-mal) Intensität im Spektrum vorhanden sein; die $L\alpha$ -Linie erscheint in Begleitung von der $L\beta$ -Linie mit ähnlicher Intensität und der $L\gamma$ -Linie mit kleiner Intensität. Die

Aussagen über die relativen Anteile einzelner Elemente in der Verbindung können anhand der relativen Intensitäten ihrer Fluoreszenz-Linien gemacht werden.

Beim Durchführen einer quantitativen Analyse müssen allerdings viele weiteren Faktoren in Betracht gezogen werden. So können z.B. die großen Peaks der Hauptbestandteile der Verbindung die Linien der in kleinen Mengen vorhandenen Elemente verdecken; die Intensität des Peaks hängt nicht nur von der Konzentration des Elements ab sondern auch von der Position seiner Absorptionskante zum anregenden Spektrum usw.

In diesem Experiment wird die qualitative Analyse der chemischen Zusammensetzung einiger Alltagsobjekte durchgeführt.

Benötigte Geräte

- Röntgengerät (LD-Kat.-Nr. 554811) und Röntgenröhre mit Molybdän-Anode (LD-Kat.-Nr. 55482) oder Kupfer-Anode (LD-Kat.-Nr. 55485)
- Halbleiterdetektor für Röntgenstrahlen (LD-Kat.-Nr. 559938)
- Proben: 1-Euro-Münze; abgeschnittenes Stück Blech von Computer-Gehäuse
- PC mit Windows 95/./XP und einer Soundkarte, vorzugsweise mit einem Beamer
- Software: *VKA Lab*

Aufbau und Vorbereitung des Experimentes

Nach Ausbau des Targethalters und des Sensorhalters mit dem Geiger-Müller-Zählrohr wird der Sensorhalter mit dem Halbleiterdetektor auf dem Goniometer montiert und das Versorgungskabel und das Ausgangskabel an den Halbleiterdetektor angeschlossen. Weiterhin wird der Targethalter mit dem Targettisch auf dem Goniometer montiert und der Kollimator in die Kollimatoraufnahme eingebaut (siehe Fig. 8.22). Am Röntgengerät werden die Hochspannung $U_A = 35 \text{ kV}$, der Emissionsstrom $I_A = 1 \text{ mA}$, der Sensorwinkel $\theta = 90^\circ$ und der Targetwinkel $\alpha = 20^\circ$ eingestellt. Das Netzgerät des Detektors wird an Netz angeschlossen, und nach ca. 1 Minute ist der Detektor betriebsbereit (die Leuchtdiode leuchtet „grün“).

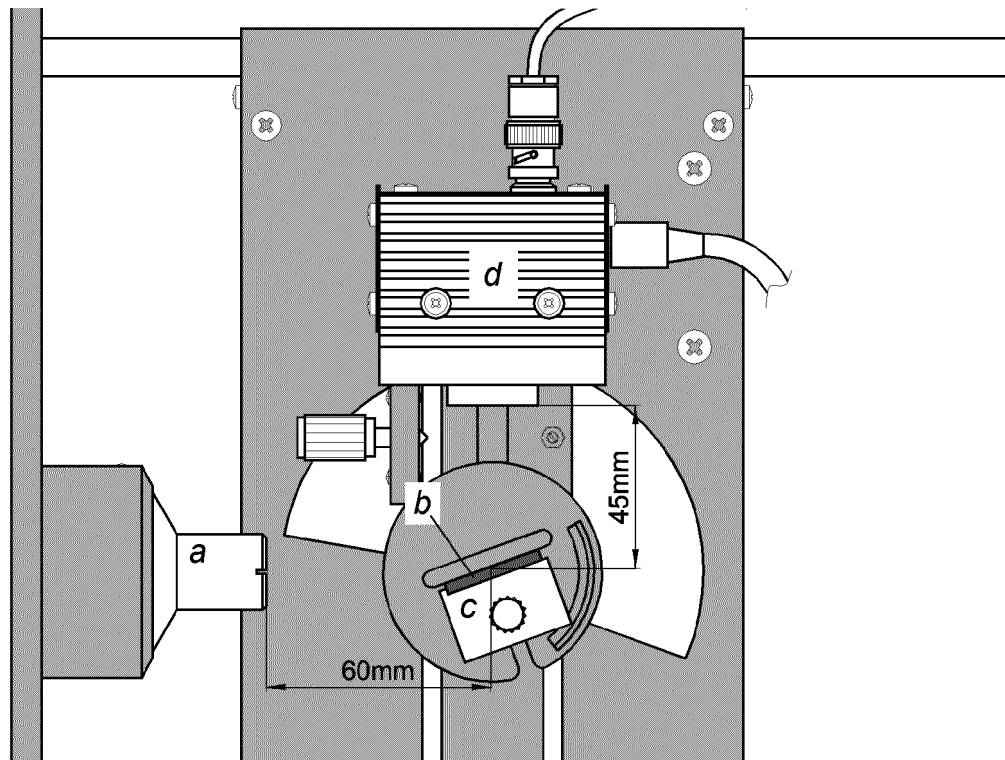




Fig. 8.22: Aufbau des Experimentes: *a* – Kollimator, *b* – Probe, *c* – Targettisch, *d* – Detektor.

Eine Vorlage für die Einstellungen von *VKA Lab* wird vorbereitet. Im Fenster *Einstellungen* (Taste F5):

- Registerkarte *Messung*: Standardwert der Messdauer wird auf 60 s eingestellt;
- Registerkarte *VKA*: Anzahl Kanäle auf 512, Begrenzung der Eingangsamplitude wird auf 1/4 der Skala eingestellt.

Im Fenster *Energiekalibrierung* (Button *Energie-Darstellung* ) werden die Werte für die Kalibrierung eingetragen und mit dem Button *OK* bestätigt.

Durchführung

Als erster Schritt wird das Modellspektrum einer Nickel-Kupfer-Legierung erzeugt. Der Vorgang bringt nahe, wie das Fluoreszenzspektrum einer Probe mit komplexer Zusammensetzung entsteht. Dafür wird in *VKA Lab* die vorbereitete Vorlage geladen, und durch Anklicken des Buttons *Mendelejew Tabelle*  das Fenster des interaktiven Periodensystems der Elemente geöffnet.

Mit Hilfe des *Periodensystems* wird zuerst das Modellspektrum für die *K*-Linien von Nickel erzeugt: die Schaltfläche „Ni“ wird angeklickt, um dieses Element auszu-

wählen, nach Anklicken des Buttons *Spektrum* wird mit dem Mauszeiger die Höhe des $K\alpha$ -Peaks angegeben (ungefähr 200 Ereignisse, Kontrolle geschieht über die Anzeige in der Statuszeile). Die Höhe des $K\beta$ -Peaks wird automatisch in Übereinstimmung mit den Literaturwerten aus der Höhe des $K\alpha$ -Peaks ausgerechnet. Das Modellspektrum ist in Fig. 8.23 dargestellt (Ni: K).

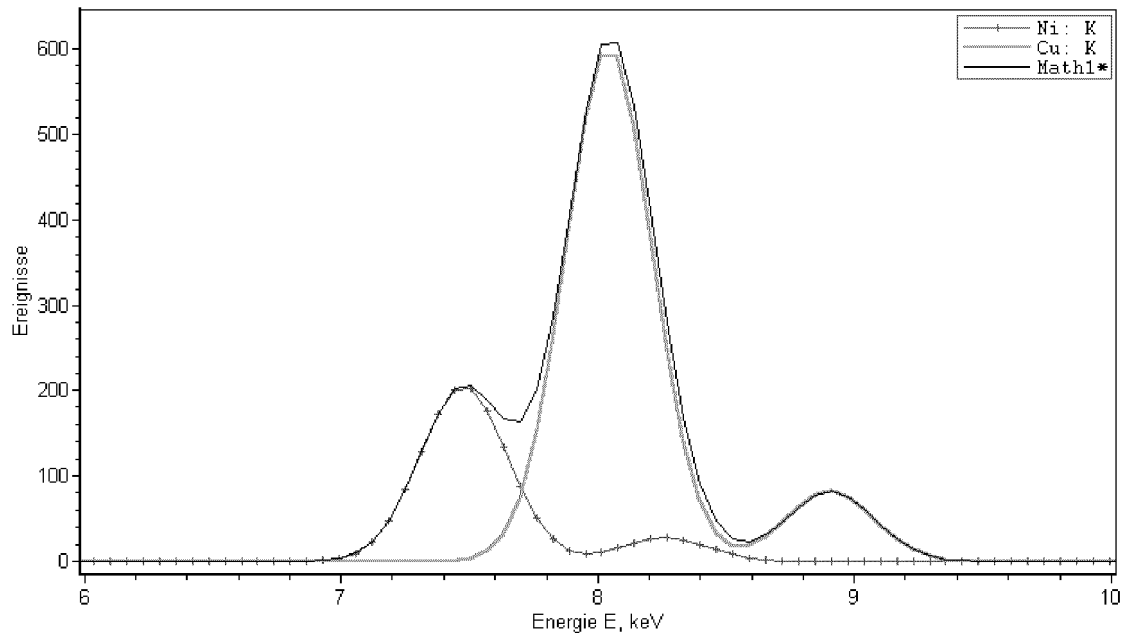




Fig. 8.23: Modellspektren der K -Serie von Nickel und Kupfer, $Ni: K$ bzw. $Cu: K$, mit dem Peakhöhen-Verhältnis $\approx 1 : 3$. Modellspektrum $Math1 = Ni: K + Cu: K$ stellt das Röntgenfluoreszenz-Spektrum einer $Ni-Cu$ -Legierung mit den relativen Anteilen von Nickel und Kupfer $\approx 1 : 3$ dar.

Gleichermaßen wird das Modellspektrum für die K -Linien von Kupfer erzeugt. Jetzt wird allerdings die Höhe des $K\alpha$ -Peaks ungefähr dreimal so hoch wie beim Nickel — auf 600 Ereignisse eingestellt (vgl. Kurve $Cu: K$ in Fig. 8.23). Das Höhenverhältnis entspricht in erster Näherung der dreimal größeren Anzahl der Kupferatome im Vergleich zu den Nickelatomen.

In der Legierung kommen die beiden Atomenarten „gemischt“ vor, d.h. das Nickel- und das Kupferspektrum werden gleichzeitig emittiert. Das Modell-Fluoreszenzspektrum der Legierung ist dann die Summe von $Ni: K$ und $Cu: K$, die mit Hilfe des *Spektrum-Rechners* ausgerechnet wird. Dafür wird der Button  angeklickt, im Fenster des *Spektrum-Rechners* wird die Operation $Math1 = Ni: K + Cu: K$ eingegeben, und die Durchführung mit Button *OK* bestätigt. Das Modell-

Fluoreszenzspektrum der Legierung (vgl. *Math1* in Fig. 8.23) weist nur drei Peaks auf, da die *Ni K β* -Linie von der größeren *Cu K α* -Linie verdeckt ist.

Nachdem das Prinzip der Zusammensetzung eines komplexen Spektrums erklärt worden ist, kann die Interpretation eines experimentellen Röntgenfluoreszenzspektrums erfolgen. Als Probe wird eine 1-Euro-Münze genommen, sie wird auf den Targethalter platziert und nach Schließen der Glastür wird die Hochspannung am Röntgengerät eingeschaltet³. Eine Messung in *VKA Lab* wird mit der Taste F9 oder dem Button *Start*  gestartet. Das Ergebnis der Messung ist in Fig. 8.23 dargestellt.

Das experimentelle Spektrum *N1* weist drei Peaks auf, die die gleichen Positionen haben, wie im Modellspektrum *Math1*. Auch die relative Intensitäten der Peaks sind mit dem Modellspektrum ähnlich. Es lässt schließen, dass die für die Prägung der 1-Euro-Münzen benutzte Legierung aus Nickel und Kupfer mit den relativen Anteilen $\approx 1 : 3$ besteht.

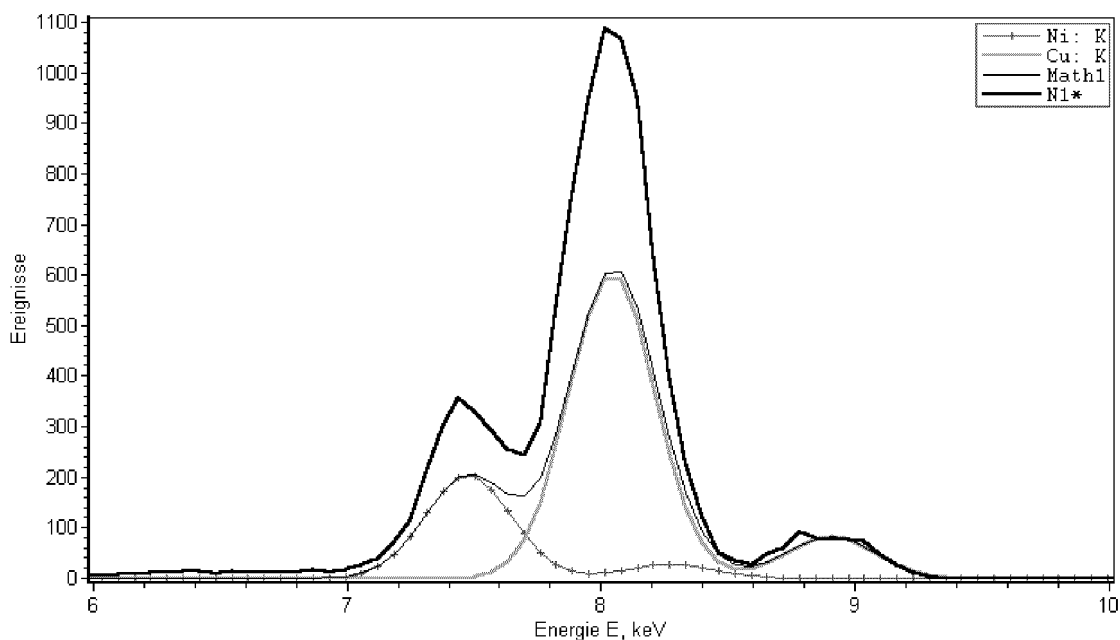


Fig. 8.24: Modellspektren *Ni: K*, *Cu: K*, *Math1* und das experimentelle Spektrum einer 1-Euro-Münze *N1*. Der Vergleich von *N1* und *Math1* zeigt, dass die Münze aus einer *Ni-Cu*-Legierung geprägt ist, mit den relativen Anteilen von Nickel und Kupfer $\approx 1 : 3$. Messdauer von *N1*: 60 s.

³ Bei der vorgeschlagenen Geometrie des Experimentes wird das Fluoreszenzspektrum des inneren „silbernen“ Teils der 1-Euro-Münze aufgenommen.

Statt der 1-Euro-Münze wird eine neue Probe — ein abgeschnittenes Stück Blech vom Computer-Gehäuse — auf dem Targettisch platziert und ihr Fluoreszenzspektrum aufgenommen (vgl. Messbeispiel: Spektrum *N2* in Fig. 8.25). Die Identifizierung der Peaks erfolgt am einfachsten durch Anklicken der Schaltflächen unterschiedlicher Elemente im interaktiven Periodensystem und Vergleichen der dargestellten Marker der Literaturwerte mit dem experimentellen Spektrum (vgl. Beispiel für Zink in Fig. 8.25).

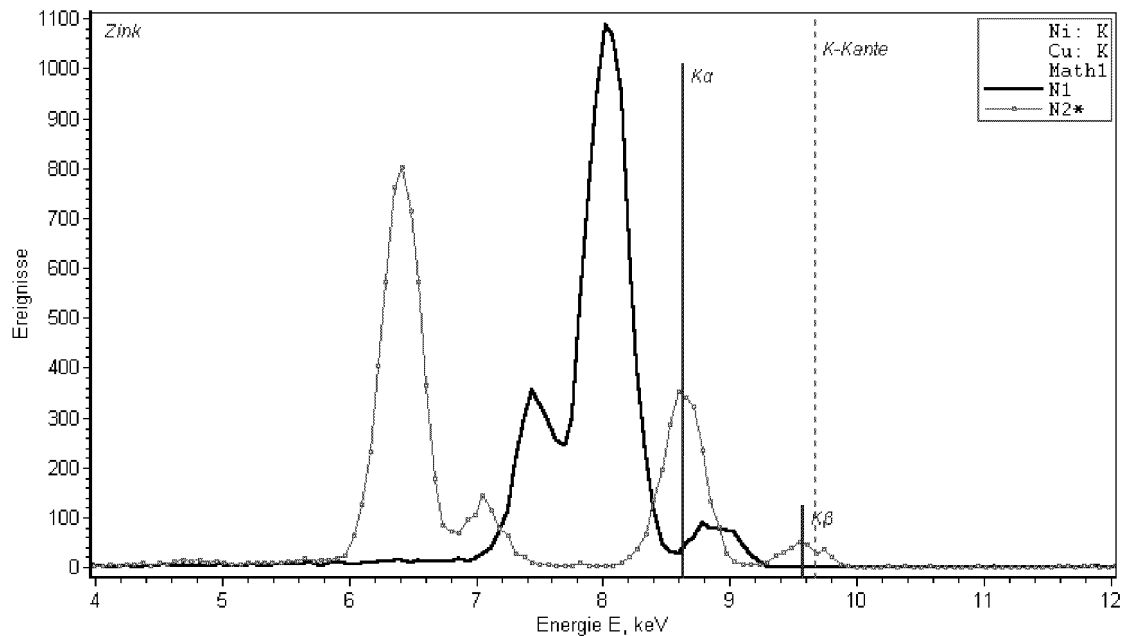


Fig. 8.25: Das Röntgenfluoreszenz-Spektrum einer 1 Euro Münze *N1* weist *Ni* $K\alpha$ -, *Cu* $K\alpha$ - und *Cu* $K\beta$ -Peaks auf (bei $E = 7,5$ keV, 8 keV bzw. 8,9 keV). Das Spektrum des Materials des Computer-Gehäuse zeigt die $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien von Eisen (bei $E = 6,4$ keV bzw. 7,1 keV) und die von Zink (bei $E = 8,6$ und 9,6 keV). Die dargestellten Marker der K -Serie von Zink illustrieren, wie die Identifizierung der Peaks mit Hilfe des *interaktiven Periodensystem der Elemente* von *VKA Lab* durchgeführt werden kann. Messdauer: 60 s pro Spektrum.

Das Spektrum des Materials des Computer-Gehäuse zeigt die $K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien von Eisen (bei $E = 6,4$ keV bzw. 7,1 keV) und die von Zink (bei $E = 8,6$ keV und 9,6 keV). Allerdings ist Zink in diesem Fall nicht ein Bestandteil der Legierung, sondern die Antikorrosionsbeschichtung auf dem Stahlblech. Da diese Beschichtung sehr dünn ist, sind auch die charakteristischen Linien von Eisen im Spektrum präsent: sie werden von den durch die Zink-Beschichtung durchgehenden

Röntgenstrahlen angeregt und verlassen das Blech wieder durch die Beschichtung. Anhand der Intensitätsverhältnisse von Linien der Beschichtung und der Unterlage könnte die Dicke der Beschichtung vermessen werden.

Jetzt können die Röntgenfluoreszenz-Spektren von Objekten nach Wahl der Schüler aufgenommen und ähnlich ausgewertet werden. Mögliche Beispiele sind in Fig. 8.26 und Fig. 8.27 gezeigt.

In Fig. 8.26 sind Spektren von zwei Schmuckstücken aus Gold dargestellt, die aus unterschiedlichen Legierungen (Gold 585 und Gold 333) hergestellt sind. In beiden Spektren sind außer der $L\alpha$ -, $L\beta$ - und $L\gamma$ -Linien von Gold bei $E = 9,7$ keV, 11,4 keV bzw. 13,4 keV auch die Linien anderer Legierungskomponenten ersichtlich. Es sind die $K\alpha$ -Linien von Kupfer (bei $E = 8$ keV), Zink ($E = 8,6$ keV) und Silber ($E = 22,2$ keV). Die Intensitäten der Peaks zeigen eindeutig, dass der relative Gold-Anteil in $N1$ (Gold 585) höher als in $N2$ (Gold 333) ist. Aus dem Spektrum $N2$ ist ersichtlich, dass der Hauptbestandteil der Legierung „Gold 333“ eigentlich Kupfer ist.

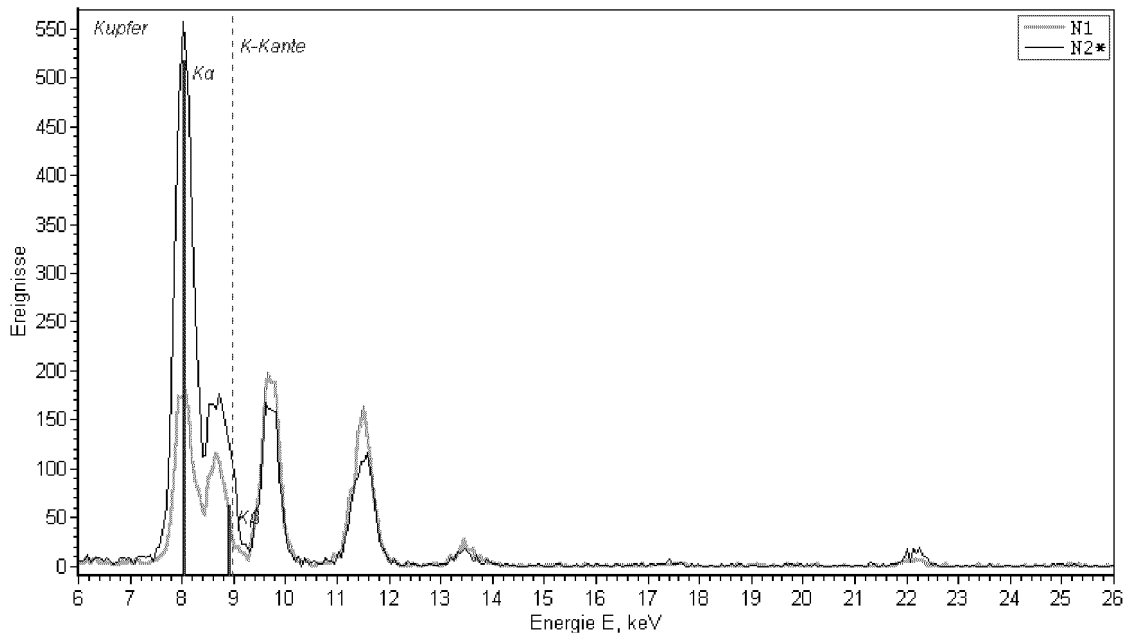


Fig. 8.26: Röntgenfluoreszenz-Spektren zweier Schmuckstücke aus Gold, $N1$: Gold 585, $N2$: Gold 333. Außer Gold (die $L\alpha$ -, $L\beta$ - und $L\gamma$ -Linien bei $E = 9,7$ keV, 11,4 keV bzw. 13,4 keV) sind Kupfer, Zink und Silber Bestandteile der Legierungen ($K\alpha$ -Linien bei $E = 8$ keV, 8,6 keV bzw. 22,2 keV). Der Vergleich der Peakhöhen zeigt, dass der relative Goldanteil in „Gold 585“ höher ist. Messdauer: 60 s pro Spektrum.

Das andere Messbeispiel zeigt das Röntgenfluoreszenz-Spektrum eines Hausschlüssels (vgl. Fig. 8.27). Der metallisch-weiße Schlüssel wies an den Verschleißstellen darunterliegendes Metall gelblicher Farbe auf. Im Spektrum sind $Ni K\alpha$ -, $Cu K\alpha$ - und $Zn K\alpha$ - und $K\beta$ -Linien ersichtlich ($E = 7,5$ keV, 8 keV, 8,6 keV bzw. 9,6 keV), zudem auch sehr kleine $Pb L\alpha$ - und $L\beta$ -Peaks ($E = 10,6$ keV und 12,6 keV). Daraus lässt sich schließen, dass der Schlüssel aus vernickeltem Messing (Kupfer + Zink + Blei) gefertigt ist.

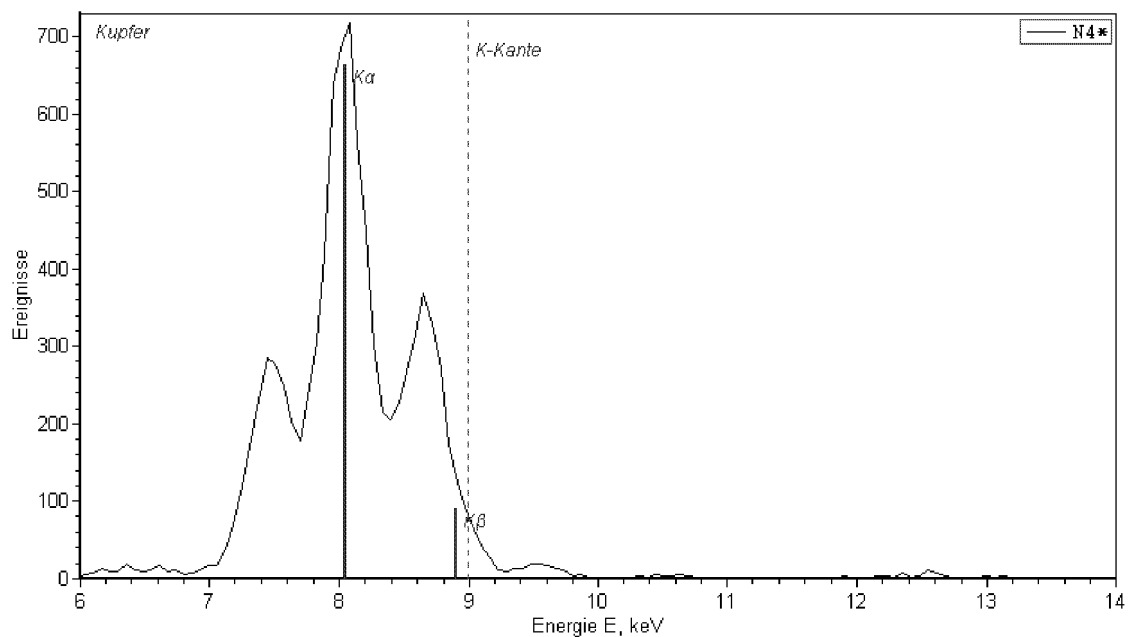


Fig. 8.27: Röntgenfluoreszenz-Spektrum eines Hausschlüssels. Ersichtlich sind Peaks bei $E = 7,5$ keV ($Ni K\alpha$ -Linie), $E = 8$ keV ($Cu K\alpha$ -Linie), $E = 8,6$ keV und $9,6$ keV ($Zn K\alpha$ - bzw. $K\beta$ -Linie). Die sehr kleinen Peaks bei $E = 10,6$ keV und $12,6$ keV ($Pb L\alpha$ - bzw. $L\beta$ -Linie) weisen auf eine kleine Menge Blei in der Legierung hin. Dargestellt sind auch Marker der K -Serie von Kupfer des *interaktiven Periodensystem der Elemente*. Messdauer: 60 s.

Zeitangaben

Jedes Spektrum kann in 1 Minute aufgenommen werden, der Wechsel der Proben nimmt zusätzlich etwas Zeit in Anspruch.

Kommentar

Bei der Auswahl der Objekte zur Analyse muss der Energiebereich berücksichtigt werden, in dem der Detektor empfindlich ist. So können z.B. die Spektren leichter Elemente wie *C* und *Al* nicht aufgenommen werden. Am besten eignen sich Elemente, die die charakteristischen Linien im Bereich $4 \text{ keV} < E < 25 \text{ keV}$ haben, z.B. Elemente von Titan bis Zinn für die *K*-Linien und von Cäsium bis Blei für die *L*-Linien.

In Fällen, wenn das zu untersuchende Objekt nur schwer im Bestrahlungsfeld des Schlitz-Kollimators zu platzieren ist, kann auch der Kreis-Kollimator eingesetzt werden.

9. AUSBLICK

In diesem Kapitel sind Ideen zu weiteren Experimenten dargestellt, die nicht in den Kapiteln 7 und 8 behandelt wurden. Sie schienen den Autor zu wichtig, um darüber nicht zu schreiben, ihre ausführliche Beschreibung würde aber die Grenzen dieser Arbeit sprengen. Deswegen sind nur kurze Kommentare zu den Experimenten gegeben und die experimentellen Ergebnisse gezeigt.

9.1 Anregung der Röntgenfluoreszenz mit Radioisotopen

Alle früher in dieser Arbeit beschriebenen Experimente sind zur Durchführung im Schulröntgengerät von Leybold Didactic bestimmt. Der entwickelte Detektor kann aber auch außerhalb des Röntgengerätes benutzt werden, wenn die zu messende Strahlung anders angeregt wird.

In diesem Abschnitt sind zwei Experimente dargestellt, in denen die Strahlung eines radioaktiven Präparates untersucht bzw. zur Anregung benutzt wird.

9.1.1 Röntgenspektrum eines ^{241}Am -Präparates

^{241}Am ist ein α - und γ -Strahler, der durch α -Zerfall zum ^{237}Np übergeht, und zwar hauptsächlich zu einem angeregten Zustand bei $E = 59,5$ keV. Beim nachfolgendem Übergang in den Grundzustand von ^{237}Np wird in 35,7% der ^{241}Am -Zerfälle γ -Strahlung mit $E_\gamma = 59,5$ keV emittiert.

Diese γ -Strahlung wird zum Teil im Präparat absorbiert und regt die Röntgenfluoreszenz der im Präparat vorhandenen Elemente an. Das Energiespektrum eines ^{241}Am Präparates mit der Aktivität 340 kBq ist in Fig. 9.1 dargestellt. Es weist sowohl die komplexe Struktur der L -Serie von Neptunium auf als auch die charakteristischen Linien von Gold und Silber, die zum Teil aus dem Präparat stammen (Americium ist in eine Goldfolie eingewalzt) und zum Teil die Fluoreszenz des Detektor-Gehäuses darstellen. Die γ -Strahlung zeigt sich auch im Spektrum. Ihr Peak ist klein, weil der Detektor bei dieser Energie eine sehr kleine Ansprechwahrscheinlichkeit besitzt ($\eta \approx 8 \cdot 10^{-3}$). Die Verschiebung der gemessenen Energie zu kleineren Werten ist auf die Nichtlinearität des Detektors zurückzuführen.

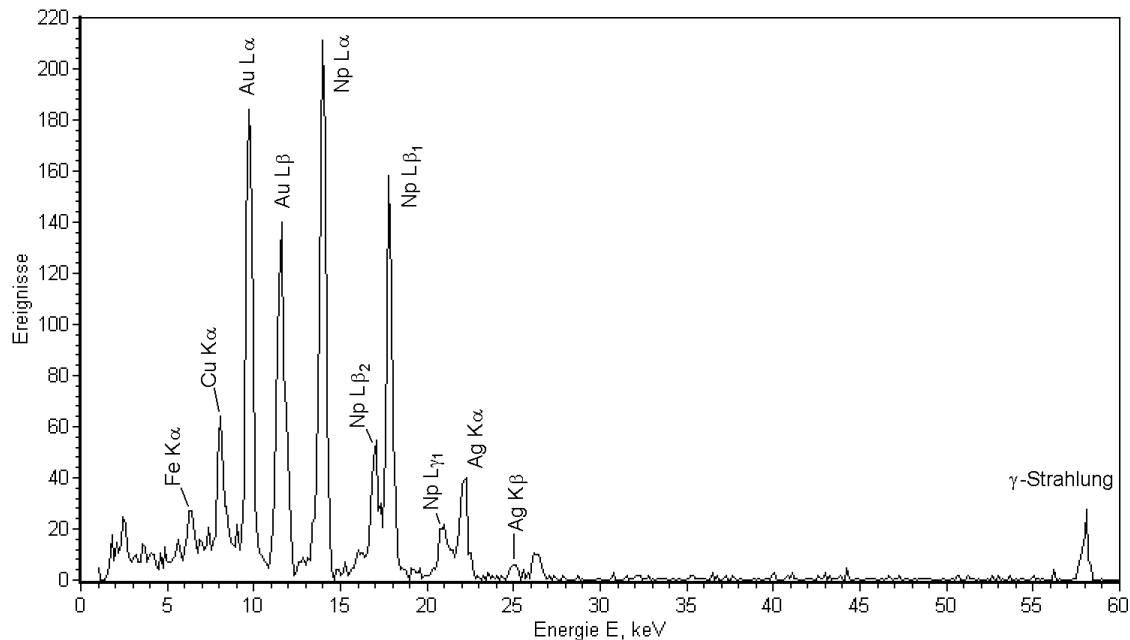


Fig. 9.1: Röntgen- und Gamma-Spektrum eines ^{241}Am -Präparates mit der Aktivität 340 kBq. Messdauer: 10 min.

9.1.2 Benutzung der Radioisotope zur Anregung der charakteristischen Spektren

Die charakteristischen Spektren der Elemente können auch außerhalb eines Röntgengerätes aufgenommen werden, wenn sie mit der Strahlung von radioaktiven Präparaten angeregt werden. Allerdings ist der Aktivität der für die Schule zugelassenen Präparate klein, und es muss mit längeren Aufnahmezeiten gerechnet werden. Das Messbeispiel in Fig. 9.2 zeigt ein mit einem ^{241}Am -Präparat angeregtes Spektrum von Kupfer.

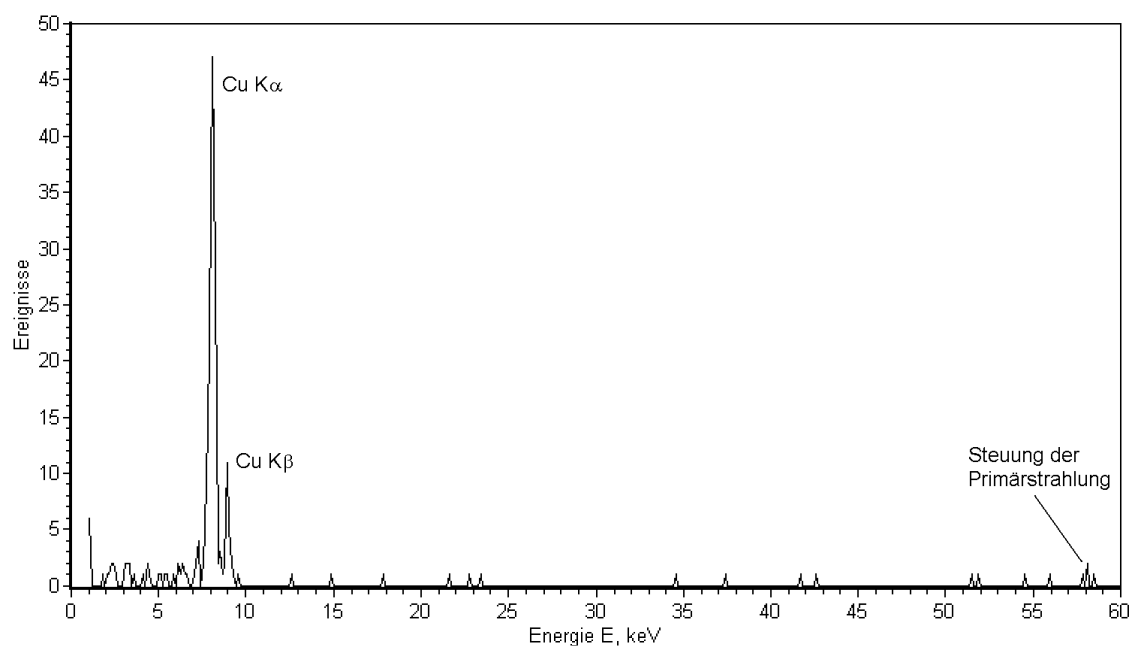


Fig. 9.2: Röntgenfluoreszenz-Spektrum von Kupfer angeregt mit der Strahlung eines ^{241}Am -Präparates (Aktivität 340 kBq). Messdauer: 10 min.

9.2 Fachübergreifende Experimente

In den Kapiteln 7 und 8 wurden die experimentellen Möglichkeiten beschrieben, die sich durch den Einsatz des energieauflösenden Röntgendetektor im Physikunterricht eröffnen. Es muss betont werden, dass auch der Unterricht in anderen Fächern von der Anwendung physikalischer Untersuchungsmethoden profitieren kann.

Beispiele der Anwendung der Röntgenfluoreszenz-Analyse auf „nicht physikalische Problemen“ sind in vielen wissenschaftlichen Arbeiten zu finden. So z.B. wurde die undestruktive Analyse der chemischen Zusammensetzung römischer Münzen mittels Röntgenfluoreszenz in einer historischen Studie eingesetzt, die den finanziellen Zustand des Römischen Reiches in der Zeit verfolgen konnte [28]. Die Analyse der viktorianischen Tapeten deckte „die schlimmste Massenvergiftung der Welt“ auf, die durch Benutzung von Farben auf Arsen-Basis verursacht wurde [47].

Die Röntgenfluoreszenz-Spektroskopie wird auch zur Identifikation des Malers anhand der Analyse der Farben auf einem umstrittenen Bild oder zur Feststellung des Vorhandenseins schwerer Elemente bei Umweltuntersuchungen u.a. eingesetzt.

In diesem Abschnitt werden Ideen und Anregungen zu einigen in der Schule einfach durchführbaren fachübergreifenden Experimenten dargestellt und die experimentellen Ergebnisse gezeigt.

9.2.1 Gesteinsanalyse

Gesteinproben aus der Mineraliensammlung können mit Hilfe der Röntgenfluoreszenz einfach analysiert werden. Interessant kann sowohl die Identifizierung der Erze als auch die Analyse von einem „einfachen Stein“ sein (vgl. Fig. 9.3). Das Messbeispiel zeigt, dass im Spektrum *N1* von Wolframierz Scheelit ($CaWO_4$) die Peaks von Calcium und Wolfram erscheinen, und dass auch ein „Stein vom Straßenrand“ (Spektrum *N2*) einen hohen Gehalt von Eisen aufweisen kann.

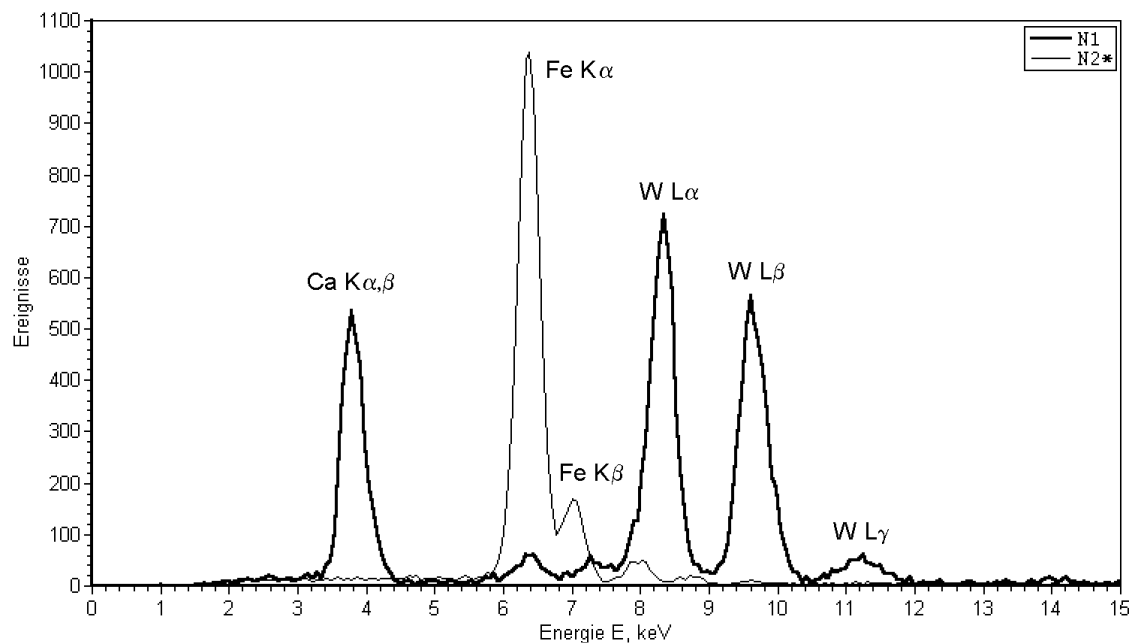


Fig. 9.3: Röntgenfluoreszenz-Spektren geologischer Proben. Spektren: *N1* – Scheelit ($CaWO_4$); *N2* – ein „Stein vom Straßenrand“. Anregung: Röntgenröhre mit Kupfer-Anode. Messdauer: 2 min pro Spektrum.

9.2.2 Wichtige chemische Elemente in Lebensmitteln

Es wird oft gesagt, man solle Milch trinken und Käse essen, da darin viel Calcium enthalten ist, das wichtig für die Knochen ist. Ob das stimmt, kann einfach mit der Röntgenfluoreszenz überprüft werden (vgl. Fig. 9.4). Im Messbeispiel sind auch Spektren von Blutwurst und von einer trockenen Aprikose dargestellt, die Eisen bzw. Kalium aufweisen.

Es muss bei der Analyse von Lebensmitteln berücksichtigt werden, dass sie im wesentlichen aus Kohlenwasserstoffen bestehen, deren Spektrum nicht direkt sichtbar ist. Ihr Vorhandensein spiegelt sich aber darin wieder, dass die Streuung der Primärstrahlung groß ist und die entsprechenden Peaks im Spektrum zu sehen sind. Daher sollte ein Vergleichsspektrum aufgenommen werden, das die Streuung an einer Substanz zeigt, die nur die leichten Elemente beinhaltet (C, H, O) und damit die „leere organische Matrix“ darstellt (vgl. Spektrum von Plexiglas in Fig. 9.4).

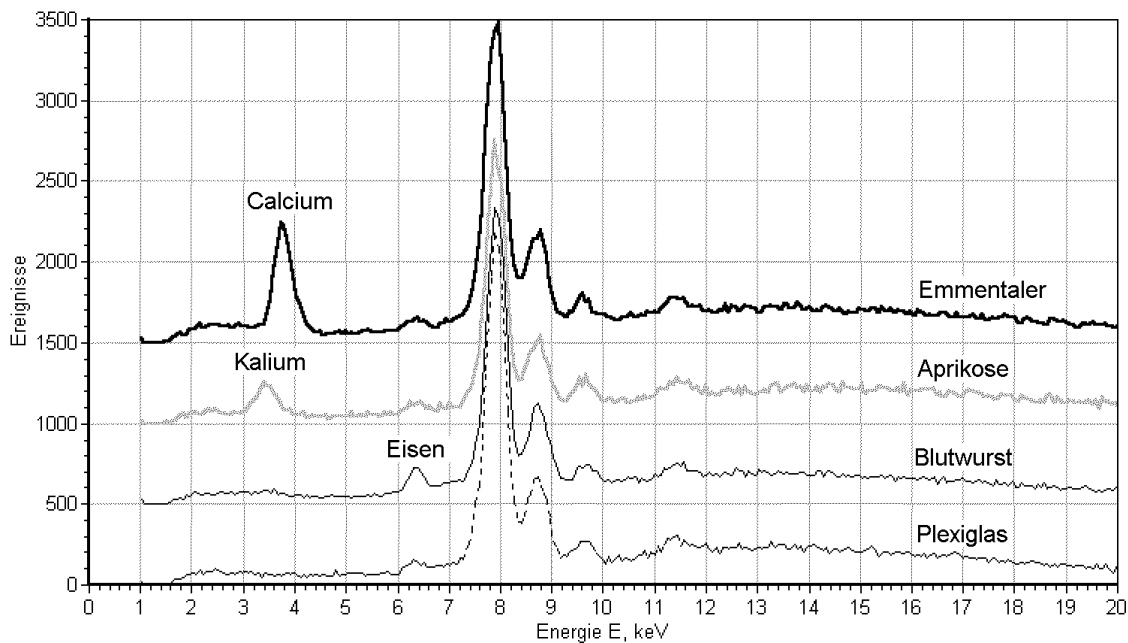


Fig. 9.4: Röntgenfluoreszenz-Spektren von Käse, Blutwurst und einer trockenen Aprikose, die Calcium, Eisen bzw. Kalium aufweisen. Die nicht beschrifteten Peaks sowie das Kontinuum sind durch die Streuung der Primärstrahlung und durch die Fluoreszenz des Detektor-Gehäuses verursacht. Das Spektrum der Streuung an Plexiglas ist zum Vergleich und zum Ausschließen der Streupeaks dargestellt. Anregung: Röntgenröhre mit Kupfer-Anode. Messdauer: 5 min pro Spektrum. Die Spektren sind zur Übersichtlichkeit in der Y-Richtung verschoben.

9.2.3 Experimentelles zum Thema „Gesundheit“

Die Spektren in Fig. 9.5 zeigen die Mineralien-Zusätze in Vitaminen. Sie stimmen gut mit den Herstellerangaben zur Zusammensetzung überein:

- Kräuterblut: 1 Dragee enthält ca. 4,5 mg 2-wertiges Eisen – Eisen(II)-D-gluconat.
- NeoVin: 1 Tablette enthält 200 mg Calcium, 100 mg Magnesium, 15 mg Eisen, 10 mg Zink, 200 μg Jod. Titandioxid und Eisenoxide sind als Farbstoffe eingesetzt. Es sollte berücksichtigt werden, dass Magnesium ($E_{K\alpha} = 1,25$ keV) nicht mit dem Detektor nachgewiesen werden kann. Die L -Linien von Jod sind von den größeren Calcium K -Linien maskiert worden.

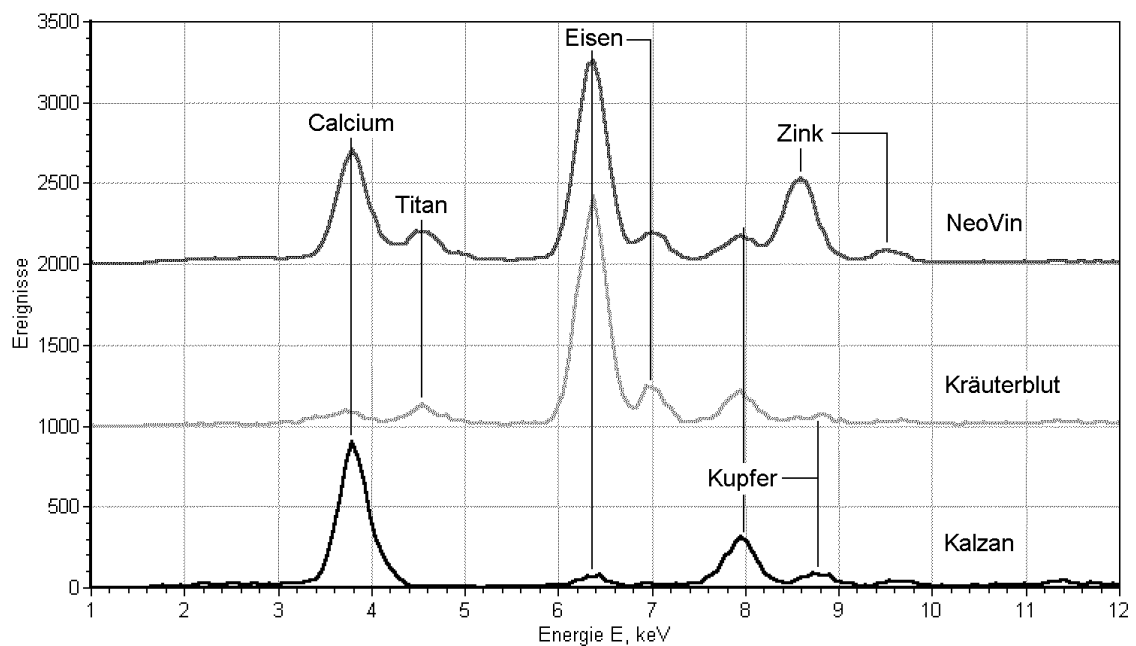


Fig. 9.5: Röntgenfluoreszenz-Spektren von Vitaminen: Kalzan, Kräuterblut und NeoVin. Anregung: Röntgenröhre mit Kupfer-Anode. Messdauer: 2 min pro Spektrum. Die Spektren sind zur Übersichtlichkeit in der Y-Richtung verschoben.

Das Spektrum von Zigarettenasche (Fig. 9.6) weist hohe Anteile schwererer Elemente (Br , Sr) auf. Es ist offensichtlich, dass sie beim Rauchen mit den Rußpartikeln in die Lungen gelangen und im Organismus abgelagert werden können. Obwohl das

Spektrum allein nicht die möglichen Schaden beweist, die durch Rauchen entstehen können, es kann aber die Gefahr nahe bringen.

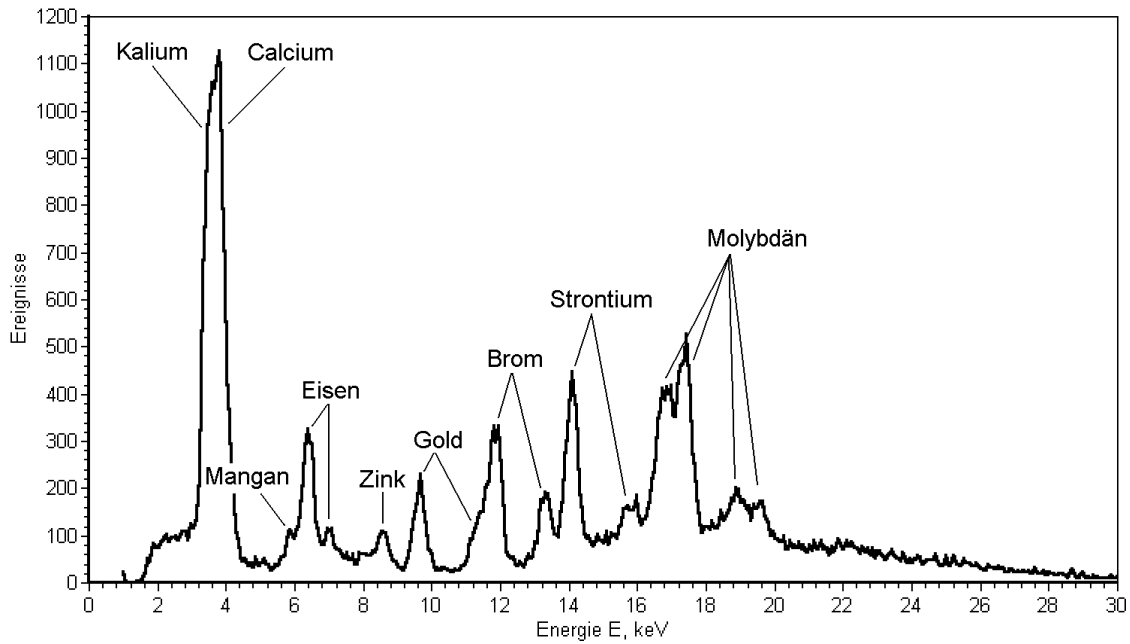


Fig. 9.6: Röntgenfluoreszenz-Spektrum von Zigarettenasche. Die Peaks der *K*-Linien von Molybdän stellen elastische sowie unelastische Streuung der Primärstrahlung dar. Die Peaks von Gold stammen aus der Fluoreszenz des Detektor-Gehäuses. Anregung: Röntgenröhre mit Molybdän-Anode. Messdauer: 30 min.

10. ZUSAMMENFASSUNG

Die vorgestellte Arbeit befasst sich mit den Problemen des Schulunterrichts in der Quanten- und Atomphysik mit dem Schwerpunkt „Röntgenstrahlen“. Es werden die physikalischen Grundlagen für die Erzeugung der Röntgenstrahlung, ihrer Absorption und Streuung sowie für den Nachweis der Röntgenstrahlung dargestellt. Anhand der Analyse der Lehrpläne verschiedener Bundesländer, der modernen methodischen Konzepte für den Unterricht in Quanten- und Atomphysik, der Schulbücher und anderer Literatur ist ein Mangel an Demonstrationsmöglichkeiten bei einigen Schlüsselexperimenten festgestellt worden.

Deshalb wurden

- ein energieauflösender Detektor für Röntgenstrahlung entwickelt, der die gewünschten Experimente durchführen lässt und zudem mit den existierenden Schulröntengeräten benutzt und zu einem für die Schule erschwinglichen Preis erworben werden kann.
- eine Software *VKA Lab* entwickelt, die den praktischen Einsatz des Detektors im Unterricht ermöglicht. Mit der Software können die Daten vom Detektor aufgenommen, dargestellt und ausgewertet werden.
- Beschreibungen zu Experimenten mit dem entwickelten Detektor ausgearbeitet, die viele Themen der Quanten- und Atomphysik abdecken. Es sind Experimentieranleitungen sowohl für Praktikumsexperimente mit ausgedehnten quantitativen Untersuchungen als auch für kurze anschauliche Demonstrationsexperimente dargestellt. Die Anleitungen beinhalten alle nötigen theoretischen Grundlagen und Aufbauhinweise und ermöglichen es, auch wahlweise nur einzelne Experimente durchzuführen.

ANHANG

A. SPEKTREN-DATENBANK

Die Spektren-Datenbank (siehe beigegefügte CD) enthält Röntgenspektren, die zu Referenzzwecken benutzt werden können. Hier sind sie mit kurzen Beschreibungen aufgelistet.

BraggCuTube15kVNaCl.xry Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 15$ kV und $I_A = 0,5$ mA, nach der Bragg-Methode aufgenommen. Kristall: *NaCl*.

BraggCuTube20kVNaCl.xry Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 20$ kV und $I_A = 0,5$ mA, nach der Bragg-Methode aufgenommen. Kristall: *NaCl*.

BraggCuTube25kVNaCl.xry Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 25$ kV und $I_A = 0,5$ mA, nach der Bragg-Methode aufgenommen. Kristall: *NaCl*.

BraggCuTube30kVNaCl.xry Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 30$ kV und $I_A = 0,5$ mA, nach der Bragg-Methode aufgenommen. Kristall: *NaCl*.

BraggCuTube35kVNaCl.xry Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 35$ kV und $I_A = 0,5$ mA, nach der Bragg-Methode aufgenommen. Kristall: *NaCl*.

CuTube15kV.mca Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 15$ kV und $I_A = 0,1$ mA, 300 s.

CuTube20kV.mca Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 20$ kV und $I_A = 0,1$ mA, 300 s.

CuTube25kV.mca Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 25$ kV und $I_A = 0,1$ mA, 300 s.

CuTube30kV.mca Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 30$ kV und $I_A = 0,1$ mA, 300 s.

CuTube35kV.mca Spektrum einer Röntgenröhre mit Kupfer-Anode bei $U_A = 35$ kV und $I_A = 0,1$ mA, 300 s.

MoTube15kV.mca Spektrum einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode bei $U_A = 15$ kV und $I_A = 0,25$ mA, 300 s (vgl. Spektrum *N5* in Fig. 7.14).

MoTube20kV.mca Spektrum einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode bei $U_A = 20$ kV und $I_A = 0,25$ mA, 300 s (vgl. Spektrum *N4* in Fig. 7.14).

MoTube25kV.mca Spektrum einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode bei $U_A = 25$ kV und $I_A = 0,25$ mA, 300 s (vgl. Spektrum *N3* in Fig. 7.14).

MoTube30kV.mca Spektrum einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode bei $U_A = 30$ kV und $I_A = 0,25$ mA, 300 s (vgl. Spektrum *N2* in Fig. 7.14).

MoTube35kV.mca Spektrum einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode bei $U_A = 35$ kV und $I_A = 0,25$ mA, 300 s (vgl. Spektrum *N1* in Fig. 7.14).

MoTube30kV_60s.mca Spektrum einer Röntgenröhre mit Molybdän-Anode bei $U_A = 30$ kV und $I_A = 0,2$ mA, 60 s.

ComptonDemo.mca Compton-Streuung an einem Plexiglas-Streukörper (vgl. Fig. 8.13). Primärstrahlung: Röntgenröhre mit Molybdän-Anode, $U_A = 35$ kV, $I_A = 1$ mA, monochromatisiert mit einem *Zr*-Filter. Spektren: *N1* – Primärstrahlung, *N2* – Streuung unter dem Winkel 45° , *N3* – 90° , *N4* – 135° . Messdauer: 60 s pro Spektrum.

ComptonPraktikum_Graphit.mca Compton-Streuung an einem Graphit-Streukörper (vgl. Fig. 7.21). Primärstrahlung: Röntgenröhre mit Molybdän-Anode, $U_A = 35$ kV, $I_A = 1$ mA, monochromatisiert mit einem *Zr*-Filter. Spektren: *N1* – Primärstrahlung, *N2* – Streuung unter dem Winkel 30° , *N3* – 60° , *N4* – 90° , *N5* – 120° , *N6* – 140° . Messdauer: 120 s pro Spektrum.

ComptonPraktikum_Materials.mca Compton-Streuung an unterschiedlichen Materialien (vgl. Fig. 7.23). Primärstrahlung: Röntgenröhre mit Molybdän-Anode, $U_A = 35$ kV, $I_A = 1$ mA, monochromatisiert mit einem *Zr*-Filter. Streuwinkel: $\vartheta = 140^\circ$. Spektren: *N1* – Graphit, 50 s; *N2* – Aluminium, 300 s; *N3* – Silber, 300 s; *N4* – Blei, 300 s.

MoseleyDemo.mca Röntgenfluoreszenz-Spektren verschiedener chemischer Elemente (vgl. Fig. 8.21). Anregung: Röntgenröhre mit Molybdän-Anode, $U_A = 30$ kV, $I_A = 0,25$ mA. Spektren: *N1* – Primärspektrum, *N2* – Eisen, *N3* – Zink, *N4* – Molybdän, *N5* – Silber. Messdauer: 60 s pro Spektrum.

MoseleyPraktikum.mca Röntgenfluoreszenz-Spektren verschiedener chemischer Elemente (vgl. Fig. 7.25, 7.26 und 7.27). Anregung: Röntgenröhre mit Kupfer-Anode, $U_A = 35$ kV. Spektren: *N1* – Titan, *N2* – Chrom, *N3* – Eisen, *N4* – Kobalt, *N5* – Nickel, *N6* – Zink, *N7* – Germanium, *N8* – Brom, *N9* – Rubidium, *N10* – Zirkon, *N11* – Molybdän, *N12* – Silber, *N13* – Zinn, *N14* – Barium, *N15* – Wolfram, *N16* – Gold, *N17* – Blei. Messdauer: 60 s pro Spektrum.

Minerals.mca Röntgenfluoreszenz-Spektren geologischer Proben (vgl. Fig. 9.3). Anregung: Röntgenröhre mit Kupfer-Anode, $U_A = 35$ kV, $I_A = 1$ mA. Spektren: *N1* – Scheelit ($CaWO_4$), 120 s; *N2* – ein „Stein vom Straßenrand“, 120 s.

Food.mca Röntgenfluoreszenz-Spektren von Lebensmitteln (vgl. Fig. 9.4). Anregung: Röntgenröhre mit Kupfer-Anode, $U_A = 35$ kV, $I_A = 1$ mA. Spektren: *N1* – Emmentaler Käse, 300 s; *N2* – Plexiglas, 300 s; *N3* – Blutwurst, 300 s; *N4* – trockene Aprikose, 180 s.

Vitamins.mca Röntgenfluoreszenz-Spektren von Vitaminen (vgl. Fig. 9.5). Anregung: Röntgenröhre mit Kupfer-Anode, $U_A = 35$ kV, $I_A = 1$ mA. Spektren: *N1* – Kalzan, 120 s; *N2* – Kräuterblut, 120 s; *N3* – NeoVin, 120 s.

CigarettesCinder.mca Röntgenfluoreszenz-Spektrum von Zigarettenasche (vgl. Fig. 9.6). Anregung: Röntgenröhre mit Molybdän-Anode, $U_A = 35$ kV, $I_A = 1$ mA. Messdauer: 30 min.

IsotopeExcitation.mca Spektren: *N1* – Röntgen- und Gamma-Spektrum eines ^{241}Am -Präparates (vgl. Fig. 9.1), 10 min; *N2* – Röntgenfluoreszenz-Spektrum von Kupfer mit Anregung durch Strahlung eines ^{241}Am -Präparates (vgl. Fig. 9.2), 10 min.

B. STRAHLENSCHUTZ

Dieser Abschnitt stellt eine kurze Zusammenfassung der Begriffsbestimmungen aus dem Strahlenschutz und einige Eckdaten zur natürlichen und zivilisatorischen Strahlenexposition des Menschen dar. Außerdem ist eine Zusammenfassung der gesetzlichen Schutzvorschriften gegeben. Diese Schutzvorschriften soll jeder mit der Röntgenstrahlung experimentierende Lehrer kennen und beachten.

B.1 Begriffsbestimmungen

Das Gefährdungspotential der Röntgenstrahlung liegt in den Ionisierungsprozessen, die bei ihrer Wechselwirkung mit Materie auftreten. Wie bei der radioaktiven Strahlung, kann die Röntgenbestrahlung Strahlenschäden im menschlichen Gewebe verursachen: findet der Ionisierungsprozess im Zellkern statt, so kann dies zu einer Beschädigung oder Veränderung der DNS führen. In dem Fall, dass dieser Primärschaden durch das zelleigene Reparatursystem nicht behoben wird, kann daraus ein dauerhafter Schaden werden. Eine mutierte DNS z.B. kann Anlass für die Entstehung von Krebs sein [59].

Es werden folgende für den Strahlenschutz zutreffenden Größen definiert (vgl. Röntgenverordnung [57] und „Lexikon zur Kernenergie“ [29]):

- **Energiedosis**

Die Energiedosis D ist die durch ionisierende Strahlung auf die Materie übertragene mittlere Energie pro Masseneinheit

$$D = \frac{d\bar{E}}{dm}.$$

Die Einheit der Energiedosis ist Joule durch Kilogramm (J/kg), ihr besonderer Einheitenname ist Gray (Gy).

- **Strahlungs-Wichtungsfaktor**

Die Wahrscheinlichkeit stochastischer Strahlenwirkungen ist nicht nur von der

Energiedosis abhängig, sondern auch von der Art und Energie der Strahlung, die die Dosis verursacht. Dies wird durch die Wichtung der Energiedosis mit einem Faktor (w_R – Strahlungs-Wichtungsfaktor) berücksichtigt. Die Werte dieses Faktors sind in Tab. B.1 angegeben.

Tab. B.1: Strahlungs-Wichtungsfaktor w_R nach Euratom-Grundnormen

Strahlenart und -energie	w_R
Photonen, alle Energien	1
Elektronen, Myonen, alle Energien	1
Neutronen	
<10 keV	5
10 keV bis 100 keV	10
100 keV bis 2 MeV	20
2 MeV bis 20 MeV	10
>20 MeV	5
Protonen >2 MeV	5
Alphateilchen, Spaltfragmente, schwere Kerne	20

- **Äquivalentdosis**

Produkt aus Energiedosis (absorbierte Dosis) im ICRU-Weichteilgewebe¹ und dem Strahlungs-Wichtungsfaktor². Beim Vorliegen mehrerer Strahlungsarten und Energien ist die gesamte Äquivalentdosis die Summe ihrer ermittelten Einzelbeiträge. Die Einheit der Äquivalentdosis ist das Sievert (Sv). Der früher gebräuchliche Einheitenname war Rad (rad), 1 Gy=100 rad.

- **Organdosis**

Die Organdosis $H_{T,R}$ ist das Produkt aus der über das Gewebe/Organ T gemittelten Organ-Energiedosis $D_{T,R}$, die durch die Strahlung R erzeugt wird,

¹ ICRU — International Commission on Radiation Units and Measurements. ICRU-Weichteilgewebe ist ein gewebeäquivalentes Material der Dichte 1g/cm³ mit der Zusammensetzung von 76,2% Sauerstoff, 11,1% Kohlenstoff, 10,1% Wasserstoff und 2,6% Stickstoff.

² In älteren Publikationen wird der Strahlungs-Wichtungsfaktor w_R oft als Qualitätsfaktor Q nach Bericht Nr. 51 der ICRU bezeichnet (ICRU report 51, ICRU Publications, 7910 Woodmont Avenue, Suite 800, Bethesda, Maryland 20814, U.S.A.).

und dem Strahlungs-Wichtungsfaktor w_R :

$$H_{T,R} = w_R \cdot D_{T,R}.$$

Die Einheit der Organdosis ist das Sievert (Sv).

Besteht die Strahlung aus Arten und Energien mit unterschiedlichen Werten von w_R , so werden die einzelnen Beiträge addiert. Für die Organdosis H_T gilt dann:

$$H_T = \sum_R w_R \cdot D_{T,R}.$$

Die Werte des Strahlungs-Wichtungsfaktors sind in der Tab. B.1 angegeben.

- **effektive Dosis**

Die effektive Dosis ist die geeignete Größe zur Angabe eines einheitlichen Dosiswertes bei unterschiedlicher Exposition verschiedener Körperbereiche zur Bewertung des Risikos für Strahlenspätchäden. Die effektive Dosis E ist die Summe der mit den Gewebe-Wichtungsfaktoren w_T multiplizierten mittleren Organdosen H_T in den einzelnen Organen und Geweben des Körpers durch äußere oder innere Strahlenexposition:

$$E = \sum_T w_T \cdot H_T.$$

Die Einheit der effektiven Dosis ist das Sievert (Sv).

Die in den Euratom-Grundnormen festgelegten Gewebe-Wichtungsfaktoren, die auch in die neue Fassung der Röntgenverordnung [57] übernommen wurden, sind in Tab. B.2 dargestellt.

- **Ortsdosis**

Ortsdosis ist die Äquivalentdosis für Weichteilgewebe, gemessen an einem bestimmten Ort. Die Ortsdosis ist bei durchdringender Strahlung ein Schätzwert für die effektive Dosis und Organdosen tiefliegender Organe.

- **Dosisleistung**

Quotient aus der Dosis in einem Zeitintervall und diesem Intervall. Einheit: Gray pro Stunde (Gy/h) für die **Energiedosisleistung**, Sievert pro Stunde (Sv/h) für die **Äquivalentdosisleistung** und **Ortsdosisleistung**.

Tab. B.2: Gewebe-Wichtungsfaktor w_T nach der Röntgenverordnung

Gewebe oder Organe	w_T
Keimdrüsen	0,20
Knochenmark (rot)	0,12
Dickdarm, Lunge, Magen	0,12
Blase, Brust, Leber	0,05
Speiseröhre, Schilddrüse	0,05
Haut, Knochenoberfläche	0,01
Andere Organe oder Gewebe	0,05

Die *Organdosis* und die *effektive Dosis* sind die zentralen Dosisgrößen im Strahlenschutz. Als Sammelbegriff für Organdosis und effektive Dosis wird der Begriff *Körperdosis* benutzt. Organdosis und effektive Dosis sind Schutzgrößen zur Verwendung im Strahlenschutz, einschließlich der Risikoabschätzung. Sie bilden für Energiedosen weit unterhalb der Schwellen für deterministische Strahlenschäden eine Grundlage zur Abschätzung der Wahrscheinlichkeit stochastischer Strahlenwirkungen.

B.2 Natürliche und Zivilisatorische Strahlenexposition des Menschen

Die natürliche Strahlenexposition des Menschen setzt sich aus der externen Exposition durch die kosmische und terrestrische Strahlung und der internen Exposition durch inkorporierte Radionuklide zusammen [30]. Die gesamte mittlere effektive Dosis durch die natürliche Strahlenexposition beträgt in Deutschland 2,1 mSv pro Jahr, vgl. Tab. B.3. Die große Variation der terrestrischen Komponente und insbesondere der Exposition durch Radon und seine Folgeprodukte führt zu lokal/regional großen Unterschieden der Dosis, typischerweise im Bereich von 1 bis 10 mSv pro Jahr.

Die zivilisatorische Strahlenexposition wird fast ausschließlich durch die Anwendung ionisierender Strahlen und radioaktiver Stoffe in der Medizin – überwiegend durch die Röntgendiagnostik – bestimmt. Weitere Beiträge stammen von nuklearen

Unfällen, Kernwaffentests, Flugreisen, beruflicher Strahlenexposition, Kernkraftwerken, fossilen Energieträgern und Industrieprodukten, vgl. Tab. B.3.

Tab. B.3: Strahlenexposition der Bevölkerung in Deutschland nach [30]

Ursache der Strahlendosis	effektive mittlere Dosis für die Bevölkerung	
	in mSv/a	in μ Sv/h
<i>Natur</i>		
kosmische Strahlung	0,3	0,034
terrestrische Strahlung	0,4	0,046
innere Bestrahlung	1,4	0,16
<i>Natur gesamt</i>	2,1	0,24
<i>Zivilisation</i>		
Medizin	2,0	0,23
Erhöhung der natürlichen Dosis durch industrielle Tätigkeit, Tschernobyl-Unfall, Kern- waffentests, Flugreisen, Beruf, fossile Energie- träger, Kernkraftwerke, Industrieprodukte	0,036	0,0041
<i>Zivilisation gesamt</i>	2,0	0,23
gesamt	4,1	0,47

Wie der Tab. B.3 zu entnehmen ist, beträgt die effektive Dosis aus allen Strahlenquellen für einen Einwohner in Deutschland im Mittel 4,1 mSv im Jahr. Diese Dosis stammt zu fast gleichen Anteilen aus der natürlichen und der medizinischen Exposition. Gegenüber diesen Beiträgen zur Strahlendosis und insbesondere unter Berücksichtigung der nicht unerheblichen Streuung sind alle anderen Dosisbeiträge faktisch zu vernachlässigen.

B.3 Schutzvorschriften

Die Schutzvorschrift, die den Umgang mit Röntgenquellen regelt ist die *Röntgenverordnung (RöV)* [57]. Sie ist vornehmlich auf die Anwendung in Medizin und Technik

orientiert, behandelt aber auch den Schulbetrieb. Die den Schulunterricht betreffenden Inhalte sind in den *KMK-Richtlinien zur Sicherheit im Unterricht (RiSU)* [55] berücksichtigt worden. Eine praktische Zusammenfassung der im Physikunterricht nötigen Schutzmaßnahmen beim Umgang mit der Röntgenstrahlung wurde in Themenheft der Zeitschrift *Naturwissenschaften im Unterricht Physik* dargestellt [59].

Die Grundsätze der Röntgenverordnung sind in §2c RöV formuliert: „Wer eine Tätigkeit nach dieser Verordnung plant, ausübt oder ausüben lässt, ist verpflichtet, jede unnötige Strahlenexposition von Mensch und Umwelt zu vermeiden“ und die nötige „auch unterhalb der Grenzwerte so gering wie möglich zu halten“. Es gilt unverändert auch für eine solche Tätigkeit in Rahmen des Schulunterrichts (RiSU, I-6.1).

B.3.1 Quellen der Röntgenstrahlung

Die Röntgenverordnung definiert zwei Haupttypen der Röntgenquellen: eine *Röntgeneinrichtung* und einen *Störstrahler*.

Röntgeneinrichtung ist eine „Einrichtung, die zum Zwecke der Erzeugung von Röntgenstrahlung betrieben wird einschließlich Anwendungsgeräte, Zusatzgeräte und Zubehör, der erforderlichen Software sowie Vorrichtungen zur medizinischen Befundung“.

Die Störstrahler sind „Geräte oder Vorrichtungen, in denen ausschließlich Elektronen beschleunigt werden und die Röntgenstrahlung erzeugen, ohne dass sie zu diesem Zweck betrieben werden“, das sind beispielsweise Gasentladungsröhren oder Kathodenstrahlröhren.

B.3.2 Verantwortlichkeiten

Nach der Röntgenverordnung trägt der Strahlenschutzverantwortliche die Verantwortung für den Einsatz einer Röntgeneinrichtung (§13 RöV). Im Fall der Schule ist es in der Regel der Schulleiter, „soweit dies für den sicheren Betrieb notwendig ist, hat der Strahlenschutzverantwortliche für die Leitung oder Beaufsichtigung dieses Betriebs die erforderliche Anzahl von Strahlenschutzbeauftragten schriftlich zu bestellen“. Eine Strahlenschutzbeauftragung setzt den Nachweis der „Fachkunde im Strahlenschutz“ voraus (§18 Abs.1 RöV). Diese Fachkunde muss alle 5 Jahre durch

eine anerkannte Fortbildungsmaßnahme aktualisiert werden (§18 Abs.2 RöV).

B.3.3 Umgang mit Röntgenquellen in der Schule

Die Minimierung der Strahlexposition in der Schule wird auch dadurch gewährleistet, dass dort nur Röntgengeräte eingesetzt werden dürfen, die als *Schulröntgeneinrichtungen* bauartzugelassen sind. Die Röntgenverordnung schreibt vor (Anlage 2 Abs.4), dass „bei Schulröntgeneinrichtungen sichergestellt sein muss, dass

- das Schutzgehäuse außer der Röntgenröhre oder dem Röntgenstrahler auch den zu behandelnden oder zu untersuchenden Gegenstand vollständig umschließt,
- die Ortsdosisleistung im Abstand von 0,1 m von der berührbaren Oberfläche des Schutzgehäuses $7,5 \mu\text{Sv/h}$ bei den vom Hersteller oder Einführer angegebenen maximalen Betriebsbedingungen nicht überschreitet³,
- durch zwei voneinander unabhängige Vorrichtungen sichergestellt sein muss, dass
 - die Röntgenröhre oder der Röntgenstrahler nur bei vollständig geschlossenem Schutzgehäuse betrieben werden kann oder
 - bei Untersuchungsverfahren, die einen kontinuierlichen Betrieb des Röntgenstrahlers erfordern, das Schutzgehäuse während des Betriebes des Röntgenstrahlers nur bei geschlossenem Strahlenaustrittsfenster geöffnet werden kann und hierbei im Inneren des Schutzgehäuses die Ortsdosisleistung $7,5 \mu\text{Sv/h}$ nicht überschreitet,
- die vom Hersteller oder Einführer angegebenen maximalen Betriebsbedingungen nicht überschritten werden können.“

Alle diese Voraussetzungen sind durch moderne Schulröntgengeräte erfüllt, aber es ist trotzdem kein verantwortungslosen Umgang mit ihnen zulässig. Auch die fol-

³ Ein Vergleich mit der Tab. B.3 zeigt, dass durch den Aufenthalt neben einer solchen Schulröntgeneinrichtung (im 0,1 m Abstand) der Wert der natürlichen Strahlenexposition erst in 280 Stunden erreicht wird. Das Dosisgrenzwert für die Bevölkerung von den Euratom-Grundnormen ([29], S. 191) 1 mSv/a würde in 133 Stunden der Exposition erreicht.

genden Bestimmungen zu für die Lehrzwecke eingesetzten Röntgenquellen müssen erfüllt werden:

- das Betreiben eines Schulröntgengerätes ist nicht genehmigungspflichtig, allerdings muss seine erstmalige Inbetriebnahme der zuständigen Aufsichtsbehörde mindestens 2 Wochen vorher angezeigt werden (§4 Abs.3 RöV)⁴;
- am Röntgengerät „keine Änderungen vorgenommen werden, die für den Strahlenschutz wesentliche Merkmale betreffen“ (§12 Abs.2 RöV);
- die Schulröntgengeräte müssen alle 5 Jahre durch einen Sachverständigen „insbesondere auf sicherheitstechnische Funktion, Sicherheit und Strahlenschutz überprüft“ werden (§18 Abs.1 Nr.5 RöV);
- der Text der Röntgenverordnung ist zur Einsicht auszulegen oder auszuhängen (§18 Abs.1 Nr.4 RöV);
- Schüler dürfen „beim Betrieb einer Schulröntgeneinrichtung oder eines Störstrahlers nur in Anwesenheit und unter der Aufsicht des zuständigen Strahlenschutzbeauftragten mitwirken“.

Der Betrieb der Störstrahler ist auch durch RöV und RiSU geregelt. So fordert die Röntgenverordnung (§5 Abs.2) für einen genehmigungsfreien Betrieb eines Störstrahlers, bei dem „die Spannung zur Beschleunigung der Elektronen 30 Kilovolt nicht überschreitet, dass

- die Ortsdosisleistung bei normalen Betriebsbedingungen im Abstand von 0,1 Metern von der berührbaren Oberfläche 1 Mikrosievert durch Stunde nicht überschreitet,
- auf dem Störstrahler ausreichend darauf hingewiesen ist, dass Röntgenstrahlung erzeugt wird und die Spannung zur Beschleunigung der Elektronen den vom Hersteller oder Einführer bezeichneten Höchstwert nicht überschreiten darf.“

⁴ Die *KMK-Richtlinien* fordern, dass der Strahlenschutzbeauftragter „die Inbetriebnahme einer Schulröntgeneinrichtung vier Wochen vorher“ anzeigt.

Die KMK-Richtlinien zur Sicherheit im Unterricht geben an, dass im Schulbetrieb die Störstrahler (Gasentladungsröhren) „nur mit einer Spannung weniger als 5 kV betrieben werden dürfen“ (I-6.8).

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] ADLER, Isidore: *X-Ray Emission Spectrography in Geology*. Amsterdam : Elsevier Publishing, 1966
- [2] BADER, Franz: *Eine Quantenwelt ohne Dualismus*. Hannover : Schroedel Schulbuchverlag, 1996
- [3] BADER, Franz (Hrsg.): *Dorn-Bader Physik-Sek II. Gymnasium Gesamtband*. Hannover : Schroedel Verlag, 2000
- [4] BAGGE, Erich: *Die Nobelpreisträger der Physik*. München : Heinz Moos Verlag, 1964
- [5] BARKLA, C. G.: Spectra of the Fluorescent Röntgen Radiation. In: *Phil. Mag* 22 (1911), S. 348–412
- [6] BAYER, Reinhard ; BREDTHAUER, Wilhelm ; BRUNS, Klaus G. ; KLAR, Gunter ; LICHTFELDT, Michael ; SCHMIDT, Martin ; WESSELS, Peter: *Impulse Physik 2, Gesamtband*. Stuttgart : Ernst Klett Verlag, 1997
- [7] BEATTY, R. T.: Energy of Roentgen Rays. In: *Proc. Roy. Soc. (London)* 89 (1913), S. 314–327
- [8] BERNSHAUSEN, Henrik: *Nachweis und Identifizierung von natürlichen Radionukliden im Physikunterricht*. Schriftliche Hausarbeit, Universität Siegen, 2001
- [9] BERTIN, Eugene P.: *Principles and Practice of X-Ray Spectrometric Analysis*. Second edition. New York : Plenum Press, 1975
- [10] BLEICHROTH, Wolfgang ; DAHNCKE, Helmut ; JUNG, Walter ; KUHN, Wilfried ; MERZYN, Gottfried ; WELTNER, Klaus: *Fachdidaktik Physik*. Köln : Aulis Verlag Deubner, 1991

- [11] BRAGG, W. H. ; BRAGG, W. L.: Reflection of X-Rays by Crystals. In: *Proc. Phys. Soc. (London)* A88 (1913), S. 428–438
- [12] *Nobel Prize Winners*. <http://www.britannica.com/nobel/index.html>. – Online-Ressource, Abruf: 14. Feb. 2005
- [13] BROCKMEYER, Heinrich: *Röntgenstrahlen im Unterricht*. Köln : Aulis Verlag Deubner, 1973
- [14] CHANTLER, C.T. ; OLSEN, K. ; DRAGOSET, R.A. ; KISHORE, A.R. ; KOTOCHIGOVA, S.A. ; ZUCKER, D.S.: *X-Ray Form Factor, Attenuation and Scattering Tables (version 2.0)*. <http://physics.nist.gov/ffast>. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. – Online-Ressource, Abruf: 5. Jan. 2005
- [15] COMPTON, Arthur H.: In: *Phys. Rev.* 22 (1923)
- [16] *Oberstufe Physik, Ausgabe E*. Berlin : Cornelsen Verlag, 2001
- [17] FEYNMAN, Richard: *QED*. Piper, 1988
- [18] FISCHLER, Helmut (Hrsg.): *Quantenphysik in der Schule*. Kiel : Institut für die Pädagogik der Naturwissenschaften, 1992
- [19] FRIEDRICH, W. ; KNIPPING, P. ; v. LAUE, M.: Interferenz-Erscheinungen bei Röntgenstrahlen. In: *Ber. Bayer. Akad. Wiss. München* (1912), S. 303–322
- [20] GÖHLER, Horst: Quantitative Experimente zum Compton-Effect(1). In: *Praxis der Naturwissenschaften - Physik* 11 (1980)
- [21] GÖHLER, Horst: Quantitative Experimente zum Compton-Effect(2). In: *Praxis der Naturwissenschaften - Physik* 12 (1980)
- [22] GREHN, Joachim (Hrsg.) ; KRAUSE, Joachim (Hrsg.): *Metzler Physik*. Hannover : Schroedel Verlag GmbH, 1998
- [23] HARREIS, Horst ; BÄUERLE, Hans G.: *Ionisierende Strahlen*. Stuttgart : Klett, 1982

- [24] HILSCHER, Helmut: Quantitative Demonstration der Compton-Streuung im Physikunterricht. In: *Praxis der Naturwissenschaften - Physik* 4 (1987)
- [25] JACKSON, John D.: *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons, 1962
- [26] JUNGE, Hartwig: Eine quantitative Versuchsauswertung zum Compton-Effekt. In: *MNU* 4 (1977)
- [27] KÜHNEL, Siegfried ; SCHAFBAUER, Hubert ; KNAUTH, Herbert: *Physik 13*. München : R. Oldenbourg Verlag, 1998
- [28] KLOCKENKÄMPER, Reinhold: Spurensuche bei römischen Kaisern – Römische Denare im Licht moderner Untersuchungsmethoden. In: *MNU* 4 (1997)
- [29] KOELZER, Winfried: *Lexikon zur Kernenergie*. Karlsruhe: Forschungszentrum Karlsruhe, 2001
- [30] KOELZER, Winfried: *Die Strahlenexposition des Menschen*. Berlin: Informationskreis Kernenergie, November 2004
- [31] KUHN, Wilfried (Hrsg.): *Handbuch der experimentellen Physik, Sekundarbereich II. Band 8: Atome und Quanten*. Köln : Aulis Verlag Deubner, 1996
- [32] KUHN, Wilfried (Hrsg.): *Physik 2*. Braunschweig : Westermann Schulbuchverlag, 2002
- [33] KUHN, Wilfried ; STÖCKLER, Manfred: Ein Effekt und viele Theorien. In: *Praxis der Naturwissenschaften - Physik* 7 (1985)
- [34] KULENKAMPFF, H.: Continuous X-Ray Spectrum. In: *Ann. Phys.* 69 (1923), S. 548–596
- [35] LEDERER, C. M. (Hrsg.) ; SHIRLEY, Virginia S. (Hrsg.): *Table of isotopes*. John Wiley & sons, 1978
- [36] *Bildungsplan für das Gymnasium*. Ministerium für Kultus und Sport Baden-Württemberg, 1994

- [37] *Lehrplan für das bayerische Gymnasium, Fachlehrplan für Physik*. Bayerische Staatsministerien für Unterricht und Kultus und Wissenschaft, Forschung und Kunst, 1991
- [38] *Verbindliche curriculare Vorgaben für den Unterricht in der Qualifikationsphase der gymnasialen Oberstufe. Physik*. Pädagogisches Landesinstitut Brandenburg, Januar 2003
- [39] *Rahmenplan Gymnasiale Oberstufe, Physik, Jahrgangsstufen 11 bis 13, Erprobungsfassung*. Ministerium für Bildung, Wissenschaft und Kultur, Mecklenburg-Vorpommern, 1999
- [40] *Sekundarstufe I Gymnasium. Richtlinien und Lehrpläne. Physik*. Ministerium für Schule und Weiterbildung, Wissenschaft und Forschung des Landes Nordrhein-Westfalen, 1999
- [41] *Sekundarstufe II Gymnasium/Gesamtschule. Richtlinien und Lehrpläne. Physik*. Ministerium für Schule und Weiterbildung, Wissenschaft und Forschung des Landes Nordrhein-Westfalen, 1999
- [42] *Lehrplan Physik, Grund- und Leistungsfach, Jahrgangsstufen 11 bis 13 der gymnasialen Oberstufe (Mainzer Studienstufe)*. Ministerium für Bildung, Wissenschaft und Weiterbildung des Landes Rheinland-Pfalz, 1998
- [43] *Lehrplan Gymnasium. Gewichtete Fassung. Physik. Klassen- und Jahrgangsstufen 6 – 12*. Sächsisches Staatsministerium für Kultus, Juni 2001
- [44] *Rahmenrichtlinien Gymnasium / Fachgymnasium Physik*. Kultusministerium des Landes Sachsen-Anhalt, 1999
- [45] *Lehrplan für das Gymnasium. Physik*. Thüringer Kultusministerium, 1999
- [46] *LEYBOLD Handblätter Physik*. Leybold Didactic GmbH, 2005
- [47] MEHARG, Andy: Killer wallpaper. In: *Spectroscopy Europe* 16 (2004)
- [48] MEYER, Lothar (Hrsg.) ; SCHMIDT, Gerd-Dietrich (Hrsg.): *Physik. Gymnasiale Oberstufe*. Berlin : Paetec, 2003

- [49] MÜLLER, R. ; WIESNER, H.: Das Münchener Unterrichtskonzept zur Quantenmechanik: erste empirische Ergebnisse. In: *Zur Didaktik der Physik und Chemie* (Hrsg.: R. Brechel). – Alsbach/Bergstrasse: Leuchtturm-Verlag, 2003
- [50] MOSELEY, H. G. J.: High-Frequency Spectra of the Elements. In: *Phil. Mag.* 26 (1913), S. 1024–33
- [51] NIEDRIG, Heinz (Hrsg.): *Bergmann-Schaefer. Lehrbuch der Experimentalphysik*. Bd. 3. Berlin : Walter de Gruyter, 1993
- [52] NITON CORPORATION (Hrsg.): *History of XRF*. http://www.niton.com/history_xrf.asp. – Online-Ressource, Abruf: 01. Mar. 2005
- [53] POHL, Robert W.: *Optik und Atomphysik*. 13. Auflage. Springer-Verlag, 1976
- [54] RAITH, Wilhelm (Hrsg.): *Bergmann-Schaefer. Lehrbuch der Experimentalphysik*. Bd. 4. Berlin : Walter de Gruyter, 1992
- [55] *Richtlinien zur Sicherheit im Unterricht (RiSU)*. Beschluss der Kultusministerkonferenz, 28. März 2003
- [56] RÖNTGEN, Wilhelm C.: Über eine neue Art von Strahlen (vorläufige Mitteilung). In: *Sitzungsbericht der Würzburger Physik.-Mediz. Gesellschaft* (28. Dez. 1895)
- [57] *Verordnung über den Schutz vor Schäden durch Röntgenstrahlen (Röntgenverordnung)*. Erlassen von der Bundesregierung am 8. Januar 1987, zuletzt geändert am 21. Juni 2002
- [58] RUSS, John C.: *Fundamentals of Energy Dispersive X-Ray Analysis*. Butterworths & Co Ltd., 1984
- [59] SAHM, Jürgen: Röntgenstrahlquellen. Sicherheitsbestimmungen und Hinweise. In: *Unterricht Physik* 80/81 (2004)
- [60] SCHÄFER, Klaus: Didaktische, methodische und physikgeschichtliche Bemerkungen zum Compton-Effekt. In: *Praxis der Naturwissenschaften - Physik* 4 (1980)

- [61] SCHINDLMAYER, Rudolf ; MERTENS, Marcel: *PHYS-DAT. Physikdidaktische Datenbank für die Sekundarstufe I/II.* <http://www.physikdidaktik.uni-wuppertal.de>. Bergische Universität Wuppertal. Didaktik der Physik. – Online-Ressource, Abruf: 12. Jun. 2004
- [62] SIEGBAHN, M.: *Spektroskopie der Röntgenstrahlen.* Berlin : J. Springer, 1924
- [63] STRECKER, Helmut: Automatische Gepäckkontrolle mit Röntgenstreustrahlung. In: *Physik in unserer Zeit* 1 (1999)
- [64] TSUJI, Kouichi (Hrsg.) ; INJUK, Jasna (Hrsg.) ; VAN GRIEKEN, René (Hrsg.): *X-Ray Spectrometry: Recent Technological Advances.* John Wiley & Sons, 2004
- [65] WEBER, Robert L.: *Pioneers of science. Nobel Prize winners in Physics.* Second edition. Bristol : Adam Hilger, 1988
- [66] WILLER, Jörg: *Didaktik des Physikunterrichts.* Frankfurt am Main : Wissenschaftlicher Verlag Harri Deutsch, 2003
- [67] WILLIAMS, K. L.: *An Introduction to X-Ray Spectrometry: X-ray fluorescence and electron microprobe analysis.* London : Allen & Unwin, 1987

Danksagungen

Ich möchte mich bedanken

bei Herrn Prof. Dr. R. Pelster für seine Bereitschaft, diese Arbeit zu betreuen, und für seine volle Unterstützung während ihrer Anfertigung,

bei Herrn J. Moser und Herrn Dr. H. J. Prinz für ihre Unterstützung und ihr Einverständnis, meine Erfahrungen und Ergebnisse aus meiner Tätigkeit bei Leybold Didactic zu veröffentlichen,

bei meinen Kollegen, insbesondere bei Herrn Dr. J. Selbach und Frau Dr. A. Krause, für viele hilfreiche Diskussionen während der Ausgestaltung und Korrektur dieser Arbeit,

bei meiner Familie, die mich auch in den letzten Monaten ertragen hat, in denen ich kaum noch einen Abend Zeit für sie hatte.