

Inhaltsverzeichnis

1	Ziel des Versuchs	1
2	Versuchsaufbau	1
3	Versuchsdurchführung	1
4	Auswertung	2
4.1	Theorie	2
4.2	Emissionsspektrum der Röntgenröhre	5
4.3	Bestimmung des Netzebenenabstands eines unbekanntes Kristalls	7
5	Diskussion	10
5.1	Versuchsergebnisse	10
5.2	Fehlerquellen und Verbesserungsvorschläge	12
A	Anhang	13
A.1	Abbildungen	13
A.2	Rohdaten	16

1 Ziel des Versuchs

In diesem Versuch soll die Zusammenstzung eines unbekanntes Kristalls mithilfe von Röntgenspektroskopie bestimmt werden. Hierfür soll zunächst das Röntgenspektrum anhand eines bekannten Kristalls kalibriert werden.

2 Versuchsaufbau

In ein Röntgengerät mit einem verstellbaren Winkel zwischen dem Strahler und einer Probe ist der bekannte LiF-Kristall als Probe montiert. Der Röntgenstrahler besteht aus einer Kupferanode, die von einer beheizten Kathode aus mit Elektronen beschossen wird. Das Röntgengerät ist mit einem Diskriminator verbunden, der die Strompulse in digitale Pulse umwandelt. Der Diskriminator wiederum ist mit einem elektrischen Zählrohr verbunden, das die Anzahl der eingehenden Pulse in einer vorgegebenen Zeit messen kann.

3 Versuchsdurchführung

Zunächst wurde die Spannung am Röntgenstrahler auf 25 kV aufgedreht und die Zählrohrspannung auf 500 V eingestellt. Es wurde der Winkel zwischen Röntgenstrahler und Horizontale mit der Winkelmaßkala abgelesen. Da sich der Kristall immer um den halben Winkel zwischen Röntgenstrahler und Horizontale mitgedreht hat, war der tatsächliche Winkel, indem die Strahlung auf den Kristall getroffen ist, die Hälfte des gemessenen Winkels. Dann wurde das elektrische Zählrohr auf eine Messzeit von 20 s eingestellt und nach dieser Zeit die Anzahl an Counts vom Anzeigedisplay abgelesen. Anschließend wurde der Winkel schrittweise verändert und die Messung in einem größtmöglichen Bereich für mehrere Winkel durchgeführt.

Nachdem das Spektrum des uns bekannten LiF-Kristalls gemessen wurde, wurde dieser durch einen uns unbekanntes Kristall ersetzt. Erneut wurden Counts für verschiedene Winkel wie zuvor beim LiF-Kristall gemessen.

4 Auswertung

4.1 Theorie

Emissionsspektrum des Röntengeräts

Aus der Glühkathode werden Elektronen der Elektronenladung e mit der Spannung U_A beschleunigt und treffen auf eine Kupferanode. Hierbei wird die elektrische Energie in kinetische Energie umgewandelt, es gilt:

$$E_{\text{kin}} = U_A e = \frac{1}{2} m v^2 \quad (1)$$

wobei m die Elektronenmasse und v die Geschwindigkeit der Elektronen bezeichnen. Treffen diese nun auf die Kupferanode, werden sie durch Wechselwirkung mit dem Coulombfeld zwischen Kern und Hülle des Kupfers abgebremst. Bei der Abbremsung wird dabei die kinetische Energie, die das Elektron verliert, als Photon der gleichen Energie

$$E_{\text{ph}} = h\nu \quad (2)$$

emittiert. Hierbei bezeichnet h die Planckkonstante und ν die Frequenz des Photons. Die Wellenlängen der abgestrahlten Photonen liegen hierbei im Röntgenbereich. Dadurch entsteht das sogenannte Bremskontinuum: Da es eine Vielzahl an Wechselwirkungen der Elektronen mit dem Kupfer gibt, werden Photonen über ein breites Spektrum an Wellenlängen emittiert. Es gibt dabei allerdings eine Untergrenze: Ein Photon kann maximal die Energie haben, die es erhält, wenn ein Elektron seine gesamte kinetische Energie verliert. Mit dem Zusammenhang

$$c = \lambda\nu \quad (3)$$

mit der Lichtgeschwindigkeit c und durch Gleichsetzen von Gleichungen (1) und (2) erhält man das Gesetz von Duane und Hunt:

$$eU_A = h\nu_{\text{gr}} = h \frac{c}{\lambda_{\text{gf}}} \quad (4)$$

Hierbei bezeichnet λ_{gr} die Grenzwellenlänge (die minimale Wellenlänge) und ν_{gr} die zugehörige (maximale) Grenzfrequenz der Photonen.

Es ist auch möglich, dass die Einstrahlung durch Elektronen dazu führt, dass sich ein Elektron eines Kupferatoms von seinem Atom trennt. Dies geschieht meistens für Elektronen auf dem Grundniveau, dem sogenannten K -Niveau. Wenn auf dem K -Niveau ein Elektron fehlt, wird es durch ein Elektron eines höheren Energieniveaus aufgefüllt. Durch die dabei freigesetzte Energie entsteht dann wieder ein Photon, mit der zum Energieunterschied der Energieniveaus zugehörige Wellenlänge bzw. Frequenz. Meistens kommen die Elektronen, die den freien Platz auf dem K -Niveau auffüllen, aus dem nächsthöheren L -Energieniveau oder aus dem M -Niveau, das zwei Stufen höher liegt. Die Strahlung, die aus der freiwerdenden Energie eines Übergangs von der L -Schale in die K -Schale entsteht, wird K_α -Strahlung genannt, die Strahlung, die durch einen Übergang von der M -Schale in die K -Schale entsteht, wird mit K_β -Strahlung bezeichnet. Da der Energieunterschied zwischen M - und K -Schale beim K_β -Übergang größer als der beim K_α -Übergang ist, hat das emittierte Photon beim K_β -Übergang eine höhere Energie und entsprechend eine größere Frequenz bzw. eine kleinere Wellenlänge.

Im Emissionsspektrum sind also für die Wellenlängen der K_α -Strahlung und der K_β -Strahlung deutliche Peaks zu erkennen, die wesentlich höher als das Bremskontinuum sind. In Abb. 1 ist der theoretisch erwartete Verlauf skizziert.

Aus der Formel der Energieniveaus E_n der Hauptquantenzahl n von Mehrelektronen-Atomen

$$E_n = -hR_y \frac{(Z - \sigma_n)^2}{n^2}, \quad (5)$$

mit der Rydbergfrequenz R_y , der Kernladungszahl Z und der Abschirmkonstante σ_n lässt sich für einen Übergang aus dem L - in das K -Niveau die Wellenlänge der K_α -Strahlung berechnen. Hierbei beträgt die Abschirmkonstante ungefähr $\sigma_1 \approx 1$, und der Übergang findet von der zweiten

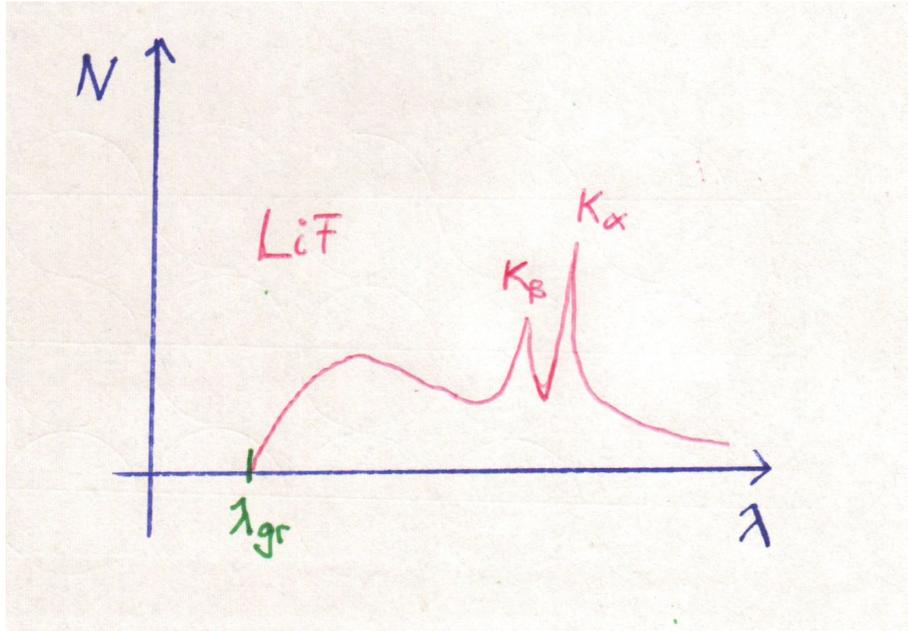


Abbildung 1: Theoretisch erwarteter Verlauf des Spektrums. Das Bremskontinuum steigt ab einer bestimmten Wellenlänge λ_{gr} an und nimmt dann mit zunehmenden Wellenlängen ab. Für Wellen kleinerer Wellenlängen als λ_{gr} ist kein Spektrum zu sehen. Aus dem Bremskontinuum stecken die K_{α} - und K_{β} -Peaks hervor, die sich aus Übergängen der Energiezustände einzelner Elektronen aus der L -Schale bzw. der M -Schale in die K -Schale ergeben.

in die erste Schale statt. Einsetzen der Hauptquantenzahlen, Berechnung der Energiedifferenz mit Gleichung (5) und Berechnung der Frequenzen $f_{K_{\alpha}}$ der Photonen mit Gleichung (3), die eine solche Energie haben, liefert das Moseley-Gesetz:

$$E_2 - E_1 = \frac{3}{4}hR_y(Z - 1)^2 = hf_{K_{\alpha}}. \quad (6)$$

Bragg-Reflexion

Trifft Röntgenstrahlung auf einen Kristall, dessen Atome bzw. Moleküle ein sogenanntes Raumgitter darstellen, tritt eine Reflexion nur bei einzelnen, von der Wellenlänge abhängigen Winkeln auf. Das liegt daran, dass sich Wellen, die an unterschiedlichen Atomlagen reflektiert werden, überlagern. Ist der Winkel gerade so groß, dass sich die Wellen konstruktiv überlagern, wird Licht reflektiert. In Abb. 2 ist die Braggreflexion zu sehen. Mit der Bragg-Bedingung

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

erhält man aus dem Einfallswinkel θ und dem Abstand der Netzebenen d die Wellenlänge der ausfallenden Strahlung. Hierbei bezeichnet z die Ordnungszahl. Das Licht, das aus anderen Winkeln eintritt, wird durch Vielstrahlinterferenz ausgelöscht.

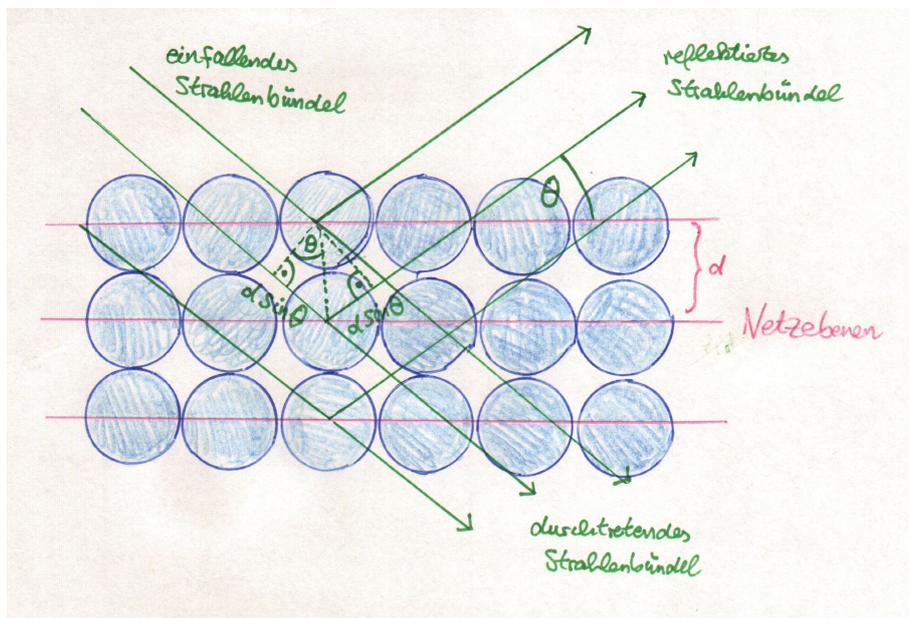


Abbildung 2: Modell für die Bragg-Reflexion an den Netzebenen eines Kristalls. Die Strahlen, die an der zweiten Ebene reflektieren, erhalten im Gegensatz zu den Strahlen, die direkt an der Oberfläche reflektieren, eine Phasenverschiebung von $\Phi = 2 \cdot d \sin(\theta)$ für einen Einfallswinkel θ und einen Netzebenenabstand von d . Die Nach der Reflexion überlagern sich die Strahlen, und je nach Wellenlänge gibt es konstruktive bzw. destruktive Interferenz.

4.2 Emissionsspektrum der Röntgenröhre

Der Winkel θ , in dem die Strahlung auf den Kristall getroffen ist, wurde durch halbieren des gemessenen Winkels θ_0 zwischen Röntgenstrahler und Horizontale berechnet. Da die Nadel, mit der der Winkel auf der Skala angezeigt wurde, relativ dick war, und es auch nicht immer einfach war, perfekt senkrecht auf die Skala zu schauen, wurde der Fehler auf die Winkelmessung mit $s_{\theta_0} = 0,3^\circ$ geschätzt. Der Fehler auf den Winkel θ ergibt sich dann mit Gaußscher Fehlerfortpflanzung durch

$$s_\theta = \frac{s_{\theta_0}}{2} = 0,15^\circ. \quad (8)$$

Mit Gleichung (7) lässt sich für eine Ordnung von $z = 1$ und dem Literaturwert für den Netzebenenabstand von $d_{\text{LiF, lit}} = 281,97 \text{ pm}$ aus der Versuchsanleitung [2] die Wellenlänge

$$\lambda = 2d_{\text{LiF, lit}} \sin(\theta)$$

berechnen. Die Unsicherheit auf die Wellenlänge ergibt sich wieder durch Gaußsche Fehlerfortpflanzung mit

$$s_\lambda = 2d_{\text{LiF, lit}} \cos(\theta) \cdot s_\theta.$$

Der Fehler auf die Anzahl der gemessenen Ereignisse N wurde durch

$$s_N = \sqrt{N}$$

abgeschätzt. Anschließend wurden die Counts in Abhängigkeit der zugehörigen Wellenlänge aufgetragen. Die Auftragung ist in Abb. 3 zu sehen.

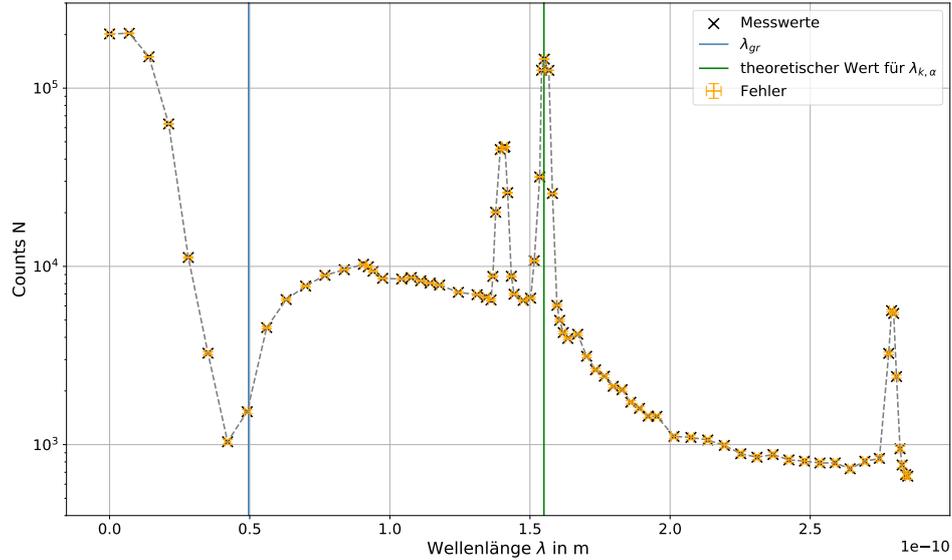


Abbildung 3: Auftragung der gemessenen Ereignisse N über eine Messdauer von 20 s in Abhängigkeit der Wellenlänge mit den zugehörigen Fehlern. Die K_α - und K_β -Peaks sind deutlich zu sehen. Für den K_α -Peak ist der theoretisch berechnete Wert in grün eingezeichnet. Der theoretisch berechnete Wert für die Grenzwellenlänge, die die kleinste Wellenlänge ist, bei der Ereignisse gemessen werden sollten, ist in blau eingezeichnet.

Durch Umstellen von Gleichung (4) wurde mit den Literaturwerten von $c = 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$, $h = 6,626\,070\,15 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ und $e = 1,602\,176\,634 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ QUELLE und der angezeigte Anodenspannung $U_A = 25 \text{ kV}$ der theoretische Wert für die Grenzwellenlänge

$$\lambda_{\text{gr, lit}} = \frac{hc}{eU_A} = (5,0 \pm 0,2) \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

berechnet. Da auf der Anzeige der Anodenspannung keine Schwankung zu erkennen war, wurde für die Fehlerabschätzung ein Digit verwendet. Der Fehler auf $\lambda_{\text{gr, lit}}$ ergibt sich hierbei wieder mit

$$s_{\lambda_{\text{gr, lit}}} = \frac{hcs_{U_A}}{eU_A^2}$$

aus der Gaußschen Fehlerfortpflanzung. Der theoretische Wert für die Grenzwellenlänge ist auch in Abb. 3 eingezeichnet.

In Abb. 3 ist klar zu erkennen, dass der Verlauf für sehr kleine Wellenlängen nicht mit dem aus Abb. 1 erwarteten Verlauf übereinstimmt. Statt einer klar erkennbaren Grenzwellenlänge, ab der kein Spektrum mehr aufgenommen wird, wurde eine hohe Zahl an Ereignissen gemessen. Um also einen experimentellen Wert für die Grenzwellenlänge zu erhalten, wurde an die Daten im Bereich etwas größerer Wellenlängen als der vermuteten Grenzwellenlänge von Hand eine Gerade angelegt. Durch Extrapolation wurde dann mit der Nullstelle der Gerade die vermutete Grenzwellenlänge

$$\lambda_{\text{gr}} = (4,4 \pm 0,3) \cdot 10^{-11} \text{ m} \quad (9)$$

bestimmt. Der Fehler wurde dabei direkt geschätzt. Der verwendete Bereich mit der von Hand bestimmten Gerade ist in Abb. 4 zu sehen.

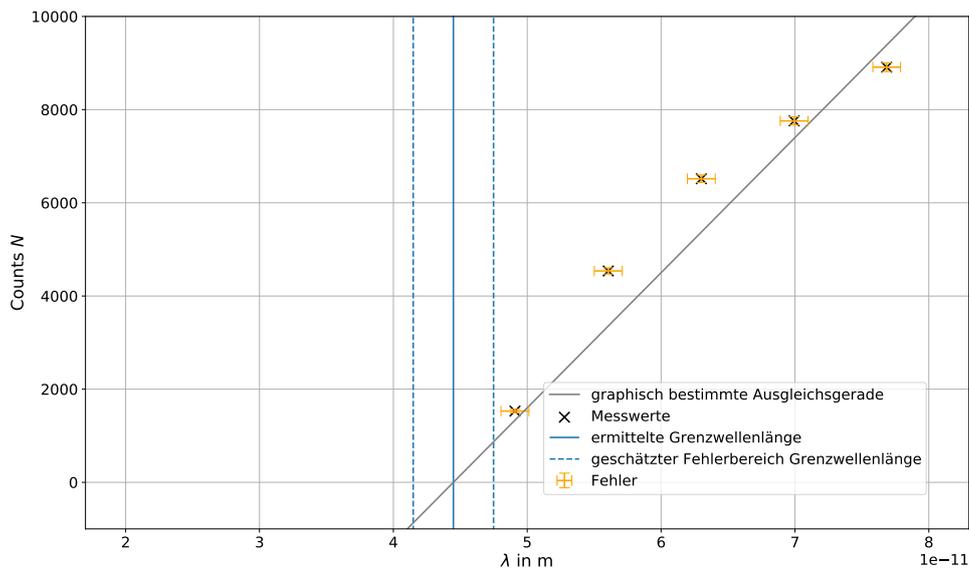


Abbildung 4: Auftragung der gemessenen Ereignisse N über eine Messdauer von 20 s in Abhängigkeit der Wellenlänge λ mit den zugehörigen Fehlern im Bereich der Grenzwellenlänge λ_{gr} . An die Werte in diesem Bereich wurde von Hand grob eine Gerade bestimmt. Die aus der Extrapolation bestimmte Grenzwellenlänge steht in Gleichung (9). Der theoretisch berechnete Verlauf ist mit seiner Unsicherheit auch mit eingezeichnet.

Durch Einsetzen von Gleichung (3) in Gleichung (6) und den Literaturwerten $c = 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$ und $R_y = 3\,289\,841\,960\,250\,880,5 \text{ Hz}$, QUELLE, sowie der Kernladungszahl für Kupfer $Z = 29$ ergibt sich für den theoretisch erwarteten Wert für die Wellenlänge des K_α -Peaks

$$\lambda_{K_\alpha, \text{lit}} = \frac{4c}{3R_y(Z-1)^2} = 1,55 \cdot 10^{-10} \text{ m.}$$

Da hier nur Literaturwerte ohne Unsicherheiten verwendet wurden, wurde hier auf den theoretisch erwarteten Wert kein Fehler berechnet. Dieser Wert ist auch in Abb. 3 eingezeichnet.

Um die Wellenlängen des K_α -Peaks λ_{K_α} und des K_β -Peaks λ_{K_β} aus dem gemessenen Emissionsspektrum zu bestimmen, wurde an die Bereiche um die Peaks eine Gaußfunktion der Form

$$G(x) = A \cdot \exp\left(\frac{-(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) + C \quad (10)$$

mit numerischer χ^2 -Minimierung angepasst.

Bei den hier vorliegenden Daten ist es nicht möglich, einen sinnvollen Fit für eine Gaußfunktion mit nur zwei Parametern, dem Mittelwert und der Standardabweichung, durchzuführen. Dies liegt zum einen daran, dass das Integral über eine Gaußfunktion mit zwei Parametern eins beträgt. Die hier gemessenen Daten sind allerdings nicht normiert. Deswegen bietet es sich an, einen Parameter A einzuführen, der die Gaußfunktion skaliert. Da das Integral über eine Gaußfunktion beschränkt ist, nähert sie sich für sehr große und sehr kleine Werte der null an. Die Daten in dem Bereich, an den die Funktion angepasst werden soll, sind allerdings sehr weit von der null entfernt. Um trotzdem einen Fit zu erhalten, der möglichst nah an den Daten liegt, bietet es sich hier also an, eine Verschiebung der Gaußfunktion entlang der y -Achse um den Wert C zuzulassen. Somit ist es möglich, die Bedingung, dass die Gaußfunktion für große und kleine Werte gegen null geht, (die aus der Anpassungsfunktion und nicht aus den Messdaten hervorgeht), zu erfüllen, ohne die Qualität der Anpassung (Nähe der Daten zur Funktion) zu beeinflussen.

Da bei der Anpassung vier Parameter minimiert werden müssen, konnte die Minimierung nicht sinnvoll mit einer selbstgeschriebenen Funktion durchgeführt werden. Deswegen wurde hier die `curve_fit`-Funktion von `scipy.optimize` verwendet. Diese Funktion nutzt entweder die `leastsq`-Funktion oder die `least_squares`-Funktion [5], die auch in `scipy` implementiert sind. Die `leastsq`-Funktion [5] bzw. die `least_squares`-Funktion [4] nutzen χ^2 -Minimierungsalgorithmen, die in den Funktionen `lmdr` und `lmdif` in MINPACK implementiert sind. Diese Funktionen wiederum verwenden Implementierung des Levenberg-Marquardt Algorithmus [5, 4], um den Wert für χ^2 zu minimieren.

Die Anpassung der Gaußfunktion ist beispielhaft für den K_α -Peak in Abb. 5 zu sehen.

Die aus der Gaußfunktion bestimmte Wellenlänge beträgt

$$\lambda_{K_\alpha} = (1,556 \pm 0,006) \cdot 10^{-10} \text{ m.} \quad (11)$$

Hierbei wurde der Fehler grob von Hand geschätzt. Analog wurde für den K_β -Peak die Wellenlänge

$$\lambda_{K_\beta} = (1,401 \pm 0,006) \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad (12)$$

bestimmt. Das Diagramm der hierfür verwendeten Werte zusammen mit dem Gauß-Fit ist im Anhang in Abb. 7 zu sehen.

Bei Betrachtung von Abb. 3 fällt außerdem auf, dass für sehr große Wellenlängen, also in unserer Messung bei großen Winkeln, noch ein weiterer Peak zu erkennen ist. Dieser ist wahrscheinlich ein Peak zweiter Ordnung. Bei der Umrechnung der Winkel in die Wellenlänge wurde die Annahme getroffen, dass nur Peaks erster Ordnung zu sehen sind. Wenn der extra Peak der K_β -Peak der zweiten Ordnung ist, erwartet man also bei unserer Umrechnung des Winkels in die Wellenlänge den Peak bei einer Wellenlänge, die doppelt so groß wie λ_{K_β} ist. Auch hier wurde wie für λ_{K_α} und λ_{K_β} eine Anpassung mit der Gaußfunktion vorgenommen. Die erhaltene Wellenlänge beträgt

$$\lambda_{K_{\beta,2}} = (2,793 \pm 0,004) \cdot 10^{-10} \text{ m.} \quad (13)$$

Eine Abbildung des hierfür verwendeten Bereichs zusammen mit dem Fit ist im Anhang in Abb. 8 zu sehen.

4.3 Bestimmung des Netzebenenabstands eines unbekanntes Kristalls

Bei der Aufnahme des zweiten Spektrums wurde der Ablesefehler wie zuvor geschätzt, für den Fehler auf den Winkel θ ergibt sich dann wie in Gleichung (8) beschrieben mit $s_\theta = 0,15^\circ$. Der Fehler

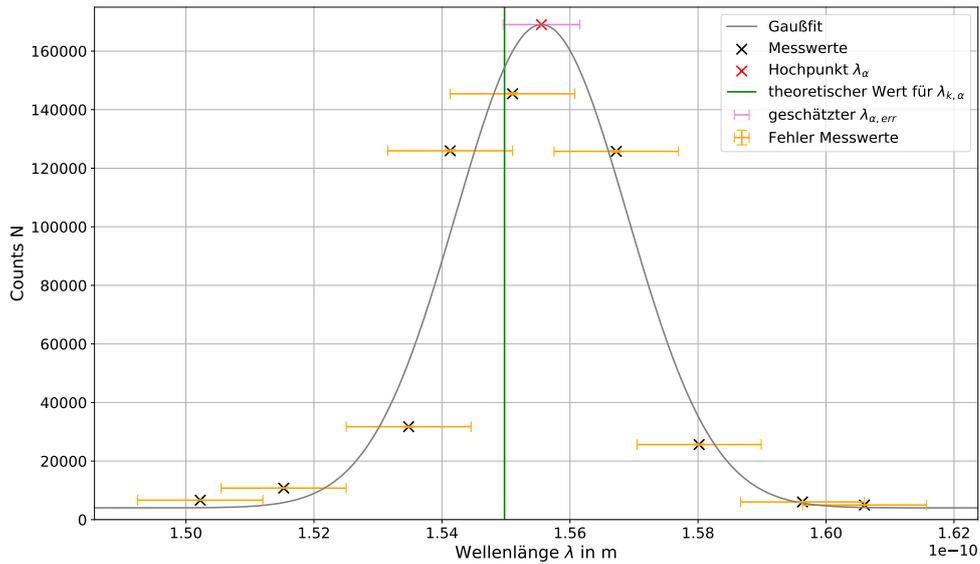


Abbildung 5: Auftragung der gemessenen Ereignisse N gegen die Wellenlänge λ mit den zugehörigen Fehlern im Bereich des K_α -Peaks. An die Daten wurde eine Gaußfunktion angepasst, die Form der Gaußfunktion steht in Gleichung (10). Der aus der Gaußfunktion berechnete Wert für die Wellenlänge des Maximums ist in rosa eingezeichnet. Die maximale Wellenlänge und die geschätzte Unsicherheit stehen in Gleichung (11). Der Fehler auf die Wellenlänge wurde hierbei von Hand geschätzt. Ein Fehler auf die Ereignisse der maximalen Wellenlänge wurde nicht geschätzt, da er für die weiteren Berechnungen nicht relevant ist. Außerdem ist in grün noch der theoretisch erwartete Wert für die Wellenlänge des Maximums eingezeichnet.

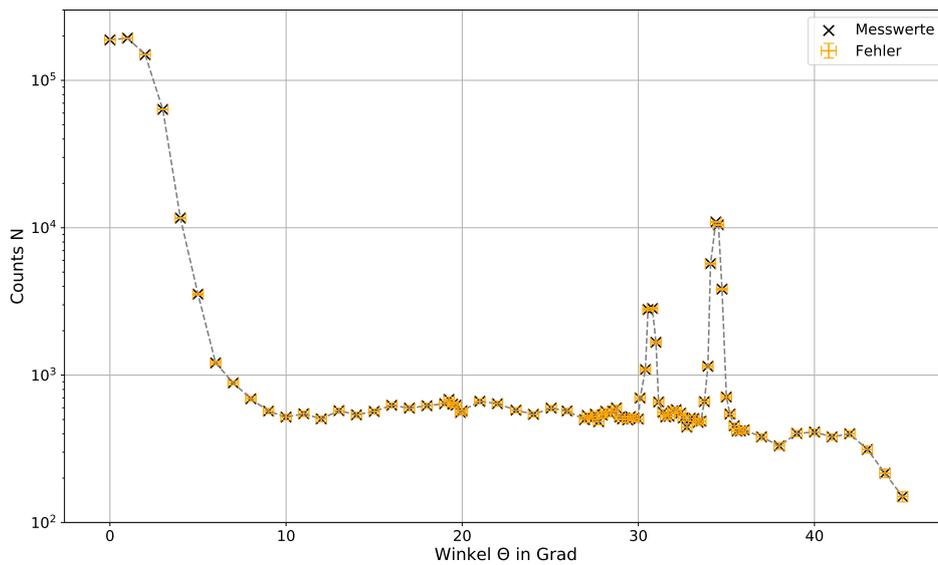


Abbildung 6: Auftragung der gemessenen Ereignisse N über eine Messdauer von 20 s in Abhängigkeit des Winkels θ mit den zugehörigen Unsicherheiten. Die K_α - und K_β -Peaks sind deutlich zu sehen.

auf die aufgenommenen Ereignisse N wurde wieder mit $s_N = \sqrt{N}$ abgeschätzt. Eine Auftragung von N gegen θ ist in Abb. 6 zu sehen.

Um die Winkel zu bestimmen, bei denen die Peaks zu beobachten sind, wurde analog zum ersten Versuchsteil eine Gaußfunktion (siehe Gleichung (10)) an die Bereiche um die Peaks angepasst. Für den K_α -Peak ergibt sich für den zugehörigen Winkel

$$\theta_{K_\alpha} = (34,41 \pm 0,09)^\circ, \quad (14)$$

für den K_β -Peak ergibt sich

$$\theta_{K_\beta} = (30,71 \pm 0,08)^\circ. \quad (15)$$

Hierbei wurden die Fehler wieder direkt von Hand abgeschätzt. Im Anhang in Abb. 9 sind die für die Anpassung verwendeten Messwerte zusammen mit den angepassten Gaußfunktionen für θ_{K_α} und in Abb. 10 für θ_{K_β} zu sehen.

Die Wellenlänge, bei der die Peaks auftreten, hängt theoretisch nur von dem Anodenmaterial, also hier Kupfer, ab. Durch Bestimmung der Winkel der Peaks, an denen aus dem ersten Versuchsteil auch die Wellenlängen bekannt sind, lässt sich also mit Gleichung (7) ein Wert für den Netzebenenabstand d_{unb} des unbekanntes Kristalls berechnen. Für die erste Ordnung $z = 1$ (hier sind nur Peaks erster Ordnung sichtbar) ergibt sich also

$$d_{\text{unb}} = \frac{\lambda}{2 \sin(\theta)}. \quad (16)$$

Für den K_α -Peak und den K_β -Peak wurden mit Gleichung (16) separat Werte für den Netzebenenabstand d_α bzw. d_β berechnet. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} d_\alpha &= (1,295 \pm 0,006) \cdot 10^{-10} \text{ m} \\ d_\beta &= (1,307 \pm 0,007) \cdot 10^{-10} \text{ m}. \end{aligned}$$

Um ein Endergebnis zu erhalten, wurde mit Formeln aus dem Datenanalyseskript [3] der gewichtete Mittelwert der beiden Werte berechnet. Es ergibt sich:

$$d_{\text{unb}} = (1,301 \pm 0,007) \cdot 10^{-10} \text{ m}.$$

Da die Standardabweichung des gewichteten Mittelwerts bei einer Mittelung über nur zwei Werte nicht sehr aussagekräftig ist, wurde sie hier nicht für die Fehlerabschätzung verwendet. Um die Unsicherheit auf den erhaltenen Wert von d_{unb} nicht zu unterschätzen, wurde der Fehler von d_α verwendet, der etwas größer als der Fehler von d_β ist.

5 Diskussion

5.1 Versuchsergebnisse

Der theoretisch erwartete Wert der minimale Wellenlänge der Bremsstrahlung wurde mithilfe des Duane-Hunt-Gesetzes auf

$$\lambda_{\text{gr,lit}} = (5,0 \pm 0,2) \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

bestimmt. Die aus dem von uns aufgenommenen Spektrum ermittelte minimale Wellenlänge wurde auf

$$\lambda_{\text{gr, lit}} = (4,4 \pm 0,3) \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

geschätzt. Damit ergibt sich ein t -Wert von

$$t = 1,42.$$

Da dieser Wert deutlich unter zwei liegt, deutet das auf eine gute Verträglichkeit der beiden Ergebnisse hin. Vermutlich liegt die reale minimale Grenzfrequenz des aufgenommenen Röntgenspektrums sogar noch näher an der theoretisch erwarteten als die von uns aus den Daten ermittelte. Davon ist auszugehen, da unsere Methode zum Bestimmen der Grenzfrequenz sehr fragwürdig war. Wir haben von Hand eine Ausgleichsgerade durch die ersten fünf Punkte über dem Minimum gezogen, obwohl in Abb. 4 klar zu sehen ist, dass diese nicht so richtig auf einer Gerade liegen. Der Verlauf erinnert eher an eine Wurzelfunktion oder ähnliches weshalb davon auszugehen ist, dass die minimale Wellenlänge der Bremsstrahlung etwas höher als von uns ermittelt liegt. Darüberhinaus handelt es sich bei den verwendeten Werten um die ersten Werte, die außerhalb des Bereiches für geringe Winkel sind, bei denen der Detektor von mehr Counts, als er messen kann, erreicht wird. In diesem Bereich wird zumindest ein Teil der Röntgenstrahlung direkt ohne durch den Kristall zu gehen auf den Detektor geschossen. Diese Effekt könnte somit auch bei der von uns verwendeten Werten eine Rolle gespielt und somit das Ergebnis verfälscht haben.

Für die erwartete Wellenlänge des K_α Zerfalls, die sich lediglich aus Naturkonstanten errechnet, ergibt sich einen Wert von

$$\lambda_{K_\alpha,\text{lit}} = 1,55 \cdot 10^{-10} \text{ m.}$$

Aus unserem Spektrum wurde mithilfe eines Gauß-Fits einen Wert von

$$\lambda_{K_\alpha} = (1,556 \pm 0,006) \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

für die Wellenlänge bestimmt. Somit ergibt sich ein t -Wert von

$$t = 0,96.$$

Da dieser deutlich unter zwei liegt, bedeutet das, dass die beiden Werte sehr gut zueinander passen. Außerdem wurde aus dem Spektrum mithilfe eines weiteren Gauß-Fits ein Wert für den K_β -Peak

$$\lambda_{K_\beta} = (1,401 \pm 0,006) \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

sowie ein Wert für den K_β -Peak der zweiten Ordnung

$$\lambda_{K_\beta,2} = (2,793 \pm 0,004) \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

bestimmt. Da dieser Peak dem K_β -Peak für Interferenz zweiter Ordnung bei der Bragg-Reflexion entspricht, wurde hier an sich die Wellenlänge falsch berechnet. Man erwartet also, dass die Wellenlänge für diesen Peak doppelt so groß ist wie die für den eigentlichen K_β -Peak bestimmte Wellenlänge. Um beide Werte zu vergleichen, wurde $\lambda_{K_\beta,2}$ und der zugehörige Fehler (Gaußsche Fehlerfortpflanzung) durch zwei geteilt und ein t -Wert berechnet. Es ergibt sich ein t -Wert von 1,02. Da auch dieser t -Wert deutlich unter zwei liegt, kann von einer guten Verträglichkeit ausgegangen werden. Die Vermutung, dass der beobachtete dritte Peak tatsächlich der K_β -Peak bei Interferenz zweiter Ordnung ist, kann also bestätigt werden.

Somit entspricht insgesamt das Röntgenspektrum gut den Erwartungen. Bei Betrachtung von Abb. 3 sind deutlich das erwartete Bremskontinuum und die K -Peaks zu erkennen. Lediglich im Bereich kleiner Winkel gibt es große Abweichungen von den Erwartungen. Statt einem Spektrum von null ist ein Anstieg auf Werte, die so groß sind, dass sie vom Messgerät nicht mehr richtig detektiert werden können, zu beobachten. Da der Rest des Spektrums gut zu den Erwartungen passt, liegt hier die Vermutung nah, dass der Versuchsaufbau für die Messung kleinerer Winkel nicht geeignet ist. So ist es z.B. möglich, dass die Strahlung bei solch kleinen Winkeln ohne den Kristall oder die Anode richtig zu treffen direkt in den Detektor gelangt ist. Dies könnte zu den beobachteten Abweichungen von der Theorie geführt haben.

Die Bestimmung der Wellenlänge der Peaks hätte verbessert werden können, indem man im Bereich dieser Wellenlängen mehr Werte aufnimmt. Damit wäre es möglich gewesen, die für die Ermittlung der Wellenlänge mehr Datenpunkte bei den Gauß-Fits zu verwenden. Dies war allerdings mit dem vorhandenen Versuchsaufbau nicht so richtig möglich. Da sich der Winkel nur in kleinen, diskreten Schritten einstellen ließ, konnten nicht mehr Zwischenwerte aufgenommen werden. Zudem war es nicht einfach, die Position des Zeigers präzise auf eine Nachkommastelle zu bestimmen. Um mehr Werte mit kleineren Unsicherheiten auf die Winkel aufnehmen zu können, wäre z.B. die Verwendung einer digitalen Anzeige für die Winkel mit einer Möglichkeit, in noch kleineren Schritten die Winkel einzustellen, von Vorteil gewesen.

Bei der Bestimmung des Netzebenenabstands eines unbekanntes Kristalls, um festzulegen, um welchen Kristall es sich handelt, ergaben sich für den K_α -Peak ein Winkel von

$$\theta_{K_\alpha} = (34,41 \pm 0,09)^\circ$$

und für den K_β -Peak ein Winkel von

$$\theta_{K_\beta} = (30,71 \pm 0,08)^\circ.$$

Zusammen mit den im ersten Versuchsteil bestimmten Wellenlängen der Peaks konnten zwei Werte für den Netzebenenabstand

$$\begin{aligned} d_\alpha &= (1,295 \pm 0,006) \cdot 10^{-10} \text{ m} \\ d_\beta &= (1,307 \pm 0,007) \cdot 10^{-10} \text{ m} \end{aligned}$$

bestimmt werden. Durch gewichtete Mittelung ergibt sich daraus ein Endergebnis von

$$d_{\text{unb}} = (1,301 \pm 0,007) \cdot 10^{-10} \text{ m}.$$

Der Literaturwert [6] des Gitterebenenabstands von Chromcarbid Cr_3C_2 beträgt für Einstrahlung von einer bestimmten Seite $2,830 \cdot 10^{-10} \text{ m}$. Der Netzebenenabstand ist die Hälfte des Gitterebenenabstands und beträgt dementsprechend für Chromcarbid $d_{\text{CrC}} = 1,415 \cdot 10^{-10} \text{ m}$. Damit liegt er knapp über 16 Standardabweichungen des von uns berechneten Werts von d_{unb} entfernt. Damit sind diese Werte nicht verträglich.

Für Indiumphosphid (InP) beträgt der Literaturwert [1] des Gitterebenenabstands $5,869 \cdot 10^{-10} \text{ m}$, der Netzebenenabstand ergibt sich dann durch $d_{\text{InP}} = 2,9345 \cdot 10^{-10} \text{ m}$. Dieser Wert liegt ungefähr 653 Standardabweichungen von d_{unb} weg. Damit kann aufgrund der Ergebnisse unserer Messung ausgeschlossen werden, dass es sich bei unserem Kristall um InP handelt.

Auch Chromcarbid ist mit 16 Standardabweichungen zu weit von unseren Messungen weg, um darauf zu schließen, dass es sich bei dem Kristall um Chromcarbid handelt hat. Allerdings ist der von uns berechnete Wert mit einem relativen Fehler von ca. 0,5 % trotz eher ungenauer Winkelmessung sehr genau. Somit ist es also durchaus möglich, dass die Fehler auf die Wellenlängen im ersten Versuchsteil und auf die Winkel im zweiten Versuchsteil wesentlich zu klein geschätzt wurden und die Unverträglichkeit mit dem Literaturwert von Chromcarbid aus dieser Fehleinschätzung stammt. Da kein Kristall gefunden werden konnte, der ein verträglicheren Wert für den Netzebenenabstand hat, ist es also durchaus möglich, dass die Fehler falsch geschätzt wurden.

Allerdings ist es genauso gut möglich, dass in der Messung und / oder Berechnung ein systematischer Fehler übersehen wurde, der zu einer Verschiebung des berechneten Netzebenenabstands führt. Falls dies der Fall ist, ist es nicht möglich, eine Aussage über den verwendeten Kristall zu machen.

5.2 Fehlerquellen und Verbesserungsvorschläge

Eine Fehlerquelle war die Ablesungenauigkeit der Winkel auf der Messskala. Dies lag zum einen an der Tatsache, dass sich die Messzeiger in einem kleinen Abstand zur Messkala befanden. Zum anderen weil die Messskala nur in Ein-Grad-Schritten auflöste. Zusätzlich konnten wir die Winkel nicht kontinuierlich messen, weil ein Drücken der Einstelltaste immer eine Verschiebung von ungefähr $0,3^\circ$ bewirkte. Anders als bei unserem Röntgengerät war bei anderen Versuchsgruppen statt einer Winkeltaste ein Drehknopf zum weichen Einstellen des Winkels vorhanden. Ein Austausch des Röntgengerätes hätte es uns erlaubt, mehr Messwerte in interessanten Bereichen aufzunehmen und so z.B. den Fehler des Gaußfits vermutlich reduziert. Eine genauere Skala sowie spitzere Messzeiger, die sich näher an der Skala befinden, hätten den Ablesefehler reduziert.

Eine weitere mögliche Fehlerquelle waren die internen Ungenauigkeiten der Geräte. Da am Zählrohr eine in der Versuchsanleitung [2] angegebene Spannung von 500 V eingestellt wurde, ohne vorher für eine Zählrohrkennlinie, also Messungen für verschiedene Spannungen, zu messen, konnte nicht überprüft werden, ob diese Spannung für das Zählrohr optimal ist. Um gute Messwerte zu erhalten, sollte die Zählrohrspannung auf einen Wert eingestellt werden, bei dem kleine Veränderungen der Spannung fast keine Änderung in der Messung bewirken. Dies konnte im Rahmen dieses Versuchs nicht selbst überprüft werden und somit ist es möglich, dass der optimale Bereich nicht genau getroffen wurde, und kleine Schwankungen in der Zählrohrspannung die Messwerte beeinflusst haben. Allerdings ist es sehr unwahrscheinlich, dass hier ein nennenswerter Fehler entstanden ist, da das Netzgerät, das die Zählrohrspannung geliefert hat, konstant einen Wert von 500 V angezeigt hat.

A Anhang

A.1 Abbildungen

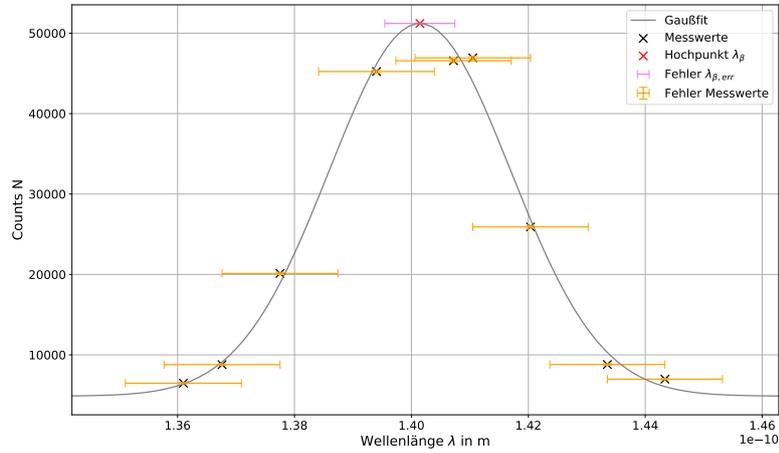


Abbildung 7: Auftragung der gemessenen Ereignisse N gegen die Wellenlänge λ mit den zugehörigen Fehlern im Bereich des K_β -Peaks. An die Daten wurde eine Gaußfunktion angepasst, die Form der Gaußfunktion steht in Gleichung (10). Der aus der Gaußfunktion berechnete Wert für die Wellenlänge des Maximums ist in rosa eingezeichnet. Die maximale Wellenlänge und die geschätzte Unsicherheit stehen in Gleichung (12). Der Fehler auf die Wellenlänge wurde hierbei von Hand geschätzt. Ein Fehler auf die Ereignisse der maximalen Wellenlänge wurde nicht geschätzt, da er für die weiteren Berechnungen nicht relevant ist.

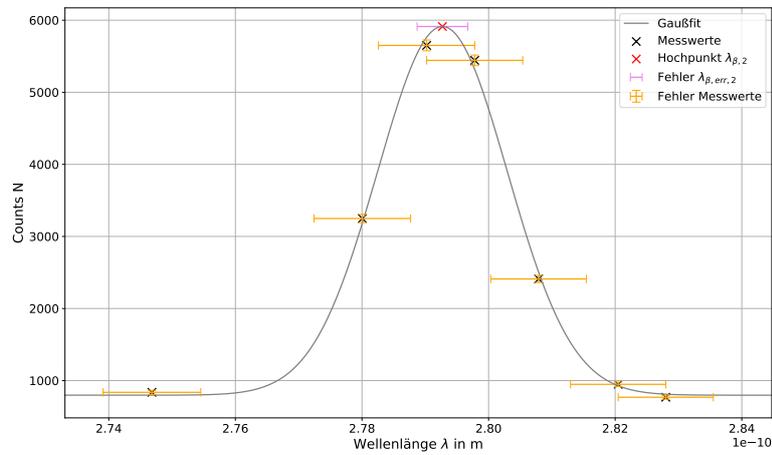


Abbildung 8: Auftragung der gemessenen Ereignisse N gegen die Wellenlänge λ mit den zugehörigen Fehlern im Bereich des zweiten K_{β} -Peaks. An die Daten wurde eine Gaußfunktion angepasst, die Form der Gaußfunktion steht in Gleichung (10). Der aus der Gaußfunktion berechnete Wert für die Wellenlänge des Maximums ist in rosa eingezeichnet. Die maximale Wellenlänge und die geschätzte Unsicherheit stehen in Gleichung (13). Der Fehler auf die Wellenlänge wurde hierbei von Hand geschätzt. Ein Fehler auf die Ereignisse der maximalen Wellenlänge wurde nicht geschätzt, da er für die weiteren Berechnungen nicht relevant ist.

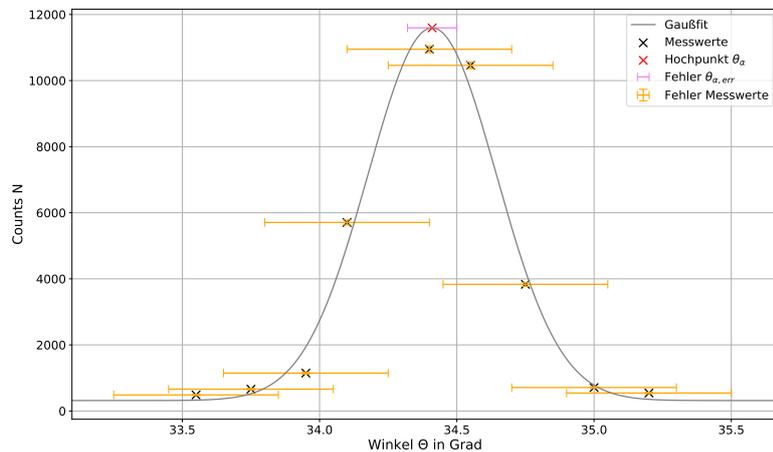


Abbildung 9: Auftragung der gemessenen Ereignisse N gegen den Winkel θ mit den zugehörigen Fehlern im Bereich des K_{α} -Peaks. An die Daten wurde eine Gaußfunktion angepasst, die Form der Gaußfunktion steht in Gleichung (10). Der aus der Gaußfunktion berechnete Wert für den Winkel des Maximums ist in rosa eingezeichnet. Der maximale Winkel und die geschätzte Unsicherheit stehen in Gleichung (14). Der Fehler auf den Winkel wurde hierbei von Hand geschätzt. Ein Fehler auf die Ereignisse des maximalen Winkels wurde nicht geschätzt, da er für die weiteren Berechnungen nicht relevant ist.

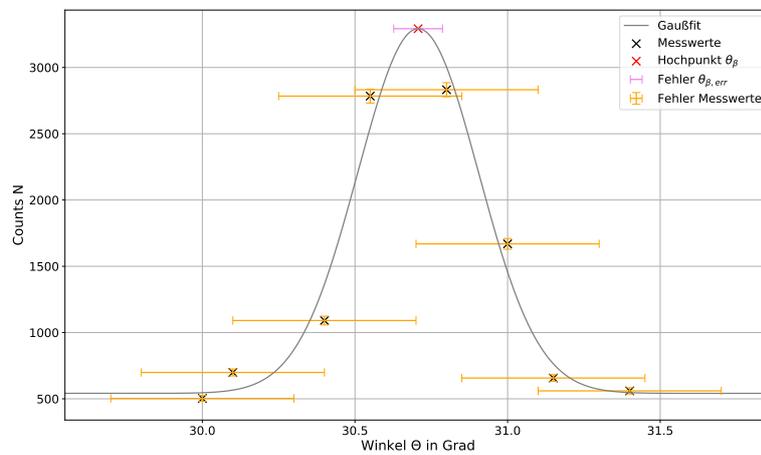
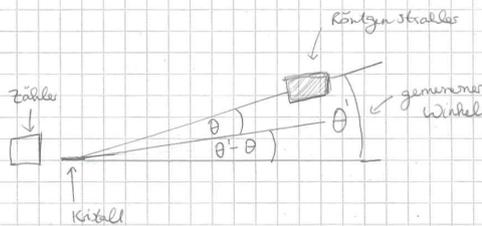


Abbildung 10: Auftragung der gemessenen Ereignisse N gegen den Winkel θ mit den zugehörigen Fehlern im Bereich des K_β -Peaks. An die Daten wurde eine Gaußfunktion angepasst, die Form der Gaußfunktion steht in Gleichung (10). Der aus der Gaußfunktion berechnete Wert für den Winkel des Maximums ist in rosa eingezeichnet. Der maximale Winkel und die geschätzte Unsicherheit stehen in Gleichung (15). Der Fehler auf den Winkel wurde hierbei von Hand geschätzt. Ein Fehler auf die Ereignisse des maximalen Winkels wurde nicht geschätzt, da er für die weiteren Berechnungen nicht relevant ist.

A.2 Rohdaten

VBS: Röntgenstrahlung 4.4.22		Messgerät v. SGL nicht richtig bes. ≈ 3000 Counts/s	
Messung des doppelten Winkels LiF		Vmax/min = 500V	
		$U_{\text{Anode}} = 25kV$ Messzeit: 20s	
Winkel an Grid	Counts	Winkel an Grid	Counts
0°	201317	55°	1729
2°	203065	56°	1589
4°	143876	57°	1445
6°	62568	58°	1441
8°	11221	60°	1112
10°	3235	62°	1088
12°	1038	64°	1062
14°	1530	66°	920
16°	4537	68°	889
18°	6516	70°	850
20°	7756	72°	820
22°	8917	74°	821
24°	9581	76°	808
26°	10275	78°	782
26,5°	9352	80°	750
28,0°	2806	82°	732
28,10°	8572	84°	807
30,0°	8403	84°	837
32,0°	8658	86°	5413
32,0°	8502	86°	465
33,0°	8061	87°	1326
34,0°	7855	87,3°	3249
36,0°	7153	87,7°	2650
38,0°	6041	88,1°	2410
40,0°	20125 (19632)	88,5°	948
42,0°	6981	89,2°	761
43,0°	6712	89,7°	679
44,0°	6481		
40,0°		40,5°	46593
39,7°	8787	40,1°	176476
40,5°	45255	39,8°	
41,0°	46936		
41,30°	25910		
41,7°	8805		
43,0°	1444		
43,5°	6694		
43,0°	125967		
44,8°	31748		
44,2°	10760		
45,3°	145421		
45,8°	125763		
46,2°	256466		
46,7°	6045		
47,0°	4381		
47,4°	4755		
47,8°	3942		
48,0°	4163		
50,0°	3132		
51,0°	2630		
52,0°	2429		
53,0°	2124		
54,0°	2084		

Fehler auf dem Winkel: $0,3^\circ$
Abschätzung der Fehler der Counts: ± 50



Winkelwert	Kristall	Messung des	Abgelesene Winkel
Winkel in Grad	Guss	Nickel in	Grund
0,0°	188136	62,8°	560
2,0°	193488	63,1°	520
4,0°	149352	63,5°	526
6,0°	63570	63,9°	571
8,0°	11658	64,3°	583
10,0°	3544	64,8°	552
12,0°	1217	65,1°	572
14,0°	385	65,5°	444
16,0°	691	65,9°	510
18,0°	570	66,3°	507
20,0°	519	66,8°	478
22,0°	547	67,1°	487
24,0°	505	67,5°	661
26,0°	574	67,9°	1347
28,0°	538	68,2°	5706
30,0°	567	68,8°	10949
32,0°	624	69,1°	10461
34,0°	597	69,5°	3834
36,0°	620	70,0°	710
38,0°	640	70,4°	544
40,0°	684	70,9°	454
42,0°	635	71,2°	417
44,0°	625	71,6°	418
46,0°	558	72,0°	425
48,0°	573	74,1°	381
50,0°	664	76,0°	331
52,0°	640	78,0°	402
54,0°	578	80,0°	411
56,0°	742	82,0°	381
58,0°	557	84,0°	400
60,0°	571	86,0°	313
62,0°	499	88,0°	216
64,0°	533	90,0°	150
66,0°	503		
68,0°	543		
70,0°	483		
72,0°	536		
74,0°	568		
76,0°	546		
78,0°	570		
80,0°	553		
82,0°	520		
84,0°	504		
86,0°	497		
88,0°	523		
90,0°	512		
92,0°	503		
94,0°	11663		
96,0°	2852		
98,0°	2784		
100,0°	1031		
102,0°	698		
104,0°	657		

VT
 St/m Ludwig
 04.04.2022

Literatur

- [1] „Basic Parameters of InP“. In: (22. Jan. 2018). URL: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InP/basic.html>. (accessed: 05.04.2022).
- [2] *Physiklabor für Anfänger*innen Teil 2, Anleitung Versuch 83, Röntgenstrahlung*. Physikalisches Institut, Fakultät für Mathematik und Physik, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, 2022, 4. Apr. 2022.
- [3] *Physiklabor für Anfänger*innen Teil 2, Datenanalyse A*. Physikalisches Institut, Fakultät für Mathematik und Physik, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, 2022, 4. Apr. 2022.
- [4] Pamphile Roy. *scipy, least_squares*. 2. Apr. 2021. URL: https://github.com/scipy/scipy/blob/b5d8bab88af61d61de09641243848df63380a67f/scipy/optimize/_lsq/least_squares.py.
- [5] Gagandeep Singh. *scipy, minpack_py*. 2. Nov. 2021. URL: https://github.com/scipy/scipy/blob/b5d8bab88af61d61de09641243848df63380a67f/scipy/optimize/_minpack_py.py.
- [6] L.E. Toth. *Transition Metal Carbides and Nitrides*. New York: Academic Press, 1967. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Lattice_constant#List_of_lattice_constants.