

# VL 20

---

---

VL 18

18.1. Mehrelektronensysteme

VL 19

19.1. Periodensystem

VL 20

20.1. Röntgenstrahlung

# Vorlesung 20:

---

**Roter Faden:**

**Röntgenstrahlung**

**Folien auf dem Web:**

**<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/>**

**Siehe auch:**

**<http://www.wmi.badw.de/teaching/Lecturenotes/index.html>**

**<http://www.uni-stuttgart.de/ipf/lehre/online-skript/>**

# Röntgenstrahlung (X-rays)

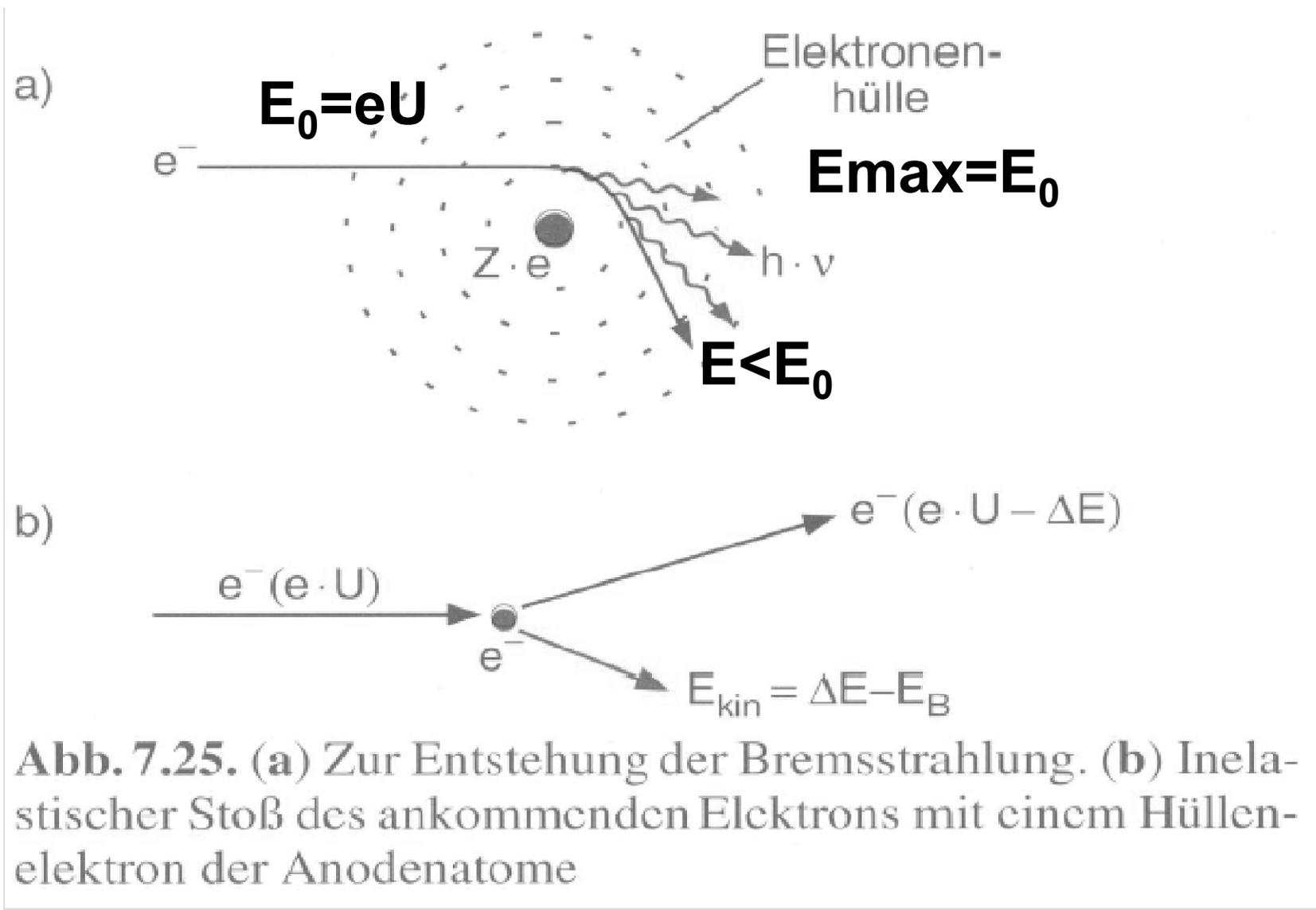
---

Röntgenstrahlung bezeichnet elektromagnetische Wellen einer Photonenenergie zwischen 100 eV und 1 MeV und von Wellenlängen zwischen  $10^{-8}$  und  $10^{-12}$  m. Röntgenstrahlen liegen im elektromagnetischen Spektrum zwischen dem ultravioletten Licht und der Gammastrahlung, mit der sie sich teilweise überschneiden. Die Röntgenstrahlung wurde von Wilhelm Conrad Röntgen entdeckt und trägt ihren Namen im deutschsprachigen Raum zu seinen Ehren. In anderen Sprachräumen wird sie häufig mit dem von Röntgen ursprünglich selbst verwendeten Begriff *X-Strahlen* (englisch *X-rays*) bezeichnet.



**30-facher  
Beckenfraktur  
mit Metall-  
stäben  
stabilisiert**

# Entstehung der Röntgenstrahlung



# Röntgenspektren

## Bremsstrahlung:

Elektronen wandel ihre Energie  $e \cdot U$  beim Auftreffen auf ein Target in *Bremsstrahlung* um.

Ein Teil wird in kontinuierliche Röntgenstrahlung umgesetzt, ein Teil in Wärme.

Ist *elektromagnetische Strahlung* - zeigt Polarisation, Beugung, Interferenz.

Intensitätsverteilung - siehe Abb.

kurzwellige Grenze:  $h\nu \leq h\nu_G = e \cdot U \Rightarrow \lambda \geq \lambda_G = \frac{h \cdot c}{e \cdot U}$

Bei ausreichend großen Spannungen - charakteristische Linien - entsprechen atomaren Übergängen.

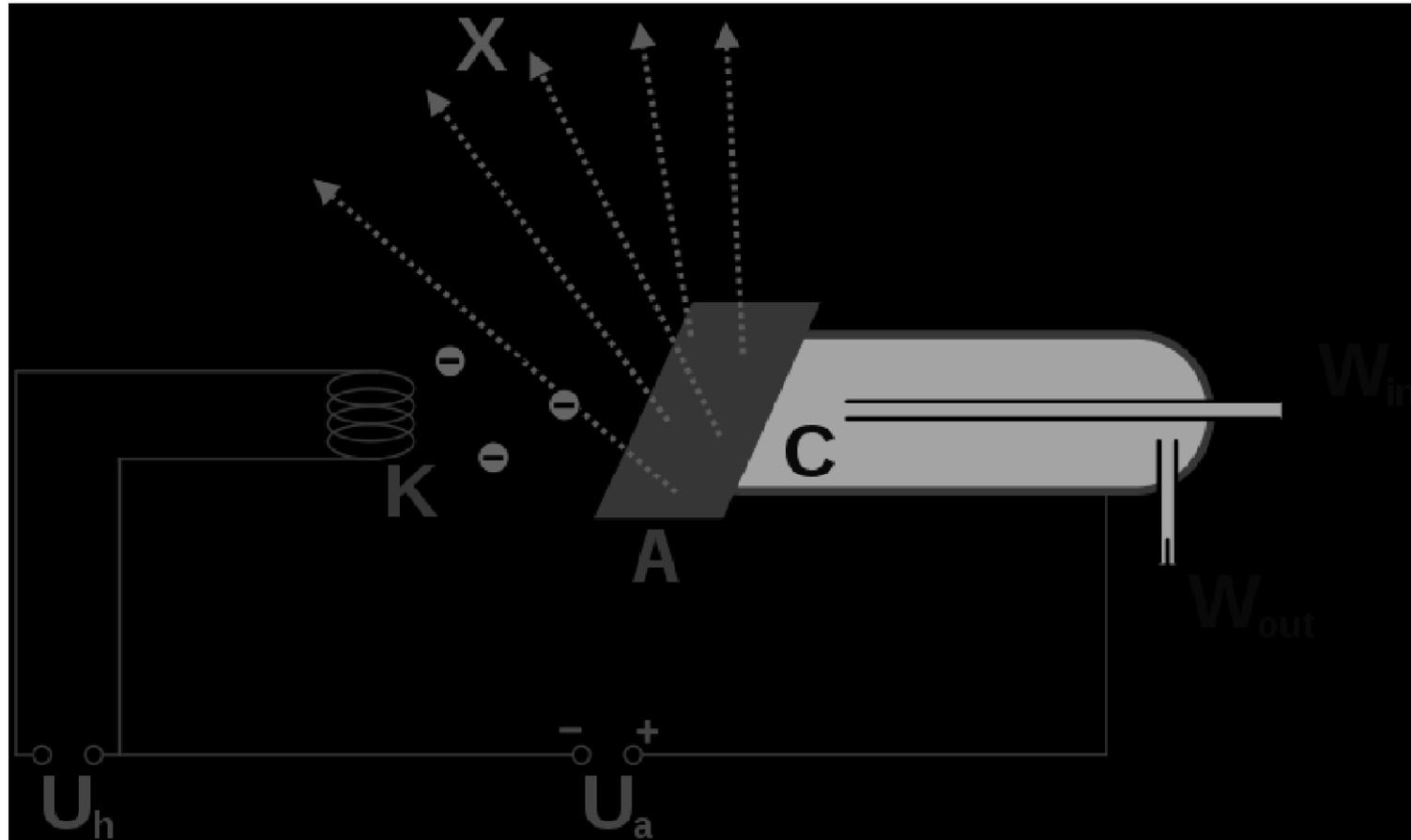
## Charakteristische Röntgenstrahlung:

Energie der Elektronen muß "genügend" groß sein um Elektronen der Anodenatome aus inneren Schale in freie höhere Energiezustände anzuregen.



mit  $E_{kin} - E'_{kin} = E_i - E_k$  und  $A^*(E_i) \Rightarrow A(E_k) + h\nu_{ik}$

# Röntgenröhre



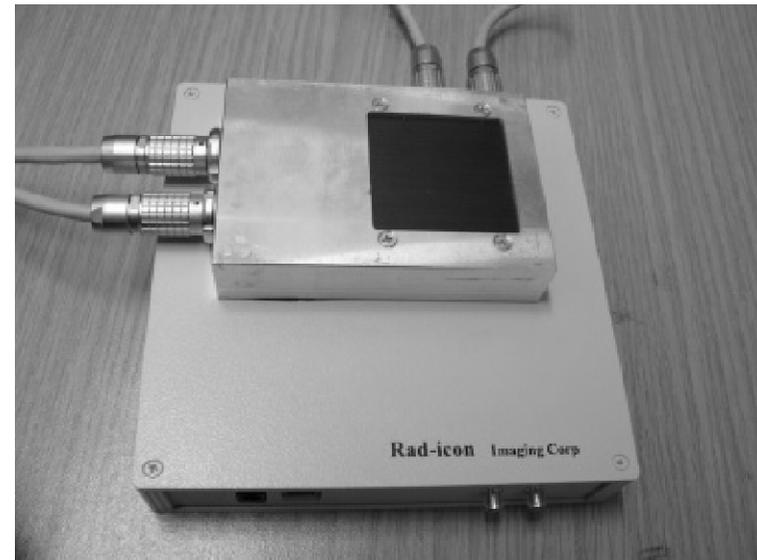
**Schematische Zeichnung einer Röntgenröhre (K: Kathode (Elektronenquelle), A: Anode (Elektronenziel), X: X-Strahlung, Röntgenstrahlung)**

---

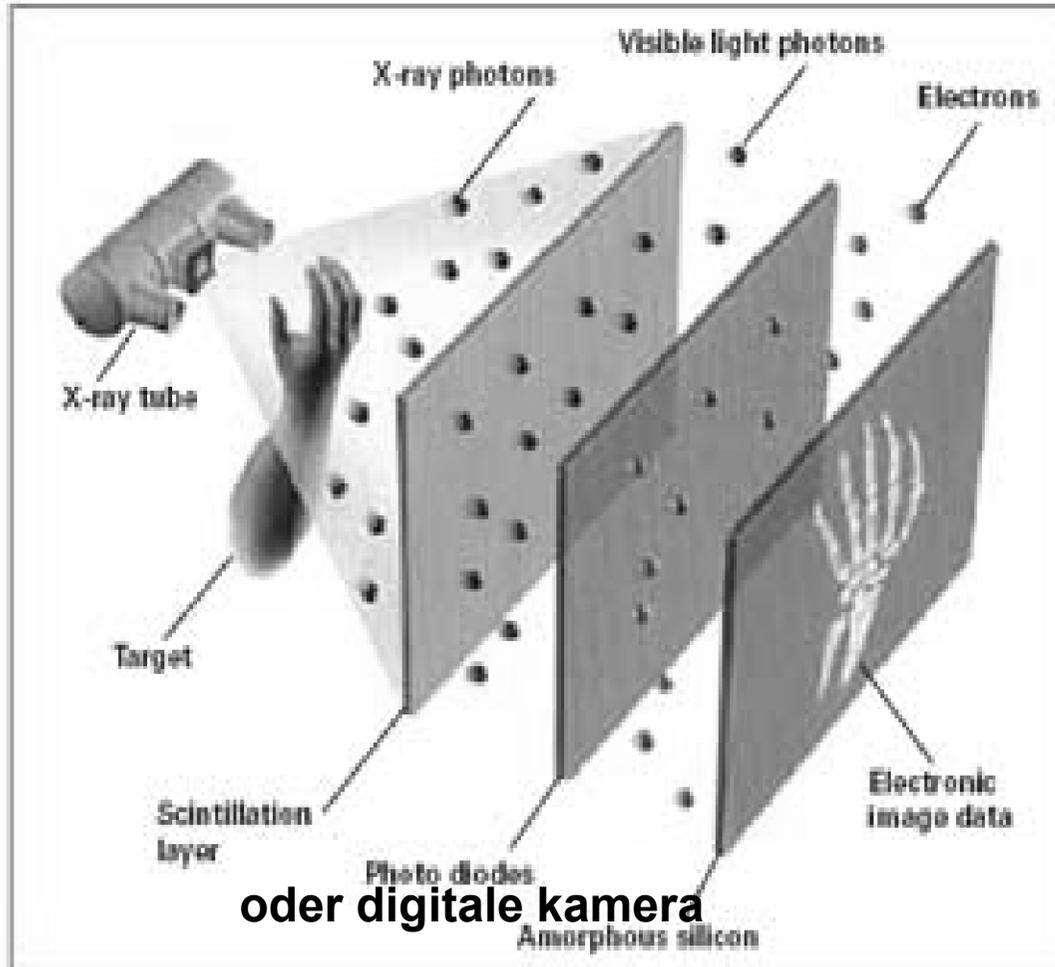
## Röntgenröhre



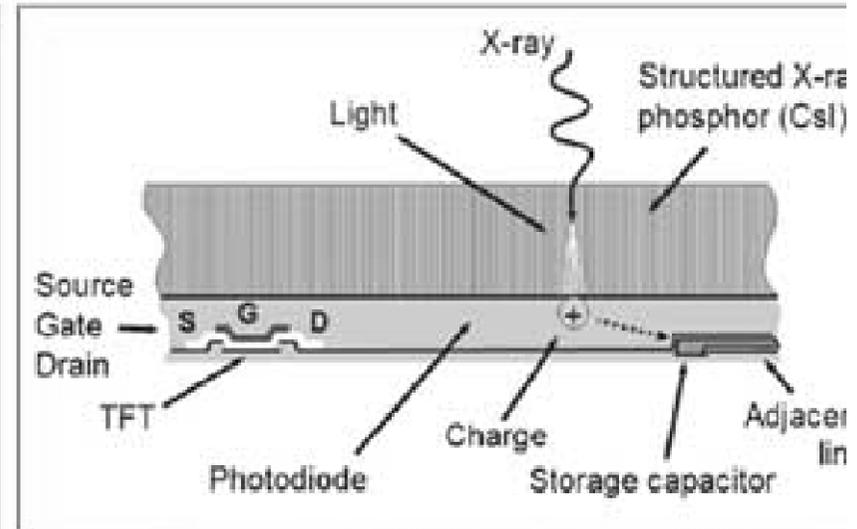
## Röntgenkamera



# Röntgendetektor



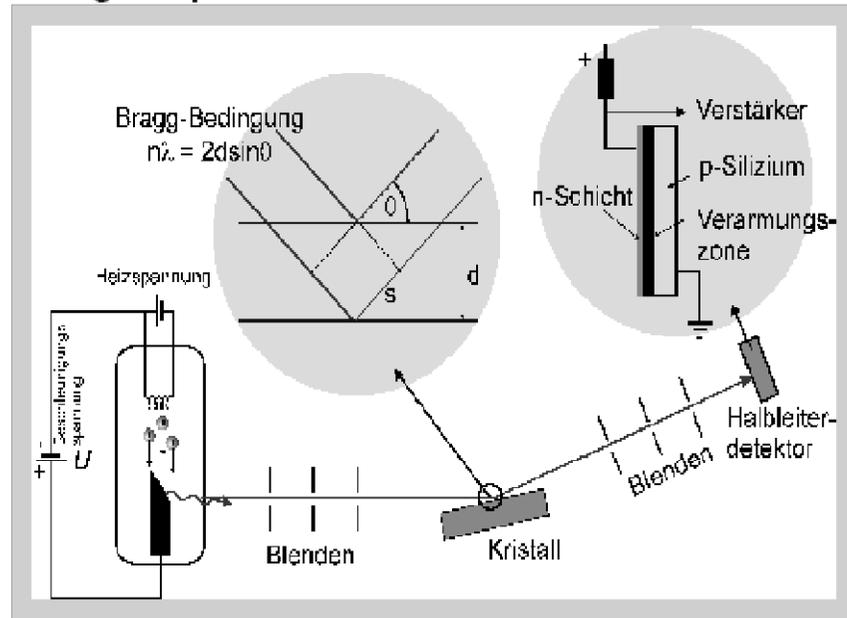
oder digitale kamera



<http://www.emasiamag.com>

# Röntgenstrahlung

## Röntgen-Spektrometer



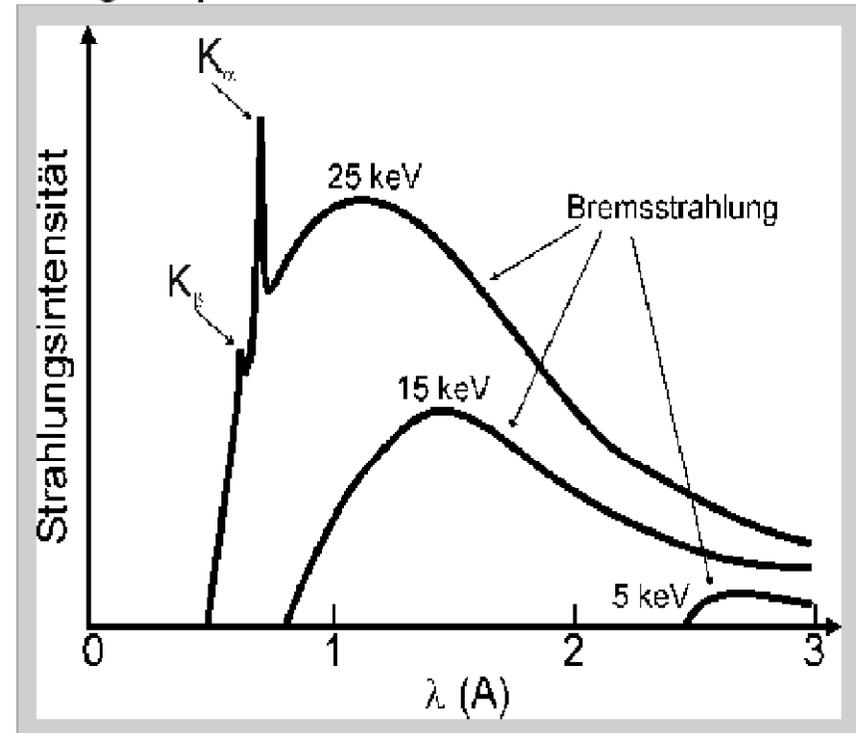
Spektroskopie der inneren Schalen.

- ▶  $E = 1-100 \text{ keV}$
- ▶  $\lambda = 0,1-10 \text{ \AA}$

## Röntgen-Bremsspektrum

- ▶ Kontinuierlich
- ▶ Grenzfrequenz  $\nu_{\text{max}} = eU/h$
- ▶  $I(\nu) \sim Z(\nu_{\text{max}} - \nu)$

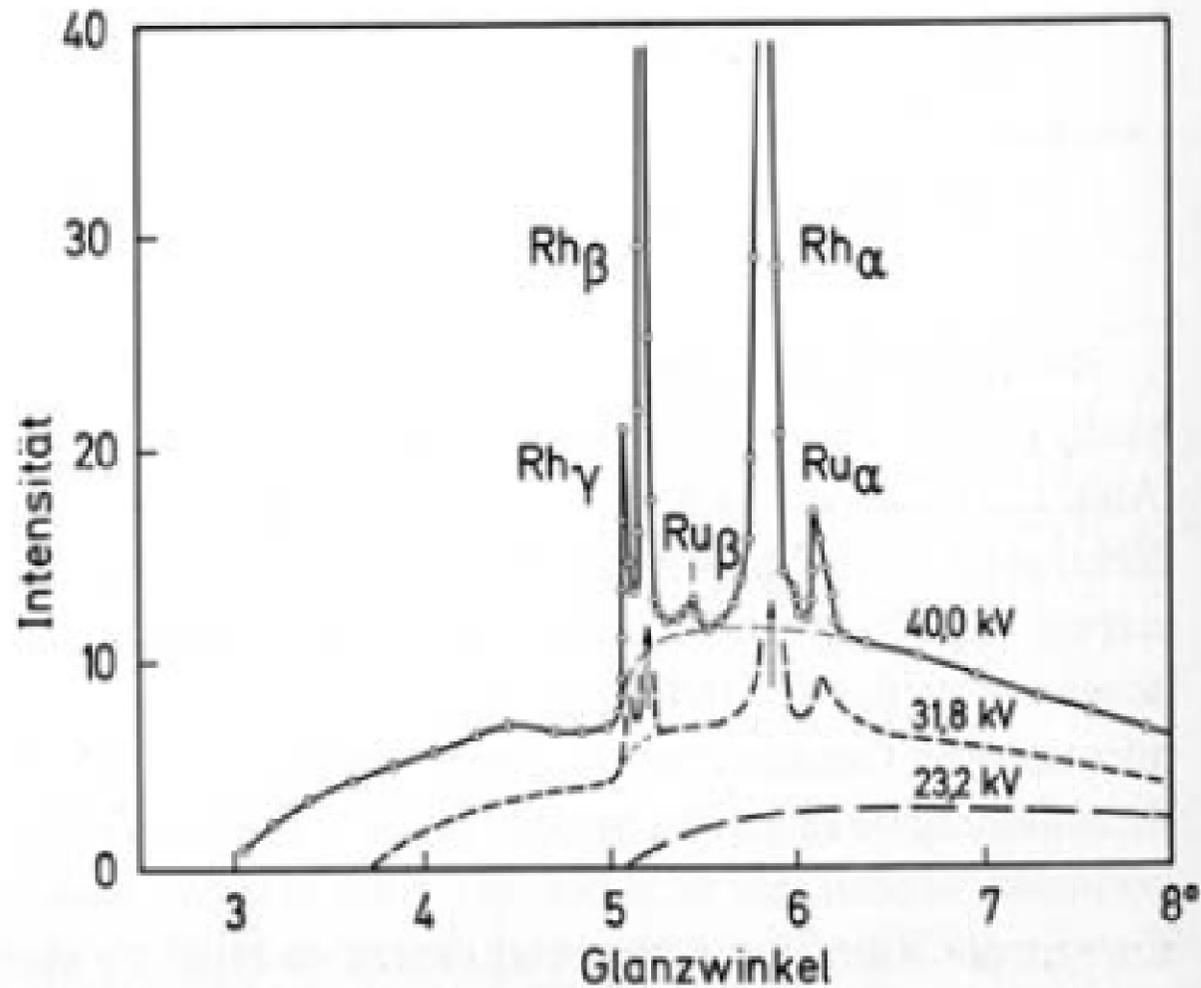
## Röntgen-Spektrum



## Charakteristisches Spektrum

- ▶ Wenige Linien
- ▶ Zusammengefasst in Serien
- ▶ Kurzwellige Grenzfrequenz (Serienkante)
- ▶ Serien verschieben sich mit  $Z$  zu höheren Energien

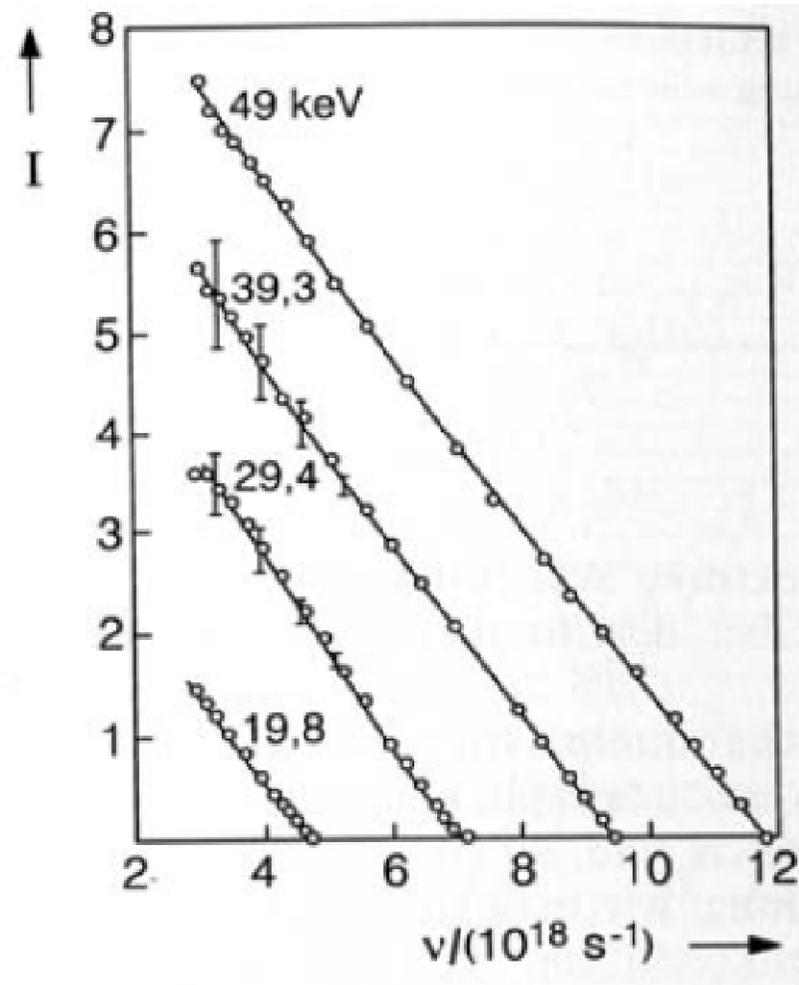
# Röntgenröhre mit Rh Anode (verunreinigt mit Ru)



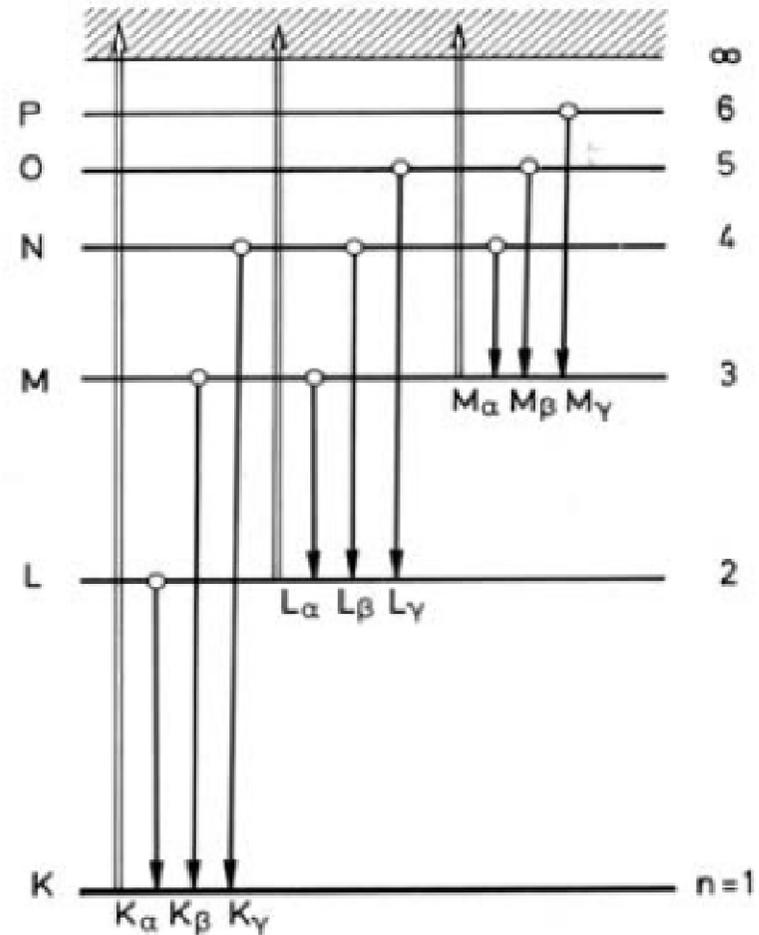
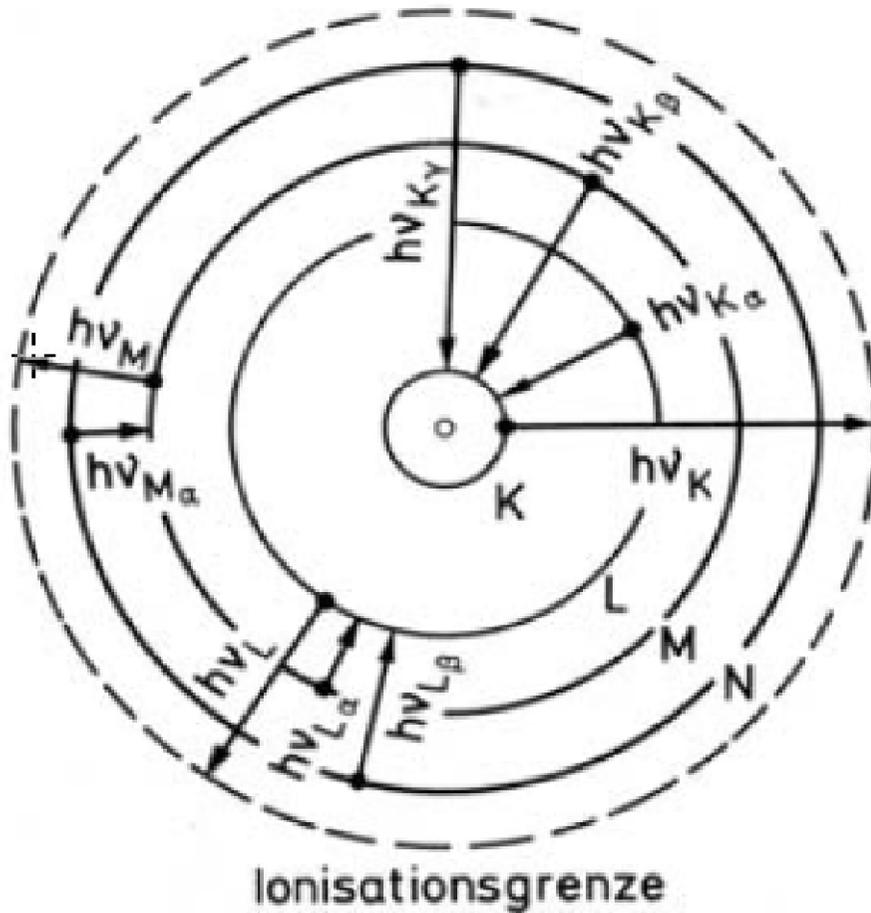
5



# Intensität einer Röntgenröhre vs Frequenz



# Charakteristische Linien im Bohr Modell



# Elektronenanordnung im Grundzustand

Schale			K		L		M			N			
Z	Element		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s				
1	H	Wasserstoff	1										
2	He	Helium	2										
3	Li	Lithium	2	1									
4	Be	Beryllium	2	2									
5	B	Bor	2	2	1								
6	C	Kohlenstoff	2	2	2								
7	N	Stickstoff	2	2	3								
8	O	Sauerstoff	2	2	4								
9	F	Fluor	2	2	5								
10	Ne	Neon	2	2	6								
11	Na	Natrium	2	2	6	1							
12	Mg	Magnesium	2	2	6	2							
13	Al	Aluminium	2	2	6	2	1						
14	Si	Silizium	2	2	6	2	2						
15	P	Phosphor	2	2	6	2	3						
16	S	Schwefel	2	2	6	2	4						
17	Cl	Chlor	2	2	6	2	5						
18	Ar	Argon	2	2	6	2	6						
19	K	Kalium	2	2	6	2	6		1				
20	Ca	Calcium	2	2	6	2	6		2				
21	Sc	Scandium	2	2	6	2	6	1	2				
22	Ti	Titan	2	2	6	2	6	2	2				
23	V	Vanadium	2	2	6	2	6	3	2				
24	Cr	Chrom	2	2	6	2	6	5	1				
25	Mn	Mangan	2	2	6	2	6	5	2				
26	Fe	Eisen	2	2	6	2	6	6	2				
27	Co	Kobalt	2	2	6	2	6	7	2				
28	Ni	Nickel	2	2	6	2	6	8	2				
29	Cu	Kupfer	2	2	6	2	6	10	1				
30	Zn	Zink	2	2	6	2	6	10	2				
31	Ga	Gallium	2	2	6	2	6	10	2	1			
32	Ge	Germanium	2	2	6	2	6	10	2	2			
33	As	Arsen	2	2	6	2	6	10	2	3			
34	Se	Selen	2	2	6	2	6	10	2	4			
35	Br	Brom	2	2	6	2	6	10	2	5			
36	Kr	Krypton	2	2	6	2	6	10	2	6			
37	Rb	Rubidium	2	2	6	2	6	10	2	6		1	
38	Sr	Strontium	2	2	6	2	6	10	2	6		2	
39	Y	Yttrium	2	2	6	2	6	10	2	6	1	2	
40	Zr	Zirkonium	2	2	6	2	6	10	2	6	2	2	
41	Nb	Niob	2	2	6	2	6	10	2	6	4	1	
42	Mo	Molybdän	2	2	6	2	6	10	2	6	5	1	
43	Tc	Technetium	2	2	6	2	6	10	2	6	6	1	
44	Ru	Ruthenium	2	2	6	2	6	10	2	6	7	1	
45	Rh	Rhodium	2	2	6	2	6	10	2	6	8	1	
46	Pd	Palladium	2	2	6	2	6	10	2	6	10		
47	Ag	Silber	2	2	6	2	6	10	2	6	10	1	
48	Cd	Cadmium	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	
49	In	Indium	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	1
50	Sn	Zinn	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	2
51	Sb	Antimon	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	3
52	Te	Tellur	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	4
53	I	Iod	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	5
54	Xe	Xenon	2	2	6	2	6	10	2	6	10	2	6

# Elektronenanordnung im Grundzustand

Schale			N	O				P
Z	Element		4f	5s	5p	5d	5f	6s
55	Cs	Cäsium		2	6			1
56	Ba	Barium		2	6			2
57	La	Lanthan		2	6	1		2
58	Ce	Cer	2	2	6			2
59	Pr	Praseodym	3	2	6			2
60	Nd	Neodym	4	2	6			2
61	Pm	Promethium	5	2	6			2
62	Sm	Samarium	6	2	6			2
63	Eu	Europium	7	2	6			2
64	Gd	Gadolinium	7	2	6	1		2
65	Tb	Terbium	9	2	6			2
66	Dy	Dysprosium	10	2	6			2
67	Ho	Holmium	11	2	6			2
68	Er	Erbium	12	2	6			2
69	Tm	Thulium	13	2	6			2
70	Yb	Ytterbium	14	2	6			2
71	Lu	Lutetium	14	2	6	1		2
72	Hf	Hafnium	14	2	6	2		2
73	Ta	Tantal	14	2	6	3		2
74	W	Wolfram	14	2	6	4		2
75	Re	Rhenium	14	2	6	5		2
76	Os	Osmium	14	2	6	6		2
77	Ir	Iridium	14	2	6	7		2
78	Pt	Platin	14	2	6	9		1
79	Au	Gold	14	2	6	10		1

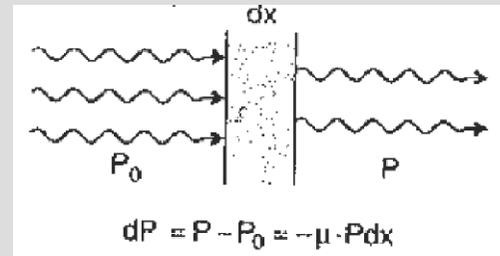
Schale			N	O				P	Q		
Z	Element		4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s
80	Hg	Quecksilber	14	2	6	10		2			
81	Tl	Thallium	14	2	6	10		2	1		
82	Pb	Blei	14	2	6	10		2	2		
83	Bi	Bismut	14	2	6	10		2	3		
84	Po	Polonium	14	2	6	10		2	4		
85	At	Astat	14	2	6	10		2	5		
86	Rn	Radon	14	2	6	10		2	6		
87	Fr	Francium	14	2	6	10		2	6		1
88	Ra	Radium	14	2	6	10		2	6		2
89	Ac	Actinium	14	2	6	10		2	6	1	2
90	Th	Thorium	14	2	6	10		2	6	2	2
91	Pa	Protactinium	14	2	6	10	2	2	6	1	2
92	U	Uran	14	2	6	10	3	2	6	1	2
93	Np	Neptunium	14	2	6	10	5	2	6		2
94	Pu	Plutonium	14	2	6	10	6	2	6		2
95	Am	Americium	14	2	6	10	7	2	6		2
96	Cm	Curium	14	2	6	10	7	2	6	1	2
97	Bk	Berkelium	14	2	6	10	8	2	6	1	2
98	Cf	Californium	14	2	6	10	10	2	6		2
99	Es	Einsteinium	14	2	6	10	11	2	6		2
100	Fm	Fermium	14	2	6	10	12	2	6		2
101	Md	Mendelevium	14	2	6	10	13	2	6		2
102	No	Nobelium	14	2	6	10	14	2	6		2
103	Lr	Lawrencium	14	2	6	10	14	2	6	1	2
104	Rf	Rutherfordium	14	2	6	10	14	2	6	2	2

# Röntgenabsorption

Paralleles Strahlungsbündel wird in Materialschicht der Dicke  $dx$  abgeschwächt:  $dP = -\mu P dx$

$\mu$ ...Abschwächungskoeffizient

Es gilt:  $P(x) = P_0 \cdot e^{-\mu x}$



*Abschwächung infolge: Streuung und Absorption.*

Schwächungskoeffizient  $\mu = \mu_s + \mu_a$

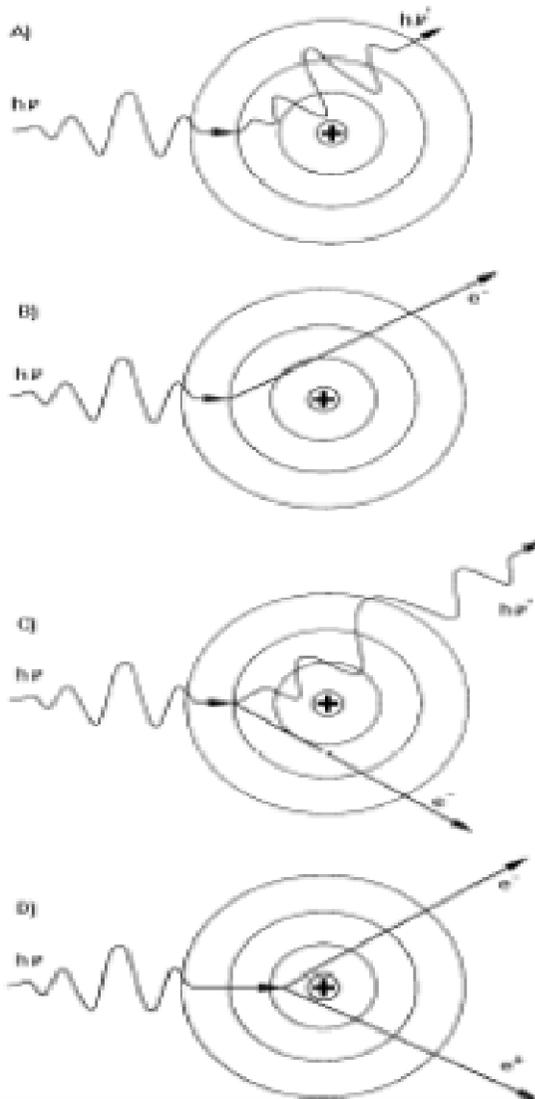
$\mu_s$ ....*Streukoeffizient* proportional zu  $\omega^4$  wenn Teilchendurchmesser  $d \ll \lambda$  (aus Streutheorie)

**Daher bei hohen Energien Streuung dominant, bei kleinen Energien Absorption. Absorption  $\propto$  Dichte  $\rightarrow$  Massenabsorptionskoeff.  $\kappa_\alpha = \mu_\alpha / \rho$**   
**Bei Röntgenstr. nur  $\kappa_\alpha$  wichtig.**

$$I = I_0 \exp(-\kappa_\alpha \rho x) .$$

# Wechselwirkung zwischen Photonen und Materie

## 4. VL



A) Kohärente Streuung

**Thompson**

**Rayleigh**

**klassische Streuung**

B) Photoeffekt

**Teilchencharakter**

C) Compton-Effekt

**Teilchencharakter**

D) Paarbildung

**Energie->Masse**

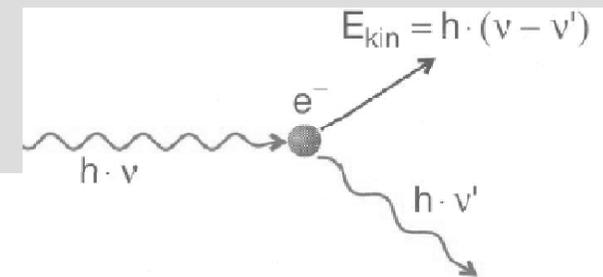
# Energieabh. der Absorptionsprozesse

**Photoeffekt:** Röntgenquant  $h\nu$  wird von Atom absorbiert - Elektron aus inneren Schale ionisiert  $h\nu + A(E_k) \rightarrow A^+(E_{Ion}) + e^-(E_{kin})$

Energiebilanz:  $E_{kin}(e^-) = h\nu - (E_{Ion} - E_k)$

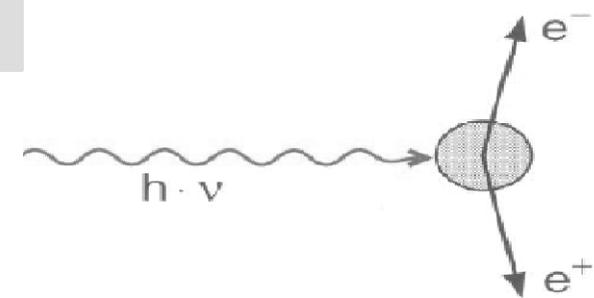
**Compton-Effekt:** Röntgenquant stößt mit "freien" Elektron der äußeren Schale zusammen - Bindungsenergie  $E_B \ll h\nu$

$h\nu + e^- \rightarrow e^-(E_{kin}) + h\nu'$

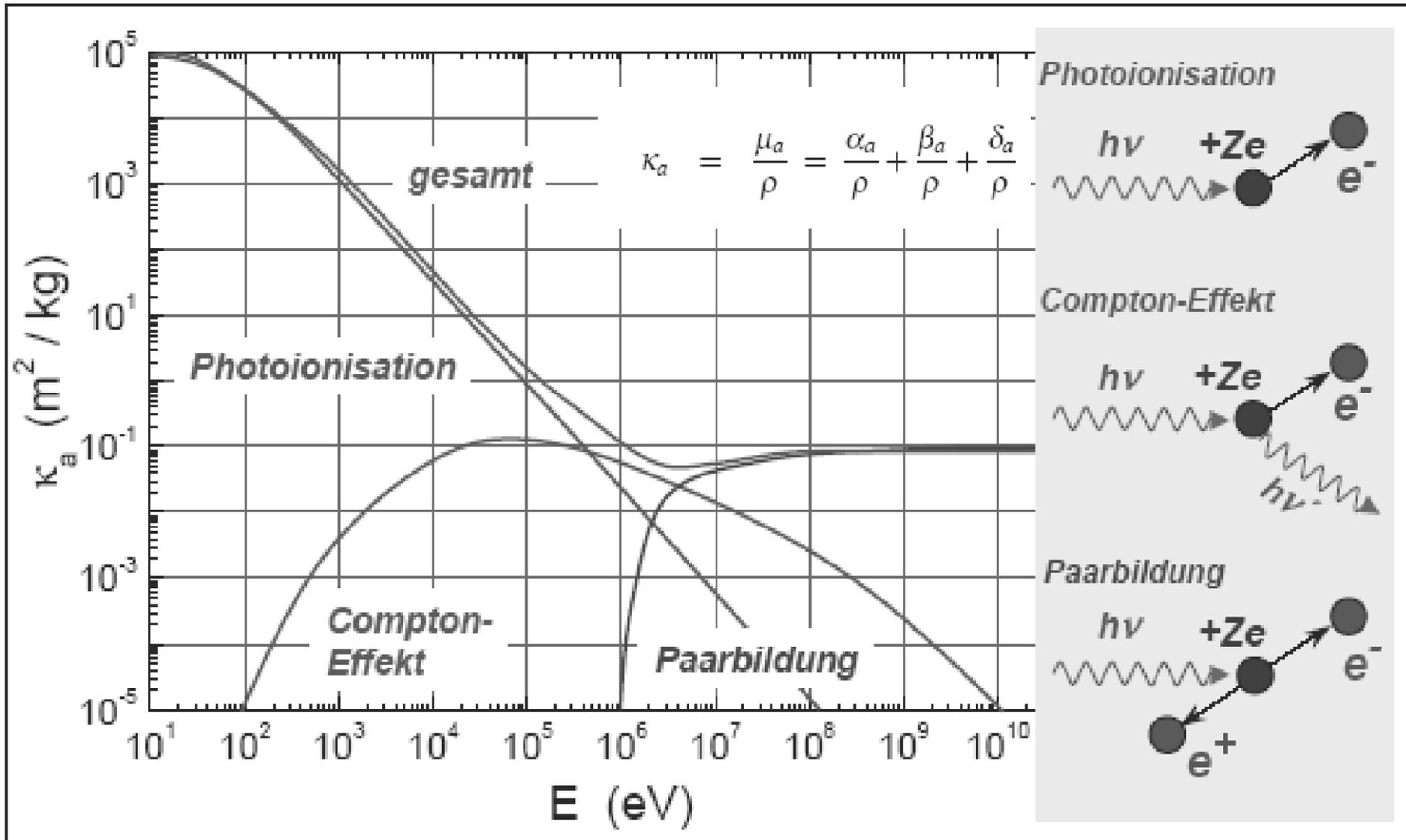


**Paarbildung** - bei  $h\nu > 1MeV$  wird ein Elektron-Positronpaar erzeugt.

$h\nu \rightarrow e^- + e^+ + 2E_{kin}$  mit  $h\nu = 2m_e c^2 + 2E_{kin}$

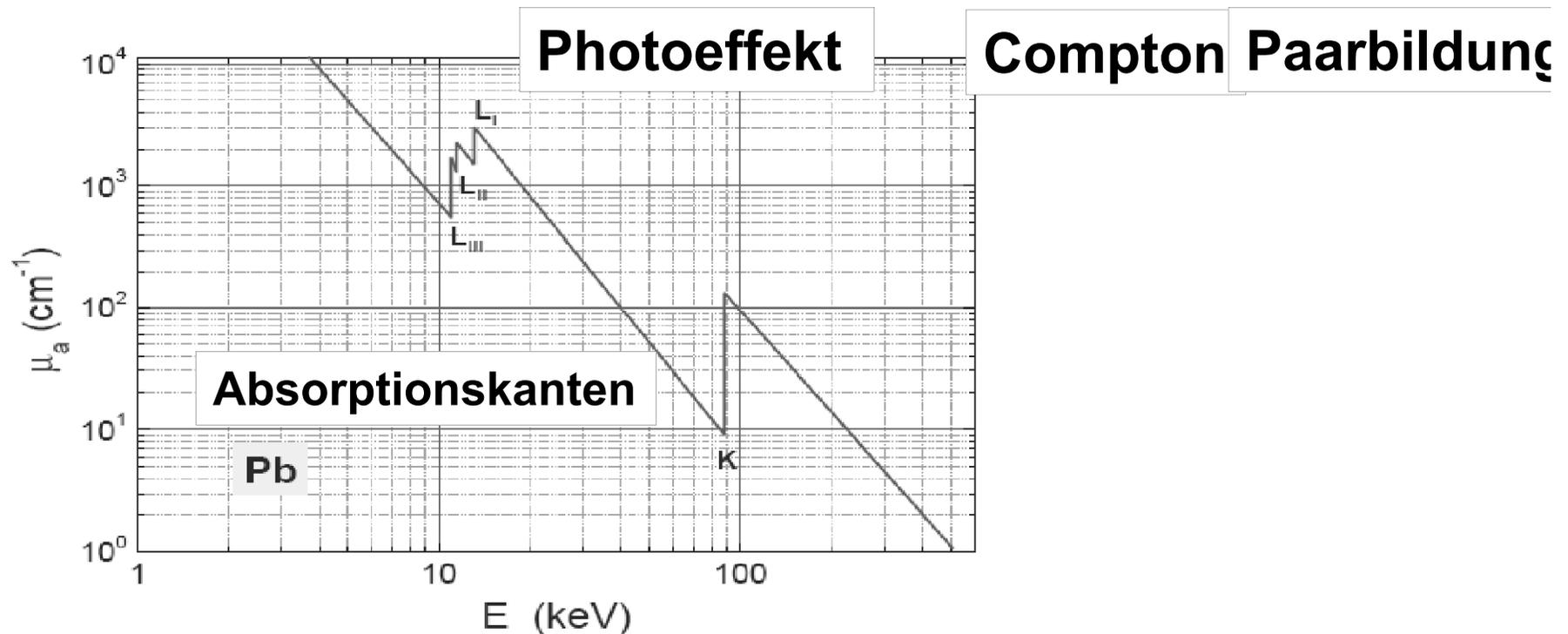


# Energieabhängigkeit der Absorptionsprozesse



# Energieabhängigkeit der Absorption

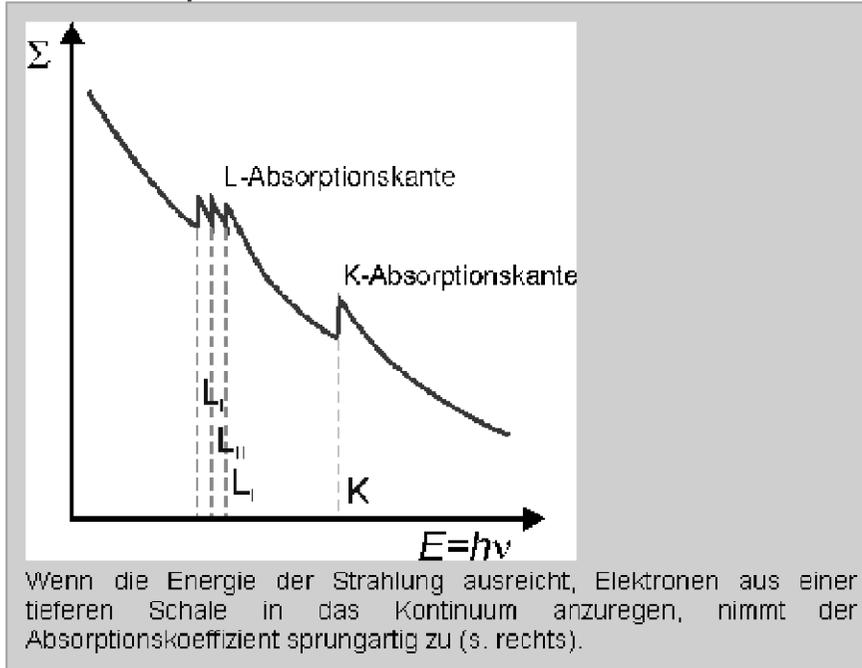
$$\kappa_a = \frac{\mu_a}{\rho} = \frac{\alpha_a}{\rho} + \frac{\beta_a}{\rho} + \frac{\delta_a}{\rho} \quad \frac{\alpha_a}{\rho} \propto \frac{Z^4}{(\hbar\omega)^3} \propto Z^4 \lambda^3 \quad \frac{\beta_a}{\rho} \propto \frac{1}{\hbar\omega} \propto \lambda \quad \frac{\delta_a}{\rho} \propto \frac{Z}{\ln(\hbar\omega)}$$



Da in das Abschwächungsgesetz  $I = I_0 \exp(-\kappa_a \rho x)$  ferner die Dichte  $\rho$  des Absorbermaterials eingeht, verwendet man zur Abschwächung von Röntgenstrahlung Materialien mit hohem  $Z$  und hohem  $\rho$ . Aufgrund diesen Zusammenhangs schirmt z.B. Blei ( $Z = 82$ ) Röntgenstrahlung wesentlich besser ab als Aluminium ( $Z = 13$ ).

# Zusammenfassung

Die Abschwächung von Röntgen-Strahlen in Materie wird durch den makroskopischen Wirkungsquerschnitt oder Absorptionskoeffizienten  $\Sigma$  beschrieben.  $\leftarrow$

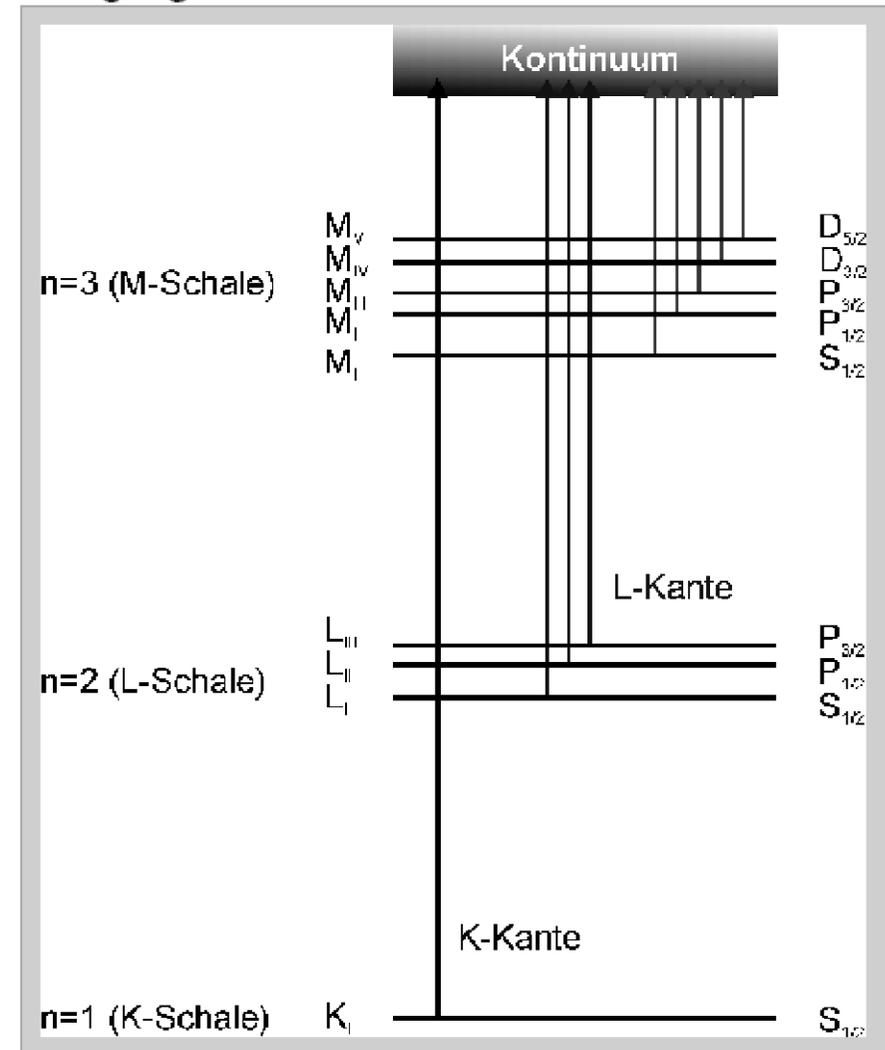


Man beobachtet:

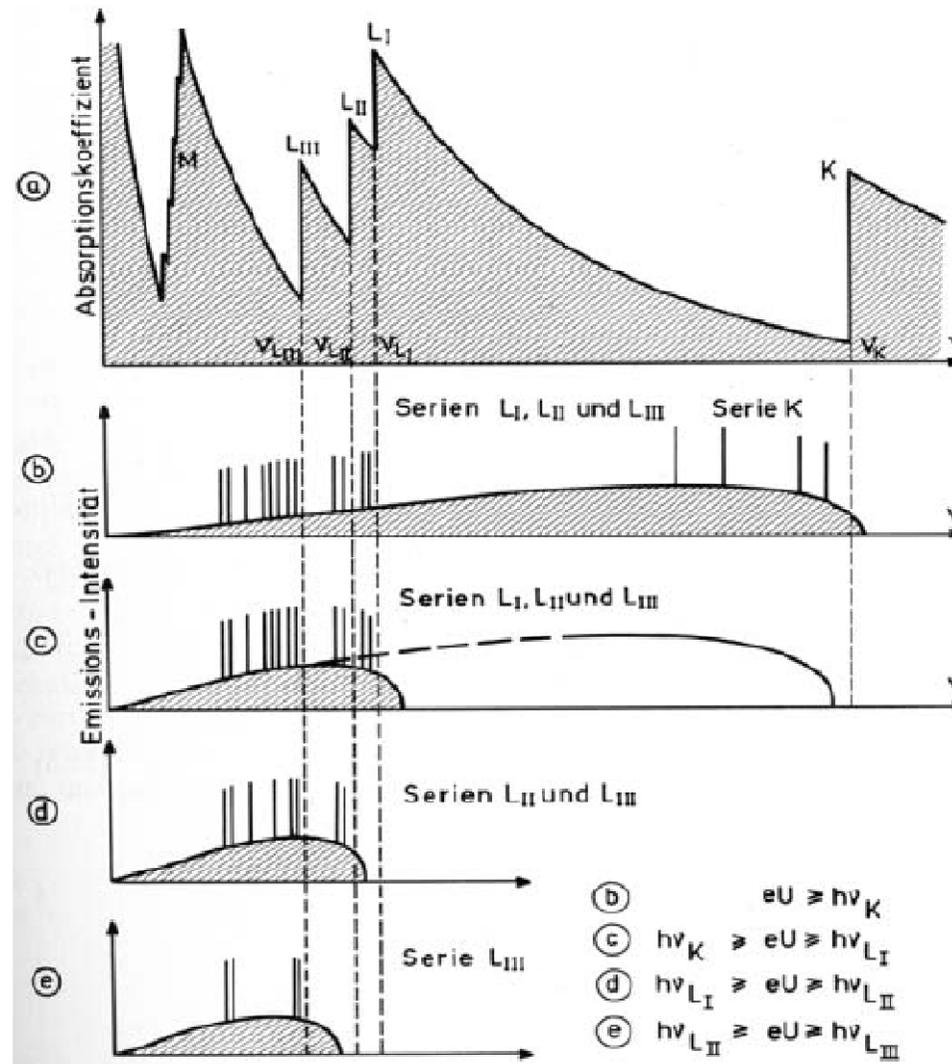
- Sprunghafte Zunahme von  $\Sigma$  mit der Energie der Strahlung (Absorptionskanten)
- Dazwischen Abnahme mit  $Z^{3-4}/(h\nu)^3$

Halbwertsdicke  $d$  ist der Weg, nach dem die Strahlung auf halbe Intensität gesunken ist.  $\leftarrow$

Anregungen ins Kontinuum



# Emission und Absorption



# Materialabhängigkeit

$$I = I_0 \exp(-\kappa_a \rho x) .$$

Energie		Luft	H <sub>2</sub> O	Al	Cu	W	Pb
E (eV)	λ (nm)	κ <sub>a</sub> (m <sup>2</sup> /kg)					
5	0.246	2	2.0	25	24	70	100
10	0.123	0.5	0.52	2.6	22.4	9.53	13.7
50	0.025	0.02	0.92	0.04	0.26	0.6	0.8
100	0.012	0.015	0.017	0.02	0.05	0.4	0.6

Tabelle 8.2: Massenabsorptionskoeffizienten  $\kappa_a$  verschiedener Absorbermaterialien Röntgenstrahlung verschiedener Energie.

# Moseley-Gesetz

---

$K_n$  ist eine von der Hauptquantenzahl  $n$  abhängige Konstante → Moseley-Gesetz.

Energie  $h \cdot \nu_{ik}$  eines Röntgenquants kann beschrieben werden durch:

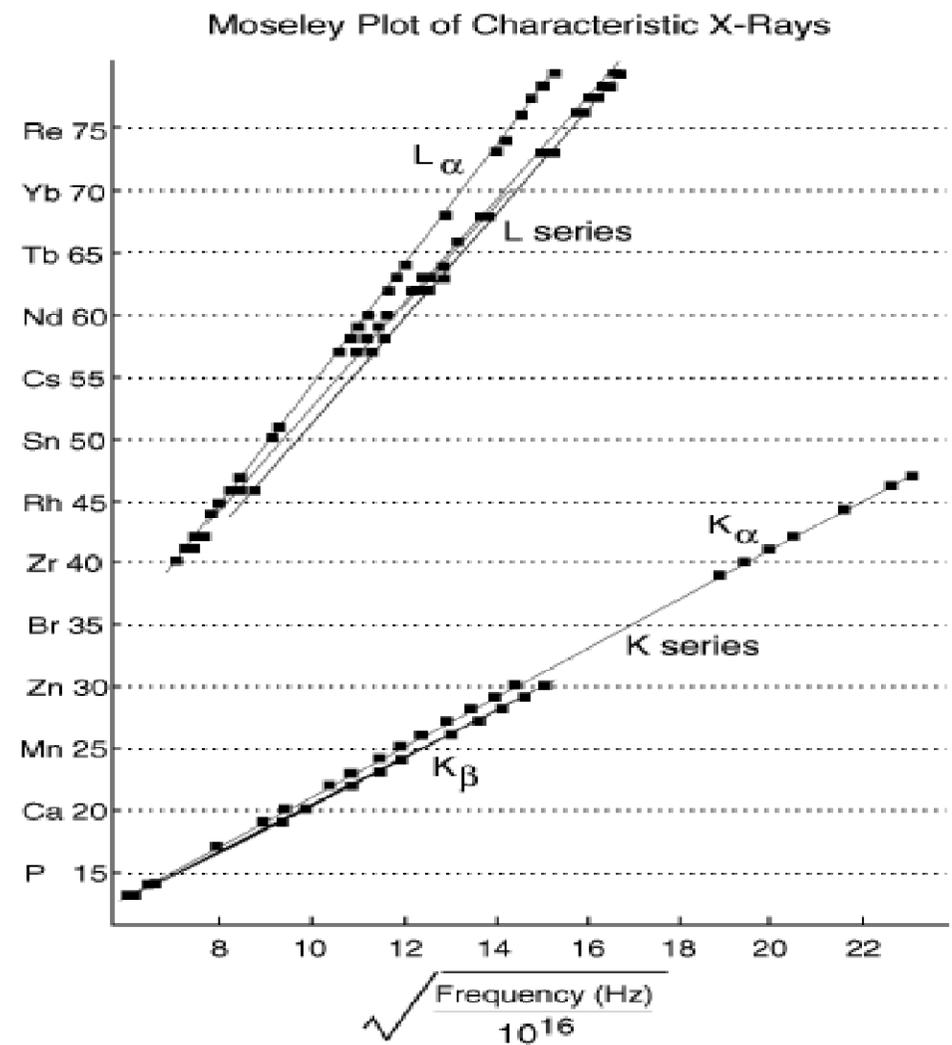
$$h \cdot \nu_{ik} = (Z - S)^2 \cdot Ry \cdot hc \left( \frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$\bar{\nu}_{ik} = (Z - S)^2 \cdot Ry \left( \frac{1}{n_k^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$(Z - S) = Z_{eff}$ ...auf Elektron wirkende effektive Kernladung

$S$ .....Abschirmzahl.

# Moseley-Gesetz

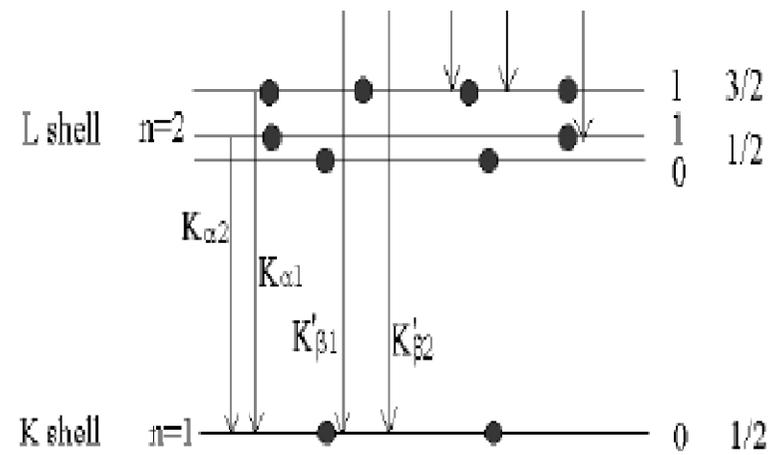


Adapted from Moseley's original data (H. G. J. Moseley, Philos. Mag. (6) 27:703, 1914)

**Moseley-Gesetz:**

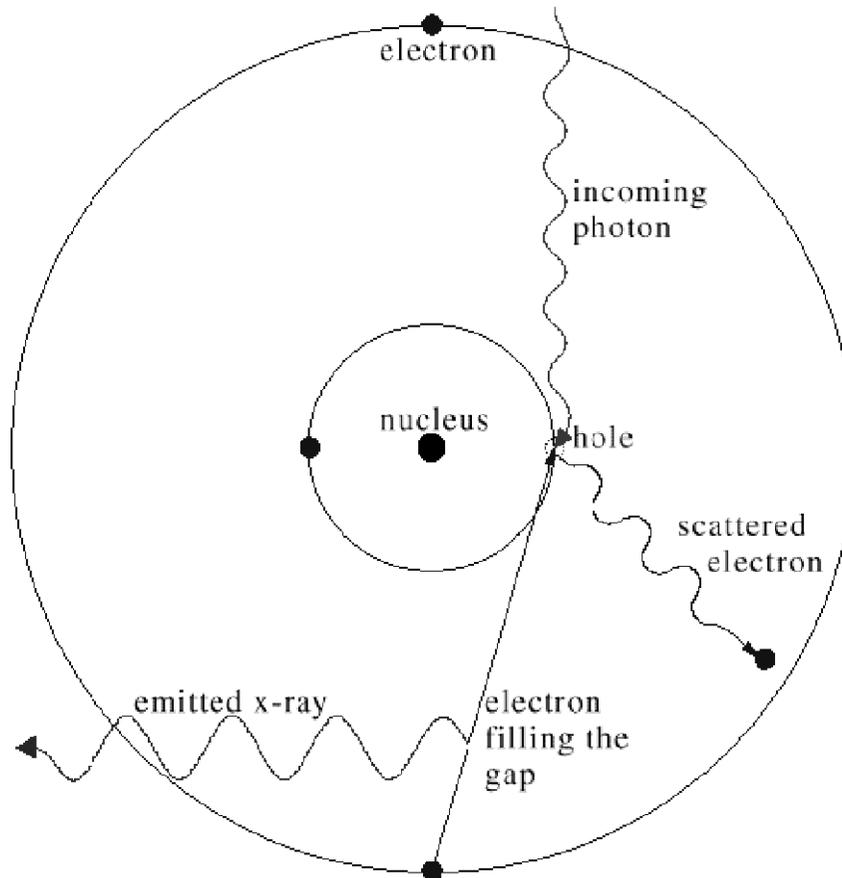
aus  $E \propto Z^2$  folgt

$Z \propto \sqrt{\nu}$ , wie von Moseley zuerst beobachtet.



# Röntgen Fluoreszenz

---



**Fluoreszenz:**

**durch einen Laserstrahl  
oder Röntgenstrahlung  
werden Atome angeregt  
(=Elektronen in höheren  
Schalen oder entfernt).**

**Bei Abregung:  
Photon emittiert  
(Röntgenstrahlung)**

<http://ie.lbl.gov/xray/>

# Röntgen Fluoreszenz

---

Röntgen hat die Röntgenstrahlung unabhängig entdeckt, als er fluoreszenzfähige Gegenstände nahe der Röhre während des Betriebs der Kathodenstrahlröhre beobachtete, die trotz einer Abdeckung der Röhre (mit schwarzer Pappe) hell zu leuchten begannen.

Röntgens Verdienst ist es, die Bedeutung der neuentdeckten Strahlen früh erkannt und diese als erster wissenschaftlich untersucht zu haben. Zu Röntgens Berühmtheit hat sicherlich auch die Röntgenaufnahme einer Hand seiner Frau beigetragen, die er in seiner ersten Veröffentlichung zur Röntgenstrahlung abbildete.

Diese Berühmtheit trug ihm 1901 den ersten Nobelpreis für Physik ein, wobei das Nobelpreiskomitee die praktische Bedeutung der Entdeckung hervorhob. Röntgen nannte seine Strahlung: X-Strahlen, daher meistens x-rays auf Englisch.

# X-ray fluorescence

---

---

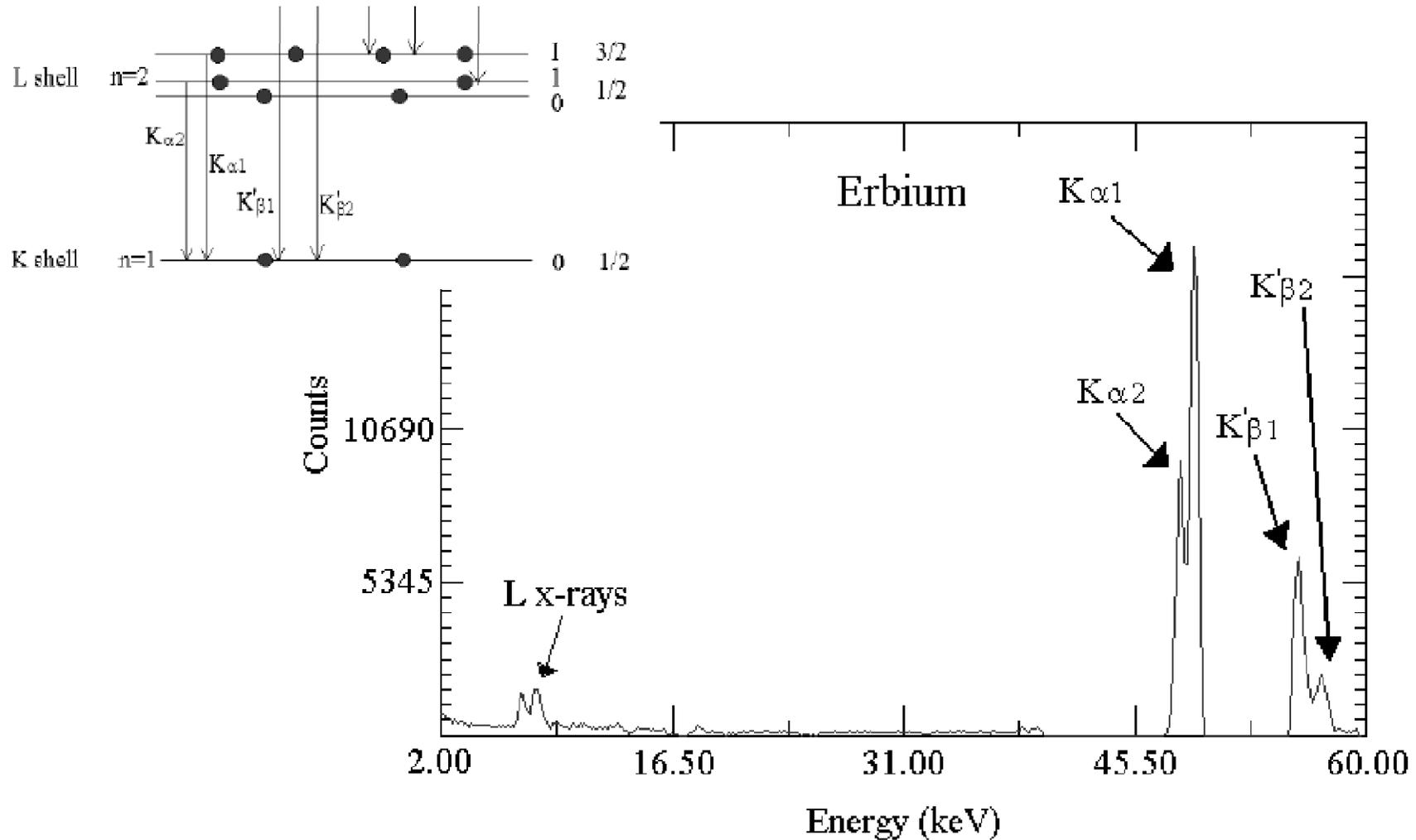


germanium x-ray Detektor  
bei flüssigem Stickstoff  
Temperatur  
(ca. 80 K, damit thermisches  
Rauschen reduziert wird)

Lötzinn mit Indium

$^{241}\text{Am}$  radioaktive Quelle

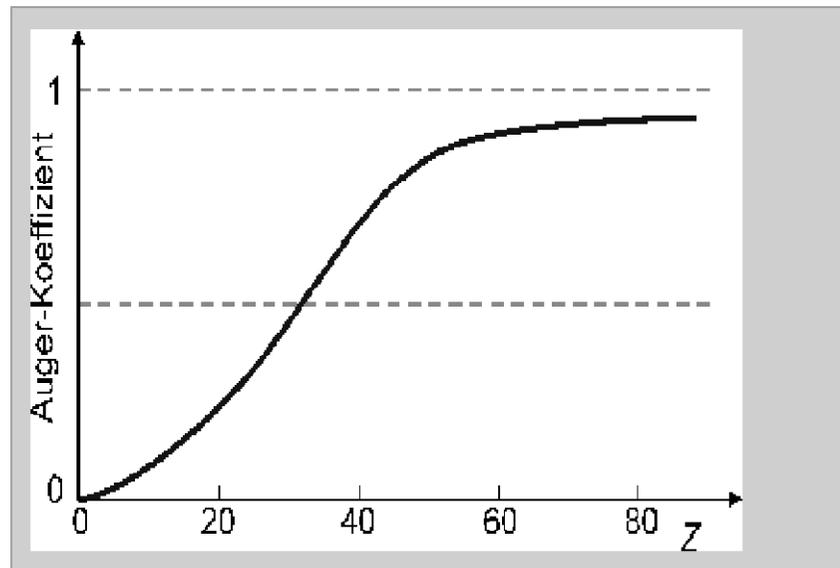
# X-ray fluorescence spectrum



# Auger-Elektronen (aus strahlungslosen Übergängen)

Nicht alle Atome mit einem fehlenden K- oder L-Elektron emittieren ein Röntgen-Quant beim Übergang in den Grundzustand.

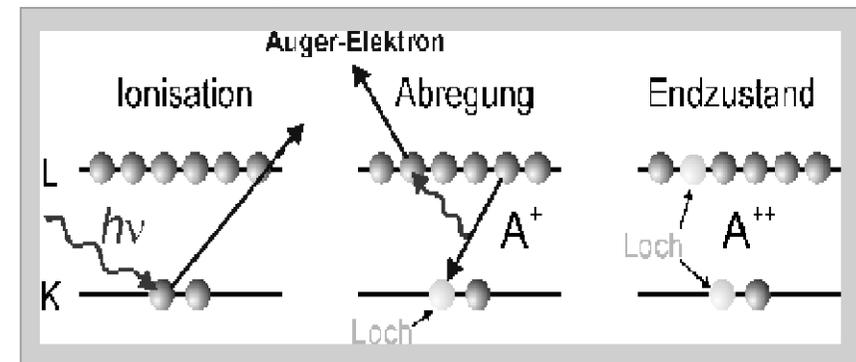
Auger-Koeffizient: Relative Zahl an Atome die mit Röntgen-Quant in Grundzustand übergehen.



## Erklärung

Ein Teil der Atome geht über Emission eines Auger-Elektrons in den Grundzustand über:

- ▶ Ionisation innerer Schale durch Röntgen-Quant
- ▶ Übergang eines Elektrons aus höherer Schale unter Emission eines Quants
- ▶ Quant regt weiteres Elektron in einen Kontinuumzustand an (analog zum atomaren Photoeffekt) ←



## Energie des Auger-Elektrons

$$E_{\text{Auger}} = E_K - E_L - E_L$$

Inneres Photon
Bindungsenergie  
Auger-Elektron

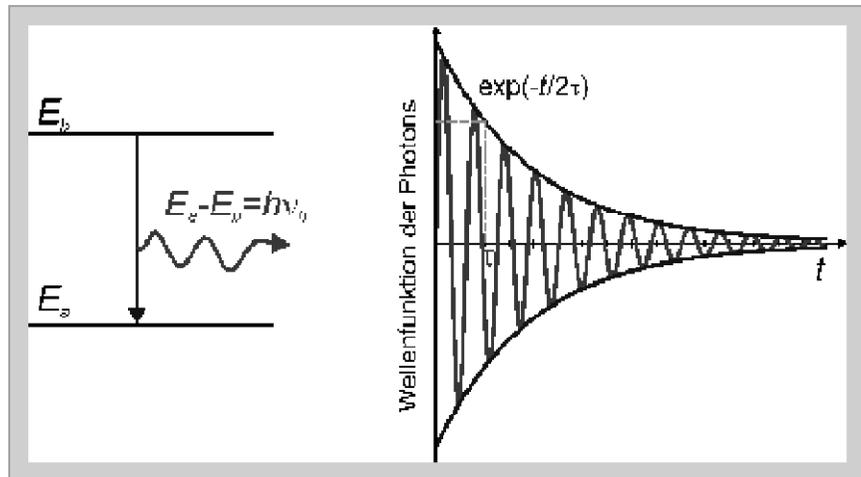
# Linienformen

Angeregte Zustände zerfallen exponentiell in der charakteristischen Zeit  $\tau$  (mittlere Lebensdauer)

$$N(t) = N_0 \exp(-t/\tau)$$

Wellenfunktion des emittierten Quants:

$$\psi(t) = \psi_0 \left( e^{i\omega_0 t} e^{-t/2\tau} + CC \right)$$



Resultierende Spektrum aus Fourier-Transformierten:

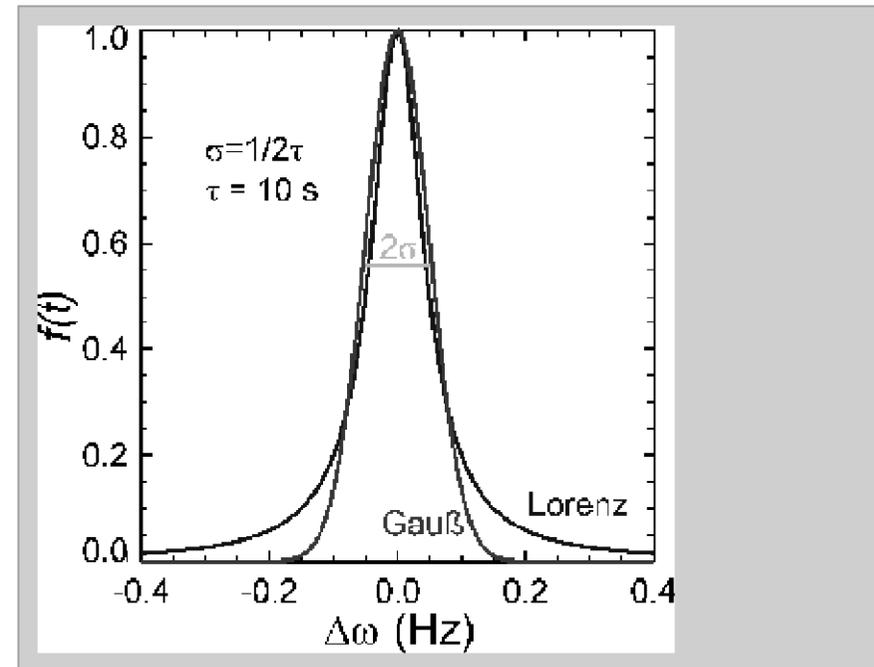
$$C(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(t) e^{-i\omega t} dt$$

Integration ergibt:

$$C(\omega) = \frac{-\psi_0}{i(\omega_0 - \omega) - 1/2\tau} + \varepsilon$$

Die natürliche Linienform ist ein Lorenz-Profil

$$|C(\omega)|^2 = \frac{I}{(\omega_0 - \omega)^2 + (1/2\tau)^2}$$



Beobachtet man Linien die von einem heißen Gas emittiert werden, so bewirkt der Doppler-Effekt ein Gauß-Profil

$$|C(\omega)|^2 = I \exp\left(-(\omega_0 - \omega)^2 / 2\sigma^2\right)$$

# Synchrotronstrahlung (-> sehr intensive Bremsstrahlung)

---

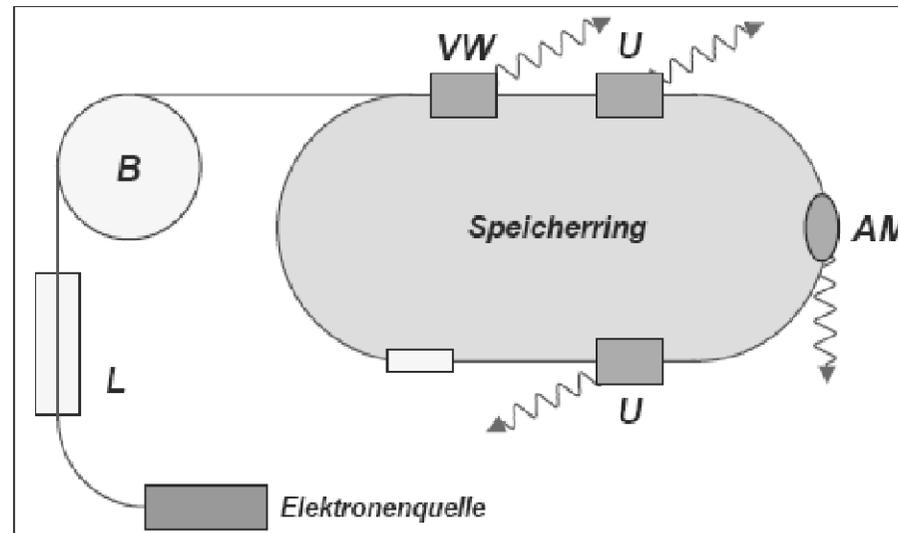


Abbildung 8.10: Schematische Darstellung einer Synchrotronstrahlungsquelle. Der Linearbeschleuniger  $L$  sorgt für die Anfangsbeschleunigung, der Booster  $B$  ist ein Synchrotron, mit dem die Elektronen bis auf ihre Endenergie (einige GeV) beschleunigt werden. Im Speicherring befinden sich einige Insertion Devices (Undulatoren  $U$ , Vielpolwiggler  $VW$  oder Ablenkmagneten  $AM$  etc.). Mit der Hochfrequenzbeschleunigungsstrecke  $RF$  wird der Energieverlust pro Umlauf ausgeglichen.

# Synchrotronstrahlung

(-> sehr intensive Bremsstrahlung)

---

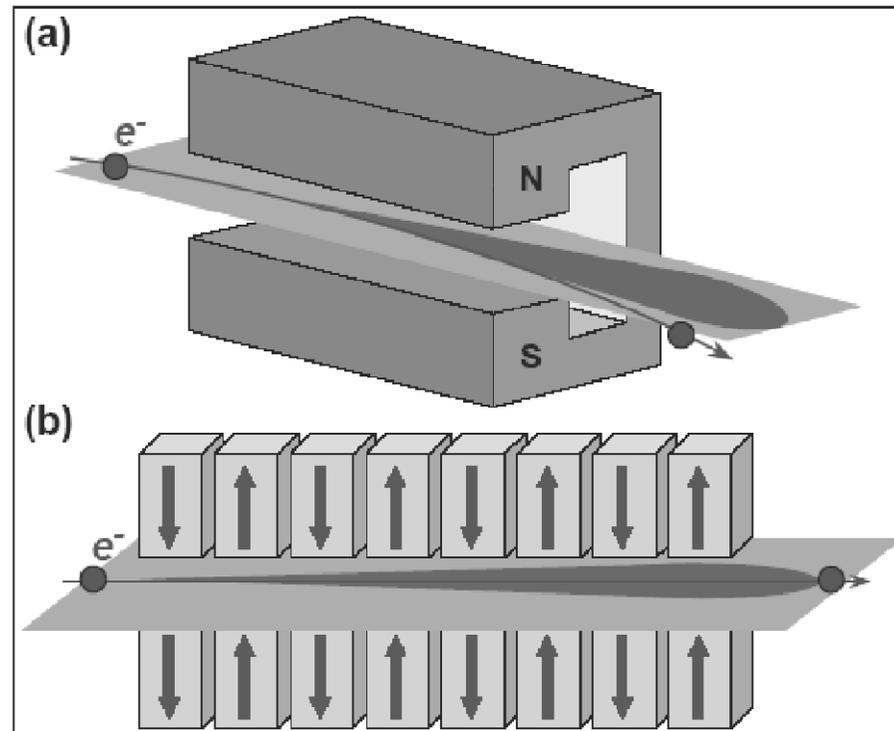


Abbildung 8.11: (a) Schematische Darstellung eines Dipolmagneten zur Ablenkung des Elektronenstrahl in einem Speicherring. (b) Schematische Darstellung eines Undulators. Durch die periodische Variation der Feldrichtung wird der Elektronenstrahl in der Strahlebene hin- und hergelenkt. Die Abstrahlung der Synchrotronstrahlung erfolgt gerichtet in Strahlrichtung (Quelle: ESRF).

# Zum Mitnehmen

- Ein- und Mehrelektronenanregungen in Atomen können durch Absorption elektromagnetischer Strahlung oder durch inelastische Stoßprozesse erhalten werden.
- Werden Elektronen aus den inneren Schalen eines Atoms herausgelöst, spricht man von Innerschalenanregungen.
- Röntgenstrahlung entsteht
  1. beim Abbremsen von Elektronen mit Energien im keV-Bereich. Das resultierende Bremsspektrum ist kontinuierlich.
  2. durch Übergänge von Elektronen auf freie Plätze in inneren Schalen. Das daraus resultierende Spektrum ist ein Linienspektrum, das für jedes Atom charakteristisch ist (charakteristische Röntgenstrahlung).
- Die typische Wellenlänge von Röntgenstrahlung liegt zwischen etwa 100 und 0.1 Å, was in etwa Frequenzen  $\nu$  zwischen  $10^{16}$  und  $10^{19}$  Hz und Photonenenergien  $h\nu$  zwischen 0.1 und 100 keV entspricht.
- Die Absorption von Röntgenstrahlung erfolgt über (i) die Photoionisation, (ii) die Compton-Streuung und (iii) die Paarbildung für  $E_\gamma \geq 2m_0c^2 \simeq 1$  MeV.
- Der Absorptionskoeffizient aufgrund der Photoionisation steigt als Funktion der Energie der absorbierten Photonen immer dann sprunghaft an, wenn die Photonenenergie gerade dazu ausreicht, ein Elektron aus einer inneren Schale ins Kontinuum anzuheben. Es entstehen für jedes Atom charakteristische Absorptionskanten.
- Das charakteristische Linienspektrum und die Absorptionskanten zeigen eine Feinstruktur, die durch die Feinstruktur der inneren Schalen L, M, N, ... verursacht wird.
- Röntgenstrahlung kann durch Beugung an einem Kristallgitter oder durch Filterung mit dünnen Metallfolien monochromatisiert werden.