

Experimentalphysik Modul PH-EP4 / PH-DP-EP4

Script für Vorlesung 15. Juni 2009

7 Fortsetzung: Emission und Absorption elektromagnetischer Strahlung durch Atome

7.3 Lebensdauern angeregter Zustände

In der letzten Vorlesung haben wir gezeigt, dass die betrachteten quantenmechanischen Zustände mit wohldefinierter Energie in einem abgeschlossenen System stationär sind. Dies bedeutet, dass ein Atom, welches sich in einem angeregten Niveau befindet, für immer dort verbleiben sollte. Experimentell zeigt sich aber, dass jedes atomare System mit einer charakteristischen Lebensdauer in energetisch tiefer liegende Zustände zerfällt, falls diese zugänglich sind. Dieses Verhalten ist darin begründet, dass kein physikalisches System als wirklich isoliert betrachtet werden kann: Die Welt ist eine durch die Kraftfelder gekoppelte Einheit. In Abwesenheit anderer Störungen (z.B. Elektronenstöße) ist die Kopplung an das Strahlungsfeld für die Emission und Absorption von Licht durch atomare Systeme entscheidend. Für die spontane Emission sind hierbei Vakuumfluktuationen verantwortlich.

- Als **Fluoreszenz** bezeichnet man den Übergang eines Elektrons aus einem höheren Energiezustand zu einem tieferen Niveau unter (spontaner) Emission eines Photons.
- Die Zahl der im Zeitintervall dt in den Zustand E_j übergehenden Atome ist

$$dN_i = -A_{ij}N_i dt. \quad (1)$$

Kann das Elektron im Zustand E_i in mehrere tiefere Zustände $E_j < E_i$ übergehen, so wird

$$dN_i = -A_i N_i dt \quad \text{mit} \quad A_i = \sum_j A_{ij}. \quad (2)$$

Integration liefert einen exponentiellen Abfall der Besetzung des angeregten Zustands E_i von seinem Anfangswert $N_i(0)$

$$N_i(t) = N_i(0) \cdot e^{-A_i t}. \quad (3)$$

- Die Konstante $\tau_i = 1/A_i$ ist die **mittlere Lebensdauer** \bar{t} des Zustandes E_i :

$$\bar{t} = \frac{1}{N_0} \int_{N_0}^0 t \cdot dN_i(t) = - \int_0^\infty t \cdot A_i \cdot e^{-A_i t} dt = \frac{1}{A_i} = \tau_i, \quad (4)$$

wobei $dN_i(t)/N_0$ die Wahrscheinlichkeit dafür ist, dass ein Atom im Zeitintervall t bis $t + dt$ zerfällt.

- Durch Messung der mittleren Lebensdauer lässt sich demnach die Summe $A_i = \sum A_{ij}$ bestimmen.

- Misst man die Linienintensitäten I_{ik} der einzelnen Elektronenübergänge, so kann man daraus die einzelnen Übergangswahrscheinlichkeiten erhalten:

$$A_{ik} = A_i \frac{I_{ik}/h \cdot \nu_{ik}}{\sum_j (I_{ij}/h \cdot \nu_{ij})}. \quad (5)$$

- Treten weitere Effekte auf, die den Elektronenübergang begünstigen, wie z.B. inelastische Stöße, so gilt

$$dN_i = -(A_i + R_i)N_i dt, \quad N_i(t) = N_0 \cdot e^{-(A_i+R_i)t}, \quad \tau_i^{\text{eff}} = \frac{1}{A_i + R_i}. \quad (6)$$

- Wird Niveau E_i durch inelastischen Elektronenstoß entleert, so gilt für die Entvölkerungswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit

$$R_i = n_B \cdot \bar{n}_{AB} \cdot \sigma_i^{\text{inel}}, \quad (7)$$

mit der Teilchenzahldichte n_B der Stoßpartner B , der mittleren Relativgeschwindigkeit der beiden Stoßpartner \bar{v}_{AB} mit der reduzierten Masse μ

$$\bar{v}_{AB} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi\mu}}, \quad \mu = \frac{M_A \cdot M_B}{M_A + M_B}. \quad (8)$$

- Trägt man die reziproke effektive Lebensdauer

$$\frac{1}{\tau_{\text{eff}}} = \frac{1}{\tau_{\text{spont}}} + n_B \bar{v}_{AB} \sigma_i^{\text{inel}} \quad (9)$$

gegen das Produkt $n_B \cdot v_{AB}$, so erhält man eine Gerade (Stern-Volmer-Plot).

- Nimmt man die ideale Gasgleichung $pV = NkT$ zu Hilfe, so kann man daraus die Teilchendichte $n_B = N/V = p/kT$ durch Druck und Temperatur ausdrücken, wobei p der Druck der Stoßpartneratome ist

$$\frac{1}{\tau_{\text{eff}}} = \frac{1}{\tau_{\text{spont}}} + \sigma_i^{\text{inel}} \cdot \sqrt{\frac{8}{\pi\mu kT}} \cdot p. \quad (10)$$



Abbildung 1: Inverse effektive Lebensdauer $1/\tau_{\text{eff}}$ eines angeregten Zustandes als Funktion der Dichte der Stoßpartner B (Stern-Volmer-Plot).

7.4 Linienbreiten der Spektrallinien

Experimentell beobachtet man, dass die beim Übergang eines Elektrons von Zustand E_i in den Zustand E_k abgegebene elektromagnetische Strahlung nicht monochromatisch ist, sondern eine gewisse spektrale Verteilung $P_\nu = P(\nu)$ um eine Mittenfrequenz $\nu_0 = \nu_{ik}$ besitzt. $P_\nu(\nu)$ ist die **spektrale Leistungsdichte**, das heißt die pro Frequenzeinheit um die Frequenz ν abgestrahlte Leistung. Die Verteilung $P_\nu = P(\nu)$ nennt man das **Linienprofil** einer Spektrallinie. Das Frequenzintervall $\delta\nu = |\nu_1 - \nu_2|$ zwischen den Frequenzen ν_1 und ν_2 , bei denen die spektrale Leistungsdichte auf die Hälfte abgenommen hat, bezeichnet man als die volle Halbwertsbreite (FWHM: Full Width at Half Maximum). Den Ausdruck $\delta\lambda/\lambda$ bezeichnet man als die relative Halbwertsbreite. Mit $\lambda = c/\nu$ ergibt sich

$$\left| \frac{\delta\lambda}{\lambda} \right| = \left| \frac{\delta\nu}{\nu} \right| = \left| \frac{\delta\omega}{\omega} \right|. \quad (11)$$

Man nennt den Spektralbereich innerhalb der Halbwertsbreite den **Linienkern** und außerhalb den **Linienflügel**.

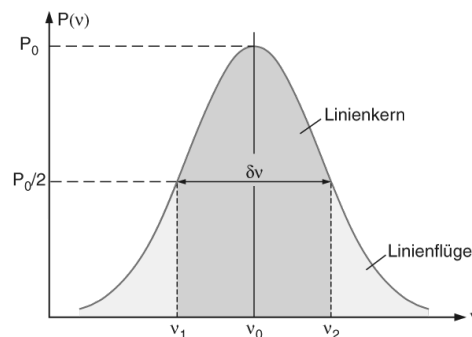


Abbildung 2: Linienprofil einer Spektrallinie.

7.4.1 Natürliche Linienbreite

Eine Spektrallinie hat ihren Ursprung in den Quantenübergängen zwischen zwei Energieniveaus E_i und E_k eines Atoms oder Moleküls. Dabei wird die Frequenz $\omega_{ik} = (E_i - E_k)/\hbar$ abgestrahlt. Die atomaren oder molekularen Zustände sind aber bis auf den Grundzustand nicht stationär, d.h. ein Atom, das sich im angeregten Zustand mit der Energie E_i befindet, wird innerhalb der mittleren Lebensdauer τ_i des angeregten Zustands in den Grundzustand übergehen. Gemäß der Heisenberg'schen Unschärferelation ist der Wert E_i daher um den Wert $\delta E_i = \hbar/\tau_i$ verschmiert mit $\tau_i = 1/A_i$. Die Frequenzunschärfe der beim Übergang von E_i nach E_k ausgesandten Welle ist dann

$$\delta\omega = A_i = \frac{1}{\tau_i} \quad \Rightarrow \quad \delta\nu_n = \frac{A_i}{2\pi} = \frac{1}{2\pi \cdot \tau_i}. \quad (12)$$

Ist der Zustand E_k nicht der Grundzustand, so ist dessen Lebensdauer auch noch zu berücksichtigen:

$$\delta\nu_n = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_k} \right) \quad \text{für} \quad \Delta E = \Delta E_i + \Delta E_k. \quad (13)$$

Das Linienprofil kann auch berechnet werden, indem man annimmt, dass man das angeregte Elektron durch einen gedämpften harmonischen Oszillator beschreiben kann: $\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = 0$.

BEISPIELE

1. Die natürliche Linienbreite der Natrium-D-Linie, die bei einem Übergang vom angeregten $3P_{1/2}$ -Zustand ($\tau = 16$ ns) zum Grundzustand emittiert wird, ist

$$\delta\nu_n = 10^9 / (16 \cdot 2\pi) \approx 10^7 \text{ s}^{-1} = 10 \text{ MHz}.$$

Da die Frequenz der Linienmitte $\nu_0 = 5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ ist, erkennt man, daß die Dämpfung des entsprechenden klassischen Oszillators äußerst klein ist. Erst nach $8 \cdot 10^6$ Schwingungsperioden fällt die Amplitude auf $1/e$ ihres Anfangswertes ab, so daß die oben verwendete Näherung $\gamma \ll \omega_0$ voll gerechtfertigt ist.

2. Für metastabile angeregte Zustände wird die Lebensdauer sehr lang und die entsprechende natürliche Linienbreite sehr klein. So kann z. B. der $2^2S_{1/2}$ -Zustand des H-Atoms nicht durch einen elektrischen Dipolübergang in den Grundzustand $1^2S_{1/2}$ übergehen, sondern nur durch eine Zweiphotonen-Emission, die aber wesentlich unwahrscheinlicher ist als ein Einphotonenübergang. (siehe Abschn. 7.2.4).

Seine spontane Lebensdauer ist $\tau \approx 1$ s, so daß die natürliche Linienbreite des Zweiphotonen-Überganges, $\delta\nu_n \approx 0,15 \text{ s}^{-1}$, die man mit speziellen Methoden in Absorption beobachten kann, extrem schmal wird.

Hierbei ist die Frequenz der abgestrahlten Welle nicht mehr monochromatisch. Die Berechnung der Amplituden der abgestrahlten Wellen $A(\omega)$ und der zugehörigen Fourier-Transformation soll hier nicht durchgeführt werden. Es zeigt sich aber, dass im Bereich der Resonanzfrequenz ω_0 ($(\omega - \omega_0) \ll \omega_0$), für die abgestrahlte spektrale Leistung gilt

$$P_\omega(\omega) \propto A(\omega) \cdot A^*(\omega). \quad (14)$$

Daraus kann durch Einsetzen der zuvor berechneten Amplituden das Linienprofil bestimmt werden:

$$P_\omega(\omega) = P_0 \frac{\gamma/2\pi}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2}. \quad (15)$$

Man nennt dieses Profil **Lorentzprofil** mit der Halbwertsbreite $\delta\omega_n = \gamma/2\pi$. Die Lorentzkurve ist im Zentralbereich spitzer als eine Gauss-Kurve und fällt weiter entfernt von der Mittenfrequenz langsamer ab als eine Gauss-Kurve. *Die natürliche Form einer Spektrallinie ist ein Lorentz-Profil. Ihre volle Halbwertsbreite bezeichnet man als natürliche Linienbreite, da sie ohne fremde Einflüsse nur durch die endliche Abstrahldauer des Atoms entsteht.*

7.4.2 Doppler-Verbreiterung

Die abstrahlenden Atome befinden sich nicht in Ruhe, sondern bewegen sich mit einer mittleren Geschwindigkeit v . Wir betrachten deshalb jetzt die Strahlung, die von einem isolierten Atom eines Gases der Temperatur T ausgeht. Das Atom soll eine Masse m besitzen und während der Lichtemission eine Geschwindigkeit v in Beobachtungsrichtung haben. Aufgrund dieser Geschwindigkeit wird die Spektrallinie durch den Dopplereffekt verschoben. Man kann zeigen, dass das Profil der dopplerverbreiterten Spektrallinie gegeben ist durch

$$P(\omega) = P(\omega_0) \cdot e^{[c(\omega - \omega_0)/(\omega_0 \cdot v)]^2}. \quad (16)$$

Die **Dopplerbreite** $P(\omega_1) = P(\omega_2) = 1/2 P(\omega_0)$ ist gegeben durch

$$\delta\omega_D = \frac{\omega_0}{c} \sqrt{\frac{8kT \cdot \ln 2}{m}}. \quad (17)$$

BEISPIELE

1. Lyman- α -Linie des Übergangs $2P \rightarrow 1S$ im H-Atom: $\lambda = 121,6 \text{ nm} \Rightarrow \nu_0 = 2,47 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$, $T = 1000 \text{ K}$, $M = 1 \text{ g} \Rightarrow \delta \nu_D = 5,6 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} = 56 \text{ GHz}$, $\delta \lambda_D = 2,8 \cdot 10^{-3} \text{ nm}$.
2. Na-D-Linie des Überganges $3P_{1/2} \rightarrow 3S_{1/2}$ im Na-Atom: $\lambda = 589,1 \text{ nm}$, $\nu_0 = 5,1 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$, $T = 500 \text{ K}$, $M = 23 \text{ g} \Rightarrow \delta \nu_D = 1,7 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$, $\delta \lambda_D = 2 \cdot 10^{-3} \text{ nm}$.

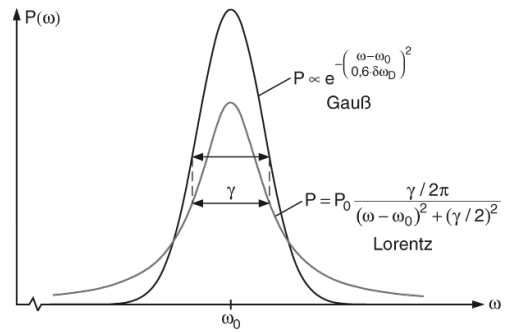


Abbildung 3: Vergleich von Lorentzprofil und Gaußprofil mit gleicher Halbwertsbreite.

Die Bewegung der Atome führt zu einer Dopplerverbreiterung der Spektrallinien, die linear mit der Frequenz und proportional zu \sqrt{T} ansteigt, mit zunehmender Masse der Atome aber proportional zu $1/\sqrt{m}$ abnimmt. Typischerweise ist die Dopplerverbreiterung im sichtbaren Spektralbereich bei Raumtemperatur um etwa 2 Größenordnungen größer als die natürliche Linienbreite.

Mit der Molmasse $M = N_A \cdot m$ und der Gaskonstante $R = N_A \cdot k$ erhält man

$$\delta \nu_D = \frac{2\nu_0}{c} \sqrt{\frac{2RT \ln 2}{M}} = 7,16 \cdot 10^{-7} \nu_0 \cdot \frac{T}{M} \cdot \text{s}^{-1}. \quad (18)$$

7.4.3 Stoßverbreiterung von Spektrallinien

Mit der Annahme eines isolierten Atoms erhält man noch nicht die vollständige Linienbreite. Es muss noch berücksichtigt werden, dass es in einem Gas immer zu Stößen mit den Nachbaratomen kommt. Hierbei unterscheidet man zwischen elastischen und inelastischen Stößen.

Elastische Stöße

Bei elastischen Stößen wird die Energie aus dem elektronischen System nur ins Strahlungsfeld, nicht aber an den Partner oder an die Schwerpunktsbewegung abgegeben. Im Falle des elastischen Stoßes reduziert sich die Wechselwirkung daher auf eine Störung der Phase $\exp(iE_i/\hbar t)$ der elektronischen Niveaus. Man spricht daher auch von Phasenstörungsstößen. Insbesondere wird die Intensität der Emission (Fluoreszenz) – über die volle Breite der Emissionslinie integriert – durch elastische Stöße nicht reduziert.

Abb. 4 veranschaulicht, wie Spektrallinien durch elastische Stöße sowohl verbreitert als auch verschoben werden. Die Energien der Niveaus E_i und E_k hängen vom Abstand R der beiden Stoßpartner ab, da sich beim Stoßprozess die beiden Elektronenwolken überlappen und es dadurch zu einer Wechselwirkung kommt. Im gezeigten Fall ist die Wechselwirkung der beiden Stoßpartner attraktiv, d.h. die Energieniveaus werden für kleine R abgesenkt. Da die Verschiebung bei gegebenem Abstand im Allgemeinen für zwei Niveaus (Elektronenverteilungen) unterschiedlich ausfällt, kommt es zu einer Verteilung von Übergangsfrequenzen $\omega_{ik} = (E_i - E_k)/\hbar$. Dabei ist für die Frequenz der Abstand der Stoßpartner zum Zeitpunkt der Lichtemission ausschlaggebend. Diese Abstände sind normalerweise statistisch um den Mittelwert R_m verteilt, der von Temperatur und Druck des Gases abhängt. Entsprechend sind die Frequenzen ν_{ik} statistisch verteilt um einen Mittelwert $\nu_{ik}(R_m)$, der im Allgemeinen gegenüber der Frequenz ν_0 des ungestörten Atoms verschoben ist. Wichtig ist, dass die Energieniveaus nur während

der Wechselwirkungszeit geringfügig verschoben sind, nach der Wechselwirkung aber wieder ihren ursprünglichen Wert besitzen: der Stoßprozess ist elastisch.

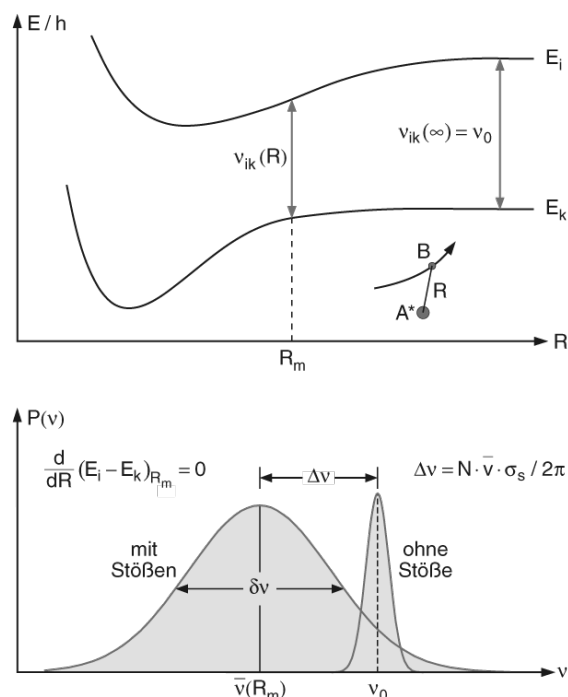


Abbildung 4: Erklärung der Stoßverbreiterung und Verschiebung bei elastischen Stößen mit Hilfe der Potentialkurven des Stoßpaares.

Linienform durch elastische Stöße. Annahme: der elastische Stoß ändert nicht die Schwingungsamplitude, sondern nur die Phasenkorrelation zwischen den emittierten Wellen vor und nach dem Stoß wird zerstört (Phasenstörungsstoß) (die Verschiebung der Linie soll hier nicht berücksichtigt werden). Ist der Phasensprung während eines Stoßprozesses groß genug, so kann angenommen werden, dass keine Phasenkorrelation mehr zwischen der Schwingung vor und nach dem Stoß besteht. Man kann in diesem Fall die gesamte Emission als Serie unkorrelierter Emissionsprozesse betrachten, wobei jeder eine mittlere Dauer τ_a hat. Die tatsächliche Dauer der Emissionsprozesse wird um den Mittelwert τ_a Poisson-verteilt sein.

Inelastische Stöße

Bei inelastischen Stößen findet eine vollständige oder teilweise Umwandlung in kinetische Energie bzw. Übertragung von innerer Energie an den Stoßpartner statt. Der Stoß reduziert damit die Energieabgabe des Atoms (Fluoreszenz) an das Strahlungsfeld, weshalb er auch als löschend bezeichnet wird. Durch die stoßinduzierte Relaxation des Atoms von Zustand E_i nach E_k wird die effektive Lebensdauer des Zustands E_i verkürzt und dadurch die Linienbreite der Strahlung von E_i vergrößert. Die durch stoßinduzierte Relaxation verursachte Linienverbreiterung steigt linear mit dem Druck eines Gases an, weshalb man sie auch als *Druckverbreiterung* bezeichnet.

Als Ergebnis der elastischen und inelastischen Stöße erhält man nach längerer Rechnung für

das Linienprofil

$$P_{\omega}(\omega) = P_0 \frac{\left(\frac{\gamma_n + \gamma_{in}}{2} + N\bar{v}\sigma_b\right)^2}{(\omega - \omega_0 - N\bar{v}\sigma_s)^2 + \left(\frac{\gamma_n + \gamma_{in}}{2} + N\bar{v}\sigma_b\right)^2} \quad (19)$$

wobei N die Dichte der stoßenden Moleküle B , \bar{v} die mittlere Relativgeschwindigkeit und $P_0 = P_{\omega}(\omega'_0)$ die spektrale Strahlungsleistung im Linienmaximum bei der verschobenen Frequenz $\omega'_0 = \omega_0 + N\bar{v}\sigma_b$ ist. Die Größen

$$\sigma_b = 2\pi \int_0^{\infty} (1 - \cos \varphi(R))R \, dR, \quad (20)$$

$$\sigma_s = 2\pi \int_0^{\infty} (\sin \varphi(R))R \, dR \quad (21)$$

sind ein Maß für die Linienverbreiterung bzw. -verschiebung durch die elastischen Phasenstörungsstöße.

Atomarer Übergang	Stoßpartner					
	He		Ar		Xe	
	$\delta\nu_b$	$\Delta\nu_s$	$\delta\nu_b$	$\Delta\nu_s$	$\delta\nu_b$	$\Delta\nu_s$
Na: $3S_{1/2} \leftrightarrow 3P_{1/2}$ $\lambda = 589,6 \text{ nm}$	0,07	0,0	0,1	-0,05	0,13	-0,07
K: $4S_{1/2} \leftrightarrow 4P_{1/2}$ $\lambda = 589,6 \text{ nm}$	0,06	0,02	0,1	-0,09	0,12	-0,07
Cs: $6S_{1/2} \leftrightarrow 6P_{1/2}$ $\lambda = 589,6 \text{ nm}$	0,08	0,05	0,08	-0,07	0,09	-0,06

Abbildung 5: Linienverbreiterung $\delta\nu_b$ und Linienverschiebung $\Delta\nu_s$ (in MHz/Pa) einiger Alkaliübergänge bei Stößen mit Edelgasatomen.

Sowohl elastische als auch inelastische Stöße führen zu einer Verbreiterung der Spektrallinien. In beiden Fällen erhält man ein Lorentz-Profil. Bei elastischen Stößen kommt es neben der Verbreiterung mit einer Halbwertsbreite $\Gamma = 2/\tau_a$ auch zu einer Verschiebung der Linien.

7.5 Röntgenstrahlung

Röntgenstrahlung ist kurzwellige elektromagnetische Strahlung, die sich an das Gebiet der Ultraviolettstrahlung anschließt. Der typische Wellenlängenbereich liegt zwischen 100 und $0,1\text{\AA}$, was in etwa Frequenzen zwischen 1016 und 1019 Hz und Photonenenergien zwischen 0,1 und 100 keV entspricht.

Röntgenstrahlung besitzt aufgrund ihrer im Vergleich zu Licht hohen Frequenz und damit größeren Energie eine große Durchdringungsfähigkeit von Materie. Etwa 100 Jahre nach ihrer Entdeckung haben die Röntgenstrahlen eine Fülle von Anwendungen erschlossen und sind aus vielen Gebieten wie der Medizintechnik, der Materialforschung, der Sterilisation von Lebensmitteln oder der Röntgenastronomie nicht mehr wegzudenken.

Die wichtigsten Methoden zur Erzeugung von Röntgenstrahlung sind die Abbremsung schneller Elektronen beim Beschuss von Metallanoden in so genannten Röntgenröhren und die

Ablenkung hochenergetischer Elektronen in Beschleunigern mit Hilfe von Magnetfeldern. Das Prinzip einer Röntgenröhre ist in Abb. 6 dargestellt. Von der Glühkathode werden Elektronen emittiert und mittels eines elektrisch geladenen Metallzylinders (Wehnelt-Zylinder, Wehnelt-Spannung U) zu einem Stahl fokussiert. Der Elektronenstrahl durchläuft das Spannungsgefälle zur geerdeten Anode und wird dabei entsprechend beschleunigt. Beim Auftreffen der schnellen Elektronen auf der Anode werden Röntgenstrahlen emittiert. Die Anode besteht aus Metallen wie z.B. Kupfer, Molybdän oder Wolfram. Um Streuprozesse der Elektronen zu vermeiden, befindet sich die ganze Anordnung in einer Vakuumröhre.

Nur ein geringer Anteil der kinetischen Energie der Strahlelektronen wird in Röntgenstrahlung umgewandelt und verlässt das System wieder. Der größte Anteil wird in Wärme umgewandelt. Die Anode muss deshalb sehr gut gekühlt werden.

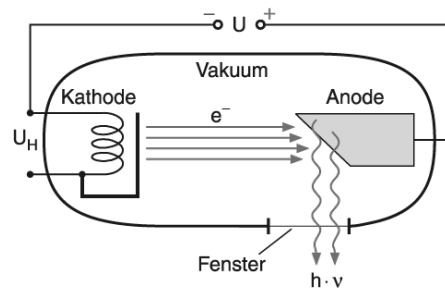


Abbildung 6: Schematischer Aufbau einer Röntgenröhre.

Das von einer Röntgenröhre emittierte Spektrum besteht aus zwei Anteilen:

1. einem kontinuierlichen Spektrum, das als *Bremsspektrum* (auch Bremsstrahlung) bezeichnet wird. Das Bremsspektrum besitzt eine kontinuierliche spektrale Intensitätsverteilung $I(\lambda)$, deren Verlauf von der Energie der Elektronen abhängt und eine kurzweilige Grenze besitzt.
2. einem Linienspektrum, das charakteristisch für das Element ist, aus dem die Anode gefertigt ist und gegenüber dem optischen Spektrum des entsprechenden Elements verblüffend wenige Linien besitzt. Man spricht von dem *charakteristischen Spektrum* (auch charakteristische Röntgenstrahlung). Auch das charakteristische Spektrum besitzt eine kurzweilige Grenze. Die Photonen haben diskrete Energien $h \cdot \nu = E_i - E_k$.

7.5.1 Bremsstrahlung

Beim Durchlaufen des Coulombfeldes der positiv geladenen Atomkerne des Anodenmaterials ändern die eintreffenden schnellen Elektronen ihre Geschwindigkeit. Nach den Gesetzen der klassischen Elektrodynamik sendet ein geladenes Teilchen, wenn es beschleunigt wird, elektromagnetische Strahlung aus. Die abgestrahlte Energie wird der kinetischen Energie des Teilchens entnommen, wodurch dieses langsamer wird. Man spricht deshalb von *Bremsstrahlung*. Die Elektronen durchlaufen dabei keine quantisierten, gebundenen Zustände, weshalb das dazugehörige Spektrum kontinuierlich ist.

Das Bremsspektrum ist zwar kontinuierlich, besitzt aber zu kurzen Wellenlängen bzw. hohen Frequenzen hin eine charakteristische Abschneidewellenlänge bzw. -frequenz. Die maximale Frequenz ν_G bzw. die minimale Wellenlänge, die die Bremsstrahlung erreichen kann, ist dann gegeben, wenn das einfallende Elektron seine gesamte kinetische Energie in einem einzigen atomaren Bremsvorgang verliert. Das Bremsspektrum muss also bei der Wellenlänge λ_G ab-

brechen. Falls U_B die Beschleunigungsspannung der Röntgenröhre ist, so gilt:

$$h\nu \leq h\nu_G = e \cdot U_B \quad \Rightarrow \quad \lambda \geq \lambda_G = \frac{h\nu}{eU} = \frac{12,4 \text{ \AA}}{U[\text{kV}]} \quad (22)$$

7.5.2 Charakteristische Röntgenstrahlung

Beim Auftreffen der Elektronen auf das Anodenmaterial können diese auch Stöße mit den Elektronen der Anodenatome ausführen. Dieser Prozess führt zu einer Erwärmung des Anodenmaterials aber auch zum Herauslösen von Elektronen aus den inneren Schalen. Das Auffüllen der Löcher in den inneren Schalen führt dann zur charakteristischen Röntgenstrahlung, wenn die Energie des auftreffenden Elektrons groß genug ist ein Elektron aus dem Anodenmaterial herauszulösen:

$$e^- + E_{kin} + A(E_k) \Rightarrow A^*(E_i) + e^- + E'_{kin} \quad \text{mit} \quad E_{kin} = -E'_{kin} = E_i - E_k, \quad A^*(E_i) \Rightarrow A(E_k) + h\nu_{ik}, \quad (23)$$

wobei A^* ein angeregtes Atom symbolisiert.

BEISPIEL

$E_k(\text{Cu}(1s)) = -8978 \text{ eV}$ (Anregung aus der K -Schale),
 $E_i(\text{Cu}(6p)) = -4 \text{ eV} \Rightarrow$ Erst oberhalb der Energie
 $E_{kin} = e \cdot U \hat{=} 8974 \text{ eV}$ der stoßenden Elektronen kann
 die Cu- K -Strahlung entstehen.

7.5.3 Absorption und Streuung von Röntgenstrahlung

Fällt paralleles Röntgenlicht auf ein Material der Dicke dx , so stellt man fest, dass die durchgelassene Strahlungsleistung $P(x)$ gegen die ursprüngliche Leistung P_0 abgeschwächt ist. Diese Abschwächung ist gegeben durch die Beziehung $dP = -\mu P dx$, wobei μ der *Abschwächungskoeffizient* ist. Integration ergibt für die Schichtdicke x :

$$P(x) = P_0 \cdot e^{-\mu \cdot x}. \quad (24)$$

Da die Abschwächung sowohl durch Streuung, als auch von Absorption verursacht ist, schreibt man den Abschwächungskoeffizienten als $\mu = \mu_s + \alpha$. μ_s beschreibt den *Streukoeffizienten*, α den *Absorptionskoeffizienten*.

Der Streuquerschnitt für Röntgenlicht ist wesentlich größer als für sichtbares Licht.

BEISPIEL

Beim Durchgang durch reines Wasser wird sichtbares Licht bei $\lambda = 500 \text{ nm}$ nach $x = 1 \text{ km}$ durch Streuung auf $1/e$ geschwächt, während Röntgenstrahlung bei $\lambda = 0,1 \text{ nm}$ bereits nach 5 mm auf $1/e$ abnimmt.

Die Absorption von Röntgenstrahlung beruht auf drei Prozessen, für die nur die Reaktionsgleichungen angegeben werden sollen:

1. Photoeffekt: $h\nu + A(E_k) \rightarrow A^+(E_{ion}) + e^-(E_{kin})$.
2. Compton-Effekt: $h\nu + e^- \rightarrow e^-(E_{kin}) + h\nu'$.
3. Paarbildung: $h\nu \rightarrow e^- + e^+ + 2E_{kin}$.

Der *Massenabsorptionskoeffizient* $\kappa_a = \alpha/\rho$ gibt an, nach welcher durchstrahlten Massenbelegung pro Flächeneinheit die Intensität auf $1/e$ ihres Anfangswertes gesunken ist. Hierbei ist $\alpha = n \cdot \sigma_a$ der Absorptionskoeffizient, der von der Teilchenzahldichte und deren Absorptionsquerschnitt abhängt. ρ ist die Dichte.

Experimentell findet man, dass der Absorptionsquerschnitt gemäß $\sigma_a = C \cdot Z^4 \cdot \lambda^3$ stark von der Wellenlänge und der Kernladungszahl abhängt. Die Konstante C hängt vom Material ab.

BEISPIEL

Blei hat die Dichte $\rho = 11,3 \text{ g/cm}^3$ und bei $\lambda = 0,1 \text{ nm}$ ($\approx 12 \text{ keV}$) den Massenabsorptionskoeffizienten $\kappa_a = 7,5 \text{ m}^2/\text{kg}$. Man braucht daher eine Masse von $0,6 \text{ kg}$ pro m^2 durchstrahlter Fläche, um die Intensität auf $1\% = e^{-4,6}$ abzuschwächen. Dies entspricht einer Schichtdicke $x = 54 \text{ }\mu\text{m}$. Für Röntgenstrahlen der Wellenlänge 10^{-2} nm ($\approx 120 \text{ keV}$) ist $\kappa_a = 0,5 \text{ m}^2 \text{ kg}^{-1}$. Damit ist nun eine Bleischicht von $0,8 \text{ mm}$ nötig für eine Abschwächung auf 1% .

Um Photoionisation zu ermöglichen, muss $\hbar\omega > E_B$ sein. Die Bindungsenergie der einzelnen Elektronen besitzt für die verschiedenen Schalen mit ihrer Feinstruktur charakteristische Werte. Sobald die Energie des Röntgen-Photons eine dieser charakteristische Energien überschreitet, stehen mehr Elektronen für den Photoionisationsprozess zur Verfügung. Als Folge davon steigt der Absorptionskoeffizient σ_a stark an, wobei $\sigma_a \propto \lambda^3$. Man erhält eine typische Kantenstruktur für den Absorptionskoeffizienten und man spricht von den K-, L-, M-, usw. *Absorptionskanten*. Bei den Absorptionskanten muss man beachten, dass es zu jeder Schale mit $n \geq 2$ Unterschalen gibt. Dies führt zu einer Feinstruktur der L-, M-, usw. Absorptionskanten, während die K-Absorptionskante ($n = 1$) keine Feinstruktur besitzt.

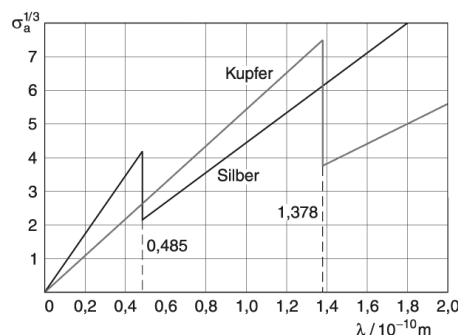


Abbildung 7: Dritte Wurzel aus dem Absorptionsquerschnitt $\sigma_a(\lambda)$. Gezeigt sind die K-Kanten von Silber und Kupfer.

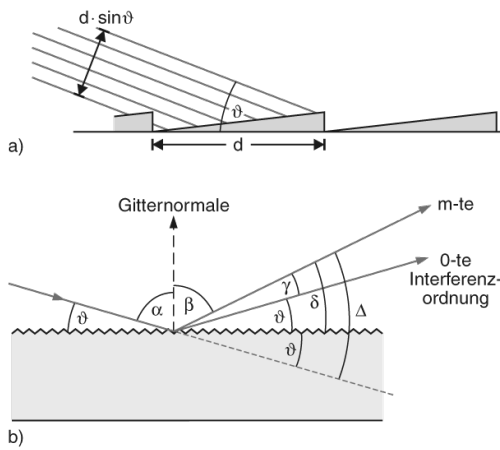
7.5.4 Messung von Röntgenwellenlängen

Die Wellenlänge λ_{ik} können an einem Beugungsgitter mit Hilfe der Bragg-Bedingung bestimmt werden:

$$d_{eff} = d \cdot \sin \vartheta, \quad (25)$$

wobei d_{eff} die effektive Gitterkonstante ist (Winkelbezeichnung siehe Abb. 8). Für die Beugung an einem Gitter gilt

$$d \cdot (\sin \alpha - \sin \beta) = m \cdot \lambda \quad (26)$$



BEISPIEL

$d = 0,83 \mu\text{m}$, $\lambda = 1 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ \AA}$, $\vartheta = 10' = 2,8 \cdot 10^{-3} \text{ rad}$. Die erste Interferenzordnung ($m = 1$) erscheint dann unter dem Winkel $\delta = 1,5 \cdot 10^{-2} \text{ rad}$ gegen die Gitterfläche und unter dem Winkel $\Delta = 1,8 \cdot 10^{-2} \text{ rad}$ gegen die Einfallsrichtung.

Abbildung 8: Messung der Wellenlänge von Röntgenstrahlung bei streifendem Einfall auf ein Beugungsgitter.

Mit der totalen Ablenkung $\Delta = \vartheta + \delta$ gegen die Einfallsrichtung gilt für die m-te Ordnung

$$m \cdot \lambda = 2d \sin \frac{\Delta}{2} \cdot \sin \frac{\gamma}{2} \approx \frac{d}{2} \cdot \Delta \gamma. \quad (27)$$

Ist die Frequenz der Röntgenstrahlung größer als eine Absorptionsfrequenz ω_0 , so wird der Brechungsindex $n < 1$ und es tritt Totalreflexion auf. Für solche Frequenzbereiche können deshalb keine Sammellinsen realisiert werden.

7.6 Kontinuierliche Absorptions- und Emissionsspektren

Kontinuierliche Spektren bekommt man, wenn wenigstens einer der beiden Zustände des Übergangs von Energieniveau E_i zu E_2 nicht gebunden ist, ansonsten handelt es sich um ein Linienspektrum. Es gibt verschiedene Möglichkeiten ein kontinuierliches Spektrum zu bekommen:

1. Photoionisation, wobei ein gebundenes Elektron durch Absorption eines energiereichen Photons den gebundenen Zustand verlässt und das Atom ionisiert.
2. Umkehrprozess der Photoionisation durch Strahlungsrekombination. Hierbei wird ein freies Elektron unter Photonenabgabe von einem Ion eingefangen.
3. Bremsstrahlung ist Beispiel für kontinuierliches Emissionsspektrum.

7.6.1 Rekombinationsstrahlung

Wird ein freies Elektron mit der Geschwindigkeit v von einem Atom oder Ion eingefangen in einen gebundenen Zustand mit der Bindungsenergie $E_i < 0$, so kann die frei werdende Energie als Strahlung mit der Photonenenergie $h\nu = E_{kin} - E_i = \frac{m_e}{2} v^2 - E_i$ emittiert werden. Man nennt diese Strahlung **Rekombinationsstrahlung**.

Der Wirkungsquerschnitt $\sigma_i(v)$ für den Elektroneneinfang hängt von der relativen Elektronengeschwindigkeit in Bezug auf das Ion ab. Im Plasma kommt außerdem noch eine Temperaturabhängigkeit dazu. Hier gilt für die von der Volumeneinheit des Plasmas in den Raumwinkel

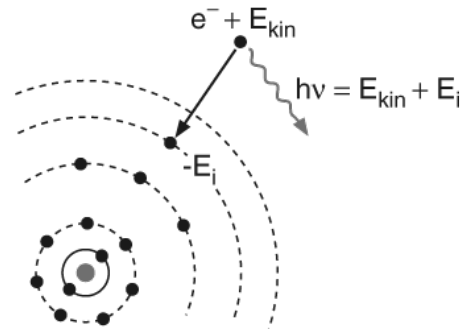
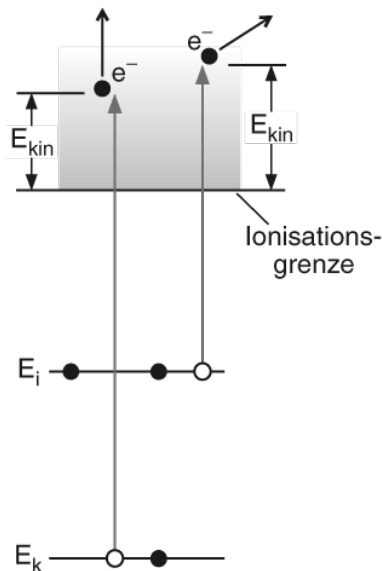


Abbildung 10: Entstehung eines kontinuierlichen Rekombinationsspektrums.

Abbildung 9: Photoionisation eines Atoms aus einem Zustand E_i .

Ω emittierte Rekombinationsstrahlung im Frequenzintervall $d\nu$

$$P_{\nu, \nu} d\nu = \frac{h\nu}{4\pi} N_a \cdot v \cdot \sigma_i \cdot n_e(v) \cdot d\nu, \quad (28)$$

wobei $n_e(v) dv$ die Dichte der freien Elektronen im Geschwindigkeitsintervall $[v, v + dv]$ ist. Die Geschwindigkeit der Elektronen ist Maxwell verteilt, so dass man ein Intensitätsspektrum der kontinuierlichen Rekombinationsstrahlung erhält mit

$$h\nu_0 = (m_e/2 v_w^2 - E_i) \quad \text{mit} \quad E_i < 0. \quad (29)$$

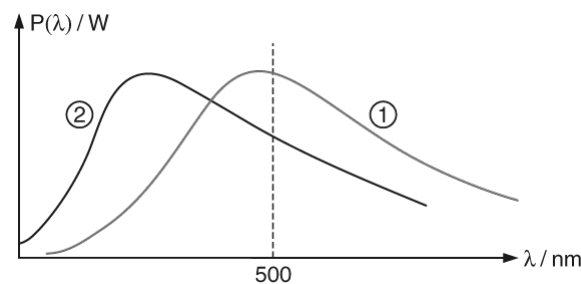


Abbildung 11: Kontinuierliche Rekombinationsstrahlung im Wasserstoffplasma mit niedriger Elektronenkonzentration bei $T = 6000 \text{ K}$. (1) $H + e^- \rightarrow H^- + h\nu$; (2) $H^+ + e^- \rightarrow H + h\nu$.

Ein Beispiel für solche ein kontinuierliches Spektrum ist das Sonnenspektrum. Hier rekombinieren freie Elektronen mit neutralen Wasserstoffatomen: $H + e^- + E_{kin} \rightarrow H^- + h\nu$. Dieser Prozess läuft bei ca. 6000 K ab. Weiterhin wird das H^- -Ion durch Stöße mit Elektronen wieder ionisiert zu angeregtem neutralen Wasserstoff: $H^- + e^- \rightarrow H^* + 2e^-$.