

Pracovní úkoly

1. Ze zadané hustoty krystalu fluoridu lithného určete vzdálenost d hlavních atomových rovin.
2. Proměřte úhlovou závislost intenzity difraktovaného rentgenového záření při pevné orientaci krystalu.
3. Proměřte spektrum rentgenového záření při konstantním anodovém napětí rentgenky $U_a = 20$ kV.
4. Z mezní hodnoty energie spojitého spektra určete Planckovu konstantu, porovnejte s tabelovanou hodnotou. Určete vlnové délky čar K_α , K_β (porovnejte s tabelovanými hodnotami), spočítejte jejich vlnočty a odpovídající energetické rozdíly vyjádřete v keV. Určete konstanty stínění.

Teoretická část

Rentgenové záření vzniká při dopadu elektronů z katody na anodu v tzv. rentgenové trubici (obrázek 1). Žhavením katody se uvolňují elektrony, které jsou urychlovány anodovým napětím U_a . V místě dopadu pak dochází ke vzniku rentgenového záření. Umístěním vodivého válce spojeného s katodou (na obrázku 1 označený W) docílíme soustředěného paprsku elektronů a tvorba rentgenového záření probíhá téměř v jediném bodě. Při dopadu elektronů na anodu vzniká rentgenové záření dvěma fyzikálními procesy.¹

Brzdné záření se spojitém spektrem vzniká při brzdění elektronů atomovými jádry na anodě. Ve spektru brzdného záření pro vysoké energie (a tedy krátké vlnové délky) pozorujeme téměř nulovou intenzitu, záření zaznamenáváme až s vlnovou délkou delší než tzv. mezní vlnová délka λ_m , při vzniku fotonu s touto vlnovou délkou totiž předává dopadající elektron celou svou energii. Pro energii fotonu s mezní vlnovou délkou platí

$$\frac{hc}{\lambda_m} = eU_a \quad , \quad (1)$$

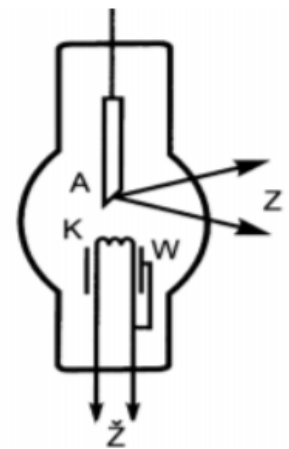
kde c je rychlost světla, h Planckova konstanta a e je elementární náboj.¹

Charakteristické záření s diskrétním spektrem vzniká, pokud mají dopadající elektrony dostatečně vysokou energii pro excitaci elektronů v atomech anody do vyšších hladin, případně pro vytržení elektronů z nižších energetických hladin. Do uvolněné energetické hladiny pak přichází elektrony z vyšších hladin a dochází k vyzařování fotonů. Spektrum tedy závisí na materiálu anody. Pro vlnočty σ_{12} , tedy převrácenou hodnotu vlnové délky záření vzniklého při přeskoku z hladiny n_1 do n_2 platí

$$\sigma_{12} = R(Z - s)^2 \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \quad . \quad (2)$$

R je Rydbergova konstanta, Z je atomové číslo a s je tzv. stínící konstanta, která kvantifikuje stínění od elektrického pole ostatních elektronů v atomovém jádře.¹

Při dopadu záření na krystal se vzdáleností atomárních rovin d , dochází k difrakci podle Braggovy podmínky



Obrázek 1. Rentgenová trubice.¹

(13) Vlastnosti rentgenového záření

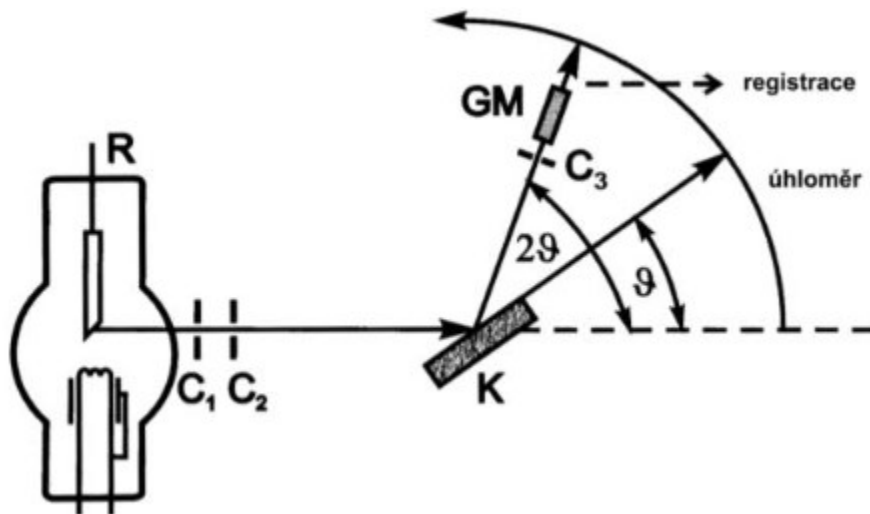
$$2 d \sin \theta = k \lambda \quad (3)$$

kde θ je úhel dopadu záření vůči atomovým rovinám a λ vlnová délka difraktovaného záření. Braggova podmínka vyjadřuje skládání záření odraženého od atomárních rovin s různou fází. Mezirovinná vzdálenost v krystalech je běžně v řádu stovek pm, což odpovídá i vlnovým délkám rentgenového záření. Přesnou vzdálenost meziatomárních rovin pro FCC krystal dostaneme podle vzorce

$$d = \sqrt[3]{\frac{A_r u}{2\rho}} \quad (4)$$

A_r je relativní atomová hmotnost molekuly, u atomová hmotnostní konstanta a ρ hustota monokrystalu.

Pro proměření spektra rentgenového záření můžeme použít přístroj zobrazený na schématu na obrázku 2. Z rentgenové trubice R vychází záření, které difraktuje na krystalu K. Při pozorování v pod úhlem $\varphi = 2\theta$ pak můžeme toto záření detekovat Geiger-Müllerovým (GM) čítačem.



Obrázek 2. Schéma měřicí aparatury Phywe. ³

Výsledky měření

Z tabulkové hodnoty⁴ hustoty monokrystalu LiF $\rho = 2601 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, relativní atomové hmotnosti $A_r(\text{LiF}) = 25,939$ a atomové hmotnostní konstanty $u = 1,6606 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ jsme podle vzorce (4) dopočetli vzdálenosti meziatomárních rovin krystalu LiF jako $d = 202,31 \text{ pm}$. Chybu této hodnoty oproti chybám měřených hodnot můžeme zanedbat (hodnota je určena z poměrně přesných tabelovaných hodnot), nebudeme jí tedy uvádět.

Anoda rentgenky v měřícím přístroji Phywe (obrázek 2) je vyrobena z mědi, napětí na ní bylo měřeno pomocí děliče napětí s odpory $R_1 = 100 \text{ M}\Omega$ a $R_2 = 100 \text{ k}\Omega$. K odporu R_2 je paralelně připojen miliampérmetr třídy přesnosti 1,5. Na rozsahu měření 0,6 mA byl udržován proud $I_a = (0,20 \pm 0,01) \text{ mA}$, v průběhu měření jsme pozorovali mírný nárůst proudu, chyba určená pomocí třídy přesnosti ze zákona přenosu je tedy ještě nadhodnocena. Tomuto proudu odpovídá anodové napětí $U_a = (20 \pm 1) \text{ kV}$.

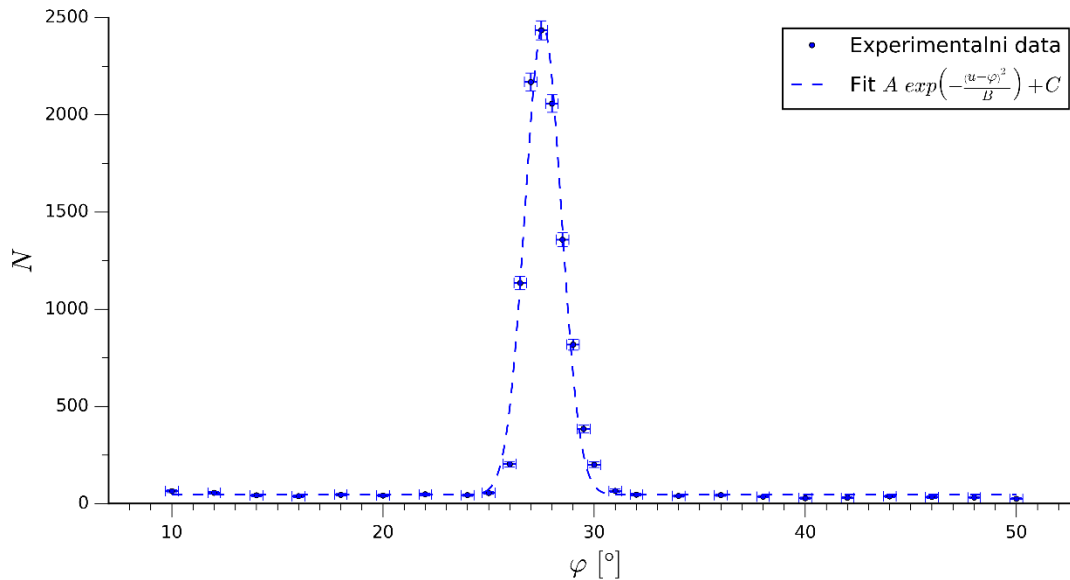
Nejprve jsme měřili závislost difraktovaného záření na úhlu pozorování GM čítačem při pevném úhlu krystalu 14° GM čítačem. Naměřené hodnoty jsou zobrazeny v grafu na obrázku 3. Stupnice

(13) Vlastnosti rentgenového záření

úhloměru měřicího přístroje měla nejmenší dílek 1° , díky vhodné vzdálenosti dílů ale bylo možné poměrně přesně určit $0,5^\circ$. Chybu měření úhlu tedy odhadujeme na $\sigma_\theta = \sigma_\varphi = 0,3^\circ$.

Místo intenzity jsme měřili počet částic zachycených GM čítačem během 40 s. Chyba určení počtu naměřených částic je dána Poissonovým rozdělením

$$\sigma_N = \sqrt{N} \quad (5)$$



Obrázek 3. Naměřená závislost počtu zachycených částic na úhlu pozorování.

Naměřené hodnoty jsou proloženy závislostí $N = N_0 + A \exp\left(-\frac{(u-\varphi)^2}{B}\right)$, hodnota N_0 nám dává představu o šumu pozadí, A odpovídá počtu naměřených částic v maximu, u je hodnota úhlu v maximu a B udává šířku peaku. Nafitované parametry jsou uvedeny v tabulce 1.

Tabulka 1. Parametry fitu naměřených dat.

N_0	A	B	u
46 ± 20	2410 ± 70	$1,48 \pm 0,10$	$27,58 \pm 0,03$

Z fitu vidíme, že maximum naměřených částic nastává pro hodnotu $\varphi = 27,58^\circ$, chyba určených hodnot ale odpovídá pouze statistické chybě, musíme započítat i chybu určení vzájemného úhlu GM a K. Chybu odhadneme jako odmocninu součtu kvadrátů chyb obou úhlů, hodnotu maxima jsme tedy určili jako $\varphi_m = (27,6 \pm 0,4)^\circ$, což se v rámci chyby shoduje s teorií, že budeme pozorovat maximum při $\varphi_m = 2\theta$.

Dále z fitu můžeme odhadnout, že šum pozadí přibližně odpovídá jedné detekované částici za sekundu.

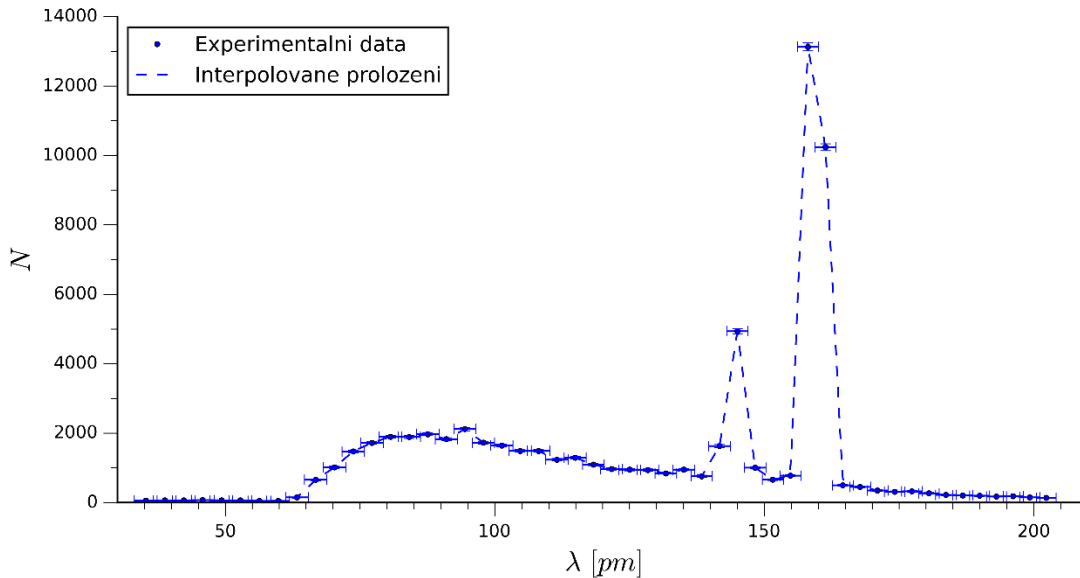
Následně bylo s využitím Braggovy podmínky (3) proměřeno spektrum rentgenového záření. Úhel natočení krystalu θ jsme měnili s krokem $0,5^\circ$ od 5° do 30° , úhel natočení GM čítače byl vždy dvojnásobný. Spektrum je zobrazeno v grafu na obrázku 4.

Vlnová délka je určena z (3) pro difrakční řád $k = 1$. Chyba určení vlnové délky je pak dána jako

(13) Vlastnosti rentgenového záření

$$\sigma_\lambda = 2 d \cos(\theta) \sigma_\theta \quad . \quad (6)$$

Chyba všech měření vyšla $\sigma_\lambda = 3 \text{ pm}$.



Obrázek 4. Spektrum rentgenového záření.

Hodnoty spektra na obrázku 4 jsou proloženy spline interpolací. Vidíme dva výrazné peaky odpovídající čarám K_α a K_β charakteristického spektra. Pro určení vlnové délky těchto čar pomocí fitu nemáme dostatek dat v okolí, vezmeme tedy hodnotu vlnové délky pro nejvyšší naměřenou intenzitu peaku. Předpokládáme, že chyba takto určené hodnoty odpovídá chybě v hodnotě vlnové délky. Dostáváme $K_\alpha = (158 \pm 3) \text{ pm}$ a $K_\beta = (145 \pm 3) \text{ pm}$. Příslušné vlnočty jsme pak podle

$$\sigma_i = 1/\lambda_i \quad (7)$$

určili jako $\sigma_\alpha = (6,3 \pm 0,1) \text{ nm}^{-1}$ a $\sigma_\beta = (6,9 \pm 0,1) \text{ nm}^{-1}$.

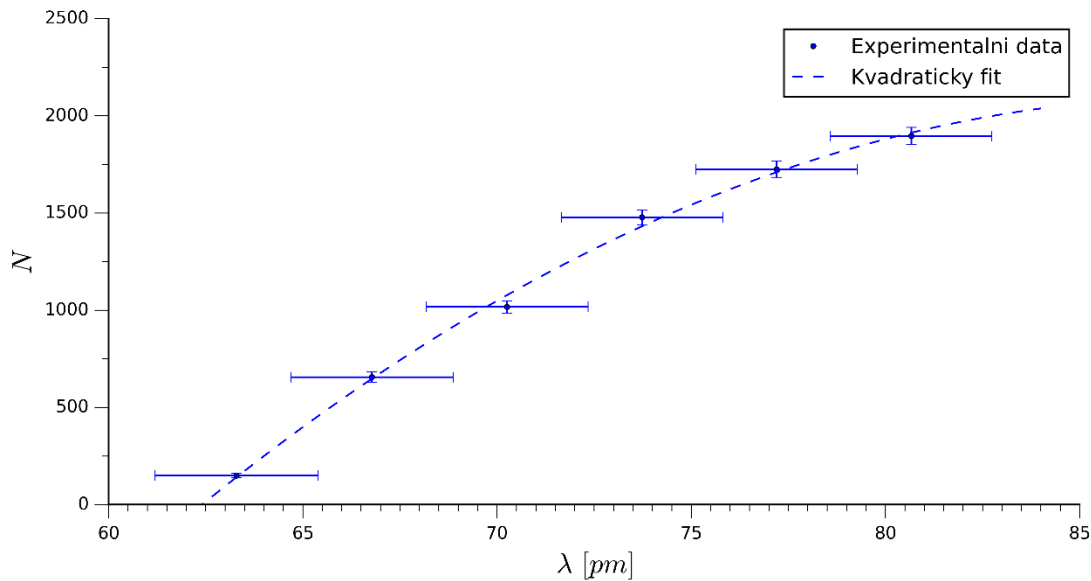
Dále jsme určili mezní vlnovou délku výběrem dat v okolí pozorovaného nárůstu intenzity. To je zobrazeno v grafu na obrázku 5. Data jsme proložili kvadratickou závislostí, tedy druhým přiblížením obecné závislosti na vlnové délce. Jak vidíme z grafu, toto přiblížení je na tomto okolí dostatečné. Parametry fitu jsou v tabulce 2, mezní vlnové délce odpovídá průsečík fitu s osou x.

Pro mezní vlnovou délku tedy dostáváme $\lambda_m = (62 \pm 3) \text{ pm}$.

Nyní podle (1) můžeme určit Planckovu konstantu. Do vzorce jsme dosadili $e = 1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ a $c = 2,9979 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$. Dostáváme hodnotu $h = (6,7 \pm 0,3) \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$. Chybu jsme určili podle vzorce

$$\sigma_h = h \sqrt{\left(\frac{\sigma_{U_a}}{U_a}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{\lambda_m}}{\lambda_m}\right)^2} \quad . \quad (8)$$

(13) Vlastnosti rentgenového záření



Obrázek 5. Určení mezní vlnové délky pomocí kvadratického fitu.

Energetické rozdíly čar K_α a K_β určíme podle vzorce analogického k vzorci (1), a to

$$E = \frac{hc}{\lambda} \quad (9)$$

Ačoliv jsme hodnotu h vypočetli pomocí mezní vlnové délky, použijeme ve výpočtech tabelovanou⁴ hodnotu $h = 6,62618 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$.

Dostáváme $E_\alpha = (7,8 \pm 0,1) \text{ keV}$ a $E_\beta = (8,6 \pm 0,2) \text{ keV}$. Energetický přechod E_α odpovídá přeskoku 1-2, E_β odpovídá přeskoku 1-3. Chyba byla určena podle

$$\sigma_E = \frac{E \sigma_\lambda}{\lambda} \quad (10)$$

Pro určení stínící konstanty využijeme vzorec (2). Pro měď je hodnota $Z = 29$. Rydbergova konstanta je $R = 10\,973\,732 \text{ m}^{-1}$.

Dostáváme hodnoty $s_{12} = (1,3 \pm 0,2)$ a $s_{13} = (2,3 \pm 0,3)$.

Diskuze

U výpočtů, ve kterých se vyskytují tabelované konstanty zanedbáváme chyby těchto konstant, jejich relativní chyby jsou mnohem menší než chyby vzniklé měřením. Anodové napětí je nastaveno pomocí miliampérmetru třídy přesnosti 1,5 pomocí kterého měříme proud procházející napěťovým děličem. V průběhu měření sledujeme mírný nárůst hodnoty proudu, podle čehož jsme patřičně nadhodnotili chybu.

Při měření počtu pulzů za časový úsek očekáváme, že je chyba daná Poissonovým rozdělením. Dále ale můžeme pozorovat šum, který odhadujeme na 1 detekovanou částici za vteřinu, což ukazuje i fit na obrázku 3.

(13) Vlastnosti rentgenového záření

Úhel GM čítače a krystalu byl odečítán z úhlooměru v přístroji, očekáváme, že odchylky od odečtené hodnoty jsou minimální a chyba odečtené hodnoty záleží pouze na stupnici a naší schopnosti přesného odečtení (a odhadu poloviny dílku).

Difrakci do dvojnásobného úhlu jsme podle očekávání pozorovali, stejně tak teorii odpovídá i spektrum rentgenového záření. Určené hodnoty vlnových délek charakteristických čar K_α a K_β odpovídají tabelovaným hodnotám ($K_\alpha^{tab} = 154 \text{ pm}$, $K_\beta^{tab} = 139 \text{ pm}$) v rámci dvou směrodatných odchylek.

Určení mezní vlnové délky pomocí kvadratického fitu předpokládá, že je chování kvadratické i velmi blízko nulové hodnoty záření. Protože očekáváme rychlý nárůst intenzity s malou změnou vlnové délky, kvadratická funkce kterou jsme nafitovali vypadá jako vhodné přiblížení pro popis intenzitní závislosti brzdného záření v bezprostředním okolí mezní vlnové délky. Chyba určení samotných vlnových délek z přímého měření je dostatečně velká, tak předpokládáme že zahrne i chybu určení mezní hodnoty tímto způsobem.

Při výpočtu Planckovy konstanty poměrně zásadně do výpočtu zasáhla chyba určení anodového napětí a mezní vlnové délky. Použitím přesnějšího ampérmetru, stabilnějšího zdroje napětí a případně i přesnější metody měření napětí, by mělo dojít k výrazné redukci chyby. Námi určená hodnota se ale v rámci chyby shoduje s tabelovanou hodnotou.

Závěr

Vzdálenost hlavních atomových hladin monokrystalu LiF byla určena jako $d = 202,31 \text{ pm}$.

Proměřením závislosti intenzity difraktovaného RTG záření na úhlu pozorování jsme ukázali, že pozorujeme maximum intenzity přibližně pro dvojnásobnou hodnotu úhlu pozorování vůči úhlu difrakce. Maximum jsme fitem určili v hodnotě $\varphi_m = (27,6 \pm 0,4)^\circ$, krystal byl natočen pod úhlem $\theta = (14,0 \pm 0,3)^\circ$.

Dále jsme proměřili spektrum rentgenového záření. Pozorovali jsme očekávané chování – brzdné záření s mezní vlnovou délkou určenou jako $\lambda_m = (62 \pm 3) \text{ pm}$ a dva peaky charakteristického záření, odpovídající čarám K_α a K_β . Vlnové délky námi naměřených spektrálních čar jsme určili jako $K_\alpha = (158 \pm 3) \text{ pm}$ a $K_\beta = (145 \pm 3) \text{ pm}$. Z těchto hodnot jsme dopočetli vlnočty a energetické rozdíly jako $\sigma_\alpha = (6,3 \pm 0,1) \text{ nm}^{-1}$, $\sigma_\beta = (6,9 \pm 0,1) \text{ nm}^{-1}$, $E_\alpha = (7,8 \pm 0,1) \text{ keV}$ a $E_\beta = (8,6 \pm 0,2) \text{ keV}$. Stínící konstanty jsme určili jako $s_{12} = (1,3 \pm 0,2)$ a $s_{13} = (2,3 \pm 0,3)$.

Planckovu konstantu jsme dopočetli jako $h = (6,7 \pm 0,3) \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$.

Použité zdroje

¹ Studijní text k Fyzikálnímu Praktiku III. Vlastnosti rentgenového záření. [online] [cit. 2019-04-24]. Dostupné online z: https://physics.mff.cuni.cz/vyuka/zfp/_media/zadani/texty/txt_313.pdf

² Daniš S. Atomová fyzika a elektronová struktura látek, Matfyzpress, Praha 2019, ISBN 9788073783761

³ Pokyny k měření (13). Studium rentgenového záření. [online] [cit. 2019-04-25]. Dostupné online z: https://physics.mff.cuni.cz/vyuka/zfp/_media/zadani/pokyny/mereni_313.pdf

⁴ J. Brož, V. Roskovec, M. Valouch. Fyzikální a matematické tabulky, SNTL, Praha 1980