



Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

Спецкурс

Физические основы рентгеновского дифракционного анализа

Русаков Вячеслав Серафимович

Москва - 2024

Материалы к Главе I.

РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ И ЕГО СВОЙСТВА

- §1. История открытия рентгеновских лучей
- §2. Волновая природа рентгеновских лучей
 - 2.1. Метод Лауэ, эксперимент Фридриха и Книппинга
 - 2.2. Метод Генри и Лоуренса Брэггов
- §3. Рентгеновское излучение
 - 3.1. Рентгеновская трубка
 - 3.2. Спектр рентгеновского излучения
 - 3.3. Свойства тормозного излучения
 - 3.4. Свойства характеристического излучения
- §4. Взаимодействие рентгеновского излучения с веществом
 - 4.1. Индикатриса рассеяния, сечения и коэффициенты рассеяния
 - 4.2. Упругое когерентное рассеяние
 - 4.3. Фотоэффект. Рентгеновская флюоресценция и Оже-эффект
 - 4.4. Комптоновское рассеяние
 - 4.5. Ослабление рентгеновского излучения
 - 4.6. Дисперсия рентгеновского излучения
 - 4.7. Преломление и полное внешнее отражение рентгеновских лучей
- §5. Другие источники рентгеновского излучения

Открытие рентгеновских лучей (1895 г.)



Вильгельм Конрад Рентген
(27.03.1845 – 10.01.1923)

Немецкий физик-экспериментатор

**Первая в истории науки
Нобелевская премия по физике
(1901 г.)**

**"В знак признания исключительных
услуг, которые он оказал науке
открытием замечательных лучей,
названных впоследствии в его честь"**

На момент открытия X-лучей (в 1895 г.) В.К. Рентген (50 лет) – ректор и профессор Вюцбургского университета, занимался исследованиями свойств катодных лучей (электрического разряда в стеклянных вакуумных трубках).

§1. История открытия рентгеновских лучей

Х-лучи В.К. Рентген обнаружил **8 ноября 1895 г.**, когда вечером остался один в своей лаборатории и проводил эксперименты с высоковольтной вакуумной трубкой. Рентген обернул вакуумную трубку черной бумагой, которая задерживала все видимые и ультрафиолетовые лучи. При подаче высокого напряжения он заметил, что некоторые флуоресцирующие кристаллы, лежащие на столе, а также бумажная ширма, покрытая платиносинеродистым барием $BaPt(CN)_6$, начинали светиться.

Рентген на несколько недель буквально замуровал себя в лаборатории – он поставил там кровать, еду приносили ему в лабораторию. Рентген работал в полном одиночестве, тщательно регистрируя и фотографируя все результаты действия нового вида излучения, названного им Х-лучами.

Только после многочисленных опытов и проверок 26 декабря 1895 г. на собрании Вюрцбургского физико-медицинского общества Рентген сделал сообщение о новом виде излучения, а также о первых результатах исследования их свойств.

Свойства Х-лучей, обнаруженные Рентгеном:

- обладают очень высокой проникающей способностью (по сравнению с видимыми, ультрафиолетовыми и катодными лучами),
- вызывают флюоресценцию различных веществ, таких, как стекло, минералы и т. д.,
- в отличие от катодных лучей не отклоняются от своего пути в магнитном поле,
- образуются в том месте трубки, на которое падают катодные лучи (антикатод, анод),
- отражение, преломление и интерференция Х-лучей не обнаружены.

22 декабря 1895 г. Рентген сделал снимок левой руки госпожи Рентген, которая в начале января 1896 г. появилась в газетах всего мира.

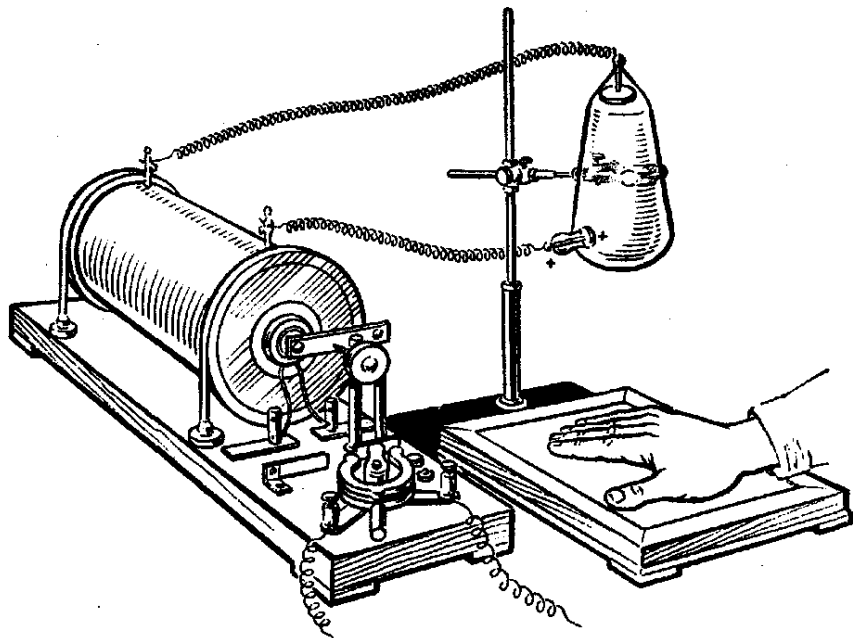
В январе 1896 г. вышла брошюра Рентгена пол заголовком «Новый род лучей».

Физики во многих лабораториях тотчас подтвердили опыты Рентгена.

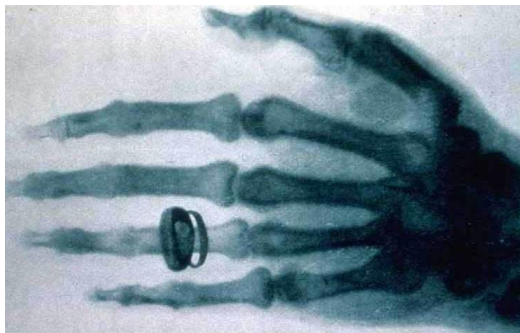
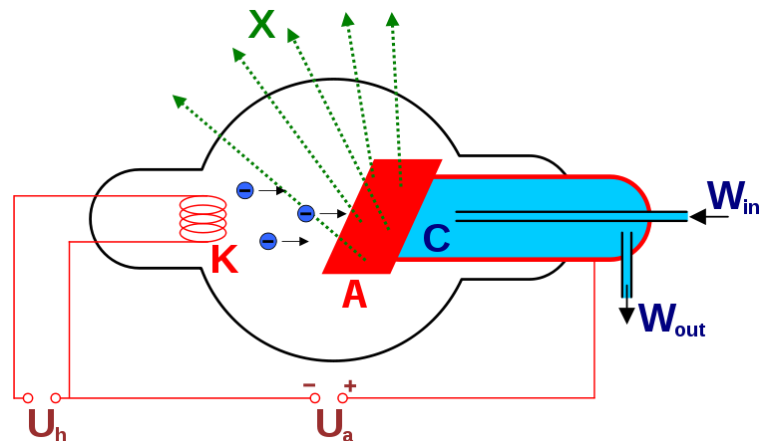
Уже в 1896 г. вышло более 50 книг и 1000 статей, посвященных открытию Рентгена.

§1. История открытия рентгеновских лучей

Эксперименты с катодными лучами 1895 г.



Одна из первых рентгеновских установок



Снимок руки Альберта фон Кёлликера (швейцарский анатом, зоолог и гистолог), 23 января 1896 года.



Кисть руки жены Рентгена — Анны Берты Рентген (Людвиг), 22 декабря 1895 года.

Нобелевские премии, связанные с рентгеновскими методами исследования

Год присуждения	Авторы	Названия работы	Область
1901	В.К. Рентген	<ul style="list-style-type: none"> Открытие X-лучей 	Физика
1914	М. фон Лауэ	<ul style="list-style-type: none"> Открытие дифракции рентгеновских лучей на кристаллах 	Физика
1915	У.Г. Брэгг, У.Л. Брэгг	<ul style="list-style-type: none"> Исследование структуры кристаллов с помощью рентгеновских лучей 	Физика
1917	Ч.Г. Баркла	<ul style="list-style-type: none"> Открытие характеристического рентгеновского излучения 	Физика
1927	А.Г. Комптон	<ul style="list-style-type: none"> Открытие эффекта Комптона 	Физика
1929	Л. Де Бройль	<ul style="list-style-type: none"> Открытие волновой природы материи 	Физика
1936	П. Дебай	<ul style="list-style-type: none"> Изучение структуры дипольных моментов молекул и дифракции рентгеновских лучей и электронов в газах 	Физика
1937	У.Н. Хоуорс, П. Каррера	<ul style="list-style-type: none"> Исследование структуры углеводов и витамина С, каратиноидов, флавинов, витаминов А и В2 	Химия
1946	Г. Меллер	<ul style="list-style-type: none"> Открытие мутаций под действием рентгеновских лучей 	Медицина
1954	Л.К. Полинг	<ul style="list-style-type: none"> Изучение природы химической связи и определение структуры сложных соединений 	Химия
1958	Ф. Сенгер	<ul style="list-style-type: none"> Исследование структуры белков-инсулина 	Химия
1962	М. Перуц, Дж. Кендрю	<ul style="list-style-type: none"> Исследования структуры глобулярных белков 	Химия
1962	Жд. Уотсон, М. Уилкинс, Ф. Крик	<ul style="list-style-type: none"> Исследование молекулярной структуры нуклеиновых кислот и их роли в передаче генетической информации 	Медицина, химия
1963	К. Циглер, Дж. Натт	<ul style="list-style-type: none"> Открытия в области химии и химической технологии высокополимерных веществ 	Химия
1964	Д. Кроуфут-Ходжкин	<ul style="list-style-type: none"> Рентгеноструктурные исследования биологических веществ управляющих процессами в живых организмах 	Химия, медицина
1979	А. Кормак, Г. Хаунсфилд	<ul style="list-style-type: none"> Разработка методов медицинской осевой томографии 	Медицина
1981	Кай Сигбан	<ul style="list-style-type: none"> Развитие методов электронной спектроскопии высокого разрешения 	Физика
1982	А. Круг	<ul style="list-style-type: none"> Работы по электронной микроскопии кристаллов нуклеопротеиновых комплексов 	Химия
1985	Г. Хауптман, Дж. Карл	<ul style="list-style-type: none"> Разработка прямых методов определения структуры кристаллов 	Химия
1988	Дж. Дайзенховер, Р. Юпер, Г. Мишель	<ul style="list-style-type: none"> Определение трехмерной структуры фотосинтетического реакционного центра у пурпурных бактерий 	Химия
2014	Э. Бетциг, У. Морнер, Ш. Хелль	<ul style="list-style-type: none"> За создание флуоресцентной микроскопии высокого разрешения 	Химия

§2. Волновая природа рентгеновских лучей

1899 г. – нидерландские физики **Г. Хага** и **К.Х. Вин** обнаружили слабый дифракционный эффект пучка рентгеновских лучей на узкой щели и оценили длину волны $\sim 1 \text{ \AA}$ (**волновая природа**).

1904 г. – английский физик **Ч.Г. Баркла** обнаружил поляризацию рентгеновских лучей (**волновая природа**).

1908 г. – английский физик **Уильям Генри Брэгг (1862–1942)**, отец **Уильяма Лоуренса Брэгга (1890–1971)**, наблюдал процесс возникновения потока электронов под действием рентгеновского излучения (**корпускулярная природа**).

1912 г. – **Макс Феликс Теодор фон Лауэ (1879–1960)** связал волновую теорию рентгеновских лучей и гипотезу о пространственных решетках кристаллов (середина XIX века французский физик-кристаллограф Огюст Браве) и **теоретически рассчитал** появление интерференц. (дифракц.) максимумов при прохождении пучка рентгеновских лучей через кристалл (**волновая природа**).

1912 г. – **Вальтер Фридрих (1883–1968)** и **Пауль Книппинг (1883–1935)** по предложению **Макса фон Лауэ** экспериментально проверили возможность использования кристалла как дифракционной решетки для рентгеновских лучей (на кристалле медного купороса – пентагидрата сульфата меди $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) (**волновая природа**).

2.1. Метод Лауэ, эксперимент Фридриха и Книппинга

Открытие дифракции рентгеновских лучей (1912 г.)

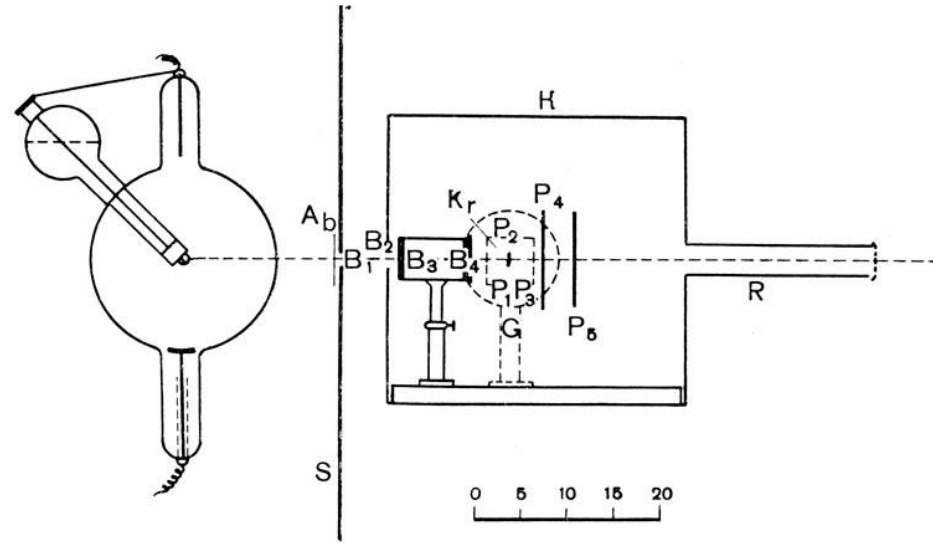
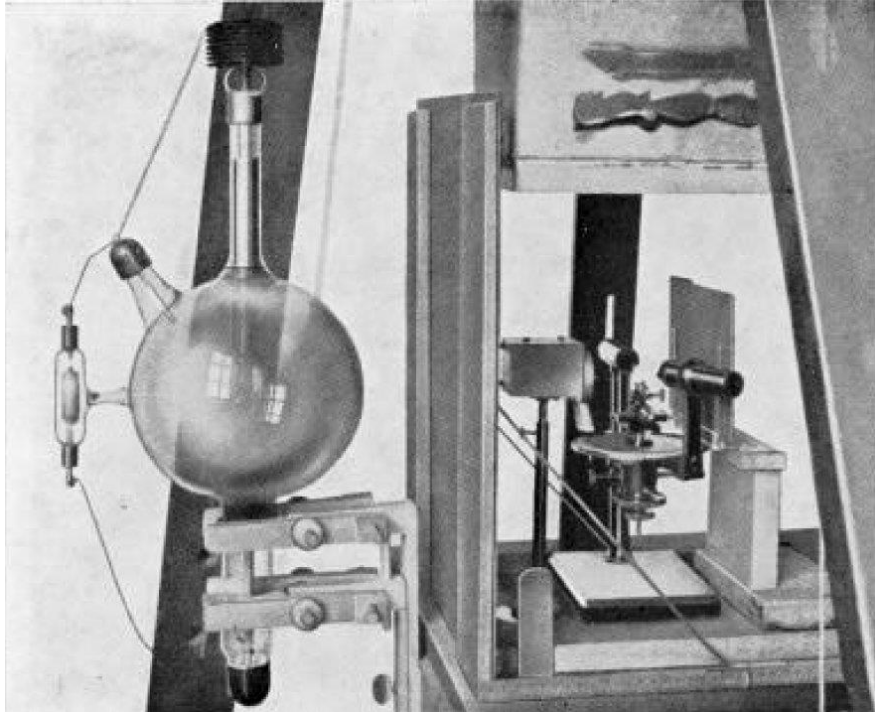
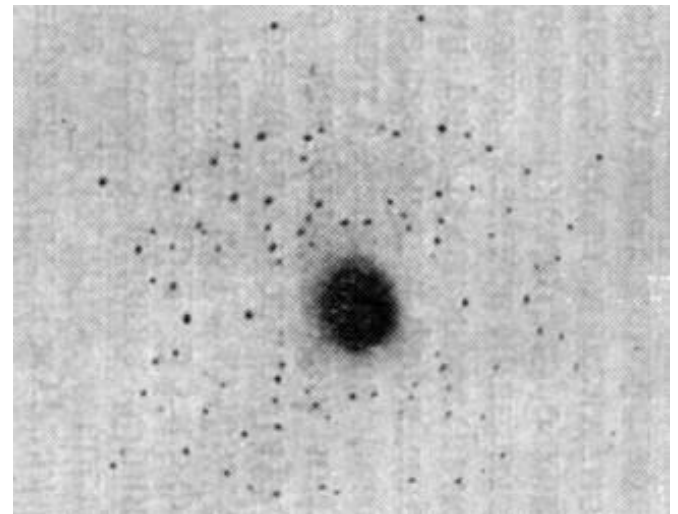


Схема экспериментальной установки

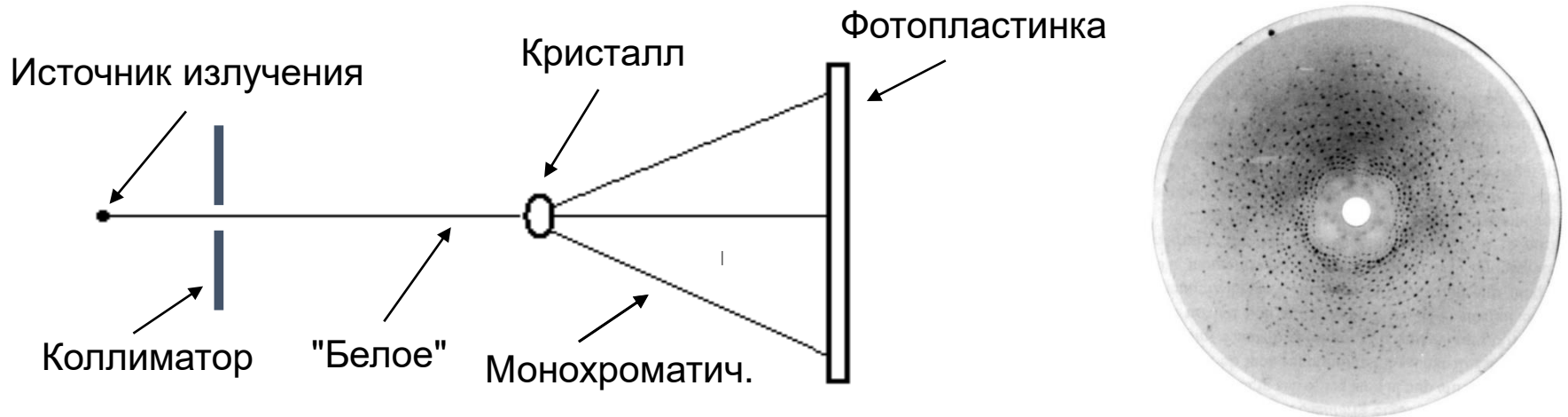
Вид экспериментальной установки
Фридриха-Книппинга

Одна из первых Лауэграмм



2.1. Метод Лауэ, эксперимент Фридриха и Книппинга

Открытие дифракции рентгеновских лучей (1912 г.)



Лауэ **теоретически рассчитал** появление дифракционных максимумов. Был сделан вывод о волновой природе рентгеновского излучения, и о том, что первичное **немонохроматическое** ("белое") рентгеновское излучение, проходя через кристалл, дает дифракционные максимумы, соответствующие **монохроматическим** лучам с определенными длинами волн.

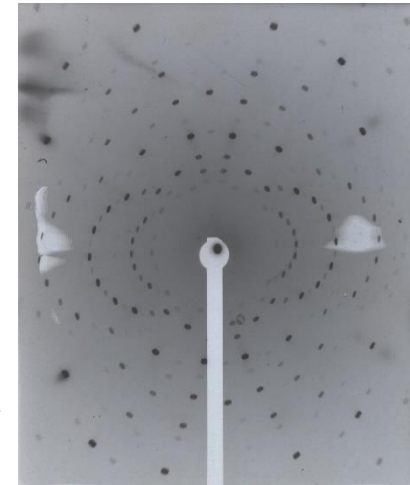
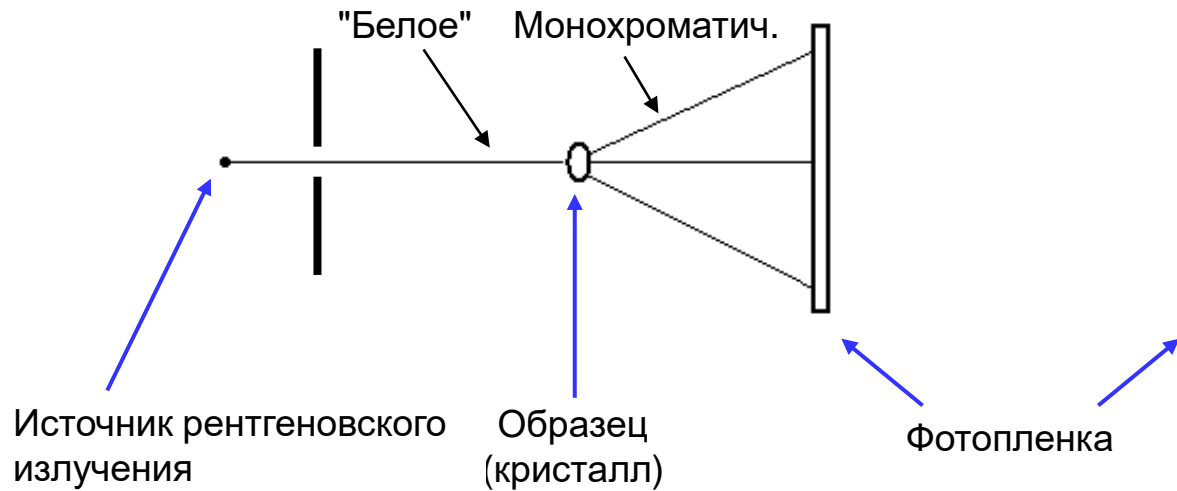
Открытие дифракции рентгеновских лучей в кристаллах:

- подтвердило, что рентгеновские лучи являются коротковолновым электромагнитным излучением,
- возвело гипотезу о пространственной решетке (Огюст Браве) в ранг достоверной экспериментально подтвержденной кристаллографической теории,
- устранило последние сомнения относительно существования атомов.

2.1. Метод Лауэ, эксперимент Фридриха и Книппинга

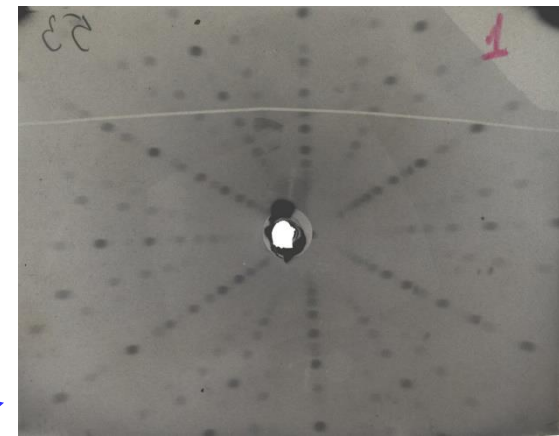
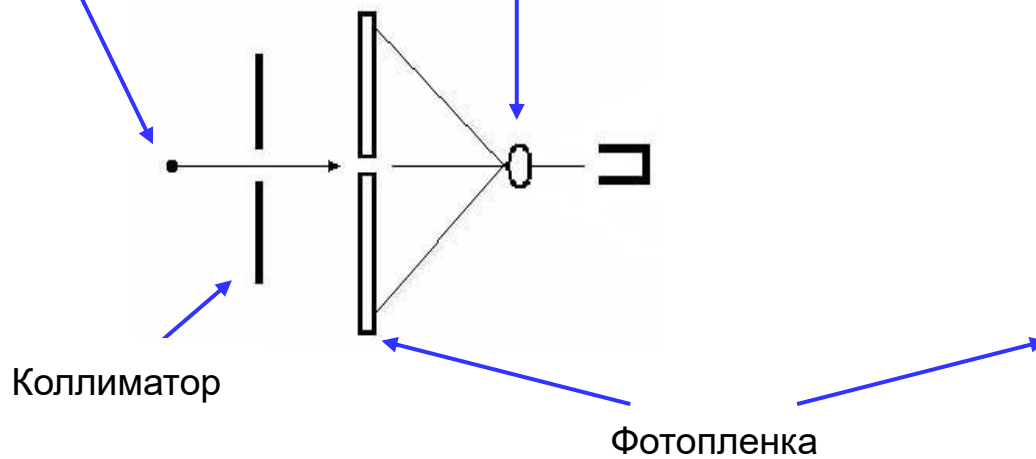
Примеры реальных Лауэграмм

На просвет



Лауэграмма

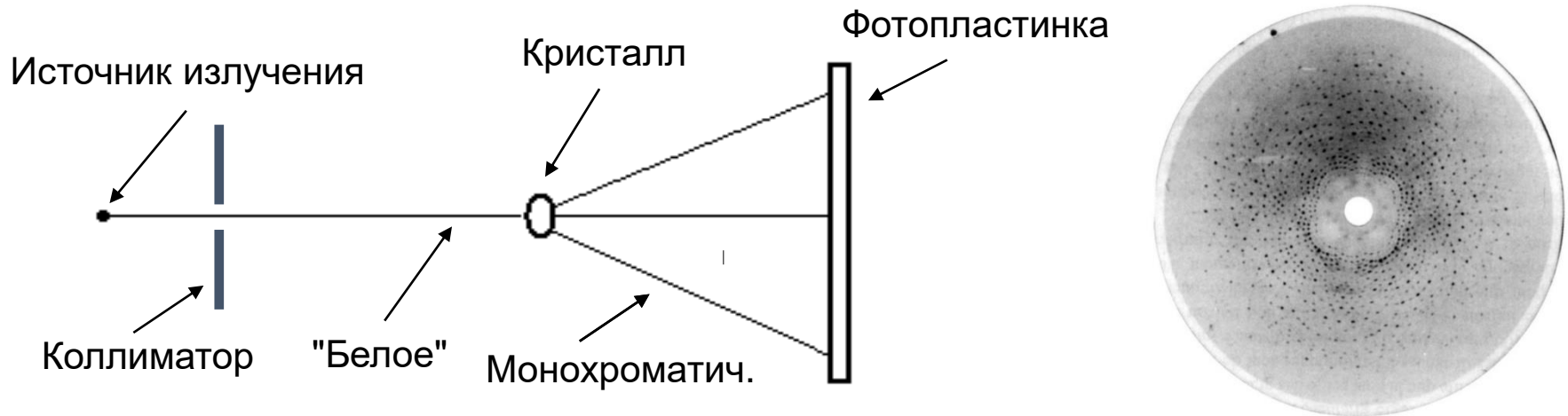
На отражение



Обратная
Лауэграмма – Эпиграмма

2.1. Метод Лауэ, эксперимент Фридриха и Книппинга

Источники информации в методе Лауэ



1. Геометрия дифракционной картины
2. Интенсивности дифракционных пятен – рефлексов
3. Тонкая структура дифракционных рефлексов и диффузного рассеяния

➔ Об элементарной ячейке кристалла: параметрах $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$; элементах симметрии решетки.

➔ Об объемной плотности распределения электронов в кристалле:

$$\rho(\mathbf{r}) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} \Phi(\mathbf{H}) e^{-2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}} dV_{\mathbf{H}}.$$

➔ О реальной структуре кристалла – дефектах, нарушениях дальнего порядка в расположении атомов в кристалле.

2.1. Метод Лауэ, эксперимент Фридриха и Книппинга Открытие дифракции рентгеновских лучей (1912 г.)



Макс Феликс Теодор фон Лауэ

(09.10.1879–24.04.1960)

Немецкий физик-теоретик

**Нобелевская премия по физике
(1914 г.)**

**«За открытие дифракции
рентгеновских лучей на кристаллах».**

Через 2 года после открытия!

На момент открытия (1912 г.) – 33 года,
сотрудник лаборатории А.И.В. Зоммерфельда
(1868-1951) в Институте теоретической
физики Мюнхенского университета.

2.2. Метод Генри и Лоуренса Брэггов

Июнь и июль 1912 г. – статьи Лауэ, Фридриха и Книппинга – теория Лауэ.

Осень 1912 г. – доклад Лоуренса Брэгга (в 22 года) в Кембриджском философском обществе (публикация – февраль 1913 г.).

Изложена более простая, чем у Лауэ, теория дифракции рентгеновских лучей. Показано, что поток монохроматического рентгеновского излучения, падающий на параллельные атомные плоскости кристалла с межплоскостным расстоянием d под углом скольжения ϑ , будет испытывать сильное отражение, если разность хода отраженных от плоскостей волн равна целому числу длин волн:

$$2d \sin \vartheta = n\lambda.$$

Февраль 1913 г. – статья Георгия (Юрия) Викторовича Вульфа "О рентгенограммах кристаллов".

Рассматривая отражение монохроматического рентгеновского излучения от узловых рядов и плоскостей кристалла, Г.В. Вульф устанавливает правила для определения интерференционных максимумов рентгенограмм. В частности, приходит к уравнению Лоуренса Брэгга.

В англоязычной литературе – "**Bragg law (equation)**".

В русскоязычной литературе – "**закон (уравнение) Брэгга-Вульфа**".

2.2. Метод Генри и Лоуренса Брэггов



Уильям Генри Брэгг и Уильям Лоуренс Брэгг
(02.07.1862-12.03.1942) (31.03.1890-01.07.1971)
(отец и сын)

Английские физики

Нобелевская премия по физике 1915 г.

"За заслуги в исследовании структуры кристаллов с помощью рентгеновских лучей".

В 1912 г. Генри Брэгг (50 лет) – профессор физики в университете Лидса (изобрел рентгеновский спектрометр), Лоуренс Брэгг (22 года) – студент-исследователь в Кембридже (создал теорию дифракции рентгеновских лучей).

2.2. Метод Генри и Лоуренса Брэггов



**Георгий (Юрий) Викторович
Вульф**

(2.06.1863-25.12.1925)

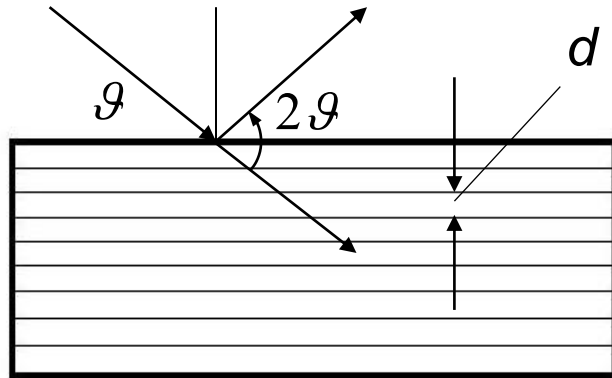
**Русский кристаллограф,
член-корреспондент РАН (1921)**

**В 1913 открыл закон
интерференции (дифракции)
рентгеновских лучей, отражённых
от узловых рядов и плоскостей
кристалла.**

С 1907 г. – приват-доцент, с 1918 г. –
профессор Московского университета.

2.2. Метод Генри и Лоуренса Брэггов

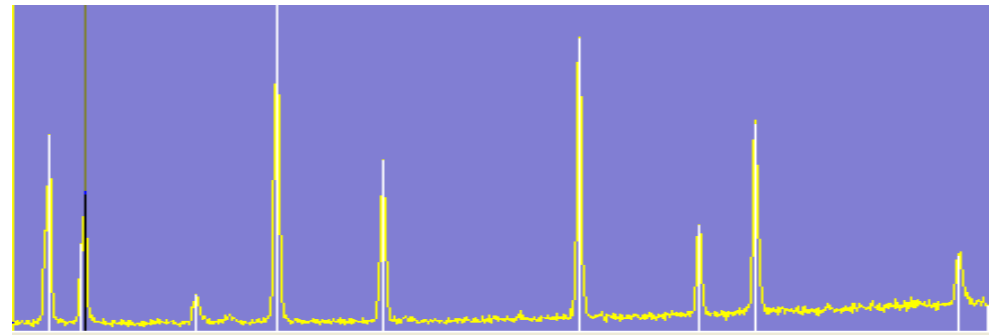
Уравнение Брэгга-Вульфа



$$2d \sin \vartheta = n\lambda$$

2ϑ – угол рассеяния (дифракции),
 d – расстояние между атомными (узловыми) плоскостями,
 n – целое число.

$$\sin \vartheta = n \frac{\lambda}{2d}$$



Дифрактограмма – $I(2\vartheta)$

Для кубической системы

$$\frac{1}{d} = \frac{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{a}$$

h, k, l – индексы Миллера семейства параллельных узловых плоскостей,
 a – параметр элементарной ячейки,
 d – межплоскостное расстояние.

2.2. Метод Генри и Лоуренса Брэггов

Рентгеновская аппаратура



Empyrean
(Malvern PANalytical)



Ultima IV
(Rigaku)



ДРОН-8Т
(АО «ИЦ «Буревестник»")

Универсальные рентгеновские дифрактометры для анализа порошков, тонких пленок, наноматериалов и твердых тел

2.2. Метод Генри и Лоуренса Брэггов

Рентгеновская аппаратура



СУР-01 "Реном"
(ЗАО "НТЦ
Экспертцентр")



КОЛИБРИ
(АО «ИЦ
«Буревестник»")



Aeris Research (Malvern PANalytical)



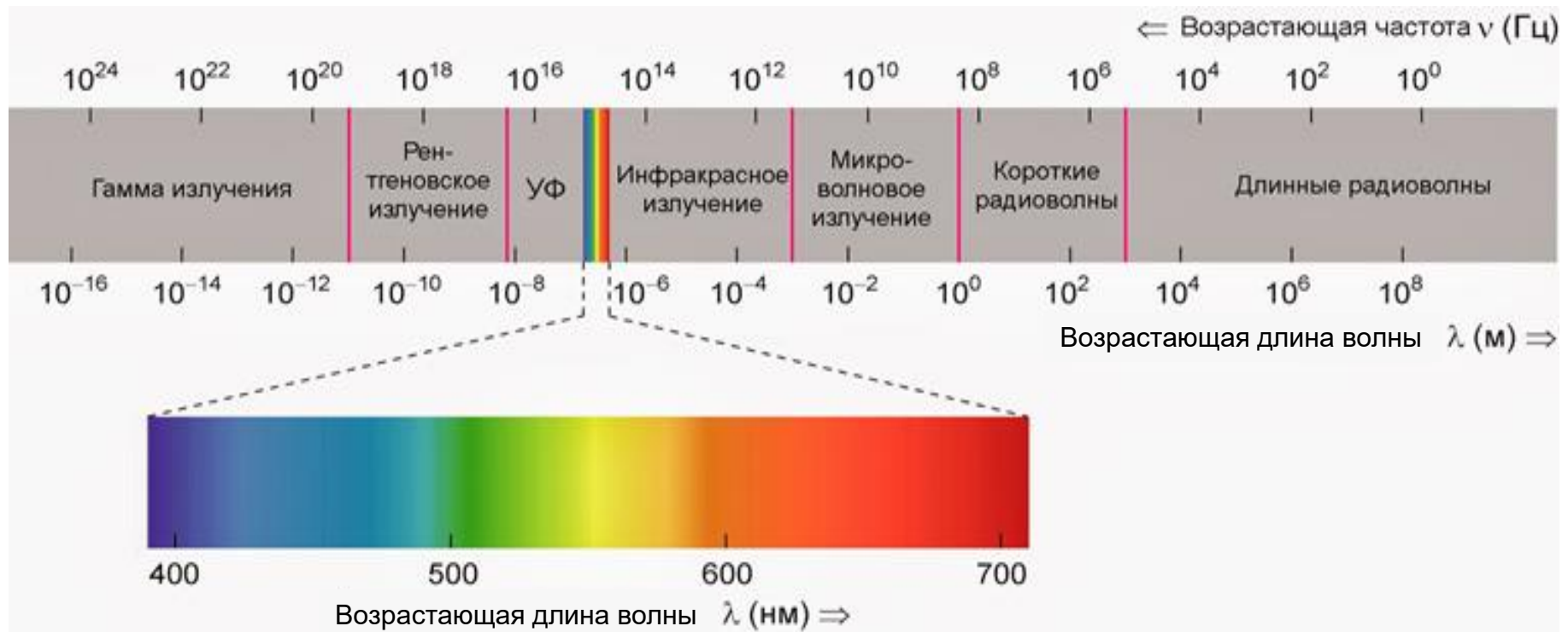
MiniFlex-600 (Rigaku)

Настольные рентгеновские дифрактометры, предназначенный для проведения качественного и количественного фазового анализа поликристаллических материалов.

§3. Рентгеновское излучение

Рентгеновское излучение (X-лучи) – коротковолновые электромагнитные волны в спектральной области между ультрафиолетовым излучением и гамма-излучением в пределах длин волн от $\sim 10^{-2} \text{ \AA}$ до $\sim 10^3 \text{ \AA}$, с энергией фотонов от $\sim 10 \text{ эВ}$ до $\sim 1 \text{ МэВ}$ ($1 \text{ эВ} \cong 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$).

$$(\lambda \sim 1 \text{ \AA} \Rightarrow T = \lambda/c \sim 3 \cdot 10^{-19} \text{ с}, \nu = c/\lambda \sim 3 \cdot 10^{18} \text{ с}^{-1}, E_\gamma = h\nu/1\text{э-В} \sim 12 \text{ кэВ})$$



Шкала электромагнитных волн

§3. Рентгеновское излучение

3.1. Рентгеновская трубка

Источником рентгеновских лучей **обычно** являются рентгеновские трубки, представляющие собой двухэлектродные электровакуумные приборы.

Рентгеновские лучи возникают при бомбардировке анода быстрыми электронами.

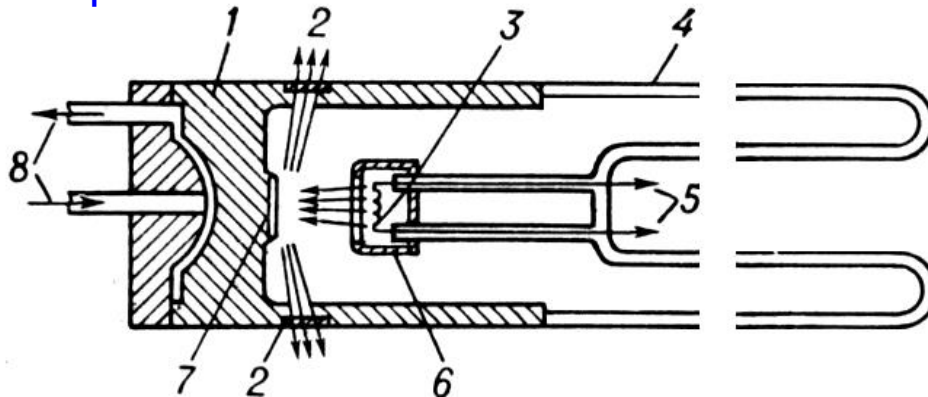


Схема рентгеновской трубки:

- 1 – металлический стакан анода (заземляется);
- 2 – бериллиевые вакуумно-плотные окна;
- 3 – термоэмиссионный катод (вольфрамовая нить);
- 4 – стеклянная колба (давление $P < 10^{-9}$ мбар*) $\cong 10^{-12}$ атм);
- 5 – выводы катода с напряжением накала и высоким напряжением;
- 6 – электростатическая система фокусировки электронов;
- 7 – анод (Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Mo, Rh или Ag);
- 8 – патрубки для подсоединения системы водяного охлаждения.

*) 1 бар = 10^5 Па \cong 0.987 атм. \cong 750 мм рт. ст. (торр).

Основные характеристики трубки:

- ускоряющее напряжение 1 – 500 кВ,
- электронный ток (0.01 мА – 1 А),
- мощность (2 Вт – 60 кВт),
- удельная мощность, рассеиваемая анодом ($10 - 10^4$ Вт/мм²).

Рентгеновские трубки различаются по:

- материалу анода,
- мощности,
- форме и размерам области излучения анода (фокуса),
- способу получения пучка электронов и его фокусировки,
- степени вакуумирования,
- способу охлаждения анода.

§3. Рентгеновское излучение

3.1. Рентгеновская трубка

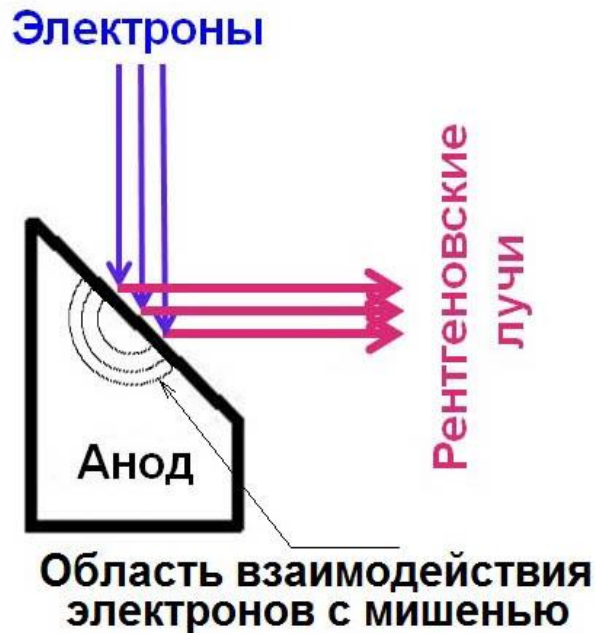


**Внешний вид
современных рентгеновских трубок**

§3. Рентгеновское излучение

3.1. Рентгеновская трубка

КПД рентгеновской трубки



$$\eta \equiv E_{\text{X-ray}}/E_{\text{electrons}} \cong 1.1 \cdot 10^{-6} ZU \sim (0.1 - 3\%),$$

где Z – атомный номер вещества анода,
 U (кВ) – ускоряющее напряжение.

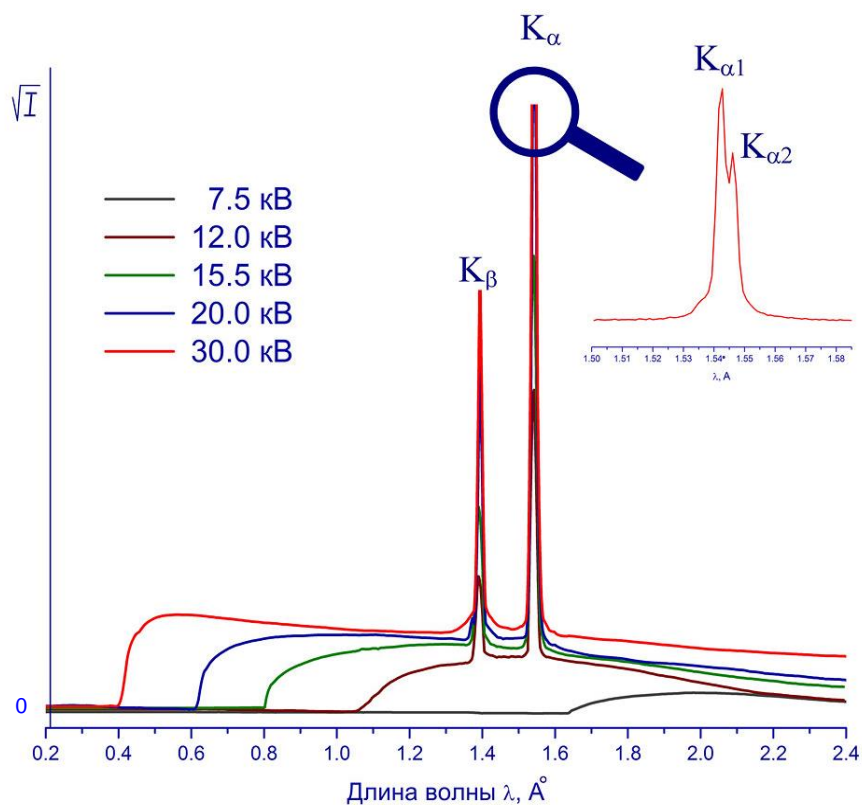
Cu (медь) – анод: $U = 30$ кВ $\Rightarrow \eta \cong 0,1\%$.

W (вольфрам) – анод: $U = 100$ кВ $\Rightarrow \eta \cong 0,8\%$.

3.2. Спектр рентгеновского излучения

Спектр рентгеновского излучения состоит из двух парциальных спектров:

- **тормозного** (непрерывного, сплошного, “белого”) спектра излучения с широкой полосой различных длин волн,
- **характеристического** (линейчатого) спектра излучения, состоящего из отдельных узких линий определенных длин волн.



Спектр рентгеновской трубки с медным анодом при разных ускоряющих напряжениях

Особенности тормозного спектра определяются в основном **режимом работы** (ускоряющим напряжением и силой тока) и **конструктивными особенностями** (материалом и толщиной окна) трубки.

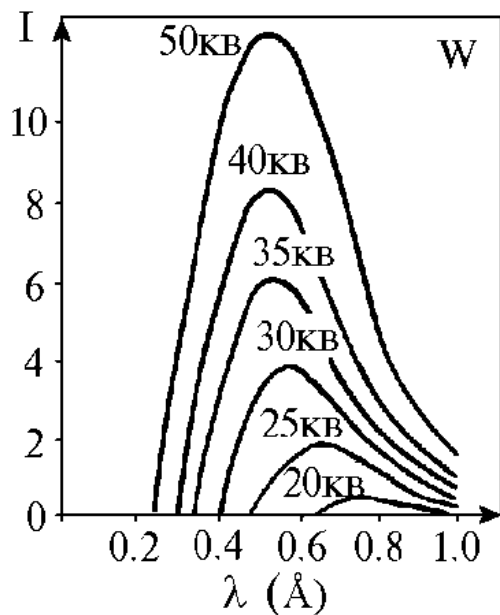
Длины волн линий характеристического спектра зависят только от **материала анода** рентгеновской трубки.

При низком напряжении существует только тормозной спектр.

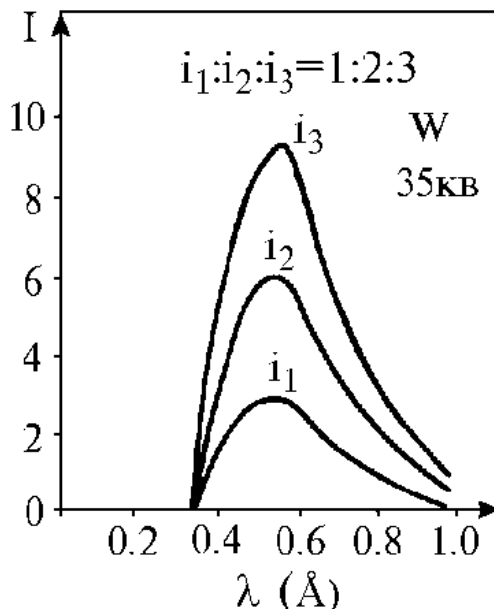
При превышении порогового значения – напряжения возбуждения $U_{\text{возб.}}$, определяемого материалом анода, к тормозному спектру добавляется характеристический спектр излучения.

3.2. Спектр рентгеновского излучения

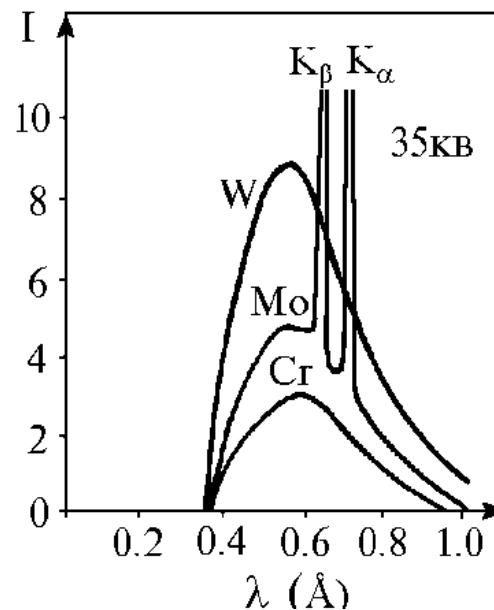
Изменения рентгеновского спектра



С ростом ускоряющего напряжения



С ростом силы тока



При изменении материала анода

Интенсивности составляющих рентгеновского спектра

$$I_{\text{торм.}} \propto i \cdot Z \cdot U^2, \quad I_{\text{хар.}} \propto i (U - U_{\text{возб.}})^n, \quad n \approx 1,6 \div 2$$

i – сила электронного тока, Z – атомный номер вещества анода, U – ускоряющее напряжение, $U_{\text{возб.}}$ – напряжение возбуждения.

3.3. Свойства тормозного излучения

Тормозное рентгеновское излучение – это электромагнитное излучение электрона при его торможении в электростатическом поле ядра и электронов атома.

Интенсивность излучения тем больше, чем больше напряжение U , сила тока i и атомный номер Z вещества анода ($I_{\text{торм.}} \propto i \cdot Z \cdot U^2$).

При падении электрона с энергией eU на анод, часть его энергии излучается в виде фотона с энергией $\hbar\omega$, а часть A передается атомам вещества анода:

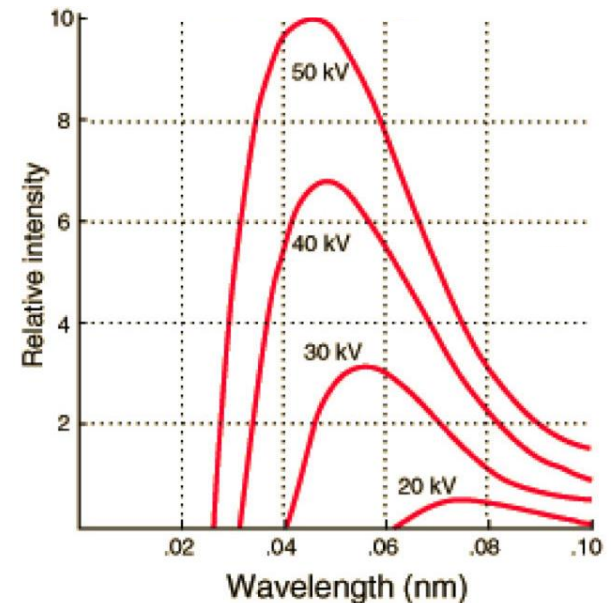
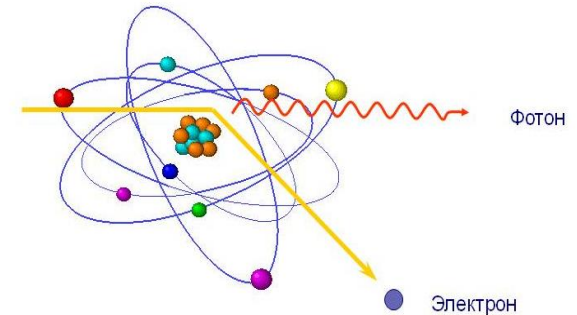
$$eU = \hbar\omega + A \text{ (уравнение Эйнштейна).}$$

Коротковолновая граница λ_0 тормозного спектра (при $A = 0$ и $eU_0 = \hbar\omega_0$) (**граница Дуана-Ханта**):

$$\lambda_0 (\text{\AA}) = cT = \frac{c}{\nu_0} = \frac{2\pi c}{\omega_0} = \frac{2\pi\hbar c}{\hbar\omega_0} = \frac{2\pi\hbar c}{eU_0} \cong \frac{12.35}{U_0(\text{кВ})}.$$

Распределение энергии по спектру имеет максимум при длине волны $\lambda_{\text{max}} \cong (3/2)\lambda_0$.

В сторону длинных волн интенсивность асимптотически стремится к нулю (ограничено поглощением окном трубки).



Распределение интенсивности $I(\lambda)$ тормозного излучения при различных напряжениях U на рентгеновской трубке

3.4. Свойства характеристического излучения

При превышении ускоряющим напряжением трубки U порогового значения ($U_{\text{возб.}}$) происходит внутренняя ионизация атома, и на фоне тормозного излучения возникает линейчатое **характеристическое рентгеновское излучение**, обусловленное электронными переходами во внутренних оболочках атомов.

Ширина линии характеристического спектра рентгеновского излучения равна сумме ширин верхнего и нижнего уровней атома (~ 1 эВ). Полная ширина уровня определяется радиационными и безрадиационными (эффект Оже) переходами.

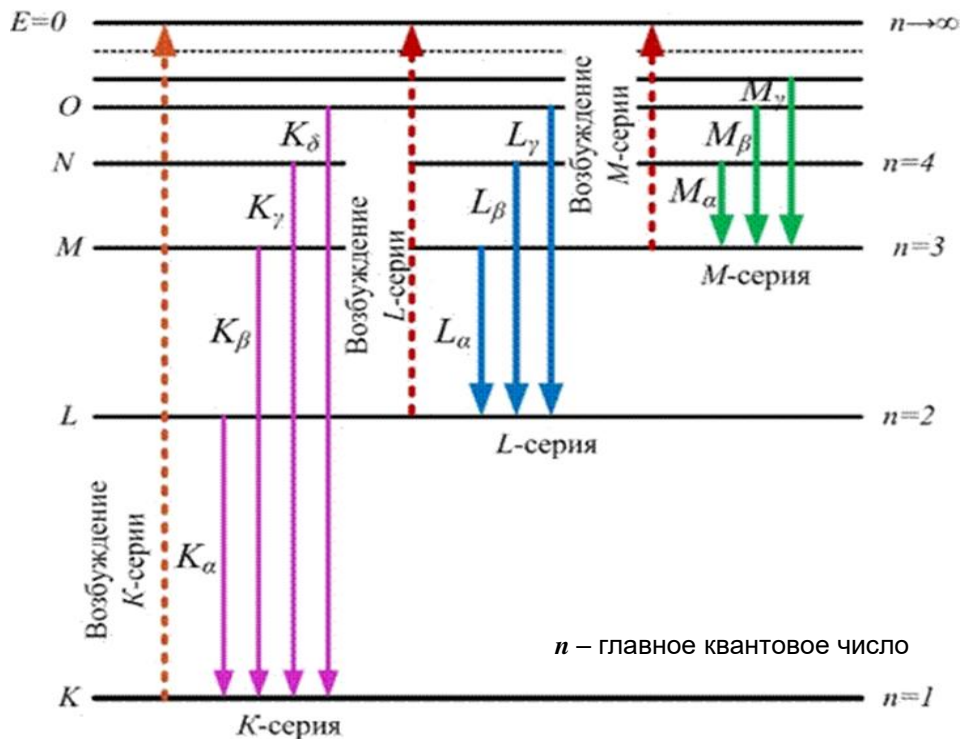
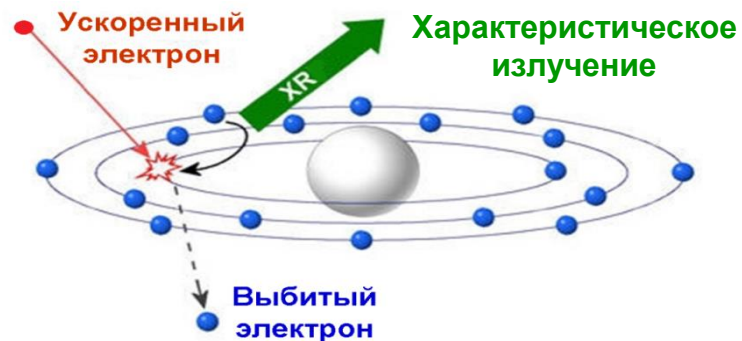


Схема возникновения характеристического рентгеновского излучения



Спектр характеристического излучения представляется в виде K-, L-, M-, ... серий линий. Серии определяются переходами электронов с более удаленных от ядра электронных оболочек (слоев) на K-, L-, M-, ... оболочку (слой).

Линии характеристического излучения расположены в спектре в соответствии с **законом Мозли**.

3.4. Свойства характеристического излучения

Закон Мозли (1913 г.) – экспериментально установленная зависимость частоты ν (длины волны λ) спектральной линии характеристического рентгеновского излучения от атомного номера Z излучающего элемента (СГС):

В настоящее время в более общем виде:

$$\nu = RcZ_{\text{eff}}^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

Здесь:

$$R = \frac{me^4}{4\pi c \hbar^3} \cong 1.097 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1} \text{ – постоянная}$$

Ридберга,

m, e – масса и заряд электрона,

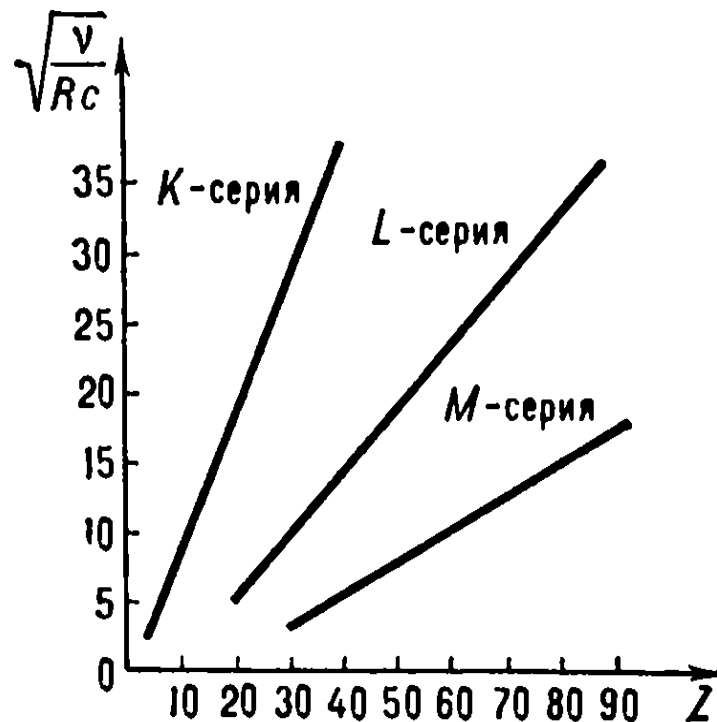
c – скорость света,

$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$ – постоянная Дирака,

$n, m = 1, 2, 3, \dots$ – главные квантовые числа
($n < m$, им соответствуют К-, L-, M-, ...
электронные оболочки (слои)),

$Z_{\text{eff}} = Z - C_n$ – эффективный заряд ядра,

C_n – постоянная экранирования ($n \uparrow \rightarrow C_n \uparrow$),



Закон Мозли для характеристических линий $K\alpha_1, L\alpha_1, M\alpha_1$.

Характеристический рентгеновский спектр атома не зависит от химического соединения, в которое этот атом входит !!! (элементный анализ)

3.4. Свойства характеристического излучения



Генри Гвин Джефрис Мозли
(23.09.1887–1008.1915)
Английский физик

В 1913 экспериментально установил закон Мозли:

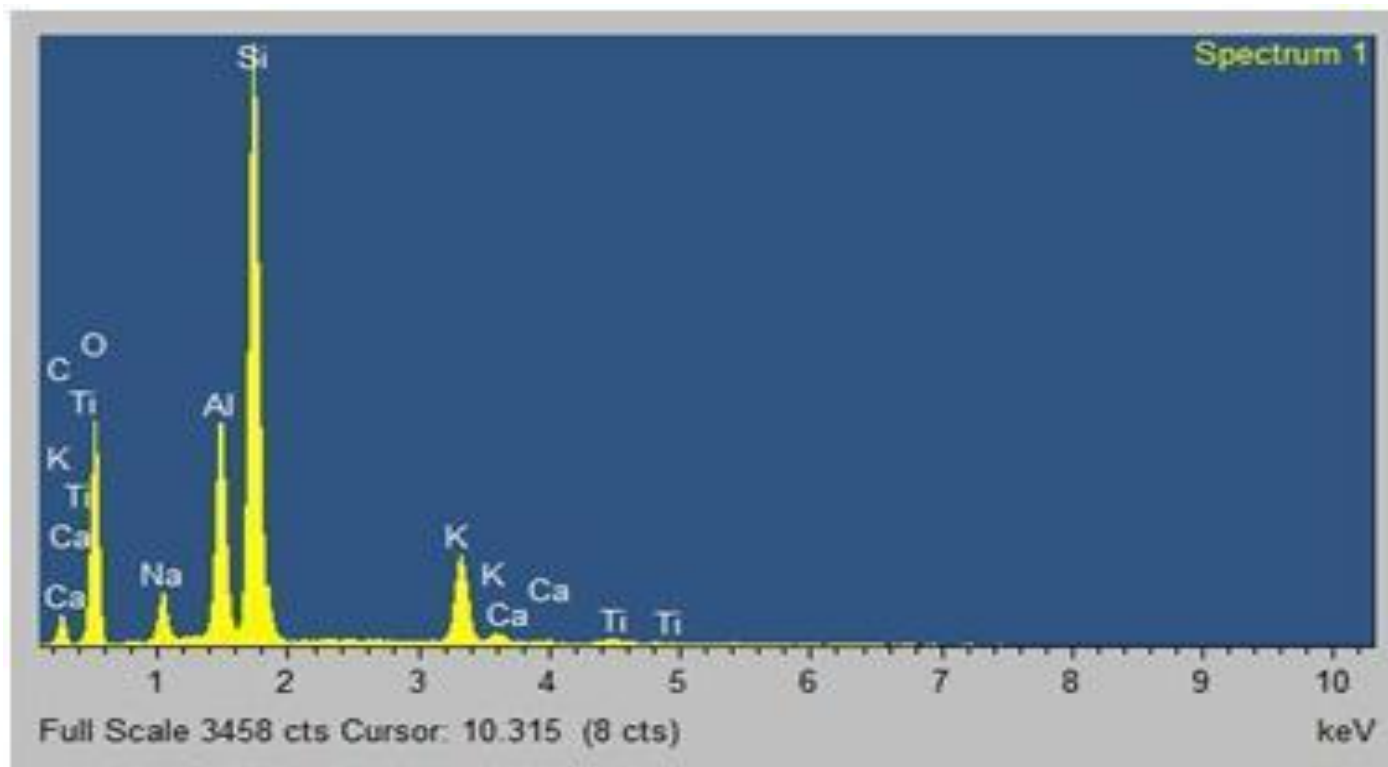
$$\sqrt{\nu} = A(Z - b).$$

В 1910–1914 работал в лаборатории Э. Резерфорда в Манчестерском университете.

Погиб (в 28 лет) на фронте в начале Первой мировой войны в Турции, будучи офицером связи в звании капитана.

3.4. Свойства характеристического излучения

Каждый элемент вещества анода дает определенный, только ему присущий спектр характеристического излучения атома, независимо от его вхождения в химическое соединение.



Спектр характеристического излучения, полученный на СУР-01 "Реном"

Рентгеноспектральный метод анализа атомного состава вещества основан на индивидуальности характеристического излучения атома и зависимости интенсивности этого излучения от концентрации элемента в образце (рентгеновский качественный и количественный элементный анализ).

3.4. Свойства характеристического излучения

Характеристический спектр обладает тонкой, мультиплетной, структурой, обусловленной зависимостью энергии электронов не только от главного квантового числа n , но и от орбитального L и полного J моментов, возникающей из-за корреляционного электростатического взаимодействия электронов в атоме.

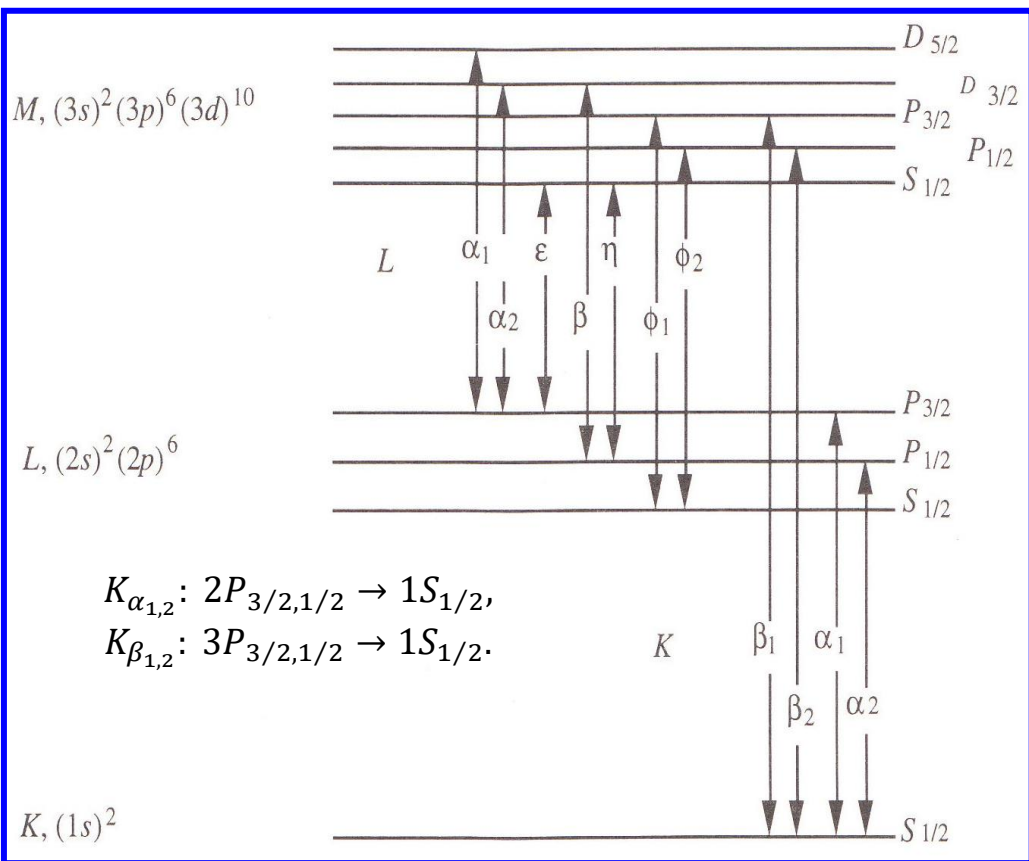


Схема возникновения тонкой структуры рентгеновского характеристического излучения

Вероятность перехода тем больше, чем ближе выше расположенная оболочка (слой), и чем меньше мультипольность (угловой момент) излучения.

Схема переходов между рентгеновскими уровнями К-, L- и М-оболочек ($n = 1, 2, 3$) атома, допускаемые правилами отбора.

Для дипольных переходов:

$$\Delta L = \pm 1, \quad \Delta J = 0, \pm 1;$$

L, J – квантовые числа орбитального и полного моментов атома.

Символ терма (τ, L, S, J):

$$nL_J \text{ или } {}^{2S+1}L_J,$$

где τ – электронная конфигурация.

3.4. Свойства характеристического излучения

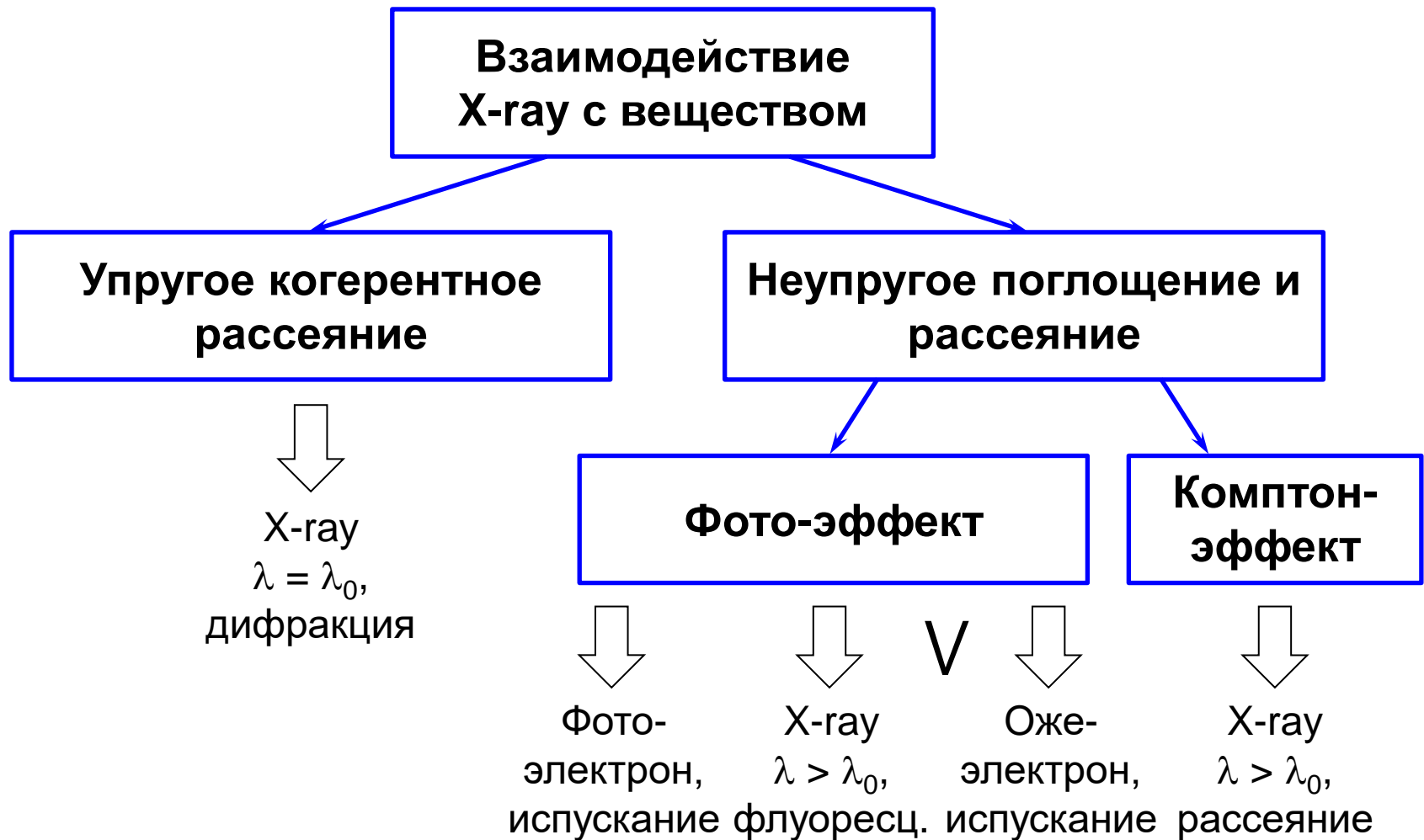
Длины волн K-серий элементов, используемых в качестве анодов в рентгеноструктурном анализе

Антикатод (Анод)		Длина волны λ , Å			Порог возбуждения $U_{\text{возб.}}$, В
Элементы	Атомный номер, символ	$K_{\alpha 1}$	$K_{\alpha 2}$	$K_{\beta 1-2}$	
Хром	24 Cr	2,28962	2,29351	2,08480	5950
Железо	26 Fe	1,93597	1,93991	1,75653	7150
Кобальт	27 Co	1,78892	1,79278	1,62075	7700
Никель	28 Ni	1,65784	1,66169	1,50010	8300
Медь	29 Cu	1,54050	1,54433	1,39229	9000
Молибден	42 Mo	0,70926	0,71354	0,63244	20000
Родий	45 Rh	0,61300	0,61720	0,5456	23400
Палладий	46 Pd	0,58050	0,58540	0,5205	24500
Серебро	47 Ag	0,55936	0,56377	0,49722	25600
Вольфрам	74 W	0,20899	0,21381	0,1844	69300

Линии K-серии W (вольфрама) не используются в качестве монохроматического излучения, используются L-линии с $\lambda(L_{\alpha 1}) = 1.47641 \text{ Å}$ и $\lambda(L_{\alpha 2}) = 1.48745 \text{ Å}$ ($U_{\text{возб.}} = 8400 \text{ В}$).

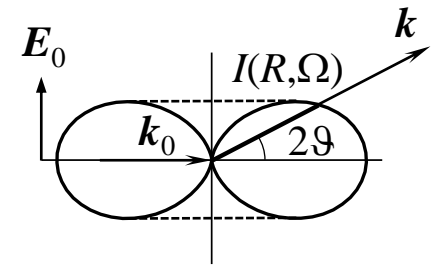
§4. Взаимодействие рентгеновского излучения с веществом

Классификация



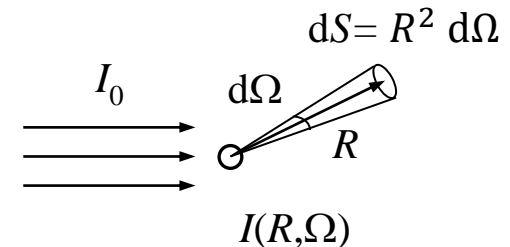
4.1. Индикатриса рассеяния, сечения и коэффициенты рассеяния

Индикатриса рассеяния – пространственная диаграмма зависимости интенсивности $I(R, \Omega)$ рассеянного излучения от телесного угла Ω (направления) рассеяния на данном расстоянии R от рассеивателя.



(Полное) сечение рассеяния (рассеивателем) σ – отношение полного потока энергии рассеянного излучения J к интенсивности падающего излучения:

$$\sigma \equiv \frac{J}{I_0} = \frac{\oiint I(R, \Omega) dS}{I_0} = \int_0^{4\pi} \frac{I(R, \Omega) R^2}{I_0} d\Omega = \int_0^{4\pi} \frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} d\Omega;$$



$$[\sigma] = \frac{\text{эрг/с}}{\text{эрг/с/см}^2} = \text{см}^2 \quad (1 \text{ барн} \equiv 1 \text{ б} = 10^{-24} \text{ см}^2).$$

Дифференциальное сечение рассеяния $\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega}$ – отношение потока энергии излучения, рассеянного в единицу телесного угла, $dJ/d\Omega$, к интенсивности падающего излучения I_0 (плотность полного сечения рассеяния по телесному углу):

$$\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} \equiv \frac{dJ(\Omega)}{d\Omega I_0} = \frac{I(R, \Omega) dS}{d\Omega I_0} = \frac{I(R, \Omega) R^2}{I_0}, \quad \left[\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} \right] = \text{см}^2/\text{ср}.$$

4.1. Индикатриса рассеяния, сечения и коэффициенты рассеяния

Коэффициент рассеяния (по энергии) – отношение потока энергии рассеянного телом излучения J к потоку энергии падающего на него излучения $J_0(S)$ с поперечным сечением площадью S :

$$\underline{k_s} \equiv \frac{J}{J_0(S)} = \frac{J}{I_0 S} = \frac{\sigma}{S}, \quad [k_s] = 1.$$

В результате рассеяния плотность потока энергии распространяющегося в среде света уменьшается. Изменение плотности потока излучения при рассеянии света слоем dz пропорционально плотности падающего потока энергии (интенсивности) и толщине слоя:

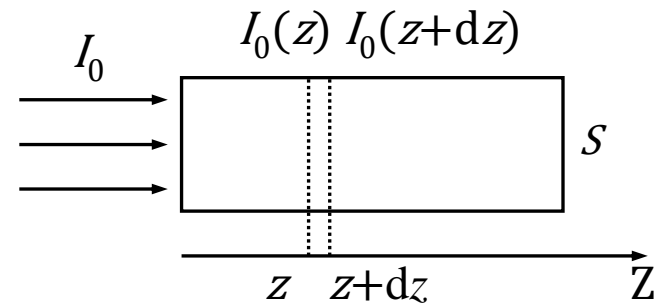
$$I_0(z+dz) - I_0(z) = dI_0 = -\alpha_s I_0(z) dz, \quad \boxed{I_0(z) = I_0(0) e^{-\alpha_s z}} \text{ – закон Бугера.}$$

Здесь α_s – **линейный коэффициент рассеяния** ($[\alpha_s] = \text{см}^{-1}$).

Пусть каждый из $N S dz$ рассеивателей (в среде с концентрацией N) в слое dz выводит из пучка поток энергии $J(z)$, тогда поток излучения, рассеянного слоем dz и площадью S , будет равен:

$$S \cdot \alpha_s I_0(z) dz = J(z) \cdot N S dz = \sigma I_0(z) \cdot N S dz,$$

$$\boxed{\alpha_s = N \sigma = N S k_s.}$$



4.2. Упругое когерентное рассеяние

Томсоновское рассеяние – упругое когерентное рассеяние электромагнитного излучения на заряженных частицах.

Рэлеевское рассеяние – упругое когерентное рассеяние электромагнитного излучения на неоднородностях с линейными размерами: $l \ll \lambda$.

Рассеяние происходит упруго (и **когерентно**) – с сохранением длины волны:

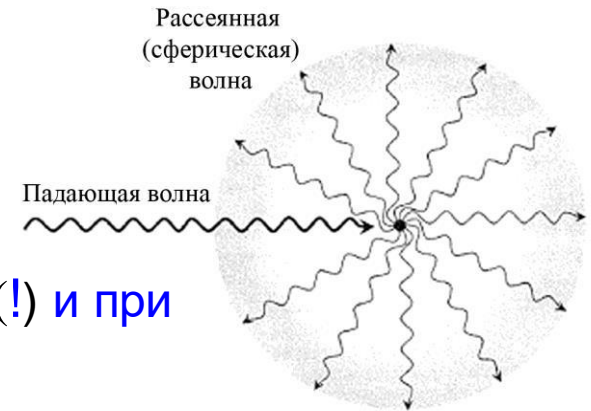
$$\lambda = \lambda_0.$$

Рассеяние происходит в основном на **электронах** ($m_{\text{nucl}} > m_p \gg m_e$):

$$\sigma_{\text{nucl}} \ll \sigma_p \ll \sigma_e.$$

Полное сечение рассеяния свободным электроном:

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \quad (\text{множитель Томсона}).$$



Интенсивность рассеянного излучения не зависит от λ (!) и при естественной поляризации равна:

$$I_e = I_0 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{1}{R^2} \cdot \frac{1 + \cos^2 2\vartheta}{2}.$$

Рэлеевское излучение электроном ($l < 10^{-8} \text{ \AA} \ll \lambda \sim 1 \text{ \AA}$) – сферич. ($R \gg l$) волна:

$$I_e \sim \frac{1}{R^2}.$$

Рассеянное излучение поляризовано (в плоскости $(\mathbf{s}, \mathbf{E}_0)$).

4.3 Фотоэффект.

Рентгеновская флюоресценция и Оже-эффект

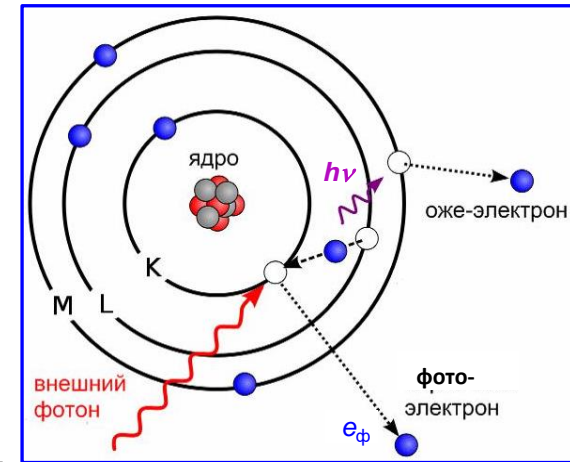
(Внешний) фотоэффект – испускание электронов веществом под действием света (рентгеновского излучения) – **фотоэлектронная эмиссия**.

Используя гипотезу световых квантов, Эйнштейн получил формулу для фотоэффекта:

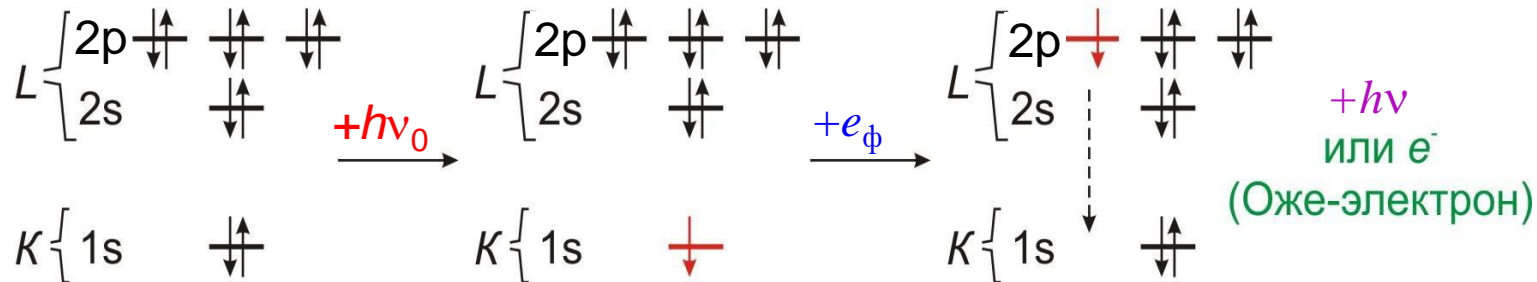
$$h\nu_0 = A + W_{\max},$$

где A – работа выхода – энергия, необходимая для удаления электрона из атома (энергия связи электрона в атоме), W_{\max} – максимальная кинетическая энергия вылетающих фото-электронов.

Красная граница фотоэффекта: $\nu_0 \geq \nu_{K,L,M,\dots}; \lambda_0 \leq \lambda_{K,L,M,\dots}$.



Взаимодействие электрона К-оболочки (слоя) с квантом рентгеновского излучения:



Фотоэффект + рентгеновская флюоресценция или Оже-электрон – один из самых вероятных процессов поглощения !

Открытие

Оже-эффекта – автоионизации возбужденного атома



Лизе Мейтнер

(17.11.1878–27.10.1968)

Австрийский физик

Исследования в области ядерной физики, ядерной химии и радиохимии.

Открытие автоионизации возбуждённого атома (1923 г.).

В её честь назван 109-й элемент табл. Менделеева – мейтнерий.



Пьер Виктор Ожé

(14.05.1899–25.12.1993)

Французский физик

Исследования в области атомной и ядерной физики, космических лучей. Открытия:

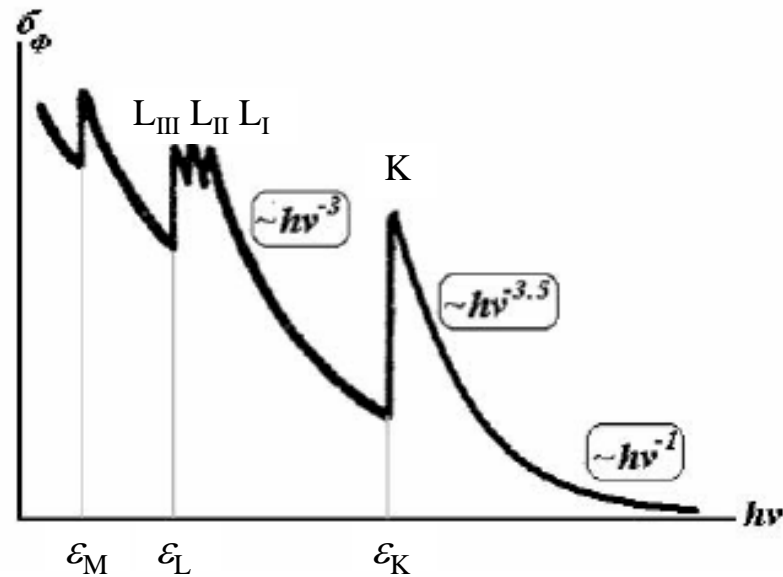
– автоионизации возбуждённого атома (1925 г.),

– широких атмосферных ливней в космических лучах (1938 г.).

4.3 Фотоэффект.

Рентгеновская флюоресценция и Оже-эффект

Зависимость сечения фотоэффекта σ_{ϕ} от энергии кванта



Край полосы поглощения – значение энергии $\epsilon \equiv E_{\gamma}$ или частоты ν (или длины волны λ) излучения, при превышении которого (или уменьшении λ) наблюдается резкое увеличение поглощения – $h\nu_{K,L,M,\dots} = E_{K,L,M,\dots}$.

Вдали от края полосы поглощения (эмпирическое соотношение):

$$\sigma_{\phi} \sim \lambda^q Z^p \sim \nu^{-q} Z^p, \quad 1 \leq q \leq 3.5, \quad 4 \leq p \leq 5.$$

Наибольшая вероятность поглощения кванта с достаточной энергией у сильно связанных электронов (K-оболочка) !!!

4.3 Фотоэффект.

Рентгеновская флюоресценция и Оже-эффект

Тонкая (мультиплетная) структура сечения фотоэффекта обусловлена мультиплетностью энергетических уровней атома, возникающей из-за корреляционного электростатического взаимодействия электронов в атоме.

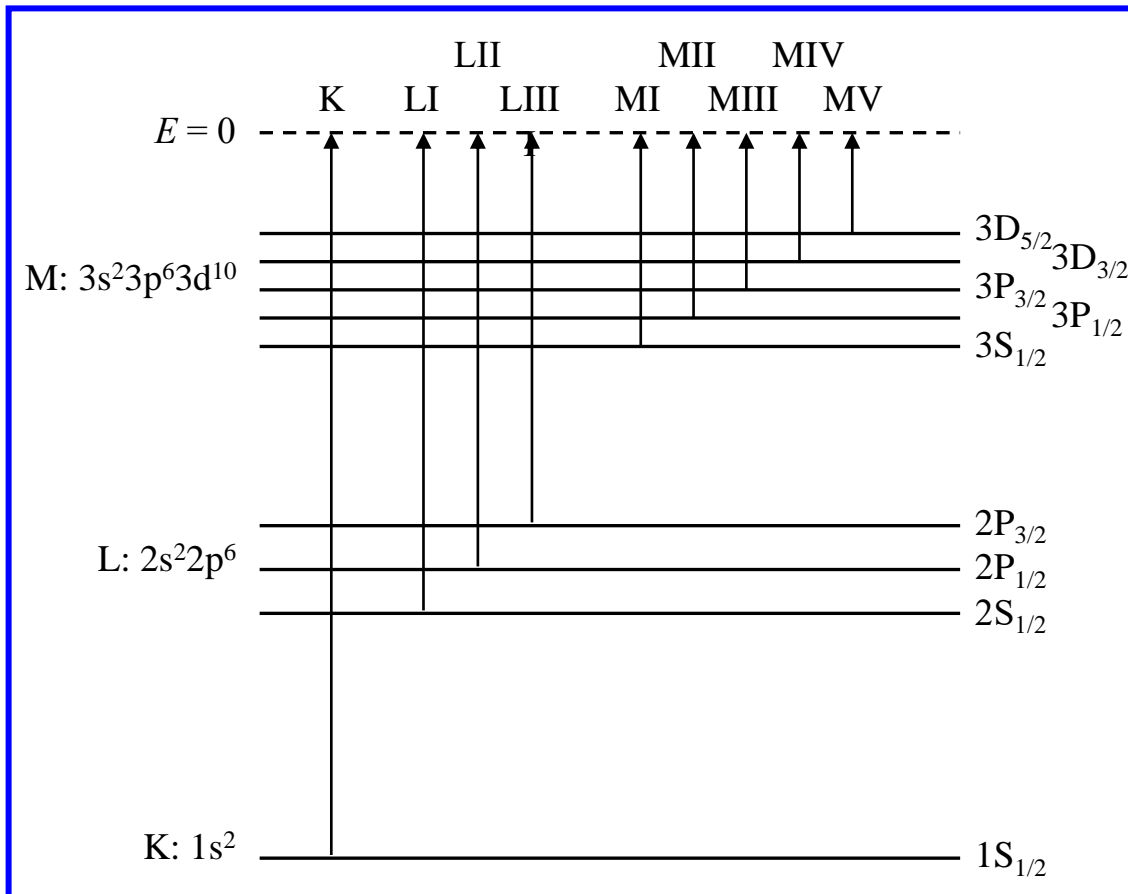


Схема возникновения тонкой структуры сечения фотоэффекта

Терм – состояние электронной структуры атома, определяющее энергетический уровень.

Терм – энергетический уровень, определяемый при данной электронной конфигурации τ орбитальным L , спиновым S и полным J моментами атома (τ ; L, S, J).

Символ мультиплета:

$$nL_J \text{ или } {}^{2S+1}L_J.$$

Мультиплет – группа рядом расположенных спектральных линий (энергетических уровней атома).

4.3 Фотоэффект.

Рентгеновская флуоресценция и Оже-эффект

Тонкая структура рентгеновского характеристического спектра (рентгеновской флуоресценции) обусловлена мультиплетной структурой энергетических уровней атома.

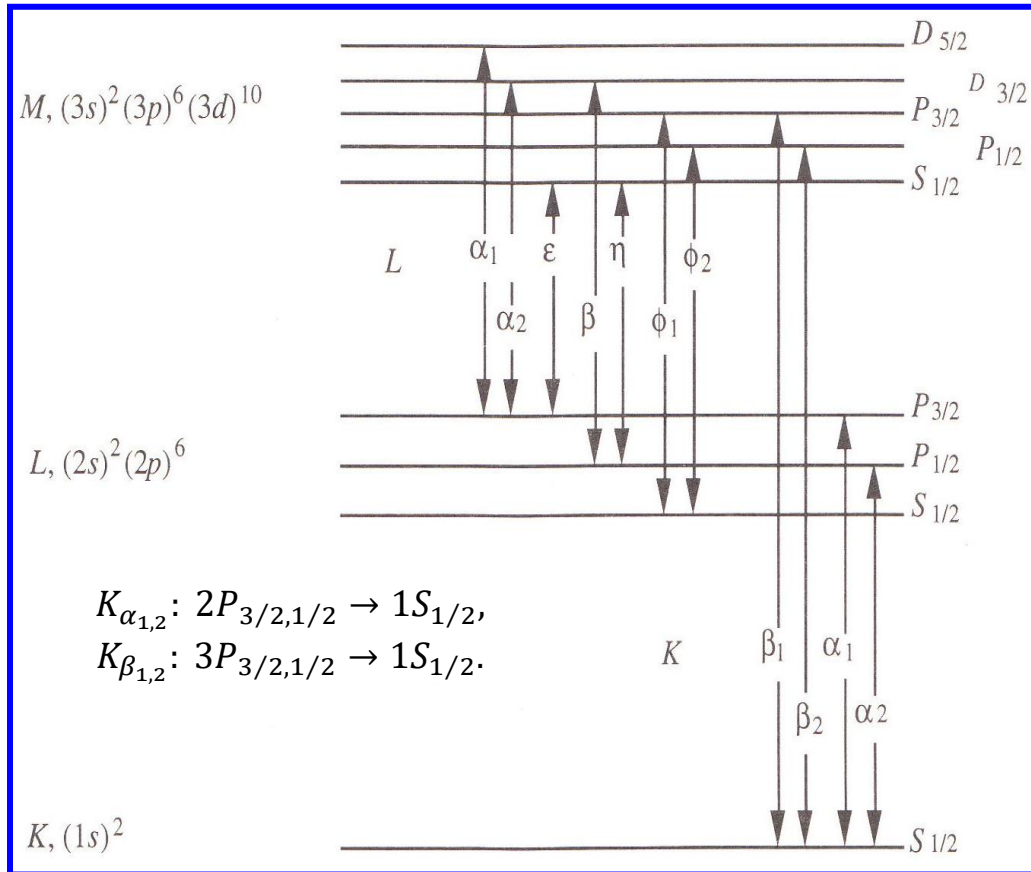


Схема возникновения тонкой структуры рентгеновского характеристического излучения (рентгеновской флуоресценции)

Вероятность перехода тем больше, чем ближе выше расположенная оболочка, и чем меньше мультипольность (угловой момент) излучения.

Схема переходов между рентгеновскими уровнями К-, L- и М-оболочек ($n = 1, 2, 3$) атома, допускаемые правилами отбора.

Для дипольных переходов:

$$\Delta L = \pm 1, \quad \Delta J = 0, \pm 1;$$

L – орбитальное квантовое число и J – квантовое число полного момента атома.

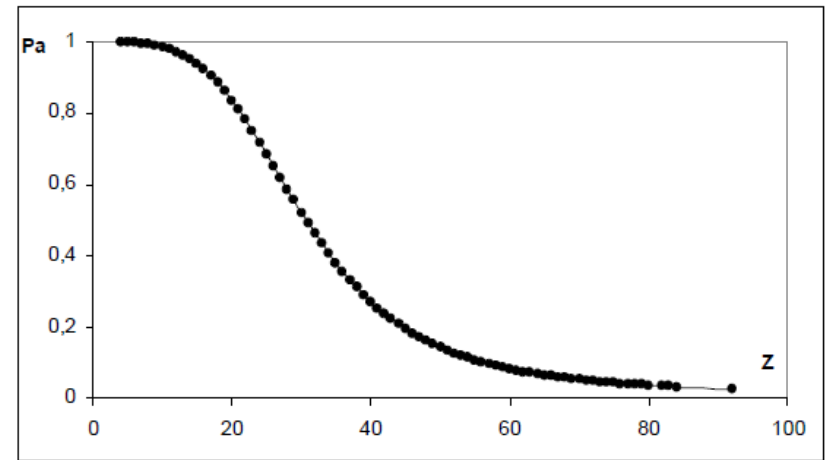
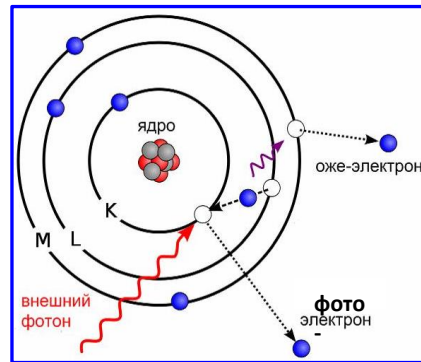
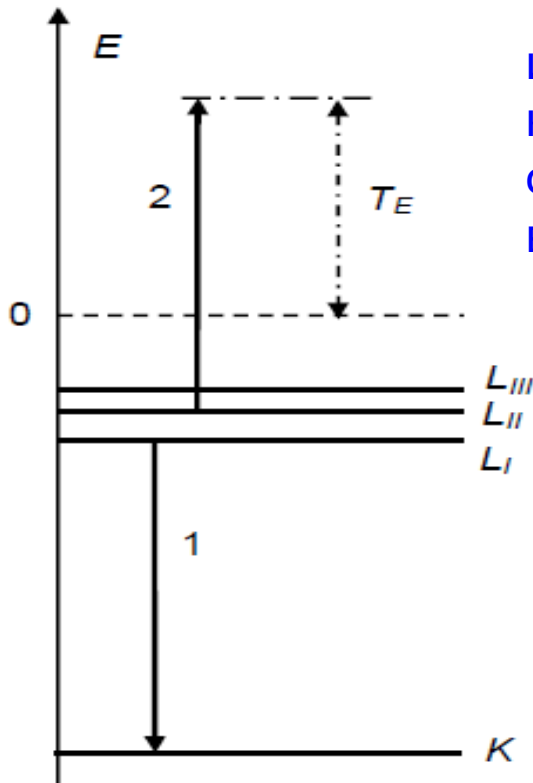
Символ термина ($\tau; L, S, J$):

$$nL_J \text{ или } 2S+1L_J.$$

4.3 Фотоэффект.

Рентгеновская флуоресценция и Оже-эффект

Эффект Оже (автоионизация возбуждённого атома) и рентгеновская флуоресценция являются конкурирующими процессами при заполнении вакансии, образовавшейся в результате фотоэффекта во внутренней электронной оболочке.



Энергетическая схема Оже-процесса KL_1L_{II} :
1 – переход электрона из L_I -подоболочки, заполнение вакансии в K-оболочке;
2 – выход электрона из L_{II} -подоболочки;
 T_E – кинетическая энергия Оже-электрона.

Зависимость вероятности эффекта Оже KLL от атомного номера химического элемента Z .

Вероятность эффекта Оже велика, а рентгеновской флуоресценции мала для легких элементов.

4.4. Комптоновское рассеяние

Явление увеличения длины рентгеновского излучения вследствие рассеяния его на почти покоящемся ($u_0/c \ll 1$) свободном (слабосвязанном) электроне.

При взаимодействии кванта рентгеновского излучения (фотона) со слабо связанным электроном ($A_{и} \ll h\nu_0$) происходит его отрыв от атома и образование рассеянного кванта. При этом часть энергии фотона $h\nu_0$ передается электрону:

$$h\nu_0 = h\nu + A_{и} + E_{к} \quad (\nu_0 > \nu).$$

Для свободного покоящегося электрона.

Законы сохранения энергии и импульса для системы фотон + электрон в релятивистском описании движения электрона:

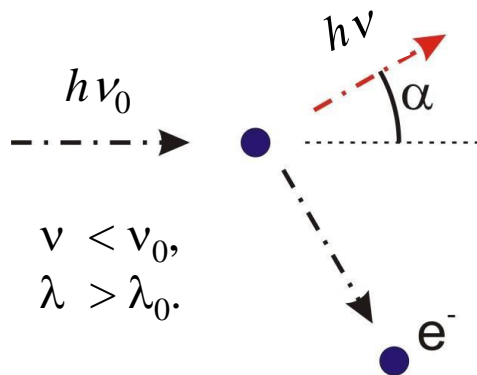
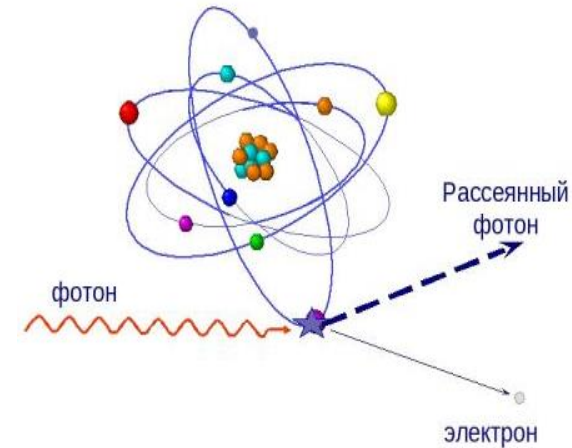
$$h\nu_0 + m_e c^2 = h\nu + \gamma m_e c^2 \quad (u_0/c \ll 1, A_{и} \ll h\nu_0),$$

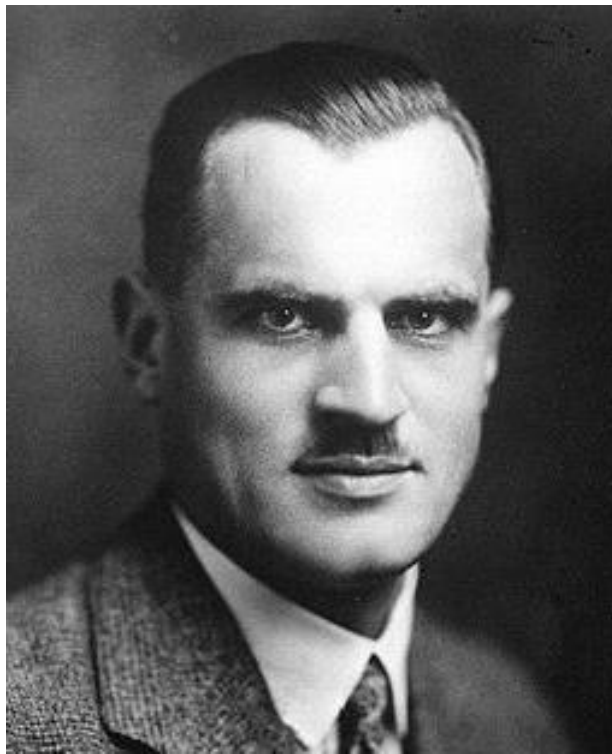
$$\frac{h\nu_0}{c} \mathbf{n}_0 = \frac{h\nu}{c} \mathbf{n} + \gamma m_e \mathbf{v}, \quad \text{где } \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \text{ — Лоренц-фактор.}$$

В результате: $\lambda = \lambda_0 + \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \alpha) = \lambda_0 + \lambda_K (1 - \cos \alpha),$

где $\lambda_K = \frac{h}{m_e c} \cong 0.024 \text{ \AA}$ — комптоновская длина волны для электрона.

Изменение длины волны не зависит от длины рассеиваемой волны λ и от материала рассеивающего тела, но зависит от направления рассеяния !!!





Артур Холли Комптон
(10.09.1892–15.03.1962)
Американский физик

**Нобелевская премия по физике (1927 г.)
«За открытие эффекта, названного его именем»**

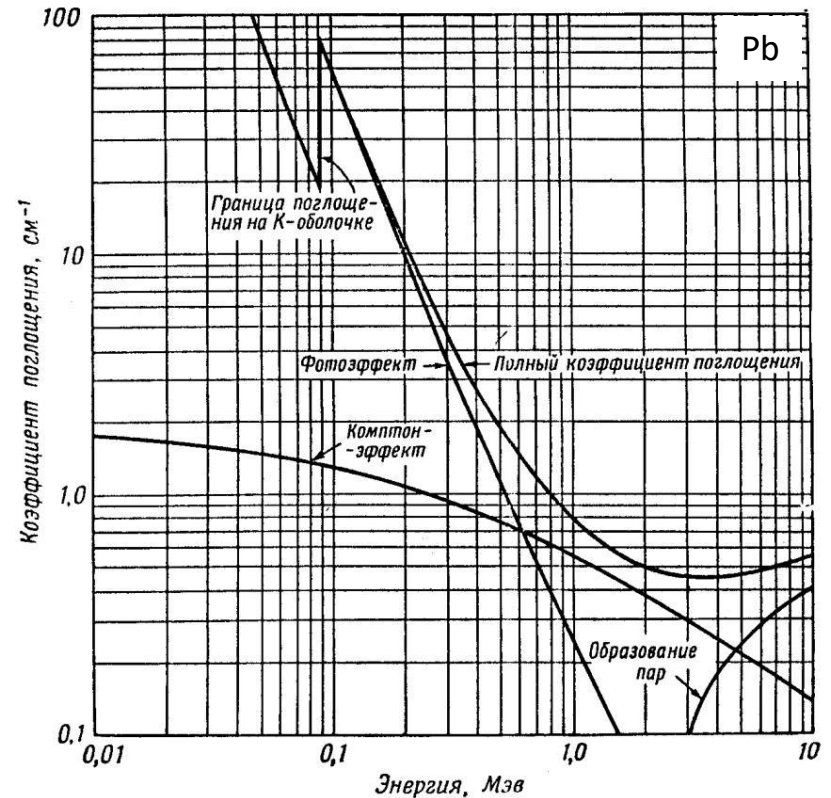
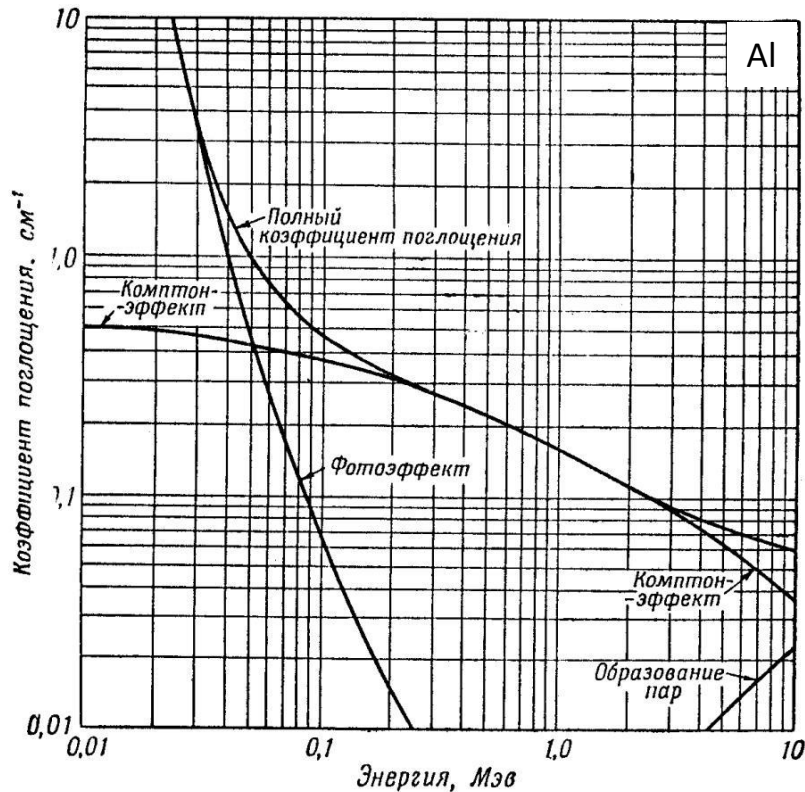
В 1922 году обнаружил и дал теоретическое обоснование эффекту изменения длины волны рентгеновского излучения при рассеянии его электронами вещества, чем доказал существование фотона.

4.4. Комptonовское рассеяние

Сечение комptonовского рассеяния излучения (и соответственно коэффициент поглощения) зависит от энергии кванта – уменьшается с увеличением энергии.

Комptonовское рассеяние играет основную роль в ослаблении интенсивности излучения при коротковолновом рентгеновском излучении.

Фотоэлектрическое поглощение (фотоэффект) наиболее существенно при длинноволновом рентгеновском излучении.



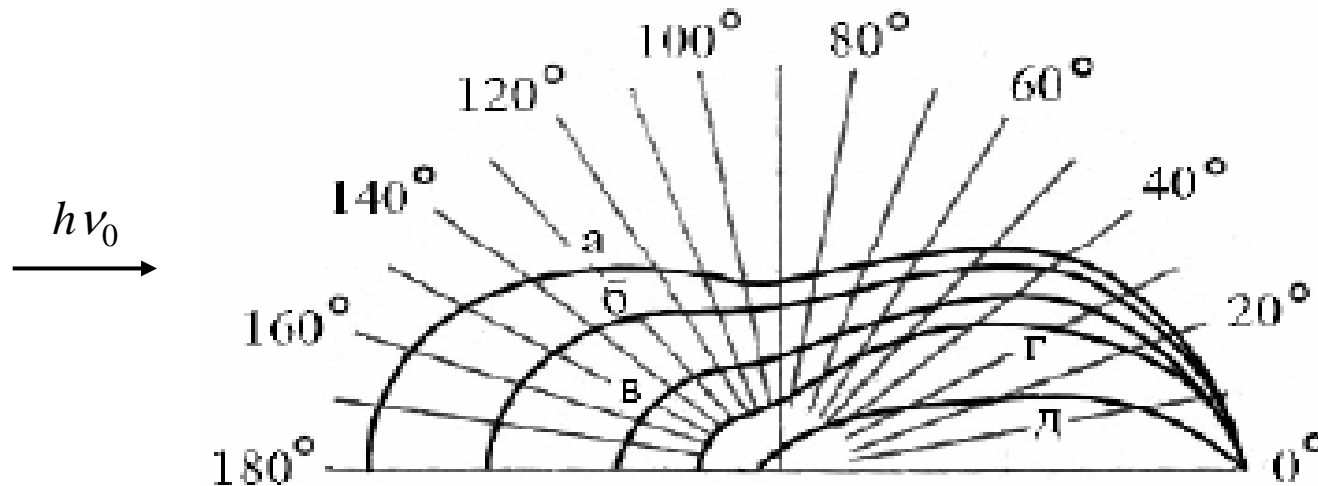
Зависимости линейных коэффициентов поглощения в Al ($Z=13$) и Pb ($Z=82$) от энергии фотонов.

4.4. Комptonовское рассеяние

Сечение неупругого (комптоновского) рассеяния практически пропорционально числу электронов в атоме. Следовательно, интенсивность неупругого рассеянного излучения растет с ростом порядкового номера Z химического элемента вещества рассеивателя ($\sim Z$).

Сечение упругого (рэлеевского) рассеяния рентгеновских лучей на атоме пропорционально квадрату атомного номера Z ($\sim Z^2$) (из-за многоволновой интерференции когерентно рассеянных лучей амплитуда пропорциональна Z).

Следовательно: $Z \uparrow \Rightarrow I^{\text{Rely}} / I^{\text{Compton}} \uparrow$.



Индикатрисы рассеяния (пространственные диаграммы зависимости интенсивности $I(R, \Omega)$) не упруго рассеянного излучения для разной длины волны λ первичного излучения:

- а) $\lambda = 0,124$ нм, б) $\lambda = 2,07 \cdot 10^{-2}$ нм, в) $\lambda = 6,2 \cdot 10^{-3}$ нм,
г) $\lambda = 2,48 \cdot 10^{-3}$ нм, д) $\lambda = 4,13 \cdot 10^{-4}$ нм.

4.5. Ослабление рентгеновского излучения

Интенсивность пучка рентгеновского излучения ослабляется за счет **поглощения** и **рассеяния** на атомах (молекулах) вещества. Закон ослабления рентгеновского излучения слоем конечной толщины x (закон Бугера):

$$I(x) = I_0 \exp(-\mu x),$$

где μ (см^{-1}) – **линейный коэффициент ослабления** зависит от вещества и длины волны рентгеновского излучения.

Закон ослабления рентгеновского излучения слоем с поверхностной плотностью массы $m_S - [m_S] = \text{г}/\text{см}^2$ ($m_S = \rho x$):

$$I(x) = I_0 \exp(-\mu_m m_S),$$

где $\mu_m = \mu x / m_S = \mu / \rho$ ($\text{см}^2/\text{г}$) – **массовый коэффициент ослабления** зависит от вещества и длины волны рентгеновского излучения (ρ – объемная плотность).

Закон ослабления рентгеновского излучения слоем с поверхностной концентрацией атомов $n_S - [n_S] = \text{см}^{-2}$ ($n_S = \rho x / (A/N_A)$):

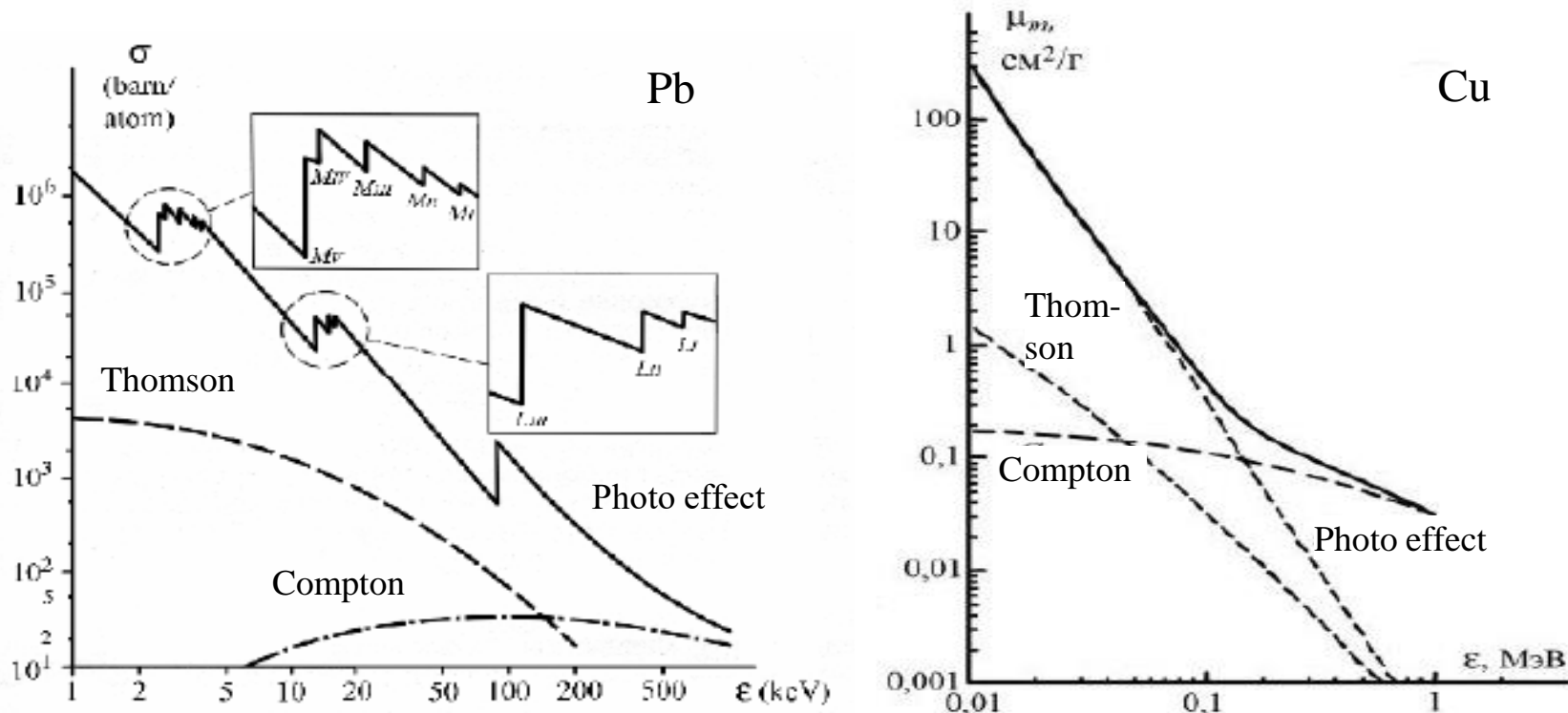
$$I(x) = I_0 \exp(-\mu_a n_S),$$

где $\mu_a = \mu_m m_S / n_S = (A/N_A) \mu_m = (A/N_A / \rho) \mu$ (см^2) – **атомный коэффициент ослабления** (A – молярная масса в-ва, $N_A = 6.023 \cdot 28$ моль $^{-1}$ – число Авогадро).

Акты поглощения и рассеяния рентгеновского излучения можно считать независимыми, поэтому можно положить атомные коэффициенты ослабления равными суммам **атомных коэффициентов поглощения** τ и **рассеяния** α :

$$\mu = \tau + \alpha, \mu_m = \tau_m + \alpha_m, \mu_a = \tau_a + \alpha_a.$$

4.5. Ослабление рентгеновского излучения



Зависимости от энергии фотонов ε сечения процессов взаимодействия рентгеновского излучения σ с атомом свинца Pb ($Z = 82$) и массового коэффициента ослабления μ_m для меди Cu ($Z = 29$):

- Photo effect – **фотопоглощение (фото-эффект)**,
- Thomson – **упругое томсоновское рассеяние**,
- Compton – **неупругое комптоновское рассеяние**.

При энергии $\varepsilon < 0,1$ МэВ ($\lambda > 0,1$ Å) ослабление рентгеновских лучей определяется, в основном, процессами **фотопоглощения и упругого рассеяния**.

4.5. Ослабление рентгеновского излучения

Массовые коэффициенты

поглощения (фото-эффект) – τ_m и рассеяния (комpton-эффект) – α_m
для двух длин волн и некоторых веществ

Наименование элемента	Атомный номер	$\lambda = 0,12 \text{ \AA}$		$\lambda = 0,71 \text{ \AA} (\lambda_{Mo})$	
		τ_m	α_m	τ_m	α_m
C	6	0,15	0,14	0,63	0,18
Al	13	0,18	0,14	5,35	0,20
Cu	29	0,45	0,18	52,0	0,3
Ag	47	1,53	0,35	26,8	0,5
Pb	82	5,17	0,67	140,0	0,8

Коэффициент рассеяния α (комpton-эффект) мал по сравнению с коэффициентом поглощения τ (фото-эффект) !!!

4.5. Ослабление рентгеновского излучения

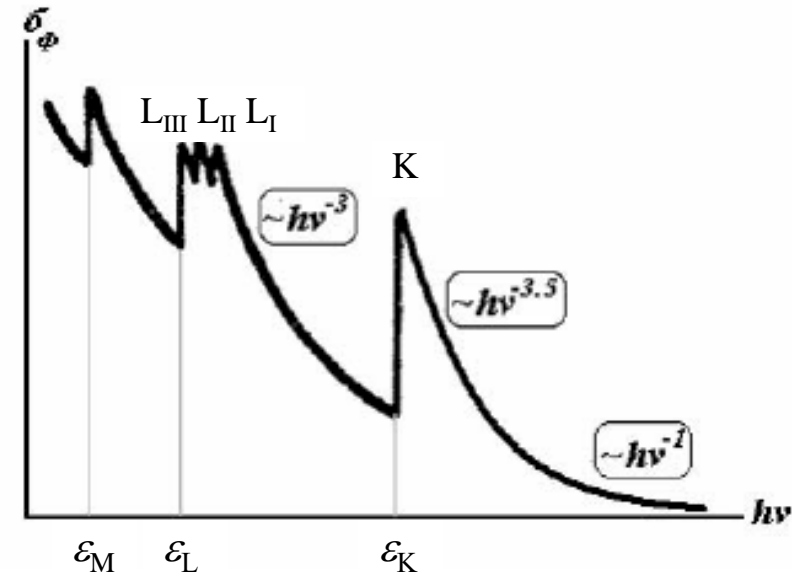
Атомный коэффициент поглощения (эффективное сечение фотоэффекта) τ можно рассматривать как сумму коэффициентов поглощения τ_q для отдельных q -уровней атома:

$$\tau = \sum_q \tau_q.$$

Эксперимент показал, что вдали от края полосы поглощения атомный коэффициент поглощения зависит от атомного номера Z и длины волны λ :

$$\tau \approx C_Z(\lambda) Z^p \lambda^q, \quad 1 \leq q \leq 3.5, \quad 4 \leq p \leq 5,$$

где $C_Z(\lambda)$ скачкообразно меняется при переходе через значения длин волн $\lambda_K, \lambda_{L_I}, \lambda_{L_{II}}, \lambda_{L_{III}}, \dots$, при которых возникает интенсивное характеристическое излучение



Край полосы поглощения – значение энергии $\varepsilon \equiv E_\gamma$ или частоты ν (или длины волны λ) излучения, при превышении которого (или уменьшении λ) наблюдается резкое увеличение поглощения – $h\nu_{K,L,M,\dots} = E_{K,L,M,\dots}$.

Наибольшая вероятность поглощения кванта рентгеновского излучения у сильно связанных электронов K-оболочки (при $E > \sim \varepsilon_K$ или $\lambda < \sim \lambda_K$!).

4.5. Ослабление рентгеновского излучения

Наличие скачков на зависимостях коэффициентов поглощения $\tau(Z,)$ приводит к необходимости подбора излучения при проведении структурных исследований материалов. Во избежание сильного поглощения, уменьшающего интенсивность дифрагированного излучения, и сильной флуоресценции, которая резко понижает контрастность рентгенограммы, повышая фон, **необходимо выбирать длину волны первичного излучения так, чтобы она была несколько больше края полосы поглощения K-(L-)серии того элемента в материале, для которого поглощение и флуоресценция наибольшие.**

Благодаря скачкам поглощения появляется возможность использования селективно поглощающих фильтров для изменения спектрального состава излучения. Наиболее широко используется **β -фильтр**, позволяющий отделить α -линию (LK-переходы) характеристического спектра от β -линии (MK-переходы).

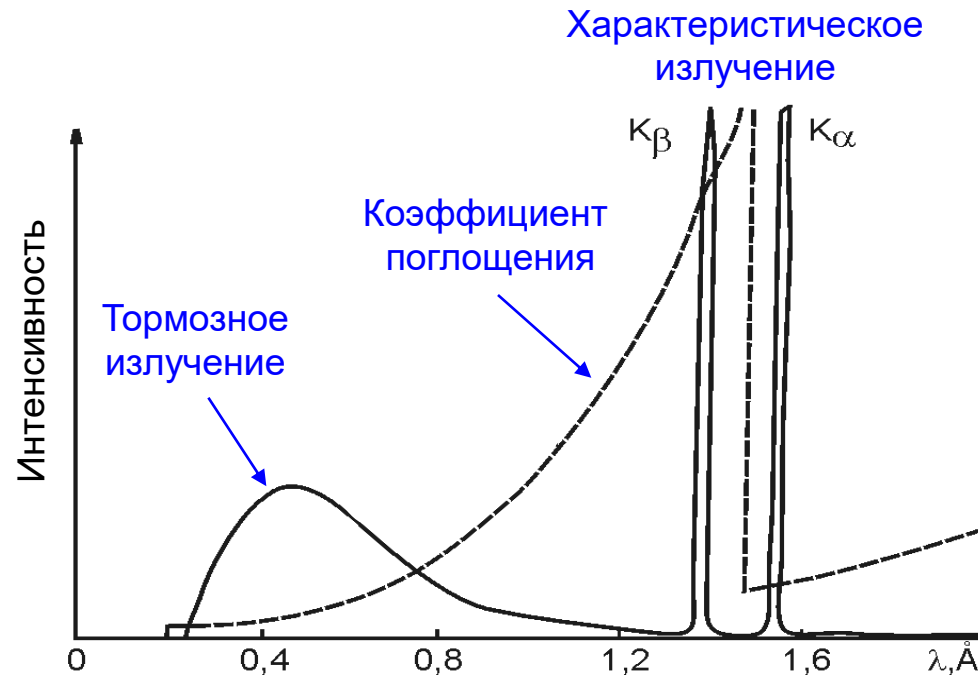
Край полосы поглощения атомов вещества, из которого состоит β -фильтр, должен лежать между α - и β -линиями характеристического спектра вещества анода рентгеновской трубки. Это условие выполняется, если **атомный номер вещества фильтра на единицу меньше атомного номера вещества анода рентгеновской трубки** в ряду элементов таблицы Менделеева:

Анод:	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
Фильтр:	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni

4.5. Ослабление рентгеновского излучения

Селективные фильтры

Подбирая длину волны края поглощения (материал фильтра) можно отсекать ненужную часть спектра



Тормозное и характеристическое излучение Cu-анода ($U = 50$ кВ), и зависимость коэффициента поглощения для Ni фильтра от длины волны.

При соответствующем подборе толщины фильтра β -линия может быть ослабленной в несколько сотен раз сильнее, чем α -линия.

4.6. Дисперсия рентгеновского излучения

Дисперсия рентгеновского излучения – это явление, обусловленное зависимостью диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega)$, а значит скорости распространения излучения $v(\omega) = c/n(\omega) = c/\sqrt{\varepsilon(\omega)\mu}$, показателя преломления $n(\omega)$ и коэффициента поглощения $\alpha(\omega)$, от частоты.

Классич. электронная теория дисперсии Хэндрика Антона Лóренца:

$$\frac{\hat{\varepsilon} - 1}{\hat{\varepsilon} + 2} = \frac{\hat{n}^2 - 1}{\hat{n}^2 + 2} = \frac{\omega_{\Pi}^2}{3} \cdot \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 + i2\delta\omega},$$

$\hat{\varepsilon} = \varepsilon - i\varepsilon'$ – комплексная диэлектрическая проницаемость среды,

$\hat{n} = \sqrt{\hat{\varepsilon}} = n - in'$ – комплексный показатель преломления,

ω_0 – частота собственных колебаний электрона в атоме без затухания,

δ – коэффициент затухания,

$$\omega_{\Pi} = \sqrt{\frac{Ne^2}{m\varepsilon_0}} \quad \text{– плазменная частота.}$$

Для конденсированных сред:

$$\omega_{\Pi} \cong 5.6 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1} \ll \omega_{\text{X-ray}} \sim 10^{18} - 10^{19} \text{ с}^{-1}$$

$$\lambda_{\Pi} = 2\pi c / \omega_{\Pi} \cong 0.34 \text{ мкм} \gg \lambda_{\text{X-ray}} \sim 1 \text{ \AA}$$

$$\hat{n}_{\text{X-ray}} \sim 1 \text{ !!!}$$



Хéндрик А́нтон Лóренц

(18.0.1853-04.02.1928)

Нидерландский физик-теоретик

Классическая электронная теория дисперсии (1892 г.)

Нобелевская премия по физике совместно с Питером Зееманом (1902)

«В знак признания исключительных услуг, которые они оказали науке своими исследованиями влияния магнетизма на явления излучения»

4.6. Дисперсия рентгеновского излучения

Для рентгеновского излучения ($\omega_{\text{п}} \ll \omega_{\text{X-ray}}, \omega_{\text{X-ray}} \neq \omega_0 \Rightarrow n(\omega) \sim 1$):

$$n(\omega) = 1 + \frac{\omega_{\text{п}}^2}{2} \cdot \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\delta^2\omega^2} \quad \text{– показатель преломления,}$$

$$\alpha(\omega) = 2 \frac{\omega}{c} n' = \frac{\omega_{\text{п}}^2}{c} \cdot \frac{2\delta\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\delta^2\omega^2} \quad \text{– коэффициент поглощения.}$$

$$n_{\text{X-ray}} < 1 !!!, \alpha_{\text{X-ray}} \sim 0 !!! \rightarrow \frac{\lambda}{\lambda_0} = \frac{v}{c} = \frac{1}{n} > 1.$$

Вдали от полос поглощения среды почти не обладают дисперсией и слабо поглощают рентгеновское излучение.

В рентгеновской области частот среда оптически менее плотная, чем вакуум.

Фазовая скорость распространения рентгеновского излучения в среде **больше скорости света**, но **групповая скорость** распространения, определяющая скорость переноса энергии рентгеновского излучения, **меньше скорости света**.

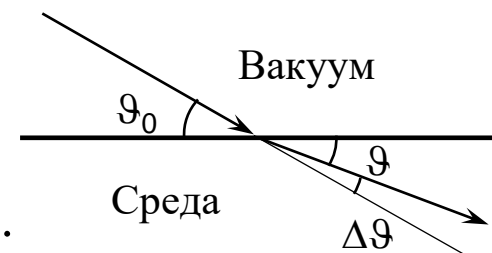
Теория Лорентца находится в хорошем соответствии с экспериментальными результатами вдали от К-края поглощения со стороны коротких волн, хуже согласуется со стороны длинных волн и совершенно неудовлетворительна вблизи краев поглощения.

4.7. Преломление и полное внешнее отражение рентгеновских лучей

$$n(\omega) - 1 = \frac{\omega_{\Pi}^2}{2} \cdot \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\delta^2\omega^2} \cong -\frac{\omega_{\Pi}^2}{2} \cdot \frac{1}{\omega^2} = -\frac{Ne^2}{2m\varepsilon_0} \cdot \frac{\lambda^2}{4\pi^2 c^2} = -10^{-7} \frac{Ne^2\lambda^2}{2\pi m} =$$

$$= -10^{-7} \frac{e^2}{2\pi m} \cdot \frac{ZN_A\rho}{A} \lambda^2 \xrightarrow{Al} -1.74 \cdot 10^{-6}.$$

$$\frac{\sin \alpha_0}{\sin \alpha} = \frac{\cos \vartheta_0}{\cos \vartheta} = n < 1, \quad \Delta\vartheta = \vartheta_0 - \vartheta > 0, \quad \vartheta_0 \downarrow \Rightarrow \Delta\vartheta \uparrow.$$



Для обнаружения отклонения рентгеновских лучей при прохождении через поверхность раздела двух сред необходимо выбирать возможно меньшие углы скольжения ϑ_0 , близкие к предельному **углу полного внешнего отражения** $\vartheta_{0,\min}$.

Впервые явление преломления и отражения рентгеновских лучей было продемонстрировано в 1933 году советскими учеными Львом Андреевичем Арцимовичем (участник атомного проекта в СССР, руководитель работ по высокотемпературной плазме и управляемого термоядерного синтеза) и Абрамом Исааковичем Алихановым (один из основоположников ядерной физики в СССР и создателей первой советской атомной бомбы).

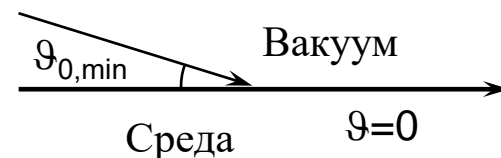
4.7. Преломление и полное внешнее отражение рентгеновских лучей

В соответствии с законом преломления (законом Снеллиуса (1621 г.))

$$\frac{\cos \vartheta_0}{\cos \vartheta} = n < 1; \vartheta_0 > \vartheta.$$

При уменьшении угла скольжения ϑ_0 излучение будет **проходить внутрь среды** лишь до некоторого наименьшего угла $\vartheta_{0,\min}$:

$$\cos \vartheta_{0,\min} = n, \quad \vartheta_{0,\min} = \Delta \vartheta_{\max} \cong \sqrt{2(1-n)} \sim 0.11^\circ \cong 7'.$$



При дальнейшем уменьшении угла ϑ_0 наступает явление **полного внешнего отражения рентгеновских лучей**: часть падающего луча по-прежнему зеркально отражается от поверхности раздела вакуум – среда, а оставшаяся его часть распространяется вдоль поверхности раздела, **проникая внутрь среды** на глубину Δz . При этом **глубина проникновения** в среду Δz равна:

$$\Delta z = \frac{n\lambda}{2\pi\sqrt{\cos^2 \vartheta_0 - n^2}} \xrightarrow{\vartheta_0 \rightarrow 0, n \sim 1} \frac{n\lambda}{2\pi\sqrt{2(1-n)}} \cong 80 \text{ \AA}.$$

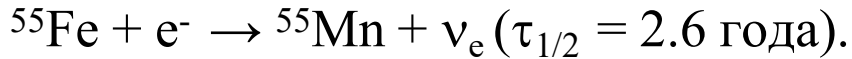
Достаточно резкая граница полного внешнего отражения получается лишь для прозрачных сред.

С возрастанием поглощения понятие предельного угла теряет смысл: интенсивность отраженного луча плавно уменьшается с увеличением угла скольжения ϑ_0 .

§5. Другие источники рентгеновского излучения

Изотопные источники:

Спонтанное радиоактивное превращение электронным K-захватом:



Практически чистая K-серия линий (5.9 кэВ без тормозного излучения).

Таких изотопов сравнительно немного, например:



Низкая интенсивность излучения.

Полная автономность, надёжность, малые размеры и вес.

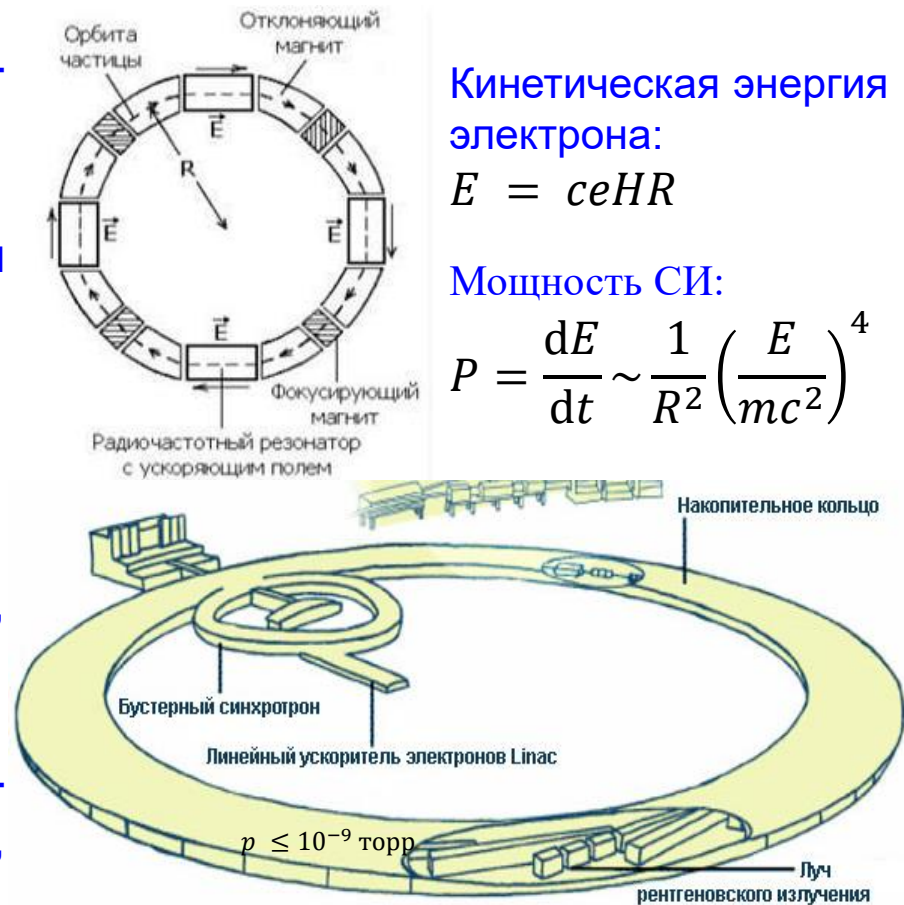
Синхротронные источники:

Синхротронное излучение – излучение ультрарелятивистских электронов, движущихся с ускорением.

Интенсивность излучения – в $10^4 - 10^{15}$ (!) раз выше, чем у рентгеновской трубки.

Протяженный линейчатый очень плотный (квазинепрерывный) спектр.

Излучение вдоль скорости электронов, поляризовано линейно в пл-ти орбиты.



Кинетическая энергия электрона:

$$E = ceHR$$

Мощность СИ:

$$P = \frac{dE}{dt} \sim \frac{1}{R^2} \left(\frac{E}{mc^2} \right)^4$$

Синхротрон электронный – резонансный циклический ускоритель электронов, в котором орбита пучка остаётся постоянного радиуса, а ведущее магнитное поле поворотных магнитов, определяющее этот радиус, возрастает во времени.

§5. Другие источники рентгеновского излучения

СИНХРОТРОНЫ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ В РЕНТГЕНОВСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

Тип прибора	Энергия, ГэВ (10^9 эВ)	Радиус орбиты	Максимальный ток, мА	Длина волны в максимуме спектрального распределения, нм	Расстояние до экспериментальной установки, м
DESY (Гамбург, ФРГ)	7,5	31,7	45	0,017	40
ESRF, (Гренобль, Франция)	6,0	134		0,015	200
NINA (Доресбург, ФРГ)	5	20	25	0,038	47
SPREAK (Стенфорд, США)	2,7	12,7	200	0,15	14
КИСИ, (Москва, Курчатовский научный центр)	2,5	19,7	100-300	0,01-200	10
О.С.И. (Орсей, Франция)	1,8	4	500	0,16	14-24
DORIS (Гамбург, ФРГ)	1,7-3,5	12,4	20-600	0,068-0,055	40

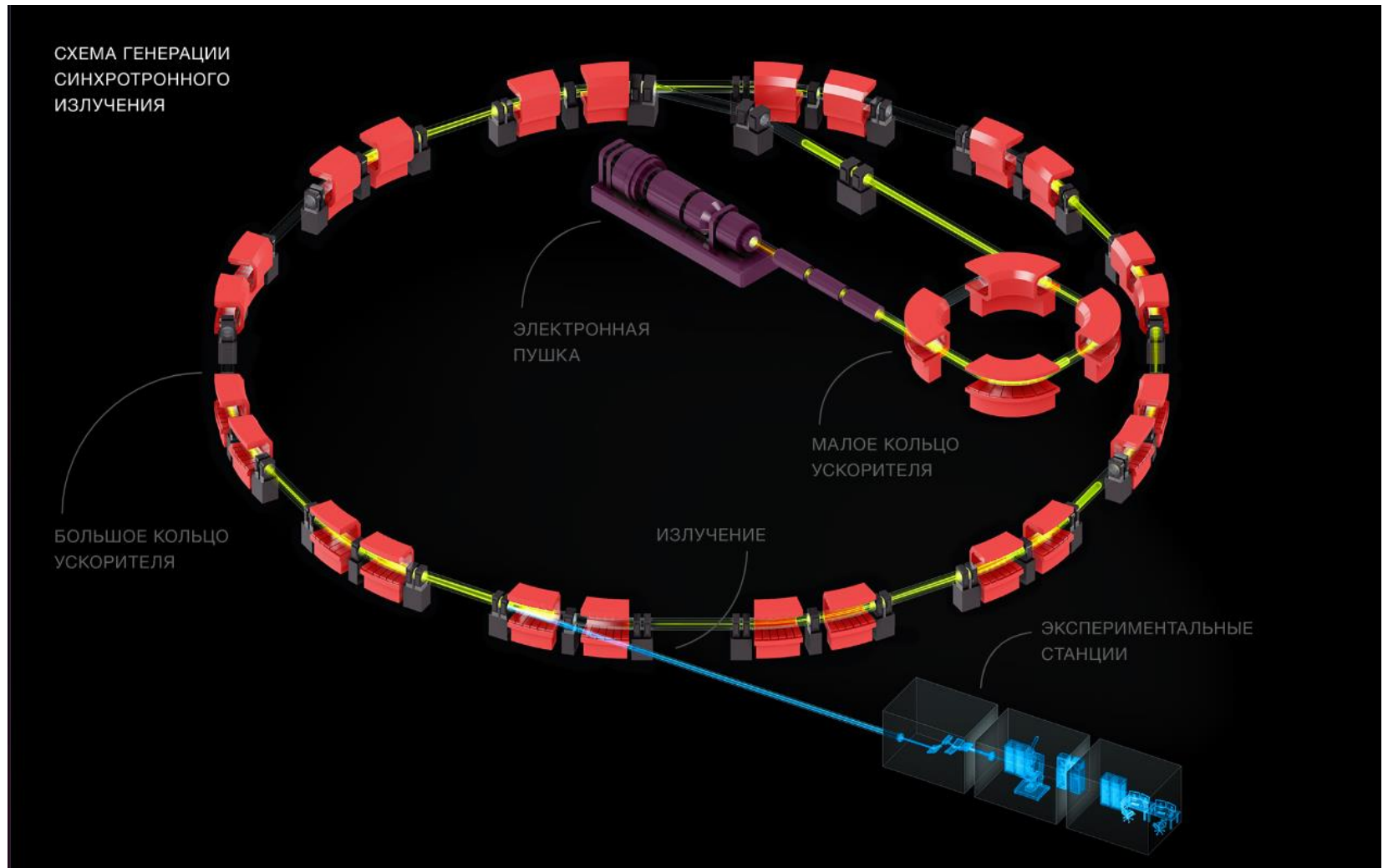
ЦКП "СКИФ" – Центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов" – Новосибирский синхротрон поколения 4+ на 3 ГэВ, радиусом 76 м. Число экспериментальных станций – 46. Строится под Новосибирском со сроком запуска – конец 2024 г.

§5. Другие источники рентгеновского излучения



Курчатовский источник синхротронного излучения ("КИСИ-Курчатов")
Курчатовский научный центр, Москва (1999 г.)

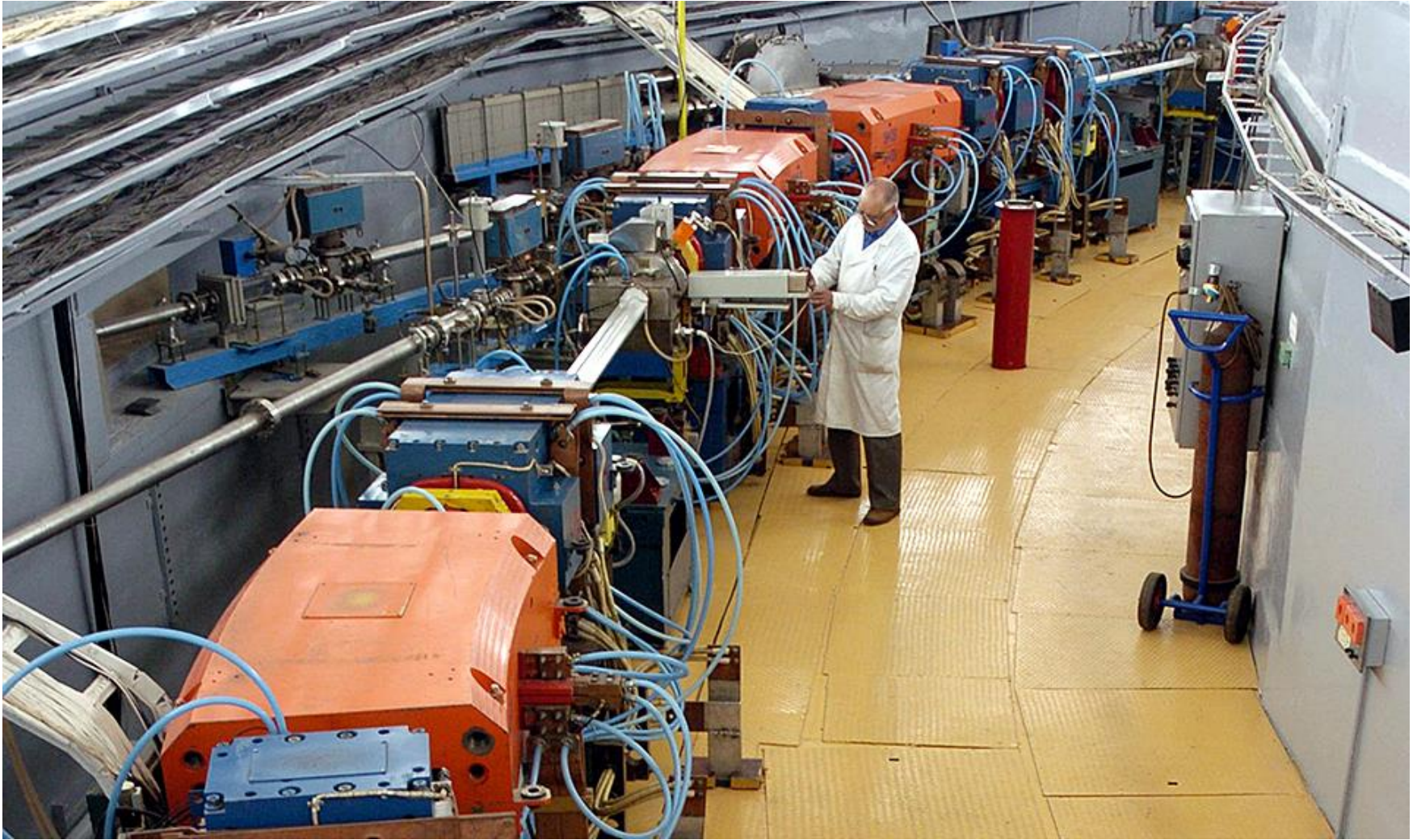
§5. Другие источники рентгеновского излучения



"КИСИ-Курчатов":

линейный ускоритель + бустерный синхротрон "Сибирь-1" + синхротрон "Сибирь-2"

§5. Другие источники рентгеновского излучения



"КИСИ-Курчатов":

линейный ускоритель + бустерный синхротрон "Сибирь-1" + синхротрон "Сибирь-2"

§5. Другие источники рентгеновского излучения

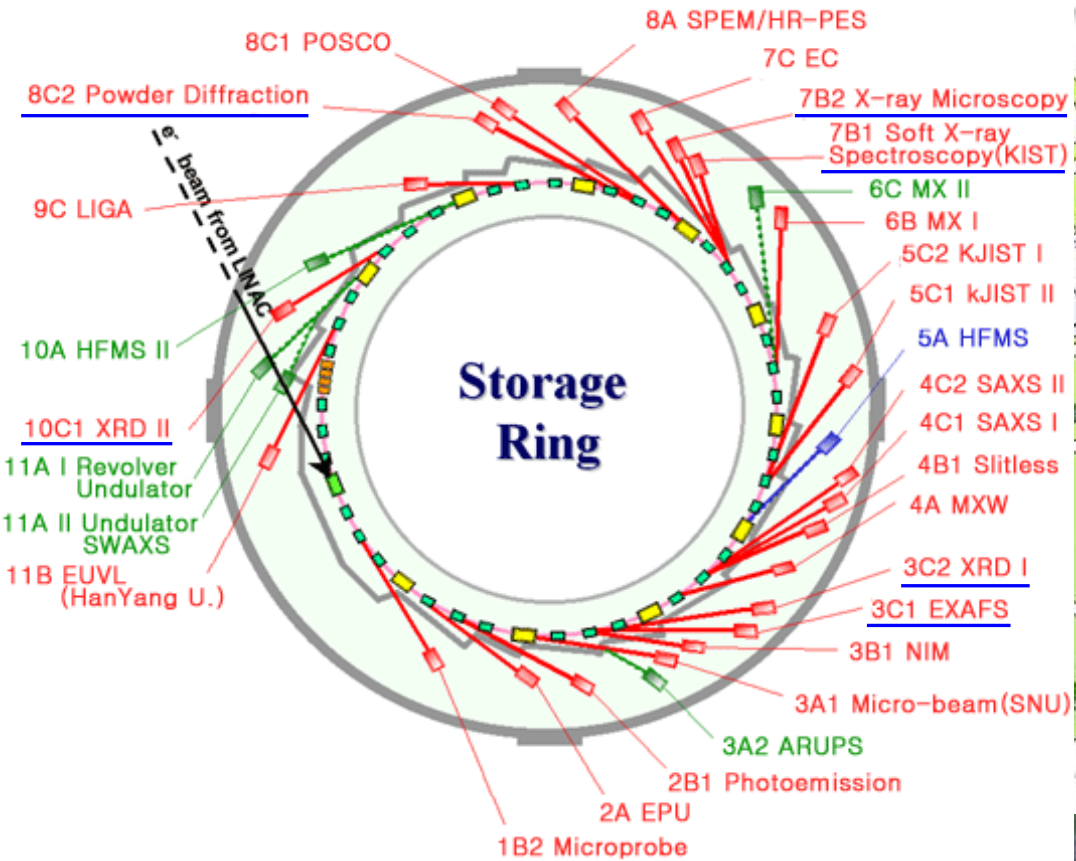
Экспериментальные станции на "КИСИ-Курчатов" (синхротрон "Сибирь 2"; 14 станций)

- Рентг. кино** — получение рентгеновских изображений;
- Ленгмюр стоячих** — исследование плёнок на поверхности жидкости методами рентгеновских волн;
- СТМ** — структурное материаловедение;
- РСА** — рентгеноструктурный анализ порошков;
- РТ-МТ** — рентгеновская топография и микротомография;
- ФАЗА** — фазочувствительные методы исследования вещества;
- Гамма** — исследования фотоядерных реакций;
- Медиана** — медицинская и материаловедческая диагностика;
- Белок** — белковая кристаллография;
- РКФМ** — рентгеновская кристаллография и физическое материаловедение;
- РЕФРА** — рентгеновская рефракционная оптика;
- EXAFS-D** — рентгеновская спектроскопия поглощения в пространственно-дисперсионной моде;
- LIGA** — глубокая рентгеновская литография;
- ПРО** — прецизионная рентгеновская оптика (в т.ч. плосковолновая рентгеновская дифракция).

PLS Beamline Status

FEBRUARY 2005

Линей
3 ГэВ, 40С



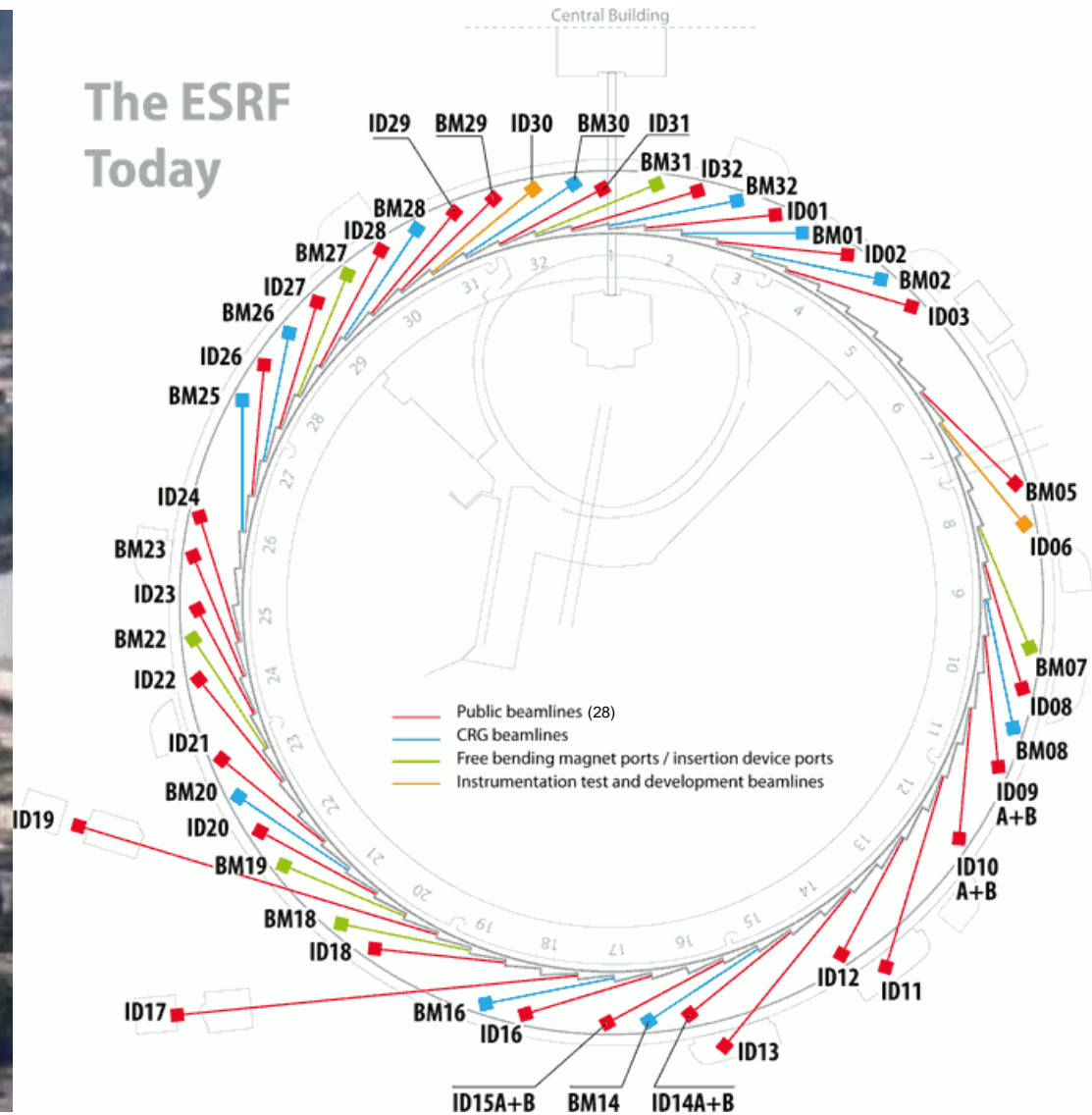
Construction	-----	6 beamlines
Commissioning	=====	1 beamlines
Operation	=====	23 beamlines

* Support bldg. : fs-FIR

Pohang Light Source, Korea



The ESRF Today



The European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) in Grenoble, France

$E = 6 \text{ ГэВ}$; длина кольца 844 м ($R = 134 \text{ м}$); 28 исследовательских линий

§5. Другие источники рентгеновского излучения

ESRF in Grenoble, France



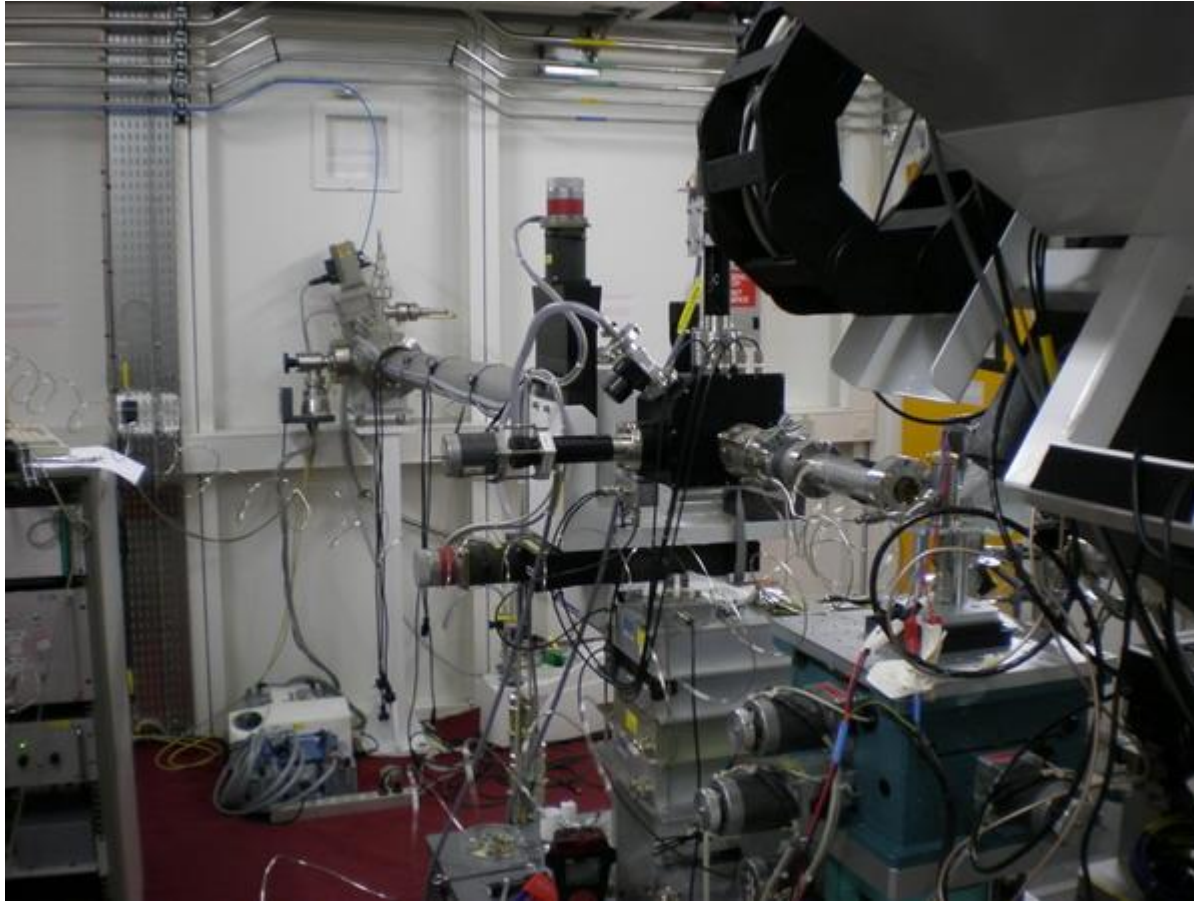
Фрагмент ускорительного кольца



Зал управления ускорителем

§5. Другие источники рентгеновского излучения

ESRF in Grenoble, France



Одна из рентгенооптических лабораторий (станций).

Восемь часов измерений обходятся каждой группе учёных ~4000 евро, а для проведения научных исследований нужно работать иногда не одну неделю чистого времени.

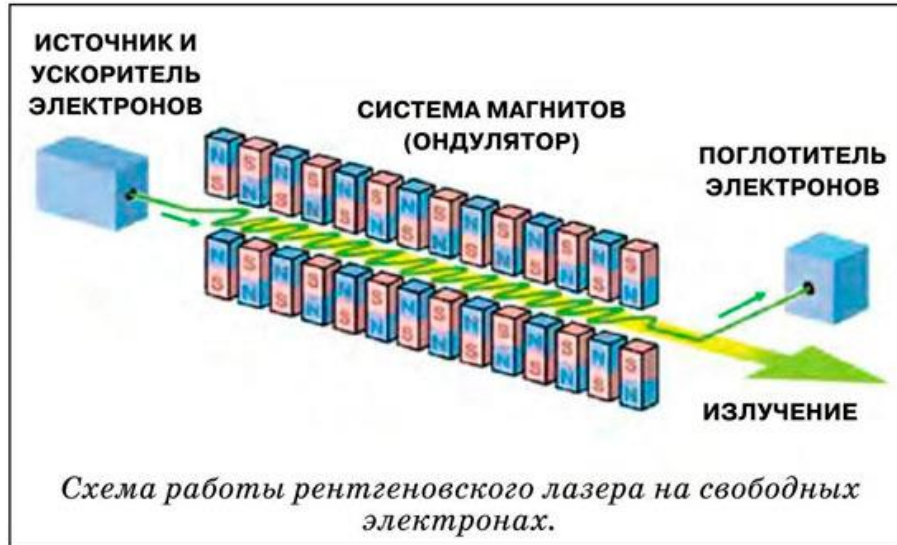
§5. Другие источники рентгеновского излучения

Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах (2019 г.)

(European X-ray Free Electron Laser – **European XFEL**,

в центре синхротронного излучения DESY, Гамбург, Германия)

Международный проект, 12 стран, 1.22 млрд евро. 58 % – Германия, 27 % – Россия



Фрагмент линейного ускорительного комплекса

($\varepsilon_{\max} = 17,5$ ГэВ, $L = 2.1$ км)

Длина всего лазера $L = 3.4$ км на глубине $h = 6-38$ м.

Электроны, ускоренные сверхпроводящим линейным ускорителем до релятивистских скоростей, попадают в магнитные поля ондулятора, где они двигаются по синусоидальным траекториям, излучая короткие и мощные рентг. импульсы ($\nu \leq 3 \cdot 10^4$ Гц и $\tau < 100$ фс (1 фемто = 1 ф = 10^{-15}), $0,5 \text{ \AA} \leq \lambda \leq 60 \text{ \AA}$) со свойствами лазерного излучения и интенсивностью, значительно превосходящей получаемую в традиционных источниках СИ так называемого третьего поколения.

Идея российских ученых из новосибирского ИЯФ Евгения Салдина, Анатолия Кондратенко и Ярослава Дербенева (~1987г.). Они показали как подобрать параметры ондулятора, чтобы упорядочить движение электронов для увеличения мощности излучения более чем в миллион раз.

§5. Другие источники рентгеновского излучения

Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах (European XFEL)

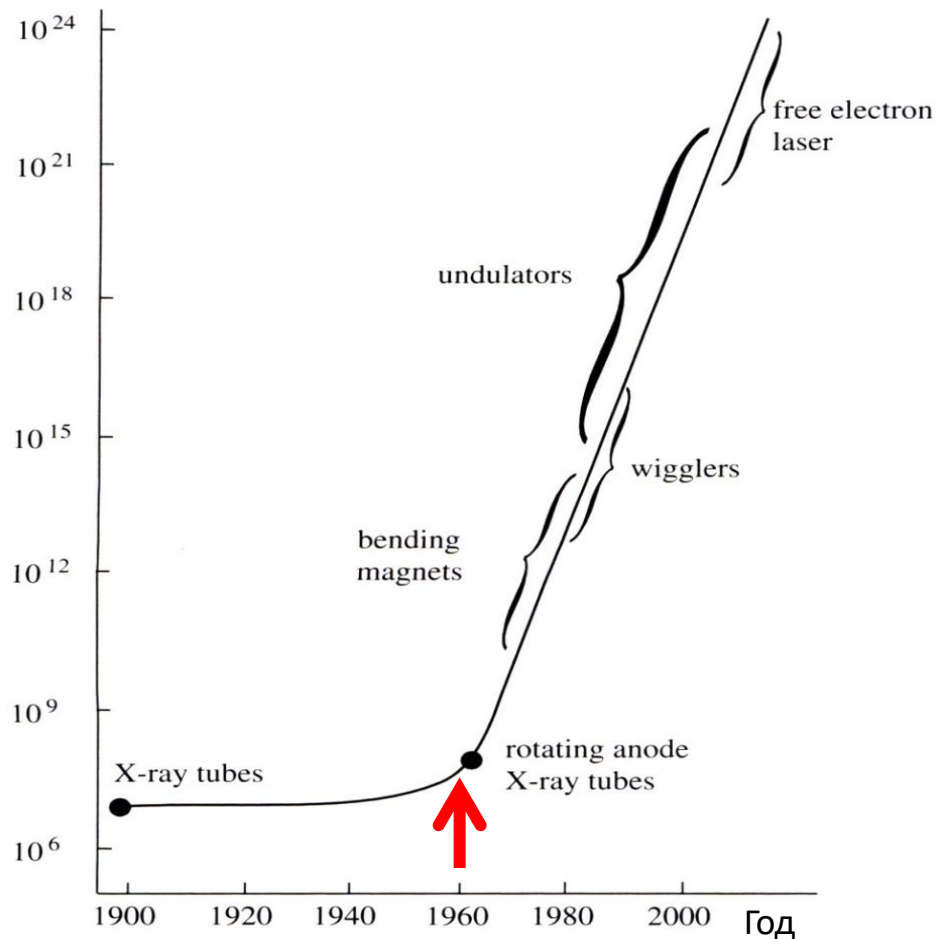


DESY's accelerator control center, European XFEL section.



§5. Другие источники рентгеновского излучения

Яркость – световой поток, испускаемый единичной площадью сечения источника в единичный телесный угол (Дж/с/ст/м²).



Ондулятор – магнитная система, создающая знакопеременное периодическое магнитное поле.

Вигглер – ондулятор с небольшим числом периодов.

Спектральная яркость – число фотонов из спектральной полосы $\delta\lambda = 10^{-3} \lambda$, испускаемое в единицу времени в телесный угол 1 мрад² площадью 1 мм² сечения источника. (фотон/с/мрад²/мм²/10⁻³ λ).

