

Rys. 37.25. Wytwarzanie promieniowania rentgenowskiego. Elektrony opuszczające rozżarzone włókno  $F$  są przyspieszane przez różnicę potencjałów  $V$  i uderzają w metalową tarczę  $T$ . „Okienko”  $W$  w próżniowej komorze  $C$  jest przezroczyste dla promieniowania rentgenowskiego

## 37.9. Dyfrakcja promieniowania rentgenowskiego

Promieniowanie rentgenowskie (promienie X) to promieniowanie elektromagnetyczne z zakresu długości fali rzędu  $1 \text{ \AA}$  ( $= 10^{-10} \text{ m}$ ). Dla porównania długość fali ze środka zakresu widzialnego widma promieniowania elektromagnetycznego, czyli światła, wynosi  $550 \text{ nm}$ , czyli  $5,5 \cdot 10^{-7} \text{ m}$ . Na rysunku 37.25 pokazano zasadę wytwarzania promieniowania rentgenowskiego — elektrony opuszczające rozżarzone włókno  $F$  są przyspieszane przez różnicę potencjałów  $V$  i uderzają w metalową tarczę  $T$ , przy czym wytwarzane jest promieniowanie rentgenowskie.

Do rozdzielenia dwóch linii o różnych długościach fali z zakresu promieniowania rentgenowskiego nie można korzystać ze zwykłej optycznej siatki dyfrakcyjnej. Aby to sprawdzić, weźmy siatkę dyfrakcyjną o stałej  $d = 3000 \text{ nm}$  i użyjmy promieniowania o długości fali  $\lambda = 1 \text{ \AA}$ . Jak wynika z równania (37.22), maksimum pierwszego rzędu powstaje wówczas w odległości kątowej równej

$$\theta = \arcsin\left(\frac{m\lambda}{d}\right) = \arcsin\left(\frac{(1)(0,1 \text{ nm})}{3000 \text{ nm}}\right) = 0,0019^\circ$$

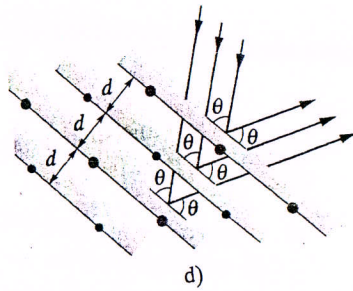
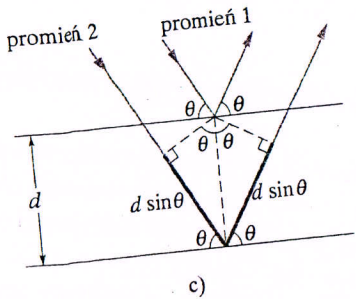
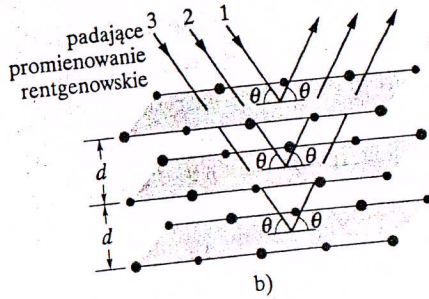
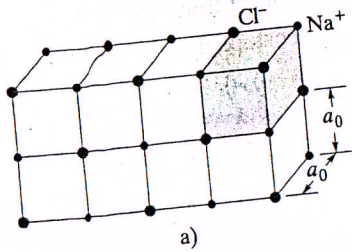
od maksimum centralnego, czyli zbyt blisko tego maksimum, gdyż takiego odchylenia nie da się zmierzyć. Potrzebna byłaby siatka dyfrakcyjna o stałej  $d \approx \lambda$ , ale ponieważ długości fali promieniowania rentgenowskiego są bliskie rozmiarów atomowych, wobec tego takiej siatki nie można wykonać metodami mechanicznymi.

W 1912 r. fizyk niemiecki Max von Laue uświadomił sobie, że krystaliczne ciała stałe, które składają się z uporządkowanych szeregów atomów, mogłyby stanowić naturalną trójwymiarową „siatkę dyfrakcyjną” dla promieniowania rentgenowskiego. Pomysł wziął się stąd, że w kryształach, takim jak chlorek sodu ( $\text{NaCl}$ ), podstawowy układ atomów (zwany komórką elementarną kryształu) jest powielany (we wszystkich trzech prostopadłych kierunkach). Z każdą komórką elementarną kryształu  $\text{NaCl}$  związane są cztery jony sodu i cztery jony chloru. Na rysunku 37.26a pokazano przekrój przez fragment kryształu  $\text{NaCl}$  i jego komórkę elementarną, która jest sześcianiem o boku  $a_0$ .

Kiedy wiązka promieni rentgenowskich wchodzi do kryształu, takiego jak kryształ  $\text{NaCl}$ , promienie są rozpraszane we wszystkich kierunkach przez kryształ. W niektórych kierunkach interferencja rozproszonych fal promieniowania rentgenowskiego jest destruktywna, co prowadzi do minimów natężenia, a w innych kierunkach jest ona konstruktywna, co prowadzi do maksimów natężenia. Taki proces rozpraszania i interferencji jest rodzajem dyfrakcji, chociaż nie jest to dyfrakcja taka, jak dyskutowane przez nas wcześniej ugięcie światła przechodzącego przez szczelinę, czy ugięcie światła na krawędzi.

Chociaż proces dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego na kryształach jest procesem skomplikowanym, to jednak okazuje się, że maksima natężenia powstają w takich kierunkach, jak gdyby promieniowanie rentgenowskie było odbijane od rodziny równoległych płaszczyzn odbijających (płaszczyzn sieciowych) zawartych w regularnie uporządkowanych atomach kryształu. (W rzeczywistości promieniowanie rentgenowskie nie ulega zwierciadlanemu odbiciu od żadnych płaszczyzn sieciowych; posługujemy się tymi fikcyjnymi płaszczyznami w celu uproszczenia analizy rzeczywistego procesu dyfrakcyjnego).





Rys. 37.26. a) Sześcienna struktura kryształu NaCl z pokazanymi jonami sodu i chloru oraz komórką elementarną kryształu (zaciemniona). b) Padające promieniowanie rentgenowskie ulega dyfrakcji na strukturze (a). Ich ugięcie zachodzi tak, jak gdyby były odbijane od rodziny równoległych płaszczyzn, pod kątem odbicia równym kątowi ich padania (oba kąty są mierzone względem płaszczyzny, a nie jak w optyce względem normalnej do płaszczyzny odbijającej). c) Różnica dróg między falami efektywnie odbitymi przez dwie sąsiednie płaszczyzny jest  $2d \sin \theta$ . d) Inny kierunek promieniowania rentgenowskiego zachodzi na płaszczyznach należących do innej rodziny płaszczyzn odbijających

Na rysunku 37.26b przedstawiono trzy płaszczyzny sieciowe (jednej z wielu rodzin płaszczyzn sieciowych kryształu) o odległości międzypłaszczyznowej  $d$ , od których — jak mówimy — odbija się promieniowanie rentgenowskie. Promienie 1, 2 i 3 odbijają się odpowiednio od pierwszej, drugiej i trzeciej płaszczyzny. Kąty padania i odbicia na każdej płaszczyźnie są oznaczone jako  $\theta$ . Przeciwnie niż w optyce, kąty te nie są zdefiniowane jako kąty między kierunkami promienia padającego lub odbitego a normalną do płaszczyzny, lecz jako kąty między tymi kierunkami a płaszczyzną odbijającą (dlatego nazywa się je także kątami poślizgu). Na rysunku 37.26b płaszczyzny odbijające są odległe od siebie o krawędź komórki elementarnej  $a_0$ .

Na rysunku 37.26c pokazano odbicie od dwóch sąsiednich płaszczyzn. Padające na kryształ fale promieniowania rentgenowskiego, reprezentowane przez promienie 1 i 2, mają zgodne fazy. Po odbiciu muszą one mieć zgodne fazy, gdyż odbicie i płaszczyzny odbijające zostały zdefiniowane wyłącznie w celu objaśnienia powstawania maksimów w dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego na kryształach. Inaczej niż światło, promieniowanie rentgenowskie nie ulega załamaniu przy wejściu do kryształu i nie definiujemy współczynnika załamania dla dyskutowanej sytuacji. Różnica faz między obiema falami, reprezentowanymi przez promienie 1 i 2, jest zatem po wyjściu z kryształu określona wyłącznie



przez różnicę przebytych przez nie dróg. Żeby te promienie miały zgodne fazy, różnica dróg musi być równa całkowitej wielokrotności długości fali  $\lambda$ .

Po dorysowaniu na rysunku 37.26c dwóch prostokątów do promieni linii przerywanych, z prostych rozważań trygonometrycznych znajdziemy, że różnica dróg jest równa  $2d \sin \theta$ . Jest to słuszne również dla każdej pary sąsiednich płaszczyzn z rodziny odbijających płaszczyzn sieciowych zilustrowanych na rysunku 37.26b. Zatem warunek określający występowanie maksimum natężenia dla dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego będzie miał postać

$$2d \sin \theta = m\lambda, \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{prawo Bragga}), \quad (37.31)$$

gdzie  $m$  jest rzędem maksimum natężenia. Równanie (37.31) zwane jest **warunkiem Bragga**, od nazwiska brytyjskiego fizyka W.L. Bragga, który je po raz pierwszy wyprowadził. (Wspólnie ze swoim ojcem za zastosowanie promieniowania rentgenowskiego do badania struktury kryształów otrzymał on Nagrodę Nobla w 1915 r.). Kąt padania i odbicia w równaniu (37.31) nazywa się *kątem Bragga*.

Niezależnie od tego, pod jakim kątem promieniowanie rentgenowskie pada na kryształ, zawsze istnieje rodzina płaszczyzn sieciowych, od której — jak mówimy — ulega ono odbiciu i możemy zastosować warunek Bragga. Zauważ, że na rysunku 37.26d struktura kryształu jest taka sama, jak na rysunku 37.26a, ale kąt, pod jakim promienie wnikają do kryształu, jest inny niż na rysunku 37.26b. Do opisu dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego z wykorzystaniem warunku Bragga temu nowemu kątowi  $\theta$  musimy przypisać nową rodzinę płaszczyzn odbijających, o innej odległości międzypłaszczyznowej  $d$ .

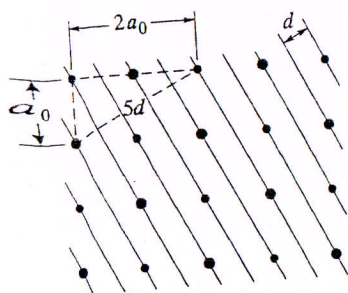
Na rysunku 37.27 pokazano, jak można powiązać odległość międzypłaszczyznową  $d$  z rozmiarem komórki elementarnej  $a_0$ . Z twierdzenia Pitagorasa wynika, że dla pokazanej na rysunku rodziny płaszczyzn sieciowych

$$5d = \sqrt{5}a_0,$$

czyli

$$d = \frac{a_0}{\sqrt{5}}.$$

(37.32)



Rys. 37.27. Rodzina płaszczyzn odbijających (płaszczyzn sieciowych) w strukturze kryształu z rysunku 37.26a i obliczenie, jak długość krawędzi komórki elementarnej  $a_0$  wiąże się z odległością międzypłaszczyznową  $d$

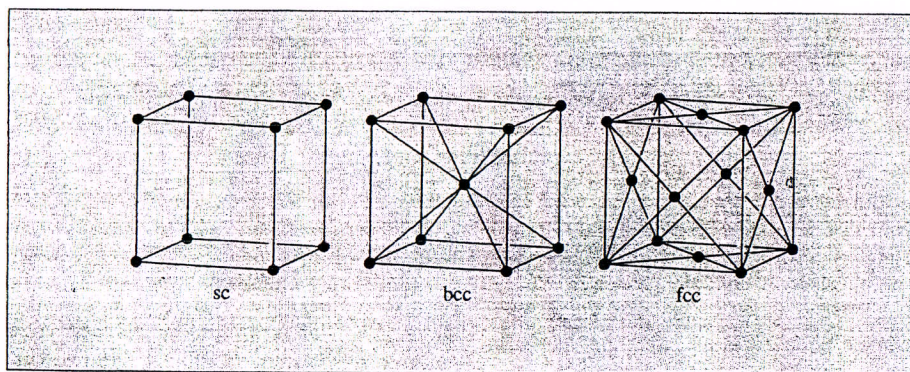
Na rysunku 37.27 wskazano, jak można wyznaczyć wymiary komórki elementarnej, jeżeli z pomiarów dyfrakcji wyznaczono odległość międzypłaszczyznową.

Dyfrakcja promieniowania rentgenowskiego jest potężnym narzędziem umożliwiającym badanie zarówno widm promieniowania rentgenowskiego, jak i rozmieszczenia atomów w strukturach krystalicznych. Do badania widm wybiera się określony zespół płaszczyzn sieciowych o znanej odległości międzypłaszczyznowej. Płaszczyzny te odbijają fale o różnych długościach pod różnymi kątami. Używając detektora rozróżniającego kąty, można wyznaczyć długości fali promieniowania zbieranego przez detektor. Kryształy mogą być badane przy użyciu monochromatycznego promieniowania rentgenowskiego, co umożliwia nie tylko wyznaczenie odległości międzypłaszczyznowych dla różnych płaszczyzn kryształu, ale również struktury komórki elementarnej.



Tabela 1. Czternaście typów sieci trójwymiarowych

Układ	Liczba sieci	Krawędzie i kąty komórki umownej
trójskośny	1	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
jednoskośny	2	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
rombowy	4	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
tetragonalny	2	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
regularny	3	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
romboedryczny (trygonalny)	1	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$
heksagonalny	1	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$



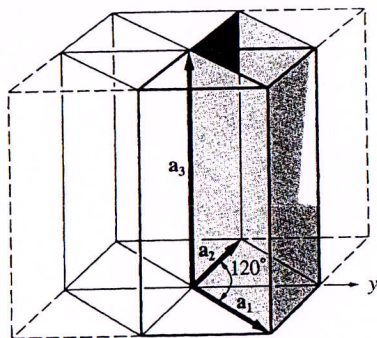
Rys. 10. Regularne sieci przestrzenne. Przedstawione komórki są komórkami umownymi

do 14 różnych  
ośna i 13 sieci  
nazwach zgod-  
gonalny, regu-  
żony w tabeli

sieci regular-  
elementarne,  
niż komórka

W układzie regularnym są trzy sieci: prosta sc (ang. *simple cubic*), przestrzenie centrowana bcc (ang. *body centered cubic*) i powierzchniowo centrowana fcc (ang. *face centered cubic*). Charakterystyczne cechy tych trzech sieci regularnych przedstawiono w tabeli 2.



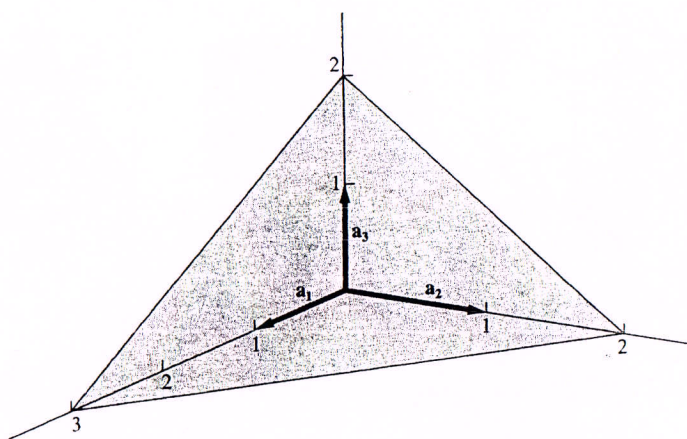


Rys. 14. Porównanie komórki elementarnej w układzie heksagonalnym (grube linie) z graniastoslupem o symetrii heksagonalnej. Tutaj  $a_1 = a_2 \neq a_3$

## Wskaźniki płaszczyzn krystalicznych

Orientacja płaszczyzny krystalicznej określona jest przez trzy punkty na płaszczyźnie nie leżące na jednej prostej. Jeśli każdy punkt leży na innej osi krystalicznej, położenie płaszczyzny określają współrzędne tych punktów w jednostkach stałych sieci krystalicznej  $a_1, a_2, a_3$ .

Okazało się, że w analizie strukturalnej wygodniej jest określać orientację płaszczyzny za pomocą wskaźników wyznaczonych według niżej opisanych zasad (rys. 15).



Rys. 15. Płaszczyzna przecina osie  $a_1, a_2, a_3$  w punktach znajdujących się na końcach wektorów  $3a_1, 2a_2, 2a_3$ . Odwrotnościami liczb 3, 2, 2 są:  $\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ . Trzema najmniejszymi liczbami całkowitymi o tym samym stosunku są 2, 3, 3, więc płaszczyzna ta ma wskaźniki (233)

• Należy znaleźć współrzędne przecięcia osi z płaszczyzną w jednostkach stałych sieci  $a_1, a_2, a_3$ . Osie mogą być osiami komórki zarówno elementarnej, jak i nieelementarnej.

• Należy użyć liczb całkowitych ( $hkl$ ) są wskaźnikami płaszczyzny. Jeśli płaszczyzna przecina osie w  $1$  i  $\frac{1}{2}$ , najmniejszą liczbą mnożącą jest istotne płaszczyznę na rys. 16.

Rys. 16. Wskaźnik (200) jest równocześnie

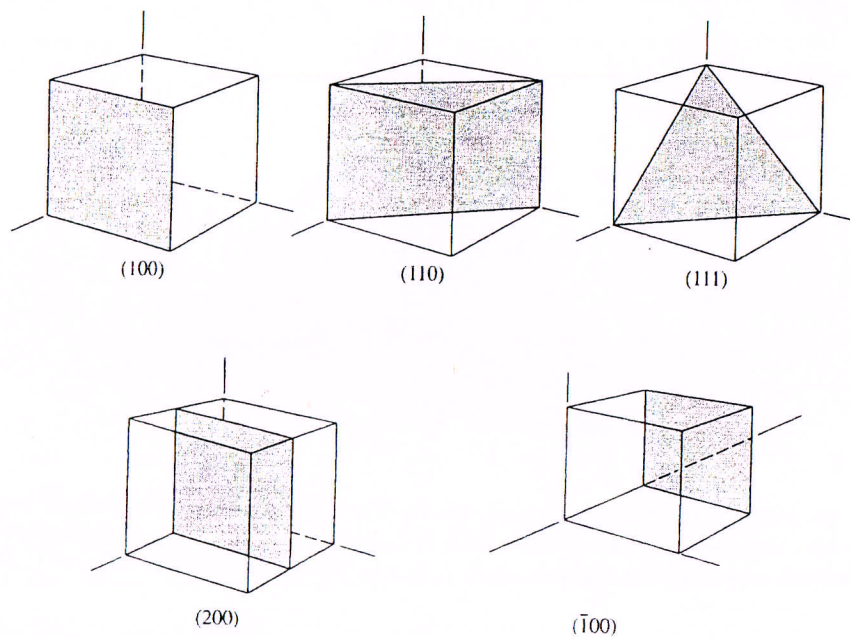
Wskaźnikami płaszczyzn równoległych. Jeśli wskaźnik ma wartości  $(h\bar{k}l)$ . Ściany  $(100), (0\bar{1}0)$  i inne są oznaczone wskaźnikami  $(hkl)$ .

<sup>3</sup>Po sprawdzeniu będą szukany  
<sup>4</sup>tzn. płaszczyzn



• Należy utworzyć odwrotności tych liczb, a następnie znaleźć trzy najmniejsze liczby całkowite mające ten sam stosunek. Liczby te zapisane w nawiasach  $(hkl)$  są wskaźnikami płaszczyzny.<sup>3</sup>

Jeśli płaszczyzna przecina osie w punktach 4, 1, 2, to odwrotności są równe  $\frac{1}{4}$ ,  $1$  i  $\frac{1}{2}$ , najmniejsze zaś trzy liczby całkowite o tym samym stosunku to (142). Gdy przecięcie jest w nieskończoności,<sup>4</sup> odpowiedni wskaźnik jest równy zeru. Niektóre istotne płaszczyzny struktury regularnej wraz z ich wskaźnikami przedstawiono na rys. 16.



Rys. 16. Wskaźniki ważniejszych płaszczyzn kryształu o strukturze regularnej. Płaszczyzna (200) jest równoległa do płaszczyzn (100) i  $(\bar{1}00)$

Wskaźniki  $(hkl)$  określają pojedynczą płaszczyznę lub układ płaszczyzn równoległych. Jeśli płaszczyzna przecina oś po stronie wartości ujemnych, odpowiedni wskaźnik ma wartość ujemną, co zaznaczamy poziomą kreską nad wskaźnikiem:  $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ . Ściany sześcianu w kryształach regularnych mają wskaźniki (100), (010), (001),  $(\bar{1}00)$ ,  $(0\bar{1}0)$  i  $(00\bar{1})$ . Płaszczyzny równoważne sobie dzięki symetrii mogą być oznaczone wskaźnikami w nawiasach klamrowych; zatem ściany sześcianu opisane są wskaźnikami  $\{100\}$ . Mówiąc o płaszczyźnie (200), mamy na myśli płaszczyznę

<sup>3</sup>Po sprowadzeniu ułamków do najmniejszego wspólnego mianownika liczby w licznikach będą szukanyimi wskaźnikami. Często są one nazywane wskaźnikami Millera (przyp. tłum.).

<sup>4</sup>tzn. płaszczyzna jest równoległa do osi (przyp. tłum.).



równoległą do płaszczyzny (100), ale przecinającą oś  $a_1$  w odległości  $\frac{1}{2}a$  od początku układu współrzędnych.

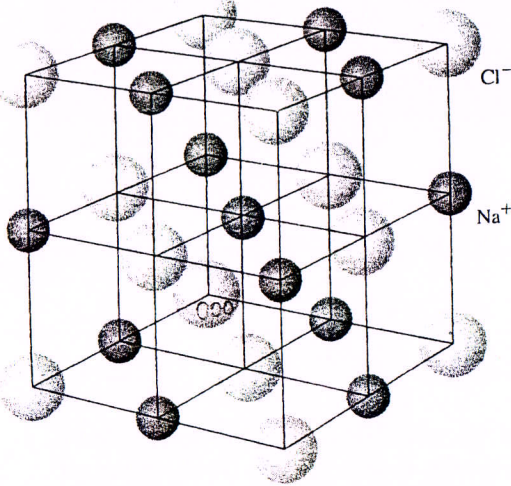
Kierunek w kryształach opisujemy za pomocą wskaźników  $[uvw]$ , które są układem najmniejszych liczb całkowitych o takim stosunku, jaki mają składowe wektora opisującego kierunek w układzie współrzędnych utworzonym przez osie  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$ . Zatem oś  $a_1$  ma kierunek  $[100]$ ; oś  $-a_2$  ma kierunek  $[0\bar{1}0]$ . W kryształach regularnych kierunek  $[hkl]$  jest prostopadły do płaszczyzny  $(hkl)$  o tych samych wskaźnikach, nie jest to natomiast prawdą w przypadku innych układów krystalograficznych.

## Proste struktury krystaliczne

Omówimy najczęściej spotykane proste struktury krystaliczne: strukturę chlorku sodu, chlorku cezu, heksagonalną gęsto upakowania, diamentu i regularną siarczku cynku.

### Struktura chlorku sodu

Strukturę chlorku sodu NaCl pokazano na rys. 17 i 18. Sieć jest regularna powierzchniowo centrowana; baza zawiera jeden atom Na i jeden atom Cl, znajdujące się w odległości równej połowie przekątnej umownej komórki w postaci sześcianu.



Rys. 17. Strukturę krystaliczną chlorku sodu możemy otrzymać umieszczając na przemian jony  $\text{Na}^+$  i  $\text{Cl}^-$  w węzłach sieci regularnej prostej. Każdy jon w kryształach otoczony jest sześcioma jonami przeciwnego znaku. Jest to sieć przestrzenna fcc, a baza zawiera jon  $\text{Cl}^-$  w punkcie o współrzędnych  $0,0,0$  i jon  $\text{Na}^+$  w punkcie  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ . Na rysunku pokazano umowną komórkę regularną. Średnice jonów zostały zmniejszone w porównaniu z rozmiarami komórki, by ich przestrzenne ułożenie było lepiej widoczne

Rys. 18. Model chlorku sodu są mniejsze o zgodą A. N. Holden

W komórce umieszczonych jest sześć jonów: trzy  $\text{Na}^+$  i trzy  $\text{Cl}^-$ .

Każdy atom otoczony jest sześcioma jonami przeciwnego znaku. W poniższej tabeli podano odległości między jonami w krawędzi sześcianu:  $0,1 \text{ nm}$ .

Na rysunku pokazano umowną komórkę regularną. Średnice jonów zostały zmniejszone w porównaniu z rozmiarami komórki, by ich przestrzenne ułożenie było lepiej widoczne.

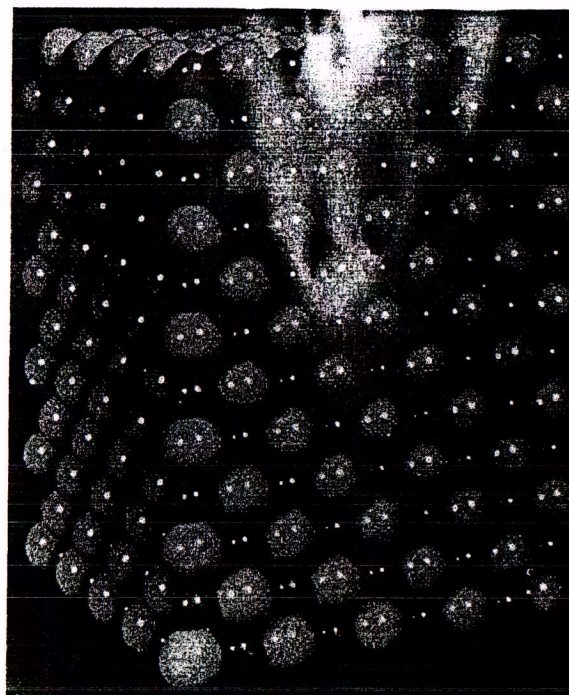


i  $\frac{1}{2}a$  od po-  
 óre są ukła-  
 adowe wek-  
 zer osie  $a_1$ ,  
 ki, ształach  
 ych samych  
 dów krysta-

turę chlorku  
 gularną siar-

eg. rna po-  
 , znajdujące  
 ci sześciannu.

liczną chlorku  
 nieszczając na  
 y węzłach sieci  
 on w kryształe  
 nami przeciw-  
 zestrzenna fcc,  
 nkie o współ-  
 unkie  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ .  
 owną komórkę  
 ostały zmniejsz-  
 arami komórki,  
 było lepiej wi-



Rys. 18. Model chlorku sodu. Jony sodu są mniejsze od jonów chloru (za zgodą A. N. Holdena i P. Singera)

W komórce umownej są cztery cząsteczki NaCl, których atomy mają następujące współrzędne:

$$\text{Cl: } 0, 0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}.$$

$$\text{Na: } \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, 0, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, 0, 0.$$

Każdy atom ma w najbliższym sąsiedztwie sześć atomów innego rodzaju. W poniższej tabeli zostały wymienione kryształy o strukturze NaCl. Długość krawędzi sześciannu  $a$  podana jest w angstromach:  $\text{Å} = 10^{-8} \text{ cm} = 10^{-10} \text{ m} = 0,1 \text{ nm}$ .

Kryształ	$a$ [Å]	Kryształ	$a$ [Å]
LiH	4,08	AgBr	5,77
MgO	4,20	PbS	5,92
MnO	4,43	KCl	6,29
NaCl	5,63	KBr	6,59

Na rysunku 19 przedstawiono zdjęcie kryształu siarczku ołowiu (PbS) znalezione w Joplin, w stanie Missouri. Próbki z Joplin mają kształt pięknych sześciannów.



## Rozdział 2

## Sieć odwrotna

<b>Spis treści</b>	
Dyfrakcja fal na kryształach	42
Prawo Bragga	42
Amplituda fali rozproszonej	45
Analiza Fouriera	45
Wektory sieci odwrotnej	48
Warunki dyfrakcji	49
Równania Lauego	51
Strefy Brillouina	53
Sieć odwrotna sieci sc	55
Sieć odwrotna sieci bcc	55
Sieć odwrotna sieci fcc	57
Analiza Fouriera bazy	58
Czynnik struktury sieci bcc	60
Czynnik struktury sieci fcc	61
Czynnik atomowy	61
Kwazikryształy	64
Podsumowanie	66
Zadania	67
1. Odległość międzypłaszczyznowa	67
2. Heksagonalna sieć przestrzenna	67
3. Objętość strefy Brillouina	67
4. Szerokość linii dyfrakcyjnej	67
5. Czynnik struktury diamentu	68
6. Czynnik atomowy dla wodoru	69
7. Łańcuch dwuatomowy	69
Literatura	69

Rys. 1. Zależność natężenia fotonów, neutronów i elektronów od kąta dyfrakcji



## Dyfrakcja fal na kryształach

## Prawo Bragga

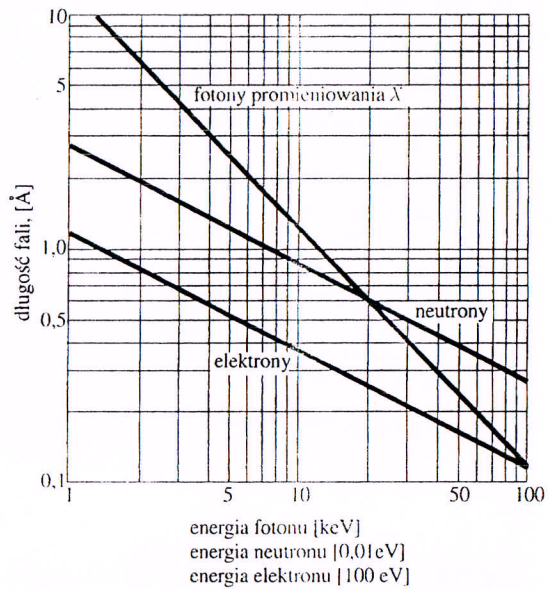
Strukturę krystaliczną badamy za pomocą dyfrakcji fotonów, neutronów i elektronów (rys. 1). Dyfrakcja zależy od struktury krystalicznej i od długości fali. Dla fal optycznych, np. o długości 5000 Å, nakładanie się fal rozproszonych sprężyście na poszczególnych atomach w kryształach prowadzi do zwykłego załamania optycznego. Kiedy długość fali promieniowania jest porównywalna ze stałą sieci lub mniejsza od niej, rejestrujemy wiązkę ugiętą w kierunku wyraźnie różniącym się od kierunku wiązki padającej.

W. L. Bragg przedstawił przekonujące wyjaśnienie mechanizmu powstawania wiązki ugiętej na kryształach. Rozumowanie Bragga jest proste, a przy tym daje poprawne wyniki. Przyjmijmy, że padające fale odbijają się zwierciadlanie od równoległych płaszczyzn atomowych w kryształach, przy czym każda płaszczyzna odbija tylko niewielką część promieniowania, jak lekko posrebrzone lustro.

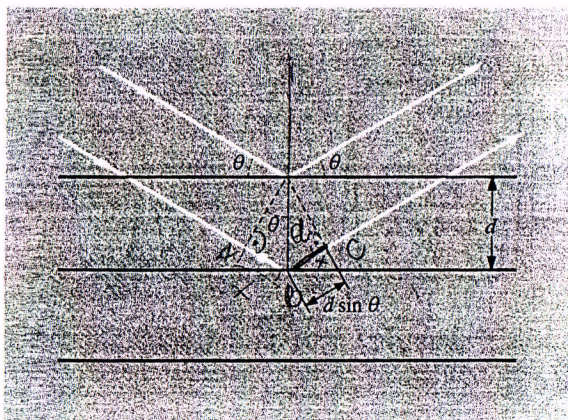
W odbiciu cyjna pow się, jak n: promieni niespręży

Rozv nie pada płaszczyzną. Wz wtedy, {





Rys. 1. Zależność długości fali od energii fotonów, neutronów i elektronów



$$\sin \theta = \frac{\lambda}{d}$$

$$\lambda = d \sin \theta$$

$$\lambda = AB + BC$$

Rys. 2. Wyprowadzenie równania Bragga  $2d \sin \theta = n\lambda$ , gdzie  $d$  oznacza odległość między równoległymi płaszczyznami atomowymi, a  $2\pi n$  — różnicę faz między promieniami odbitymi od sąsiednich płaszczyzn. Płaszczyzny odbijające nie mają nic wspólnego z płaszczyznami powierzchni próbki

W odbiciu zwierciadlanym kąt padania jest równy kątowi odbicia. Wiązka dyfrakcyjna powstaje wtedy, gdy fale odbite od równoległych płaszczyzn wzmacniają się, jak na rys. 2. Rozważmy rozpraszanie sprężyste, tzn. takie, w którym energia promieniowania rentgenowskiego nie zmienia się podczas odbicia. Rozpraszanie niesprężyste ze wzbudzeniem fal sprężystych jest omówione w uzupełnieniu A.

Rozważmy równoległe płaszczyzny odległe od siebie o  $d$ . Niech promieniowanie pada w płaszczyźnie kartki. Różnica dróg dla promieni odbitych od sąsiednich płaszczyzn jest równa  $2d \sin \theta$ , gdzie  $\theta$  oznacza kąt, jaki tworzy promień z płaszczyzną. Wzmocnienie promieniowania ugiętego na kolejnych płaszczyznach nastąpi wtedy, gdy różnica dróg optycznych będzie równa całkowitej wielokrotności  $n$



długości fali  $\lambda$ , tak więc

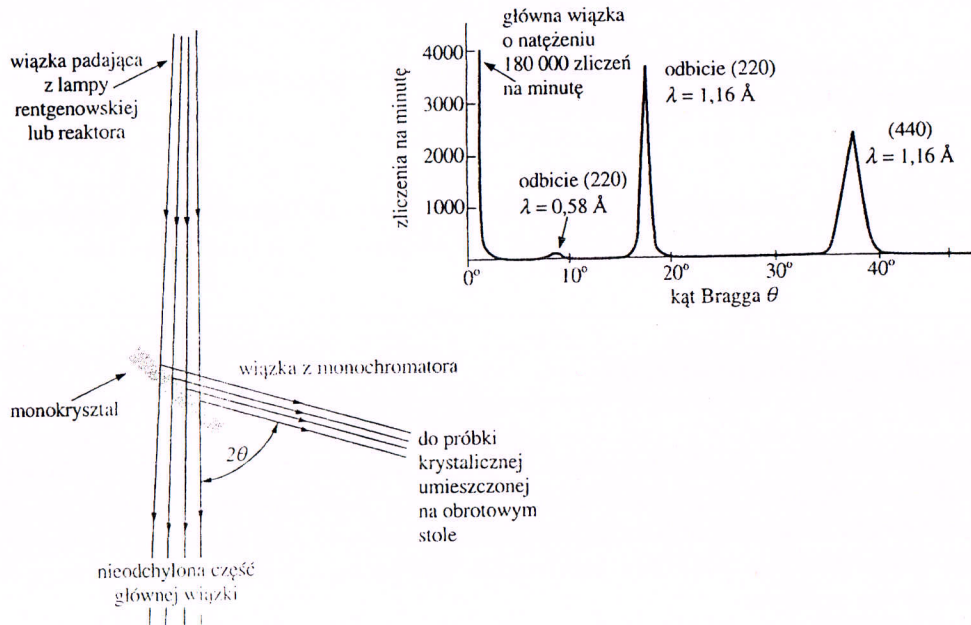
$$2d \sin \theta = n\lambda. \quad \text{sin } 90^\circ = 1 \quad (1)$$

$2d = n\lambda$

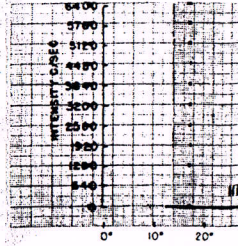
Jest to prawo Bragga. Odbicie Bragga może zachodzić jedynie dla długości fali  $\lambda \leq 2d$ . Dlatego właśnie nie możemy wykorzystać światła widzialnego.

Chociaż odbicie od każdej płaszczyzny jest zwierciadlane, to tylko dla niektórych wartości kąta  $\theta$  fale odbite od wszystkich równoległych płaszczyzn mają taką samą fazę, co daje silną wiązkę odbitą. Gdyby każda płaszczyzna odbijała w stu procentach, to tylko pierwsza płaszczyzna „widziałaby” promieniowanie i fale o dowolnej długości ulegałyby odbiciu. Ale każda płaszczyzna odbija od  $10^{-3}$  do  $10^{-5}$  padającego promieniowania, tak więc od  $10^3$  do  $10^5$  płaszczyzn może wpływać na ukształtowanie wiązki przez doskonały kryształ zgodnie z prawem Bragga. Odbicie od pojedynczej płaszczyzny omówione jest w rozdz. 19 dotyczącym fizyki powierzchni.

Prawo Bragga jest konsekwencją periodyczności sieci. Zauważmy, że prawo to nie uwzględnia składu bazy atomowej, związanej z każdym węzłem sieci. Jednakże pokażemy, że zawartość bazy określa względne natężenia różnych rzędów dyfrakcji (oznaczonych wyżej przez  $n$ ) na danej grupie płaszczyzn równoległych. Wyniki



**Rys. 3.** Schemat monochromatora, który w wyniku odbicia Bragga z szerokiego widma wiązki padającej promieni rentgenowskich lub neutronów wybiera wąskie widmo. W górnej części rysunku pokazano wynik analizy (otrzymanej przez odbicie od drugiego kryształu) monochromatyczności wiązki neutronów o długości fali 1,16 Å otrzymanej za pomocą monochromatora z kryształem fluoru wapnia. Główna wiązka nie odbija się od drugiego kryształu (wg G. Bacona)



**Rys. 4.** Dyfraktogram zliczeń dla ugiętej wiązki

doświadczalne, i rys. 3 i 4. W cz...

**Amplituda fali**

Warunek dyfrakcji by fale rozprasz: wyznaczenia natężenia czyli przestrzeni jest głębsza analiza

Kryształ jest z rozdz. 1:  $T =$  natomiast  $a_1$ , a kryształ, takim elementu magnetycz

**Analiza Fouriera**

Koncentracja elementów  $a_2$ ,  $a_3$  w kierunku

Okresowość stw Większość interesujących składowymi rozwiązań Rozważmy  $n$   $a$  w kierunku  $x$

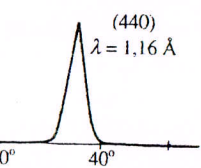


(1)

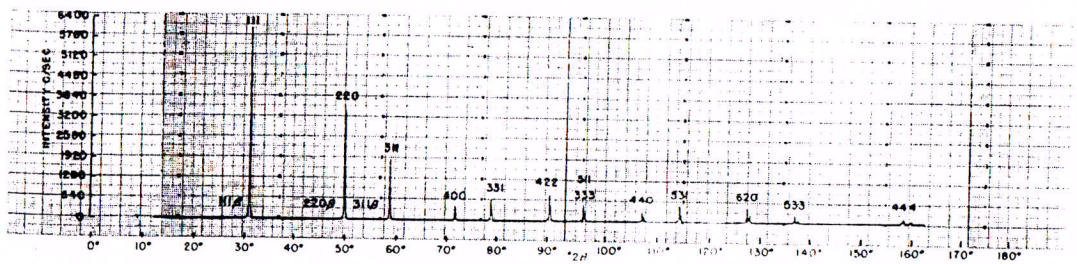
nie dla długości fali  
działnego.

tylko dla nie-  
szczyzn mają  
szczyzna odbijała w  
romieniowanie i fale  
odbija od  $10^{-3}$  do  
szczyzn może wpły-  
e z prawem Bragga.  
dotyczącym fizyki

ważny, że prawo to  
dem sieci. Jednakże  
ch rzędów dyfrakcji  
noległych. Wyniki



kiego widma wiązki  
W górnej części ry-  
ysztalu) monochro-  
cą monochromatora  
ysztalu (wg G. Ba-



Rys. 4. Dyfraktogram rentgenowski próbki proszkowej krzemu, przedstawiający zapis liczby zliczeń dla ugiętej wiązki (za zgodą W. Parrisha)

doświadczalne, ilustrujące odbicia Bragga od monokryształów, pokazane są na rys. 3 i 4. W czasie pomiarów kryształ był obracany wokół ustalonej osi.

## Amplituda fali rozproszonej

Warunek dyfrakcji (1) podany przez Bragga jest warunkiem koniecznym do tego, by fale rozpraszane na węzłach sieci wzmacniały się w wyniku interferencji. Do wyznaczenia natężenia linii rozpraszania na podstawie znajomości atomów bazy, czyli przestrzennego rozkładu elektronów wewnątrz każdej komórki, potrzebna jest głębsza analiza.

Kryształ jest niezmienniczy ze względu na translację opisaną wzorem (3) z rozdz. 1:  $\mathbf{T} = u_1\mathbf{a}_1 + u_2\mathbf{a}_2 + u_3\mathbf{a}_3$ , gdzie  $u_1, u_2, u_3$  oznaczają liczby całkowite, natomiast  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  — wektory podstawowe sieci. Lokalne własności fizyczne kryształu, takie jak gęstość ładunku, koncentracja elektronów czy gęstość momentu magnetycznego, też są niezmiennicze ze względu na translację  $\mathbf{T}$ .

## Analiza Fouriera

Koncentracja elektronów  $n(\mathbf{r})$  jest okresową funkcją położenia  $\mathbf{r}$ , z okresami  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  w kierunku trzech osi kryształu. Wtedy

$$n(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = n(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Okresowość stwarza sytuację dogodną do przeprowadzenia analizy Fouriera. Większość interesujących własności kryształów jest bezpośrednio związana ze składowymi rozwinięcia funkcji  $n(\mathbf{r})$  w szereg Fouriera.

Rozważmy najpierw przypadek jednowymiarowy, tzn. funkcję  $n(x)$  o okresie  $a$  w kierunku  $x$ . Rozwijamy  $n(x)$  w szereg Fouriera składający się z sinusów



i wywołują wtórną emisję elektronową. Zwielokrotnienie strumienia elektronowego na skutek emisji wtórnej zależy od energii elektronów padających na dynodę oraz od rodzaju powierzchni dynody. Dla czystych powierzchni metalicznych współczynnikiem zwielokrotnienia emisji  $\sigma$  w korzystnych warunkach energetycznych dochodzi do 1,5. Zastosowanie powierzchni metalicznych pokrytych cienką warstwą półprzewodnika lub warstw złożonych, np. Cs<sub>2</sub>O z domieszkami Ag i Cs, pozwala zwiększyć wartość współczynnika emisji wtórnej, która w korzystnych warunkach energetycznych sięga do około 20. Zwielokrotniony na dynodzie D<sub>1</sub> strumień elektronów po odpowiednim przyspieszeniu pada na dynodę D<sub>2</sub>, powtórnie ulega zwielokrotnieniu, pada na dynodę D<sub>3</sub> itd. Po n-krotnym wzmocnieniu na n-tej dynodzie pada na anodę A, z której wychodzi na zewnątrz w postaci prądu o natężeniu zwiększonym w stosunku do pierwotnego prądu fotoelektrycznego  $\sigma^n$  razy. Ostateczne wzmocnienie zależy w dużym stopniu od przyspieszającego napięcia między kolejnymi dynodami. W nowoczesnych fotopowielaczach w korzystnych dla nich warunkach pracy osiąga się wzmocnienia rzędu 10°. Rozmiary nowoczesnych fotopowielaczy odpowiadają mniej więcej rozmiarom lamp elektronowych. Są one m.in. szeroko stosowane w fizyce jądrowej, jako urządzenia pomocnicze przy licznikach scyntylacyjnych.

### 29.8. Promienie Röntgena

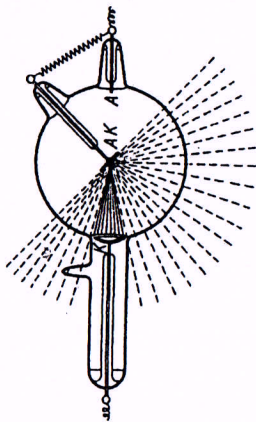
29.8.1. *Ogólna charakterystyka właściwości promieni Röntgena.* Odkrycie promieni katodowych i badanie ich właściwości doprowadziło do nowego naukowego osiągnięcia. Okazało się, że po gwałtownym zahamowaniu promieni katodowych w ich ruchu od przeszkody, na której nastąpiło zahamowanie, rozchodzą się nowe promienie, zwane promieniami X lub promieniami Röntgena od nazwiska ich odkrywcy (rok 1895).

Już początkowe badania właściwości promieni Röntgena wykazały, że mają one zdolność:

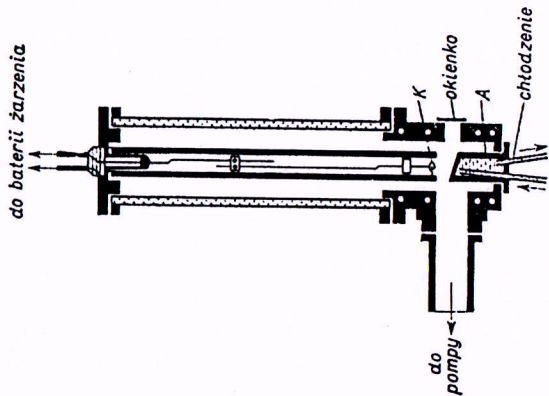
- 1) wzbudzania fluorescencji licznych ciał (m.in. wywołują świecenie ekranów pokrytych platynocjankiem baru lub siarczkiem cynku),
- 2) zacierzania kliszy fotograficznej,
- 3) wywoływania jonizacji gazów (stwierdzono szybkie rozładowywanie się elektroskopów umieszczonych w pobliżu źródeł promieni Röntgena),
- 4) przenikania przez materię.

Przenikliwość promieni Röntgena zależy od warunków ich wytwarzania. Początkowo promienie Röntgena były wytwarzane w tzw. lampach rentgenowskich jonowych. Budowa takiej lampy przedstawiona jest schematycznie na rys. 29.16. W bańce próżniowej, w której ciśnienie waha się około 0,1 N/m<sup>2</sup> (0,001 mm Hg), znajduje się katoda K w postaci wklęsłej blaszki, np. z glinu, anoda A i antykatoda AK w postaci płytki z trudno topliwego metalu, np. wolframu lub platyny. Antykatoda umieszczona jest w odległości równej promieniowi krzywizny od katody. Dzięki temu wiązka elektronów wybiegająca z katody prostopadle do jej powierzchni skupia się na powierzchni anody. Antykatoda ma ten sam potencjał co anoda, więc w zasadzie oddzielna anoda nie jest potrzebna. Napięcie istniejące między anodą i katodą decyduje o prędkości

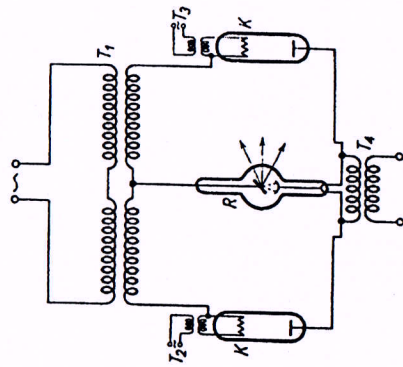
elektronów dobiegających do antykatody. Jest ono rzędu kilkudziesięciu tysięcy woltów. Wyższym napięciem odpowiadają promienie Röntgena bardziej przenikliwe — bardziej twarde. Niższym napięciem na elektrodach lampy rentgenowskiej odpowiadają promienie bardziej miękkie, łatwiej absorbowane przez materię.



Rys. 29.16



Rys. 29.17



Rys. 29.18

Ciśnienie panujące w lampie rentgenowskiej jonowej ma również wpływ na twar- dość promieni Röntgena. Z biegiem czasu ciśnienie w bańce się zmienia, gdyż część gazu zostaje zaabsorbowana na ściankach. W tych warunkach potrzebne jest wyższe napięcie do wzbudzenia promieni Röntgena i stają się one twardsze. Stałość ciśnienia można utrzymać przez wprowadzenie do bańki lampy rurki palladowej z okludowanym wodorem (*okluzja* — pochłanianie gazów przez niektóre ciała stałe), która po ogrzaniu uwalnia wodór i uzupełnia niedobór ciśnienia.



Rysunek 29.17 przedstawia nowoczesną lampę rentgenowską z żarzoną katodą, zwaną lampą Coolidge'a. Wewnątrz lampy mamy wysoką próżnię. Ciężnienie jest rzędu  $10^{-7}$  N/m<sup>2</sup> (czyli  $10^{-9}$  mm Hg). Katodę K stanowi spiralka wolframowa, anodą jest podstawa pustego miedzianego cylindra. Może to być płytka z platyny, wolframu, molibdenu, srebra. Miedziane ścianki cylindra zapewniają dobre odprowadzanie ciepła. W pewnych typach lamp stosuje się dodatkowe chłodzenie powietrzne, olejowe lub wodne. Temperatura żarzenia katody zależy od zastosowanego napięcia żarzenia. Im wyższa jest temperatura katody, tym większa jest gęstość prądu termionemijii i w dalszych skutkach — tym większe natężenie promieni Röntgena. Natężenie promieni Röntgena decyduje o intensywności świecenia ekranów fluorujących, o stopniu zaciemnienia kliszy fotograficznej, o stopniu jonizacji gazów, co jest stosunkowo najłatwiejsze do mierzenia. Napięcie włączone między anodę i katodę decyduje o twardości promieni Röntgena. Źródłem tego napięcia jest transformator wysokiego napięcia  $T_1$ . Przed doprowadzeniem napięcia do zacisków lampy  $R$  zostaje ono wyprostowane przez lampę prostowniczą  $K$  (ewentualnie dwie lampy), zwaną kenotronem. Rysunek 29.18 przedstawia schemat połączeń nowoczesnej lampy rentgenowskiej. Transformatory  $T_2$ ,  $T_3$  i  $T_4$  są źródłami napięcia żarzenia w lampach prostowniczych i lampie rentgenowskiej (lampa rentgenowska zaznaczona jest na schematach jako lampa jono-  
nowa).

*Przenikliwość promieni Röntgena zależy nie tylko od napięcia, przy którym pracuje lampa, lecz także od rodzaju materii, przez którą przechodzą promienie. Okazało się, że czynnikiem decydującym o absorpcji promieni Röntgena jest numer porządkowy  $Z$  (zwany też liczbą atomową) pierwiastka w układzie Mendelejewa i grubość warstwy ciała absorbującego. Jeżeli przez  $I_0$  oznaczymy natężenie wiązki padającej, a przez  $I$  — natężenie wiązki wychodzącej z warstwy absorbującej o grubości  $x$ , to*

$$I = I_0 e^{-\mu x}, \quad (29.9)$$

gdzie  $\mu$  oznacza *liniowy współczynnik absorpcji* danego środowiska. Jest on funkcją numeru porządkowego pierwiastka absorbującego i wyraża logarytm naturalny ułamka, o jaki zmniejsza się natężenie promieni Röntgena po przejściu jednostkowej drogi w ośrodku absorbującym. (Pamiętać jednak należy, że  $\mu$  jest ponadto zależne od rodzaju padających promieni Röntgena.)

*Wzór (29.9) otrzymujemy w wyniku prostych rozważań matematycznych. Zmiana natężenia wiązki po przejściu przez warstwę absorbującą jest proporcjonalna do natężenia  $I$  oraz do grubości warstwy  $dx$ , czyli*

$$-dI = \mu I dx,$$

$$-\frac{dI}{I} = \mu dx,$$

a po scałkowaniu

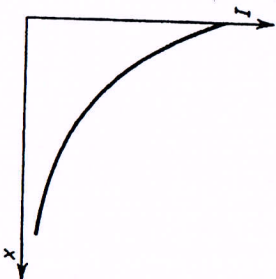
$$\ln I = -\mu x + \text{const.}$$

Wartość stałej całkowania znajdujemy z warunku, że dla  $x = 0$   $I = I_0$ , a zatem

$$\ln I = -\mu x + \ln I_0,$$

Wykres tej zależności przedstawiony jest na rys. 29.19.

Zależność absorpcji promieni Röntgena od rodzaju ciała absorbującego umożliwiają stosowanie ich do celów diagnostycznych w medycynie. Ciało ludzkie absorbuje słabiej niż kości, a te ostatnie słabiej niż np. ołdanki pocisków lub kule tkwiące w organizmie. Wprowadzenie silnie absorbujących „papek” do przewodu pokarmowego lub tzw. płynów kontrastowych do płuc umożliwia otrzymanie zdjęć rentgenowskich (renogramów), stanowiących podstawę do stawiania diagnozy lub kontroli stanu zdrowia. Na tej samej podstawie opiera się tzw. defektoskopia rentgenowska: prześwietlanie bloków metalicznych pozwala na kontrolę np. odlewów, wykrywa wady w postaci pęcherzyków powietrza, pęknięć wewnętrznych itp.



Rys. 29.19

Lampy rentgenowskie stosowane do celów diagnostycznych w medycynie pracują pod napięciem około 60 000 V i przy natężeniu prądu 5–400 mA. Przy większym natężeniu prądu stosuje się krótkie czasy pracy lampy, około 5–10 sekund. W technice stosowane są lampy niskonapięciowe (30 000–80 000 V) i wysokonapięciowe do 250 000 V. Iloczyn  $UI$  przedstawia moc lampy. Na przykład dla lampy o napięciu 100 000 V i natężeniu prądu 5 mA moc wynosi 500 W. Z tego bardzo mały ułamek, bo zaledwie około  $\frac{1}{1000}$  przekształca się na energię promieni Röntgena, reszta zamienia się na ciepło. Liczby te wskazują na konieczność stosowania trudno topliwych metali jako materiałów na anody katody i intensywnego chłodzenia zależnego ponadto od tego, czy lampa jest przewidziana do pracy ciągłej, czy w krótkich impulsach.

W czasie pracy z lampami rentgenowskimi konieczne jest zachowanie wielu środków ostrożności, gdyż absorpcja promieni Röntgena przez ciało ludzkie powoduje zmiany we krwi, oparzenia rentgenowskie itp. Działanie jest tym niebezpieczniejsze, że efekty krótkich, powtarzających się naświetlań kumulują się w organizmie prowadząc do poważnych zmian. Z tego powodu lampy umieszcza się w osłonach ołowianych, promienie wychodzą na zewnątrz tylko przez okienka o możliwie najmniejszych rozmiarach, a więc jako wiązki o określonym kierunku przebiegu. Ekrany do prześwietlań rentgenowskich mają od strony obserwatora zabezpieczenie w postaci grubych warstw ze szkła ołowowego. Dla zabezpieczenia przed atakującym ze wszystkich stron pro-



mięniowaniem rentgenowskim rozproszonym na cząstkach powietrza, częściach aparatury itp. pracownicy noszą specjalne fartuchy ochronne gumowe z dodatkiem ołowiu.

Promienie Röntgena działają niszcząco na młode tkanki. Zostało to wykorzystane przy zwalczaniu szybko rozwijającej się tkanki nowotworów.

29.8.2. *Natura falowa promieni Röntgena.* Dalsze badania promieni Röntgena przyniosły wiadomości o ich charakterze. Doświadczenia wykazały, że promienie Röntgena nie ulegają odchyleniu od pierwotnego biegu ani w polu elektrycznym, ani w polu magnetycznym. Nie są zatem cząsteczkami obdarzonymi ładunkami elektrycznymi, nie są odbitymi od powierzchni anody katody elektronami. Nasunęło się przypuszczenie, że do ich charakteru falowego. Potwierdzeniem tej hipotezy byłoby doświadczenie stwierdzenie w dziedzinie promieniowania rentgenowskiego charakterystycznych zjawisk falowych, takich jak ugięcie, interferencja, polaryzacja. Dopiero w r. 1912 Laue, a w r. 1913 Braggowie uzyskali efekty interferencji promieni Röntgena po zastosowaniu całkowicie różnych metod. Trudności eksperymentalne wiązały się z tym, że długość fali promieni Röntgena jest tak mała, że zawodziły zwykle metody badań optycznych. Do wywołania ugięcia nie nadawały się zwykłe siatki dyfrakcyjne ustawiane prostopadle do kierunku biegu promieni. Potrzebne były takie siatki, których stałe byłyby rzędu odległości międzycząsteczkowych w ciałach stałych.



Rys. 29.20

Laue pierwszy wysunął myśl, że do ugięcia i interferencji promieni Röntgena można wykorzystać regularny układ elementów kryształu, czyli atomów, jonów lub cząstek (por. § 16.12). Doświadczenia tego typu wykonali następnie Friedrich i Knipping. Wąska wiązka promieni Röntgena przechodzi przez cienką płytkę wyciętą z kryształu, a następnie pada na kliszę fotograficzną. Na kliszy otrzymujemy zacementowanie w miejscu centralnym odpowiadającym nieugiętemu przebiegowi promieni oraz szereg zacementów (plamek) rozmieszczonych z zachowaniem pewnej symetrii dookoła plamki centralnej (rys. 29.20). Obraz interferencyjny zmienia swą symetrię przy zmianie rodzaju



