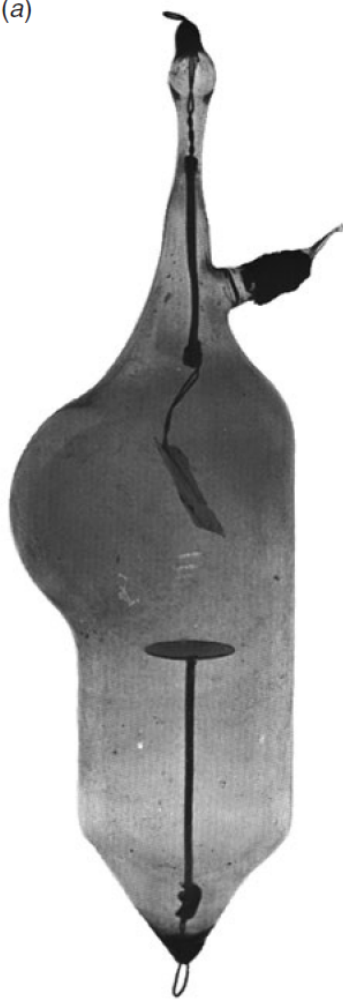


Promieniowanie X

- ♦ Jak powstaje promieniowanie rentgenowskie
- ♦ Budowa lampy rentgenowskiej
- ♦ Widmo ciągłe i charakterystyczne promieniowania X

Lampa rentgenowska

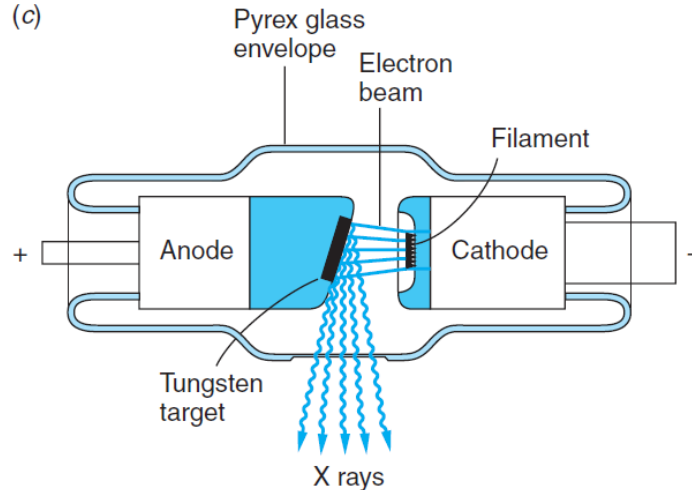
(a)



(b)



(c)



(a) Early x-ray tube.

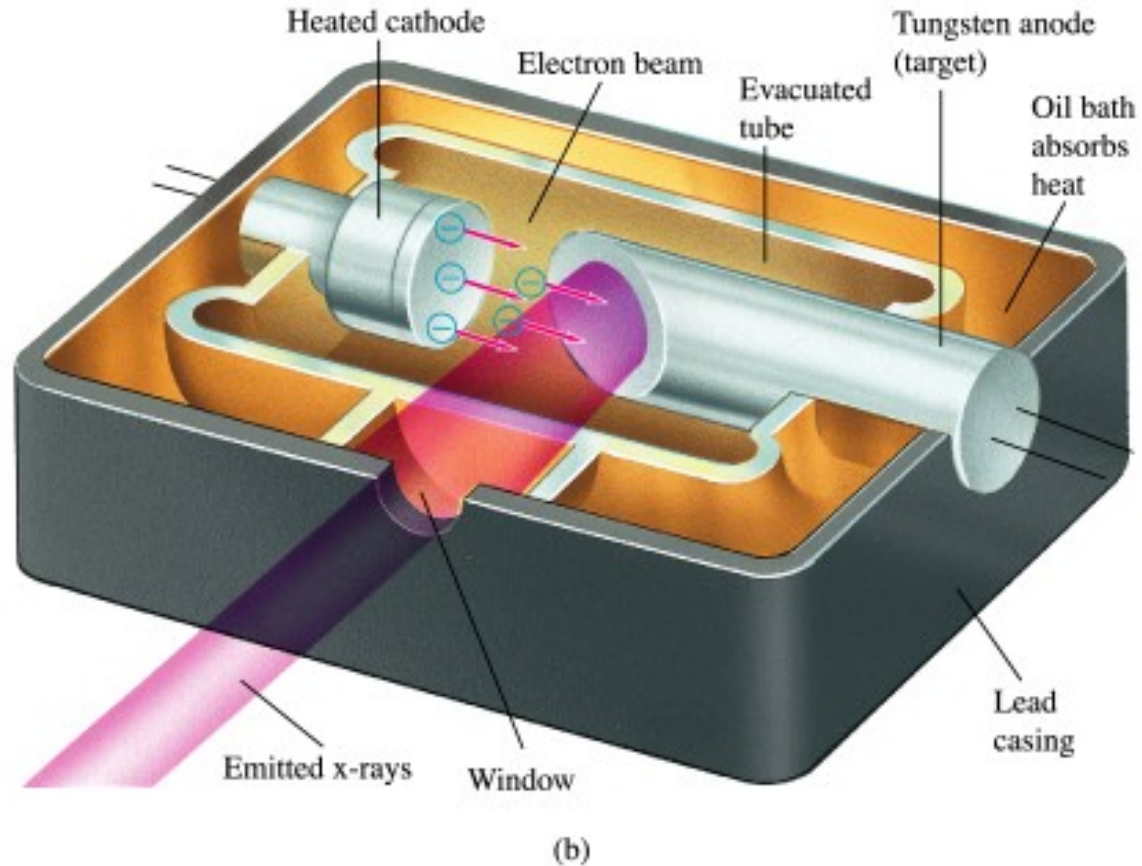
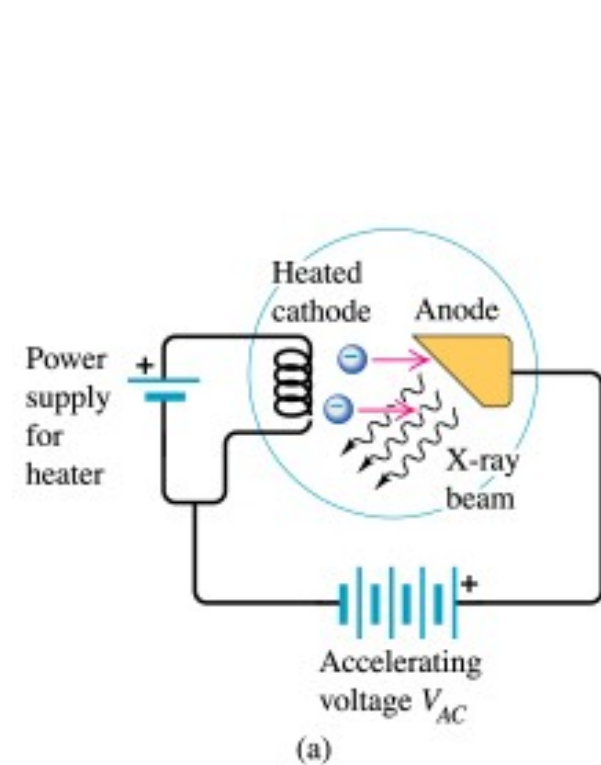
[*Courtesy of Cavendish*

Laboratory.] (b) X-ray tubes became more compact over time. This tube was a design typical of the mid-twentieth century. [*Courtesy of*

Schenectady Museum, Hall of Electrical History, Schenectady, NY.]

(c) Diagram of the components of a modern x-ray tube. Design technology has advanced enormously, enabling very high operating voltages, beam currents, and x-ray intensities, but essential elements of the tubes remain unchanged.

Lampa rentgenowska



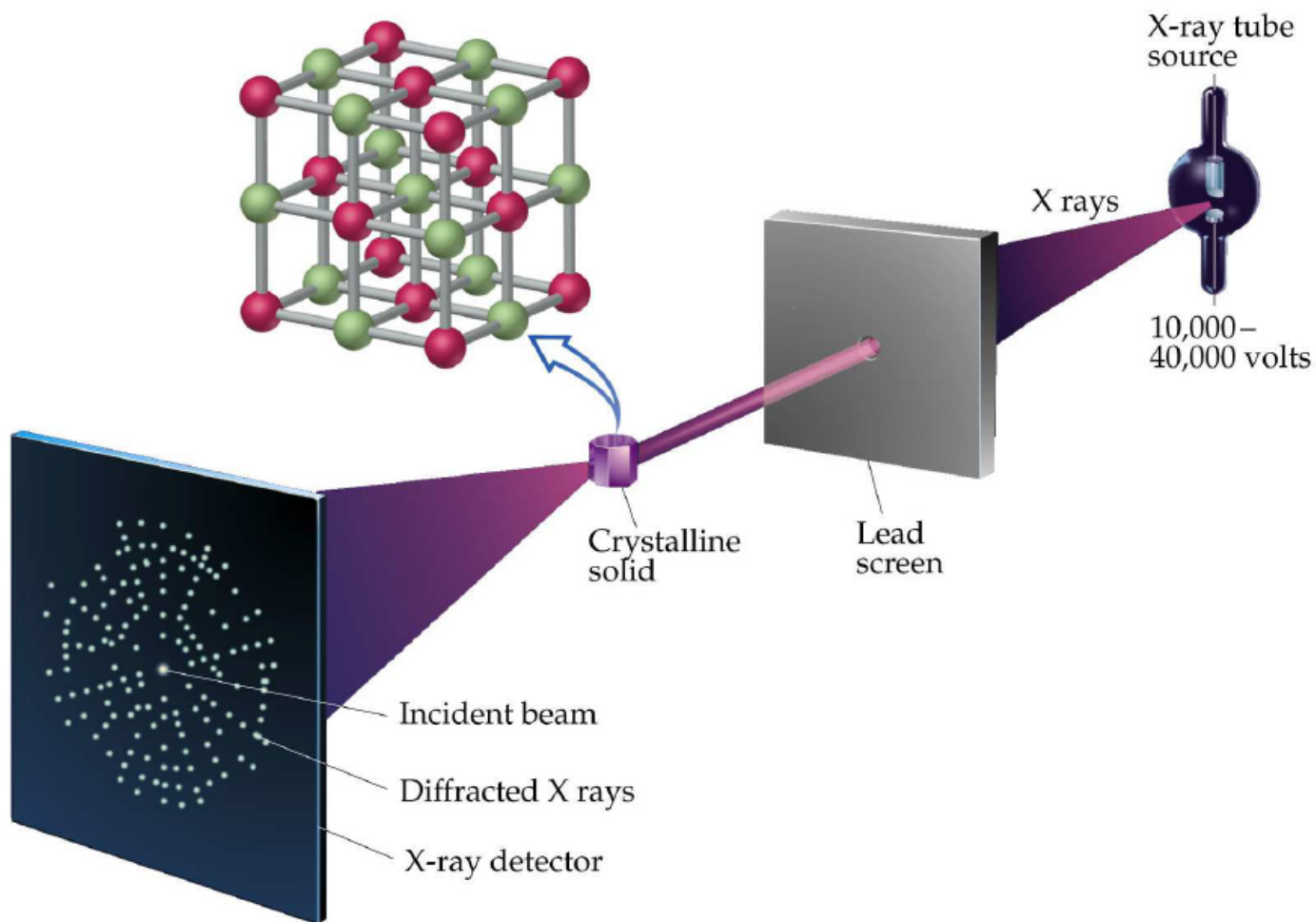
Promieniowanie rentgenowskie



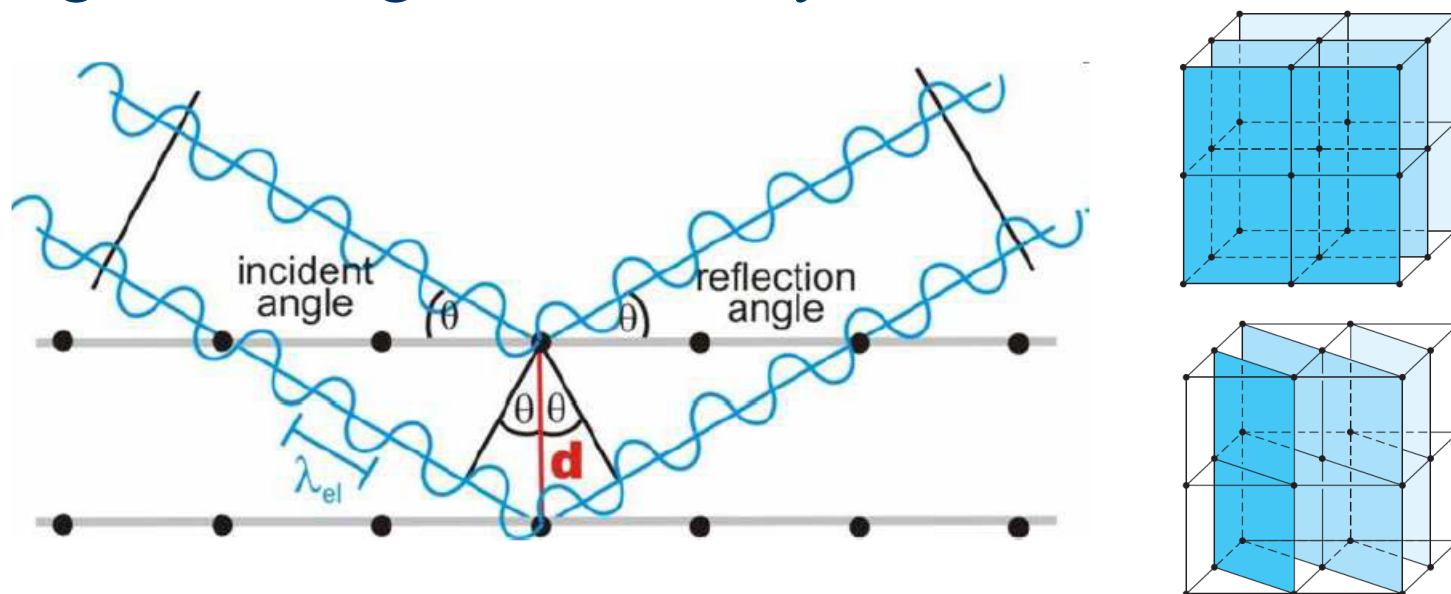
An x ray
of Mrs.
Roentgen's
hand taken
by Roentgen
shortly after
his discovery.

- Promienie X nie ulegają odchyleniu w polu magnetycznym
- Powstaje w wyniku hamowania elektronów, więc ma naturę fal elektromagnetycznych (prawa elektrodynamiki klasycznej)
- Zauważalne bardzo małe poszerzenie wiązki przechodzącej przez szczelinę wielkości rzędu tysięcznej części mm, zatem dł. fali X jest rzędu 10^{-10}m
- Aby zbadać własności falowe promieniowania X trzeba używać siatki dyfrakcyjnej o rozmiarach atomów

Dyfrakcja promieniowania rentgenowskiego na monokryształach



Dyfrakcja promieniowania rentgenowskiego na monokryształach



Fale uginane przez równoległe płaszczyzny ulegają wzmocnieniu gdy „są w fazie”. Wtedy musi być spełniony warunek BRAGGÓW:

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

W zależności od struktury krystalicznej może być wiele płaszczyzn o różnych odległościach d .

Sposób analizy spektrum promieniowania rentgenowskiego

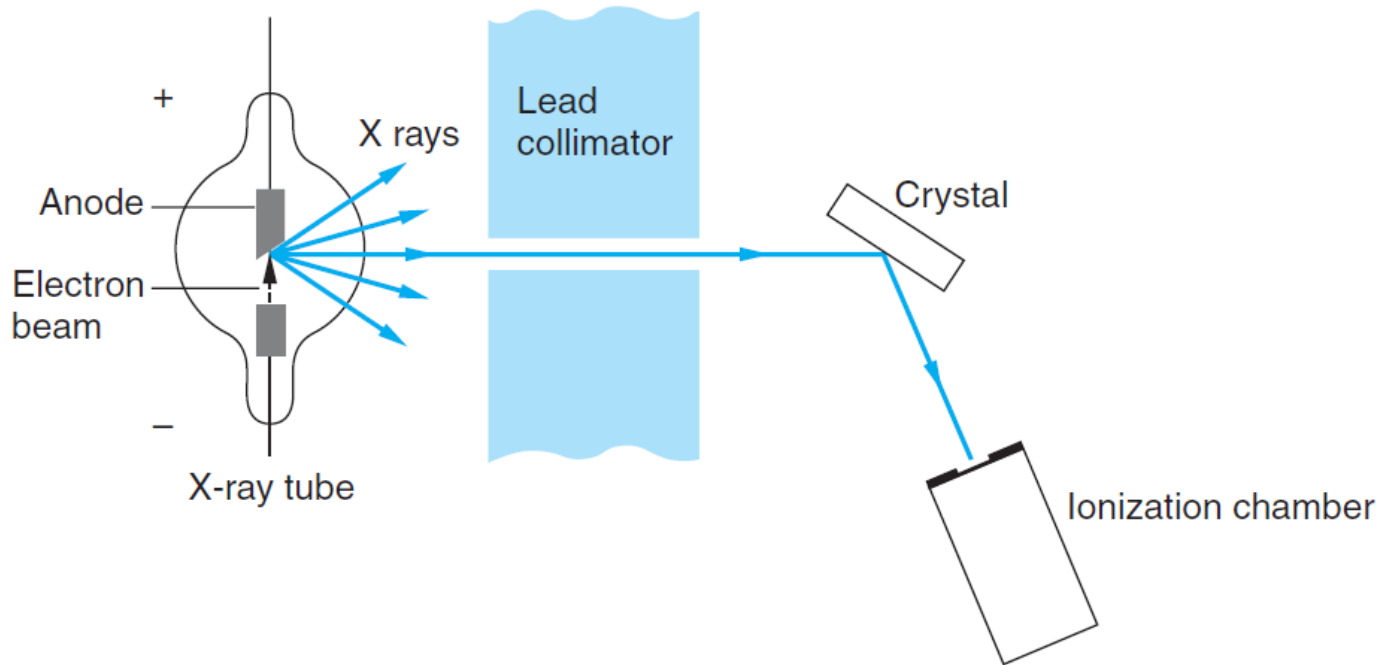
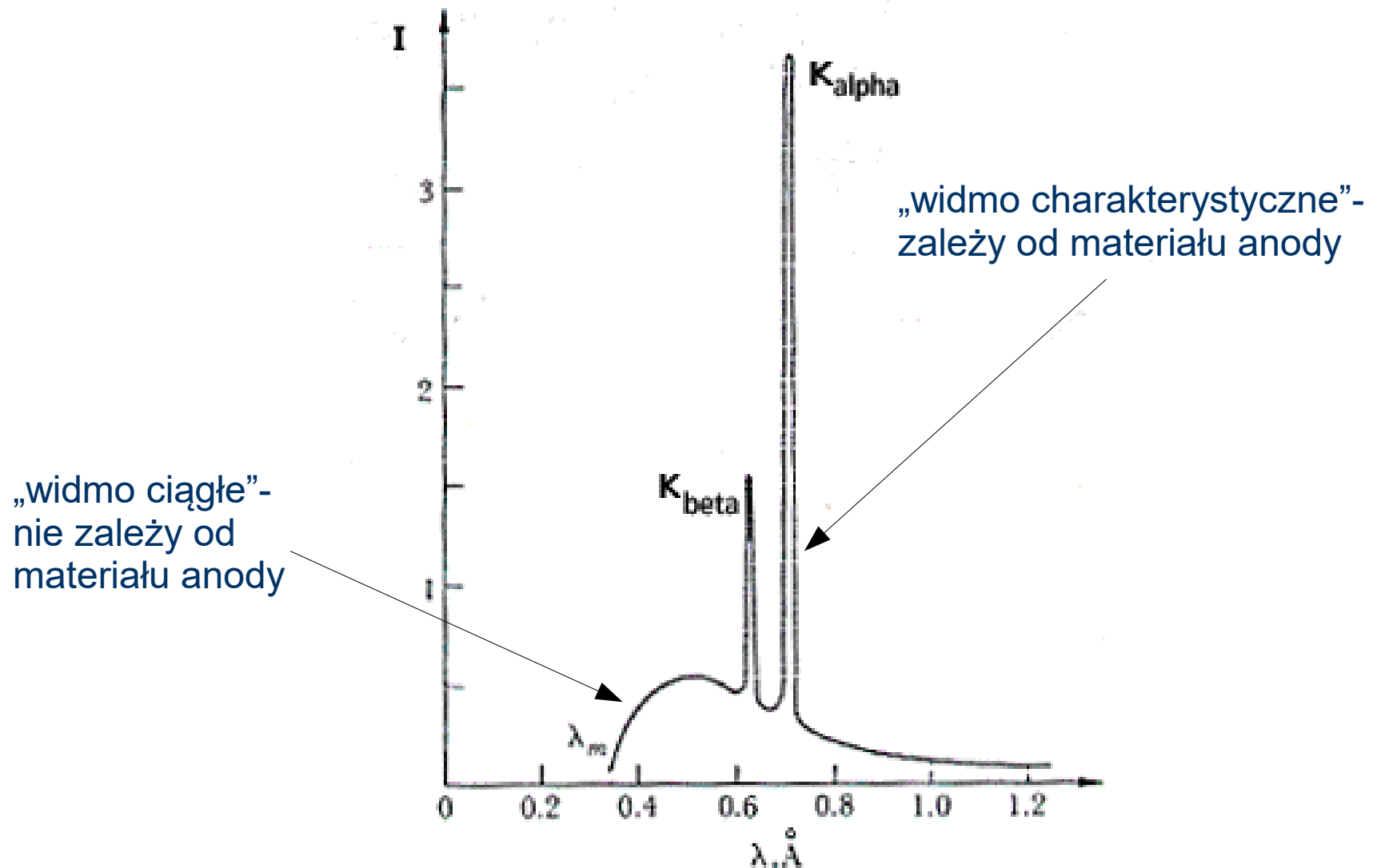


Figure 3-14 Schematic diagram of a Bragg crystal spectrometer. A collimated x-ray beam is incident on a crystal and scattered into an ionization chamber. The crystal and ionization chamber can be rotated to keep the angles of incidence and scattering equal as both are varied. By measuring the ionization in the chamber as a function of angle, the spectrum of the x rays can be determined using the Bragg condition $2d \sin \theta = m\lambda$, where d is the separation of the Bragg planes in the crystal. If the wavelength λ is known, the spacing d can be determined.

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

Promieniowanie rentgenowskie





Promieniowanie rentgenowskie

Jak powstaje promieniowanie rentgenowskie?

Promieniowanie rentgenowskie powstaje wtedy wiązka elektronów o **wystarczająco** wysokiej energii oddziałuje z materią.

Kiedy elektrony uderzają w materię (tarczę) możliwe są następujące procesy:

- elastyczne odbicie od tarczy (bez straty energii)
- uderzenie w elektrony zewnętrzne słabo związane z atomem wybijając je (tzw. elektrony wtórne)
- **wybijanie elektronów z powłok wewnętrznych czemu towarzyszy emisja tzw. promieniowania „charakterystycznego”**
- **nieelastycznie rozpraszanie elektronu i utrata części energii (hamowanie elektronów), emitowanie promieniowania elektromagnetycznego „ciągłego”.**

Promieniowanie rentgenowskie

Widmo ciągłe

Energia kinetyczna elektronów jest częściowo lub całkowicie zamieniana na energię promieniowania rentgenowskiego. W zależności od rodzaju zderzenia elektrony tracą różne ilości energii i dlatego energia powstających kwantów promieniowania rentgenowskiego $h\nu$ obejmuje szeroki zakres wartości tworząc **widmo ciągłe**. Widmo to rozpoczyna się od pewnej progowej wartości:

tzw. **krótkofalowa granica widma** $\lambda_{\min}$, niezależna od materiału tarczy, zależna energii kinetycznej elektronów:

energia kinetycznej elektronów $E_k = \frac{mv^2}{2} = eU = h\nu_{\max}$ foton o max. energii $= \frac{hc}{\lambda_{\min}}$

U - napięcie lampy przyspieszające elektrony
 m – masa elektronu
 h – stała Planck'a
 v – prędkość elektronu

$$\lambda_{\min} = \frac{hc}{eU}$$

– widoczne max. widma występuje w obszarze $\lambda = 1.5 \lambda_{\min}$

– całkowita intensywność spektrum proporcjonalna do napięcia w kwadracie U^2

Promieniowanie rentgenowskie

- Promieniowanie elektromagnetyczne o długość fali między 0.1 Å do 50 Å (co odpowiada energii kwantów od 120 do 0.25 keV)
- Często jednostki długości fali w tym zakresie używa się Angstrémów (Å)

$$1 \text{ Å} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$$

Często energię kwantów tego promieniowania wyraża się w elektronowoltach (eV) Wynika to z relacji pomiędzy energią a długością fali dla fotonu

gdzie:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

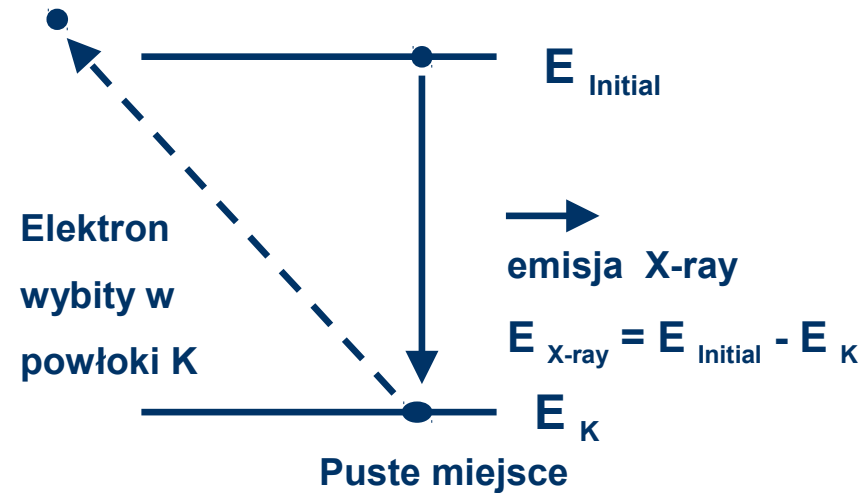
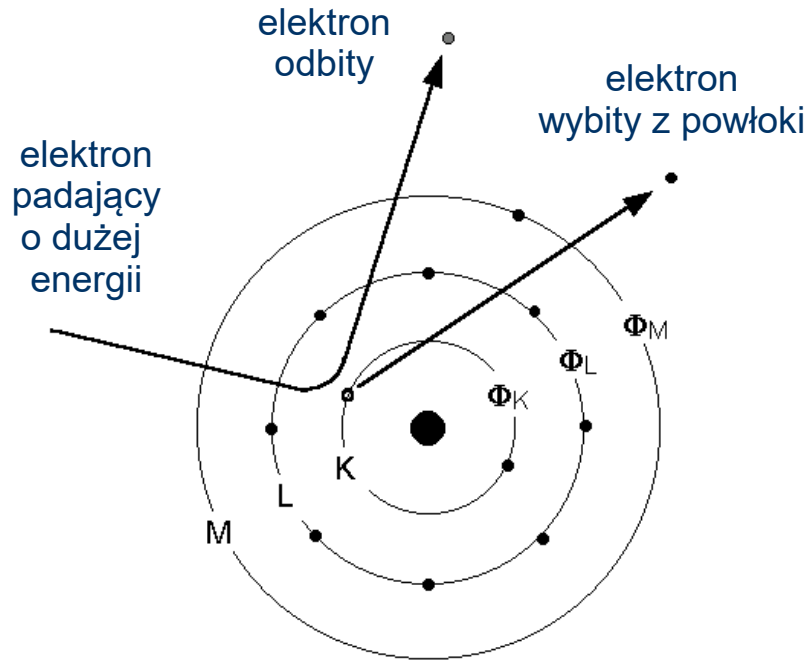
$$h = \text{stała Planck'a} = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J/s}$$

$$c = \text{prędkość światła w próżni} = 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}$$

$$1 \text{ eV} = 1 \text{ e} \cdot 1 \text{ V} \approx 1,602 \ 177 \ 33 \times 10^{-19} \text{ J}$$

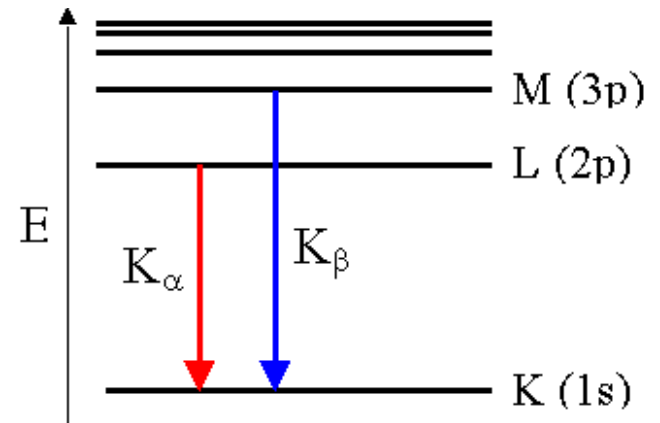
$$1 \text{ J} \approx 6,2415 \times 10^{18} \text{ eV}$$

Promieniowanie rentgenowskie



Widmo charakterystyczne

- elektron wybija elektron z wewnętrznej powłoki (np. K)
- następnie elektron z wyższej powłoki „spada” na powłokę K emitując kwant promieniowania – foton

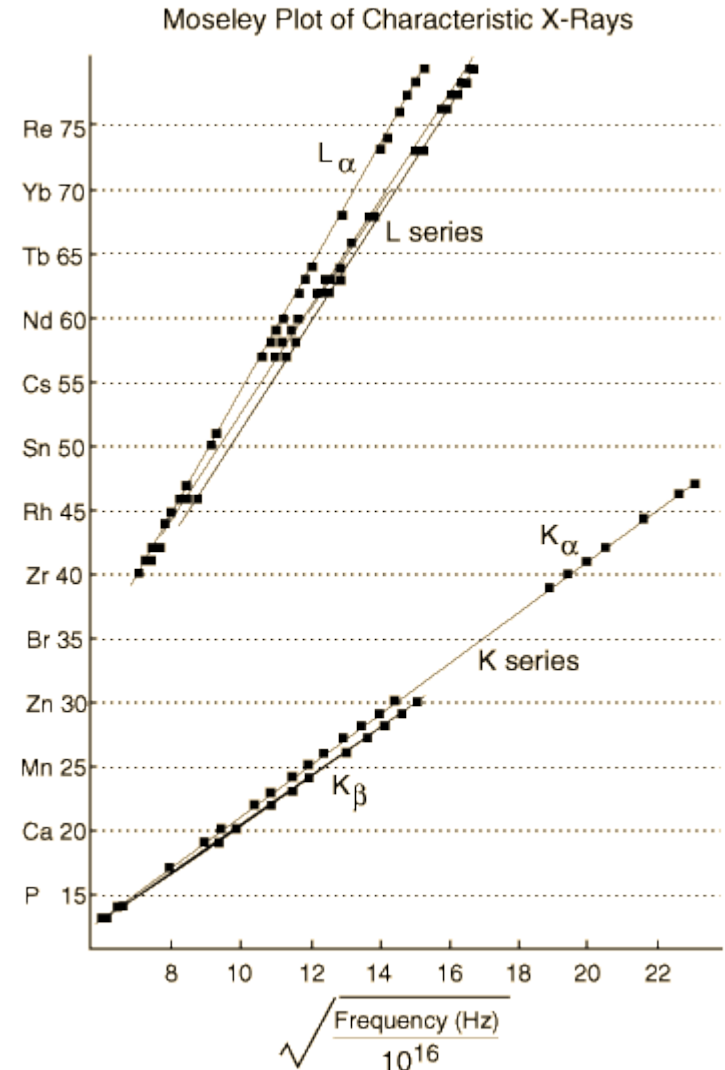
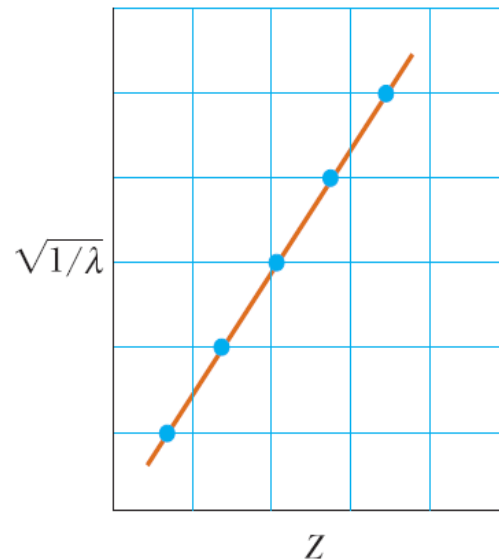


Promieniowanie rentgenowskie

Widmo charakterystyczne (prawo Moseley'a)

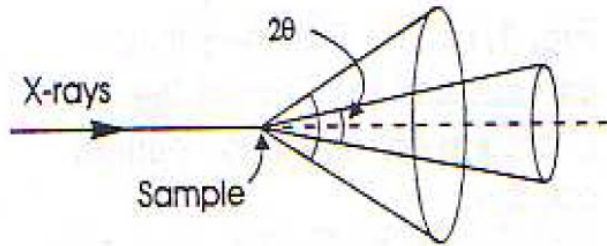
$$E_K = -m_e Z_{eff}^2 \frac{k_2^2 e^4}{2 \left(\frac{h}{2\pi} \right)^2} = -Z_{eff}^2 E_0$$

$$E_K = -(Z - 1)^2 (13.6 \text{ eV})$$

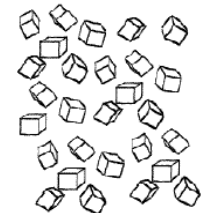
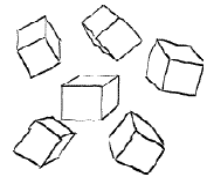
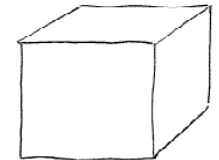
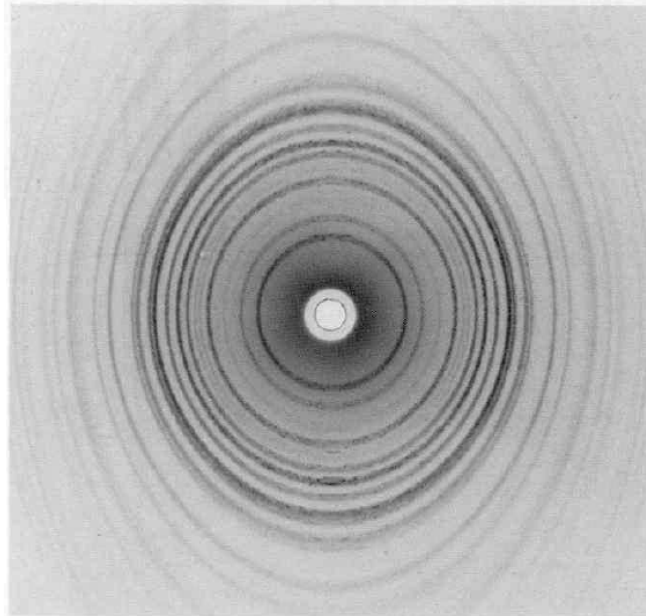
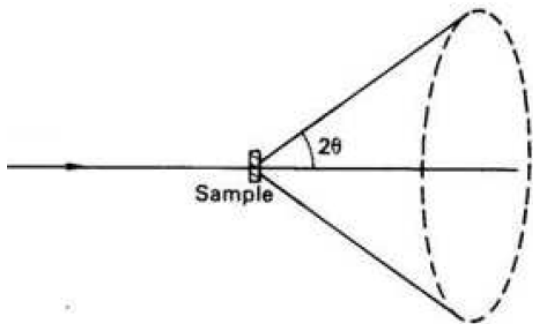
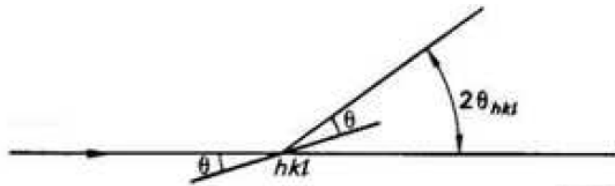


Adapted from Moseley's original data (H. G. J. Moseley, Philos. Mag. (6) 27:703, 1914)

Dyfrakcja promieniowania rentgenowskiego na materiałach polikrystalicznych

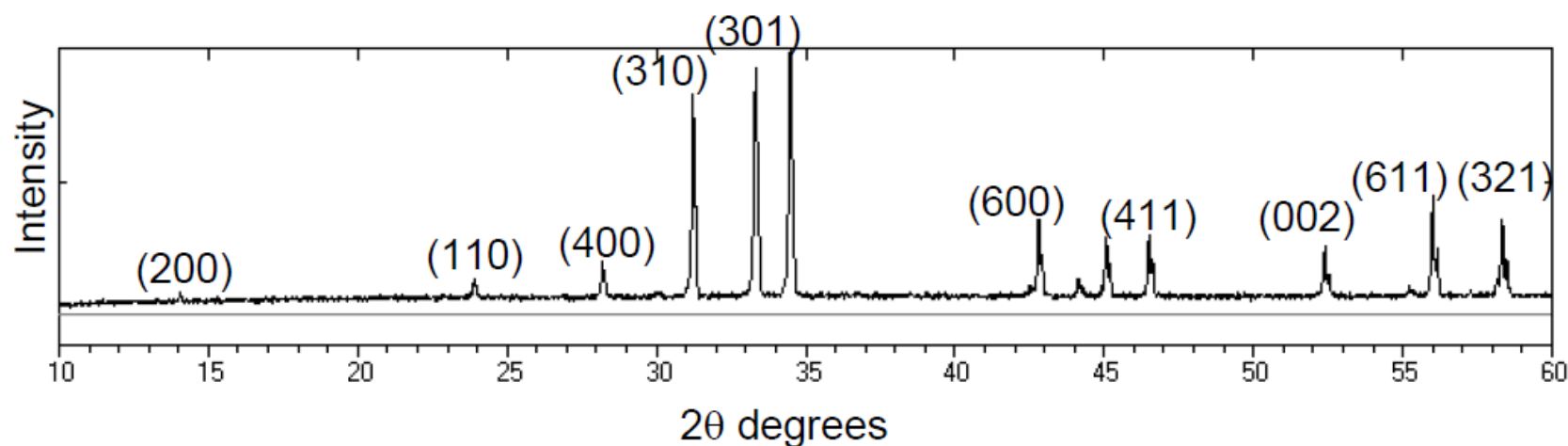


proszek = polikryształ
duża liczba krystalitów o rozmiarach μm
ułożonych przypadkowo



Detektor rejestruje intensywność promieniowania w funkcji kąta obserwacji. Intensywność w funkcji kąta tworzy dwuwymiarowy „obraz dyrakcyjny - dyfraktogram”, który jest charakterystyczny, unikalny dla danego materiału.

Każdy pik odpowiada ugięciu od konkretnej rodziny płaszczyzn (hkl).



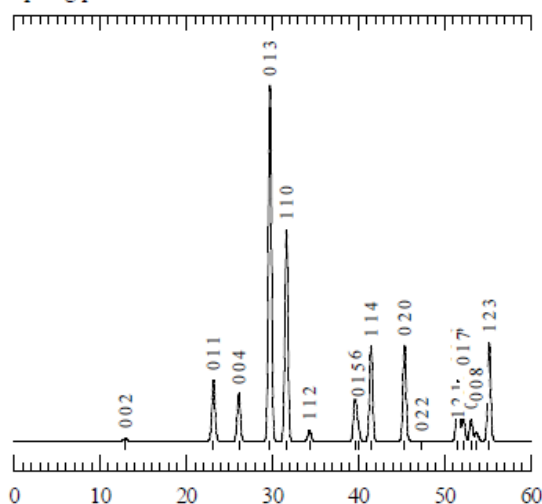
Opis struktury krystalicznej

BaLaMnO₄ (struktura typu K₂NiF₄):

Grupa przestrzenna ***I4/mmm*** (# 139)

$a = b = 4 \text{ \AA}$, $c = 13.65 \text{ \AA}$

BaLaMnO₄
Lambda: 1.54178 Magnif: 1.0 FWHM: 0.200
Space grp: *I4/mmm* Direct cell: 4.0000 4.0000 13.6568 90.00



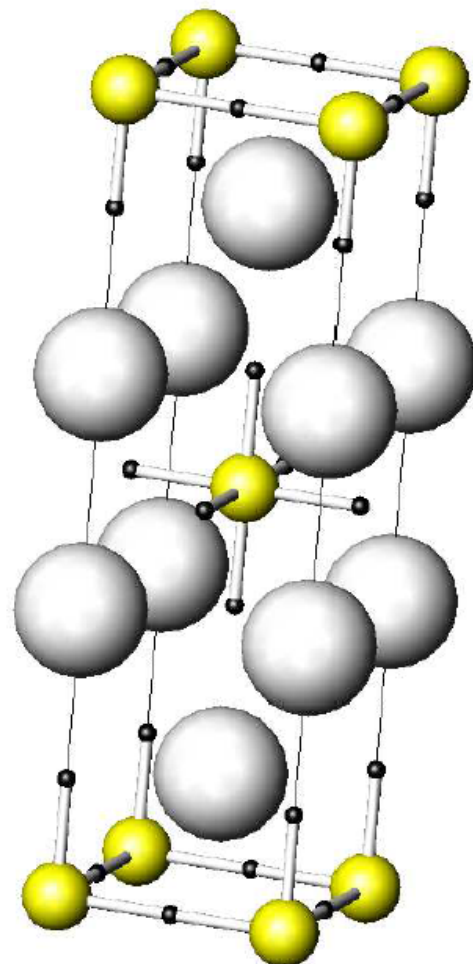
Ba(56) = 0,0,0.35

La(57)) = 0,0,0.35

Mn (25) = 0,0,0

O1(8) = 0,½,0

O2(8) = 0,0,¼



dyfraktogram:

$h+k+l$ = nieparzyste, - refleksy niewidoczne

Elementy mechaniki kwantowej

- Mechanika kwantowa – co to jest?
- Fale materii – hipoteza de Broglie'a
- Funkcja falowa
- Równanie Schrödingera

Fale materii de Broglie'a (rok 1923)



Louis V. de Broglie,
who first suggested
that electrons might
have wave properties.
[Courtesy of
Culver Pictures.]

- De Broglie zaproponował, że **każdy obiekt fizyczny** który posiada pęd **p** posiada także ***naturę falową*** gdzie długość fali wyraża się zależnością:

$$p = \frac{h}{\lambda}$$



$$\lambda = \frac{h}{p}$$

stała
Planck'a
pęd

Fale materii de Broglie'a (rok 1923)

- De Broglie zaproponował, że **każdy obiekt fizyczny** który posiada pęd **p** posiada także ***naturę falową*** gdzie długość fali wyraża się zależnością:

$$p = \frac{h}{\lambda}$$



$$\lambda = \frac{h}{p}$$

stała
Planck'a
pęd

- Obiekt z pędem może być: np. elektron, jądro atomowe, cały atom, piłka tenisowa,... oraz oczywiście foton.
- Dlaczego zatem rzadko obserwujemy efekty falowe materii wokół nas?
- Popatrzmy na dwa przykłady:

Np. długość fali materii **fotonu** o energii 1eV ($=1.62 \times 10^{-19} \text{ J}$) :

$$E_k = pc = \frac{hc}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{hc}{E} \approx \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ Js} \cdot 3 \times 10^8 \text{ m/s}}{1.6 \times 10^{-19} \text{ J}} \approx 1240 \text{ nm}$$

Długość fali materii **elektronu** o energii kinetycznej 1eV:

$$E_k = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$$
$$p = \sqrt{2mE_k}$$
$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} \approx 1.2 \text{ nm}$$

Fale materii de Broglie'a – czy je widać?

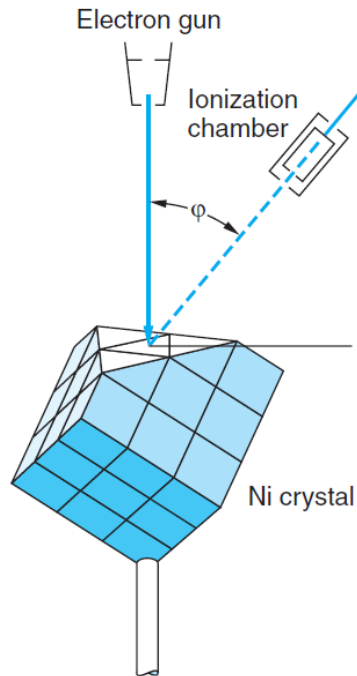


Figure 5-2 The Davisson-Germer experiment. Low-energy electrons scattered at angle ϕ from a nickel crystal are detected in an ionization chamber. The kinetic energy of the electrons could be varied by changing the accelerating voltage on the electron gun.

- Doświadczenie Davisson'a-Germer'a
- Badano oddziaływanie wiązki elektronów z materią – w formie monokryształów
- Zaobserwowano podobny układ minimów i maksimów intensywności wiązki elektronów w funkcji kąta obserwacji wiązki ugiętej

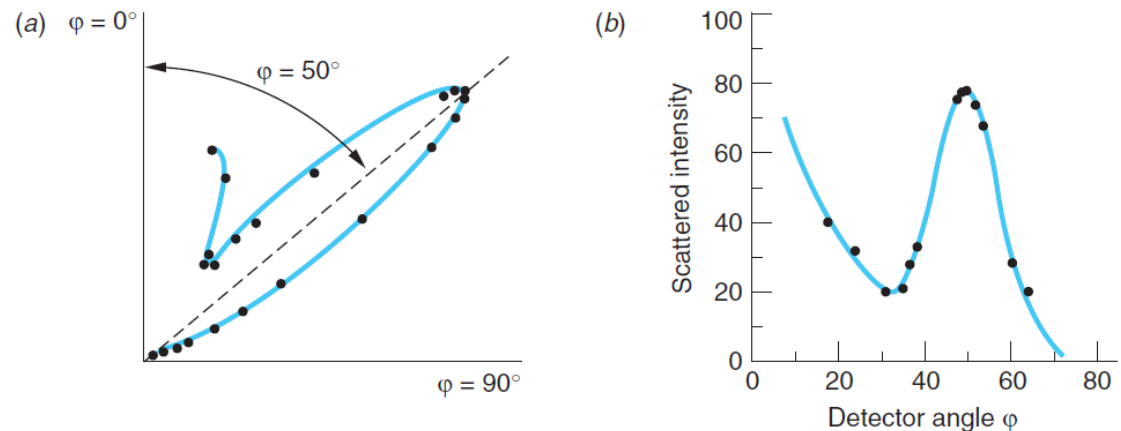
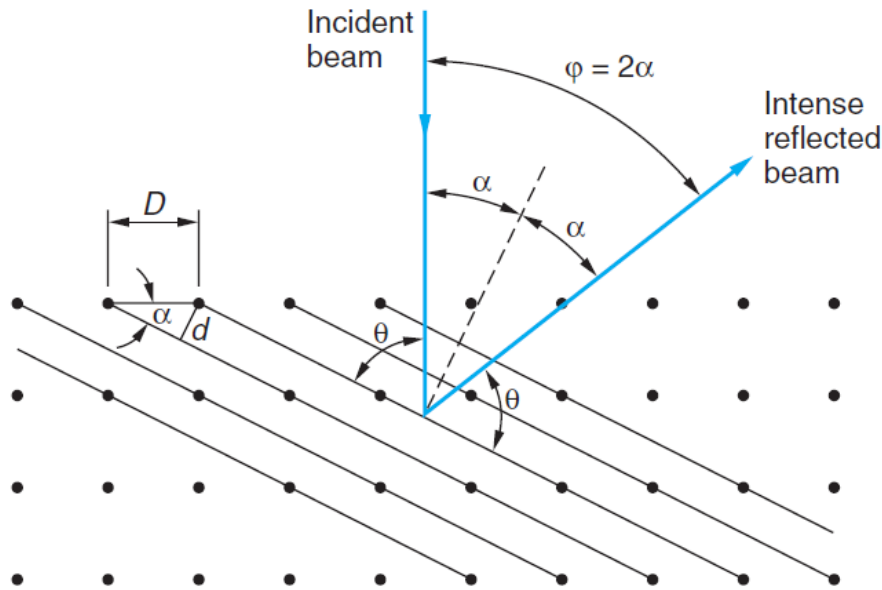


Figure 5-3 Scattered intensity vs. detector angle for 54-eV electrons. (a) Polar plot of the data. The intensity at each angle is indicated by the distance of the point from the origin. Scattering angle ϕ is plotted clockwise starting at the vertical axes. (b) The same data plotted on a Cartesian graph. The intensity scales are arbitrary but the same on both graphs. In each plot there is maximum intensity at $\phi = 50^\circ$, as predicted for Bragg scattering of waves having wavelength $\lambda = h/p$. [From *Nobel Prize Lectures: Physics* (Amsterdam and New York: Elsevier, © Nobel Foundation, 1964).]

Doświadczenie Davisson'a-Germer'a dyfrakcji elektronów monokryształe niklu



- ♦ Wiązka elektronów o energii 54 eV,
- ♦ Maksimum intensywności wiązki odbitej zaobserwowano dla kąta 50°

Figure 5-4 Scattering of electrons by a crystal. Electron waves are strongly scattered if the Bragg condition $n\lambda = 2d \sin \theta$ is met. This is equivalent to the condition $n\lambda = D \sin \varphi$.

$$n\lambda = 2D \sin \alpha \cos \alpha = D \sin 2\alpha$$

$$n\lambda = D \sin \varphi$$

Zakładając, że dla niklu $D = 0,215$ nm (w pomiarów rentgenowskich), długość dla fali elektronów:

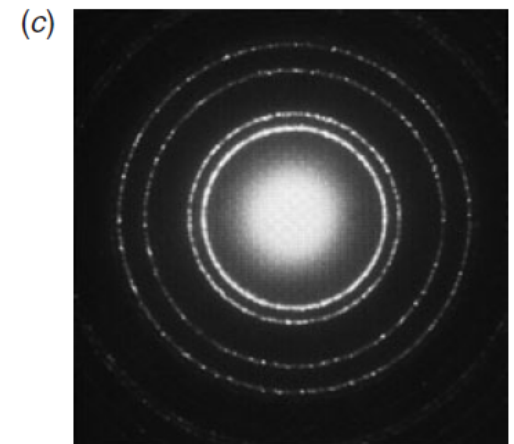
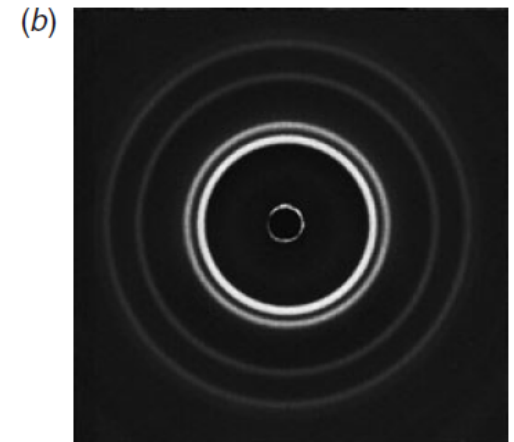
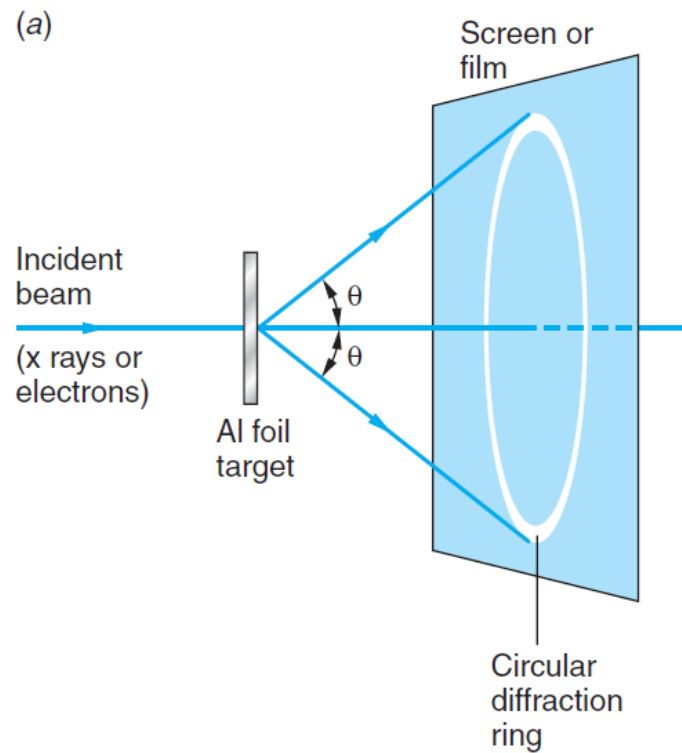
$$\lambda = 0.215 \sin 50^\circ = 0.165 \text{ nm}$$

Natomiast wg hipotezy de Broigle'a dla elektronów o energii 54 eV:

$$\lambda = \frac{1.226}{(54)^{1/2}} = 0.167 \text{ nm}$$

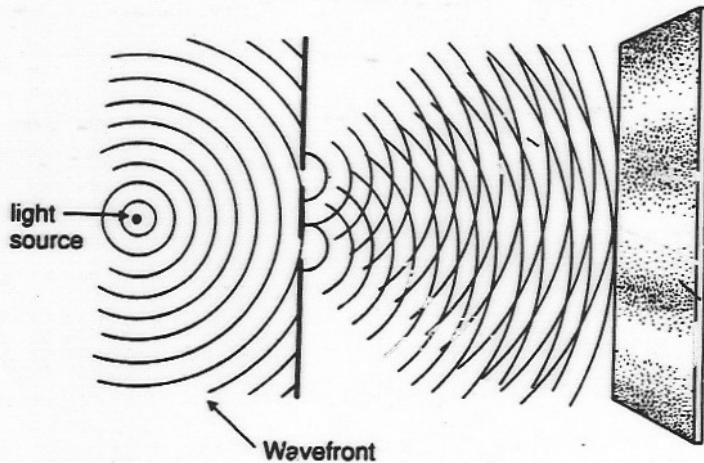
Doświadczenie Thomsona dyfrakcji elektronów na folii aluminiowej

Figure 5-8 (a) Schematic arrangement used for producing a diffraction pattern from a polycrystalline aluminum target.
(b) Diffraction pattern produced by x rays of wavelength 0.071 nm and an aluminum foil target.
(c) Diffraction pattern produced by 600-eV electrons (de Broglie wavelength of about 0.05 nm) and an aluminum foil target. The pattern has been enlarged by 1.6 times to facilitate comparison with (b). [Courtesy of Film Studio, Education Development Center.]



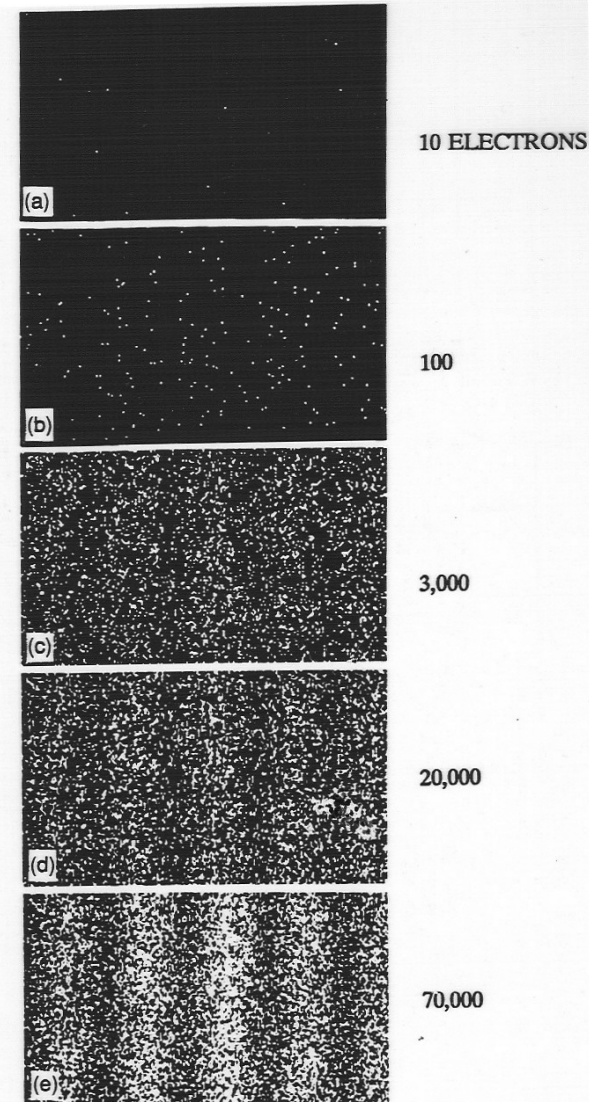
Fale materii de Broglie'a – czy je widać?

Tak ulega dyfrakcji i interferencji światło



- podobnie jak światło, elektrony też mogą ulegać dyfrakcji – czyli mają własności falowe !!!
- siatkę dyfrakcyjną stanowi np. folia aluminiowa (zatem dł. fali dla elektronu jest porównywalna z odległościami między atomami aluminium)
- im więcej elektronów przechodzi przez siatkę dyfrakcyjną, tym efekt dyfrakcyjny jest bardziej widoczny

Dyfrakcja i interferencja elektronów !!!



ELECTRON INTERFERENCE THROUGH A DOUBLE SLIT

Funkcja falowa

- Jak matematycznie opisać własności falowe materii? Czy są fale materii?
- Własności falowe materii (cząstek, układów cząstek) opisuje matematycznie pewna **funkcja falowa**

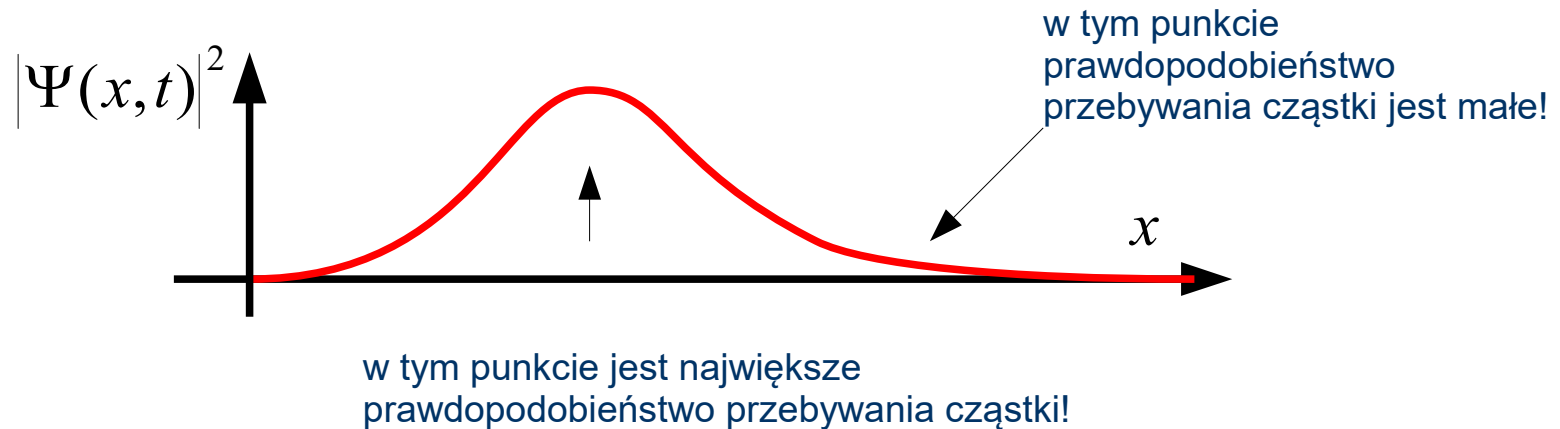
$$\Psi(x, t)$$

Tutaj upraszczamy i rozpatrujemy funkcję falową zależną tylko od jednej współrzędnej przestrzennej (ruch w jednym wymiarze)

- Funkcja falowa ma własności
 - zależy ona od współrzędnych przestrzennych i czasu
 - jest funkcją zespoloną
 - nie ma jednoznacznej interpretacji fizycznej (jest pewnym modelem zachowań falowych opisywanych obiektów)
- Ale moduł funkcji falowej ma interpretację fizyczną !!!
 - *Jeśli w pewnej chwili czasu t przeprowadza się pomiar położenia cząstki, z którą związana jest funkcja falowa $\Psi(x, t)$, to prawdopodobieństwo $P(x, t)dx$ tego, że cząstka znajdzie się pomiędzy współrzędną x a $x+dx$ jest wyrażone kwadratem modułu funkcji falowej*

$$P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 dx = \Psi(x, t) \cdot \Psi(x, t)^* dx$$

Funkcja falowa - interpretacja



- Wniosek: w mechanice kwantowej cząstka nie ma „jednoznacznego” położenia!!! Możemy mówić tylko o pewnym prawdopodobieństwie że cząstka przebywa w danym punkcie.
- Ale musimy przyjąć, że cząstka gdzieś w przestrzeni jest, więc jeśli obliczając prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w całej przestrzeni powinniśmy otrzymać:

warunek normalizacji

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \cdot \Psi(x, t)^* dx = 1$$

Jak znaleźć funkcję falową ?

Równanie Schrödinger'a dla poruszającej się cząstki

- Dla cząstki poruszającej się w polu sił o energii potencjalnej $V(\mathbf{x}, t)$ funkcja falowa musi spełniać następujące równanie Schrödinger'a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, t) \right] \Psi(x, t)$$

liczba urojona, stała Planck'a / 2π funkcja falowa, masa operator Laplace'a, energia pot. cząstki

- To równanie jest postulatem (nie da się go wyprowadzić ściśle z innych praw fizyki)
- Rozwiązując to równanie dostajemy funkcje falowe, które zawierają dane-informacje dotyczące stanu tej cząstki (np. gdzie może się znajdować, jaki może mieć pęd)
- W mechanice kwantowej stan cząstki określa się podając funkcję falową, która jest wielkością zespoloną, określoną w dowolnej chwili czasu t i we wszystkich punktach przestrzeni
- Mechanika kwantowa daje nam narzędzie matematyczne do opisu zjawisk zachodzących w obiektach skali atomowej.