



Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης
Τμήμα Φυσικής
Εργαστήριο Εφαρμοσμένης Φυσικής

Γενική Φυσική V (Σύγχρονη Φυσική)

**Φυσική Ακτίνων-Χ και Αλληλεπίδραση
Ακτίνων-Χ και Ηλεκτρονίων με την Ύλη**

© 2010 Europa Technologies
© 2010 Google

Google

Image © 2010 DigitalGlobe

Imagery Date: Jul 9, 2008

34°41'31.03" N 33°05'11.97" E elev. 0 m

Eye alt 511 m

Περιεχόμενα

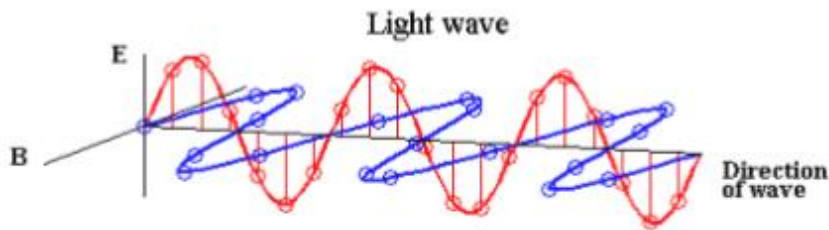
- Φύση Ακτίνων-Χ
- Μέθοδοι Παραγωγής Ακτίνων-Χ
 - Φάσμα εκπομπής ακτίνων-Χ από ιονισμένα άτομα: Γραμμές K_{α} , K_{β} , L_{α} , L_{β} , κ.ο.κ.
 - Ακτινοβολία πέδησης
 - Ακτινοβολία Synchrotron
 - Ανάλυση και Μονοχρωματισμος ακτίνων-Χ: νόμος του Bragg
 - Οργανολογία διχωρισμού μήκους κύματος ή ενέργειας φωτονίων
- Φάσματα Εκπομπής και Απορόφησης Ακτίνων-Χ
 - Νόμος του Moseley
 - Νόμος Beer-Lambert
 - Μαζικός και Γραμμικός συντελεστής απορόφησης

Περιεχόμενα

- Αλληλεπίδραση Ακτίνων-Χ με την Ύλη
 - Ελαστικές αλληλεπιδράσεις
 - Περίθλαση ακτίνων-Χ: Κρυσταλλική Δομή Στερεών
 - Γεωμετρικές Περίθλασης
 - Κρυσταλλική δομή στερεών – Πλέγματα Bravais
 - Στοιχεία Συμμετρίας Κρυστάλλων
 - Ποιοτική και Ποσοτική Ανάλυση
 - Ανακλαστικότητα Ακτίνων-Χ: Πυκνότητα και Τραχύτητα Επιφανειών
 - Σκέδαση Ακτίνων-Χ: μορφολογία κόκκων σε υλικά και επιφάνειες
 - Ανελαστικές αλληλεπιδράσεις
 - Φάσματα Φθορισμού Ακτίνων-Χ: Στοιχειακή ανάλυση υλικών
 - Φάσματα Φωτοηλεκτρονίων Ακτίνων-Χ: Χημεία επιφανειών
- Αλληλεπίδραση Ηλεκτρονίων με την Ύλη
 - Το Φαινόμενο Auger
 - Φάσματα ενεργειακών απωλειών (EELS)

- Ακτίνες-Χ: Ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία πολύ μικρού μήκους κύματος:

Ηλεκτρομαγνητική
ακτινοβολία

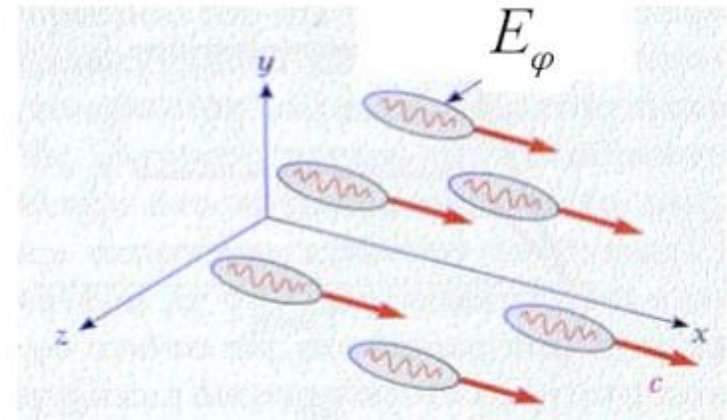


$$\lambda \cdot f = c$$

Μήκη κύματος ακτίνων-Χ
 $0.1 \text{ \AA} < \lambda < 100 \text{ \AA}$

$$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$$

Σωματίο - Φωτόνιο



$$E_\phi = \frac{h \cdot c}{\lambda} = \frac{12.398 \text{ keV} \cdot \text{\AA}}{\lambda}$$

$$p_\phi = \frac{h}{\lambda}$$

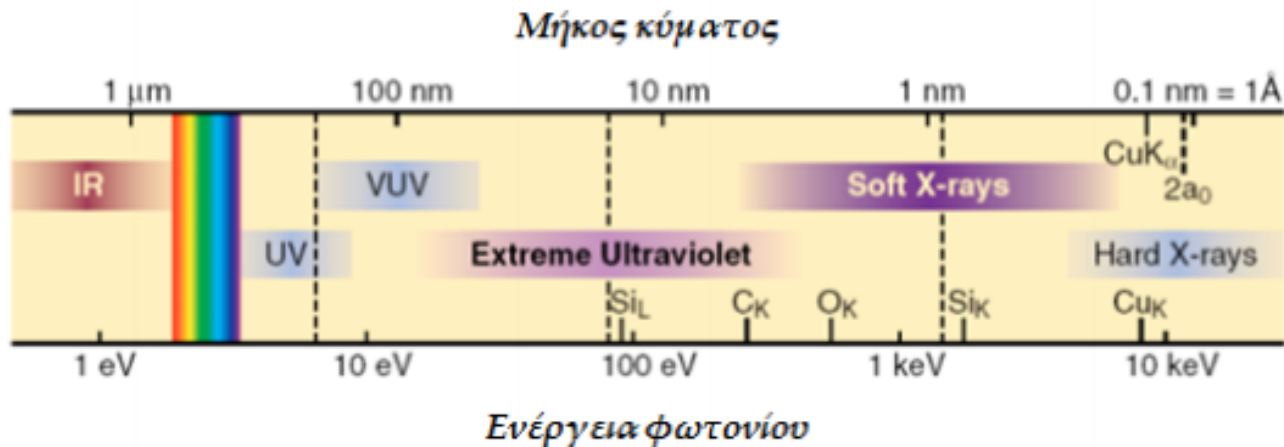
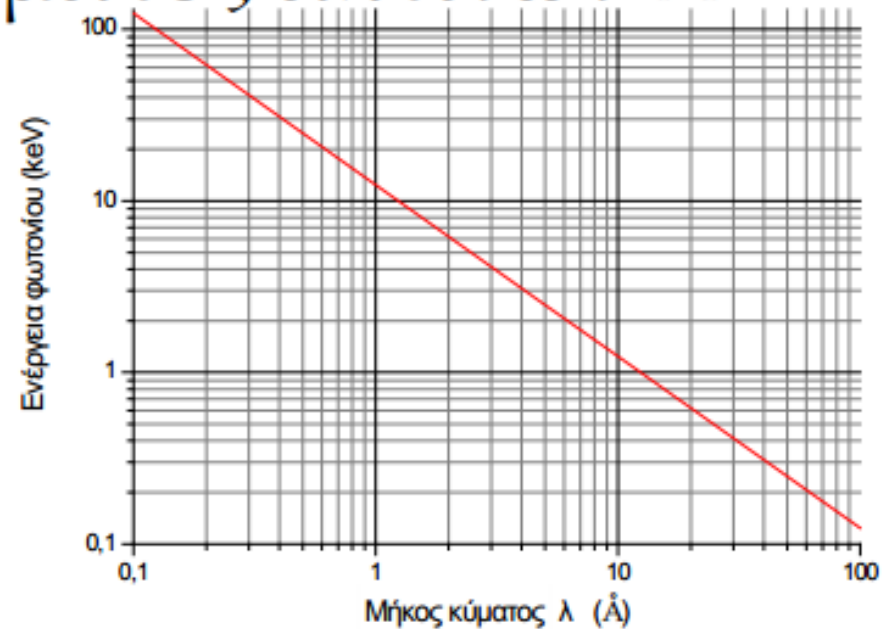
$$1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ Joule}^3$$

Ακτίνες-Χ

- Μήκος κύματος: $\sim 0.01-10$ nm
 - Το μήκος κύματος είναι συγκρίσιμο με τις διατομικές αποστάσεις στα στερεά υλικά, οπότε εμφανίζεται το φαινόμενο της περίθλασης από τα ατομικά επίπεδα
- Ενέργεια Φωτονίου: μερικά ως δεκάδες keV
 - Η ενέργεια φωτονίου είναι συγκρίσιμη με τις δεσμικές ενέργειες των ηλεκτρονίων στις εσωτερικές στοιβάδες των πολυηλεκτρονιακών ατόμων, οπότε χρησιμοποιούνται για την ταυτοποίηση των ατόμων αυτών

Ενέργεια και μήκος κύματος ακτίνων-Χ

$$E_{\varphi} = \frac{h \cdot c}{\lambda} = \frac{12.398 \text{ keV} \cdot \text{\AA}}{\lambda}$$

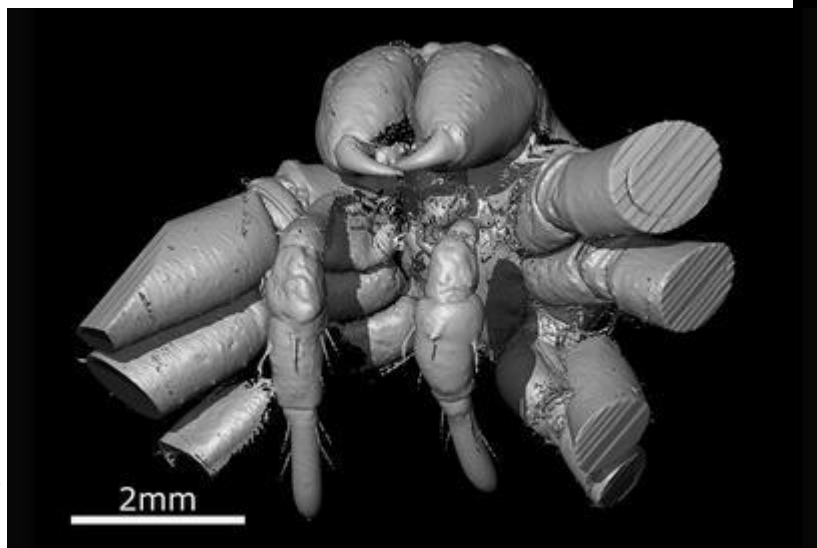
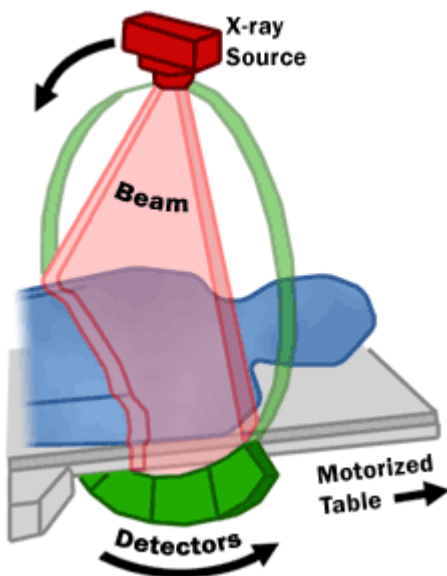


Εφαρμογές Ακτίνων-Χ

Ιατρικές ακτινογραφίες (συνέπεια του μαζικού συντελεστή απορόφησης)

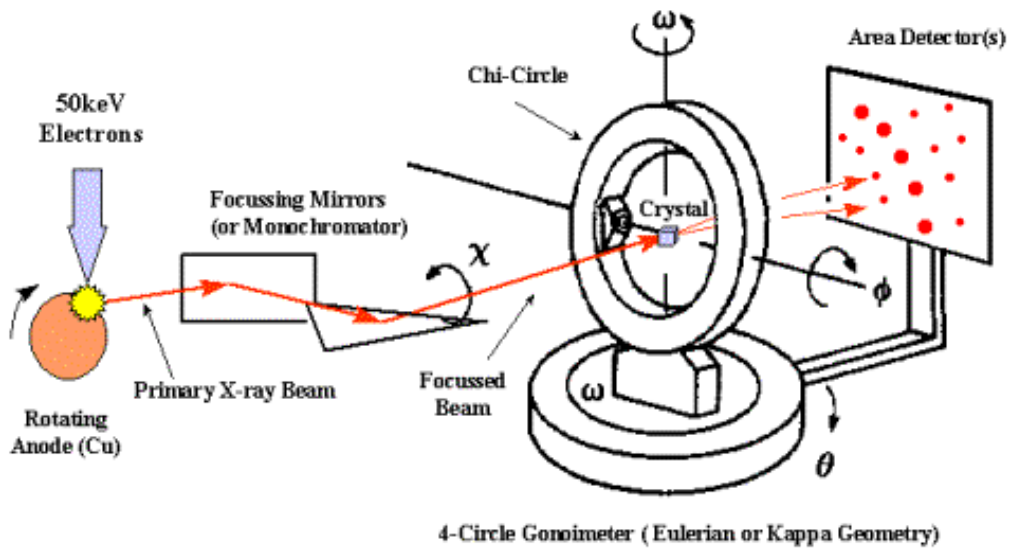


Τομογραφία Ακτίνων-Χ για 3D απεικονίσεις



Εφαρμογές Ακτίνων-Χ

Περίθλαση ακτίνων-Χ:
Κρυσταλλογραφία Υλικών



Εφαρμογές Ακτίνων-Χ

Φθορισμός Ακτίνων-Χ: Χημική Ανάλυση, Αρχαιολογία, Έργα Τέχνης

 **PHYSICS TO GO**
explore physics on your own

login - register

APS
physics

archives browse fyi about

Search the Library...

Home » Detail Page » Feature Summary

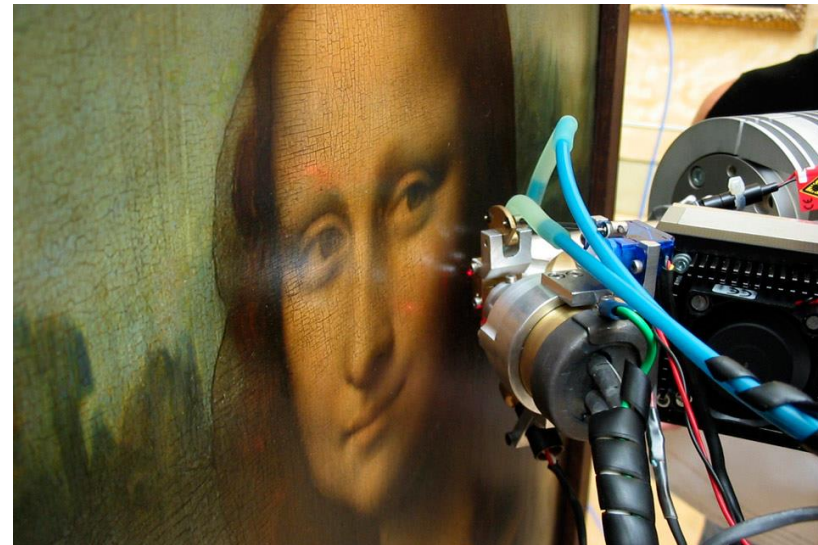
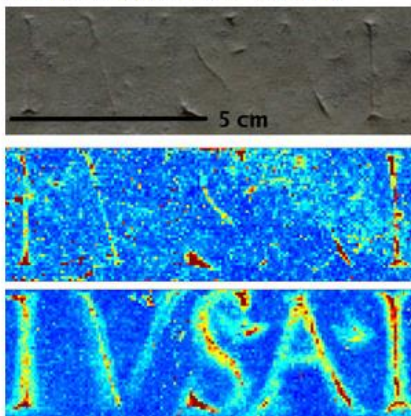
X-Ray Fluorescent Recovers Ancient Text Feature Summary

Type: [From Physics Research](#)

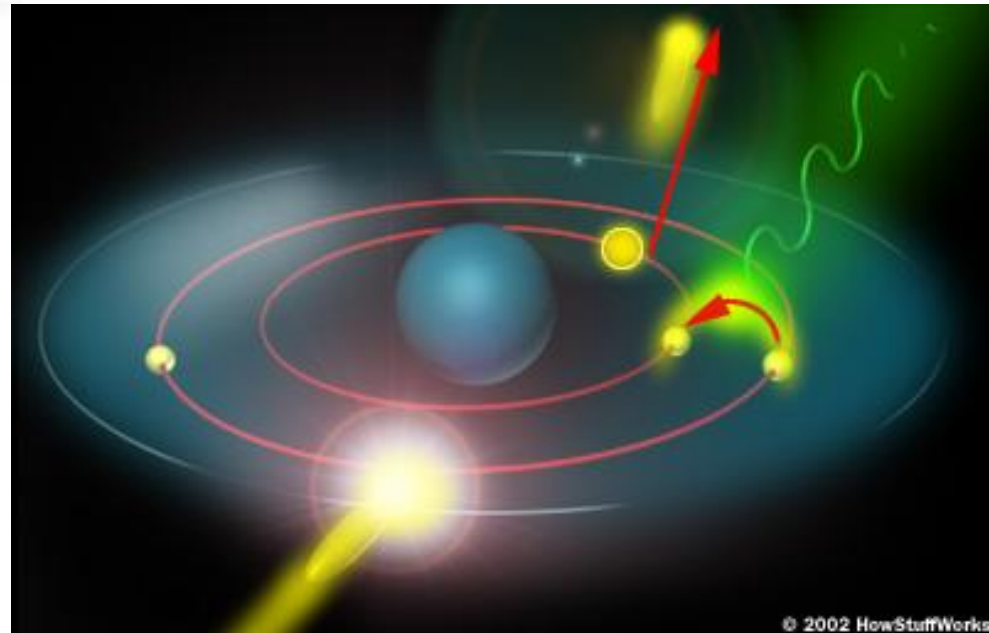
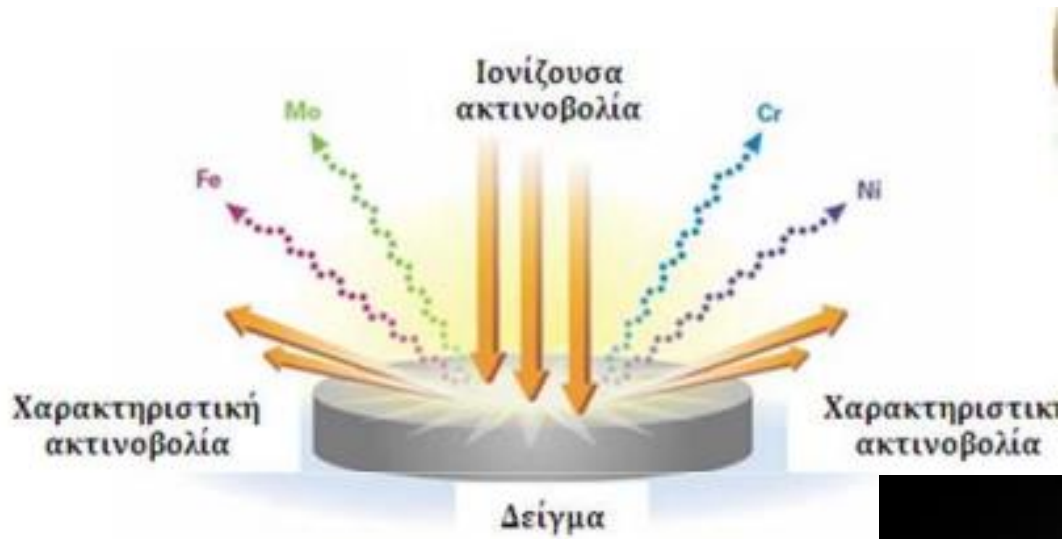
Title: [X-Ray Fluorescence Recovers Ancient Text](#)

Description: This image shows how a Cornell University group used x-ray fluorescence to restore the inscription on a 2000-year-old weathered stone. Some of the atoms producing this fluorescence were residues from the stoneworkers' chisels and from paint applied to the stone. To learn more about this investigation, see [X-Ray Fluorescent Recovers Ancient Text](#).

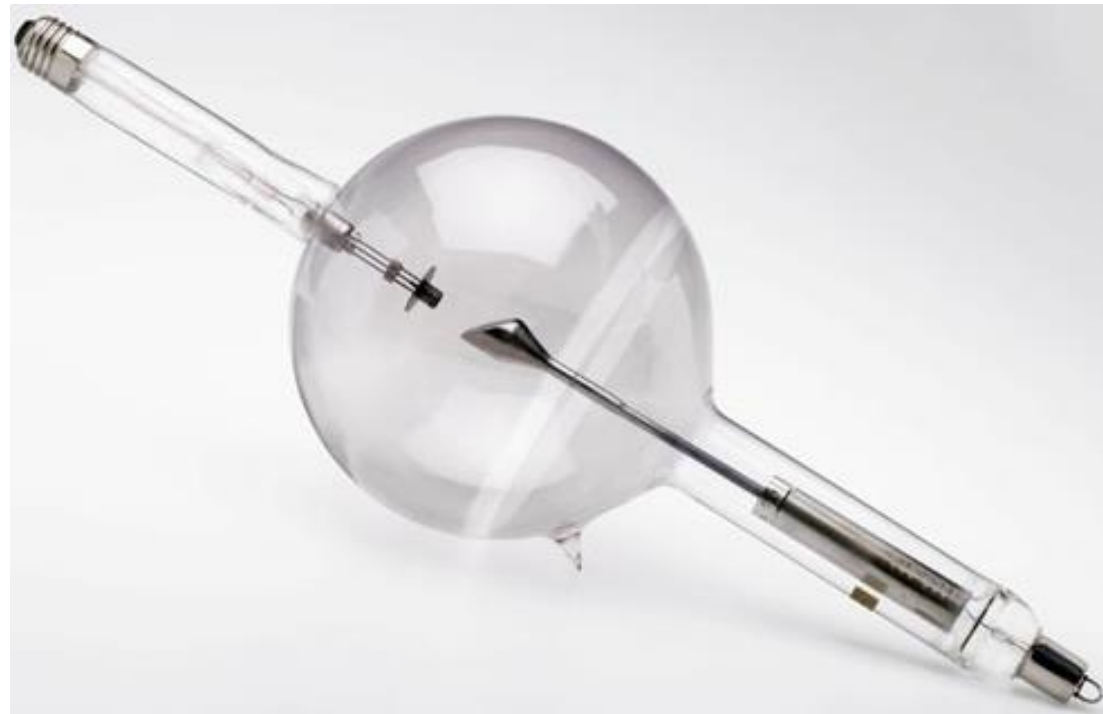
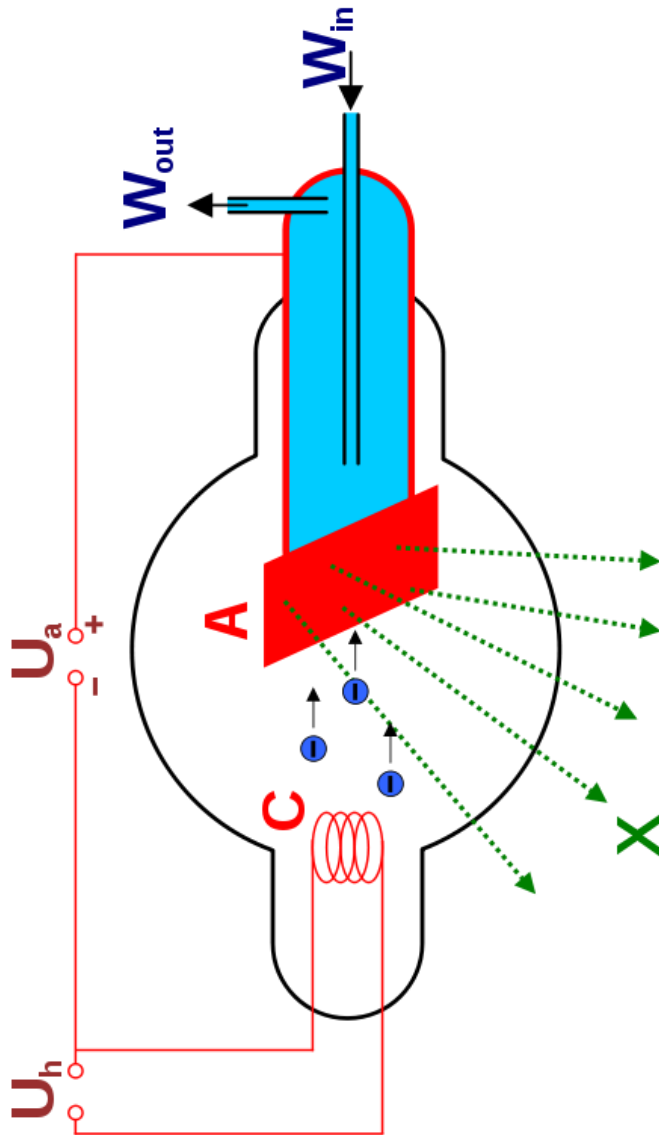
Image:



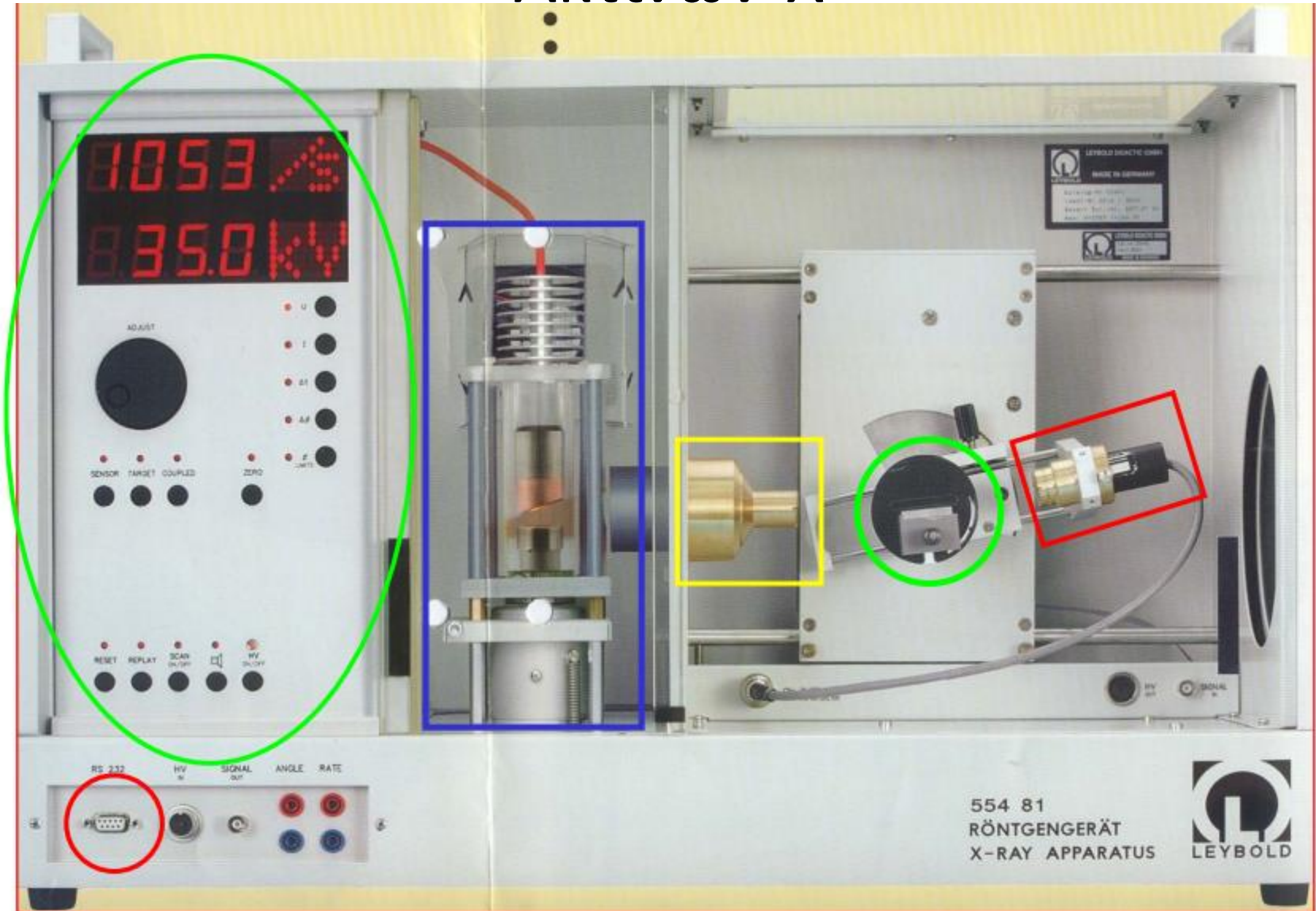
Παραγωγή Ακτίνων-Χ I:



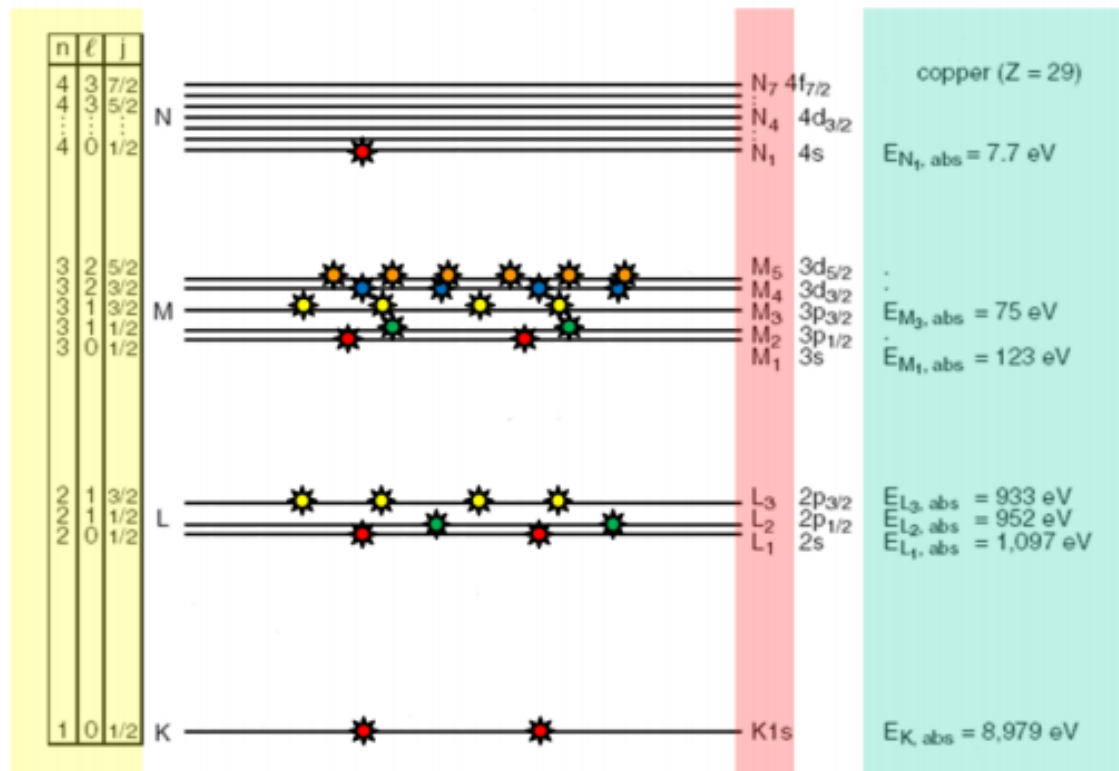
Παραγωγή Ακτίνων-Χ I: Λυχνία Coolidge και σύγχρονες λυχνίες Ακτίνων-Χ



Παραγωγή Ακτίνων-Χ Ι: Σύγχρονες λυχνίες Ακτίνων-Χ

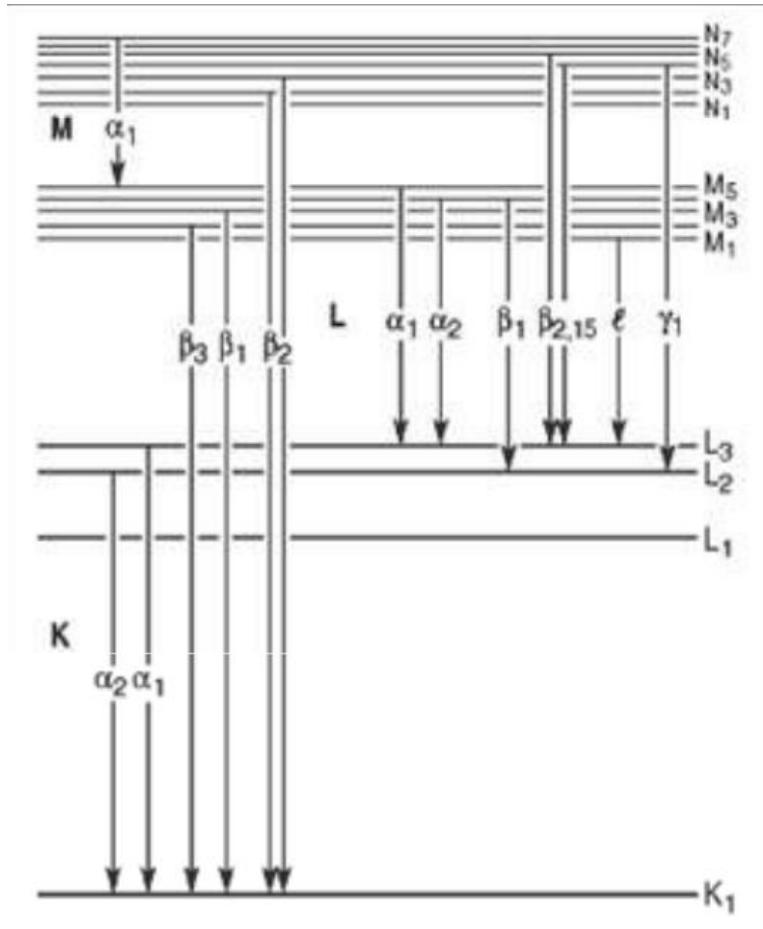


Δεσμικές ενέργειες ηλεκτρονίων στο άτομο



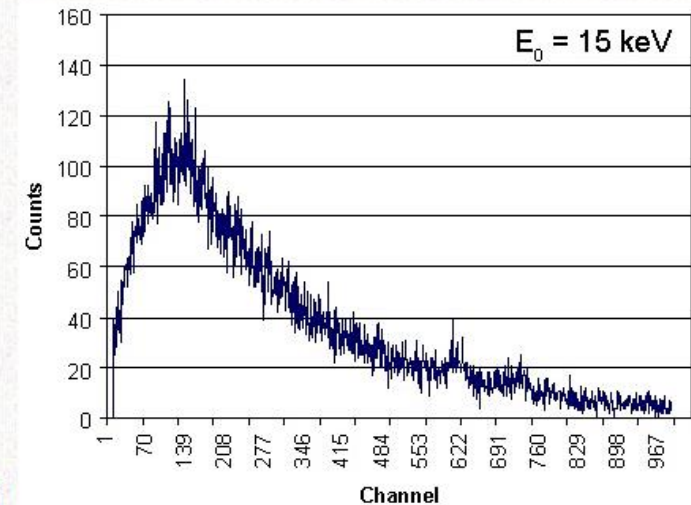
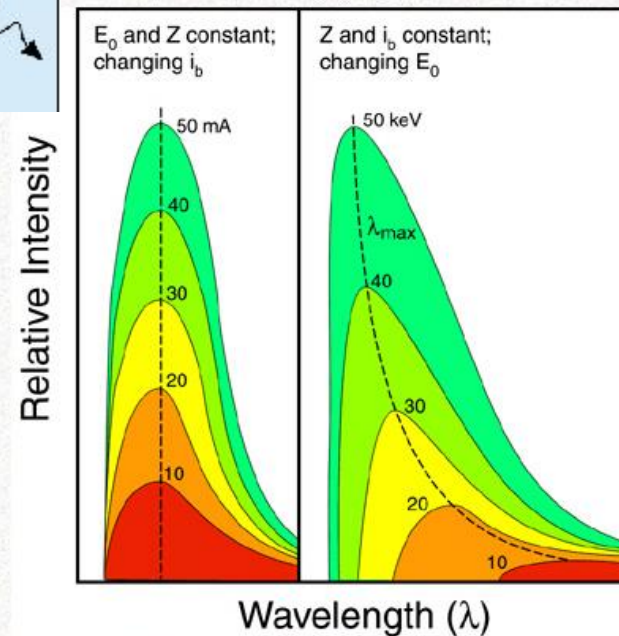
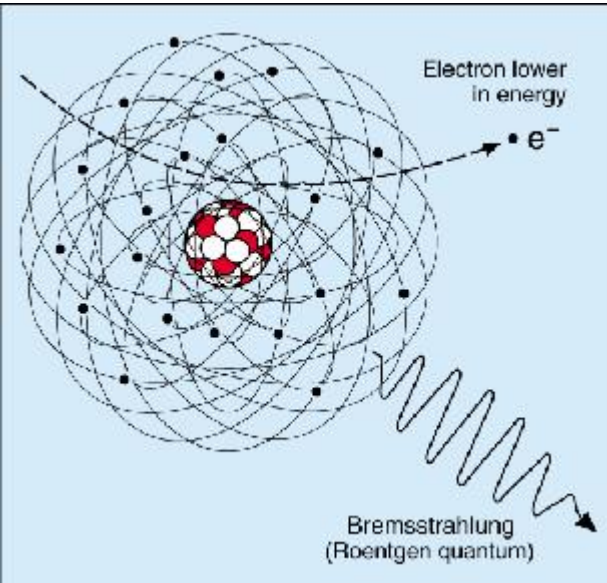
Στοιβάδα	K	L			M				
Υποστοιβάδες	K	L _I	L _{II}	L _{III}	M _I	M _{II}	M _{III}	M _{IV}	M _V
<i>n</i>	1	2	2	2	3	3	3	3	3
<i>l</i>	0	0	1	1	0	1	1	2	2
<i>j</i>	1/2	1/2	1/2	3/2	1/2	1/2	3/2	3/2	5/2
Φασματοσκοπικός	1s _{1/2}	2s _{1/2}	2p _{1/2}	2p _{3/2}	3s _{1/2}	3p _{1/2}	3p _{3/2}	3d _{3/2}	3d _{5/2}
Πλήθος	2	2	2	4	2	2	4	4	6

Φωτονικές Αποδιεγέρσεις

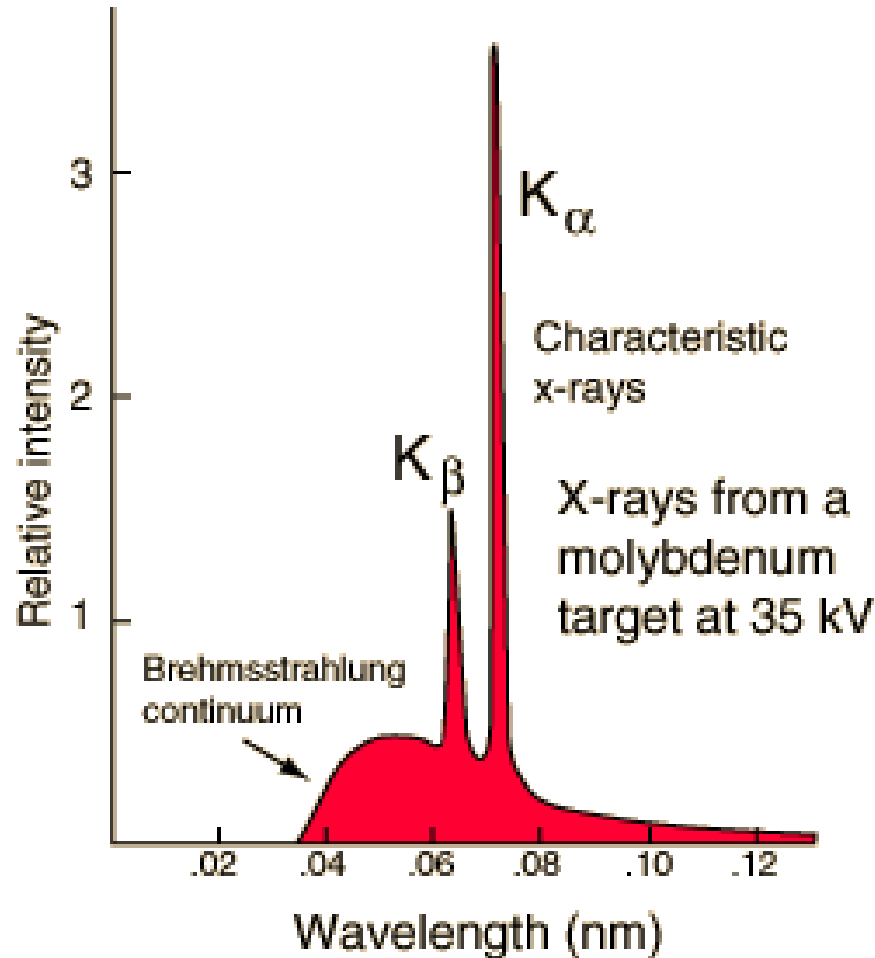


Τέλωση κατάσταση οπής	Αρχική κατάσταση οπής			
	K	L_I	L_{II}	L_{III}
L_I				
L_{II}	K_{α_2} (50)			
L_{III}	K_{α_1} (100)			
M_I			L_{η} (1)	L_I (2)
M_{II}	K_{β_3} (1)	L_{β_4} (5)		L_t (0.01)
M_{III}	K_{β_1} (20)	L_{β_3} (6)	$L_{\beta_{17}}$	L_s (0.01)
M_{IV}	K_{β_5}	$L_{\beta_{10}}$	L_{β_1} (50)	L_{α_2} (10)
M_V	K_{β_5}	L_{β_9}		L_{α_1} (100)
N_I			L_{γ_5} (0.1)	L_{β_8} (0.1)
N_{II}	$K_{\beta_{2'}}$ (5)	L_{γ_2} (1)		
N_{III}	$K_{\beta_{2'}}$	L_{γ_3} (2)		
N_{IV}	K_{β_4}		L_{γ_1} (10)	$L_{\beta_{15}}$ (1)
N_V	K_{β_4}			L_{β_2} (20)
N_{VI}			L_v	
N_{VII}			L_v	
O_I		L_{γ_4}	L_{γ_8}	L_{β_7}
O_{II}	K_{δ_2} (0.1)	L_{γ_4}		
O_{III}	K_{δ_1} (0.1)			
O_{IV}			L_{γ_8}	L_{β_5}
O_V				L_{β_5}

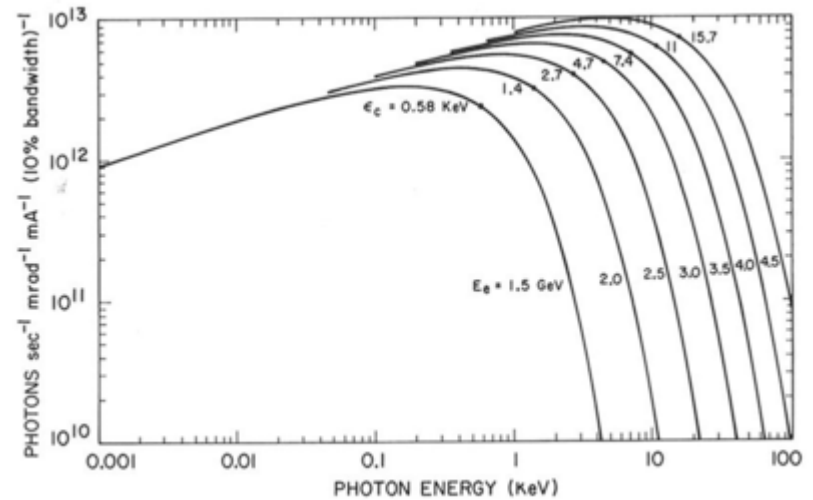
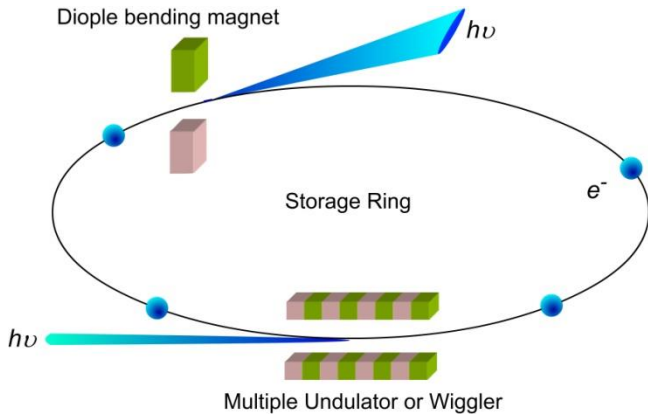
Παραγωγή Ακτίνων-Χ II: Ακτινοβολία Πέδησης (Bremsstrahlung)



Συνδυασμένο Φάσμα: Συνεχές (Bremsstrahlung) και Γραμμικό (Φωτονικές Αποδιεγέρσεις) Φάσματος



Παραγωγή Ακτίνων-Χ III: Ακτινοβολία Synchrotron

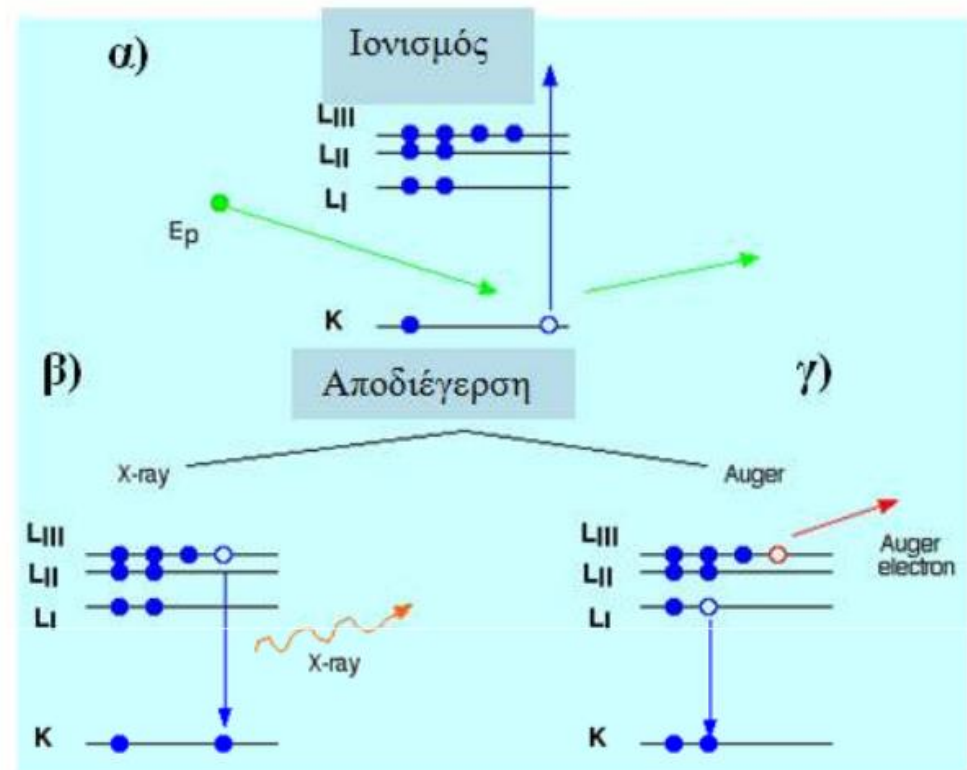
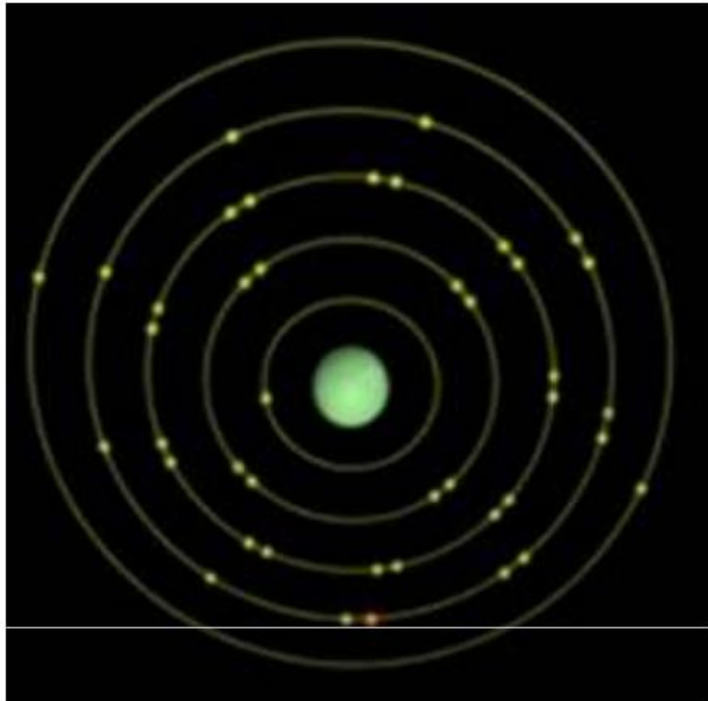


Diamond Light Source, RAL, Oxford



ANKA Light Source, Karlsruhe

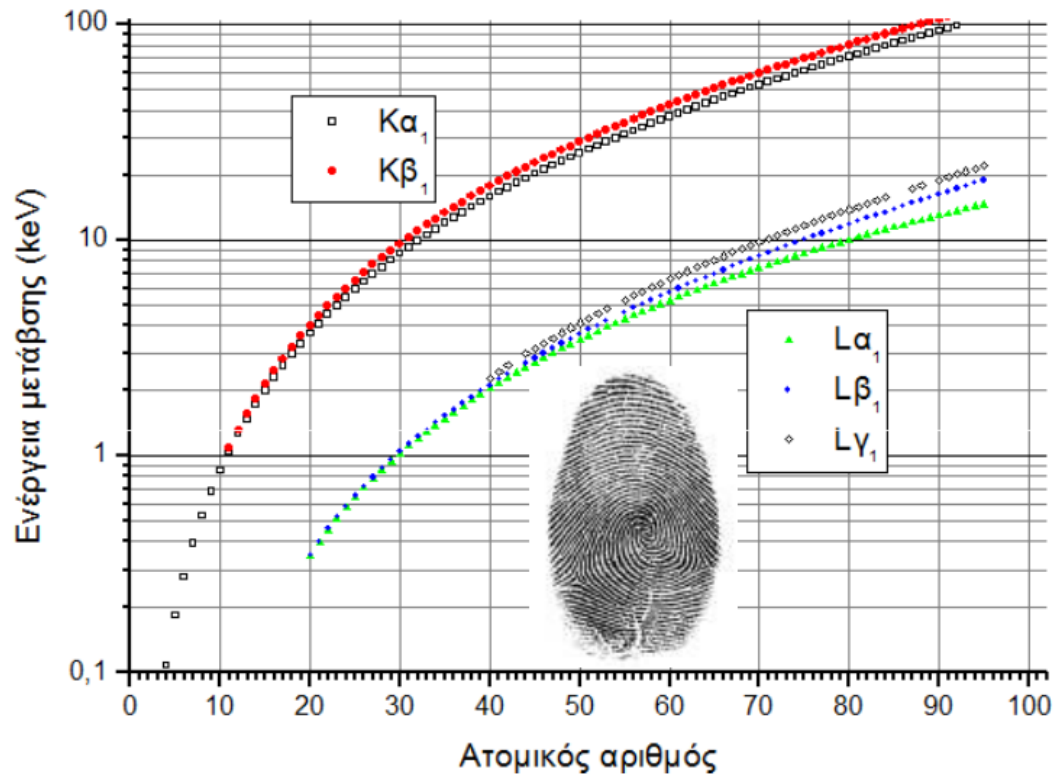
Σύγκριση εκπομπής φωτονίου μέσω φωτονικής αποδιέγερσης και φαινομένου Auger



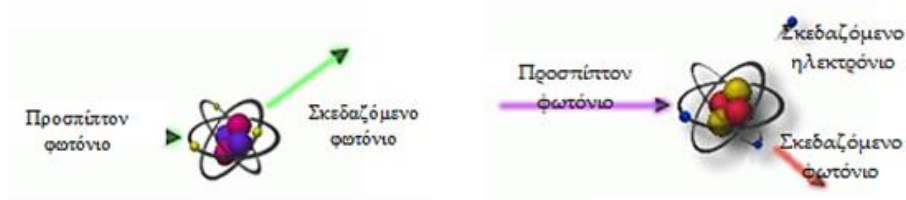
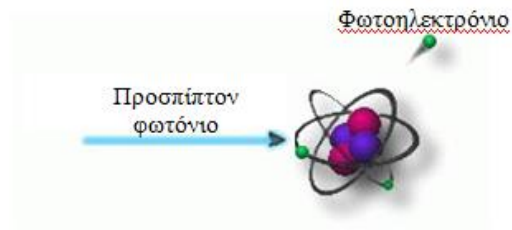
Ενέργεια εκπομπής φωτονίου μέσω φωτονικής αποδιέγερσης: Νόμος Moseley



$$E_{\phi} = \alpha (Z - \sigma)^2$$

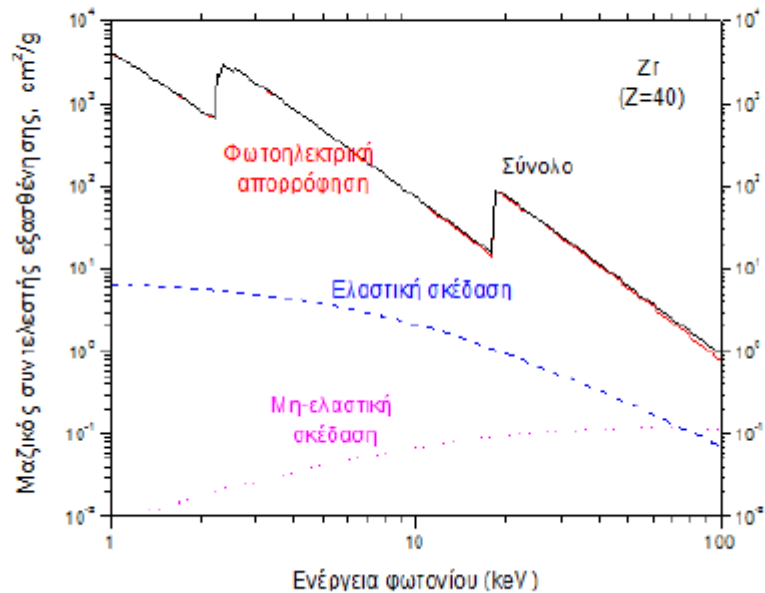


Μηχανισμοί Εξασθένησης Ακτίνων-Χ

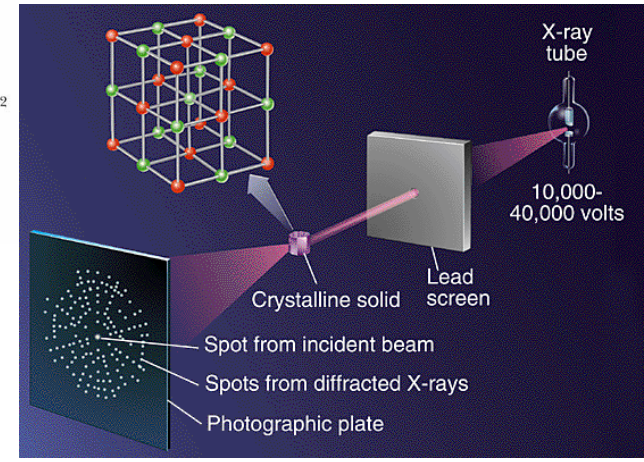
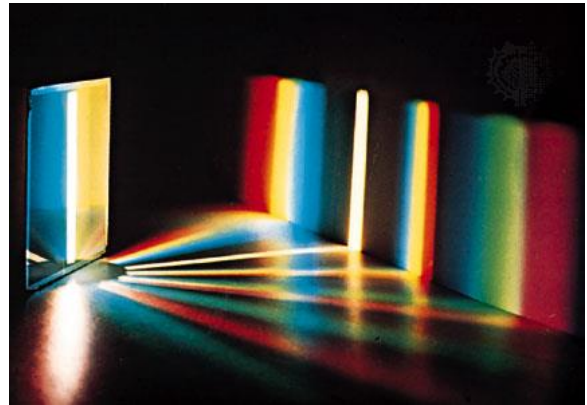
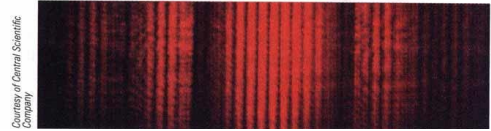
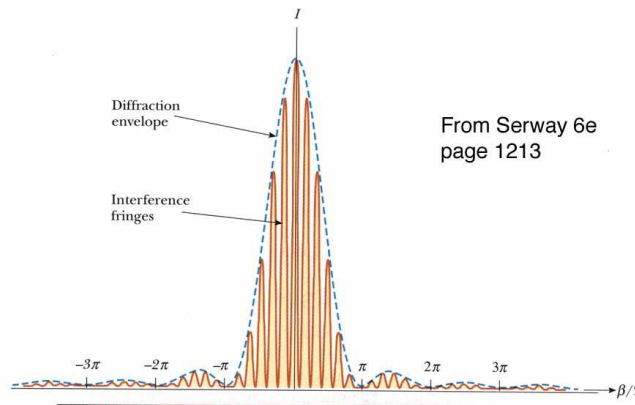


Άτομο ζirkονίου

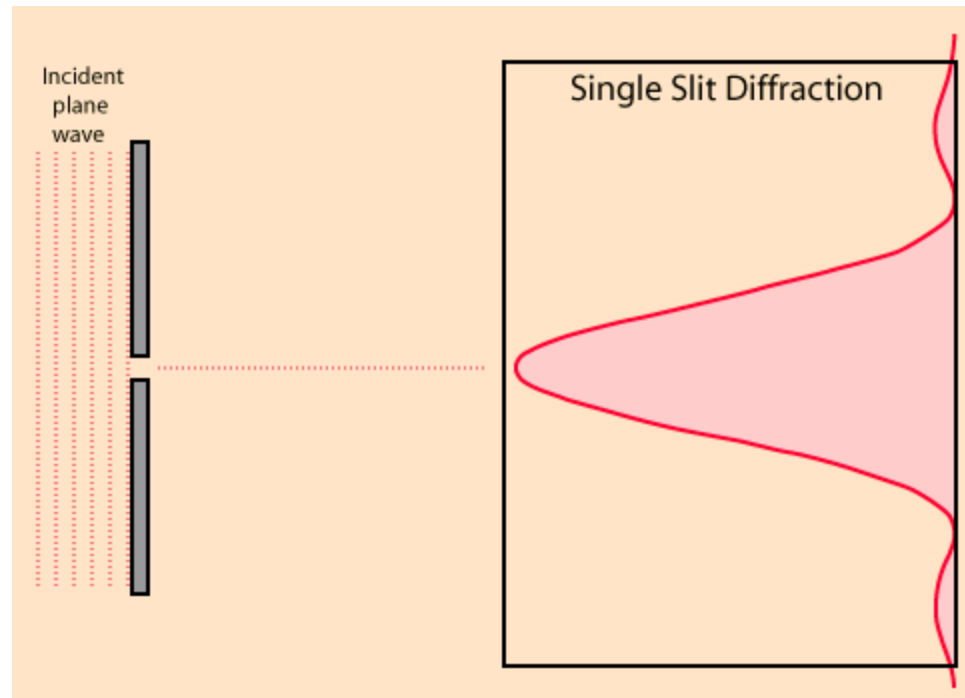
Πιθανότητα απορρόφησης
≡
Μαζικός συντελεστής απορρόφησης



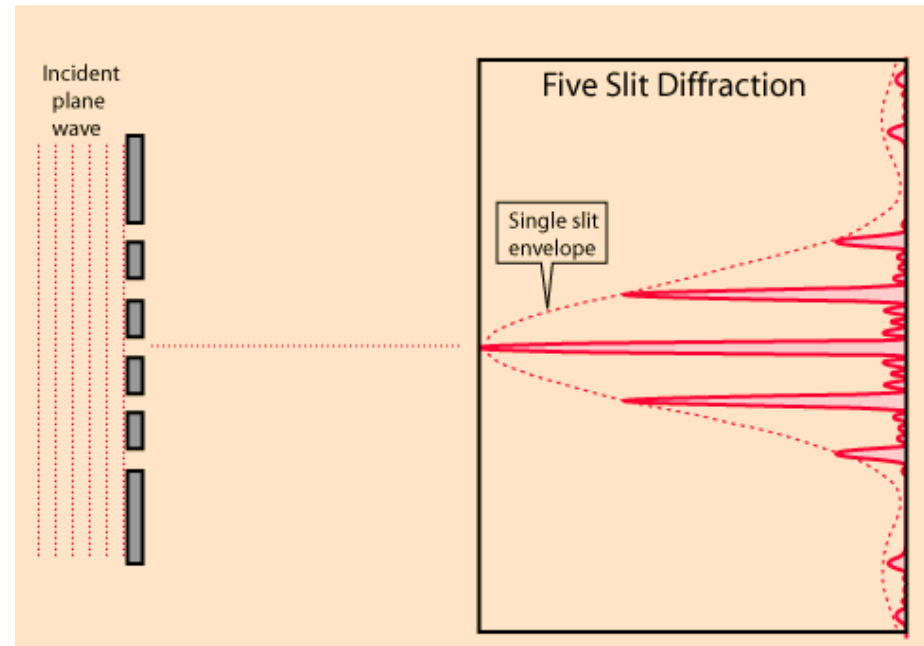
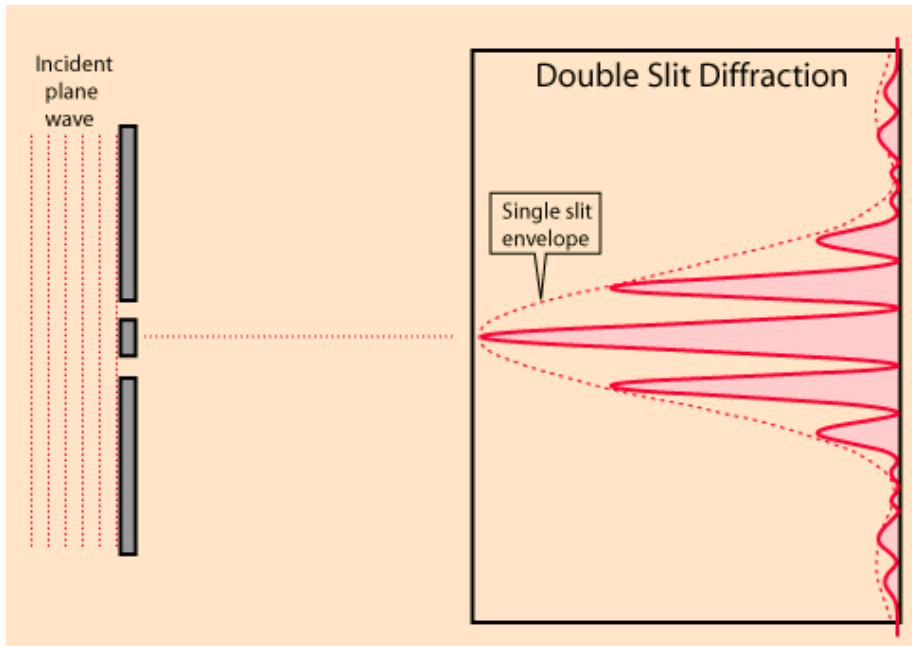
Συμβολή και περίθλαση κυμάτων



Περίθλαση Φωτός από Απλή Σχισμή



Συμβολή και περίθλαση φωτός

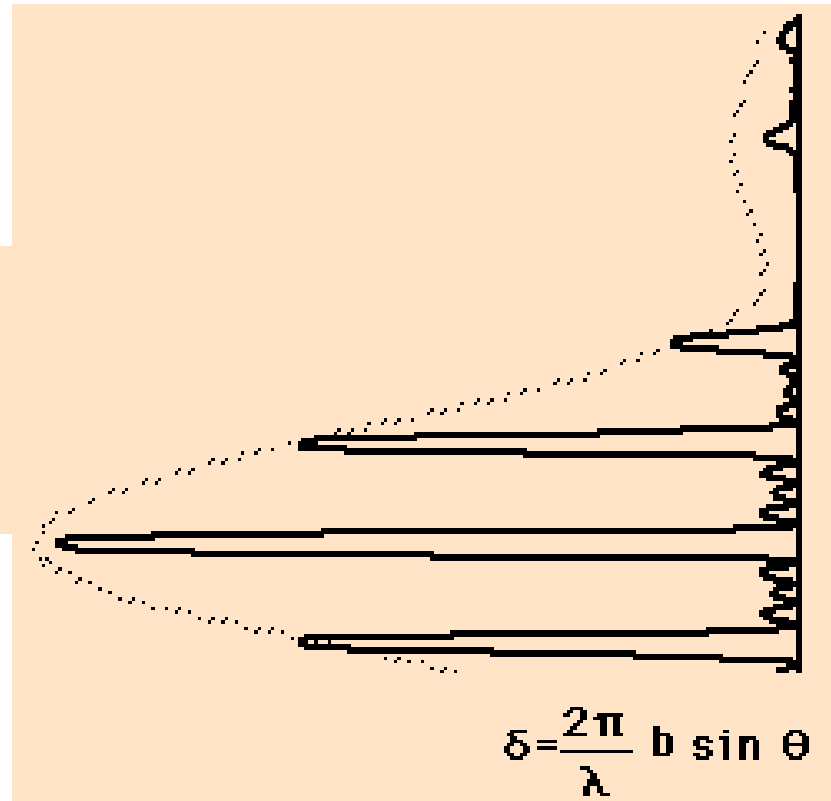
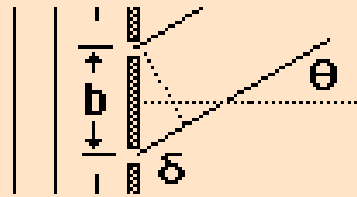


'No-one has ever been able to define the difference between interference and diffraction satisfactorily. It is just a question of usage, and there is no specific, important physical difference between them.'

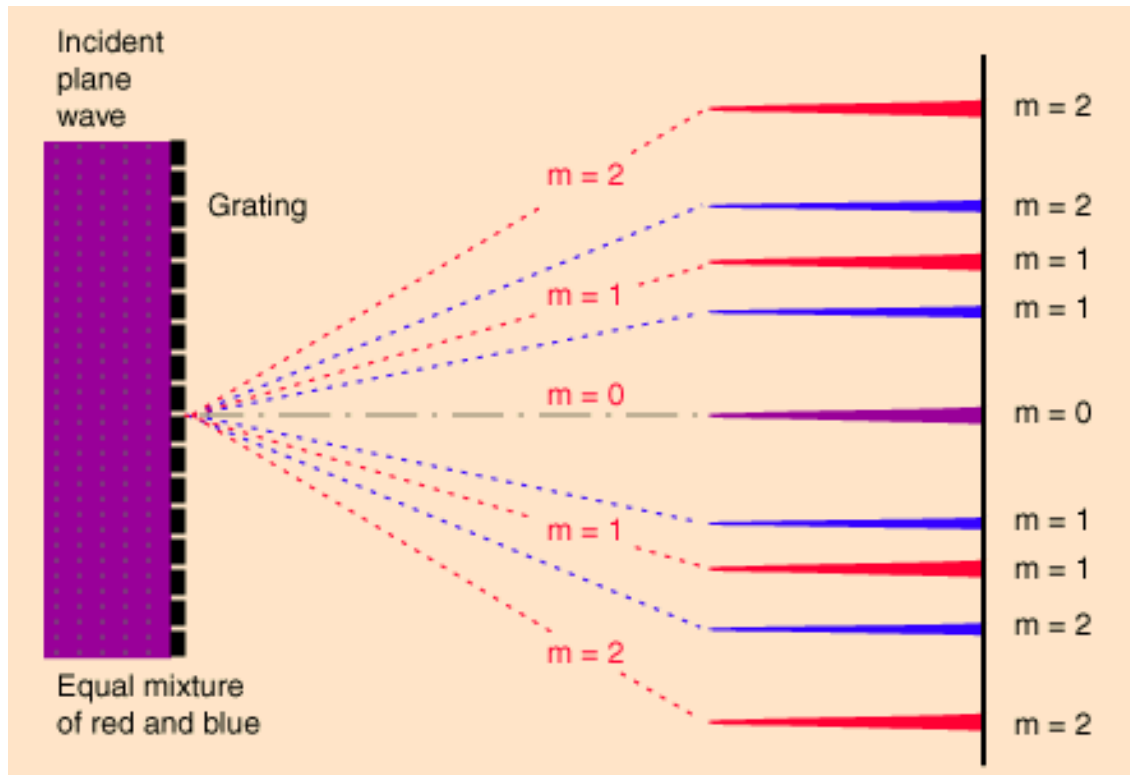
*Richard Feynman
The Feynman Lecture on Physics*

Συμβολή και περίθλαση φωτός από N σχισμές – φράγματα περίθλασης

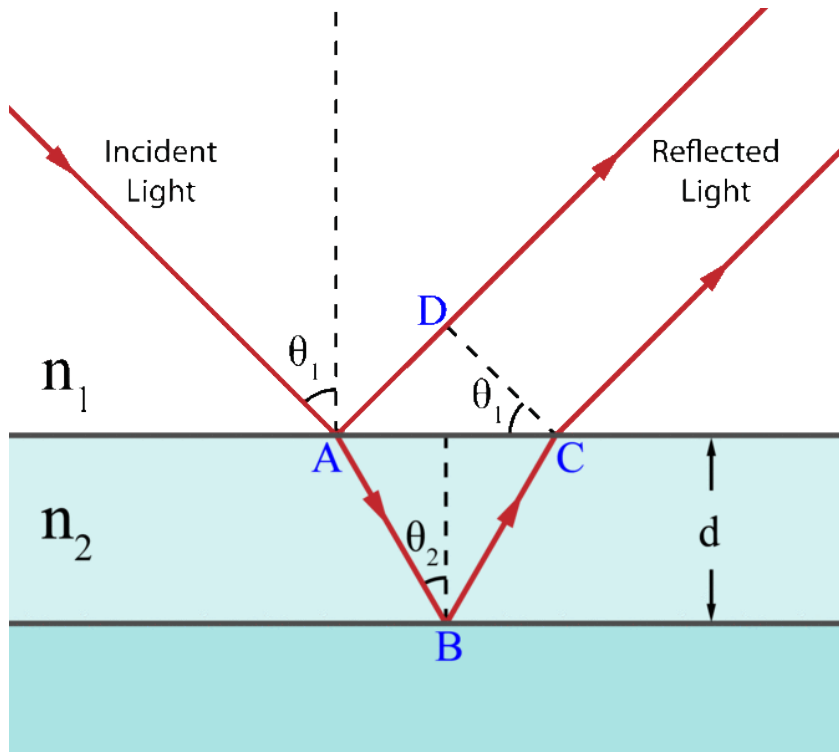
$$I = I_0 \frac{\sin^2 \left[\frac{\delta}{2} \right] \sin^2 \left[\frac{N\delta}{2} \right]}{\left[\frac{\delta}{2} \right]^2 \sin^2 \left[\frac{\delta}{2} \right]}$$



Συμβολή και περίθλαση φωτός από N σχισμές – φράγματα περίθλασης και ανάλυση φωτός

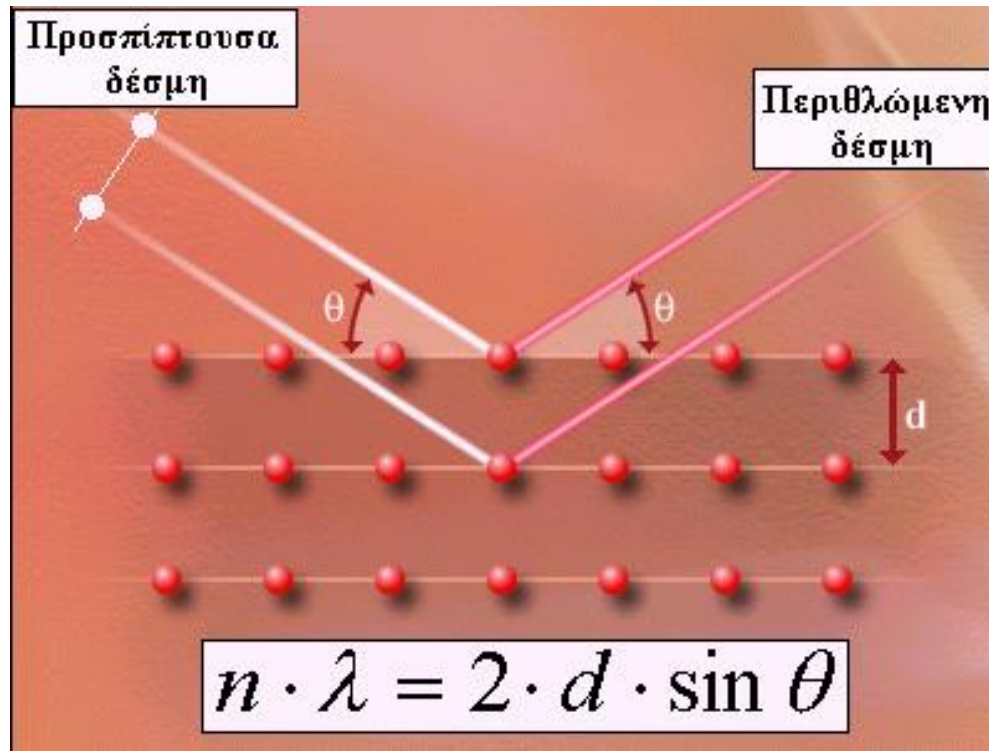
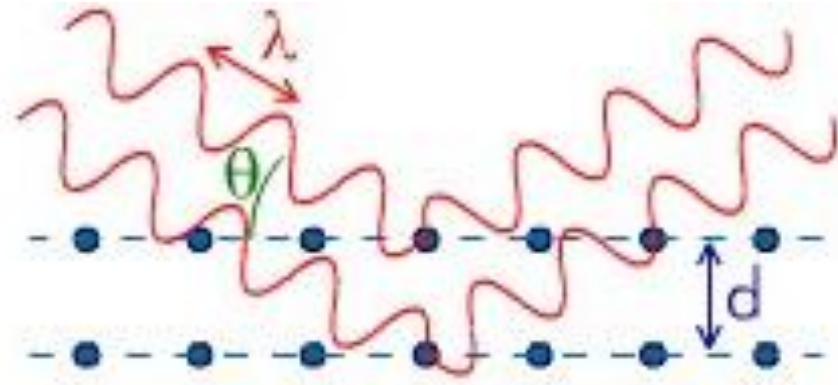


Συμβολή φωτός από πλακίδιο

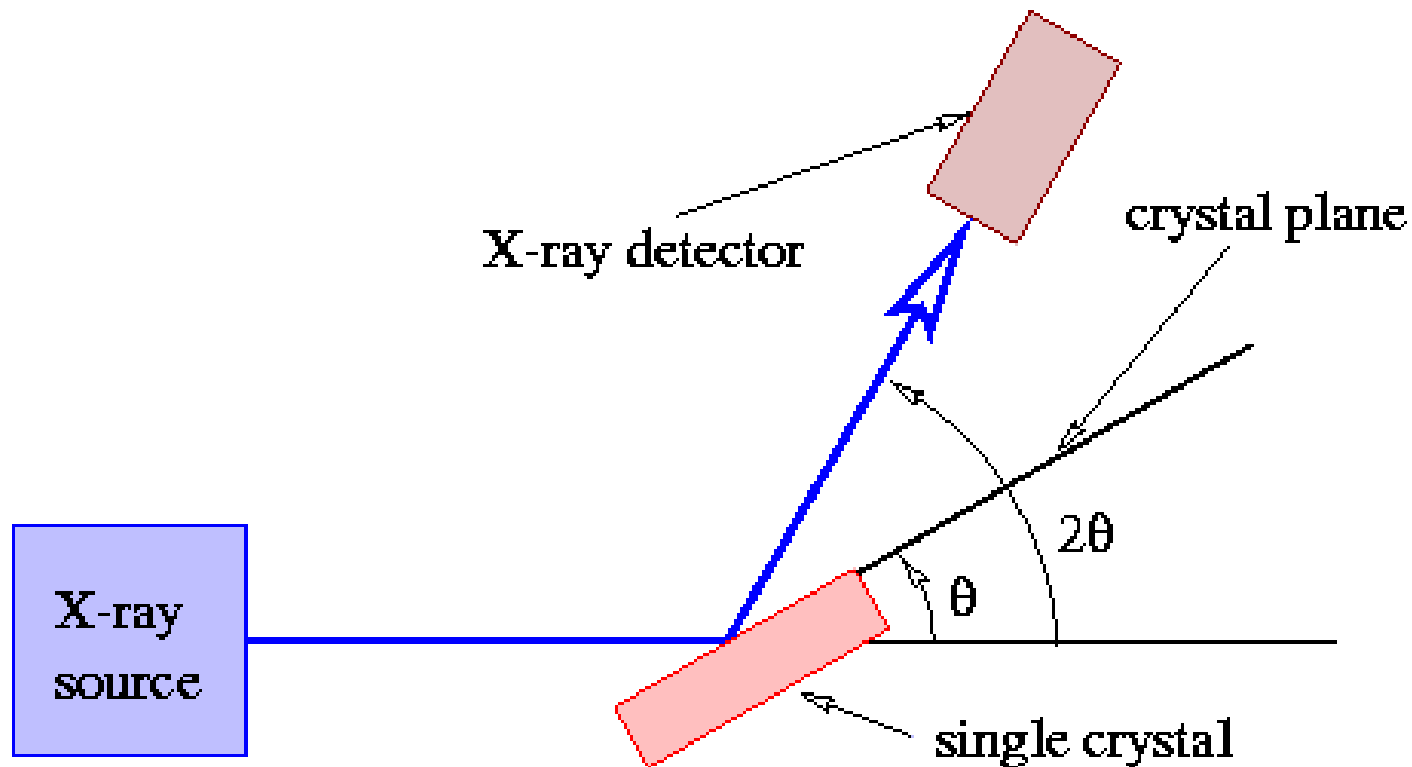


Ο νόμος του Bragg για την περίθλαση των ακτίνων-Χ

Ενισχυτική συμβολή συμβαίνει όταν η διαφορά οπτικού δρόμου είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του μήκους κύματος:



Γεωμετρία θ - 2θ : Εξασφαλίζει την κατοπτρική γεωμετρία



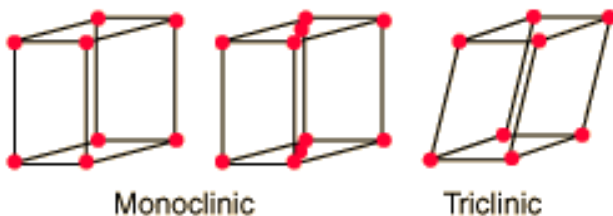
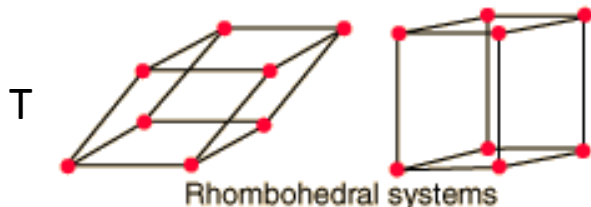
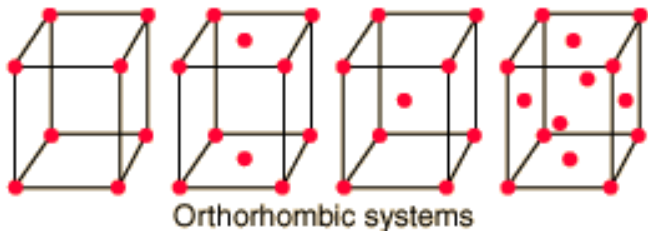
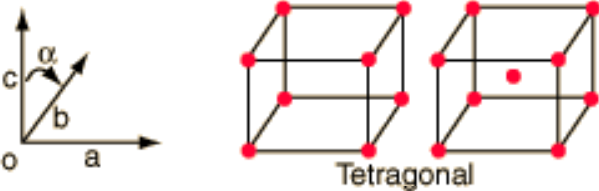
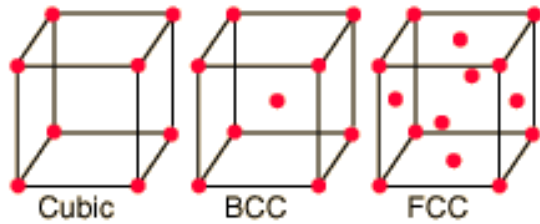
Κρυσταλλογραφία Στερεών

Το ορθό πλέγμα (πλέγματα Bravais)

- Μια τρισδιάστατη μαθηματική κατασκευή όλων των σημείων στο χώρο όπου μπορούν να τοποθετηθούν άτομα ή μόρια που αποτελούν δομικές μονάδες του κρυστάλλου
- Τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά (αποστάσεις, μοναδιαία διανύσματα, κλπ) και τα στοιχεία συμμετρίας (κατοπτρισμοί, άξονες στροφής, κλπ) του πλέγματος χαρακτηρίζουν και τον κρύσταλλο
- Κάθε σημείο του ορθού πλέγματος χαρακτηρίζεται από ένα διάνυσμα θέσης **R**

Κρυσταλλική δομή των Στερεών

Τα πλέγματα Bravais



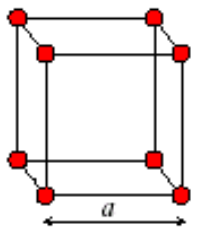
Name	Number of Bravais lattices	Conditions
Triclinic	1	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Monoclinic	2	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
Orthorhombic	4	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	2	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Cubic	3	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trigonal	1	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ \neq 90^\circ$
Hexagonal	1	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

Το ορθό πλέγμα (πλέγματα Bravais)

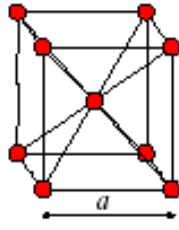
- Παραδείγματα:
 - Μοναδιαία διανύσματα sc
 - Μοναδιαία διανύσματα bcc
 - Μοναδιαία διανύσματα fcc

Πλέγματα Κυβικών Κρυστάλλων

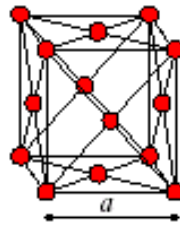
Lattice type	Number of lattice points/atoms per unit cell	Nearest distance between lattice points	Maximum packing density	Example
Simple cubic	1/1	a	$\pi/6 = 52\%$	Phosphor
Body centered cubic	2/2	$a\sqrt{3}/2$	$\pi\sqrt{3}/8 = 68\%$	Tungsten
Face centered cubic	4/4	$a\sqrt{2}/2$	$\pi\sqrt{2}/3 = 74\%$	Aluminium
Diamond	4/8	$a\sqrt{2}/2$ Nearest distance between atoms: $a\sqrt{3}/4$	$\pi\sqrt{3}/16 = 34\%$	Silicon



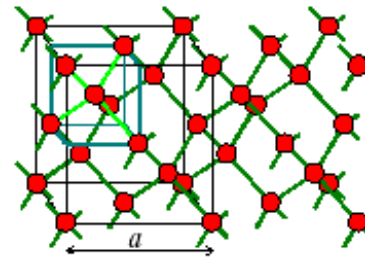
sc



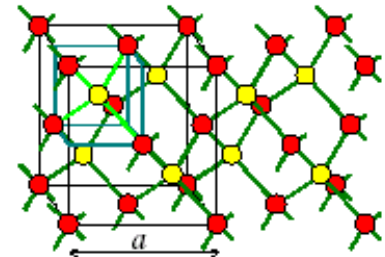
bcc



fcc



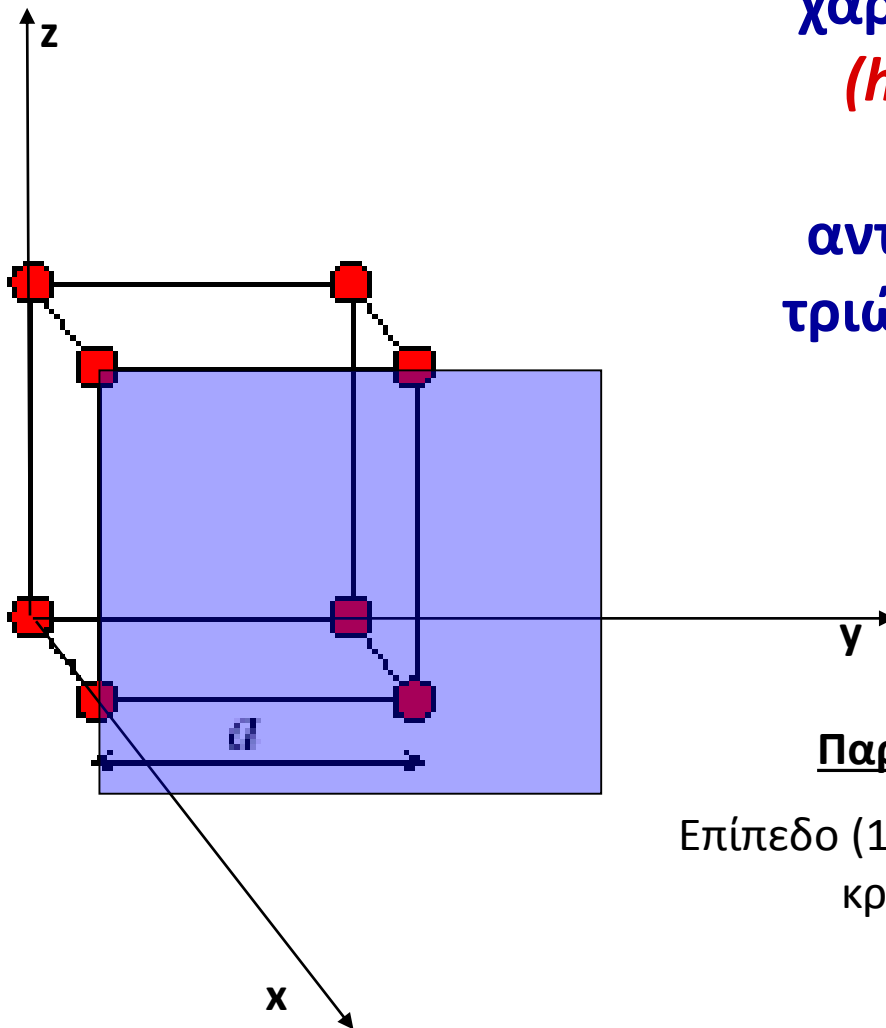
Διαμάντι



**Zincblend
(ZnS)**

Δείκτες Miller

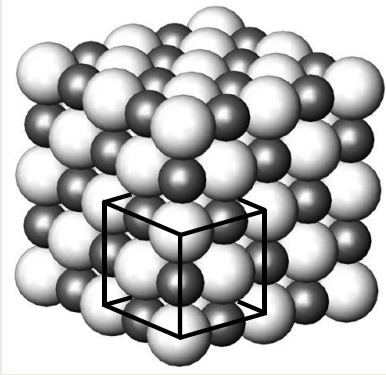
Το κάθε επίπεδο του κρυστάλλου χαρακτηρίζεται από τρεις αριθμούς (hkl) που ονομάζονται **ΔΕΙΚΤΕΣ MILLER** και ορίζονται ως οι αντίστροφοι των τεταγμένων των τριών κρυσταλλογραφικών αξόνων από το αντίστοιχο επίπεδο



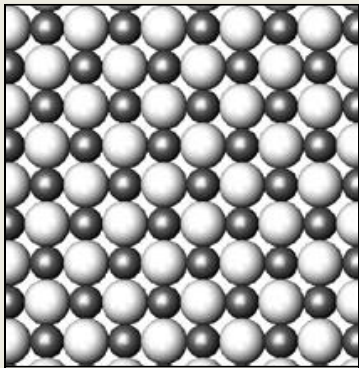
Παράδειγμα:

Επίπεδο (100) ενός κυβικού κρυστάλλου

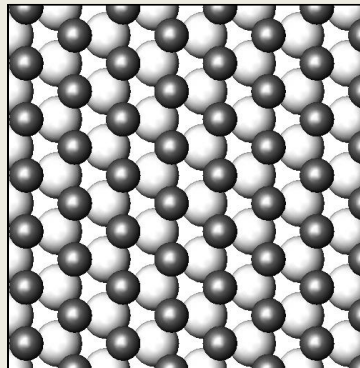
Τομές Κρυστάλλου NaCl στις διευθύνσεις (100) και (111)



(a)



(b)



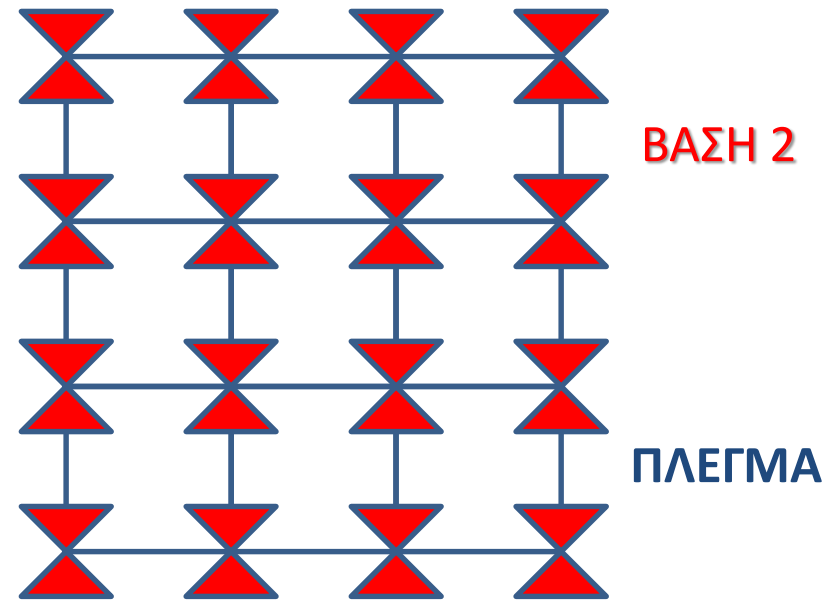
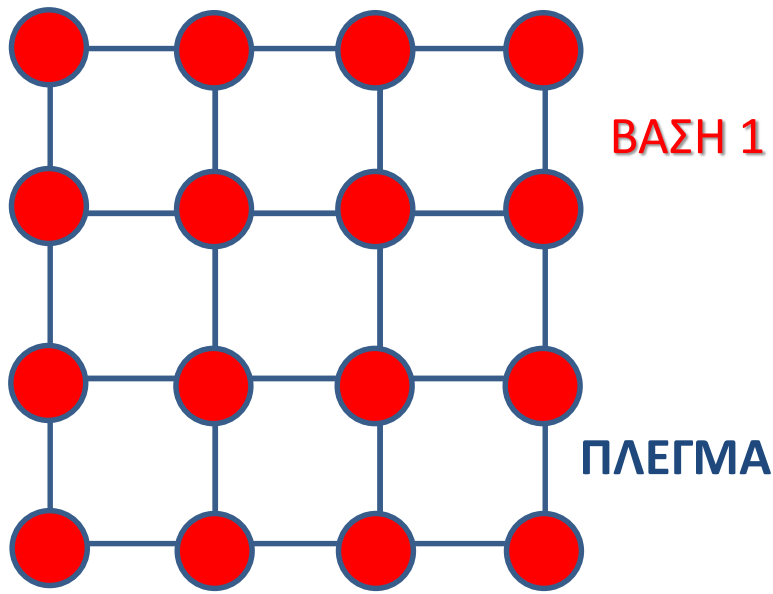
(c)

Τα διάφορα πλεγματικά
επίπεδα του ΙΔΙΟΥ
κρυστάλλου
παρουσιάζουν
ΔΙΑΦΟΡΕΤΙΚΗ διδιάστατη
ΣΥΜΜΕΤΡΙΑ

Εισαγωγή στον Ατομικό Παράγοντα Δομής

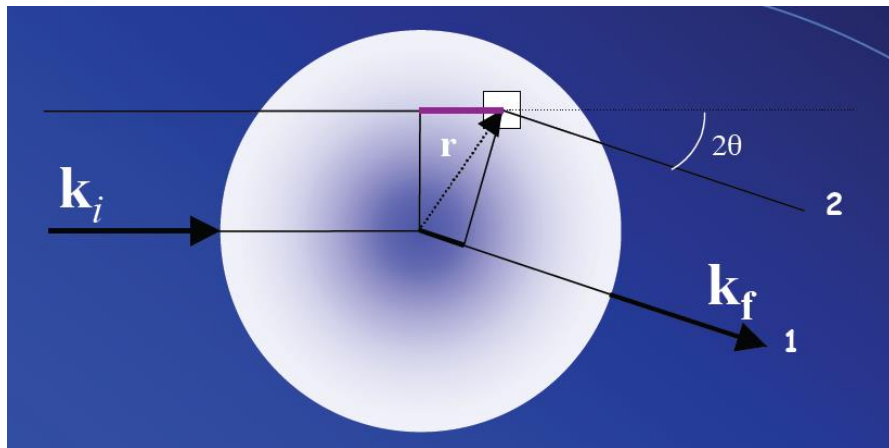
Κρύσταλλος = Πλέγμα+Βάση

- Σε κάθε πλεγματική θέση του κρυστάλλου τοποθετείται ένα άτομο/μόριο το οποίο έχει τα δικά του στοιχεία συμμετρίας.
- Τα στοιχεία συμμετρίας του κρυστάλλου καθορίζονται τόσο από το πλέγμα όσο και από τη βάση



Ατομικός Παράγοντας Δομής

- Τα άτομα της βάσης μπορούν να συνεισφέρουν στο διάγραμμα περίθλασης εξαιτίας των φαινομένων συμβολής της δέσμης των ατίνων-Χ από διαφορετικά σημεία του ατόμου.



$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N f(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = f(\mathbf{r}) * \sum_{j=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$$

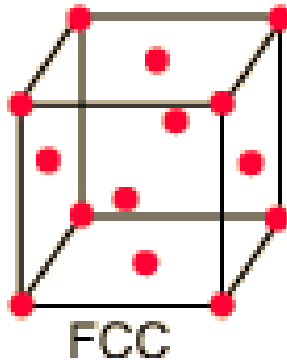
$$\begin{aligned} I(\mathbf{q}) &\sim |\phi(\mathbf{q})|^2 = |f(\mathbf{q})|^2 \times \left(\sum_{j=1}^N e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \right) \times \left(\sum_{k=1}^N e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_k} \right) = \\ &= |f(\mathbf{q})|^2 \sum_{j,k} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)} \end{aligned}$$

S(q)

- Η συμβολή αυτή μετράται από τον ΑΤΟΜΙΚΟ ΠΑΡΑΓΟΝΤΑ ΔΟΜΗΣ του κρυστάλλου.

Ατομικός Παράγοντας Δομής

- Παράδειγμα: Η *fcc* δομή μπορεί να θεωρηθεί ως απλή κυβική με βάση δύο ατόμων στα σημεία $(0,0,0)$ και $(1/2,1/2,0)$.
 - Όταν ικανοποιείται ο νόμος του Bragg για ενισχυτική συμβολή από τα (100) επίπεδα, έχουμε ταυτόχρονα καταστροφική συμβολή λόγω του παράγοντα δομής. Ως αποτέλεσμα η (100) κορυφή του *fcc* ΔΕΝ ΕΜΦΑΝΙΖΕΤΑΙ ΣΤΟ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑ ΠΕΡΙΘΛΑΣΗΣ. Τότε λέμε ότι έχουμε μια **ΚΑΤΑΣΒΕΣΗ**.



Κατασβέσεις σε Κυβικούς Κρυστάλλους

Επίπεδο περίθλασης hkl	100	110	111	200	210	211	220	300 221	310	311	222	320	321	400	410 322
$h^2 + k^2 + l^2$	1	2	3	4	5	6	8	9	10	11	12	13	14	16	17
Απλό	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
BCC	✗	✓	✗	✓	✗	✓	✓	✗	✓	✗	✓	✗	✓	✓	✗
FCC	✗	✗	✓	✓	✗	✗	✓	✗	✗	✓	✓	✗	✗	✓	✓

BCC (Συμμετρία I): $h+k+l=2m$

FCC (Συμμετρία F): $h+k=2m$ ή $k+l=2m$ ή $h+l=2m$

Προσδιορισμός Κυψελίδας σε Κυβικούς Κρυστάλλους

- Η σταθερά (μέγεθος) μιας κυβικής μοναδιαίας κυψελίδας μπορεί να υπολογιστεί ακόμα και από μια κορυφή περίθλασης με δείκτες Miller (hkl):
- Αυτό οφείλεται στην κυβική συμμετρία. Στη γενικότερη περίπτωση χρειαζόμαστε τουλάχιστον 3 κορυφές περίθλασης για να προσδιορίσουμε τα 3 θεμελιώδη διανύσματα της μοναδιαίας κυψελίδας.

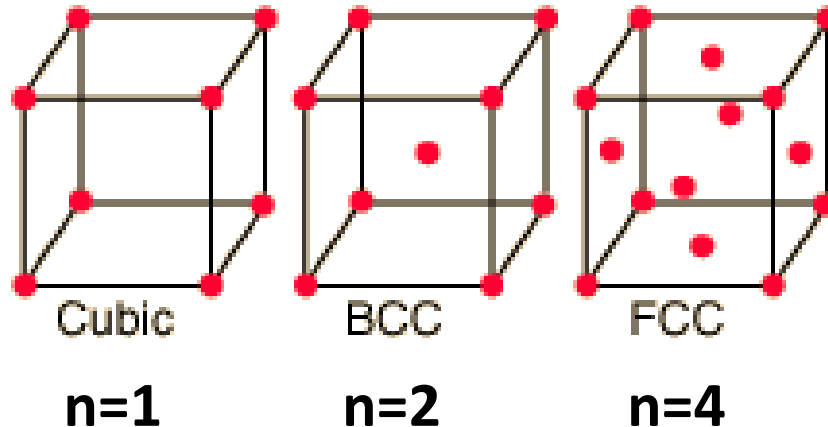
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \Rightarrow a = \frac{\lambda \cdot \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2 \cdot \sin \theta_{hkl}}$$

Προσδιορισμός Πυκνότητας σε Κυβικούς Κρυστάλλους

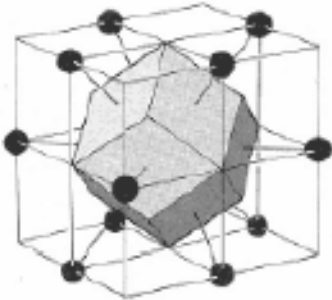
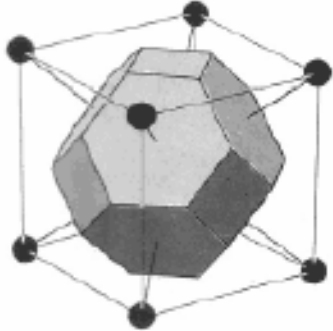
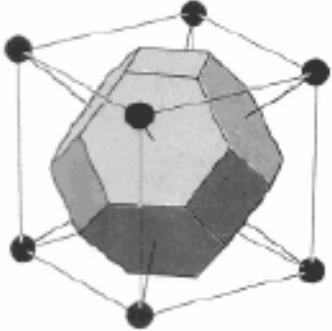
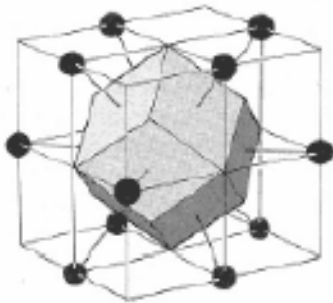
$$\rho = \frac{m}{V}$$

$$V = \alpha^3 \Rightarrow V = \left(\frac{\lambda \cdot \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2 \cdot \sin \theta_{hkl}} \right)^3$$

$$m = MB \times n$$



Το αντίστροφο πλέγμα

Lattice Real Space	Lattice k-space
 <p data-bbox="625 853 788 882">bcc WS cell</p>	 <p data-bbox="1205 853 1290 882">fcc BZ</p>
 <p data-bbox="625 1263 788 1292">fcc WS cell</p>	 <p data-bbox="1205 1263 1290 1292">bcc BZ</p>

Το αντίστροφο πλέγμα

- Η διερχόμενη ακτινοβολία από έναν κρύσταλλο γενικά δεν έχει την ίδια περιοδικότητα με αυτόν.
- Για ορισμένα κκυματανύσματα \mathbf{k} το διερχόμενο κύμα έχει την ίδια περιοδικότητα με το πλέγμα Bravais
- Το σύνολο των κυματανυσμάτων \mathbf{K} για τα οποία το επίπεδο κύμα έχει την περιοδικότητα του πλέγματος Bravais ορίζεται ως το αντίστροφο πλέγμα

Το αντίστροφο πλέγμα

Από τη συνθήκη περιοδικότητας έχουμε:

$$e^{iK \cdot (R+r)} = e^{iK \cdot r} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow e^{iK \cdot R} = 1 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow K \cdot R = 2\pi m$$

Το αντίστροφο πλέγμα

Μοναδιαία διανύσματα:

$$a_1^* = b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)} = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{V}$$

$$a_2^* = b_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)} = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{V}$$

$$a_3^* = b_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)} = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{V}$$

Το αντίστροφο πλέγμα

- Παραδείγματα:
 - Μοναδιαία διανύσματα sc
 - Μοναδιαία διανύσματα bcc
 - Μοναδιαία διανύσματα fcc

Το αντίστροφο πλέγμα

Ας θυμηθούμε την κβαντική μας...

Ο χώρος των θέσεων συνδέεται με τον χώρο των ορμών μέσω του μετασχηματισμού Fourier:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3} \int_{\mathbf{k}\text{-space}} \phi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{k}$$

Το αντίστροφο πλέγμα

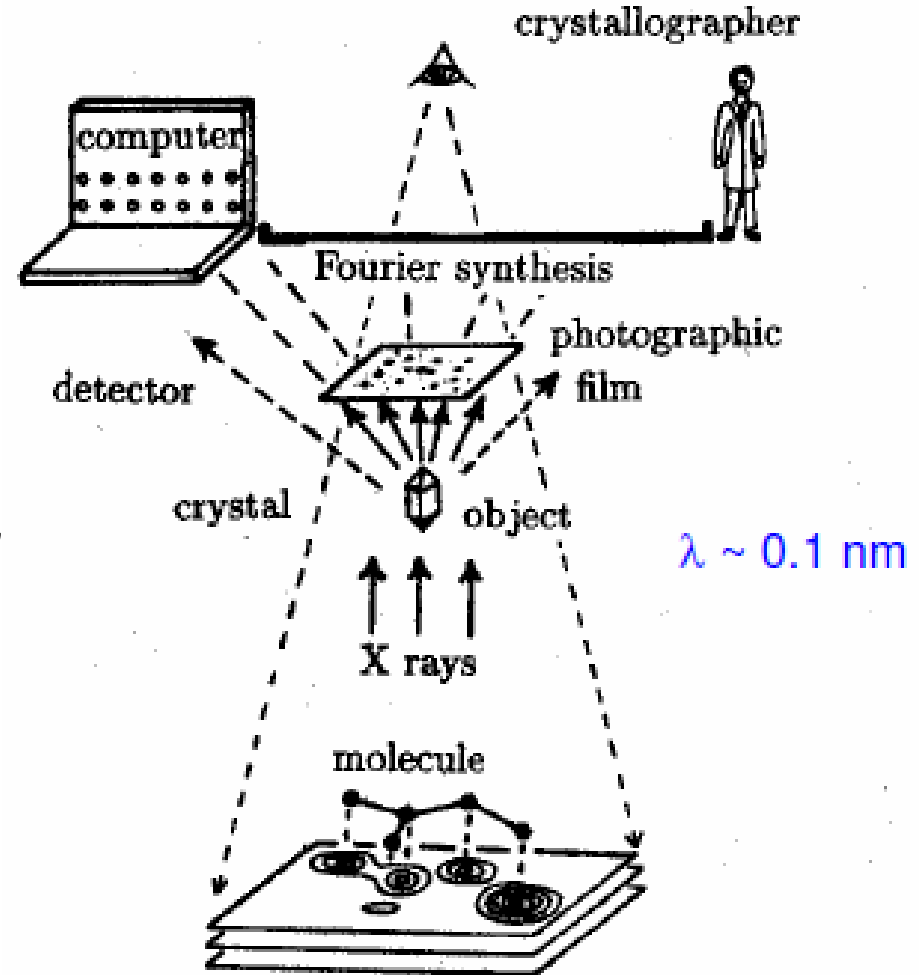
Σε πλήρη αντιστοιχία:

Το αντίστροφο πλέγμα είναι ο μετασχηματισμός Fourier του ορθού πλέγματος

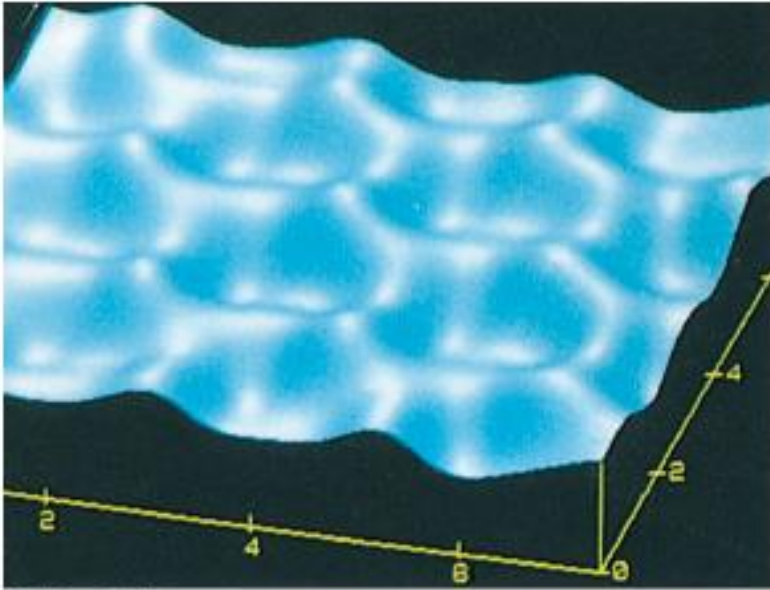
Το αντίστροφο πλέγμα

Σε πλήρη αντιστοιχία:

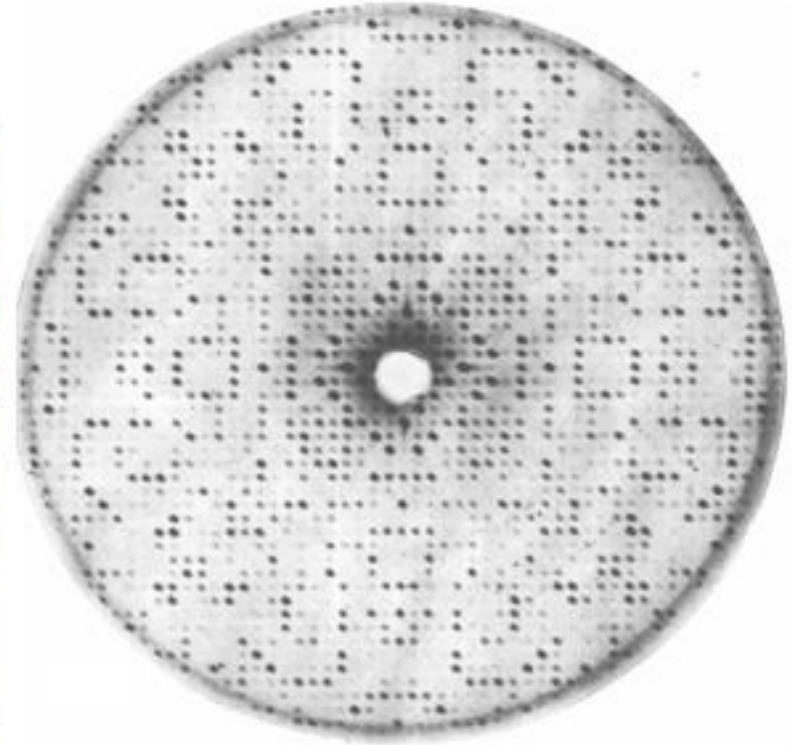
- Το αντίστροφο πλέγμα είναι ο μετασχηματισμός Fourier του ορθού πλέγματος
- Δίνει τον χώρο των κυματανυσμάτων που μπορούν να δώσουν περίθλαση
- Αποτελεί απεικόνιση του διαγράμματος περίθλασης σε 3D



Το αντίστροφο πλέγμα

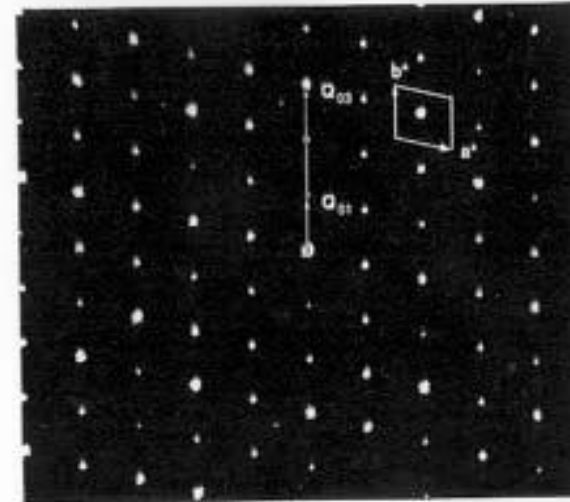
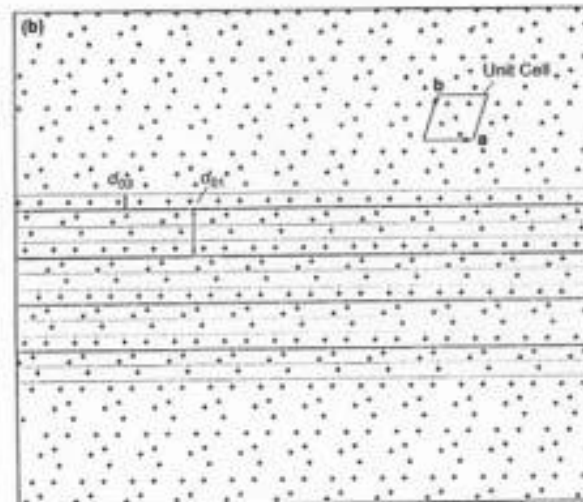
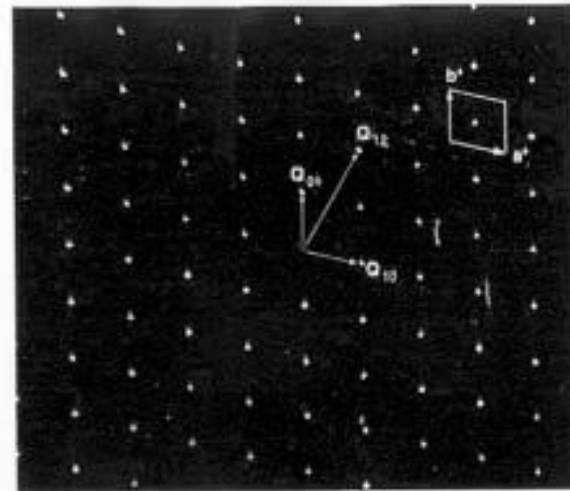
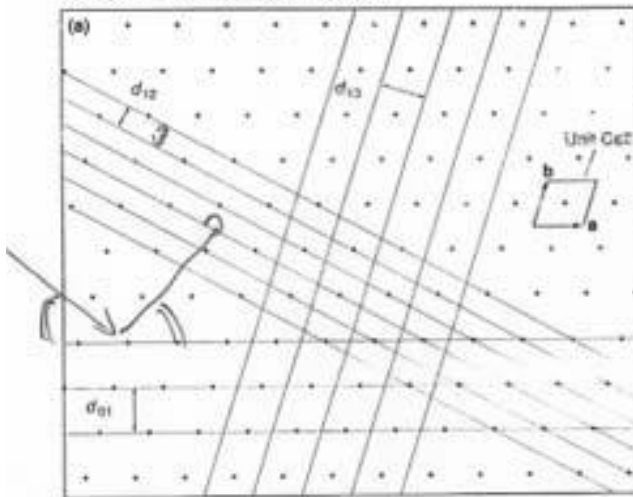


© 2004 Thomson | Brooks/Cole

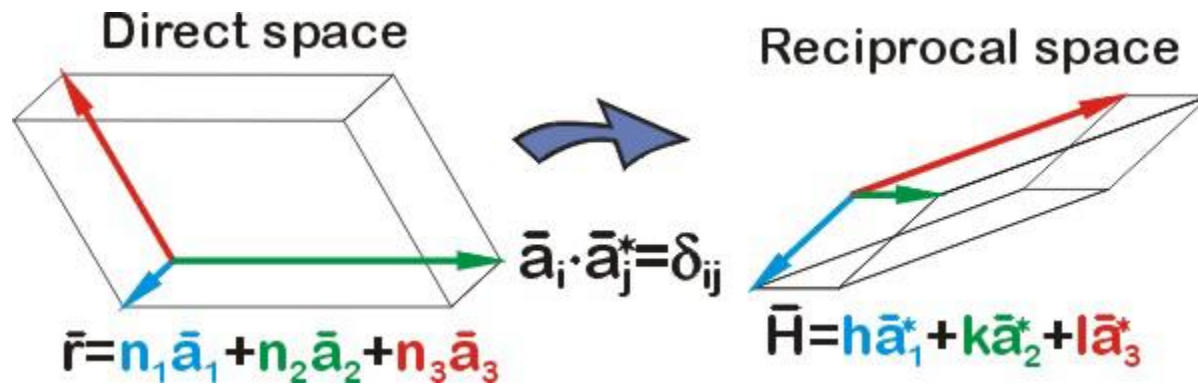


Το αντίστροφο πλέγμα

X-Ray and Neutron Crystallography



Τί είναι τελικά οι δείκτες Miller?



Οι δείκτες Miller είναι οι συντεταγμένες στο αντίστροφο πλέγμα των κρυσταλλικών επιπέδων εκείνων που έχουν την ίδια περιοδικότητα d με το αντίστοιχο σημείο!