

Frumeinda- og ljósfræði:

Litróf Röntgengeisla

Kaflí 7

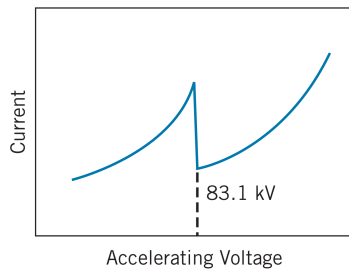
Jón Tómas Guðmundsson

tumi@hi.is

6. vika vor 2020

Innri rafeindir og ísogsbrún

- Gerum nú ráð fyrir að rafeindageisli sé sendur um klefa sem fylltur er af kvikasilfurgufu
- Hröðunarspenna rafeindanna er um 100 kV

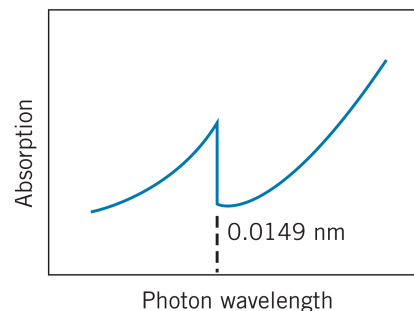


Frá Krane (2012)

- Myndin sýnir strauminn sem fer um kvikasilfurgasið sem fall af hröðunnarspennu
- Skarpt fall í straum á sér stað við 83.1 kV
- Lág hröðunarspenna svarar til víxlverkana sem ýta ytri rafeindum kvikasilfuratóms til hærri ástanda (eða jóna atómið)

Innri rafeindir og ísogsbrún

- Fall í straum við 83.1 kV stafar af því að kvikasilfuratómið ísogar orku frá rafiendageislanum sem jónar atómið með því að kýla lausa eina fastar bundna innri rafeindanna
- Bindiorka innri rafeindar er í þessu tilfalli er 83.1 keV
- Svipaða tilraun má framkvæma með því að send Röntgengeisla um þunna kvikasilfurhúð og mæla ísogsrófið



Frá Krane (2012)

- Ísog sem fall af bylgjulengd Röntgengeislanna er sýnt á mynd

Innri rafeindir og ísogsbrún

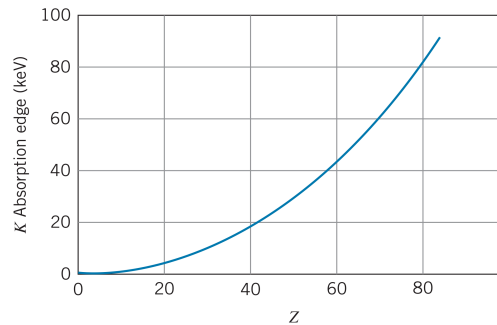
- Ljóseindir eru gleyptar frá geislanum með ljósröfun (e. photoelectric effect) þar sem rafeindir eru kýldar út frá kvikasilfuratómunum
- Með aukinni bylgjulengd (eða þegar orka ljóseindanna fer minnkandi), þá kemur að því að ljóseindirnar hafa ekki nægilega orku til að mynda í það minnsta eina ljósrafeind og fram kemur skarpt fall í ísogi
- Bylgjulengdin þar sem þetta gerist er 0.0149 nm, sem svarar til orku 83.1 keV
- Þetta skarpa fall í rafstraumi eða útgeislun ljósrafeinda er nefnt ísogsbrún (e. absorption edge)
- Það svarar til losunar innri rafeindar frá atóminu
- Fyrir kvikasilfur hefur fastast bundna (1s) rafeindin bindiorku sem er 83.1 keV

Innri rafeindir og ísogsbrún

- Í dreifingartilrauninni þegar orka geislans fer umfram 83.1 keV, þá valda árekstrar rafeindar við kvikasilfursatóm því að orka sem nemur 83.1 keV flyst til atómsins og einni 1s rafeind er útgeislað
- Á sama hátt þegar orka ljóseindar er umfram 83.1 keV (eða bylgjulengdin fer niður fyrir 0.0149 nm), þá getur ljóseindin ýtt út ljósrafeind frá 1s hvelinu, en neðan við 83.1 keV er það ekki mögulegt
- Áður hefur verið nefnt að þegar $n = 1$ stigið er þekkt sem K skel
- Við höfum því verið að ræða K ísogsbrúnina í kvikasilfri, sem svarar til að rafeind losni frá K skelinni
- Það er einnig hægt að losa lausar bundna rafeind frá L skel ($n = 2$) og þá er talað um L ísogsbrún

Innri rafeindir og ísogsbrún

- Í kvikasilfri er L ísogsbrúnin nálægt 14 keV (Vegna fíngerðar klofnunar eru í raun þrjú ástönd í L skelinni með örlítið mismunandi orku)



Frá Krane (2012)

- Myndin sýnir K ísogsbrún frumeindanna – K ísogsbrúnin fer hækkandi með hækkandi atómtölu
- Með hækkandi kjarnhleðslu eru 1s rafeindirnar dregnar inn í smærri og fastar bundnar brautir og er þetta samfelld ferli sem er að mestu óháð röðun rafeindanna á skeljar og engar snöggar breytingar

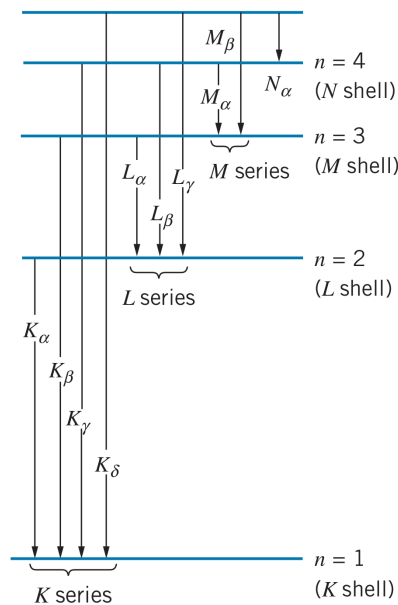
Röntgen færslur

- Röntgengeislur eru rafsegulgeislun með bylgjulengdir á bilinu 0.01 til 10 nm (orku frá 100 eV til 100 keV)
- Samfelld Röntgenróf kemur til vegna hröðunar rafeinda
- Hér skoðum við stakrænt Röntgenróf sem kemur við útgeislun frá atómum
- Röntgengeislum kemur fram við færslur milli fastar bundinna innri rafeindanna í atómi
- Við eðlilegar aðstæður eru öll innri hvel atóms fyllt svo að engar færslur eiga sér stað

Röntgen færslur

- Þegar hins vegar ein innri rafeind er fjarlægð, eins og þegar K rafeind er útgeislað, þá getur færsla átt sér stað
- Ef einni innri rafeind er fjarlægð, mun rafeind frá herra hluthveli snögglega fylla þá eyðu og geila út ljóseind í Röntgenrófinu
- Orka þessarar ljóseindar nemur orkumuninum milli upphafs og loka ástands rafeindarinnar sem að færir sig
- Þegar 1s rafeind er fjarlægð myndast eyða í K skel
- Þeir Röntgengeislar sem myndast við að fylla þessa eyðu eru þekktir sem K skeljar Röntgengeislar

Röntgen færslur

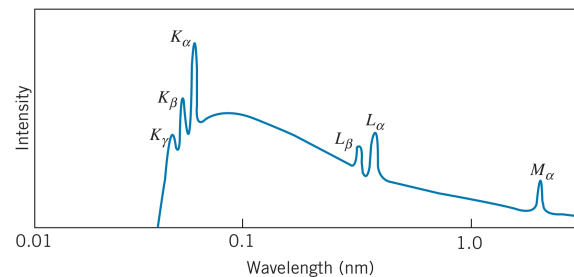


Frá Krane (2012)

- Þeir K skeljar Röntgengeislur sem eiga upptök sín í $n = 2$ skelinni (L skel) eru þekktir sem K_α Röntgengeislur og þeir sem eiga upptök sín í M skelinni eru þekktir sem K_β Röntgengeislur
- Þessar færslur eru sýndar á myndinni

Röntgen færslur

- Ef að rafeindir eða ljóseindir kýla út rafeind frá L skel, þá munu rafeindir frá hærri ástöndum falla niður og fylla eyðuna
- Þær ljóseindir sem þá er geislað út eru þekktar sem L Röntgengeislar
- Þeir Röntgengeislar sem lægsta orku hafa í L röðinni, eru þekktir sem L_α
- Á sama hátt merkjum við Röntgengeisla raðirnar M,N,....



Frá Krane (2012)

- Myndin sýnir Röntgenróf frá silfri

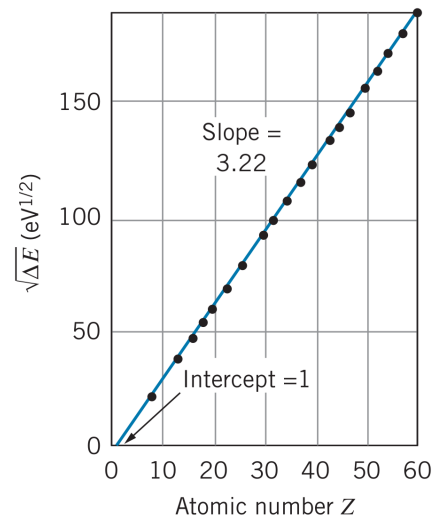
Lögmál Moseley

- Skoðum nú K_α geisla sem er geislað þegar rafeind í L skel fyllir eyðu í K skel
- Rafeind í L skel er yfirleitt skýlt með tveimur 1s rafeindum svo að virk kjarnhleðsla er $Z_{\text{eff}} = Z - 2$
- Þegar ein þessara 1s rafeinda fjarlægð með myndun eyðu í K skelinni er aðeins ein 1s rafeind skermar fyrir L skelina, svo að $Z_{\text{eff}} = Z - 1$
- Góð nálgun er að gera ráð fyrir K_α geislun sé færsla frá $n = 2$ til $n = 1$ í einnar rafeindar atómi með $Z_{\text{eff}} = Z - 1$
- Þá er hægt að beita jöfnu Bohr til að reikna orkuna í K_α færslu í atómi með atómtölu Z

$$\Delta E = E_2 - E_1 = (-13.6 \text{ eV})(Z-1)^2 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1^2} \right) = (-10.2 \text{ eV})(Z-1)^2$$

Röntgen færslur

- Rétt eins og með K ísogsbrúnina, þá breytist orka K_α samfelld með atómtölu og sýnir engin merki um skeljarnar



Frá Krane (2012)

- Þegar $\sqrt{\Delta E}$ er teiknað sem fall af Z væntum við þess að fram komi bein lína með hallatölu $(10.2 \text{ eV})^{1/2} = 3.22 \text{ eV}^{1/2}$ eins og sést á myndinni

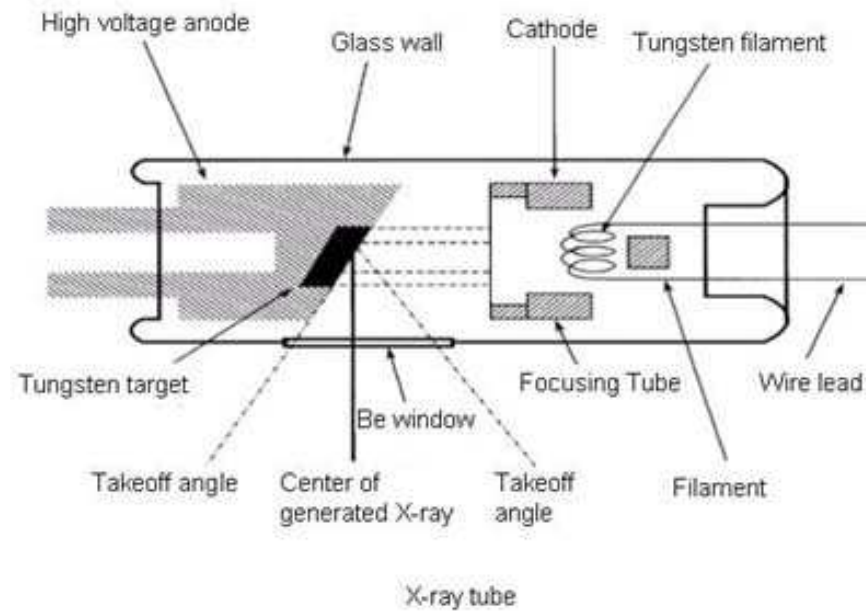
Röntgen færslur

- Þetta er þess vegna öflug leið til að ákvarða atómtölu og var fyrst beitt 1913 af H. G. J. Moseley, sem mældi K_α orku frumefna og ákvarðaði atómtölur
- Það hvernig orkan Röntgengeisla er háð atómtölu er þekkt sem lögmál Moseley
- Moseley fann að tiltekin frumefni falla ekki inn í röðina, þar sem frumefni með hærri Z hafðu lægri massa (t.d. kobalt og nikkell eða jod og tellurium)
- Hann fann einnig göt, sem svöruðu til óþekktra frumefna, t.d. technetium ($Z = 43$) sem ekki er að finna í náttúrunni og var ekki þekkt á dögum Moseley

⇒ Dæmi 7.1

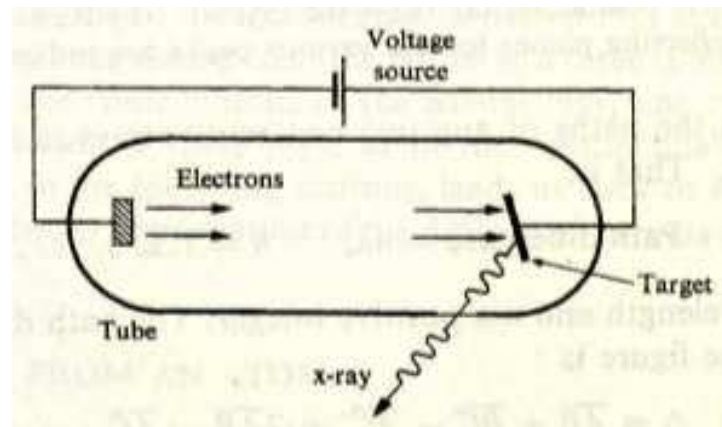
Röntgengeislar

- Rafeindum geislað út frá bakskauti í lofttæmi og hraðað þ. a. þær hafa háa hreyfiorku er þær lenda á forskautinu



- Við áreksturinn myndast Röntgengeisli

Röntgengeislar

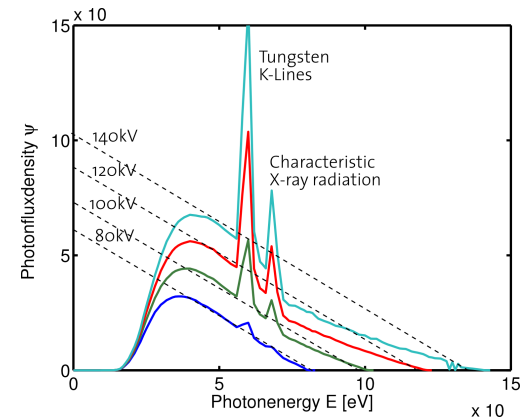
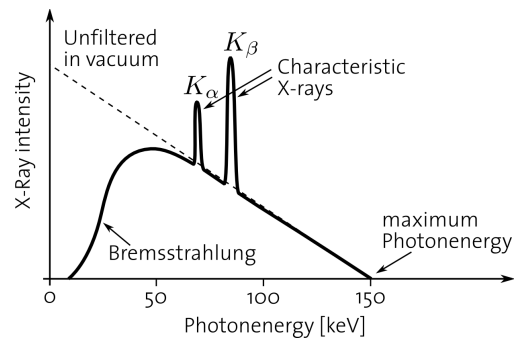


Frá Omar (1975)

- Röntgengeislar eru rafsegulbylgjur með bylgjulengd nálægt 1 \AA
 - u. þ. b. grindarfasti kristalla
- Orka geislanna er

$$E = h\nu \approx 10^4 \text{ eV}$$

Röntgengeislar



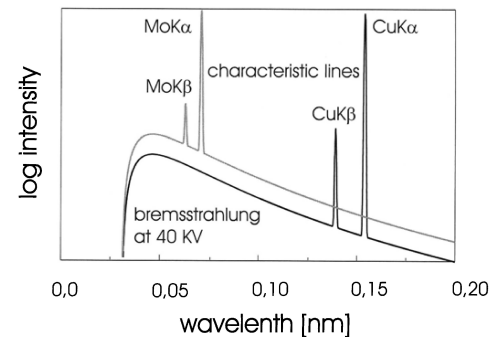
- Rófið er samfelld með hæstu tíðni ν_0

$$eV = h\nu_0$$

þar sem V er hröðunarspenna og bylgjulengdin er

$$\lambda_0 = \frac{12.3}{V[\text{kV}]}$$

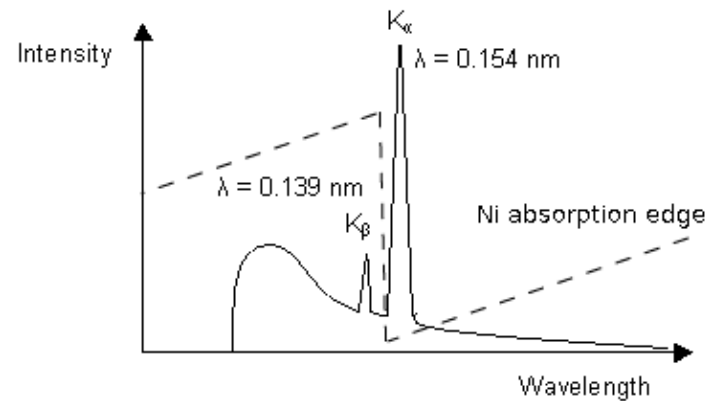
Röntgengeislar



Frá Pietsch et al. (2004)

- Útgeislunarróf röntgenlampa með kopar og mólýbden skotmörkum og hröðunarorku 40 kV.
- Útgeislunin samanstendur af samfelldri bremsstrahlung geislun og einkennandi K_{α} tvístigi við $\lambda_1 = 0.15056$ nm and $\lambda_2 = 0.154439$ nm, fyrir kopar og $\lambda_1 = 0.07093$ nm and $\lambda_2 = 0.071359$ nm fyrir mólýbden. Að auki er svo K_{β} -lína sem samanstendur af nokkrum undirlínunum við $\lambda_{\beta} = 0.1396$ nm fyrir kopar og 0.06323 nm fyrir mólýbden.

Röntgengeislar



- Ísogsbrún Ni er miðja vegu milli K_β og K_α línanna frá kopar
- K_β línan skerðist því verulega á meðan K_α línan fer nánast óbreytt í gegn
- Fyrir aðrar bylgjulengdir eru valdar viðeigandi síur

Röntgengeislar

- Röntgengeisli sem fer um efni fer að hluta í gegn og verður fyrir ísogi að hluta
- Tilraunir sýna að hlutfallsleg deyfing Röntgengeisla sem fer um efni er gefin með

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

þar sem μ er línulegur ísogsstuðull

- Styrkur geislans er

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

þar sem I_0 er upphafsstyrkur geislans og x er vegalengdin sem geislinn fer og μ er ísogsstuðull

Frekari upplýsingar

- Þessi kafli er að mestu byggður á kafla 8.5 hjá Krane (2012). Smabærilega umfjöllun er að finna í kafla 9.8 hjá Eisberg and Resnick (1985).

Heimildir

Eisberg, R. and R. Resnick (1985). *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles* (2 ed.). New York, New York: John Wiley & Sons.

Krane, K. S. (2012). *Modern Physics* (3 ed.). Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons.

Omar, A. (1975). *Elementary Solid State Physics*. Reading, Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Company.

Pietsch, U., V. Holý, and T. Baumbach (2004). *High-Resolution X-Ray Scattering: From Thin Films to Lateral Nanostructures* (2 ed.). Advanced Texts in Physics. New York: Springer Verlag.