

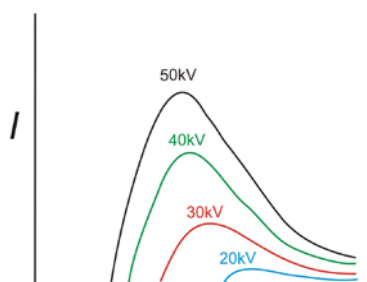
2. RTG. ŽIARENIE A JEHO DIFRAKCIA

2.1. Zdroj a charakteristika rtg. žiarenia

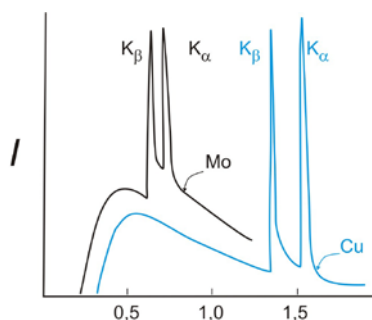
Röntgenové (rtg) žiarenie (lúče X) predstavuje časť elektromagnetického spektra, ktoré spadá medzi ultrafialové svetlo a gama žiarenie. Jeho vlnové dĺžky sa pohybujú od 0,1 po 100 Å. Hoci Ångström ($1 \text{ Å} = 10^{-8} \text{ cm}$) nepatrí medzi jednotky SI, stále sa často používa pri práci s molekulovými rozmermi, kedy je užitočné použiť celé číslo. V poslednej dobe sa však častejšie používa jednotka nm (nanometer), ktorá patrí do SI sústavy. Takže nepedagogicky necháme na Vás, čo budete používať. Len nezabudnite, že $1 \text{ Å} = 0,1 \text{ nm}$.

Rtg. žiarenie je zvyčajne produkované prudkým zabrzdzením rýchleho toku elektrónov na hmotnej prekážke a premenením pohybovej energie na žiarenie. Na žiarenie sa premení len nepatrné množstvo ($\sim 1\%$) kinetickej energie elektrónov. Zostávajúca časť sa premení na teplo. Hoci o rtg. žiarení hovoríme ako o vlnení, jeho energia nie je vyžarovaná kontinuálne, ale ako keby vo zväzkoch vĺn, kvantách – fotónoch. Najbežnejším zdrojom rtg. žiarenia sú rtg. trubice (rtg. lampy). Sú to sklenené banky so zatavenými elektródami, medzi ktorými je vysoké napätie. Z katódy sú emitované elektróny, ktoré urýchľované vysokým napätím (15 až 60 kV) dopadajú na antikatódu (anódu) a produkujú dva základné typy rtg. žiarenia:

1. spojité žiarenie, ktoré má spojité spektrum rôznych vlnových dĺžok (**Obr.4**)
2. charakteristické žiarenie s ostrými píkmi typickými pre použitý materiál antikatódy (**Obr.5**).



Obr. 4. Spojité rtg.spektrá ako funkcia urýchľujúceho napätia. Na osi x je vlnová dĺžka a na osi y intenzita.



Obr. 5. Charakteristické spektrá pre Mo (50 kV) a pre Cu (35 kV). Na osi x je vlnová dĺžka v Å a na osi y intenzita.

Spojité žiarenie vzniká prudkým spomalením elektrónov v dôsledku ich zrážky so silným elektrickým poľom v okolí jadier atómov antikatódy, pričom dochádza k strate energie. Táto strata sa prejaví vyžiarovaním fotónov s frekvenciou, ktorá zodpovedá hodnotám rtg. spektra. Distribúcia vlnových dĺžok spojitého žiarenia závisí predovšetkým od urýchľovacieho napätia, zatiaľčo charakteristické žiarenie závisí významne od atakovaného materiálu (**Obr. 4, 5**).

Charakteristické žiarenie vzniká nárazom rýchlo letiacich elektrónov na antikatódu, čo spôsobí, že elektróny sú vyrazené z ich orbitálov mimo sféry vplyvu atómového jadra. Na orbitáli K, ktorá predstavuje fyzikálnu dráhu elektrónov najbližšie k jadru, sú elektróny najsilnejšie viazané a treba energiu približne 10 000 eV (pre prvky s atómovým číslom ~ 30), aby sa uvoľnili z ich atómových orbitálov. Vyrazený elektrón je okamžite nahradený ďalším elektrónom z vyššej energetickej úrovne. Pritom dochádza k vyžiarovaniu fotónov s frekvenciou zodpovedajúcou spektru. Množstvo uvoľnených fotónov je dané rozdielom medzi energiami do procesu zapojených atómových úrovní. V praxi sa najviac využíva charakteristické žiarenie vznikajúce vtedy, keď je elektrón vyrazený z hladiny K a na jeho miesto sa posunie elektrón z hladiny L a M. Tým vznikne séria charakteristických línií, ktoré označujeme $K\alpha_1$, $K\alpha_2$ a $K\beta$ (**Obr.6**).

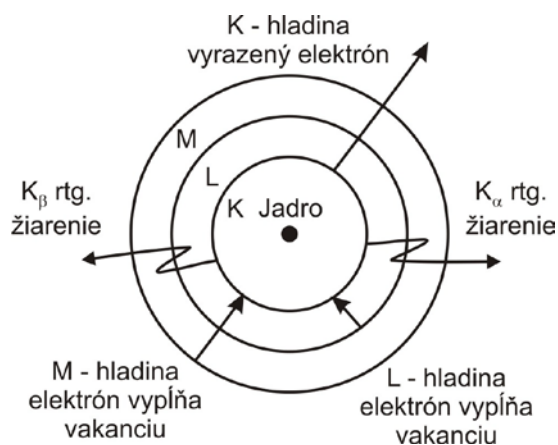
$K\alpha_1, K\alpha_2$ $L \rightarrow K$

$K\beta_1, K\beta_2$ $M \rightarrow K$

Pretože rozdiel v energiách medzi L a K orbitálom je menší ako medzi M a K, $K\alpha$ má vždy dlhšiu vlnovú dĺžku ako $K\beta$. $K\alpha_1$ je dvakrát intenzívnejšie ako $K\alpha_2$ a 3-6 krát silnejšie ako $K\beta_1$. $K\beta_2$ je zvyčajne taká slabá, že sa ignoruje. $K\alpha$ línie vytvárajú veľmi blízky dublet. Jeho váženým priemerom

je hodnota $K\alpha$, s ktorou pri difrakčnej analýze najčastejšie pracujeme.

So zvyšujúcim sa atómovým číslom antikatódových prvkov sa ich charakteristické línie posúvajú ku kratším vlnovým dĺžkam. V praxi je však materiál pre anódu limitovaný nasledovnými vlastnosťami: vodivosť, hustota, pevnosť, vysoký bod tavenia. Preto sa



Obr. 6. Ilustrácia ako dochádza ku rtg. žiareniu. Po vyrazení elektrónu z hladiny K je toto vakantné miesto zaplnené elektrónom z vyššej energetickej hladiny. Tento proces emituje rtg. fotón.

najčastejšie ako materiál na prípravu antikatód využíva meď, kobalt a železo (vlnová dĺžka charakteristického žiarenia $\text{Cu K}\alpha = 1.54178\text{\AA}$, $\text{Co K}\alpha = 1.79020\text{\AA}$, $\text{Fe K}\alpha = 1.93728\text{\AA}$).

Jednou z najdôležitejších vlastností rtg. žiarenia je schopnosť prechádzať nepriehľadnými materiálmi. Je logické, že pri prechode takýmito materiálmi intenzita rtg. žiarenia nemôže zostať nezmenená, dochádza k jeho absorpcii. Za absorpciu možno vo všeobecnosti považovať energiu primárneho rtg. žiarenia mínus energia žiarenia, ktoré prešlo cez daný materiál. Čiže ide o energetický úbytok. Množstvo žiarenia absorbované pri prechode opakným materiálom sa vyjadruje absorpčným koeficientom. Ten je funkciou vlnovej dĺžky rtg. žiarenia a atómového čísla daného prvku. To znamená, že pri prechádzaní rtg. žiarenia napríklad mechanickou zmesou, chemickými zlúčeninami, tuhými alebo tekutými roztokmi, hmotnostný absorpčný koeficient pre danú vzorku, daný materiál, bude váženým priemerom hmotnostných absorpčných koeficientov jednotlivých prvkov, z ktorých je daný materiál zložený. Vo všeobecnosti platí, že ľahšie prvky absorbujú menej rtg. žiarenia ako ťažké prvky. Hmotnostný absorpčný koeficient jednotlivých prvkov, zlúčenín alebo minerálov sa udáva v tabuľkách pre jednotlivé charakteristické rtg. žiarenie a je možné ho vhodne využiť predovšetkým pri presnejšej analýze kvantitatívneho minerálneho zloženia.

Tu na tomto mieste je vhodné si pripomenúť, že žiarenie veľmi krátkych vĺn je pre živé organizmy zničujúce a jeho účinok je kumulatívny. Všetky moderné rtg. difrakčné prístroje precízne eliminujú vplyv ožiarovania. Nebezpečné ožiarovanie môže nastať v podstate len v prípade porušenia bezpečnostných predpisov alebo prevedenia neštandardného postupu.

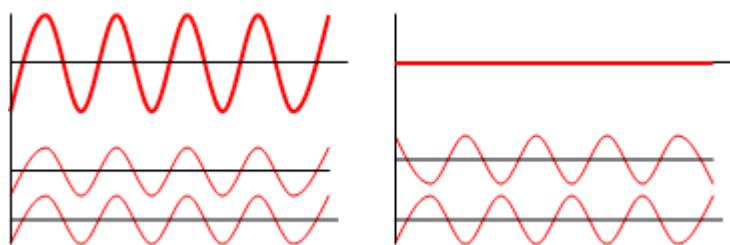
Na charakterizáciu žiarenia sa používajú dva prístupy. Prvým je meranie množstva žiarenia alebo jeho prúdenia v zmysle jeho aktivity. 1 bequerel (Bq) je odvodená jednotka definovaná ako aktivita rádioaktívnej látky, pri ktorej dôjde k jednému rozpadu atómového jadra za sekundu. Staršou jednotkou rádioaktivity je curie (Ci). Druhý prístup je meranie efektu množstva radiácie na živý organizmus. Rozdielne živé organizmy reagujú rôzne na rtg. Žiarenie, preto je druhý prístup podstatne komplexnejší. Množstvo dodanej energie je merané graymi (1 Gy – 1 gray) alebo radmi (röntgen absorbed dose – absorbovaná dávka žiarenia) a efekt na živý organizmus je meraný v remoch (röntgen equivalent man) alebo sievertoch (1 Sv – 1 sievert). 1 Sv je taká absorbovaná dávka, ktorá pri akomkoľvek type ionizujúceho žiarenia vyvolá v organickej látke rovnaký biologický účinok. Gray a sievert sú SI jednotky, rad a rem sú staršie jednotky.

2.2. Difrakcia rtg. žiarenia na kryštáloch

Difrakcia je dej, s ktorým sa každý mohol stretnúť napríklad v podobe dúhy na povrchu CD nosiča alebo na hladine mláky s olejovou škvrnou. Tieto efekty sú spôsobené vlastnosťami svetla: vlnovou dĺžkou, amplitúdou a fázou. Pri svetle vo viditeľnej oblasti zmenou jeho vlnovej dĺžky zmeníme farbu, zmenou amplitúdy zmeníme svetlosť, nemôžeme však pozorovať zmeny pri úprave fázy. Tento fenomén môžeme sledovať pri interakcii X-lúčov a kryštálov.

Základnou podmienkou pre difrakciu vln pri akejkoľvek vlnovej dĺžke je, že rozdiel medzi rozptyľujúcimi centrami musí byť veľmi blízky vlnovej dĺžke vln, ktoré sú rozptyľované. Parametre X-lúčov a vzdialenosti medzi atómami v kryštáloch spĺňajú tieto podmienky, ako to na začiatku 20. storočia ukázala skupina vedcov okolo von Laueho. Parametre oboch fenoménov sa pohybujú okolo $1 \text{ \AA}$ ($0,1 \text{ nm}$).

Rtg. žiarenie, ako každé elektromagnetické vlnenie, sa skladá z elektrického vektora E vibrujúceho kolmo na smer šírenia a magnetického vektora H vibrujúceho kolmo na vektor E i na smer šírenia. Elektrický vektor dopadajúceho fotónu je pre nás dôležitý z pohľadu stimulácie rozptyľujúcich centier (domén). Ak dôjde k interakcii elektrónu v kryštálovej mriežke s dopadajúcim (primárnym) lúčom a absorbcii malého množstva energie, daný elektrón sa stáva šíriteľom elektromagnetického žiarenia. Toto žiarenie sa šíri na všetky strany s rovnakou vlnovou dĺžkou ako primárny lúč. Tento fenomén sa nazýva koherentné rozptýlenie. Difraktovaný lúč s charakteristickou amplitúdou a fázou dostaneme, veľmi zjednodušene povedané tak, že koherentne rozptýlené domény zosumujeme do jedného vektora a následne zosumujeme všetky vektory jednotlivých domén. Doménami môžu byť atómy, základné bunky alebo veľmi malé kryštály.

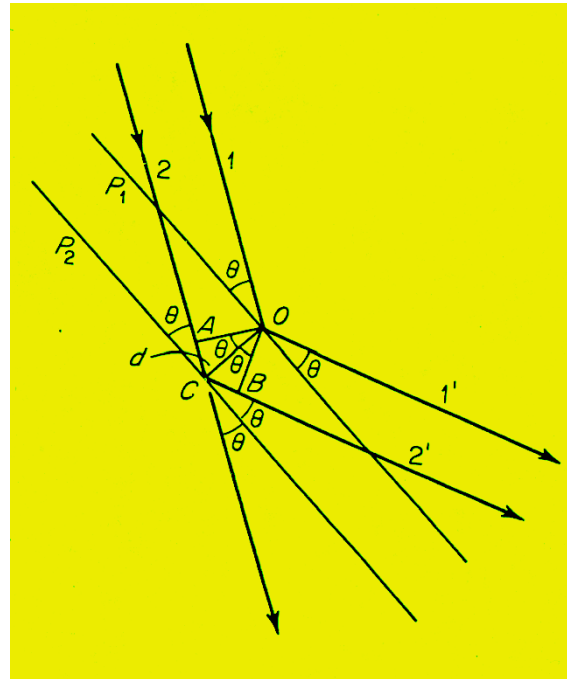


Obr. 7. Príklad konštruktívnej a deštruktívnej interferencie.

Teraz si veľmi stručne povieme ako dochádza k interferencii vlnenia. Interferencia môže byť konštruktívna alebo deštruktívna (**Obr. 7**). Ak sú vlny s rovnakou vlnovou dĺžkou vo fáze ako je to na **Obr. 7** (vľavo), tak je interferencia maximálne konštruktívna. Ak jednu z vln fázovo

posunieme o $\frac{1}{2}$ vlnovej dĺžky ako je to na **Obr 7.** (vpravo), tak výsledok je absolútne deštruktívny. Pri rôznych fázových posunoch sa nám intezita výslednej vlny bude meniť medzi vyobrazenými krajnými hodnotami. Difraktovaný lúč je výsledkom veľkého množstva pozitívne interferujúcich vln. Difraktovaný lúč má odlišný smer od smeru lúča dopadajúceho. Podľa názoru Bragga je možné chápať difrakciu aj ako odraz rtg. lúčov na rovinách kryštálovej mriežky.

Pozrime sa ako je možné odvodiť si jeho rovnicu. Predpokladajme, že máme X-lúče dopadajúce na dve paralelné roviny P1 a P2 s medzirovinnou vzdialenosťou d (**Obr. 8**). Paralelné lúče 1 a 2 zvierajú s rovinami P1 a P2 uhol θ . Elektróny predpokladané v bodoch O a C budú aktivované dopadajúcimi lúčmi a začnú vibrovať a vyžarovať radiáciu na všetky strany. Pre konkrétne sekundárne lúče 1' a 2', ktoré sú emitované pod uhlom θ , bude mať difraktovaný lúč maximálnu intenzitu, ak tieto dva lúče budú vo fáze. Spravme kolmicu z bodu O do bodu A resp. do B.



Obr. 8. Schéma ukazujúca podmienky pre difrakciu.

Keďže uhol $\text{ACO} = 90^\circ - \theta$ a uhol $\text{OAC} = 90^\circ$, tak uhol $\text{AOC} = \theta$, a ten je rovnaký s uhlom BOC . Takže $\text{AC} = \text{BC}$. Vlny v lúči 2' budú vo fáze s vlnami v lúči 1', ak $\text{AC} + \text{CB} = 2\text{AC}$ je celočíselným násobkom n vlnovej dĺžky λ použitého rtg. žiarenia. To môžeme vyjadriť rovnicou:

$$2\text{AC} = n\lambda \quad (1)$$

Ak vyjadríme uhol θ pomocou funkcie sinus: $\sin \theta = \text{AC}/d$ a toto vyjadrenie použijeme do rovnice (1), dostaneme Braggovu rovnicu, ktorá bola odvodená v roku 1912 W. L. Braggom:

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (2)$$