

Άσκηση 1

Περίθλαση ακτίνων X

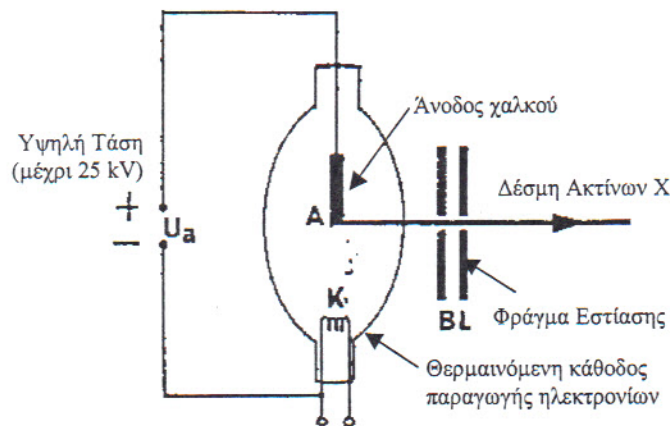
1.1 Σκοπός

Σκοπός της άσκησης αυτής είναι η κατανόηση της διαδικασίας παραγωγής των ακτίνων X καθώς και φαινομένων περίθλασης αυτών από μονοκρυστάλλους.

1.2 Γενικά

1.2.1 Εισαγωγή

Οι ακτίνες X, είναι ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία και παρήχθησαν σε εργαστήριο για πρώτη φορά από τον Wilhelm Röntgen (Βίλχελμ Ραίντγκεν, 1845-1923). Παράγονται όταν ταχέως κινούμενα ηλεκτρόνια, που έχουν επιταχυνθεί από μεγάλες διαφορές δυναμικού μερικών χιλιάδων volt, πέφτουν πάνω σε στερεό μεταλλικό στόχο. Το χαρακτηριστικό μήκος κύματος της ακτινοβολίας είναι της τάξης των 10^{-11} m έως και 10^{-9} m. Οι ακτίνες X παράγονται, σήμερα, μέσα σε γυάλινο σωλήνα υπό συνθήκες υψηλού κενού (πίεση 10^{-7} atm ή μικρότερη), που περιλαμβάνει ηλεκτρόδιο (Ανοδος) υψηλού δυναμικού από μέταλλο (Στόχος) π.χ. Χαλκό και ηλεκτρόδιο παραγωγής ηλεκτρονίων με Θερμιονική εκπομπή, χαμηλού δυναμικού (Κάθοδος), όπως φαίνεται στο σχήμα 1 (σωλήνας Coolidge).

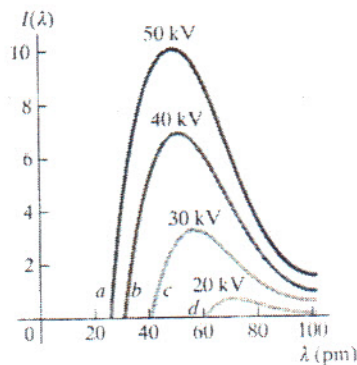


Σχήμα 1.1

1.2.2 Χαρακτηριστικό φάσμα

Η διαδικασία παραγωγής της δέσμης των ακτίνων X οφείλεται σε δύο διαφορετικούς μηχανισμούς. α) Μερικά ηλεκτρόνια, που προέρχονται από την θερμαινόμενη κάθοδο και έχουν επιταχυνθεί από την διαφορά δυναμικού, επιβραδύνονται ή ακινητοποιούνται από τον στόχο και μέρος ή όλη η ενέργεια τους μετατρέπεται απευθείας σε φωτόνια με συνεχές φάσμα συμπεριλαμβανομένων και ακτίνων X. Ο μηχανισμός αυτός ονομάζεται *εκπομπή ακτινοβολίας πέδησης* (bremsstrahlung είναι ο γερμανικός όρος που χρησιμοποιείται διεθνώς), β) άλλα ηλεκτρόνια μεταφέρουν μέρος ή το σύνολο της ενέργειας τους σε μεμονωμένα άτομα του στόχου. Τα ηλεκτρόνια των ατόμων αυτών πλέον μεταπίπτουν σε διεγερμένες καταστάσεις και αποδιεγειρόμενα προς τη θεμελιώδη κατάσταση, εκπέμπουν φωτόνια. Αν η διαδικασία γίνεται έτσι που να συμμετέχουν εσωτερικά ηλεκτρόνια του ατόμου εκπέμπονται ακτίνες X με μήκη κύματος χαρακτηριστικά των ατόμων του στόχου. Η διεργασία αυτή οδηγεί στην εκπομπή του *χαρακτηριστικού φάσματος ακτίνων X* του στοιχείου του στόχου.

Σε ότι αφορά στην εκπομπή ακτινοβολίας πέδησης το φάσμα των ακτίνων X είναι συνεχές όπως φαίνεται στο Σχ. X.2 για διάφορες τιμές της τάσης ανόδου - καθόδου. Η μορφή του φάσματος και η θεωρητική του επεξήγηση προκύπτει από τους νόμους της Κβαντικής Ηλεκτροδυναμικής.



Σχήμα 1.2
Συνεχές φάσμα ακτίνων X για διάφορες τιμές της τάσης ανόδου-καθόδου. Παρατηρήστε την μετατόπιση του $\lambda_{\min}(a,b,c,d)$ προς τα μεγαλύτερα μήκη κύματος για μικρότερες τάσεις.

Παρατηρείται όμως ένα ελάχιστο λ_{\min} το οποίο αντιστοιχεί σε ηλεκτρόνια τα οποία αποδίδουν όλη την ενέργεια που απέκτησαν από την επιτάχυνση τους μέσα στο δυναμικό V , σε ένα φωτόνιο ακτίνων X. Η σχέση που μας δίνει αυτό το λ_{\min} είναι η γνωστή σχέση του Planck,

$$E = hf = hc / \lambda, \quad (1.1)$$

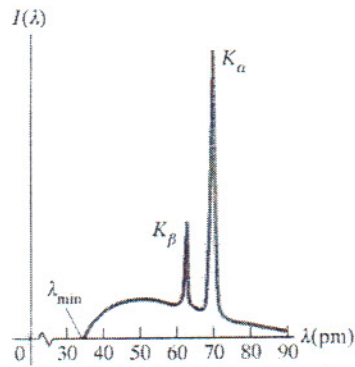
όπου E συμβολίζουμε την ενέργεια του σωματιδίου, h είναι η σταθερά του Planck, f είναι η συχνότητα και λ το μήκος κύματος της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας.

Εάν στην ενέργεια αντικαταστήσουμε την μέγιστη ενέργεια που μπορούν να αποδώσουν τα ηλεκτρόνια δηλαδή την $E = eV$, έχουμε

$$\lambda_{\min} = hc / eV. \quad (1.2)$$

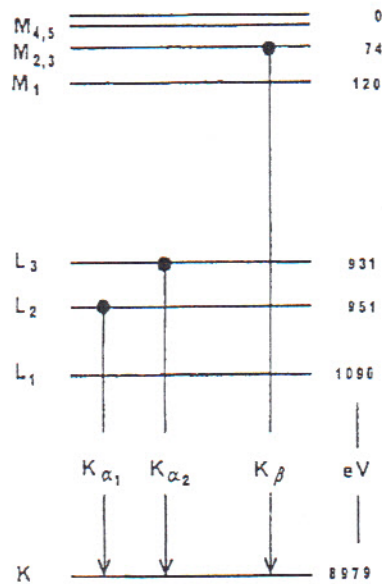
Όπως παρατηρούμε στο Σχ. 1.2, το ελάχιστο της έντασης μεταβάλλεται με την τάση επιτάχυνσης και μάλιστα είναι ανεξάρτητο από το υλικό που έχουμε για στόχο.

Στο συνεχές φάσμα υπερτίθενται και άλλες στενές κορυφές που συνιστούν ένα γραμμικό φάσμα όπως φαίνεται στο Σχ 1.3.



Σχήμα 1.3
Εκτός από το συνεχές φάσμα παρατηρήστε τις κορυφές K_{α} και K_{β} που αποτελούν το γραμμικό χαρακτηριστικό φάσμα ακτίνων X

Οι θέσεις των κορυφών εξαρτώνται άμεσα από το στοιχείο του στόχου και απαρτίζουν το λεγόμενο *χαρακτηριστικό φάσμα ακτίνων X* για το συγκεκριμένο στοιχείο. Στο εσωτερικό της λυχνίας ακτίνων X τα επιταχυνόμενα ηλεκτρόνια συγκρούονται μερικές φορές με τον στόχο με ενέργεια ικανή να απομακρύνει ηλεκτρόνια που βρίσκονται σε εσωτερικούς φλοιούς των ατόμων του στόχου. Ας υποθέσουμε ότι απομακρύνεται ένα ηλεκτρόνιο από τον φλοιό K. Δημιουργείται έτσι μια κενή θέση. Η κενή αυτή θέση μπορεί στη συνέχεια να πληρωθεί από ένα ηλεκτρόνιο που προέρχεται από κάποιον εξωτερικό φλοιό (π.χ. L, M, N κλπ.). Αυτή η μετάβαση συνοδεύεται από εκπομπή ενός φωτονίου ακτίνων X με ενέργεια ίση με τη διαφορά ενεργειών του ηλεκτρονίου στις δύο στάθμες των δύο σταθμών. Κάθε κατάσταση έχει συγκεκριμένη ενέργεια, οπότε οι εκπεμπόμενες ακτίνες X έχουν καθορισμένα μήκη κύματος. Το εκπεμπόμενο φάσμα είναι επομένως γραμμικό. Η αποδιέγερση των ατόμων του χαλκού της ανόδου φαίνεται στο Σχήμα 1.4.



Σχήμα 1.4

Όταν ένα ηλεκτρόνιο 'χτυπάει' με μεγάλη ενέργεια και απομακρύνει ένα ηλεκτρόνιο της στοιβάδας σθένους K του χαλκού τότε στην κενή θέση μεταπίπτει ένα

ηλεκτρόνιο από την στοιβάδα L_2 ή από την L_3 ή από την $M_{2,3}$ με την εκπομπή κάθε φορά ακτίνων X διαφορετικού μήκους κύματος που αντιστοιχεί σε διαφορά ενέργειας, ΔE μεταξύ των στοιβάδων ίση με

$$\Delta E_{L_2-K}(K_{\alpha 1}) = (8979 - 951) \text{ eV} = 8028 \text{ eV}$$

$$\Delta E_{L_3-K}(K_{\alpha 2}) = (8979 - 931) \text{ eV} = 8048 \text{ eV},$$

$$\Delta E_{M_{2,3}-K}(K_{\beta}) = (8979 - 74) \text{ eV} = 8905 \text{ eV}.$$

Μεταπτώσεις από την L_1 στην K καθώς και από την M_1 στην K δεν επιτρέπονται από τους κανόνες επιλογής της Κβαντομηχανικής (πρέπει να διατηρείται η στροφορμή του συστήματος, διεγερμένο άτομο – αποδιεγερμένο άτομο συν φωτόνιο). Επίσης οι ενέργειες $K_{\alpha 1}$ και $K_{\alpha 2}$ λόγω της ελάχιστης διαφοράς που έχουν μεταξύ τους δεν είναι συνήθως διακριτές και θα αναφέρονται ως K_{α} παίρνοντας σαν τιμή το μέσο όρο των δύο προηγούμενων.

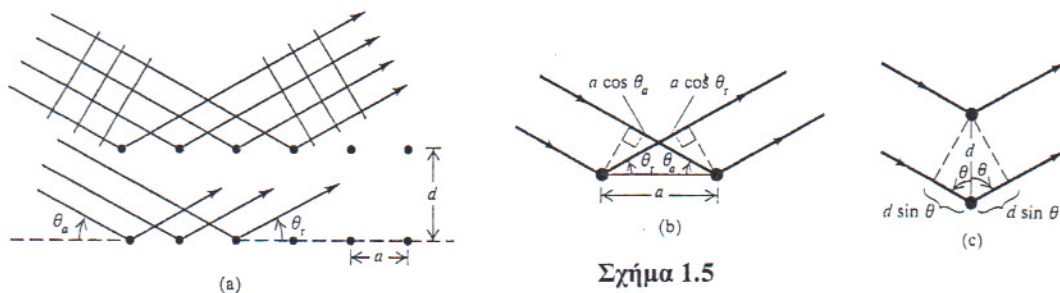
Έτσι έχουμε ότι $E(K_{\alpha}) = 8038 \text{ eV}$ και $E(K_{\beta}) = 8905 \text{ eV}$, οπότε από τη σχέση του Planck

$$\Delta E = h c / \lambda,$$

θέτοντας όπου ΔE τα $E(K_{\alpha})$ και $E(K_{\beta})$ υπολογίζουμε $\lambda_{K_{\alpha}} = 139,3 \text{ pm}$ και $\lambda_{K_{\beta}} = 154,3 \text{ pm}$ που είναι και τα μήκη κύματος των ακτίνων X του χαρακτηριστικού γραμμικού φάσματος του χαλκού.

1.2.3 Ανάκλαση Bragg

Μετά την έξοδο τους από τον σωλήνα οι ακτίνες X προσπίπτουν πάνω σε μονοκρυστάλλο ο οποίος λειτουργεί ως ορθογώνιο πλέγμα κέντρων σκέδασης. Ως γνωστό τα άτομα του κρυστάλλου είναι διατεταγμένα στο κρυσταλλικό πλέγμα σε παράλληλα στρώματα στην επιφάνεια του κρυστάλλου τα οποία ονομάζονται επίπεδα πλέγματος (lattice planes). Σύμφωνα με την αρχή του Χόυχενς κάθε άτομο του κρυστάλλου, όταν ακτινοβολείται από τις ακτίνες X, μπορεί να λειτουργεί ως πηγή δευτερογενών κυμάτων. Έτσι, κάθε επίπεδο ατόμων λειτουργεί σαν κάτοπτρο στην προσπίπτουσα ακτινοβολία (Σχ. 1.5.a) δημιουργώντας φαινόμενα συμβολής. Για να υπολογίσουμε το διαμόρφωμα συμβολής πρέπει να θεωρήσουμε τις συνολικές διαφορές δρόμου για τα σκεδαζόμενα κύματα, συμπεριλαμβανομένων τόσο της απόστασης πηγής-σκεδαστή όσο και της απόστασης σκεδαστή-παρατηρητή.



Σχήμα 1.5

Όπως φαίνεται στο Σχ. 1.5.b αν οι γωνίες θ_a και θ_r είναι ίσες, το μήκος του δρόμου από την πηγή προς τον σκεδαστή είναι το ίδιο για όλους τους σκεδαστές της ίδιας σειράς. Η σκεδαζόμενη ακτινοβολία από παράλληλες γειτονικές σειρές όπως στο Σχ. 1.5.c είναι επίσης σε φάση αν η διαφορά δρόμου είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του μήκους κύματος.

Όπως φαίνεται από το σχήμα η διαφορά δρόμου αυτή είναι $2d \sin \theta$. Άρα οι συνθήκες που πρέπει να ισχύουν ώστε η ακτινοβολία που προέρχεται από την διαδιάστατη συστοιχία, να φτάσει στον παρατηρητή σε φάση είναι α) Η γωνία πρόσπτωσης να είναι ίση με την γωνία σκέδασης $\theta_a = \theta_r = \theta$ και β) η διαφορά δρόμου για δύο γειτονικές σειρές να είναι ίση με $n \lambda$ δηλαδή να ισχύει η σχέση:

$$n \lambda = 2 d \sin \theta \quad (1.3)$$

όπου d είναι η απόσταση ανάμεσα στα γειτονικά πλεγματικά επίπεδα. Σε κατευθύνσεις που ικανοποιούν τις παραπάνω συνθήκες παρατηρούμε μέγιστα στο διαμόρφωμα συμβολής. Η σχέση αυτή ονομάζεται συνθήκη του Bragg.

Εάν λύσουμε την συνθήκη του Bragg ως προς d έχουμε:

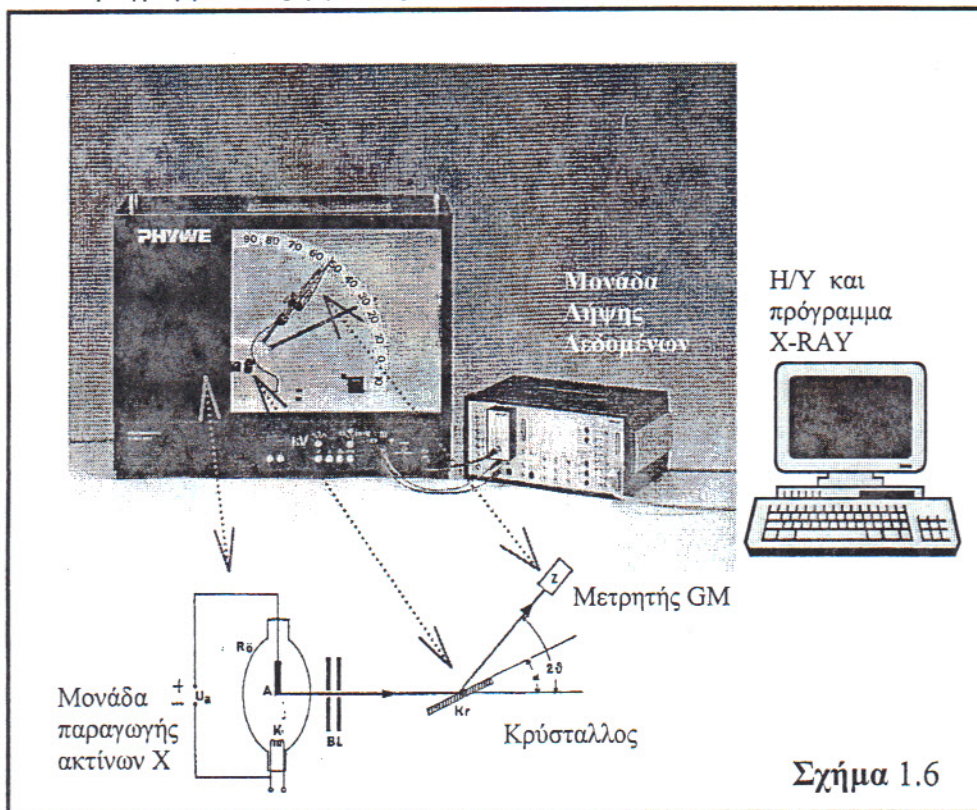
$$d = n \lambda / 2 \sin \theta \quad (1.4)$$

Επίσης παρατηρούμε ότι η γωνία μεταξύ της προσπίπτουσας και ανακλώμενης ακτίνας είναι 2θ . Μέσω της σχέσης (1.4) και προσδιορίζοντας πειραματικά την γωνία θ για το αντίστοιχο μήκος κύματος λ και για την τάξη n της περίθλασης μπορούμε να υπολογίσουμε πειραματικά το d , την απόσταση δηλαδή ανάμεσα στα πλεγματικά επίπεδα.

1.3 Πειραματική διάταξη

Η πειραματική διάταξη φαίνεται στο Σχ. 1.6 και αποτελείται από:

1. Μονάδα παραγωγής ακτίνων X που περιλαμβάνει: Λυχνία παραγωγής ακτίνων X (χαλκού), Κρύσταλλο, Ανιχνευτή Geiger Miller, Σύστημα περιστροφής κρυστάλλου και ανιχνευτή Geiger Miller με γωνιόμετρο,
2. Μονάδα λήψης δεδομένων,
3. Η/Υ και πρόγραμμα επεξεργασίας δεδομένων ακτίνων X.



Σχήμα 1.6

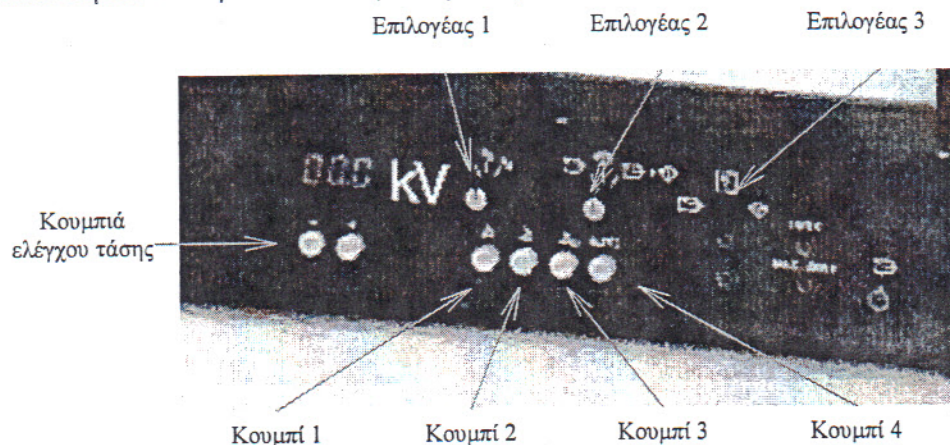
1.4 Πειραματική Διαδικασία

1.4.1 Προετοιμασία του πειράματος

1. Ελέγξτε τα καλώδια σύνδεσης (Οι συνδέσεις των συσκευών έχουν γίνει ήδη).
2. Τοποθετήστε τον κατευθυντήρα των 2 mm στην έξοδο των ακτίνων X .
3. Ελέγξτε αν το φράγμα του ανιχνευτή GM είναι σε οριζόντια θέση.
4. Τροφοδοτήστε τις συσκευές με ρεύμα.
5. Ανοίξτε τον Η/Υ και εκτελέστε το πρόγραμμα X-RAY (Πληκτρολογήστε cd xray και cobra για να εκκινήσετε το πρόγραμμα)

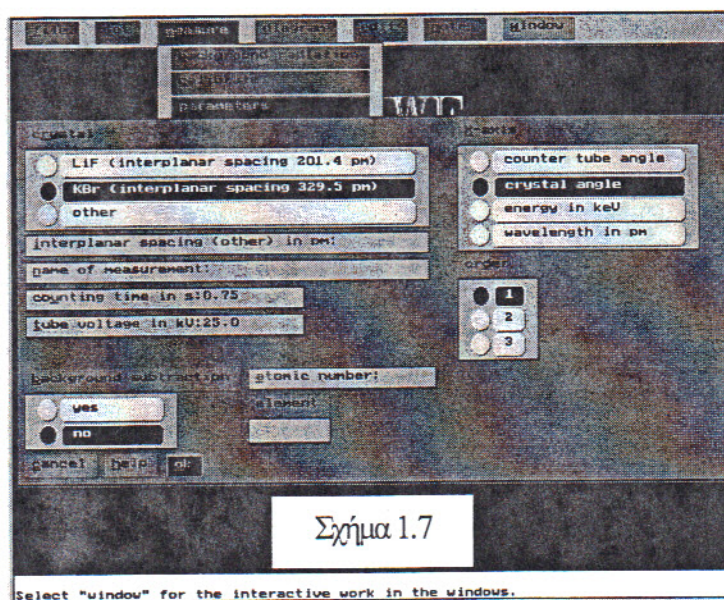
1.4.2 Διαδικασία λήψης πειραματικών δεδομένων

1. Τοποθετήστε τον κρυστάλλο (LiF ή KBr).



Σχήμα 1.7

2. Στρέψτε τον επιλογέα 2 στην συσκευή ακτίνων X στα δεξιά, έτσι ώστε να περιστρέφετε ταυτόχρονα και τον ανιχνευτή και τον κρύσταλλο.
3. Στρέψτε τον επιλογέα 3 σήματος εξόδου προς τα αριστερά έτσι ώστε το σήμα να προέρχεται από τον ανιχνευτή.
4. Μηδενίστε τον δείκτη του μετρητή της γωνίας του ανιχνευτή καθώς και του κρυστάλλου στην συσκευή ακτίνων X πατώντας το κουμπί 3.



5. Αφού μηδενιστούν οι μετρητές επιλέγουμε στο πρόγραμμα `<measure>` → `<calibrate>` και επιλέγουμε `<ok>` με σκοπό να ξεκινήσει η καταγραφή των γωνιών με την έναρξη της περιστροφής του κρυστάλλου και του ανιχνευτή.

6. Επιλέγουμε στο πρόγραμμα <measure>→ <parameters> και εκεί ορίζουμε το είδος του κρυστάλλου που έχουμε τοποθετήσει , επίσης στο πεδίο < x-axis> επιλέγουμε τις μονάδες του άξονα x (Υπάρχει δυνατότητα να αλλάξουμε τις μονάδες του x και αφού πάρουμε τις μετρήσεις) και τέλος στο πεδίο <tube voltage in keV> γράφουμε την ενέργεια της δέσμης για να χαρακτηρίζει το φάσμα μας όπως φαίνεται στο σχήμα 1.7.
7. Ρυθμίζουμε την ταχύτητα περιστροφής του συστήματος στη συσκευή των ακτίνων X σε V_1 , στρέφοντας τον επιλογέα 1 στην κατάλληλη θέση.
8. Περιστρέφουμε τον κρύσταλλο, χρησιμοποιώντας το κουμπί 1 κατά 5° (δηλαδή τον ανιχνευτή κατά 10°)
9. Αφού κλείσουμε την πρόσωση του συστήματος αυξάνουμε την τάση σε 25KeV χρησιμοποιώντας το κουμπί +.
10. **ΠΡΟΣΟΧΗ!**
Εφαρμογή τάσης σημαίνει εκπομπή ακτινοβολίας X. Γι αυτό αυξάνουμε την τάση ΜΟΝΟ αφού έχουμε στρέψει τον κρύσταλλο κατά 5° γιατί αλλιώς υπάρχει κίνδυνος καταστροφής του ανιχνευτή GM λόγω της μεγάλης έντασης της άμεσης ακτινοβολίας!
11. Επιλέγουμε στο πρόγραμμα <measure> → <start> → <OK> και μετά πατάμε το κουμπί 4 (AUTO) που σημαίνει έναρξη του πειράματος.
12. Όταν ο μετρητής φτάσει σε γωνία 90° η μέτρηση έχει τελειώσει και πατάμε δύο φορές ESC για να διακόψουμε το καταγραφή του φάσματος από το πρόγραμμα.
13. **ΠΡΟΣΟΧΗ !** Με το πέρας του πειράματος ανοίγουμε την πρόσωση της συσκευής ακτίνων X για να μηδενιστεί η τάση ώστε να πάψει η εκπομπή ακτινοβολίας X.
14. Ενδέχεται η βαθμονόμηση του άξονα y να μην αναδεικνύει το φάσμα που λάβαμε και να χρειάζεται να κάνουμε zoom σε συγκεκριμένη περιοχή ως εξής. Επιλέγουμε <diagram>→ <zoom>→ και στο πεδίο <Limits> Επιλέγουμε <Minimum Maximum X Y> και έπειτα βάζουμε στα πεδία Xmin Xmax Ymin Ymax τις κατάλληλες ρυθμίσεις και επιλέγουμε <Ok>.
15. Υπάρχει η δυνατότητα αποθήκευσης των μετρήσεων σε αρχείο τύπου ASCII σε δισκέτα για την επεξεργασία των μετρήσεων από το <File>→ <Save>

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. Sir Lawrence Bragg “The development of X-ray Analysis”, (Dover Publications),1975.
2. Boris K. Vaishtein “Fundamentals of Crystals , Symmetry and Methods of Structural Crystallography” (Springer-Verlag Eds), 1994.
3. K. Debertin and R.G. Helmer, “Gamma and X-Ray spectrometry with Semiconductor Detectors” (NORTH-HOLLAND Eds), 1998.

1.5 Εκτέλεση

1.5.1.1 Μελέτη φάσματος των ακτίνων X του χαλκού - Υπολογισμός της σταθεράς του Planck

1. Τοποθετήστε τον κρύσταλλο LiF
2. Στην επιλογή <parameters> → <x-axis> βάλτε <wavelength in pm> έτσι ώστε στον x άξονα να μετράμε το μήκος κύματος σε pm (10^{-12} m).
3. Χρησιμοποιώντας διάφορες τάσεις (25 kV, 22 kV, 19 kV, 16 kV, 13 kV) να ανακτήσετε τα φάσματα και να τα αποθηκεύσετε σε δισκέτα με όνομα αρχείου με πρώτο συνθετικό το όνομα του κρυστάλλου και δεύτερο την τάση που χρησιμοποιήσαμε π.χ. LiF25.asc κλπ.
4. Παρατηρήστε την μορφή του φάσματος (Συνεχές – Γραμμικό) αφού αλλάξετε την βαθμονόμηση των αξόνων έτσι ώστε να αναδειχθεί το φάσμα .

1.5.1.2 Επεξεργασία των μετρήσεων

Παρατηρήστε στην οθόνη το συνεχές καθώς και το γραμμικό φάσμα των ακτίνων X του χαλκού. Τι παρατηρείτε για τις διάφορες τάσεις. Εξηγήστε.

Για κάθε φάσμα και μέσω της επιλογής <diagram> → <single values> πατώντας tab και χρησιμοποιώντας τα 'βελάκια' βρίσκουμε το λ_{\min} και συμπληρώνουμε τον Πίνακα 1.1 (Σημειώνουμε και το σφάλμα ανάγνωσης του λ_{\min} , $\delta\lambda_{\min}$)

Ισχύει η σχέση $E_{kin} = eV = hc / \lambda_{\min} \Rightarrow \lambda_{\min} = hc / eV$ όπου $c = 2,9979 \cdot 10^8$ m/s , $e = 1,6021 \cdot 10^{-19}$ C.

Πίνακας 1.1			
V (kV)	1/V (kV ⁻¹)	λ_{\min} (pm)	$\Delta\lambda$ (pm)

Υπολογίστε από την κλίση της γραφικής παράστασης του λ_{\min} συναρτήσει του 1/V την σταθερά του Planck, h , θεωρώντας γνωστά τα e και c . Υπολογίστε το σφάλμα της dh βασιζόμενοι στο σφάλμα ανάγνωσης του λ_{\min} .

Σχολιάστε τα (πιθανά) συστηματικά σφάλματα .

Υπολογίστε την μέση τιμή του d καθώς και το σφάλμα του. Συγκρίνετε με την τιμή που δίνει ο κατασκευαστής. Εξηγήστε τυχόν διαφορές στις τιμές του d .

Σχολιάστε το εύρος των κορυφών λόγω της περίθλασης και πιθανώς άλλων αιτιών.

1.5.3 Επεξήγηση των άλλων κορυφών του φάσματος

Στο φάσμα παρατηρούμε μια αύξηση στην ένταση των εκπεμπόμενων ακτίνων X σε γωνίες 8 και $16,5$ μοιρών η οποία οφείλεται στην απορρόφηση ενός μέρους των παραγόμενων ακτίνων X από τα ιόντα Βρώμιου του κρυστάλλου KBr. Υπάρχει λοιπόν ιονισμός του Βρώμιου και επανεκπομπή ακτίνων X κατά την αποδιέργηση σε μήκη κύματος $91,99$ pm που αντιστοιχεί σε γωνία Bragg 8 μοιρών για την δέσημη πρώτης τάξης και $16,2$ pm για την δεύτερης τάξης!

1.5.4 Σύγκριση των μεγίστων διαφορετικών τάξεων

1. Επιλέξτε <diagram><x-axis> \rightarrow <wavelength in pm> <Order 1> για τα μέγιστα πρώτης τάξης.
2. Πραγματοποιήστε <diagram><zoom> για $X_{min} = 120$, $X_{max} = 180$
3. Επιλέξτε <diagram><single values> πατάμε tab και βρίσκουμε τα μήκη κύματος των μεγίστων πρώτης τάξης. Συγκρίνετε με τα θεωρητικά.
4. Πραγματοποιήστε την ίδια επεξεργασία για όλες τις τάξεις. Δηλαδή για <Order 2> και <Order 3> και συγκρίνετε τα αποτελέσματα.

