

1.1 Неупругое рассеяние рентгеновских лучей

Комптоновское рассеяние можно представить себе, если рассмотреть столкновение фотона, обладающего моментом количества движения $h\nu/c$, с электроном, как показано на **Рис.2**. При столкновении фотона с электроном, масса которого очень мала и момент количества движения (импульс) сравним с моментом фотона, может происходить обмен энергии, при котором должно измениться направление движения фотона, а, вместе с тем, и его энергия. Если обмен энергией состоит в передаче импульса свободному электрону без перевода его на новую орбиталь, в результате чего электрон начнет движение со скоростью V , то процесс можно изобразить, как это показано на **Рис.2**.

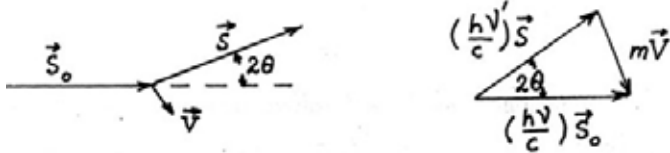


Рис. 2. Схема рассеяния плоской волны на свободном электроне с комптоновской передачей импульса: a - единичный вектор распространения волны до рассеяния; s - единичный вектор распространения рассеянной волны; V - скорость движения электрона после столкновения с фотоном; 2θ - угол рассеяния; V и V' - частота волны до и после рассеяния соответственно.

Обычно при таком обмене энергия фотона уменьшается, что означает увеличение длины волны рассеянного рентгеновского излучения. Для анализа результатов рассеяния рентгеновских лучей важно отметить, что изменение длины волны при наличии эффекта Комптона зависит от угла рассеяния Θ . Это можно показать с помощью следующих рассуждений. При комптоновском рассеянии фотон, налетающий на электрон, передает ему часть своей энергии. При этом может измениться скорость движения электрона, в результате чего в одном случае электрон, оставаясь связанным с атомным ядром, может занять другую орбиталь, либо покинуть пределы атома, который тем самым перейдет в ионизированное состояние. Фотон после такого соударения испытает рассеяние с изменением направления движения и уменьшением своей энергии (увеличением длины волны). По правилам классической механики, при таком обмене энергией должны выполняться законы сохранения энергии и импульса. Разность импульсов фотона до и после рассеяния, согласно закону сохранения импульса, должна равняться изменению момента количества движения mV электрона, т.е.

$$(h\nu/c)S_0 - (h\nu'/c)S = mV, \quad (1)$$

где S_0 и S - единичные векторы, указывающие направление распространения падающей и рассеянной волн соответственно, угол между которыми равен 2θ . По закону сохранения энергии

$$h\nu = h\nu' + mV^2/2 \quad (2).$$

Объединив оба уравнения, можно получить выражение, связывающее изменение длины волны при комптоновском рассеянии с величиной угла рассеяния. Для этого выразим из (1) скорость, как:

$$V = [(h\nu/c)S_0 - (h\nu'/c)S]/m.$$

В первом приближении изменение длины волны при Комpton-эффекте мало и можно считать $(v' - v)^2 \sim 0$ (квадрат разности двух близких величин) или $v' \sim v$. С учетом этого из полученного выражения следует:

$$V^2 = [(S_0 - S)h\nu/mc]^2 = (h\nu/mc)^2 h^2 (1 - \cos 2\theta),$$

поскольку модуль единичных векторов равен единице, и соответственно скалярные произведения $S_0 \cdot S_0 = S \cdot S = |S| \cdot |S| \cdot \cos 0^\circ = 1$, а $2S_0 \cdot S = 2 \cdot 1 \cdot 1 \cdot \cos 2\theta$.

Вспомнив из тригонометрии, что $\cos 2\theta = 1 - 2 \sin^2 2\theta$, получаем

$$V^2 = (h\nu/mc)^2 h^2 4 \sin^2 2\theta.$$

Подставляем это значение в (2):

$$h\nu - h\nu' = 2 \sin^2 2\theta h^2 v^2/mc^2 \rightarrow n - n' = 2h\nu^2/mc^2 h \sin^2 2\theta.$$

Левая часть этого уравнения равна

$$v - v' = c/\lambda - c/\lambda' \rightarrow (\lambda' - \lambda)c/\lambda'\lambda \rightarrow \sim \Delta\lambda c/\lambda^2.$$

Теперь преобразуем правую часть уравнения:

$$2h(c/\lambda)^2/mc^2 h \sin^2 2\theta \rightarrow 2h/m\lambda^2 h \sin^2 2\theta, \text{ откуда } \Delta\lambda c/\lambda^2 \sim 2h/m\lambda^2 h \sin^2 2\theta, \text{ или}$$

$$\Delta\lambda \sim 2h/mc h \sin^2 2\theta \sim 0.048h \sin^2 2\theta \quad (3)$$

Следовательно, как отмечено выше, длина отраженной волны при рассеянии с эффектом Комптона зависит от угла рассеяния и не зависит от длины волны первичного пучка. Максимальное изменение длины волны может составлять 0.048λ . Свойством комптоновского рассеяния является то, что его интенсивность увеличивается с ростом $\sin\theta/\lambda$ и зависит от силы, с которой рассеивающий электрон связан с атомом. Эффект комптоновского рассеяния максимален для почти свободных внешних электронов лёгких атомов.

Вероятность эффекта Комптона возрастает с увеличением энергии излучения. Его интенсивность пренебрежимо мала при длине волны рентгеновского излучения больше 1Å , но уже на излучении Mo K

($\lambda = 0,71069 \text{ \AA}$) его можно наблюдать, и в некоторых случаях необходимо учитывать при рентгеноструктурном анализе, целью которого является исследование электронной структуры кристаллов, состояния ионов, энергии электронов и т.д. Существует еще один вид некогерентного рассеяния - тепловое диффузное рассеяние, связанное с тепловыми колебаниями атомов в кристалле. Природа его объясняется следующим образом.

Фотон рентгеновского излучения не обладает достаточной энергией, чтобы изменить положение атома, гораздо более массивного по сравнению с электроном, и поэтому упруго отражается при соударении с ним. Однако фотон может обмениваться энергией с колебаниями атома (фононным спектром реального кристалла), меняя свою энергию, а следовательно и длину волны. Рассеянные таким образом лучи несколько (весьма мало) по длине волны отличаются от упруго рассеянных и образуют при дифракции максимумы теплового диффузного рассеяния (ТДР). Диффузным это излучение называется потому, что при дифракции оно дает пик интенсивности, совпадающий по положению с брэгговским, но оказывающийся более широким и образующий на рентгеновской плёнке (например, при съемке монокристаллов) диффузное галло. Являясь некогерентным, ТДР не интерферирует с упругим брэгговским рассеянием, поэтому их интенсивности складываются без учета фаз. Интенсивность ТДР зависит от прочности связи атомов в кристалле и обычно описывается с помощью констант упругости кристалла или скорости распространения звука в кристалле, которая тоже связана с упругими свойствами кристалла. По сравнению с брэгговской (упругой) составляющей рефлекса интенсивность ТДР значительно меньше и, в зависимости от жесткости кристалла, достигает от нескольких процентов до нескольких десятков процентов от суммарной (интегральной) интенсивности отражения.

При рентгеноструктурном анализе ТДР, как правило, является мешающим фактором, с которым приходится бороться путем введения корректирующих членов в выражения для экспериментальной интенсивности или для структурного фактора. Однако, анализ интенсивности диффузного рассеяния может быть весьма полезен, например, при исследовании аморфных и жидких кристаллов, и позволяет оценивать прочность связи атомов в кристаллах.