

1.5 Рассеяние рентгеновских лучей атомами

Предположение о свободном и покоящемся электроны справедливо только при условии, что импульс, передаваемый электрону, намного превышает импульс его первоначального движения в атоме

$$\lambda_e = \frac{\lambda}{\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}, \text{ где } \lambda \text{ и } \lambda_e - \text{ первоначальные длины волн соответственно фотона и электрона. Наличие}$$

связей и первоначального движения электронов приводит к уменьшению вероятности комптоновского рассеяния и исчезновению жёсткого соотношения между λ, λ_e и θ . В этом случае сечение комптоновского рассеяния определяется комбинацией σ_{KN} и нерелятивистской функции некогерентного рассеяния Хартри-Фока $I(Z, \varepsilon, \theta)$:

$$\frac{d\sigma_{Комп}}{d\Omega} = \frac{I(Z, \varepsilon, \theta)d\sigma_{KN}}{d\Omega} \quad (11)$$

Учет указанного эффекта, приводит к уменьшению вероятности комптоновского рассеяния вперёд (к полному запрету рассеяния по направлению первоначального движения фотона) и к некоторому увеличению вероятности рассеяния назад, относительно первоначального движения фотона для небольших энергий и более тяжелых элементов.

Рассеяние фотонов на электронах становится когерентным при небольшой величине передаваемого импульса (Рэлеевское рассеяние). Такое рассеяние происходит без потери энергии квантом проникающего излучения. Дифференциальное сечение Рэлеевского рассеяния в случае учета связанности электронов является произведением Томпсонского классического сечения σ_{Th} (предельный вид формулы (1) при малых энергиях) и квадрата релятивистского атомного форм-фактора Хартри-Фока $C(Z, \varepsilon, \theta)$:

$$\frac{d\sigma_{Рэл}}{d\Omega} = C^2 \frac{d\sigma_{Th}}{d\Omega}, \quad \frac{d\sigma_{Th}}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} (1 + \cos^2 \theta) \quad (12)$$

Основной эффект влияния форм-фактора $C(Z, \varepsilon, \theta)$ заключается в уменьшении вероятности рассеяния фотонов в обратном направлении для высоких энергий и лёгких элементов, что противоположно действию функции рассеяния $I(Z, \varepsilon, \theta)$ (см. Рис.7).

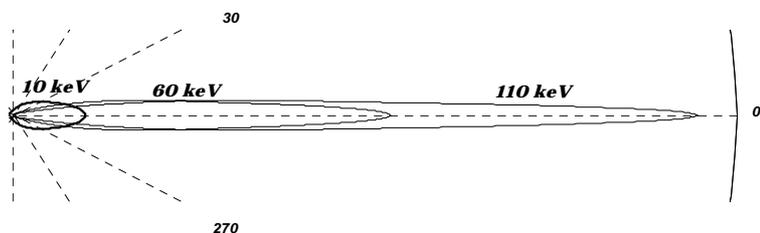


Рис.7 Угловое распределение когерентно рассеянных фотонов в железе

Отметим, что рассеяние фотонов прямо вперед с точки зрения процесса переноса излучения означает, что фактически квант не рассеивается. При этом

его энергия, естественно, сохраняется. Уменьшение сечения комптоновского рассеяния в направлении первоначального движения фотонов, компенсируется когерентным рассеянием при высоких энергиях и малых углах. Если бы все атомные электроны участвовали в Рэлеевском рассеянии независимо друг от друга, то их суммарный эффект при малых значениях передаваемого импульса точно компенсировал бы уменьшение комптоновского рассеяния, однако из-за эффекта связанности, электроны атома участвуют в указанном процессе когерентно. Поэтому вероятность рассеяния возрастает вследствие явлений интерференции.

Вследствие того, что рассеяние рентгеновских лучей определяется главным образом электронами атомов, можно подумать, что тяжелые атомы, содержащие больше электронов, будут рассеивать сильнее, чем легкие. Однако, в действительности, рассеяние не пропорционально количеству электронов в атоме, т.е. его порядковому номеру. В чем причина этого явления?

Для интерпретации рассеяния рентгеновских лучей системой из n электронов существует две теории. Одна из них предполагает, что система электронов раскачивается электромагнитной волной как единое целое. В этом случае заряд и масса электрона в Ур.9 должны умножаться на n , а интенсивность рассеяния такой системой будет равна интенсивности рассеяния одним электроном, умноженной на n^2 . Другая теория полагает, что каждый электрон рассеивает независимо и волны, рассеянные разными электронами, некогерентны. В этом случае интенсивности рассеянных волн складываются арифметически и таким образом интенсивность рассеяния электронной системой равна интенсивности рассеяния одним электроном, умноженной на n . Первый случай относится к полностью когерентному рассеянию, а второй – к некогерентному.

Если бы все электроны атома были сконцентрированы в точке, то интенсивность рассеяния, согласно формуле (9), действительно была бы пропорциональна числу электронов. На самом деле электроны в атомах распределены в некотором объеме вокруг ядра, причем размеры этого объема сравнимы с длиной волны рентгеновского излучения. В этом случае фазы рассеяния каждым электроном отличаются от фаз рассеяния другими электронами, поэтому общая интенсивность рассеяния уменьшается интерференцией волн рассеянных разными электронами. При этом взаимодействие волн, рассеиваемых разными точками атома, зависит от расстояния между ними и угла рассеяния.

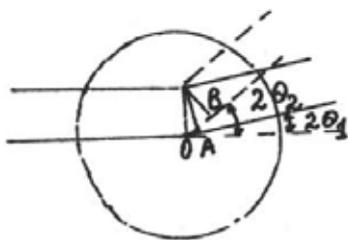


Рис. 8. Возрастание разности хода с увеличением угла рассеяния ($2\theta_2 > 2\theta_1$ и $OB > OA$)

С увеличением этих расстояний разность хода двух лучей будет возрастать. Кроме того, чем больше угол рассеяния (т.е. угол между первичным и рассеянным лучами), тем значительнее разность фаз и тем меньше амплитуда суммарного рассеяния двумя бесконечно малыми объемами атома (**Рис.8**).

Основное участие в рассеянии принимают участки атома, расположенные вблизи его центральной части, где электронная плотность выше, и этим определяется сходный монотонный спад интенсивности рассеяния у различных атомов по мере увеличения его угла. Интенсивность рассеяния атома характеризуется величиной атомного фактора рассеяния (f_j), показывающего во сколько раз амплитуда рассеиваемого атомом луча больше амплитуды рассеяния электроном. Зависимость атомного фактора рассеяния от угла Θ и длины волны направляемого на кристалл рентгеновского луча иллюстрирует **Рис.9**.

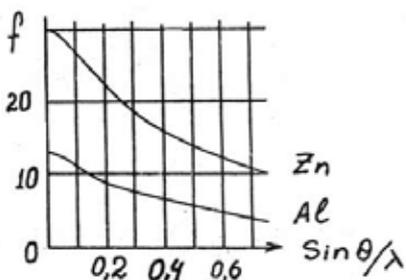


Рис. 9. Изменение атомного фактора рассеяния в зависимости от $\text{Sin}\Theta/\lambda$

Атомный фактор обладает следующими свойствами. Являясь монотонно убывающей функцией от скалярной величины $\text{Sin}\Theta/\lambda$, при $\text{Sin}\Theta/\lambda = 0$ он равен числу электронов в атоме (Z). Иными словами, волны, рассеиваемые электронами атома в направлении первичного пучка, совпадают по фазе. С ростом Θ величина атомного фактора рассеяния быстро убывает, причем основную роль в рассеянии начинают играть электроны внутренних оболочек. То есть при $\Theta=0$ рассеяние испытывает сильное влияние внешних валентных электронов

атома, а с ростом Θ [обычно при $(\text{Sin}\Theta)/\lambda > 0.6 \text{ \AA}^{-1}$] рассеяние мало чувствительно к валентным электронам и в основном определяется электронами внутренних оболочек атома. Таким образом, атомный фактор рассеяния может быть представлен как суммарное рассеяние электронов, близких к ядру и валентных:

$$f_a = f_{\text{внутр}} + f_{\text{вал}}. \quad (13)$$

Математически расчет f_a может быть представлен в виде формулы:

$$f_j = (S a_j \exp(-b_j x^2)) + c, \quad (14)$$

где a_j , b_j и c - константы, а $x = (\text{Sin}\Theta)/\lambda$.

Рассеивающая способность атома непосредственно связана с радиальным распределением электронной плотности в атоме $U_a(r)$:

$$U_a(r) = 4\pi r^2 \rho_a(r), \quad (15)$$

где $\rho_a(r)$ - вероятность нахождения электрона на расстоянии r от центра атома. Как отмечено выше, атомный фактор рассеяния f_a является функцией $(\text{Sin}\Theta)/\lambda$ или $1/d$ или вектора обратной решетки $H=r^*$. То есть

$$f_a(r^*) = f(U_a(r)) = f_{ej}, \quad (16)$$

где f_{ej} - рассеивающая способность j -го электрона в направлении r^* .

Функции атомного рассеяния нейтральных атомов и их ионов различаются лишь при малых $(\text{Sin}\Theta)/\lambda$ и практически совпадают при больших Θ , поэтому при расшифровке кристаллических структур обычно пользуются атомными функциями рассеяния.