

Рентгеноструктуралық анализ. Лауе тәжірибесі, Брегг-Вульф теңдеуі, оны шығару жолдары.

Хи 202 Муратова Л. Маратова К.
Жадырасынова А. Бекболатова А.

Жоспар

- *КРИСТАЛДАРДЫҢ РЕНТГЕНОМЕТРИЯСЫ*
 - Лауэ тәжірибесі
 - рентгенқұрылымдық анализ
 - Рентген сәулелерінің алынуы
 - электрондық рентген түтікшесі
 - Ақ сәулелену
 - Сипаттамалық сәулелену
 - Кристалдардағы рентген сәулелерінің дифракциясы.
-

КРИСТАЛДАРДЫҢ РЕНТГЕНОМЕТРИЯСЫ

- Рентген сәулелері көмегімен алғаш рет кристалдардың тор құрылысы теориясы эксперименталдық тұрғыдан дәлелденді, олардың көмегімен нақты мысалдармен атомдар арасындағы қашықтықты абсолюттік бірліктермен өлшеу және әрбір зерттелген кристалдық объектінің құрылымын (атомдардың кеңістіктік орналасуы) анықтау мүмкін болды.



Рентген сәулелері 1895 жылы ашылды, әйгілі неміс физигі В.К. Рентген құрметіне аталды

- 1912 жылдың ортасына қарай М. Лауэнің (1879-1960) ашқан жаңалығының арқасында кристалдардағы рентген сәулелерінің дифракциясы, рентген сәулелерінің табиғаты инфрақызыл, көрінетін, ультракүлгін және басқа да электромагниттік спектр сәулелері табиғатымен сәйкес екендігі анықталды.

Алғашқы тәжірибенің сәтсіз болу себептері:

- Рентген сәулелерінің толқын ұзындығы көрінетін сәулелердің толқын ұзындығынан 10 000 есе қысқа болады.
- Зерттеушілер қолданатын әдеттегі приборлар өте аз толқындарды ұстау үшін өте дөрекі аспап болып шықты.

Лауэ тәжірибесі

- кристалдар көмегімен рентген сәулелерін, рентген сәулелері көмегімен кристалдарды зерттеу мүмкіндігі

Рентгенқұрылымдық анализ негізінде рентген сәулелерінің екі таңғажайып ерекшеліктері жатыр:

- 1). сәулелердің қасиеттері дененің ішкі жағынан ене алады,
- 2). олардың кристалдық құрылымдық бірліктерінен (атом, ион, молекула) дифракциялану қасиеті, ол кеңістікте периодты түрде қайталанады.

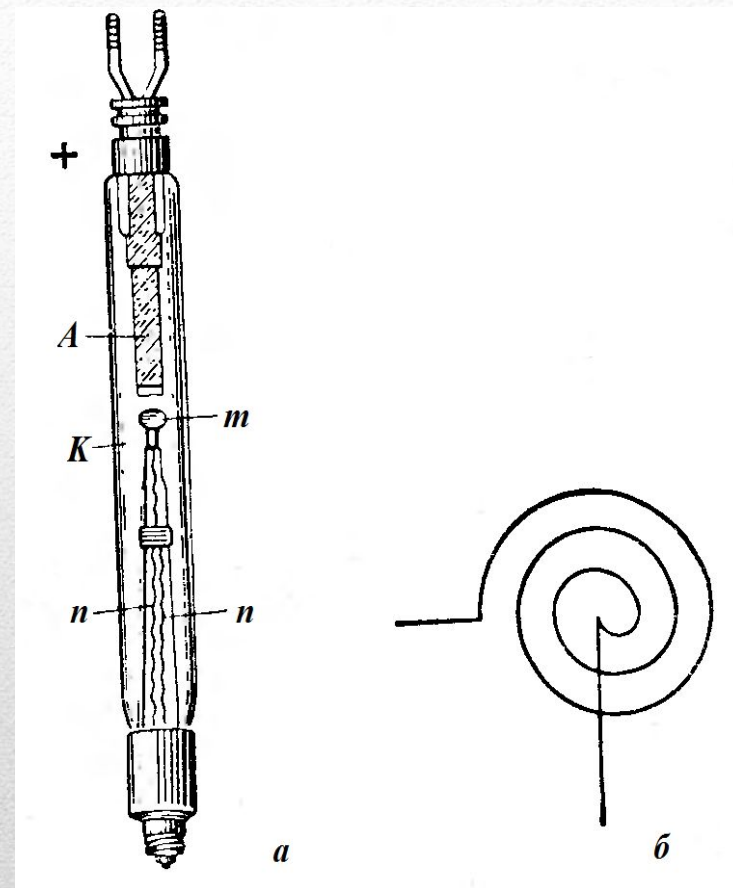
рентгенқұрылымдық анализ

- Рентген сәулелерін алу үшін, әдетте, мына үш шартты орындау керек:
- 1. Бос электрондардың көп мөлшерін алу керек.
- 2. Алынған электрондарды белгілі бағытта үлкен жылдамдықпен қозғалуға мүмкіндік жасау.
- 3. Электрондарды бірден тоқтату. Бұл кезде тежелетін зат тежелу кезінде электрондардың жылдамдығының бірден жоғалуы нәтижесінде рентген сәулелерін шағылыстырады.

Айтылған үш шартты қанағаттандыратын және рентген сәулелерін алуға қолданылатын приборлар *рентген түтікшелері* деп аталады.

Рентген сәулелерінің алынуы

- Электрондық рентген түтікшесі цилиндрлік, әдетте, шыны ыдыс болып келеді, ол ыдыстан ауа техникалық мүмкіндіктер шегіне дейін ығыстырылады (түтікшедегі газ қысымы 10^{-6} мм.сын.бағ. дейін жетеді). Түтікшеге екі метал электрод енгізіледі. Бір электрод *катод (K)*, екіншісі – *анод (A)* деп аталады.



Электронды рентген түтікшесі (а) және қыздыру спиралі (б)

электрондық рентген түтікшесі

Сәулелену ұзындығы мен интенсивтіліктері әр түрлі толқындардан құралады. Ол көрінетін жарыққа ұқсас және де ақ сәулелену деп аталады.

Ақ сәулеленудің құрамы түтікке берілетін кернеуге (бос электрондардың жылдамдығына) байланысты және анод затына байланысты болмайды.

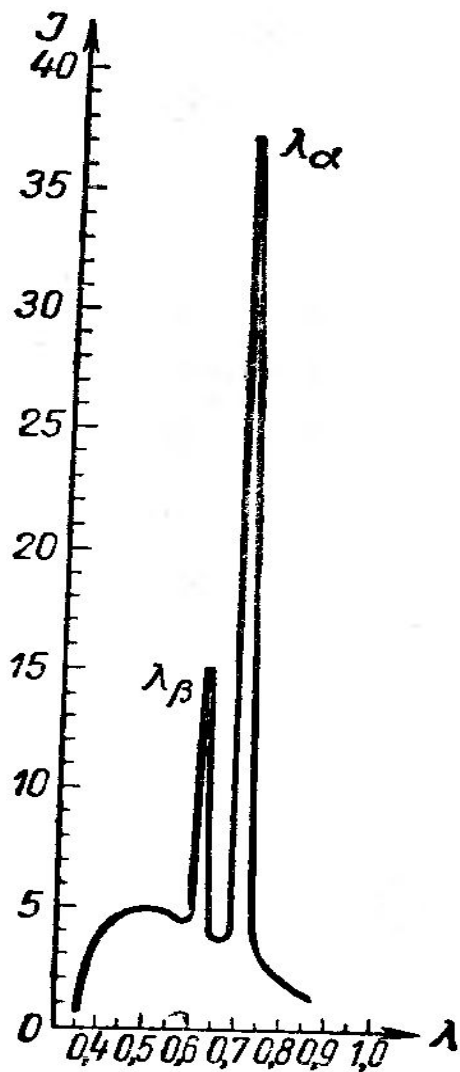
Түтіктің полюстеріндегі кернеудің жоғарылауымен катод - анод аралығында электрондардың жылдамдығы артады, бұл жағдайда ұшып жүрген электрондар анод атомының электрондық деңгейлеріне өте алады.

Ақ сәулелену

Атомдарға қосымша энергия беріледі. Бұл энергияны анод атомы қоршаған ортаға толқын түрінде қайтарады, бұл толқын ұзындығы бойынша берілген атом типі үшін тән болады. Мұнда туындайтын ұзындықтары белгілі толқындар рентген түтікшесінің сипаттамалық сәулеленуін құрайды.

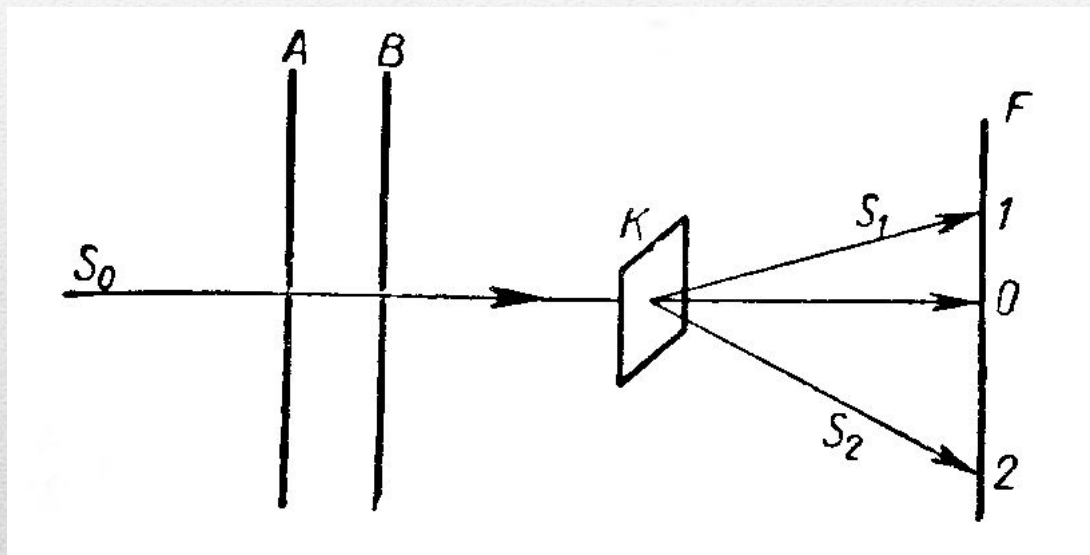
Сипаттамалық сәулеленудің құрамы анод затына (оның атомдық нөміріне) байланысты және түтікке берілетін кернеуге байланысты болмайды.

Сипаттамалық сәулелену



- Түтіктегі кернеу 35 кв болғанда молибден анодының спектрі көрсетілген.
- Ақ сәуленің бірқалыпты қосық спектрлерге берілетін жоғары пиктер сипаттамалық сәулелердің және толқын ұзындықтарына сәйкес болады.

- Өзінің гипотезасына сәйкес, Лауэ рентген сәулесінің анализі үшін кристалдарды шынайы үшөлшемді дифракциялық тор ретінде қолдануды ұсынды.

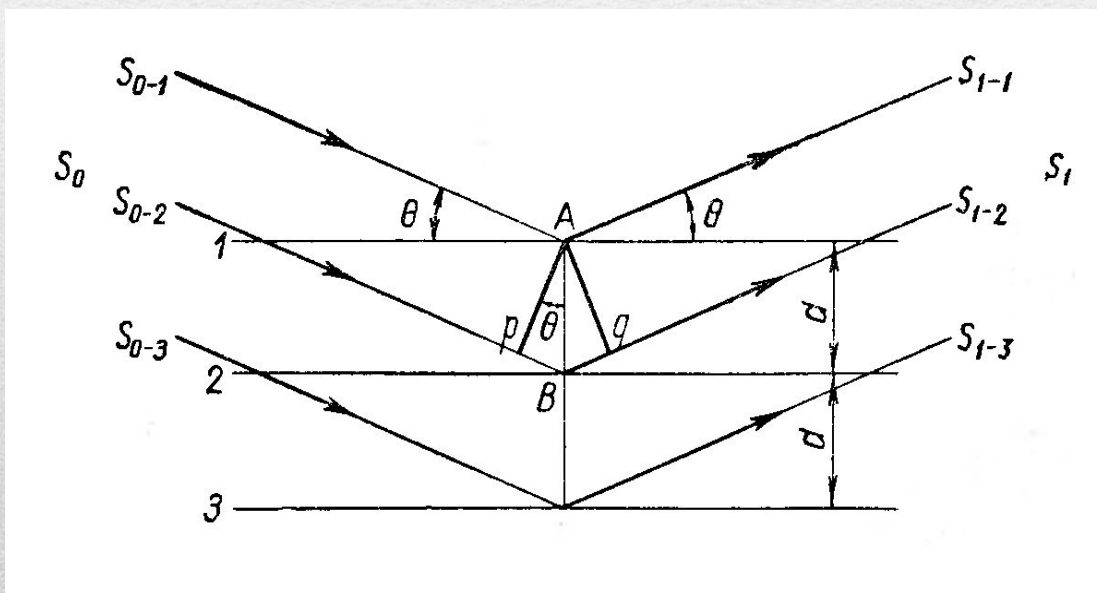


Мұнда А және В – тар тесігі бар кермелер, олар S_0 ақ рентген сәулелерінің шоғырын өткізеді, К-кристалл, F-кристалдың артындағы фотографиялық пластинка.

Лауэ тәжірибесі

Кристалдардағы рентген сәулелерінің дифракциясы.

- Кристалл қырлардың рентген сәулелерінің «шағылуына» алып келетін дифракция құбылысы қарапайым және өте көркем болады, оны 1912 жылы бір біріне тәуелсіз ағылшын ғалымы В.Л.Брэгг және ірі орыс кристаллографы Г.В.Вульф (1863-1925) тұжырымдады. Осы негізгі формуланы қорытындысын қарастырайық.



$$\frac{d}{n} = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}$$

Брегг – Вульф теңдеуін
қорытындылау

**Кристалдардағы рентген сәулелерінің
дифракциясы.**

- Интерференция заңына сәйкес, егер шоғыр сәулесінің S_1 жолының айырымы (толқын ұзындығының толық санына тең болады:

- $\Delta = n\lambda$,
- мұндағы n – шағылу реті, ол 1,2,3, ... ке тең.

$$\frac{d}{n} = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}$$

- $pB = AB \sin \theta = d \sin \theta$

- Сондықтан:

- $\Delta = n\lambda = 2d \sin \theta$,

- – ауытқыған сәулелердің жолының айырымы, n – шағылу реті, λ – рентген сәулелерінің толқын ұзындығы, d – жазықтық аралық арақашықтық, θ – толқын ұзындығы берілген тор жүйесінен «ауытқитын» бұрыш. Құлау бұрышына немесе шағылу бұрыштарына қатысты θ 90° –қа дейін болады.

- Шағылудың түрлі реті үшін Брэгг-Вульф формуласын жазайық:

- $\lambda = 2d \sin \theta_1$ – бірінші рет,
- $2\lambda = 2d \sin \theta_2$ – екінші рет
- $3\lambda = 2d \sin \theta_3$ – үшінші рет және т.б.

- Шығарылған формула немесе Брэгг – Вульф формуласы бүкіл рентген құрылымдық анализдің негізінде жатыр. Мысалы, λ (сипаттамалық сәулелену) белгілі болғанда және θ тәжірибелік табылған бұрыштардан мына теңдік анықталады: