

# Röntgenispektrid

## Sissejuhatus

Käesolevas referaadis on vaatluse alla võetud röntgenispektrid. Referaadi esimeses osas on vaadeldud röntgenikiirte tekkemehhanismi ja vastavat spektrit, peatudes pikemalt pidurdusspektril. Teine osa on pühendatud karakteristikule röntgenikiirgusele ja Moseley seadusele.

## Röntgenikiired

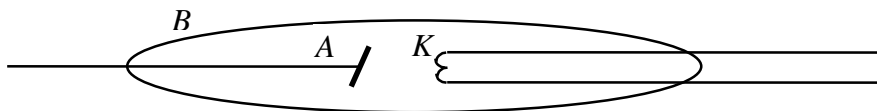
Aatomi ehituse detailide (elektronide jaotumine kihtide järgi) määramisel olid suure tähtsusega röntgenikiirguse spektrite andmed. Vaatleme siin röntgenikiirguse mõningaid omadusi.

Röntgenikiired tekivad ainete pommitamisel suure kineetilise energiaga elektronide vooga. Röntgenikiirte torud koosnevad kolmest osast: balloonest  $B$ , katoodist  $K$ , mis on elektronide allikaks ja kujutab endast elektrivooluga köetavat traati ning anoodist  $A$ , mis on röntgenikiirte allikaks (joonis 1). Katoodi ja anoodi vahel on elektrone kiirendav elektriväli. Tänu sellele elektriväljale omandavad anoodile  $A$  saabuvad elektronid suure kineetilise energia  $E_k$ .

$$E_k = eU$$

kus  $U$  on katoodi  $K$  ja anoodi  $A$  potentsiaalide vahe ja  $e$  elektroni laeng. Röntgenikiirte tekitamiseks peab elektronide energia ulatuma kümnetesse tuhandetesse elektronvoltidesse.

**joonis 1.** Röntgenitoru ehituse skeem



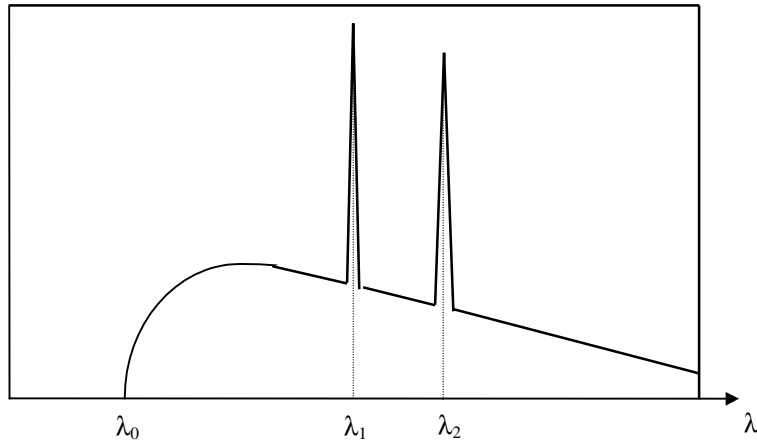
Et elektronid saaksid sellise energia omandada, kaotamata teda põrgetel gaasi aatomitega, on ballooni  $B$  sisemuses tekitatud suur hõrendus, õhk on sel määral välja pumbatud, et elektronid läbivad vahemaa  $KA$  ilma põrgeteta.

Röntgenikiirtel on tugev fotograafiline toime. Luminofoorides (tsinksulfiidis, baariumplaatinoatsüaniidis, kaltsiumvolframaadis jt.) kutsuvad nad esile silmaga nähtava helenduse. Nende ainete abil võib visuaalselt teha kindlaks röntgenikiirte ilmumise.

Röntgenikiirte intensiivsust võib mõõta nii nende fotograafilise mõju kui ka nende poolt gaasilistes keskkondades tekitatud ionisatsiooni suuruse järgi. Mida intensiivsem on kiirgus, seda suurema ionisatsiooni ta tekitab.

Röntgenikiirguse spektraalse koostise uurimine näitas, et see on keerulise kujuga ja sõltub nii elektronide energiast kui ka anoodi  $A$  ainest. Joonisel 2 on kujutatud röntgenikiirte spektri tüüpiline kuju.

**joonis 2.** Intensiivsuste jaotus röntgenikiirguse spektris



Spekter koosneb kahest osast - mõningate monokromaatsete joonte  $\lambda_1, \lambda_2, \dots$  kogumist, mis on joonisel 2 kujutatud teravate maksimumidena ja laiast spektraalvahemikust, mis kujutab endast pidevat lainepikkuste rida ning on piiratud lühemate lainepikkuste poolt suurusega  $\lambda_0$ .

Elektronide energia ja anoodi A edasine uurimine näitas, et röntgenikiirte spekter on kahesuguse olemusega. Teravate intensiivsusemaksimumide asukoht osutus sõltuvaks ainult anoodi ainest. Järelikult kiirgab neid kiiri aine, mida pommitatakse suure energiaga elektronidega. Sel põhjusel nimetatakse seda kiirgust karakteristikuks röntgenikiirguseks. Pideva spektri iseloom aga ei sõltu üldse ainest, vaid ainult pommitavate elektronide kineetilisest energiast. Sellest võib järeldada, et pommitavad elektronid ise kiirgavad pidevalt röntgenispektrit. Selle kiirguse hoolikas uurimine näitas, et ta tekib aatomi tuumade lähedalt mööduva elektroni järsul pidurdumisel. Maxwelli järgi peavad sellised pidurduvad elektronid kiirgama lühikesi elektromagnetiliste lainete impulsse. Seetõttu nimetatakse pidevat röntgenispektrit sageli *pidurdusspektriks*.

Joonisel 2 kujutatud spekter on piiratud lühemate lainete poolt. Olgu pideva röntgenispektri piitile vastav lainepikkus  $\lambda_0$ . Elektronide kineetilise energia muutudes muutub ka  $\lambda_0$ . Energia  $E_k$  suurenemisel  $\lambda_0$  väheneb.  $E_k$  ja  $\lambda_0$  vahelise sõltuvuse uurimine näitas, et see avaldub kujul:

$$E_k = eU = \text{const}/\lambda_0$$

**seos 1**

Kujutledes valgust laineprotsessina, pole seost 1 võimalik seletada. Maxwelli järgi peab pidurduva elektroni kiirgusspekter olema pidev ja ilma piirita lühemate lainepikkuste poolt.

Seost 1 saab seletada üksnes kvantteooria abil.

Elektroni pidurdumisel osa tema energiast kiirgub valguskvandina. Kui suur osa elektroni energiast aga läheb kiirguseks, sõltub pidurdusest (ehk sellest kui lähedalt elektron möödub tuumast). Mida rohkem energiat pidurduseks kulub, seda suurem on tekiva kvandi sagedus ja seda väiksem on kiirguse lainepikkus  $\lambda$ . On ilmne, et kvandi suurim energia vastab pidurdusjuhule, kus elektroni kogu kineetiline energia läheb üle kvandi energiaks. Järelikult peab kehtima seos

$$h\nu_0 = eU,$$

kus  $\nu_0$  on pideva spektri piirile vastav sagedus.

Kui valgus on kvantide voog ja pideva röntgenikiirguse kvandid tekivad ühe elektroni pidurdumisel, siis ei saa elektronide kineetilise energia  $E_k = h\nu_0$  korral tekkida kvante, mille sagedus on suurem kui  $\nu_0$ . Järelikult peab pidev röntgenispekter olema lühemate lainepikkuste poolt piiratud. Piirav lainepikkus  $\lambda_0$  peab olema järgmine:

$$\lambda_0 = \frac{c}{\nu_0} = \frac{ch}{eU} \quad \text{seos 2}$$

Seos 2 ühtib seosega 1. Järelikult annavad kvantkujutlused valgusest pideva röntgenispektri lühilainelise piiri olemasolule õige põhjenduse. Märgime veel, et teades  $U$  väärtust ja määrates katseliselt lainepikkuse  $\lambda_0$  (pidurdusspektri piiri), võib arvutada Plancki konstandi  $h$  väärtuse. Plancki konstandi määramine röntgenikiirguse pideva spektri piiri lainepikkuse järgi on üks kindlamaid ja täpsemaid Plancki konstandi määramise mooduseid.

### Karakteristlikud röntgenispektrid

Teatavasti on iga elektroni olek aatomis iseloomustatav nelja kvantarvuga  $n, l, m_l, m_s$ , kusjuures:

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots; \\ l &= 0, 1, 2, \dots, n - 1; \\ m_l &= -l, \dots, -1, 0, 1, \dots, +l; \\ m_s &= \pm 1/2; \end{aligned}$$

Oleku energia sõltub peamiselt peakvantarvust  $n$  ja orbitaalsest kvantarvust  $l$ . Elektronid, millel on ühesugune peakvantarv, moodustavad elektronikihi. Kihte tähistatakse järgmiste sümbolitega (tabel 1):

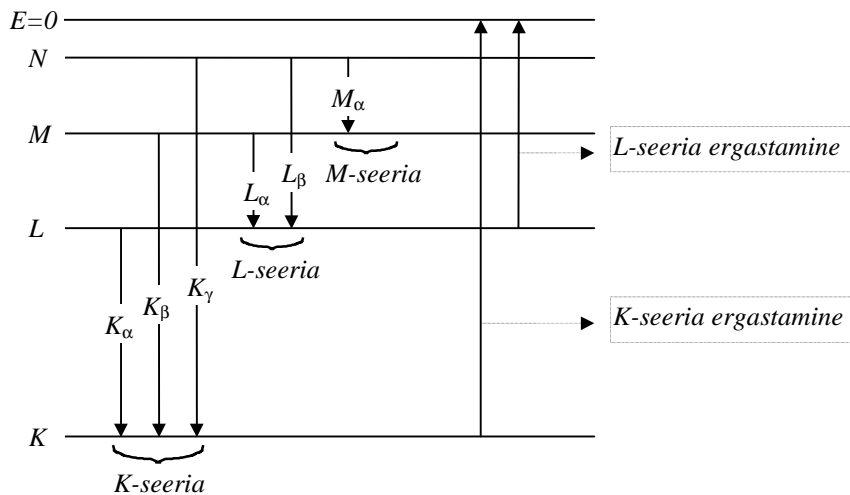
**tabel 1**

$n$	1	2	3	4	5	6	7	...
	K	L	M	N	O	P	Q	...

Analoogiliselt optiliste spektritega koosneb karakteristlik röntgenispekter reast seeriatest, mille lainepikkused teravalt erinevad. Erinevate elementide spektritel on sarnane iseloom. Järjenumbri  $Z$  suurenemisel nihkub kogu röntgenispekter struktuuri muutmata lühemate lainete poole. See on seletatav sellega, et röntgenispektrid tekivad elektronide siiretel aatomi siseosades, mis on kõik sarnase ehitusega.

Röntgenispektri tekke skeem on kujutatud joonisel 3. Aatomi ergastamine seisneb sisekihi elektroni eemaldamises. Kui kiire välise elektroni või röntgenikvandi mõjul eemaldatakse üks kahest K-kihi elektronist, siis võib vabanenud koha hõivata elektron

joonis 3. Röntgenispektrite tekke skeem



mõnest välimisest kihist (L, M, N jne.). Ühtedes aatomites täidab selle koha L-kihi elektron, teistes aatomites M-, N-kihi elektronid, nii et tulemusena tekib kogu K-seeria korruga. Nii tekib K-seeria. Analoogiliselt tekivad ka teised seeriad. Neid seeriaid tähistatakse tähtedega L, M, N ja O. Igas seerias on joonte arv väike; jooni märgitakse lainepikkuse vähenemise järjekorras indeksitega  $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ .

Kui aatomis puuduvad L-kihi elektronid, siis tekib L-seeria. K-seeriaga kaasnevad kindlasti ülejäänud seeriad, sest selle joonte kiirgumisel vabanevad kohad L-, M- jne. kihtides, mis omakorda täidetakse elektronidega välimistest kihtidest.

Erinevatel üleminekutel on erinev tõenäosus ja seetõttu on spektris esinevate joonte intensiivsus erinev.

Tuues  $m_l$  ja  $m_s$  asemele sisse alternatiivsed kvantarvud  $j$  ja  $m_j$  ( $j = 1 \pm 1/2$ ;  $m_j = -j \dots +j$ ), rühmitub elektronide jaotus aatomis pisut ümber. Nn. seesmise kvantarvu  $j$  väärtus on aluseks elektronkatte lahterdamisel alanivoodeks - tabelis 2 on näiteks toodud 3 esimest energianivood.

tabel 2

$n$	$l$	$j (m_l)$	$m_j$	Alanivoo	
1(K)	0 (s)	1/2 (0)	-1/2	I	
		1/2 (0)	+1/2		
2(L)	0 (s)	1/2 (0)	-1/2	I	
		1/2 (0)	+1/2		
	1 (p)	1/2 (-1)	1/2 (-1)	-1/2	II
			1/2 (-1)	+1/2	
		3/2 (0)	3/2 (0)	-3/2	III
			3/2 (0)	-1/2	
3/2 (1)	3/2 (1)	+1/2	III		
	3/2 (1)	+3/2			
	0 (s)	1/2 (0)	-1/2	I	
		1/2 (0)	+1/2		
			1/2 (-1)	-1/2	II
			1/2 (-1)	+1/2	

3(M)	1 (p)	3/2 (0)	-3/2	III
		3/2 (0)	-1/2	
		3/2 (+1)	+1/2	
		3/2 (+1)	+3/2	
	2 (d)	3/2 (-2)	-3/2	IV
		3/2 (-2)	-1/2	
		3/2 (-1)	+1/2	
		3/2 (-1)	+3/2	
		5/2 (0)	-5/2	V
		5/2 (0)	-3/2	
5/2 (+1)	-1/2			
5/2 (+1)	+1/2			
		5/2 (+2)	+3/2	
		5/2 (+2)	+5/2	

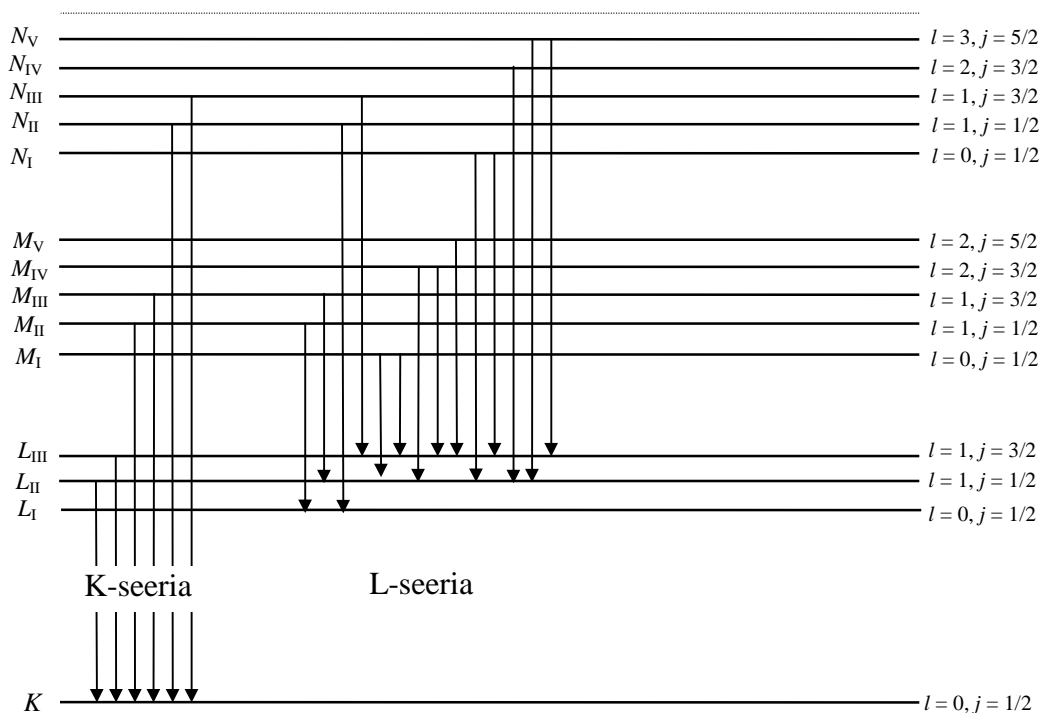
Osutub, et kõige intensiivsemad on selliste statsionaarsete olekute vahelised üleminekud, mille korral orbitaalse kvantarvu  $l$  ja seesmise kvantarvu  $j$  muutus on järgmine (valiku reegel):

$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta j = \pm 1 \text{ või } 0$$

Viimast seost nimetatakse valiku reegliks. Joonisel 4 on esitatud kõige suurema tõenäosusega (valiku reeglit rahuldavad) üleminekud.

**joonis 4.** Aatomi sisemiste elektronide energianivoode diagramm



Kõige intensiivsemad K-seeria jooned on  $K_{\alpha 1}$  ja  $K_{\alpha 2}$ , mis tekivad elektronide üleminekul vastavalt olekutest  $L_{III}$  ja  $L_{II}$ .

Karakteristliku röntgenispektri joonte lainepikkuse ja vastava sageduse muutumist erinevate elementide korral uuris esimesena Moseley, kes avastas 1913. aastal lihtsa seaduse, mis seob karakteristliku röntgenikiirguse ringsagedust seda kiiranud elemendi järjenumbriga Mendelejevi tabelis:

$$\sqrt{\omega} = C(Z - \sigma)$$

**valem 1**

Moseley seaduse võib formuleerida järgmiselt - ringsageduse ruutujuur on elemendi järjenumbriga lineaarfunktsioon. Konstant  $\sigma$  säilitab oma väärtuse ühe ja sama seeria piires, kuid muutub üleminekul ühelt seerialt teisele. Moseley mõõtmiste järgi  $\sigma = 1$  K-seeria jaoks ja  $\sigma = 7,5$  L-seeria jaoks. Konstandil  $C$  on oma väärtus iga joone jaoks, kuid iga väärtus on ühtlasi ühine kõikidele elementidele.

Moseley poolt avastatud seadus lubab röntgenispektri joone lainepikkuse järgi täpselt määrata antud elemendi järjenumbriga - see seadus mängis suurt osa elementide paigutamisel perioodilisuse süsteemi.

Moseley andis oma seadusele ka lihtsa teoreetilise põhjenduse. Ta tegi kindlaks, et  $K_{\alpha}$  joone jaoks on konstandil  $C$  valemis 3 väärtus  $\sqrt{3R/4}$ , kus  $R$  on Rydbergi konstant. Seega võib selle joone jaoks seose 1 kirjutada kujul:

$$\omega = R(Z - 1)^2 \left( \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right)$$

Samasuguse ringsagedusega joon tekib elektroni siirdel tasemelt  $n = 2$  tasemel  $n = 1$ , kui elektron liigub laengu  $(Z - 1)$ e väljas.

Teiste joonte puhul võib valemile 1 anda kuju:

$$\omega = R(Z - \sigma)^2 \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

**valem 2**

kus  $\sigma$  on ühe ja sama seeria piires konstantne.

Konstandi  $\sigma$  mõtet on lihtne mõista - siiret sooritavad elektronid on tuuma mõju all, mille tõmbejõud on mõnevõrra nõrgestatud teda ümbritsevate teiste elektronide mõju tõttu. Selline nõndanimetatud ekraanering mõju avaldubki vajaduse lahutada tuuma laengu kirjeldavast järjenumbrist teatud suurus  $\sigma$ .

Konkreetselt sisepoolsele elektronile mõjuvad tuumast kaugemal asuvad elektronid nõrgalt, sest viimaste poolt sisepoolsele tekitatud väljatugevus on keskmiselt null (laetud kerapinna sees väli puudub). Seetõttu on sisemised elektronid peamiselt tuuma ja neist tuumale lähemale asetsevate elektronide mõju all. Seega on parandus  $\sigma$  esile kutsutud tuuma lähedal paiknevate elektronide olemasolust ja ülejäänud elektronide poolt avaldatavast nõrgast mõjust.

Lõpetuseks võib veel lisada, et seos 4 pole päris täpne, vaid on koostatud eeldusel, et mõlemal seose termil on ühesugune ekraaneringkonstant. Tegelikult on ekraanering

näiteks K-kihis nõrgem kui L-kihis, sest L-kihis olevat elektroni ekraneerivad 2 K-kihi elektroni ja osa L-kihi enda elektronidest. Vastavalt sellele tuleks valemit 2 täiendada järgmiselt:

$$\omega = R \left[ \frac{(Z - \sigma_1)^2}{n_1^2} - \frac{(Z - \sigma_2)^2}{n_2^2} \right]$$

### Kasutatud kirjandus

M. Korsunski Füüsika III. Optika. Aatomi ehitus. Aatomi tuum. *Tallinn* 1967

I. Saveljev Füüsika üldkursus 3. Optika, aatomifüüsika, aatomituuma ja osakeste füüsika. *Tallinn* 1979