

*И. Б. БОРОВСКИЙ, В. И. МАТЫСКИН, В. И. НЕФЕДОВ

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ РЕНТГЕНОВСКИХ ЭМИССИОННЫХ СПЕКТРОВ

(Представлено академиком А. М. Прохоровым 6 IV 1970)

В монокристаллах низкой симметрии межатомные связи могут быть резко анизотропны относительно какого-нибудь кристаллографического направления. В подобных случаях может оказаться, что рентгеновское характеристическое излучение, связанное с переходами с уровней валентных электронов на один из внутренних уровней также будет пространственно анизотропно. Поэтому большой интерес для получения дополнительной информации представляет исследование «ориентационной» зависимости параметров линии характеристического рентгеновского спектра.

Ориентационная зависимость основных параметров линии первичных рентгеновских спектров K - и L -серии ванадия в монокристалле V_2O_5 была изучена в работе (1). Полученные в ней экспериментальные данные показали, что особый интерес представляет исследование формы линии, когда начальным уровнем перехода являются уровни валентной полосы.

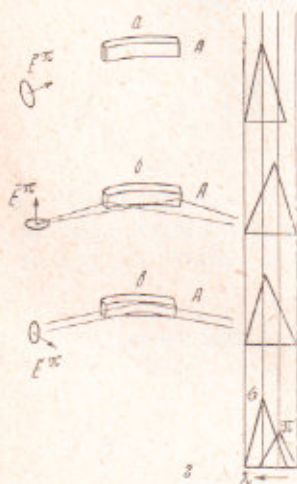


Рис. 1. а, б, в — взаимная ориентация вектора E (для π -переходов) и кристалла-анализатора A . Рентгеновское излучение может распространяться лишь в плоскости $\perp E$; г — схематические изображения K_α -полосы углерода в графите

Большой интерес для подобных исследований представляло изучение SK_α -линии углерода в графите, связанной переходам электронов валентных уровней на $1s$ -уровень углерода. Структура графита подробно изучена и имеются многочисленные расчеты зонной структуры его в различных приближениях одноэлектронной теории. Характерным для графита является слоистая структура, причем связь между слоями слабая, а внутри слоя (плоскости) — сильная. Расчеты зонной структуры, проведенные для двумерной решетки, позволили удачно интерпретировать такие физические свойства графита, как электропроводность, эффект Холла, оптические константы. В слоях графита каждый атом углерода связан тремя прочными так называемыми σ -связями с соседними атомами. Эти связи образованы волновыми функциями s -, p_x - и p_y -симметрии, а четвертый валентный электрон углерода участвует в так называемой π -связи и характеризуется волновыми функциями p_z -симметрии. Пользуясь теорией групп, можно показать, что переходы σ -полоса $\rightarrow K$ -уровень поляризованы

в плоскости XY , а переходы π -полоса $\rightarrow K$ -уровень поляризованы в направлении оси Z . Таким образом, SK_α -полоса от поликристаллического образца представляет собой результат наложения обеих полос, и выделить экспериментально какую-нибудь компоненту невозможно.

Основная задача при экспериментальном исследовании ориентационной зависимости состоит в умении «гасить» переходы с определенной поляризацией. Для переходов с уровней, дающих поляризованное излучение с вектором E , поляризационный характер излучения можно использовать тремя следующими способами.

1. Монокристалл-излучатель ориентировать таким образом, чтобы вектор поляризации E был направлен на изогнутый кристалл-анализатор; в этом случае на него не попадает излучение, вызванное переходами с этих уровней.

2. Вектор поляризации E направлен параллельно образующей цилиндра, по которому изогнут кристалл-анализатор (рис. 1б). В этом случае бу-

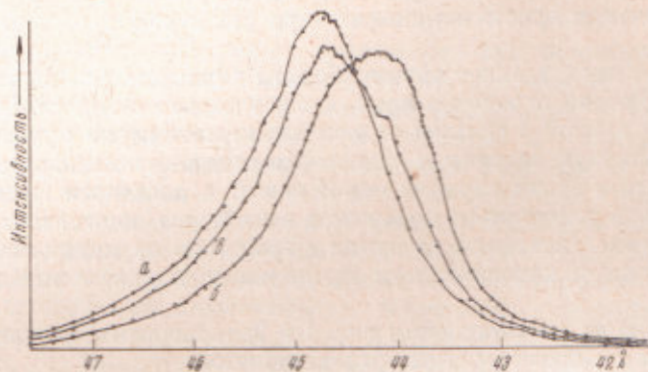


Рис. 2. Экспериментальные K_{α} -линии углерода в графите. Взаимная ориентация векторов E (для π -переходов) и кристалла-анализатора в случаях *а*, *б* и *в* соответствуют рис. 1 и пояснена в тексте

дут иметь место оптимальные условия для отражения переходов с изучаемых уровней.

3. Если E ориентировать перпендикулярно к своему направлению в случае *а* и *б* (рис. 1а), и если при этом угол Вульфа — Брэгга равен 45° , то (пренебрегая многократным рентгеновским рассеянием) интенсивность излучения в направлении к регистрирующей системе равна 0; интенсивность будет тем меньше, чем ближе угол Вульфа — Брэгга к 45° . Таким образом, этот случай является промежуточным для случаев 1 и 2.

Используя в качестве анода монокристалл графита, ориентированный так, чтобы ось Z была направлена на кристалл-анализатор, получим спектр, обусловленный переходами только σ -электронов. Во втором из рассмотренных выше случаев в спектре будут представлены переходы как σ , так и π -электронов, причем последние с максимально возможной интенсивностью. И, наконец, в третьем варианте ориентации образца мы снова получим смесь σ - и π -полос, но теперь π -полоса будет представлена в значительно меньшей степени, чем в предыдущем случае. Из общих положений и расчетов известно, что коротковолновая часть SK_{α} -полосы графита связана с π -полосой. Обозначим условно σ - и π -полосы треугольниками.

Ожидаемый вид спектра для всех трех случаев схематически изображен на правой стороне рис. 1.

SK_{α} -полоса графита снималась на IV спектрометре установки MS-46 с кристаллом стеарата свинца в качестве анализатора при следующих геометрических условиях.

а) Образец ориентирован так, что направление оси Z составляет угол в 18° с точным направлением на центр кристалла;

б) образец повернут в плоскости шлифа на 90° , т. е. направление на кристалл и ось Z взаимно перпендикулярны, причем последняя параллельна образующей цилиндрической поверхности кристалла;

в) электронный зонд падает нормально на поверхность скола, при этом волновой вектор регистрируемого излучения составляет угол с осью Z , а ее проекция на кристалл перпендикулярна образующей цилиндра.

Эти три случая соответствуют рассмотренным выше трем вариантам взаимной ориентации вектора E^π (для излучения от π -переходов) и кристалла. Отклонение на угол в 18° в случае а) и в) не изменяет качественной картины; в случае а), например, геометрия прибора по-прежнему исключает попадание излучения, обусловленного переходами с π -полосы, на кристалл.

На рис. 2 показаны формы полос CK_α в графите, соответствующие перечисленным трем способам ориентировки образцов. Каждая полоса получена усреднением 5—6 экспериментальных кривых, причем в каждом угле положения кристалла-анализатора регистрировалось от $5 \cdot 10^3$ до 10^5 импульсов.

Кривая a представляет таким образом эмиссионную полосу, в которой начальные уровни переходов принадлежат только σ -полосе. Максимум интенсивности кривой b смещен относительно максимума кривой a на 3,2 эв в коротковолновую сторону, а отношение самих интенсивностей составляет 1,14 (так как в обоих случаях ось Z лежит в плоскости шлифа, и ориентация образца изменяется поворотом в этой же плоскости, то условия взаимодействия электронного пучка с графитом не меняются). В третьем случае максимум интенсивности примерно совпадает с максимумом кривой a .

Как видно из сопоставления рис. 1 и 2, экспериментальные результаты согласуются с теоретическими представлениями.

Институт металлургии им. А. А. Байкова
Академии наук СССР

Поступило
30 III 1970

Институт общей и неорганической химии
им. Н. С. Курнакова
Академии наук СССР
Москва

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ И. Б. Боровский, В. И. Матыский, ДАН, 192, № 1 (1970).