

1 原理

1.1 X 線の発生

電磁波の発生過程には黒体放射, 制動放射, 遷移放射などがある. 今回の実験で用いた X 線発生装置では制動放射と遷移放射が支配的になっているのでこれらについて述べる.

1.1.1 連続 X 線

連続 X 線とは制動放射により生じる X 線である. 連続 X 線は図のスペクトルの連続的な部分である. 図に X 線発生装置の概略を示す. 電子銃から放射された電子は銅のターゲットに衝突する. ターゲットに衝突した電子は様々な方向に散乱されるが, その程度によって制動の具合が異なってくる. これによって様々なエネルギーの X 線が放射されることになる. ここで電子銃の加速電圧を V としよう. 最も制動が大きいのは 1 回の衝突で全エネルギーを失うことに相当するので $hc/\lambda = eV$ から

$$\lambda_m = \frac{hc}{eV} \quad (1)$$

となる. この波長が加速電圧 V の連続 X 線で得られる最も高エネルギーな (すなわち波長が短い) 光になる. 連続 X 線の全強度は管電流を i , ターゲット原子の原子番号を Z とすれば

$$I \propto iV^m Z \quad (2)$$

となり, ターゲットに重元素を用いると効率よく X 線を得ることができる.[1] 連続 X 線スペクトルを求める方法としては Birch-Marshall のモデルが用いられる.[2]

1.1.2 特性 X 線

特性 X 線 (または固有 X 線) とは遷移放射により生じる X 線である. 特性 X 線は図 1 の鋭いピークの部分である. 特性 X 線は主量子数 n の高い準位にいる電子が低い準位に遷移する際に放射される X 線である. X 線の波長は準位間のエネルギーの差を ΔE とすれば

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} \quad (3)$$

となり, 同じ遷移による放射は常に同じ波長となることから鋭いピークが現れる. 原子では主量子数が 0 の軌道を K 殻, 1 の軌道を L 殻, 2 の軌道を M 殻と呼ぶが, それぞれの遷移について名前がついている. 図 2 のように L 殻から K 殻への遷移による X 線を K_α 線, M 殻から K 殻への遷移による X 線を K_β 線と呼ぶ. また角運動量子数 j の違いなどによって L, M 殻は微細構造を持つので波長が僅かに異なる X 線が発生する. 特に L_{III} 殻から K への遷移による X 線は $K_{\alpha 1}$ 線, 特に L_{II} 殻から K への遷移による X 線は $K_{\alpha 2}$ 線などと呼ばれる. これらの遷移確率は約 2 : 1 であり, すなわち強度比も 2 : 1 となる. これらの X 線の波長は非常に近接しており, 実験的には分離が困

難なため、その波長を加重平均した

$$\lambda_{K_{\alpha}} = \frac{2\lambda_{K_{\alpha 1}} + \lambda_{K_{\alpha 2}}}{3} \quad (4)$$

を用いる場合が多い.[1] ターゲットとして銅を用いた場合、これらの X 線の波長は表 1 のようになる.

表 1 X 線の波長

波長 / Å	
$K_{\alpha 1}$	1.5405
$K_{\alpha 2}$	1.5443
K_{α}	1.5418
K_{β}	1.3922

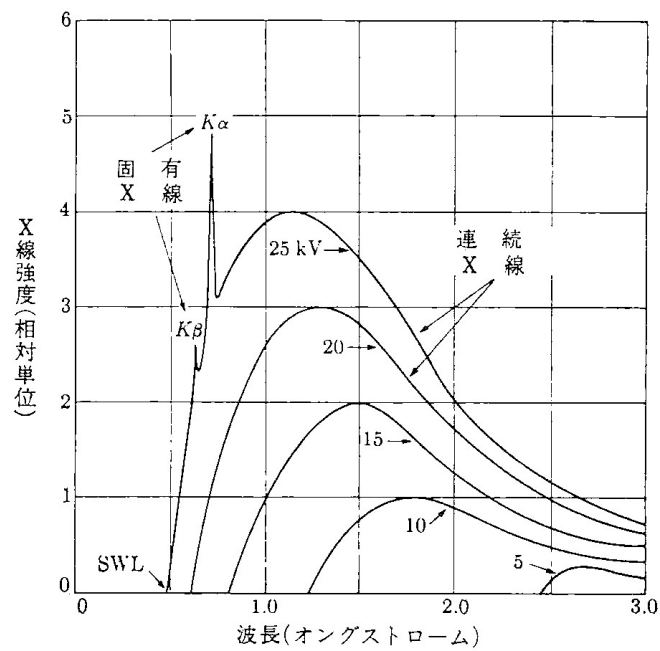


図 1 モリブデンターゲットによる X 線のスペクトル [3]

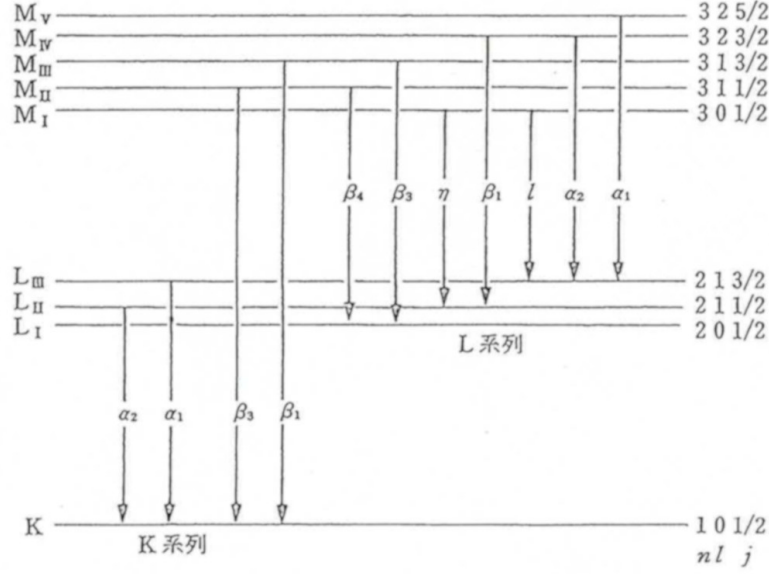


図 2 準位間の遷移 [1]

1.2 X 線回折法

Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (5)$$

ここで両辺 $-2\mu/\hbar^2$ を掛けると

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(\vec{r}) = U(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \quad (6)$$

となる. ただし $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$, $U(\vec{r}) = 2\mu V(\vec{r})/\hbar^2$ とした. この解は平面波解

$$\psi_{\text{in}}(\vec{r}) = e^{ikz} \quad (7)$$

及び Poisson 方程式の Green 関数

$$G(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \quad (8)$$

を用いて

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{\text{in}}(\vec{r}) + \int d\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') \quad (9)$$

と表され, これは Lippmann-Schwinger 方程式と呼ばれる. 散乱問題では 1 項目が平面波である入射波と対応し, 2 項目は散乱波と対応する. ここで積分内の $\psi(\vec{r}')$ に左辺を逐次代入すると

参考文献

- [1] 菊田惺志. X 線回折・散乱技術. 上, 1992.
- [2] 前川昌之. X 線スペクトルモデルの有用性と限界 (討論会テーマ:診断技術における x 線スペクトルの利用, 第 31 回計測分科会討論会 (4)). 計測分科会誌, Vol. 16, No. 1, p. 12, 2008.
- [3] B.D. Cullity. X 線回折要論, p. 7. アグネ, 東京, 新版, 1980.