

Spis treści

Wstęp	13
CZĘŚĆ I. ŹRÓDŁA PROMIENIOWANIA SYNCHROTRONOWEGO	19
ROZDZIAŁ 1. Podstawy fizyczne i techniczne budowy źródeł promieniowania synchrotronowego (Edward A. Gölich, Robert Nietubyc)	21
1.1. Wstęp	22
1.2. Zjawisko promieniowania synchrotronowego	23
1.3. Budowa synchrotronowych źródeł promieniowania	33
1.3.1. Akceleratory elektronów	35
1.3.2. Optyka elektronowa pierścieni akumulujących	38
1.3.3. Czas życia wiązki	45
1.4. Promieniowanie z magnesu odchylającego	45
1.5. Urządzenia wstawkowe	53
1.5.1. Ruch elektronu w undulatorze płaskim	54
1.5.2. Składowa podstawowa i interferencja fal wypromieniowywanych w undulatorze	59
1.5.3. Polaryzacja promieniowania emitowanego w undulatorze płaskim	65
1.5.4. Rozkład widmowy promieniowania undulatora płaskiego	68
1.5.5. Undulator spiralny	73
1.5.6. Urządzenia wstawkowe – podsumowanie	76
1.6. Podsumowanie	81
Bibliografia	82
CZĘŚĆ II. SPEKTROSKOPIA	85
ROZDZIAŁ 2. Spektroskopia fotoemisyjna z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego (SR PES) (Elżbieta Guziewicz, Bronisław A. Orłowski)	87
2.1. Wstęp	87
2.2. Rys historyczny	88
2.3. Teoria zjawiska fotoemisji i kluczowe zagadnienia	89
2.4. Fotoemisja rezonansowa	95
2.5. Przykłady eksperymentu fotoemisji rezonansowej	98
2.6. Inne przykłady zastosowania zmiennej energii fotonów	111
2.7. Podsumowanie	115
Bibliografia	117
ROZDZIAŁ 3. Kątowo-rozdzielcza spektroskopia fotoemisyjna (ARPES) (Bogdan J. Kowalski)	119
3.1. Wstęp	119
3.2. Rys historyczny	120
3.3. Podstawowe informacje o technice eksperymentu ARPES	123

3.4. Badanie struktury pasmowej metodą ARPES	131
3.4.1. Przykład 1: struktura pasmowa powierzchni GaN(0001)-(1x1)	135
3.4.2. Przykład 2: topologiczny izolator krystaliczny (Pb,Sn)Se	140
3.5. Podsumowanie	145
Bibliografia	148
ROZDZIAŁ 4. Wysokorozdzielcza spektroskopia rentgenowska w badaniach układów chemicznych (Anna Wach, Jakub Szlachetko)	151
4.1. Wprowadzenie	151
4.2. Rezonansowa rentgenowska spektroskopia emisyjna (z ang. <i>Resonant X-ray Emission Spectroscopy</i>)	152
4.2.1. Podstawy fizyczne	152
4.2.2. Metodyka	154
4.3. Zastosowanie rezonansowej rentgenowskiej spektroskopii emisyjnej do badania układów chemicznych	158
4.3.1. Struktura elektronowa tlenków metali przejściowych	158
4.3.2. Pomiary czasowo-rozdzielcze do badania procesów chemicznych	164
4.4. Podsumowanie	169
Bibliografia	169
ROZDZIAŁ 5. Spektroskopia Absorpcyjna Promieniowania Rentgenowskiego	171
5.1. Wstęp (<i>Krystyna Ławniczak-Jabłońska</i>)	172
5.2. Rys historyczny (<i>Krystyna Ławniczak-Jabłońska</i>)	173
5.3. Kluczowe zagadnienia spektroskopii absorpcyjnej (<i>Marcin Klepka</i>)	175
5.4. Szkic opisu teoretycznego zjawiska absorpcji promieniowania rentgenowskiego	183
5.4.1. Wprowadzenie (<i>Krystyna Ławniczak-Jabłońska</i>)	183
5.4.2. Struktura subtelna w widmach absorpcji rentgenowskiej (XAFS) (<i>Iraida N. Demchenko</i>)	184
5.5. Struktura bliska krawędzi absorpcji – XANES (<i>Anna Wolska</i>)	192
5.5.1. Metody analizy widm XANES bazujące na eksperymencie (<i>Anna Wolska</i>)	192
5.5.1.1. Analiza podstawowych składowych oraz dopasowanie liniowej kombinacji składowych (<i>Marcin Klepka</i>)	194
5.5.2. Metody analizy widm XANES bazujące na teorii	195
5.5.2.1. Gęstości stanów obliczane z pierwszych zasad (<i>Anna Wolska</i>)	196
5.5.2.2. Rozpraszanie wielokrotne w przestrzeni rzeczywistej (<i>Anna Wolska</i>)	197
5.5.2.3. Struktury anizotropowe (<i>Iraida N. Demchenko</i>)	201
5.5.2.4. XANES związków międzymetalicznych (<i>Paweł Zajdel, Andrzej Kisiel</i>)	203
5.6. Rozciągnięta subtelna struktura progu absorpcji – EXAFS	206
5.6.1. Wprowadzenie (<i>Krystyna Ławniczak-Jabłońska</i>)	206
5.6.2. Ogólne przedstawienie pakietu DEMETER do analizy EXAFS (<i>Iraida N. Demchenko</i>) ..	208
5.6.3. Pakiet Demeter – przykłady zastosowania (<i>Anna Wolska</i>)	217
5.6.4. Pakiet EXCURVE – przykłady zastosowania (<i>Monika Walczak</i>)	222
Bibliografia	228
ROZDZIAŁ 6. Magnetometria selektywna pod względem pierwiastków składowych – XMCD i XLMD (Iwona A. Kowalik-Arvaniti)	235
6.1. Wstęp	235
6.2. Zarys historyczny rozwoju techniki XMCD	236
6.3. Kluczowe zagadnienia techniki	240
6.4. Spektroskopia absorpcyjna z kontrastem magnetycznym – krótki opis teoretyczny	240
6.4.1. Głębokość próbkowania oraz teoretyczne modelowanie widm XMCD i XLMD w trybie TEY	240
6.4.2. Efekt saturacji w trybie TEY	242
6.4.3. Teoretyczne podstawy spektroskopii XMCD i XLMD	243
6.4.4. Obliczenia ab initio widm eksperymentalnych	248

6.5. Spektroskopia absorpcyjna z kontrastem magnetycznym – opis eksperymentu z przy- kładami	249
6.5.1. Źródła promieniowania rentgenowskiego i polaryzacja światła	250
6.5.2. Plan linii pomiarowej	254
6.5.3. Reguły sum i interpretacja wyników	256
6.5.4. Dichroizm z użyciem liniowo spolaryzowanego światła	265
6.5.5. Rozciężnione półprzewodniki magnetyczne	268
6.6. PEEM jako narzędzie do badań XMCD i XLMD z rozdzielczością przestrzenną	275
6.7. Podsumowanie	281
Bibliografia	283

ROZDZIAŁ 7. Zastosowanie promieniowania synchrotronowego z zakresu UV i widzialnego do badania właściwości biomateriałów (Krzysztof Polewski)	285
7.1. Wstęp	285
7.2. Oddziaływanie promieniowania synchrotronowego z zakresu UV i widzialnego z materią ...	287
7.2.1. Mechanizm zjawiska absorpcji i emisji światła. Schemat Jabłońskiego	289
7.2.2. Opis ilościowy zjawiska absorpcji	291
7.2.3. Zasada pomiaru absorpcji próbki	294
7.3. Pomiary spektroskopowe	295
7.3.1. Pomiary absorpcji w zakresie UV i próżniowego UV	296
7.4. Światło spolaryzowane	297
7.4.1. Widma dichroizmu kołowego (CD)	299
7.4.2. Układ pomiarowy do obserwacji widm CD	301
7.5. Zjawisko fluorescencji	303
7.5.1. Opis zjawiska	303
7.5.2. Pomiary fluorescencji	305
7.5.3. Czasy życia fluorescencji	307
7.5.4. Metoda pomiaru	310
7.6. Mikrospektrofotometria	311
7.7. Podsumowanie	315
Bibliografia	317

CZĘŚĆ III. DYFRAKcja	319
-----------------------------------	------------

ROZDZIAŁ 8. Synchrotronowa rentgenografia polikrystaliczna (Paweł Piszora, Jolanta Daru)	321
8.1. Wstęp	321
8.2. Rys historyczny	323
8.3. Kluczowe zalety promieniowania synchrotronowego w badaniach materiałów prosz- kowych	325
8.4. Przykłady dyfrakcyjnych badań materiałów polikrystalicznych z wykorzystaniem pro- mieniowania synchrotronowego	326
8.4.1. Badania strukturalne w warunkach ekstremalnych	327
8.4.2. Mapowanie struktury i mikrostruktury w skali submikronowej	328
8.4.3. Defekty i odkształcenia sieciowe	331
8.4.4. Mikro- i nanokrystalografia	332
8.4.5. Czasowo-rozdzielcze badania strukturalne	333
8.4.6. Wysokorozdzielcze pomiary materiałów proszkowych	334
8.4.7. Dyfrakcja in situ i operando na materiałach polikrystalicznych	339
8.4.8. Dyfraktometria proszkowa sprzężona z innymi technikami	345
8.5. Podsumowanie	349
Bibliografia	351

ROZDZIAŁ 9. Wysokorozdzielcza dyfraktometria i reflektometria rentgenowska na przykładzie azotku galu (Ewa Grzanka, Mikołaj Grabowski, Michał Leszczyński, Marcin Kryśko, Jarosław Domagała, L. Kirste)	357
--	------------

9.1. Wstęp – dlaczego azotek galu?	358
9.2. Dyfrakcja rentgenowska – podstawy	360
9.2.1. Rozwój teorii dynamicznej	361
9.3. Reflektometria – podstawy	363
9.3.1. Współczynnik załamania materiałów dla promieni rentgenowskich	364
9.3.2. Teoria dynamiczna reflektometrii dla warstw gładkich	365
9.3.3. Warunki brzegowe dla polaryzacji σ	367
9.3.4. Warunki brzegowe dla polaryzacji π	369
9.3.5. Uwzględnienie szorstkości międzypowierzchni	370
9.4. Dyfraktometr wysokorozdzielczy	373
9.4.1. Budowa dyfraktometru	373
9.4.2. Część formująca wiązkę rentgenowską	373
9.4.3. Uchwyt próbki – stolik	376
9.4.4. Analizator	376
9.4.5. Liczniki	377
9.4.6. Mody pracy dyfraktometru	378
9.5. Sposób pomiarów z wykorzystaniem dyfrakcji wysokorozdzielczej	379
9.5.1. Sposób zbierania krzywych dyfrakcyjnych i map węzłów sieci odwrotnej	379
9.5.2. Sposób pomiaru promienia krzywizny próbki (R) oraz geometrii cięcia powierzchni podłoża, czy asymetrii płaszczyzn wzrostu warstwy względem jej powierzchni	383
9.5.3. Zalecane konfiguracje w pomiarach dyfrakcji wysokorozdzielczej	385
9.6. Interpretacja wyników doświadczalnych	386
9.6.1. Krzywa odbić (RC)	386
9.6.2. Precyzyjny pomiar parametrów sieciowych	390
9.7. Przykłady innych badań	395
Dodatek	398
A.9.1. Elementy teorii dynamicznej	398
A.9.2. Przypadek dwóch fal	401
A.9.3. Równanie dyspersji	402
A.9.4. Warunki brzegowe	403
A.9.5. Krzywa dyspersji	404
A.9.6. Rozwiązanie równania dyspersji z warunkiem brzegowym	406
A.9.7. Wartości amplitud D0 i Dh wewnątrz i na zewnątrz kryształu	407
Bibliografia	409
ROZDZIAŁ 10. Rentgenowskie metody dyfrakcyjne badań strukturalnych materiałów mono- i polikrystalicznych w warunkach wysokiego ciśnienia (Wojciech Paszkowicz, Damian Paliwoda)	413
10.1. Wstęp	413
10.2. Rys historyczny	416
10.3. Metody badań wysokociśnieniowych	416
10.4. Warunki hydrostatyczne w badaniach wysokociśnieniowych	417
10.5. Rola promieniowania synchrotronowego w dyfrakcyjnych badaniach wysokociśnieniowych. Stacje pomiarowe	418
10.6. Komory ciśnieniowe jako podstawowe narzędzie badawcze. Rodzaje komór	421
10.6.1. Konstrukcja komór ciśnieniowych z kowadłami diamentowymi	421
10.6.2. Konstrukcja komór typu LAC	426
10.7. Badania materiałów polikrystalicznych	430
10.8. Badania monokryształów	433
10.8.1. Podstawy metodyki pomiarowej	433
10.8.2. Komora DAC w badaniach monokryształów	435
10.8.3. Analiza obrazu dyfrakcyjnego	436
10.9. Podsumowanie	437
Dodatek 1	438

Dodatek 2	439
Dodatek 3	440
Bibliografia	441
ROZDZIAŁ 11. Metoda radialnej funkcji dystrybucyjnej uzyskiwanej z pomiarów dyfrakcyjnych <i>(Zbigniew A. Kaszukur)</i>	451
11.1. Wstęp	451
11.2. Rys historyczny	452
11.3. Założenia modelowe i podstawy rentgenowskiej metody RDF	454
11.3.1. Normowanie mierzonego natężenia do czynników atomowych	461
11.3.2. Błędy i metody korekcji funkcji RDF i normowania	464
11.4. Ograniczenia teoretyczne metody RDF	466
11.4.1. Wpływ na RDF zastosowania czynników uzbiegniających	466
11.4.2. Inne metody korekcji obliczanej radialnej funkcji dystrybucyjnej	467
11.5. Procedura obliczeniowa dla materiałów budowanych przez atomy wielu rodzajów	468
11.6. Metody analizy radialnej funkcji dystrybucyjnej	469
11.7. Przykładowe zastosowania	471
11.8. Podsumowanie	475
Bibliografia	476
ROZDZIAŁ 12. Fotokrystalografia monokryształów małych cząsteczek i makromolekuł w kontekście badań synchrotronowych <i>(Katarzyna N. Jarzemska, Radosław Kamiński)</i>	481
12.1. Wprowadzenie i komentarz historyczny	481
12.2. Czynniki struktury i mapy Fouriera	486
12.3. Wyposażenie linii synchrotronowych dedykowanych badaniom fotokrystalograficznym ...	490
12.3.1. Metoda monochromatyczna	491
12.3.2. Metoda Lauego	493
12.3.3. Lasery na swobodnych elektronach	498
12.4. Obróbka danych	498
12.4.1. Dane dla makromolekuł	499
12.4.2. Dane polichromatyczne dla małych cząsteczek	501
12.4.3. Metoda stosunków intensywności	505
12.5. Ilościowy opis modelu struktury	506
12.6. Wybrane wyniki badań fotokrystalograficznych	508
12.6.1. Badania układów przełączalnych metodą statyczną	508
12.6.2. Fotokrystalografia makromolekuł	510
12.6.3. Metody monochromatyczne dla kryształów małych cząsteczek	513
12.6.4. Metoda Lauego dla małych cząsteczek	519
12.7. Podsumowanie	523
Bibliografia	524
ROZDZIAŁ 13. Zastosowanie promieniowania synchrotronowego w krystalografii białek <i>(Zbigniew Dauter, Mariusz Jaskólski)</i>	533
13.1. Wstęp	534
13.2. Rys historyczny	534
13.3. Główne problemy na drodze do struktury kryształu	537
13.4. Etapy rozwiązywania struktury kryształu w aspekcie pomiarów synchrotronowych	540
13.4.1. Otrzymywanie i własności kryształów białek	540
13.4.2. Techniki kriogeniczne w krystalografii białek	541
13.4.3. Pomiar danych dyfrakcyjnych	543
13.4.4. Problem fazowy w przypadku nowych struktur	545
13.4.5. Udokładnianie atomowych modeli struktur krystalicznych makromolekuł	547
13.4.6. Rola synchrotronów w genomice strukturalnej	550
13.4.7. Synchrotronowa krystalografia Lauego	550
13.4.8. Uszkodzenia radiacyjne kryształów białek	551

13.5. Mapy gęstości elektronowej i ich interpretacja	551
13.6. Ocena jakości struktur krystalicznych makromolekuł	555
13.6.1. Rozdzielczość danych dyfrakcyjnych	555
13.6.2. Jakość eksperymentalnych danych dyfrakcyjnych	557
13.6.3. Wskaźniki rozbieżności R i R_{free}	558
13.6.4. Odstępstwo od wzorców stereochemicznych	559
13.6.5. Atomy wodoru w modelach makromolekuł	559
13.7. Postęp krystalografii makromolekuł na przestrzeni ostatnich lat	560
13.8. Perspektywy zastosowań promieniowania synchrotronowego w krystalografii białek ..	563
13.8.1. Źródła synchrotronowe nowej generacji	563
13.8.2. Lasery rentgenowskie na swobodnych elektronach (XFEL)	564
13.8.3. Synchrotronowa krystalografia szeregową (SSX)	565
13.8.4. Rewolucja trwa	566
Bibliografia	568
ROZDZIAŁ 14. Promieniowanie synchrotronowe w zastosowaniach biomedycznych (Jerzy B. Pełka)	573
14.1. Wstęp	573
14.2. Oddziaływanie PS z obiektami biologicznymi	579
14.2.1. Charakterystyka i zastosowania poszczególnych zakresów promieniowania synchrotronowego	582
14.2.1.1. Zakres twardego promieniowania rentgenowskiego (HX, 0,25–0,00248 nm, 5–500 keV)	583
14.2.1.2. Zakres miękkiego promieniowania rentgenowskiego (SX, 0,83–24,8 nm, 50–1500 eV)	589
14.2.1.3. Zakresy skrajnego nadfioletu (EUV) i nadfioletu próżniowego (VUV) ...	590
14.2.1.4. Zakres optyczny	591
14.2.1.4.A. Zakres nadfioletu (UV, 180–400 nm; 6,5–3,1 eV)	592
14.2.1.4.B. Zakres widzialny (VIS, 380–780 nm)	593
14.2.1.4.C. Zakres bliskiej i dalekiej podczerwieni (780 nm–6 μm i 6–15 μm)	594
14.2.1.5. Zakres promieniowania terahercowego ($\lambda = 10\text{--}1000 \mu\text{m}$; $\nu = 0,3\text{--}3\text{ THz}$)	596
14.3. Uszkodzenia radiacyjne	599
14.3.1. Uszkodzenia radiacyjne biomolekuł	603
14.3.2. Uszkodzenia radiacyjne krystalicznych próbek biologicznych	604
14.3.3. Uszkodzenia radiacyjne DNA	605
14.3.4. Gatunkowe i tkankowe aspekty uszkodzeń radiacyjnych	606
14.3.5. Sposoby zmniejszania uszkodzeń radiacyjnych	608
14.4. Lasery na swobodnych elektronach i ich zastosowanie w biologii i medycynie	610
14.4.1. Zastosowania FEL do ablacji tkanek	612
14.4.2. Metody bioobrazowania i dyfrakcji z użyciem X-FEL	615
14.4.3. Metody spektroskopowe z wykorzystaniem krótkofalowych laserów FEL	618
14.4.4. Wykrywanie i identyfikacja wirusów z wykorzystaniem promieniowania niejonizującego	622
14.5. Podsumowanie	627
Dodatek. Słowniczek nazw i akronimów	629
Bibliografia i odnośniki	631
CZĘŚĆ IV. PODSTAWY FIZYCZNE	645
ROZDZIAŁ 15. Promieniowanie synchrotronowe w spektroskopii optycznej związków półprzewodnikowych II–VI (Andrzej Kisiel)	647
15.1. Wstęp	647
15.2. Związki pomiędzy stałymi optycznymi	648
15.3. Oddziaływanie światła z ośrodkiem krystalicznym	652

15.4. Przejścia optyczne z atomowych stanów rdzeniowych do pasma przewodnictwa	659
15.5. Fundamentalne odbicie światła i struktura pasmowa wybranych związków półprzewodnikowych grupy II–VI	660
15.5.1. Fundamentalne odbicie światła dla ZnTe, CdTe oraz HgTe	661
15.5.2. Fundamentalne odbicie światła ZnSe	666
15.5.3. Fundamentalne odbicie światła roztworów stałych $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$	668
15.5.4. Fundamentalne odbicie światła stopów związków grupy II–VI z metalami przejściowymi (związki DMS)	670
15.6. Fundamentalne odbicie światła półprzewodników amorficznych	676
15.7. Absorpcja światła w ośrodku krystalicznym	678
15.8. Podsumowanie	681
Bibliografia	683
ROZDZIAŁ 16. Dyfrakcja rentgenowska – wprowadzenie (<i>Elżbieta Dynowska</i>)	687
16.1. Wstęp	687
16.2. Promieniowanie rentgenowskie i jego oddziaływanie z materią	688
16.2.1. Fale i fotony	688
16.2.2. Rozpraszanie	689
16.3. Dyfrakcja	690
16.3.1. Kierunki wiązek ugiętych	690
16.3.2. Natężenia wiązek ugiętych	693
16.4. Sieć odwrotna	697
16.5. Prawo Bragga	699
16.6. Promieniowanie synchrotronowe w badaniach dyfrakcyjnych	701
Bibliografia	702