5 Wechselwirkung der Strahlung mit der Materie
5.1 Wechselwirkung zwischen Materie und Neutronen

Neutronen sind Kernbausteine mit Masse, ohne Ladung, aber mit einem magnetischen Moment, dem „Spin $1/2$ “. Diese Eigenschaften machen das Neutron zu einem besonders vielseitigen „Detektor“ zur Materialforschung. Als Kernbaustein reagiert es mit den Atomkernen, indem es beim Auftreffen auf einen Kern kurzzeitig eingebaut wird, es entsteht ein „Compoundkern“. Danach wird es wieder emittiert, eventuell mit einer Phasenverschiebung. Wenn die Bausteine der Materie ein magnetisches Moment zeigen, dann gibt es zwischen ihnen und dem magnetischen Moment des Neutrons noch zusätzlich eine elektromagnetische Wechselwirkung. Der Streuquerschnitt eines Kerns wird durch das Verhältnis der Anzahl der pro Zeit vom Kern ausgehenden Neutronen zum Neutronenfluss auf den Kern definiert.

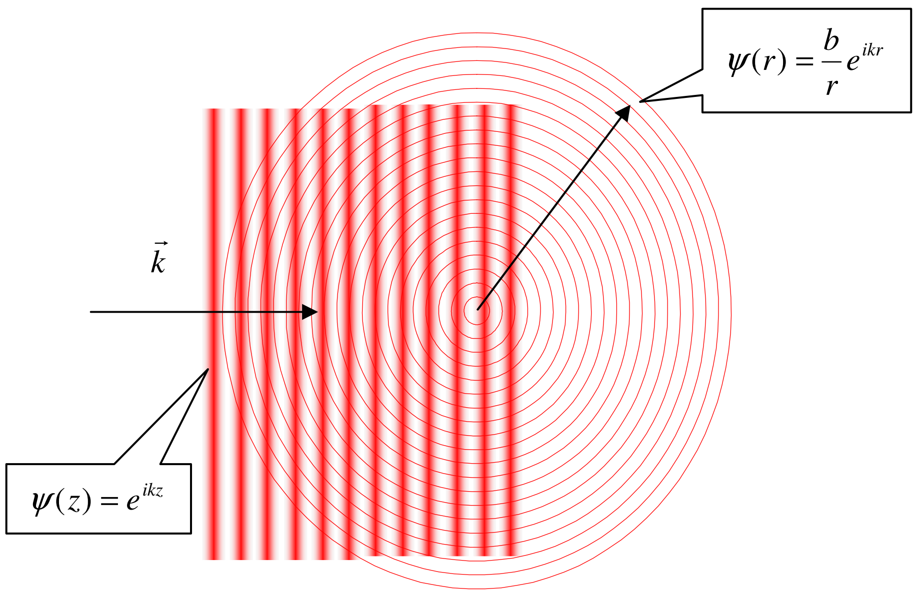


Abbildung 1 Amplitude einer durch Streuung am Kern entstehenden Kugelwelle und der erzeugenden ebene Welle (Materiewellen)

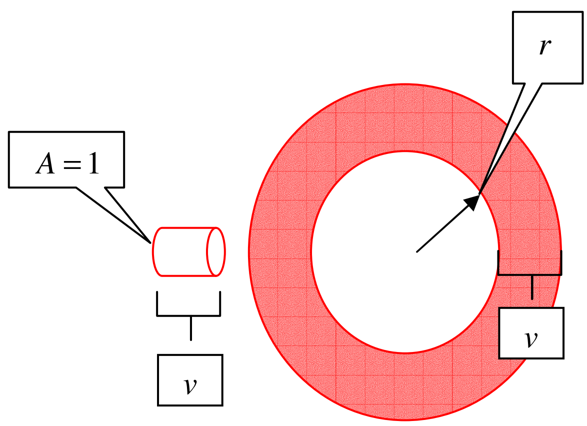


Abbildung 2 Volumina zur Bestimmung des einfallenden Flusses (Querschnitt A=1) und die Kugelschale zur Abzählung der gestreuten Neutronen

	Einheit	
$k = \frac{2\pi}{\lambda}$	1/m	Wellenzahl
$\psi(r) = e^{ikz}$		Amplitude der einfallenden Welle am Ort z
$\psi(r) = \frac{b}{r} e^{ikr}$		Amplitude der am Kern gestreuten Welle im Abstand *r* vom Kern
b	cm	Streulänge
$N_{Streu} = 4\pi r^2 v \cdot \left\| b/r \cdot e^{ikr} \right\|^2 = \frac{4\pi r^2 b^2 v}{r^2}$	$\frac{1}{s}$	Anzahl der in einer Sek. durch eine Kugelfläche im Abstand r vom Streuzentrum tretenden, gestreuten Neutronen: Volumen der Kugelschale mit Stärkre des in 1s zurückgelegten Wegs ($v \cdot 1\mathrm{s}$) mal der Intensität bei r
$\phi_{Ein} = v \cdot \left\| e^{ikz} \right\|^2$	$\frac{1}{\mathrm{cm}^2\mathrm{s}}$	Der Fluss der einlaufenden Neutronen ist die Anzahl der Neutronen, die in 1 s durch eine Fläche mit Betrag 1 fliegen: Volumen des Zylinders mit Grundfläche 1 und Länge v mal Intensität
$\sigma = \frac{N_{Streu}}{\phi_{Ein}} = \frac{4\pi r^2 v}{v} \frac{\left\| b/r \cdot e^{ikr} \right\|^2}{\left\| e^{ikz} \right\|^2} = 4\pi b^2$	cm^2	Streuquerschnitt des Kerns: Anzahl der gestreuten Neutronen / Fluss der eintreffenden Neutronen

Tabelle 1 Definition des Sreuquerschnitts

$\sigma = S + s$		Der Streuquerschnitt ist eine Summe aus:
	S	Streuquerschnitt für kohärente Streuung
	s	Streuquerschnitt für inkohärente Streuung

Tabelle 2 Querschnitt für kohärente und inkohärente Streuung

Die Ursache für den inkohärenten Streuquerschnitt – auch bei Material aus einem einzigen Isotop – liegt in der Möglichkeit, dass das einfallende Neutron in einen Kern mit Drehimpuls I auf zwei unterschiedliche Weisen eingebaut werden kann: es addiert oder subtrahiert sich der Spin des Neutrons, somit entstehen zwei unterschiedliche Compoundkerne:

Spin des Compoundkerns	Streulänge	
$I + \frac{1}{2}$	b_+	Der Neutronenspin addiert sich zum Spin
$I - \frac{1}{2}$	b_-	Der Neutronenspin wird vom Spin des Compoundkerns subtrahiert
I	b	Spin des reinen Isotops

Tabelle 3 Zwei unterschiedliche Kerne entstehen, wenn der Kernspin ungleich null ist

Ein Kern mit Spin J kann in einem magnetischen Feld $2J+1$ mögliche Zustände annehmen. Die Kerne mit ihren unterschiedlichen Spins sind völlig regellos verteilt, diese Eigenschaft führt bei der Beugung zu einem Anteil an inkohärenter Streuung.

$2\cdot\left(I+\frac{1}{2}\right)+1=2I+2$	Anzahl der möglichen Orientierungen +
$2\cdot\left(I-\frac{1}{2}\right)+1=2I$	Anzahl der möglichen Orientierungen -
$w_+=\frac{I+1}{2I+1}$	Gewichtung zur Abzählung der unterschiedlichen Zustände, folgt aus den Bedingungen:
$w_-=\frac{I}{2I+1}$	
$w_+ + w_- = 1$	
$w_+/w_- = (2I+2)/2I = (I+1)/I$	

Tabelle 4 Abzählung der unterschiedlichen Zustände

Zur inkohärenten Streuung gibt es noch einen weiteren Beitrag, der durch die zufällige Verteilung der Isotope in chemisch homogenem Material verursacht wird.

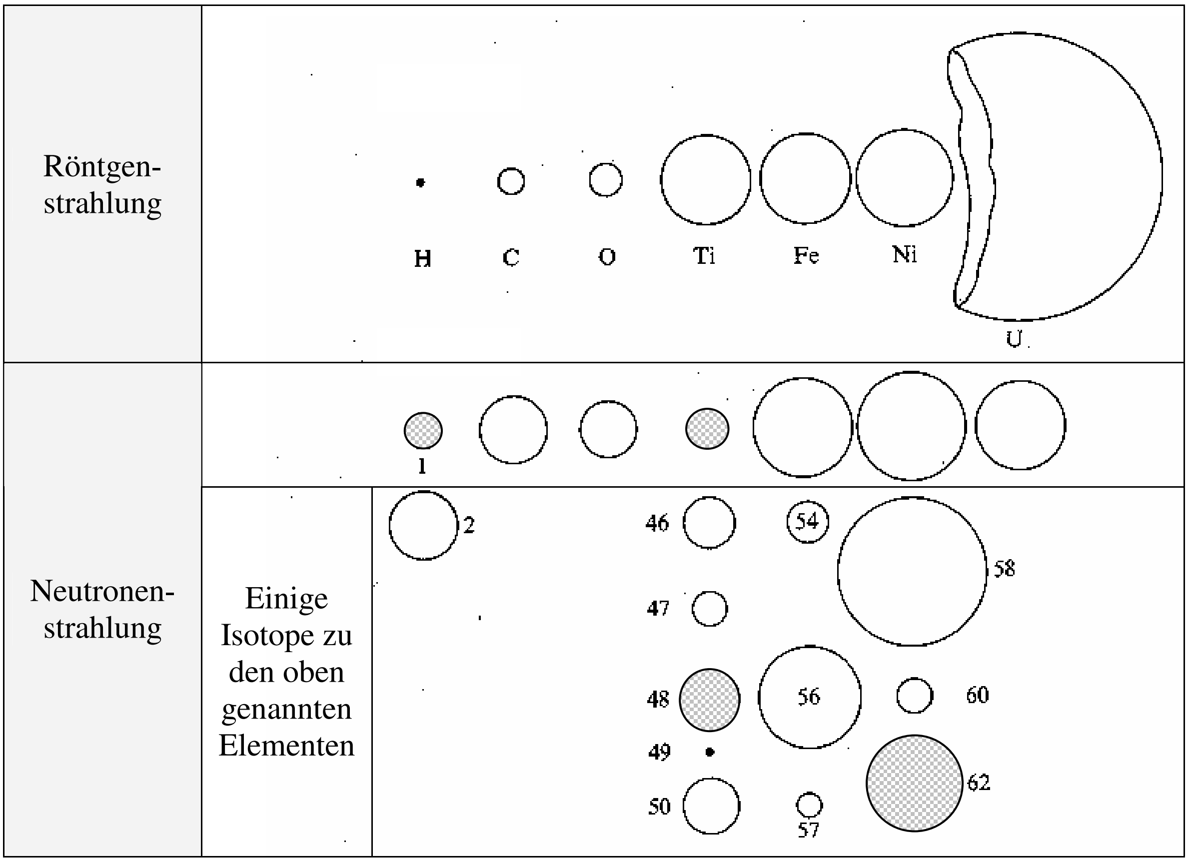


Tabelle 5 Vergleich der Streukraft einiger Elemente und ihrer Isotope bei Röntgen- und Neutronenstrahlen, die Zahlen zeigen die Massenzahl der Kerne (Quelle: E. C. Bacon, „Neutron Diffraction", Clarendon Press, 1975)

Abbildung 3 Vergleich der Streukraft einiger Elemente bei Röntgen- und Neutronenstrahlen

Isotop	Kohärente Streuamplitude [cm]	Häufigkeit	Mit der Häufigkeit gewichtete Streuamplitude
^{58}Ni	$1{\cdot}44 \times 10^{-12}$	0·679	$0{\cdot}978 \times 10^{-12}$
^{60}Ni	0·30	0·262	0·079
^{61}Ni	0·76	0·012	0·009
^{62}Ni	−0·87	0·037	−0·032
^{64}Ni	−0·037	0·011	—
Mittlere Streuamplitude von Nickel			1,034

Abbildung 4 Streuamplituden für unterschiedliche Isotope in Nickel

5.2 Wechselwirkung zwischen Materie und Röntgenstrahlung

Die Wechselwirkung zwischen Röntgenstrahlen und den Elektronen der Materie ist rein elektromagnetisch: der elementare Prozess ist die Streuung einer elektromagnetischen Welle an einem einzelnen Elektron.

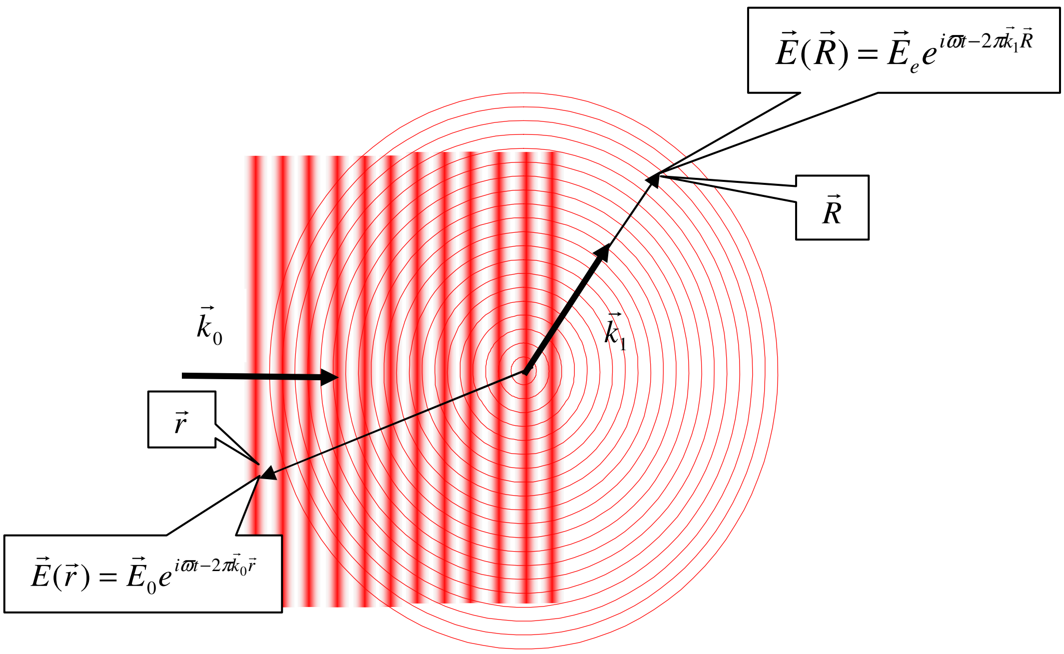


Abbildung 5 Amplitude der elektrischen Feldstärke einer durch Streuung am Elektron entstehenden Kugelwelle und die erzeugende ebene Welle

In der Materie sind die Elektronen meistens an Atome gebunden, das Elektron reagiert auf eine Anregung durch eine Welle mit einer erzwungenen Schwingung eines Oszillators. Nimmt man aber an, dass die Eigenfrequenz der Elektronen klein ist im Vergleich zur Frequenz der Röntgenstrahlung, dann folgt die Bewegung des Elektrons dem elektrischen

Feld mit fester Phasenbeziehung und mit konstanter Amplitude. Werden Antriebsfrequenz und Eigenfrequenz vergleichbar, dann verschiebt sich die Phase zwischen Antrieb und Auslenkung und die Amplitude wächst an bei Annäherung an die Eigenfrequenz, es gibt Resonanz.
Außerhalb der Resonanzstelle ist zur Berechnung der gestreuten Intensität das Bild des freien Elektrons gerechtfertigt.

Die Streukraft eines Elektrons wird als das Verhältnis der vom Elektron abgestrahlten Energie zum Energiefluss auf das Elektron definiert.

Die einlaufende elektromagnetische Welle wird als ebene Welle formuliert, man denke an die Dipolstrahlung im Fernfeld. (Näheres zum elektrischen Schwingkreis und zum schwingenden Dipol http://www.uni-tuebingen.de/uni/pki/skripten/V6_6Wellen.DOC)

	Einheit	
$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_0 \cdot e^{i\varpi t - 2\pi \vec{k}_0 \vec{r}}$	N/C	Feldstärke der anregenden ebenen Welle
$\vec{E}_0$	N/C	Max. Amplitude der Feldstärke
ϖ	s^{-1}	Kreisfrequenz
$\vec{k}_0$	m^{-1}	Wellenvektor

Tabelle 6 Elektrische Feldstärke einer ebenen Welle

Die mit dem elektrischen Feld verknüpfte magnetische Feldstärke steht senkrecht zur elektrischen und zur Ausbreitungsrichtung. Beide Felder tragen die gleiche Energie zur Welle bei.

$\varepsilon_0 = 8{,}85 \cdot 10^{-12}$	$\frac{C^2}{Jm}$	Influenzkonstante zur Umrechnung auf Einheiten der Mechanik
$w_{el} = \frac{\varepsilon_0}{(4\pi)^2}\overline{E^2} = \frac{\varepsilon_0}{(4\pi)^2}\frac{1}{2}E_0{}^2$	$\frac{J}{m^3}$	Energiedichte des elektrischen Feldes, $\overline{\left(\sin(\varpi t - 2\pi \vec{k}\vec{r})\right)^2} = 1/2$
$w_0 = \frac{\varepsilon_0 E_0^2}{(4\pi)^2}$	$\frac{J}{m^3}$	Energiedichte des gesamten Felds, Summe der Dichten des elektrischen und (des gleichgroßen) magnetischen Felds
$I_0 = c \cdot w_0 = \frac{c\varepsilon_0 E_0^2}{(4\pi)^2}$	$\frac{J}{sm^2}$	Intensität, Energiefluss: In einer Sekunde durch eine zur Ausbreitungsrichtung senkrecht stehende Fläche von $1m^2$ transportierte Energie

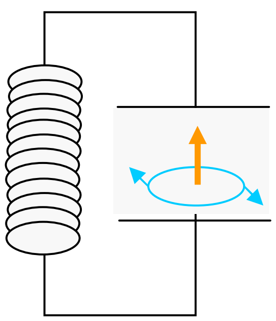
Tabelle 7 Energie in den Feldern einer ebenen elektromagnetischen Welle

Gibt es am Ort eines Elektrons ein elektrisches Feld, dann wirkt auf das Elektron eine Kraft. Weil Elektronen eine Masse haben gibt es auch eine Trägheitskraft, die bei freier Beweglichkeit die Beschleunigung definiert.

	Einheit	
$\vec{F}(t) = e \cdot E(t)$	N	Kraft auf das Elektron durch das Feld, es liege im Ursprung des Koordinatensystems, *e*=1.60 10^{-19} C, Elementarladung
$\vec{F}(t) = -m \cdot \ddot{\vec{x}}(t)$		Trägheitskraft, *m*=9,1 10^{-31} kg Masse des Elektrons
$\vec{x}(t)$	m	Auslenkung des Elektrons aus der Ruhelage, verursacht durch die Feldstärke
$e \cdot \vec{E}\ (t) = -m \cdot \ddot{\vec{x}}(t)$		Bewegungsgleichung für die Auslenkung
$\vec{x}(t) = \vec{x}_0 \cdot e^{i\varpi t}$	m	Amplitude der am Kern gestreuten Welle im Abstand *r* vom Kern
$\vec{x}_0 = \vec{E}_0 \dfrac{e}{m\varpi^2}$		Maximale Amplitude
$\vec{p} = -e \cdot \vec{x}_0$	Cm	Elektrisches Dipolmoment des max. ausgelenkten Elektrons

Tabelle 8 Bewegung eines Elektrons im elektrischen Feld

Das oszillierende Elektron wirkt als Sender: Es wird ein elektrisches und ein magnetisches Feld abgestrahlt, die Feldstärken sind die Lösungen der Wellengleichung, die sich aus den Maxwellschen Gleichungen ergeben.(vgl. Herleitung der Schwingungsgleichung für Wellen zwischen zwei Drähten http://www.uni-tuebingen.de/uni/pki/skripten/V6_6ATelegraph.DOC).



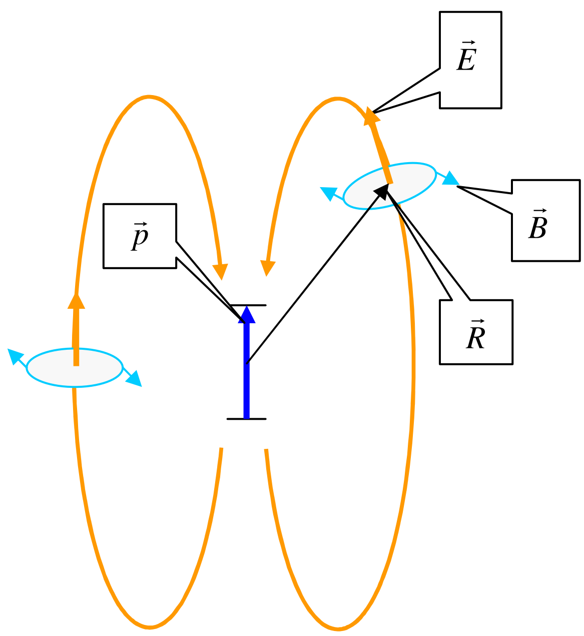


Abbildung 6 Übergang vom Schwingkreis zum Hertzschen Dipol. Orange: Zeitlich variierende elektrische Feldstärke, blau das dadurch induzierte Magnetfeld. Das schwingende Elektron steht für die im Dipol bewegte Ladung. Der dunkelblaue Vektor zeigt das max. Dipolmoment.

Die Lösung der Maxwellschen Gleichung zeigt, dass die von einem schwingenden Dipol ausgehende, an einem Ort $\vec{R}$ empfangene Energie vom Abstand R und vom Winkel φ zwischen $\vec{R}$ und der Richtung des Dipols abhängt. Man kann die vom Elektron ausgesandte Intensität I_e durch einfallende Intensität I_0 ausdrücken, weil das oszillierende Dipolmoment durch die das Elektron anregende einlaufende Welle erzeugt wird. So erhält man die „Thomsonsche Streuformel":

	Einheit	
$I_e = \frac{p^2 \varpi^4}{(4\pi)^2 \varepsilon_0 c^3} \cdot \frac{\sin^2 \varphi}{R^2}$	$\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{sm}^2}$	Vom oszillierenden Dipol abgestrahlte Intensität (Energiefluss), man erhält sie aus der Lösung der Maxwellschen Gleichungen.
$p = E_0 \frac{e}{m\varpi^2}{}^{2}$	Cm	Betrag des max. Dipolmoments, aus (Tabelle 8) eingesetzt:
$I_e = \frac{cE_0^2}{(4\pi)^2 \varepsilon_0} \cdot \left(\frac{e^2 \sin \varphi}{mc^2 R} \right)^2$	$\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{sm}^2}$	
$I_0 = \frac{c\varepsilon_0 E_0^2}{(4\pi)^2}$		Intensität der einlaufenden Welle, wird in I_e eingesetzt:
$I_e = I_0 \cdot \left(\frac{e^2 \sin \varphi}{\varepsilon_0 mc^2 R} \right)^2$		Thomsonsche Streuformel: Die von einem mit einer ebenen Welle (Intensität I_0) angeregten Elektron im Winkel φ zur Auslenkungsrichtung ausgestrahlte Intensität, gemessen im Abstand R

Tabelle 9 Thomsonsche Streuformel

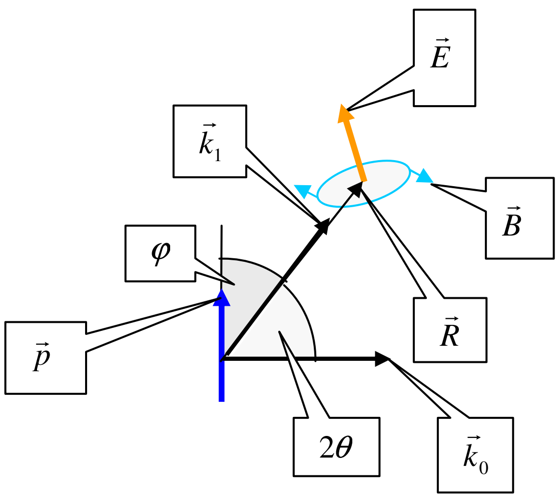


Abbildung 7 Streuwinkel 2θ zwischen den Wellenvektoren der ein- und ausfallenden Wellen

Weil im Bild des freien Elektrons der Dipol durch die einlaufende Welle erzeugt wird, wählt man zur Formulierung der Streuung anstelle von φ den Winkel 2θ .zwischen den Wellenvektoren der einlaufenden Welle und dem der vom Dipol zum Ort $\vec{R}$ ausgesandten Welle.

Oft ist die einfallende Strahlung unpolarisiert. Als Folge davon empfängt man am Ort $\vec{R}$ ein Gemisch von Strahlungen, die von unterschiedlich orientierten Dipolen ausgesandt werden. Die Dipole erscheinen um beliebige Winkel ψ verdreht, die Drehachse ist parallel zu $\vec{k}_0$.

Es interessiert die Auswirkung der Mittelung über alle Richtung auf die in $\vec{R}$ empfangene Intensität. Bei wechselnder Orientierung ändert sich der Winkel φ in Abhängigkeit von ψ, der Winkel 2θ bleibt unverändert. Um die Thomsonsche Streuformel auf unpolarisierte Strahlung zu erweitern, muss man den Mittelwert von $\sin\varphi$ bei Variation von $0 < \psi \leq 2\pi$ bestimmen. Weil $\sin\varphi$ als Betrag eines Vektorprodukts geschrieben werden kann, gelingt die Umrechnung mit wenig Aufwand, wenn alle Richtungen durch entsprechende Einheitsvektoren bezeichnet werden. Zur Berechnung der Vektorprodukte wird ein orthonormiertes Koordinatensystem eingeführt.

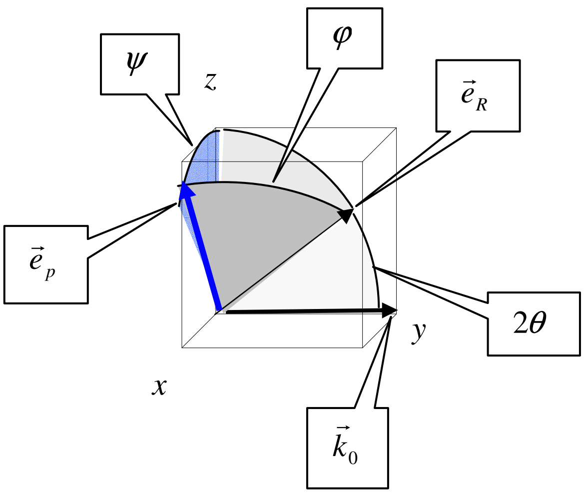


Abbildung 8 Orthonormiertes Koordinatensystem. Die Vektoren $\vec{k}_0$ und $\vec{e}_R$ definieren die Lage des Koordinatensystems: $\vec{k}_0$ liegt entlang der y-Achse, $\vec{e}_R$ (Richtung von $\vec{k}_1$) liegt in der von der y- und z Achse aufgespannten Ebene

$\vec{e}_R = \begin{pmatrix} 0 \\ \cos 2\theta \\ \sin 2\theta \end{pmatrix}$	Einheitsvektor in Richtung des Beobachtungspunkts in $\vec{R}$, Richtung von $\vec{k}_1$
$\vec{e}_P = \begin{pmatrix} \cos\psi \\ 0 \\ \sin\psi \end{pmatrix}$	Einheitsvektor in Richtung des Dipolmoments $\vec{p}$
$\lvert\vec{e}_R \times \vec{e}_P\rvert = \sin\varphi$	Definition des Vektorprodukts aus Vektoren vom Betrag 1
$\vec{e}_R \times \vec{e}_P = \begin{vmatrix} 1 & \overline{1} & 1 \\ 0 & \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \cos\psi & 0 & \sin\psi \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} \cos 2\theta \sin\psi \\ \sin 2\theta \cos\psi \\ -\cos 2\theta \cos\psi \end{pmatrix}$	Vektorprodukt im orthonormierten Koordinatensystem, wird über die Unterdeterminanten berechnet
$\lvert\vec{e}_R \times \vec{e}_P\rvert^2 = \cos^2 2\theta \sin^2\psi + \sin^2 2\theta \cos^2\psi + \cos^2 2\theta \cos^2\psi$	
$\lvert\vec{e}_R \times \vec{e}_P\rvert^2 = \frac{1}{2}\cos^2 2\theta + \frac{1}{2}\sin^2 2\theta + \frac{1}{2}\cos^2 2\theta$	Mittelung über $0 < \psi \leq 2\pi$, $\overline{\cos^2\psi} = \overline{\sin^2\psi} = \frac{1}{2}$
$\lvert\vec{e}_R \times \vec{e}_P\rvert^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \cos^2 2\theta\right)$	
$\sin^2\varphi = \frac{1}{2}\left(1 + \cos^2 2\theta\right)$	
$I_e = I_0 \cdot \left(\frac{e^2}{\varepsilon_0 m c^2 R}\right)^2 \frac{\left(1 + \cos^2 2\theta\right)}{2}$	Thomsonsche Streuformel für die von einem Elektron ausgesandte Intensität, bei Anregung des Elektrons mit unpolarisierter Strahlung

Tabelle 10 Berechnung des Polarisationsfaktors: Thomsonschen Streuformel für die Anregung eines Elektrons mit unpolarisiertem Licht