

Sugárzás és anyag
köölcsönhatásán alapuló
módszerek

Sugárzások

- Alfa
- Béta
- Gamma
- Röntgen
- Neutron
- Részecske

Kilépő részecske	Besugárzó részecske			
	foton	elektron	ion	neutron
Transzmisszió reflexió vagy abszorpció	Spektroszkópia, a sugárzás energiájától függően: NMR, ESR, IR, NIR, látható, UV-spektroszkópia Mössbauer – spektroszkópia	TEM		Neutron abszorpció (beleértve a magreakciókat, NAA, PGAA)
Szórás	Dinamikus fényszórás Röntgendiffrakció (XRD)	EELS LEED RHEED β -sugárzás visszaszórása	RIBS ISS	Neutronszórás Kisszögű neutronszórás Nem-elasztikus neutronszórás

Kilépő részecske	Besugárzó részecske			
	foton	elektron	ion	neutron
Foton-emisszió	XANES vagy NEXAFS EXAFS Röntgenfluoreszcencia (XRF)	EMP	IMXA IEX PIXE CPIN RA CPAA	NAA PGAA
Elektron-emisszió	AES XPS (ESCA) UPS	AES SAM SEM	INS	
Ionemisszió	LAMMA	EIID	SIMS IMMA CPIN RA	Magreakciók (e.g. (n,p), (n, α))

- AES: Auger-elektronspektroszkópia (Auger electron spectroscopy)
- CPINRA, CPAA: magreakciók töltött részecskékkel (charged particle activation analysis)
- EIID: iondeszorpció elektronbombázás hatására (electron induced ion desorption)
- ELS: karakterisztikus energiavesztéses elektron spektroszkópia (electron-energy-loss spectroscopy)
- EMP: elektron mikroszonda (electron microprobe)
- ESCA: elektronspektroszkópia kémiai elemzéshez (electron spectroscopy for chemical analysis)
- ESR: elektronspin rezonancia (electron spin resonance)
- EXAFS: kiterjesztett röntgenabszorpciós finomszerkezet (extended X-ray absorption fine structure)
- IEX: iongerjesztéses röntgenfluoreszcencia spektroszkópia (ion excited X-ray fluorescence spectroscopy)
- IMMA: ionmikroszonda tömegspektroszkópiával (ion micro-probe mass analyzer)
- IMXA: ionmikroszonda röntgen-spektroszkópiával (ion microprobe X-ray analysis)
- INS: ionokkal kiváltott elektronspektroszkópia (ion neutralization spectroscopy)
- IR: infravörös spektroszkópia (infrared spectroscopy)

- ISS: visszaszórt ionok spektrometriája ((ion scattering spectrometry)
- LEED: alacsony energiájú elektrondiffrakció (low energy electron diffraction)
- LEED: alacsony energiájú elektrondiffrakció (low energy electron diffraction)
- LAMMA: lézergyjtésű mikroszonda (laser micro-spectral analysis)
- n: neutron
- NAA: neutron aktivációs analízis (neutron activation analysis)
- NEXAFS (lásd EXAFS) near edge X-ray absorption fine structure
- NIR: közeli infravörös spektroszkópia (near-infrared spectroscopy)
- NMR: magmágneses rezonancia (nuclear magnetic resonance)
- p: proton
- PGAA: prompr gamma aktivációs analízis (prompt gamma activation analysis)
- PIXE: részecskebombázással kiváltott röntgenfotonok spektroszkópiája (particle induced X-ray emission)
- RHEED: nagy energiájú elektrondiffrakció (reflection high energy electron diffraction)

- RIBS: Rutherford-szórás (Rutherford backscattering spectroscopy)
- SAM: Auger-mikroszonda (scanning Auger microanalysis)
- SANS: kisszögű neutronszórás (small-angle neutron scattering)
- SEM: pásztázó elektronmikroszkóp (spektroszkópiával) (scanning electron microscopy)
- SIMS: Szekunder ion tömegspektroszkópia (secunder ion mass spectroscopy)
- UPS: fotoelektron-spektroszkópia ultraibolya gerjesztéssel (UV photoelectron spectroscopy)
- UV: ultraibolya spektroszkópia (ultraviolet spectroscopy)
- XPS: fotoelektron-spektroszkópia röntgen-gerjesztéssel (X-ray photoelectron spectroscopy)
- XRD: röntgendiffrakciós analízis (X-ray diffraction analysis)
- XRF: röntgenfluoreszcencia analízis (X-ray fluorescence analysis)
- XANES: X-ray absorption near edge structure (lásd EXAFS)
- IEX: ionbombázás hatására kilépő röntgenfotonok spektroszkópiája (ion excited X-ray fluorescence spectroscopy)

Besugárzás	Módszer	Elérhető rétegvastagság	Tipikus érzékenység	Elsődleges információ	Detektálható elemek és specieszek
Foton	NMR	tömbfázis	-	A tömbfázis és az adszorbeált molekulák kémiai állapota	Mágnesesen aktív magok ($\frac{1}{2}$ spinű izotópok, kb.80)
	ESR	tömbfázis	-	Elektronszerkezet	Paramágneses specieszek
	IR, NIR	0.5-2.5 μm	0.1-0.5 %	A tömbfázis és az adsz. molekulák geometriája és kötése	Funkciós csoportok
	Látható, UV spektroszkópia	0.1 μm	0.001-1000 ppm	Elem- és molekulaelemzés	Li-U
	UPS, XPS (ESCA)	3 nm	0.1 %	Specieszek, felület elemi összetétele, vegyérték, kémiai kötés	Li-U
	LAMMA	-	0.5% szerves 0.1-10 ppm szerves	Mikroelem- és molekulaelemzés	Na-U

Besugárzás	Módszer	Elérhető rétegvastagság	Tipikus érzékenység	Elsődleges információ	Detektálható elemek és specieszek
Foton	AES	1 nm	0.1 %	Elemi összetétel, adszorbátum analízis	Li-U
	EXAFS, XANES, NEXAFS	50 nm	500 ppm	Oxidációs állapot, speciesz, koordinációs szám, szerkezet	Li-U
	XRF	10 ⁴ nm	1-10 ppm	A tömbfázis és a felületközeli régió elemi összetétele	Na-U
	XRD	10 ⁴ nm	-	A tömbfázis és a felület szerkezete, ásványos összetétel	
	Mössbauer	tömbfázis	1-1000 ppm	Kötőhelyek, szerkezet, kötés, kémiai környezet	Mössbauer-átmenettel rendelkező izotópok

Besugárzás	Módszer	Elérhető rétegvastagság	Tipikus érzékenység	Elsődleges információ	Detektálható elemek és specieszek
Elektron	Elektron-diffrakció, beleértve LEED, RHEED Béta-visszaszórás	1 nm Tömbfázis	-	Mikrokristályos fázisok azonosítása Elemi összetétel, rétegvastagság	Li-U H-U
	AES	1 nm	0.1 %	Elemi összetétel, adszorbátum analízis	Li-U
	SAM	1 nm	0.1 %	Elemi összetétel, adszorbátum analízis	Li-U
	EMP	10 ³ nm	0.1 %	A tömbfázis és a felületközeli régió elemi összetétele	Na-U
	EELS	100 nm	<0.1 %	Elemi összetétel, uazok a specieszek, mint az IR-ben, kötés, szerkezet	Li-U
	SEM	5 nm		Felület és tömbfázis morfológiája	
	TEM			Felület és tömbfázis morfológiája	

Besugárzás	Módszer	Elérhető rétegvastagság	Tipikus érzékenység	Elsődleges információ	Detektálható elemek és specieszek
Ion	ISS	1-100 μm	100 ppm	Elemi összetétel, az adszorbeált részecskék elhelyezkedése	Li-U
	SIMS	3-10 nm	0.1-10 ppm	Elemi, izotóp- és molekula összetétel	H-U
	IMMA	3-10 nm	0.1-10 ppm	Elemi, izotóp- és molekula összetétel	H-U
	CPINRA	10^4 nm	0.1-10 ppm	Elemi összetétel	
	IEX, PIXE	10^4 nm	0.1-10 ppm	Elemi összetétel, az adszorbeált részecskék elhelyezkedése	Na-U
	IMXA	10^4 nm	0.1-10 ppm	Elemi összetétel	
	RIBS	10^3 nm	0.01-1 %	Elemi összetétel, az adszorbeált részecskék elhelyezkedése	Li-U

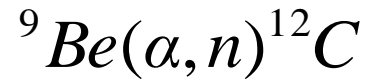
Besugárzás	Módszer	Elérhető rétegvastagság	Tipikus érzékenység	Elsődleges információ	Detektálható elemek és specieszek
Neutron	Magreakciók	Tömbfázis	0.001-0.1 ppm	Elemi összetétel a tömbfázisban	Li-U
	NAA	Tömbfázis	0.001-0.1 ppm	Elemi összetétel a tömbfázisban	Li-U
	PGAA	Tömbfázis	0.001-0.1 ppm	Elemi összetétel a tömbfázisban	H-U
	Neutron-szórás	Tömbfázis		Szerkezet és morfológia	
	SANS	Tömbfázis		Szerkezet és morfológia	

Neutronok alkalmazása

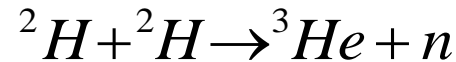
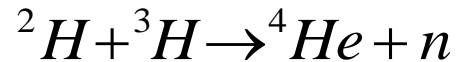


Neutronok előállítása

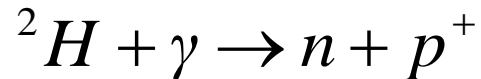
➤ Neutronforrások: 10^3 - 10^5 n/s.



➤ Neutrongenerátorok: 10^8 - 10^{10} n/s.



➤ Atomreaktorok: (n,f)



➤ Spallációs neutronforrás (EES)

- Fizika: statisztikus fizikai rendszerek
- Részecskefizika: a neutronok elemi részekből (kvarkok, pionok, gluonok) állnak. Belső szerkezetük határozza meg a radioaktív bomlást, a mágneses momentumot, , elektromos dipól momentumot, stb.
- Szilárdtest fizika: szilárd anyagok mágneses szerkezete és dinamikája
- Magnetoelektronika: mágneses szenzorok, hard disc-ek, mágneses momentumok iránya, spinszelepek, stb.
- Szerkezeti kémia: mindent, ahol hidrogénkötések vannak.: racionális molekulatervezés
- Folyadékok és üvegek: átmenetek a két állapot között (memória hatás, számítógépes szimulációs technikák)

- Anyagtudomány: szerkezetérzékeny képalkotás, tomográfia, radiográfia. Belső szerkezetek, rejtett tárgyak vizsgálata.
- Anyagtervezés: Növekvő energiaárak, fokozódó környezetvédelmi követelmények új anyagok előállítását teszik szükségessé, pl. kis sűrűségű nanokompozitok.
- Nanoszerkezetek templátjai: nanoméretű rendezett blokk kopolimerek előállítása, melyek felhasználhatók katalizátorok, implantátumok, gyógyszerek, mágneses készülékek, stb. előállítására.
- Műszaki tudomány: A szerkezetek élettartamát befolyásoló mechanikai tulajdonságok vizsgálata

- **Biológia:** A neutronok különösen érzékenyek a molekulák ill. atomok dinamikájára, azaz a szerkezet megváltozásaira.
- **Biotechnológia:** Enzimek aktív szerkezetének, ill. aktív centrumainak vizsgálata felhasználható biotechnológiai folyamatok tervezésére. Pl. glükóz-izomeráz szerkezetének, aktív centrumának, a katalízist befolyásoló anyagok hatásának felderítése.
- **Gyógyszerkutatás:** Enzimreceptor proteinek, nukleinsavak három-dimenziós szerkezetének felderítése. Pl. öregkori betegségek, Alzheimer-kór kezelése: a betegséget rosszul oldódó amyloid lerakódások kiválása okozza az agyban és az idegszálakban. A folyamatot szabályozó enzimek szerkezetének megismerése segíthet a gyógyszertervezésben.

- Hidrogén mint energiahordozó: a hidrogén biztonságos tárolása (fém-hidridek, könnyű elemek ionos hidrogénvegyületei).
- Energetika: a földgáz legnagyobb hányada metán-víz klatrátok formájában található. Ez nagy energiaforrást jelenthet, de hozzájárul az üvegházhatáshoz és a tengerek geológiai veszélyeihez. öldtudomány: a felső földköpeny aktivitása felelős a földrengésekért és a vulkánkitörésekért. Az ásványok és a magma vizsgálata a köpenynek megfelelő körülmények között segítheti az előrejelzést.
- Archeológiai vizsgálatok: NAA, PGAA nagy neutronfluxussal. Rézkori, kb. 5200 éves emberi maradványok (Ötztal). Régen elfelejtett technológiák vizsgálata.

Nukleáris analitikai módszerek neutronokkal

- Kvalitatív analízis - sugárzás fajtája, energiája vagy energia-eloszlása
- Kvantitatív analízis - intenzitás, aktivitás
- Elemzési mód: a gerjesztett sugárzás megfigyelése
 - magsugárzás - magreakciók
 - atomi sugárzás - szórás
- Előnyei:
 - független a kémiai környezettől
 - szelektív
 - érzékeny
 - roncsolásmentes

Nukleáris analitikai módszerek felosztás

- A gerjesztés módja szerint
 - aktiváció (n-, p⁺-, stb. aktiváció)
 - a késleltetett radioaktivitás mérése
 - indukált sugárzás (γ-, röntgen-, α-sugárzás)
 - prompt (azonnali: <math><10^{-14}</math> s) radioaktivitás mérése
 - szórás (töltött részecske)
- A keltett sugárzás fajtája szerint
 - γ-spektroszkópiái
 - röntgenspektroszkópiái
 - töltött részecske spektroszkópiái

Neutronaktivációs analízis (NAA)

- Hevesy Gy., H. Levi (1936)
- Magreakciók:
 - (n,γ) : termikus, epitermikus neutronokkal reaktorban
 - (n,γ) , (n,p) , (n,α) : gyors neutronokkal neutrongenerátorban
- Mérés: radioaktív bomlás során keletkező γ -, esetleg β -sugárzást
 - instrumentális (INAA) - közvetlenül
 - radiokémiai (RNAA) - radiokémiai elválasztás után

A magreakciók kinetikája

$$\frac{dN^*}{dt} = \sigma\Phi N - \lambda N^*$$

N^* a keletkező részecske

N a targetmagok száma

Φ a besugárzó részecske fluxusa

σ a hatáskeresztmetszet, 1
barn= 10^{-24} cm²

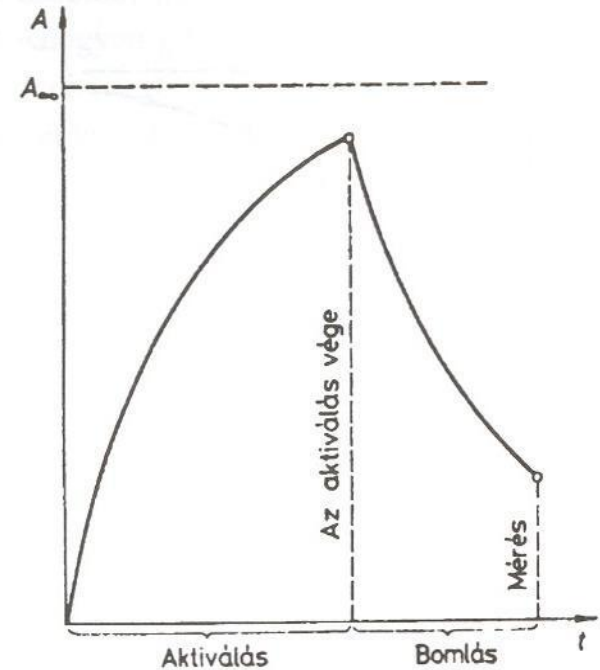
λ a termékmag bomlási állandója

$$N^* = \frac{\sigma\Phi N}{\lambda} (1 - e^{-\lambda t_{besug}}) = N_{\infty} (1 - e^{-\lambda t_{besug}})$$

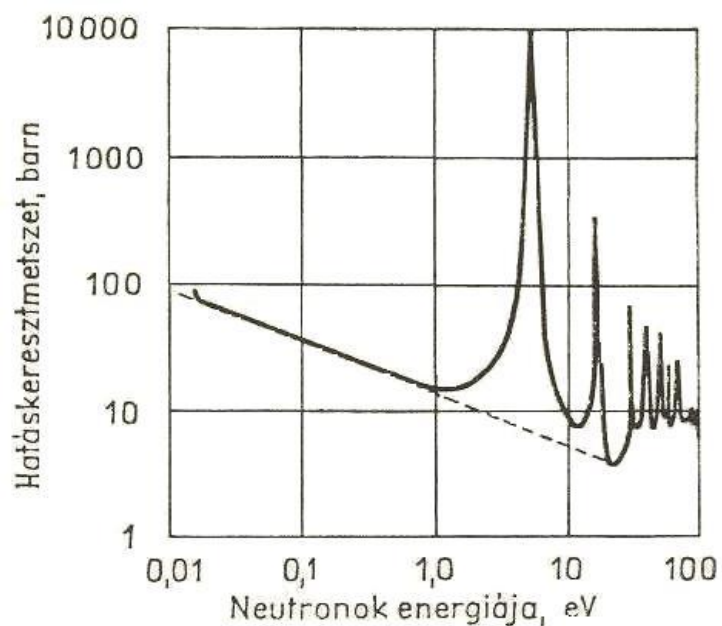
Besugárzás megszűnte után:

$$N^* = N_{\infty} (1 - e^{-\lambda t_{besug}}) e^{-\lambda t}$$

Aktivitással kifejezve: $A^* = \lambda N^* = \lambda N_{\infty} (1 - e^{-\lambda t_{besug}}) e^{-\lambda t} = A_{\infty} (1 - e^{-\lambda t_{besug}}) e^{-\lambda t}$



Magreakciók neutronokkal



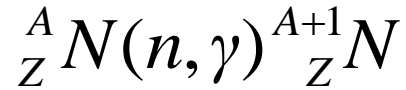
$< 0,01$ eV lassú vagy termikus

> 100 keV gyors

epitermikus neutronok

Hatáskeresztmetszet $\sim 1/v$

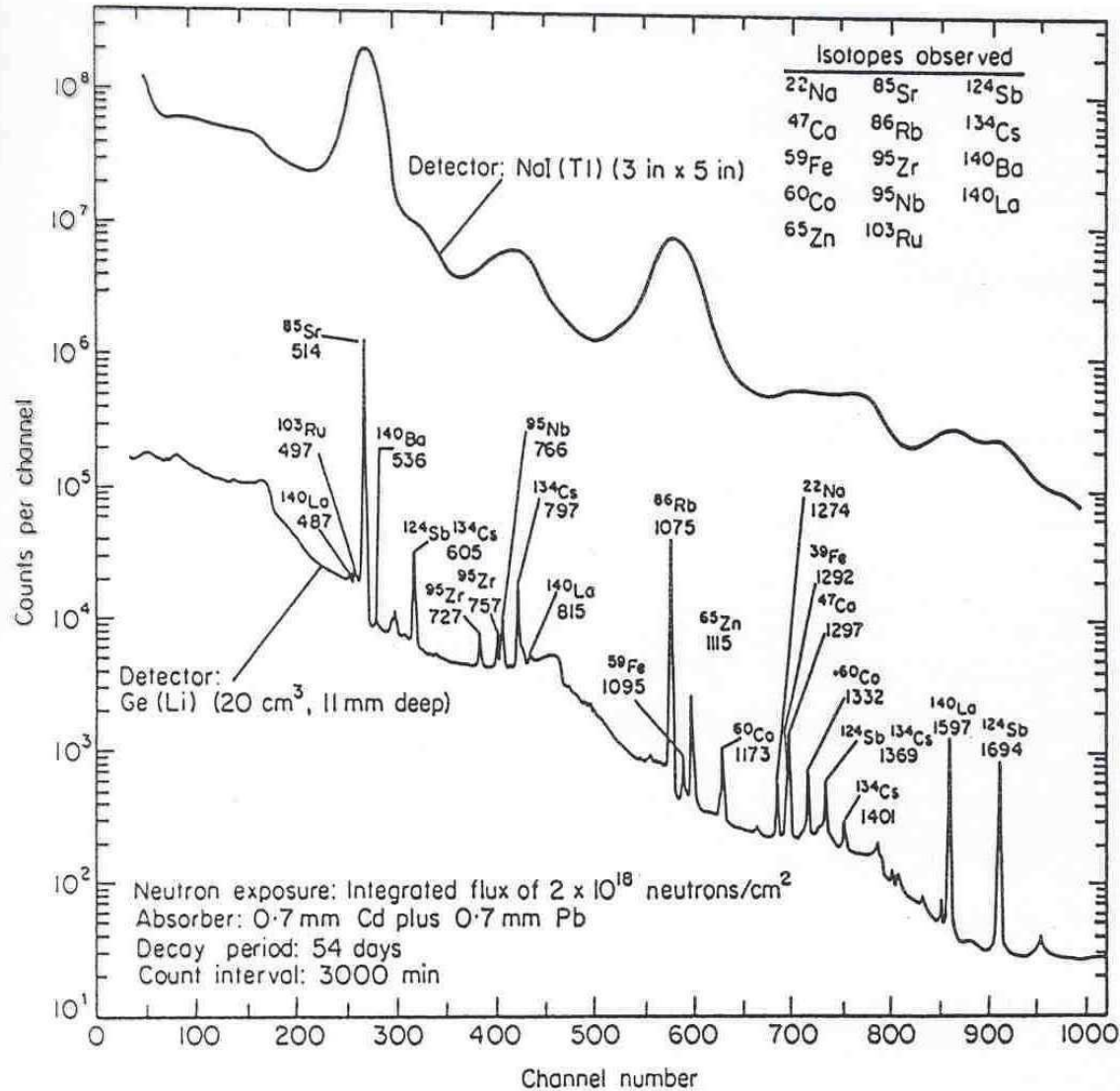
Rezonanciacsúcsok



- Nincs Coulomb-gát
- He kivételével mindig lejátszódik
- Exoterm, 8 MeV (neutron kötési energiája)
- Nem állítható elő hordozómentes izotóp
- Neutronfelesleges, β^- -sugárzó magok keletkeznek

- Zavaró reakciók az aktivációs analízisnél, pl.
ZnCu ötvözet: ${}^{64}\text{Zn}(n, \gamma) {}^{65}\text{Zn}$, ${}^{64}\text{Zn}(n, p) {}^{64}\text{Cu}$,
 ${}^{63}\text{Cu}(n, \gamma) {}^{64}\text{Cu}$

Tengervíz neutronaktivációval felvett spektruma



71 elem kimutatási határa 10^{13} termikus neutron/cm² s fluxus mellett (1 h besugárzás)

$$N^* = \frac{\sigma\Phi N}{\lambda} (1 - e^{-\lambda t_{besug}}) = N_{\infty} (1 - e^{-\lambda t_{besug}})$$

Detektálási határ, μ	Elemek
$1-3 \cdot 10^{-6}$	Dy
$4-9 \cdot 10^{-6}$	Mn
$1-3 \cdot 10^{-5}$	Kr, Rh, In, Eu, Ho, Lu
$4-9 \cdot 10^{-5}$	V, Ag, Cs, Sm, Hf, Ir, Au
$1-3 \cdot 10^{-4}$	Sc, Br, Y, Ba, W, Re, Os, U
$4-9 \cdot 10^{-4}$	Na, Al, Cu, Ga, As, Sr, Pd, I, La, Er
$1-3 \cdot 10^{-3}$	Co, Ge, Nb, Ru, Cd, Sb, Te, Xe, Nd, Yb, Pt, Hg
$4-9 \cdot 10^{-3}$	Ar, Mo, Pr, Gd
$1-3 \cdot 10^{-2}$	Mg, Cl, Ti, Zn, Se, Sn, Ce, Tm, Ta, Th
$4-9 \cdot 10^{-2}$	K, Ni, Rb
$1-3 \cdot 10^{-1}$	F, Ne, Ca, Cr, Zr, Tb
10-30	Si, S, Fe

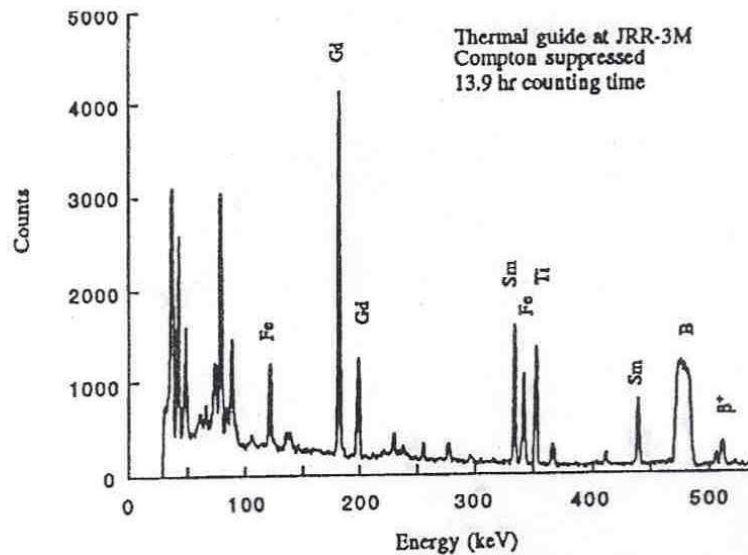
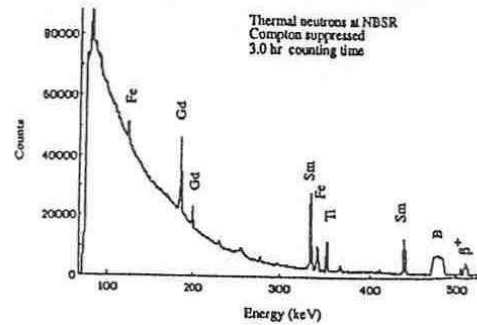
Prompt-gamma neutronaktivációs analízis (PGAA)

- Neutron-befogást követő prompt γ -sugárzás aktiválással egyidejű észlelése
- (n,γ) reakció: a gerjesztett atommag sugároz.
 - Gerjesztési energia \sim neutron kötési energiája (7-8 MeV)
 - Legerjesztődés: nagy energiájú γ -sugárzás vagy kis energiájú γ -kaszkádok. Ezek energiája és intenzitása éppúgy jellemző a magra, mint a radioaktív bomlást kísérő gamma-sugárzása. Aktiválás időtörvénye is ugyanaz.
- Előny: mint NAA, de minden elemre működik
 - különösen fontos a könnyű elemeknél (H, B, N, stb.)
 - nyomelemeknél (Cd, Hg, stb.)
- Hátrány:
 - közvetlenül a neutron-nyalámban kell mérni-nagy háttérsugárzás
 - a fluxus a nyaláb belsejében \ll reaktor belseje
 - bonyolult gamma-spektrum
 - bonyolult, drága mérés technika

Hidegneutronos PGAA

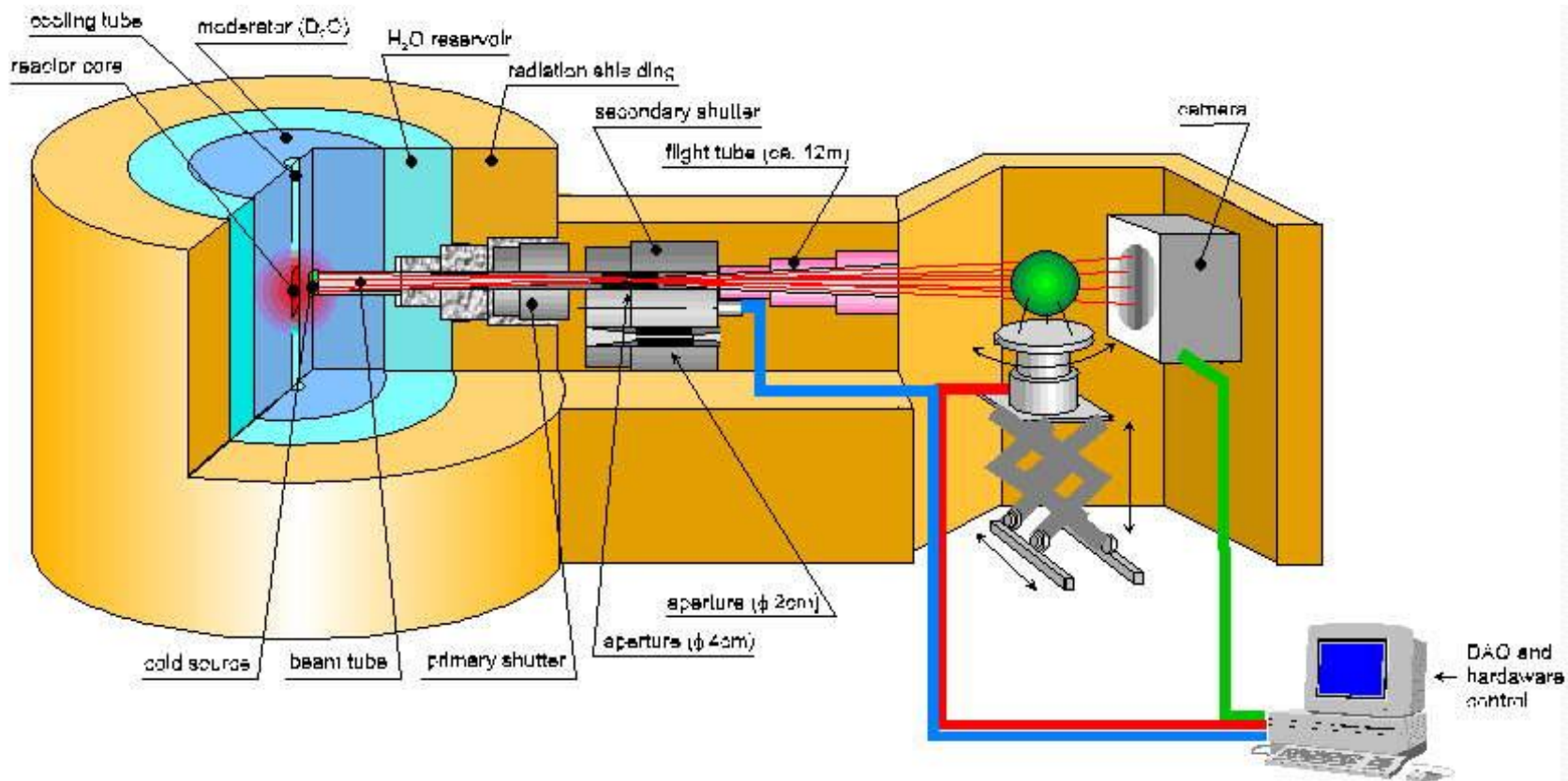
- Előny: NAA legfontosabb kiegészítője
 - nagyon alacsony háttér
 - nagy hatáskeresztmetszet ($\sigma \sim 1/v$)
 - *in-vivo* lehetőségek
 - termikus neutronnyalábhoz képest <100x javulás
 - kimutatási határ: 10^{-5} - 10^{-9} g
- Alkalmazások:
 - anyagvizsgálat (H, B)
 - geokémia
 - fő elemek (Si, Al, H, C)
 - nyomelemek (Cu, Cd, Hg, /Pb/)
 - indikátorok (B, Rb, Sm, Gd)
 - környezetvédelem
 - toxikus nyomelemek (Cd, Hg)
 - biológia, orvostudomány
 - makroelemek (H, C, /O/, Ca)
 - mikroelemek (Cu, Zn, Fe)

Termikus és hideg neutronnyalámban felvett PGAA spektrumok összehasonlítása



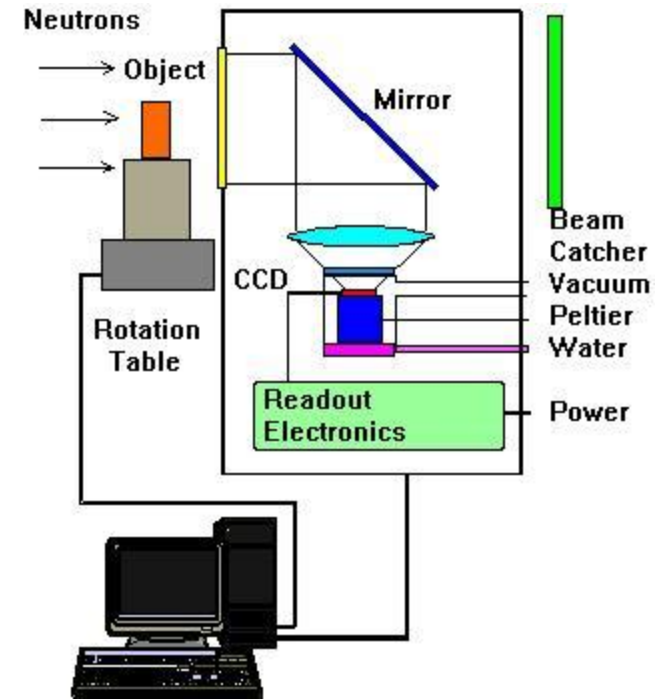
Neutronos képalkotó technikák

- Neutronradiográfia és –tomográfia



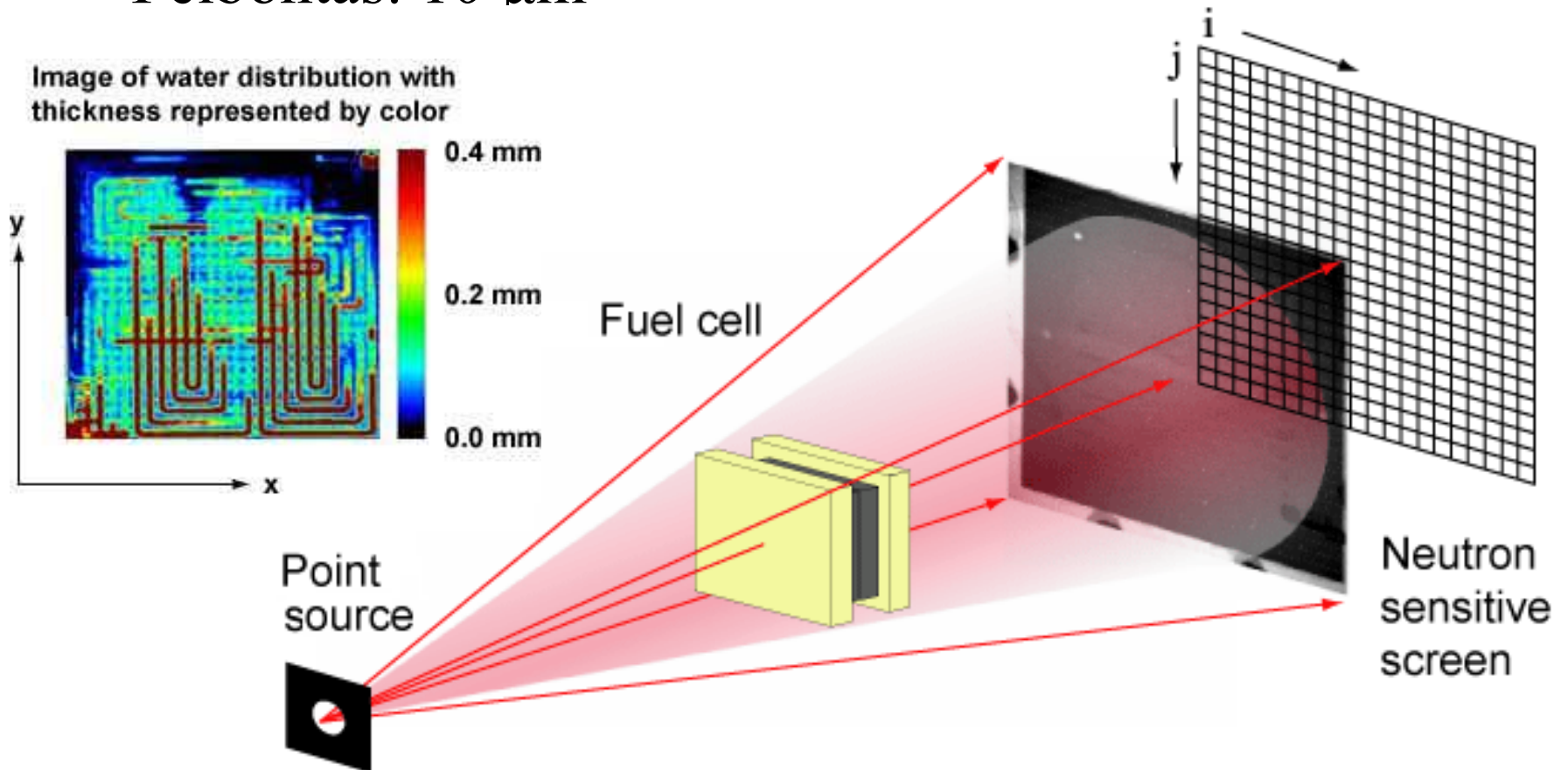
Neutronradiográfia

- Párhuzamos neutronnyaláb
- Minta (változó neutronelnyelés)
- Szcintillátorernnyő
 - ${}^6\text{LiF} + \text{ZnS}$
 - ${}^6\text{Li}(n,t){}^4\text{He}$ – két töltött részecske
 - ZnS-ben felvillanást okoz
 - Felbontás: 100—300 μm
- Tükör
- Digitális kamera



Nagyítás??

- Széttartó nyaláb
- Felbontás: 10 μm

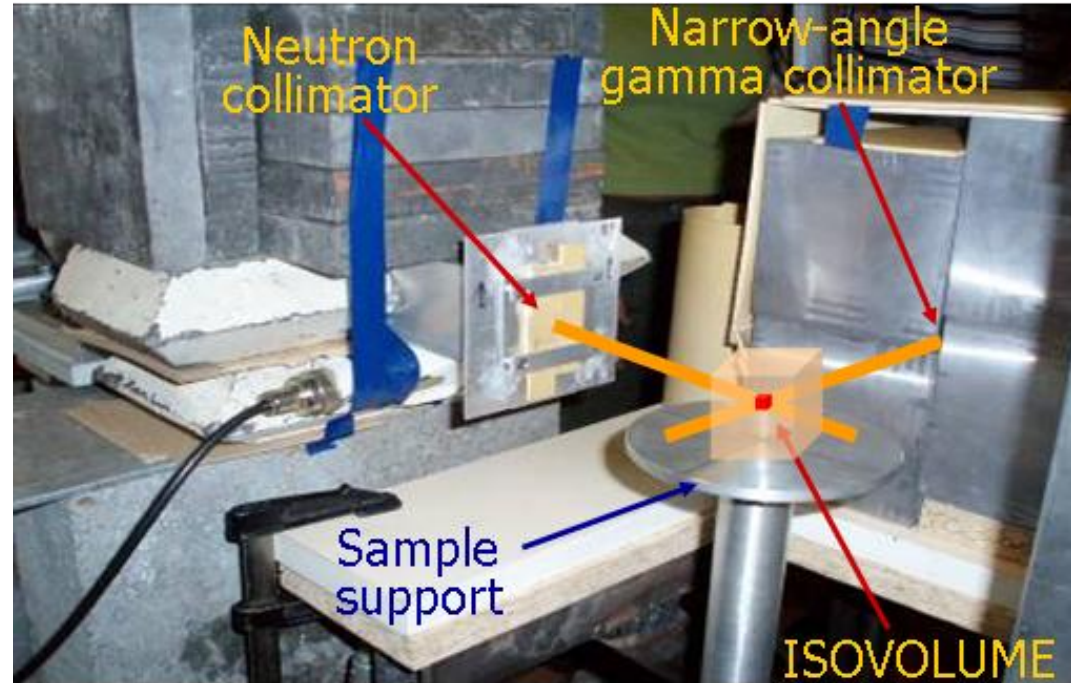
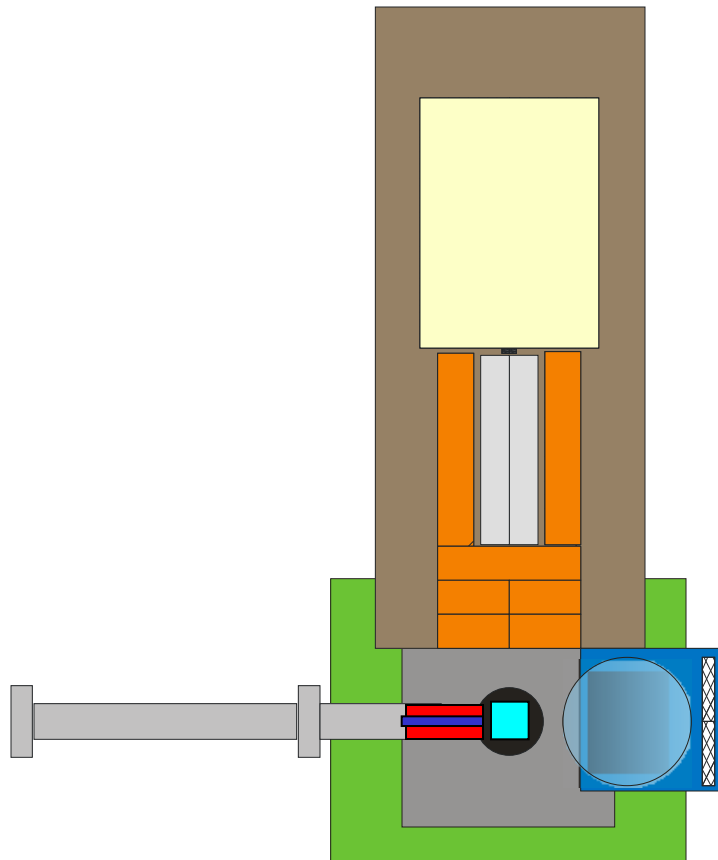


Időigényes mérés

- Felbontástól, fluxustól függően:

Pár sec – 1 nap

PGAA és neutronradiográfia kombinálása



Belső részletek külön-külön elemezhetők

