

*Misure di soglie di  
assorbimento di elementi con  
basso numero atomico  
utilizzando raggi X molli*

*Tutori:*

*A. Balerna, A. Grilli, A. Raco, V. Sciarra*

*INFN - Laboratori Nazionali di Frascati 10-12 Ottobre 2012*

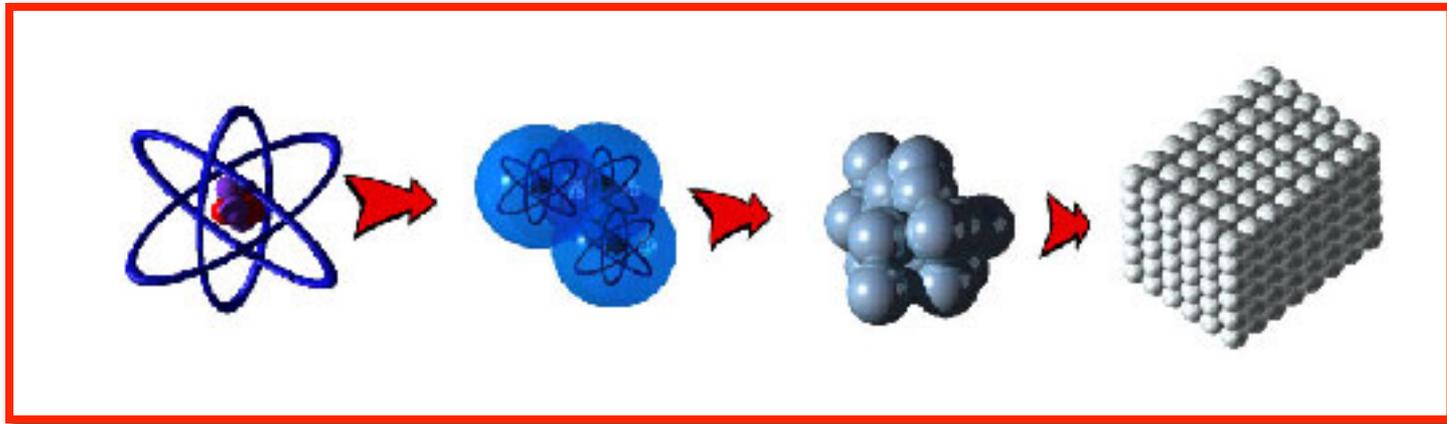


# *Sommario*

- *Introduzione*
- *La luce di sincrotrone*
- *Applicazioni*
- *‘Linee di luce’ o beamlines*
- *‘Linea di luce’ @ Dafne-L DXR1*
- *Interazione radiazione-materia*
- *Assorbimento e informazioni strutturali*
- *Cenni di analisi dei dati*

# Introduzione

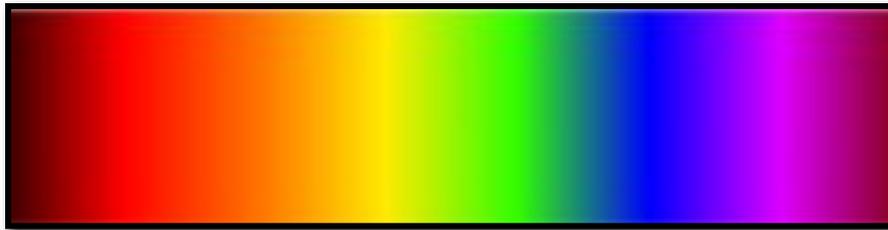
Studiare la **struttura della materia**, composta di atomi di vario tipo, significa **ottenere informazioni** sulle sue **proprietà** elettroniche, strutturali e magnetiche.



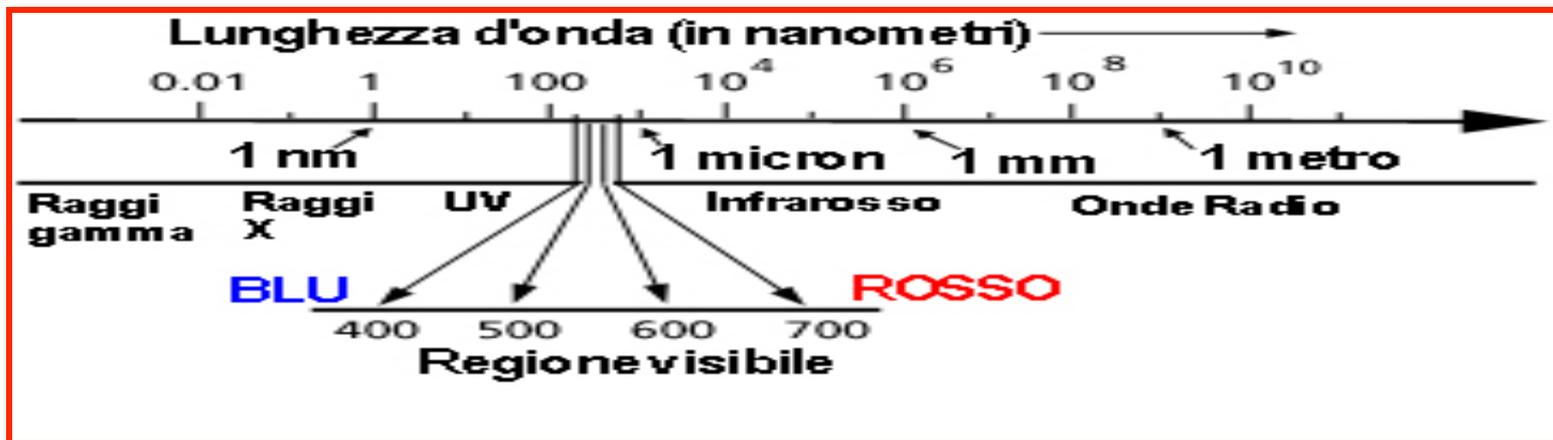
Da sempre la **radiazione elettromagnetica** ha costituito per l'uomo l'elemento più importante per la conoscenza dell'universo che lo circonda. Nello studio della struttura della materia, la **'luce di sincrotrone'** è importante per aiutarci a **'vedere'**.

# La luce

La luce nella sua normale accezione e' quella parte dello spettro elettromagnetico (insieme di tutti i tipi di radiazione) che e' visibile dall'occhio umano.



Di fatto la luce visibile e' solo una piccola parte dello spettro elettromagnetico. Le altre parti dello spettro sono note come onde radio, microonde, radiazione ultravioletta, raggi X e raggi gamma.



# Radiazione, luce e onde

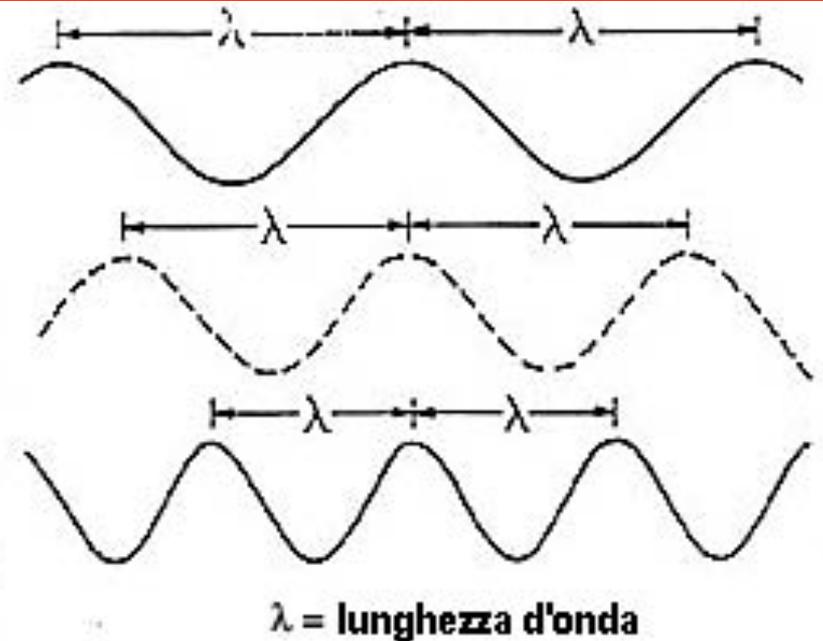
I vari tipi di radiazione rappresentano in senso più ampio particolari tipi di luce classificati in base alle loro definite frequenze e lunghezze d'onda associate.

La lunghezza d'onda è la distanza tra due creste consecutive di un'onda sinusoidale, essa viene rappresentata con la lettera greca lambda ( $\lambda$ ) e la sua unità di misura è il **nanometro** (unità di lunghezza ed è pari a  $10^{-9}$  m ossia un milionesimo di metro).

Luce rossa  
 $\lambda = 680$  nm

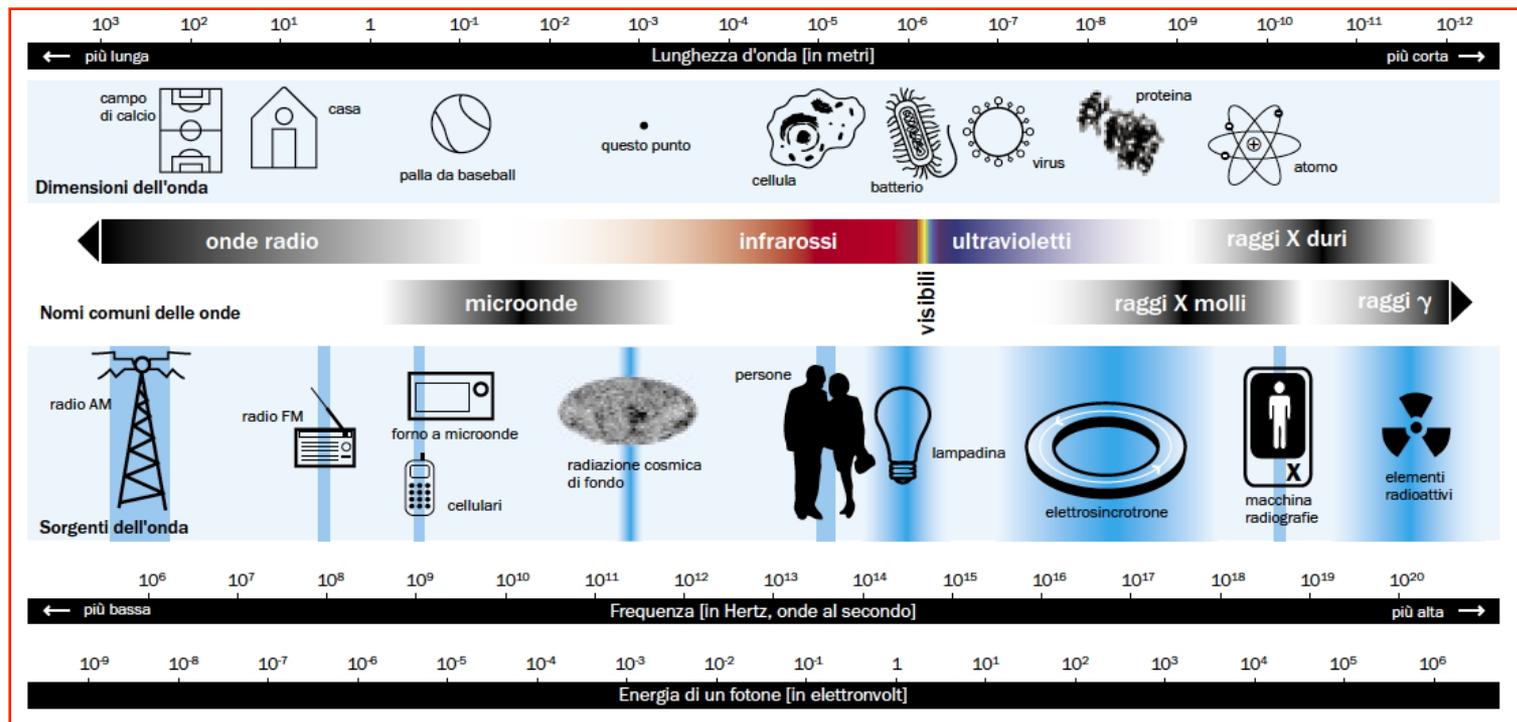
Luce verde  
 $\lambda = 550$  nm

Luce viola  
 $\lambda = 410$  nm



I nostri occhi percepiscono i cambiamenti di frequenza della luce visibile, attivando la percezione cerebrale, sotto forma di cambiamenti di colore

# Spettro elettromagnetico



Lo spettro elettromagnetico è costituito da un **insieme continuo di frequenze** ( $\nu$ ). La frequenza o numero di oscillazioni effettuate dall'onda nell'unità di tempo, si misura in Hertz (Hz). Connessa con la frequenza è la **lunghezza d'onda** ( $\lambda$ ):

$$\lambda \nu = c \quad \text{dove } c \text{ e' la velocita' della luce.}$$

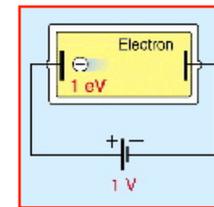
Queste due grandezze sono connesse con l'energia trasportata dall'onda: l'energia associata alla radiazione elettromagnetica è infatti direttamente proporzionale alla frequenza.

# Energia

La radiazione e' quindi un'onda elettromagnetica, ossia un campo elettromagnetico oscillante, che si propaga trasportando energia.

L' energia si misura in **eV** - electron volt definito come **l'energia cinetica** guadagnata da un elettrone passando in una differenza di potenziale di un Volt.

$$1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ Joules}$$



Il successo di un lavoro di ricerca dipende in molti casi dall' uso della corretta energia o lunghezza d' onda per il particolare studio che si vuole attuare.

# *Sorgente ideale*

Una sorgente ideale per molti studi legati alla struttura della materia dovrebbe avere le seguenti caratteristiche:

*alta intensita' luminosa*

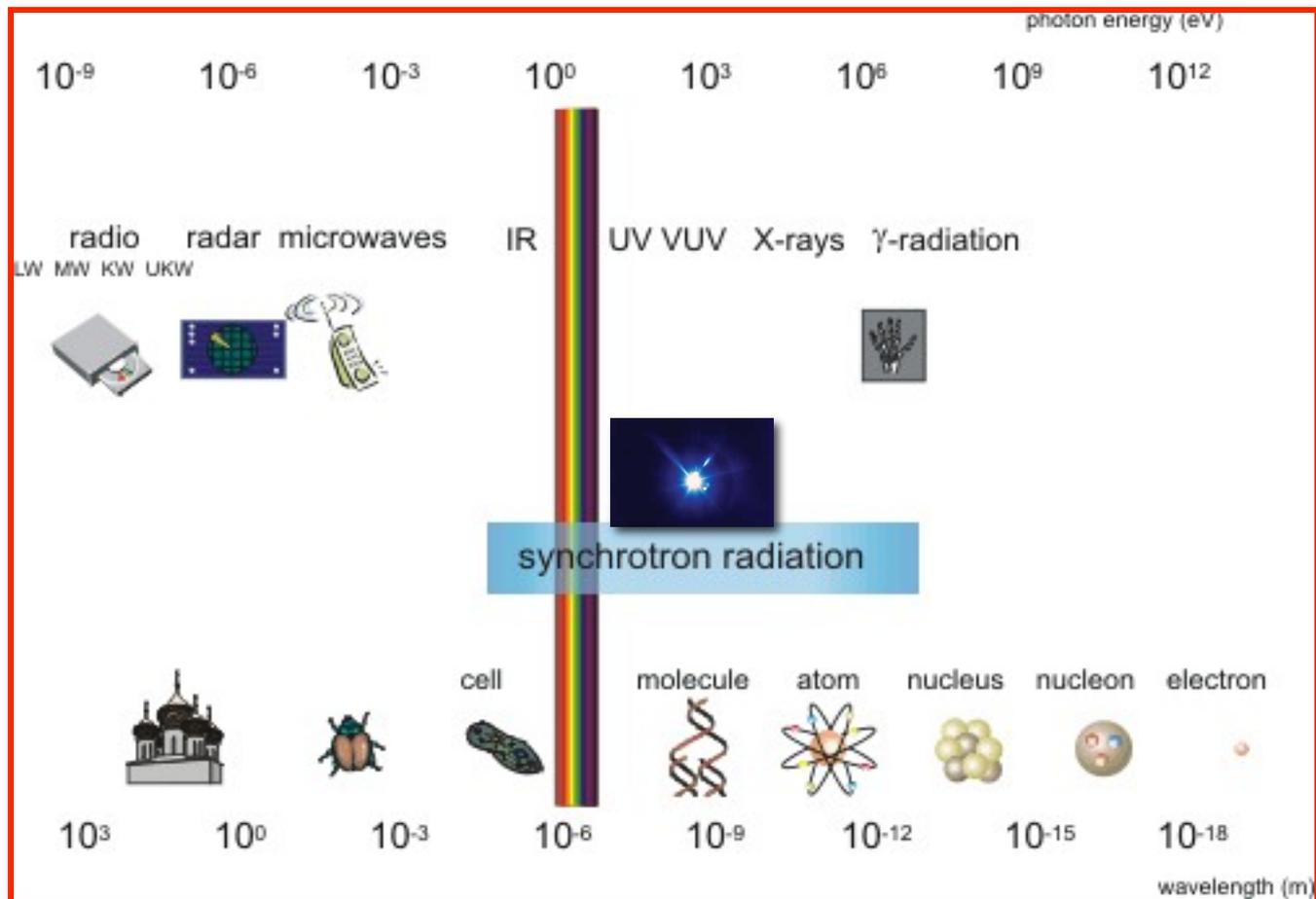
*larghissimo spettro di frequenze* con possibilita' di selezionare tra queste la frequenza desiderata mantenendo perlomeno una ragionevole intensita'

*facile scelta della polarizzazione*

*un certo grado di coerenza*

*collimazione* etc.

# Cosa e' la luce di sincrotrone?

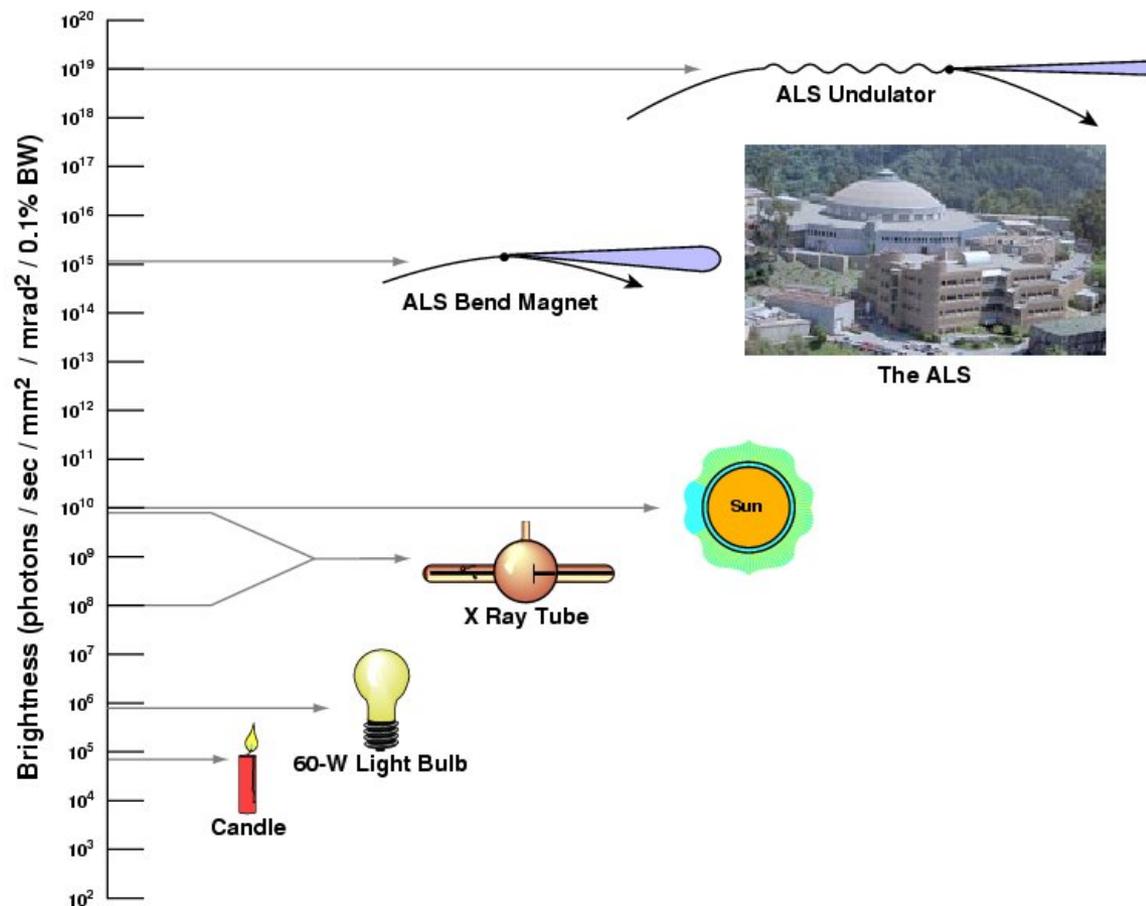


La **luce o radiazione di sincrotrone** permette di 'vedere' molte cose perche' di fatto e' una **radiazione molto intensa** con una **banda di emissione larga** che puo' andare **dall'infrarosso ai raggi x** duri.

# Brillanze a confronto

## How Bright Is the Advanced Light Source?

ALS



**Brillanza  
o flusso**  
(numero di  
fotoni  
emessi  
nell'unita'  
di tempo in  
una  
determinat  
a regione  
spettrale)  
**per angolo  
solido e  
unita' di  
superficie  
della  
sorgente**

# Emissione di una particella carica accelerata

Una particella carica, tipo elettrone o protone, accelerata, emette radiazione elettromagnetica.

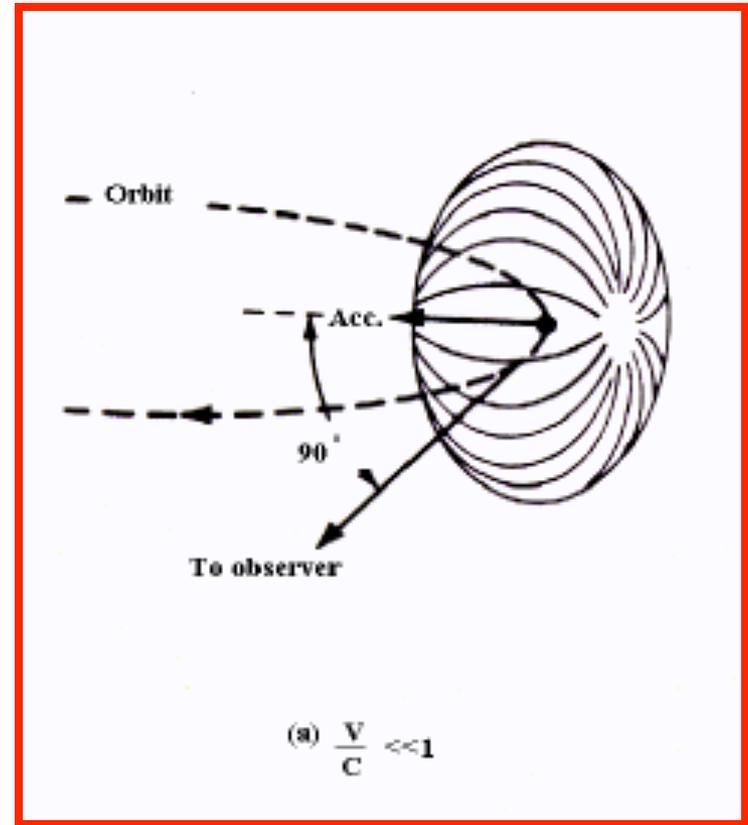
**Larmor**, nel 1897, aveva ricavato, a partire dall'elettrodinamica classica, la formula che esprime la potenza irradiata da una **particella accelerata non relativistica**

$$v \ll c \text{ o } v/c \ll 1$$

$v$  = velocità della particella

$c$  = velocità della luce

$P$  - potenza integrata su tutto l'angolo solido  $a$  - accelerazione  $e$  - carica



$$P = \frac{2}{3} \frac{e^2 a^2}{c^3} \text{ [W]}$$

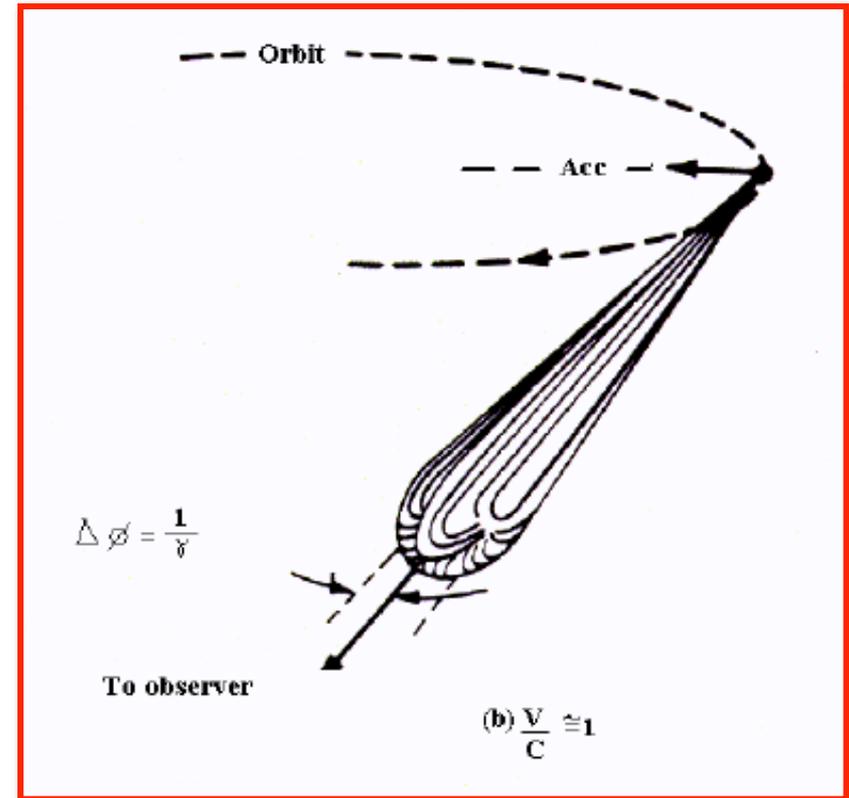
# Luce di sincrotrone

Quando **particelle cariche**, si muovono a **velocita' vicine a quelle della luce**, su una traiettoria curva, le particelle emettono radiazione elettromagnetica nota come **luce di sincrotrone**.

La radiazione e' emessa nella direzione del moto, in uno **stretto cono tangente** all'orbita degli elettroni. Piu' **alta e' l'energia cinetica (E) degli elettroni** piu' **stretto e' il cono** di emissione e lo spettro di radiazioni emesso si sposta verso piu' alte energie.

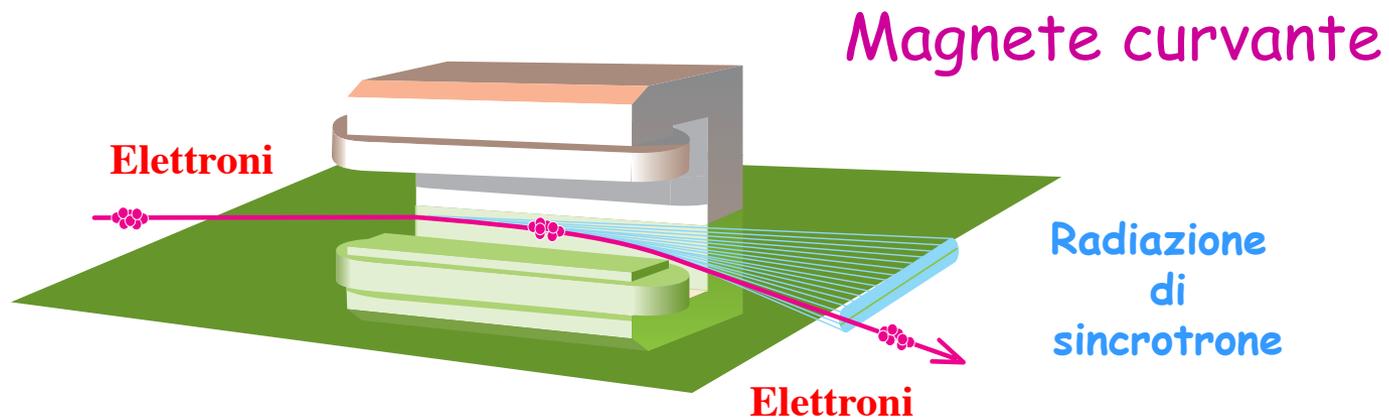
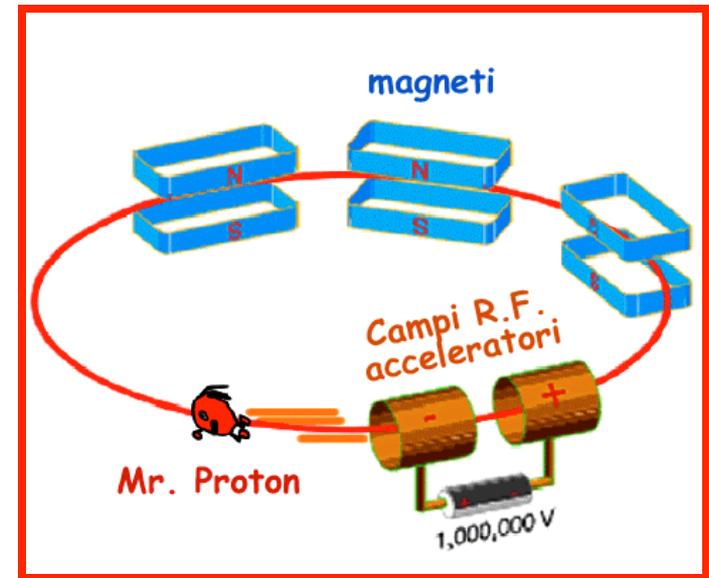
$$P_{rad} = \frac{2}{3} \frac{Q^2 c}{R^2} \left[ \frac{E}{mc^2} \right]^4$$

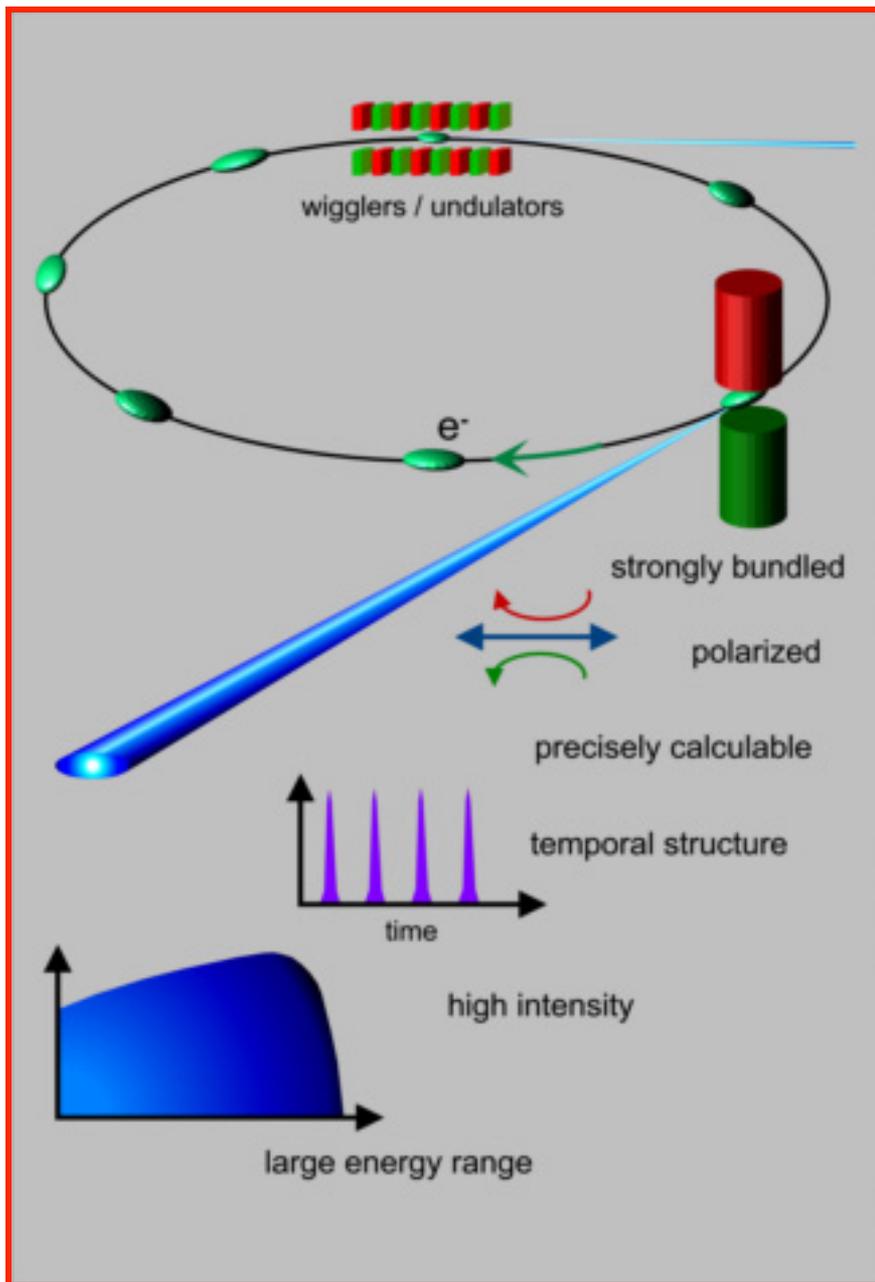
La potenza dipende dalla massa (**m**) e dall'energia della particella (**E**) e dal raggio di curvatura della traiettoria (**R**)



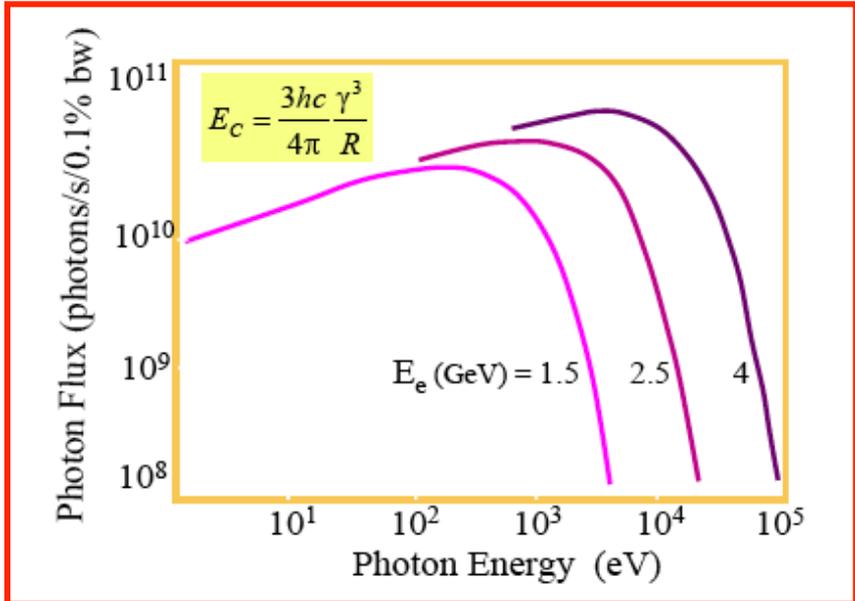
# Sincrotroni o acceleratori di particelle

I **sincrotroni** sono degli **acceleratori circolari**. Le particelle cariche vengono **accelerate per mezzo di campi elettrici** e vengono mantenute sulle orbite circolari quindi **deflesse campi magnetici**. Le particelle sono confinate in un anello in cui c'è un ultra vuoto.

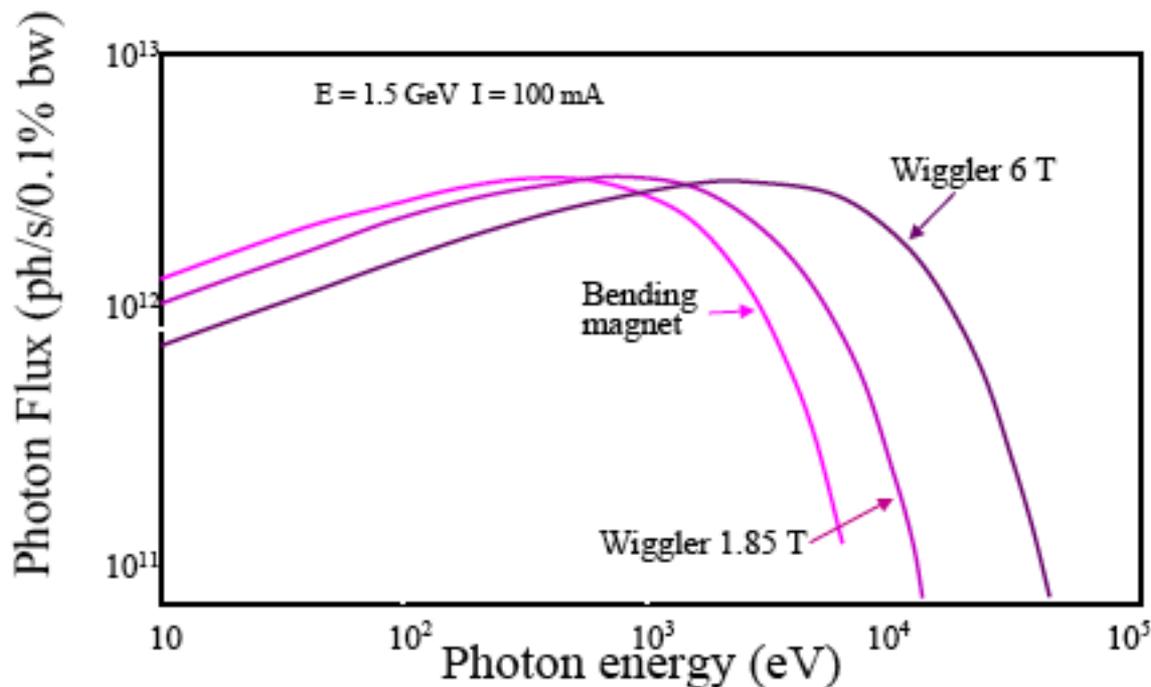
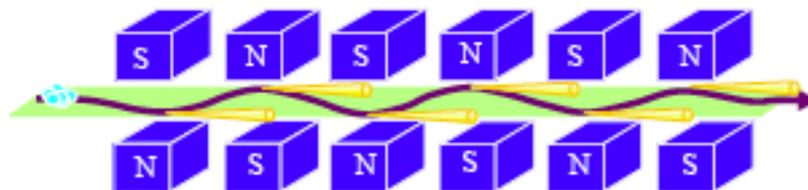




# *Proprieta' della Luce di Sincrotrone*



# Magneti Wiggler



Il **flusso** e la **brillanza della radiazione emessa possono essere aumentati**, mediante **'insertion devices'** (ID) (tipo **wigglers** o ondulatori multipolari) che vengono installati in tratti rettilinei dell' anello (sezioni diritte) opportunamente ricavate tra i vari magneti curvanti.

# Acceleratori dedicati e non

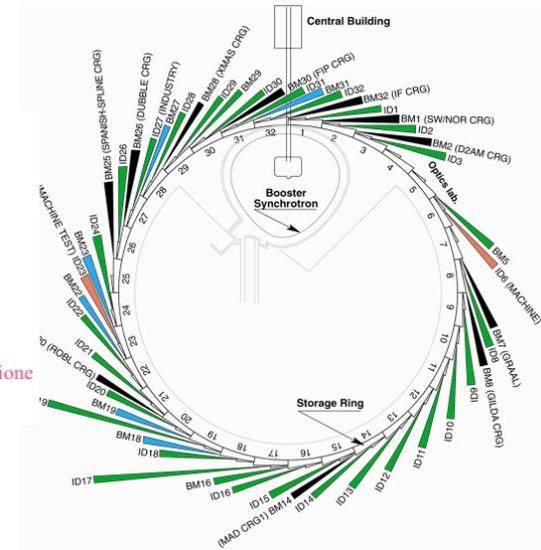


**ESRF - Dedicated Synchrotron Radiation Facility - Grenoble - France**

A partire dagli anni '70 la luce di sincrotrone ha trovato numerose applicazioni e sono stati costruiti anche acceleratori dedicati al suo uso.



Booster - piccolo anello che prepara il fascio del linac per una migliore efficienza di iniezione  
 Electron Gun  
 Linac  
 Anello di accumulazione



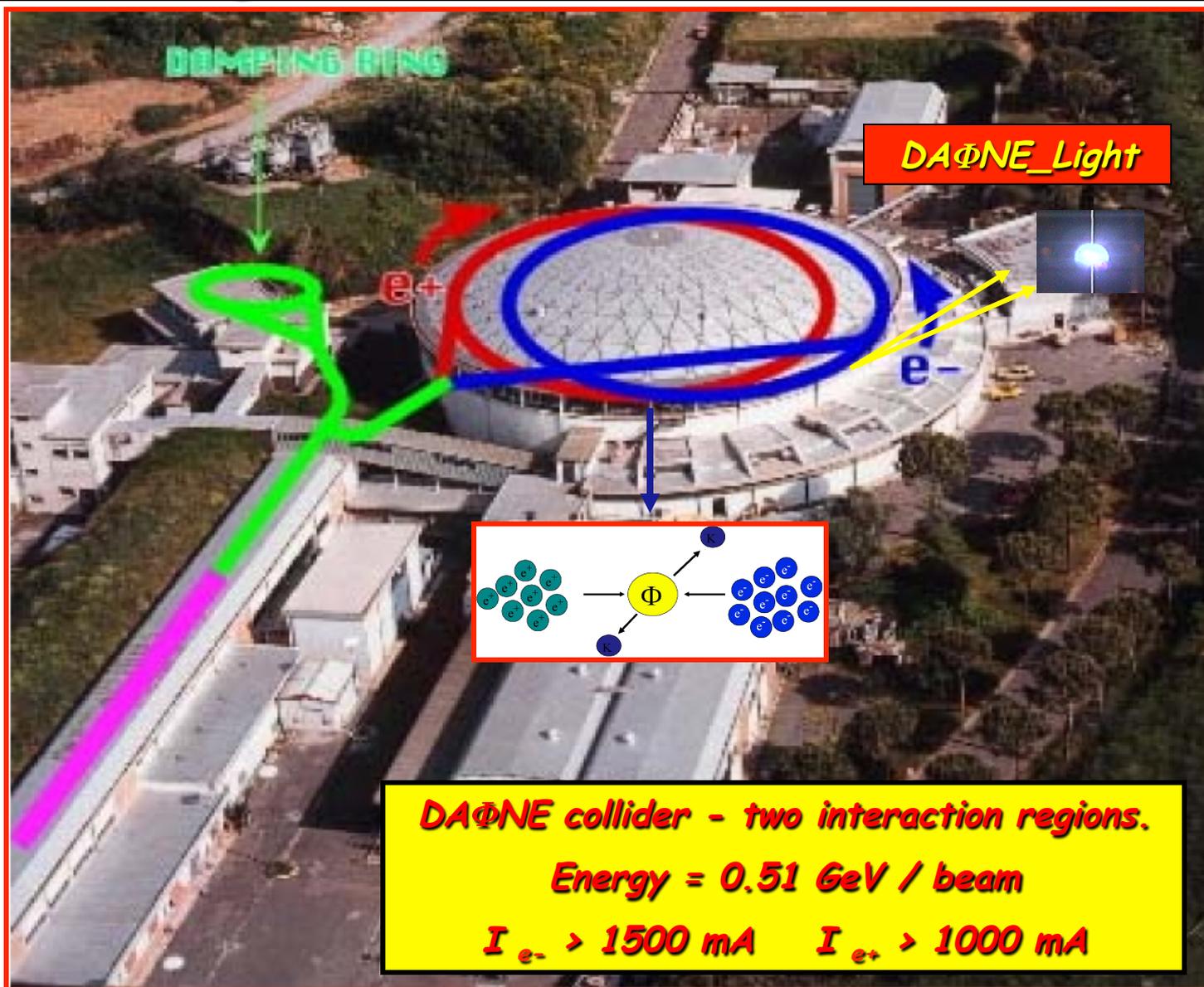
# DAΦNE Frascati

DAΦNE

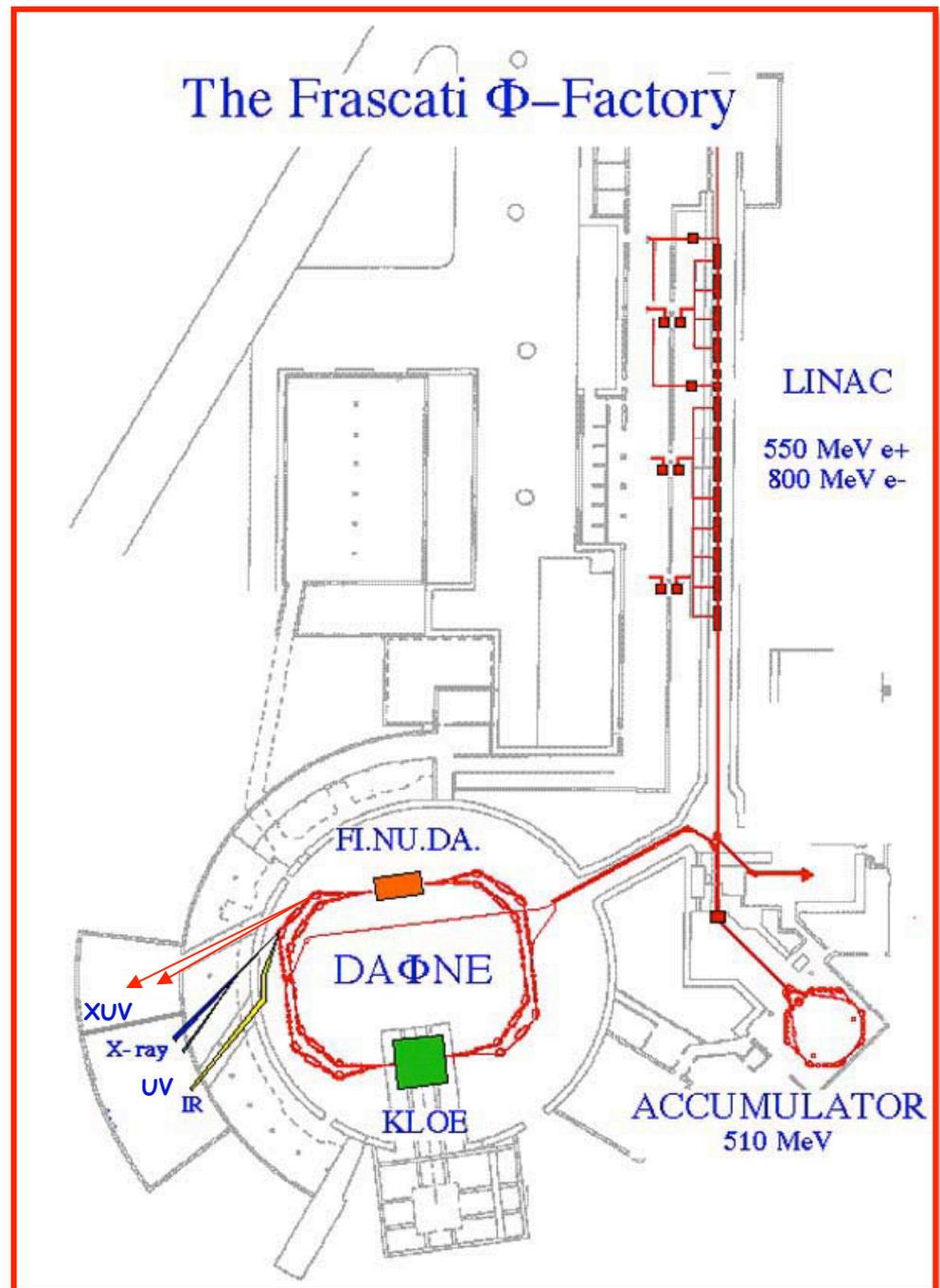
DAΦNE\_Luce



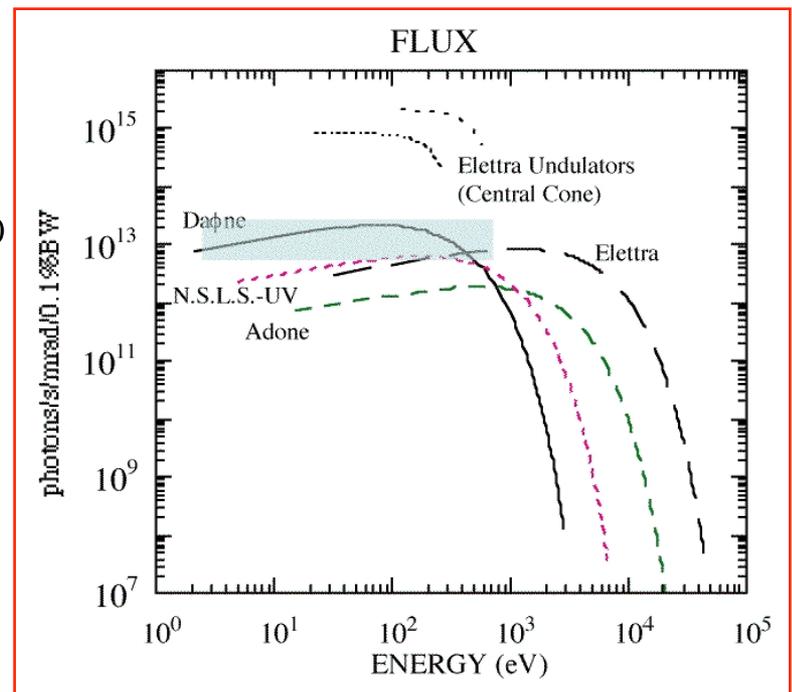
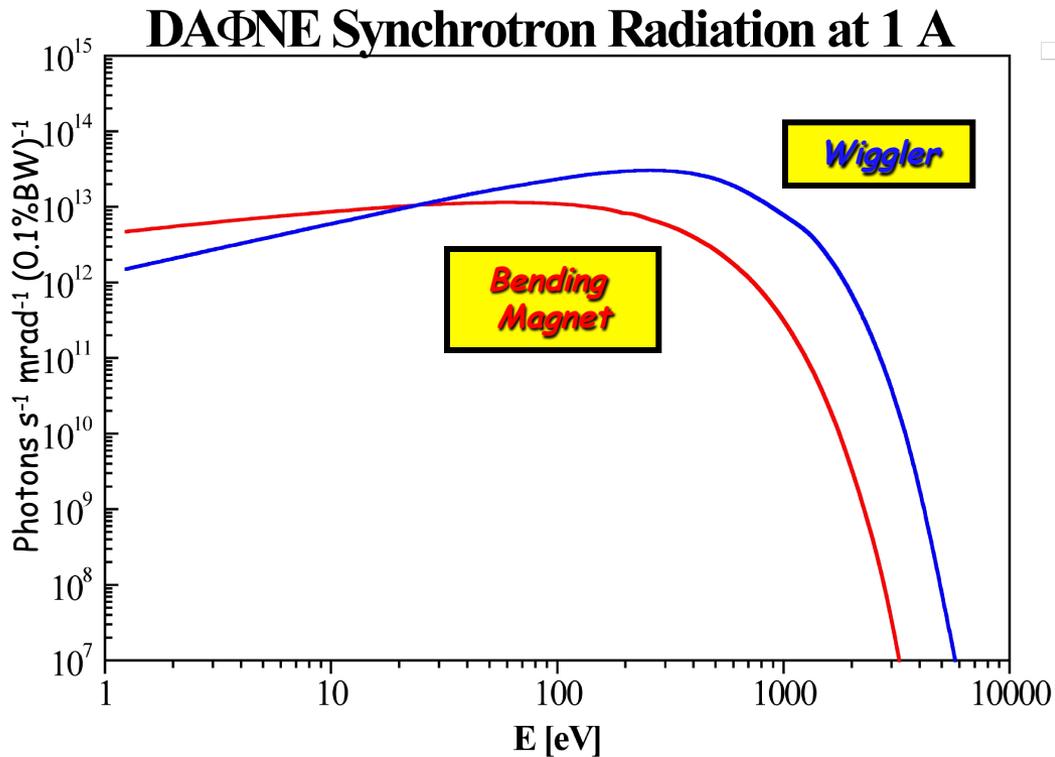
# DAΦNE come Collider ( $e^+ - e^-$ ) ma anche come Sorgente di Luce di Sincrotrone



*Visione  
schematica  
del  
laboratorio  
DAΦNE -  
Luce*



# Flusso fotonico @ DAΦNE



# *Beamlines @ DAΦNE*

*DXR1 - Soft x-ray beamline ( 900 - 3000 eV  
aperta ad utenti)*

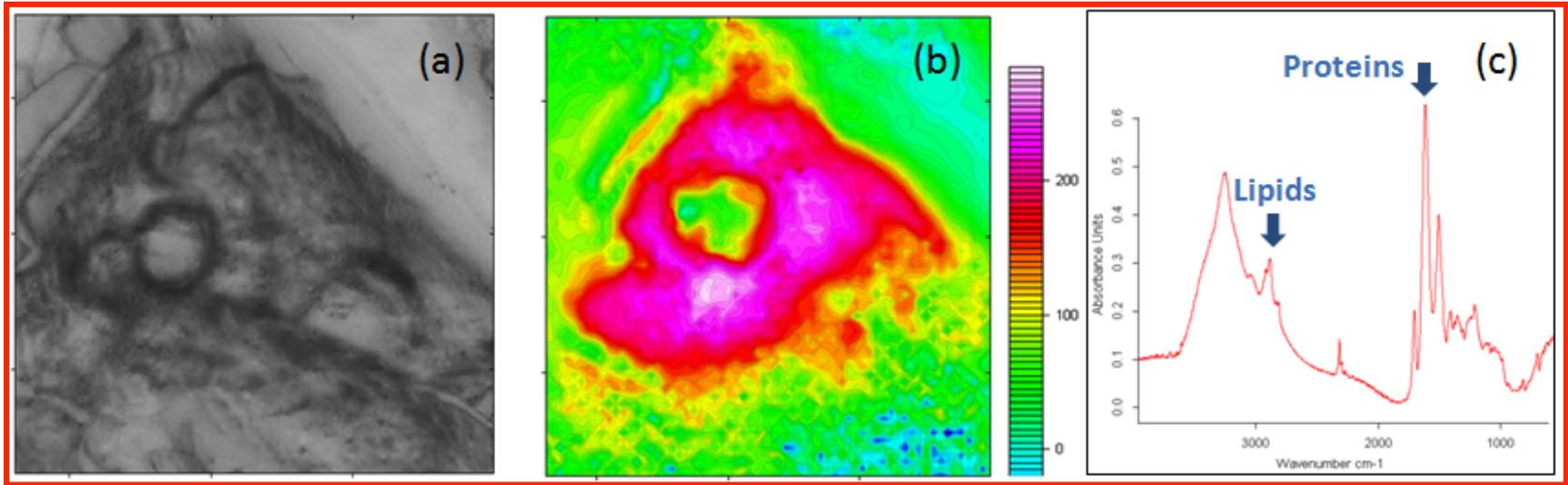
*DXR2 - UV beamline ( 2 - 10 eV nuovo setup )*

*SINBAD - IR beamline (1.24 meV to 1.24 eV  
aperta ad utenti)*

*DXUV - 2 new XUV beamlines (LEB: (35 - 200)  
eV- HEB: (60-1000) eV commissioning)*

*Ricerca e Luce di Sincrotrone*

# Imaging e spettro-microscopia usando radiazione IR



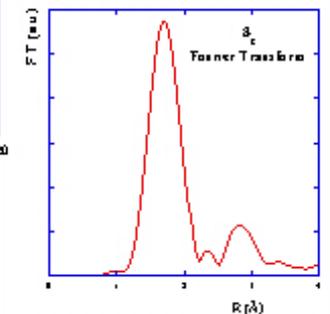
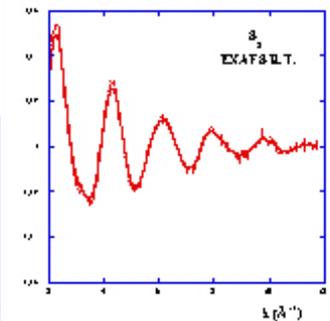
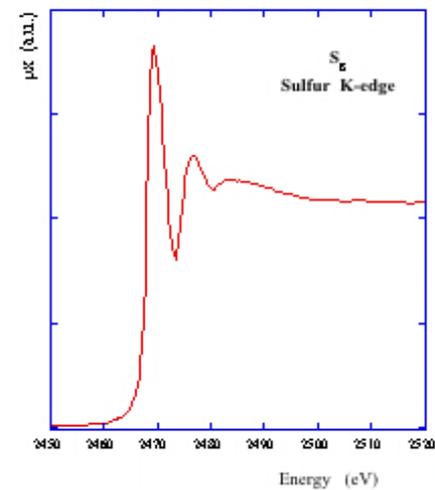
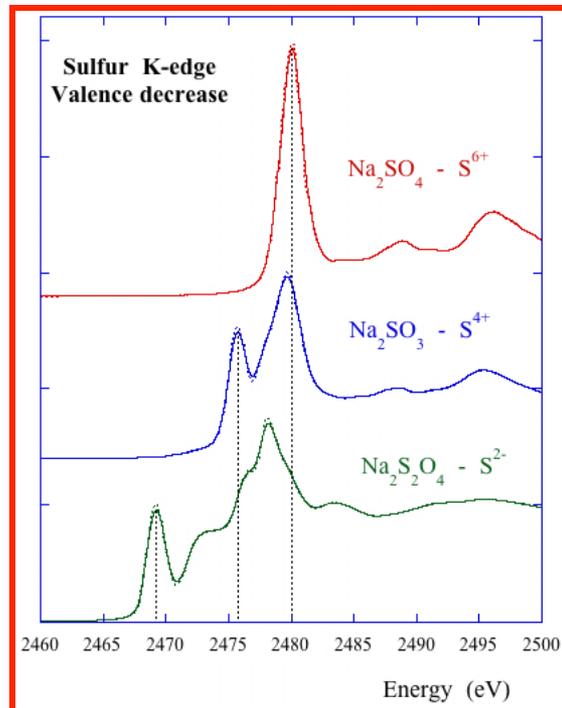
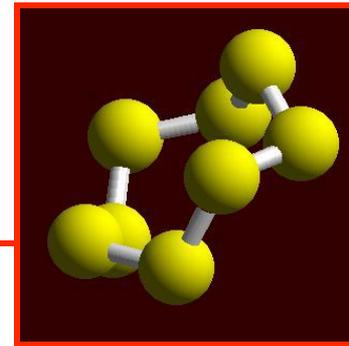
(a) Visible image of a **skeletal muscle connective tissue** showing insertion between endomysium and perimysium. The image size is  $170 \times 170 \mu\text{m}$ . (b) Infrared image of the tissue with  $1.3 \mu\text{m}$  pixel resolution representing the protein (amide I) band distribution. (c) A typical absorption spectra where different cell contributions are resolved: proteins (amide I @  $1715\text{-}1600 \text{ cm}^{-1}$ ) and lipids (fatty acyl chains @  $3020\text{-}2880 \text{ cm}^{-1}$ ).

**A bright future for synchrotron IR imaging**

C. Petibois, G. Deleris, M. Piccinini, M. Cestelli-Guidi, A. Marcelli,  
*Nature Photonics* 3, 179 (01 Apr 2009)

# Spettroscopie e raggi-x molli

| Crystal type  | 2d spacing (Å) | Energy range (eV) | Absorption edges     |
|---------------|----------------|-------------------|----------------------|
| Beryl (10-10) | 15.954         | 1000 - 1560       | Na K, Mg K, Cu L     |
| KTP (011)     | 10.950         | 1200 - 2200       | Mg K, Al K           |
| InSb (111)    | 7.481          | 1800 - 3100       | Si K, P K, S K, Cl K |
| Ge (111)      | 6.532          | 2100 - 3100       | P K, S K, Cl K       |



# *Applicazioni con radiazione UV e XUV*

- ❑ Particle experiments (using Cherenkov light)
  - ❑ Astro-particle experiments (using fluorescence light)
  - ❑ Astronomy experiments
  - ❑ Space experiments
    - Cosmic rays
    - Astronomy
    - Earth Observation
- ❑ Astrobiology and photo-biology
  - ❑ Optical technology
  - ❑ Detector technology
  - ❑ Instrumentation testing and calibration
  - Optical properties of materials

*XUV radiation fields of interest:*

*Biology*

*Surface Science*

*Material Science*

*R&D studies of INFN interest*

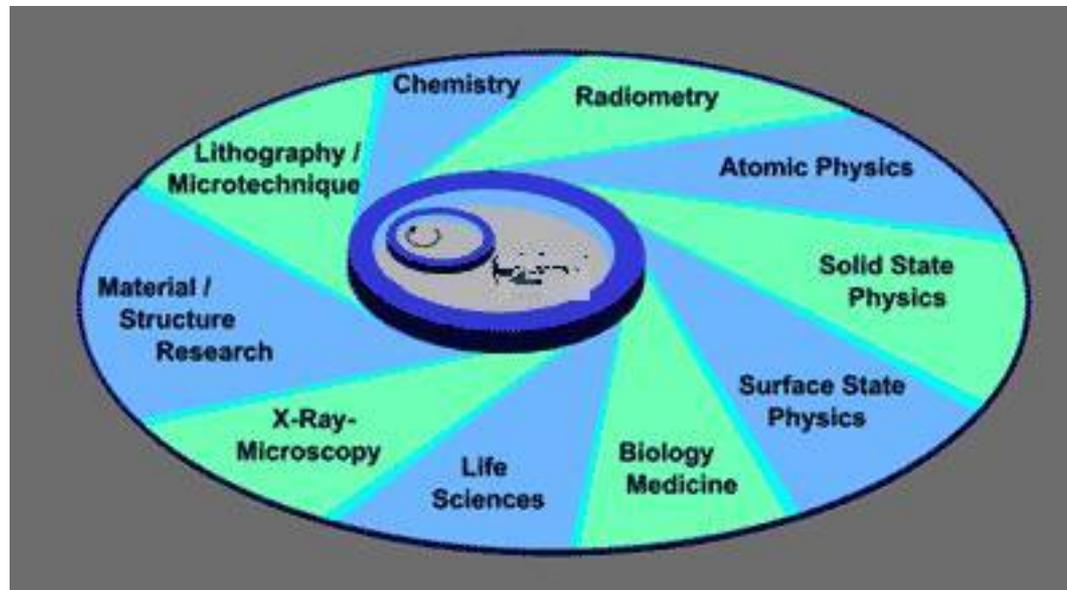
# Campi di ricerca

La luce di sincrotrone viene utilizzata per lo **studio delle proprietà dei materiali**, ad esempio magnetici o superconduttori, per l'analisi di **strutture biologiche**, quali proteine e virus, nel campo della **microelettronica e micromeccanica** e anche in **medicina**.

○ Chimica

○ Tecnologia

○ Scienze dei materiali



○ Fisica Atomica

○ Fisica dello Stato Solido

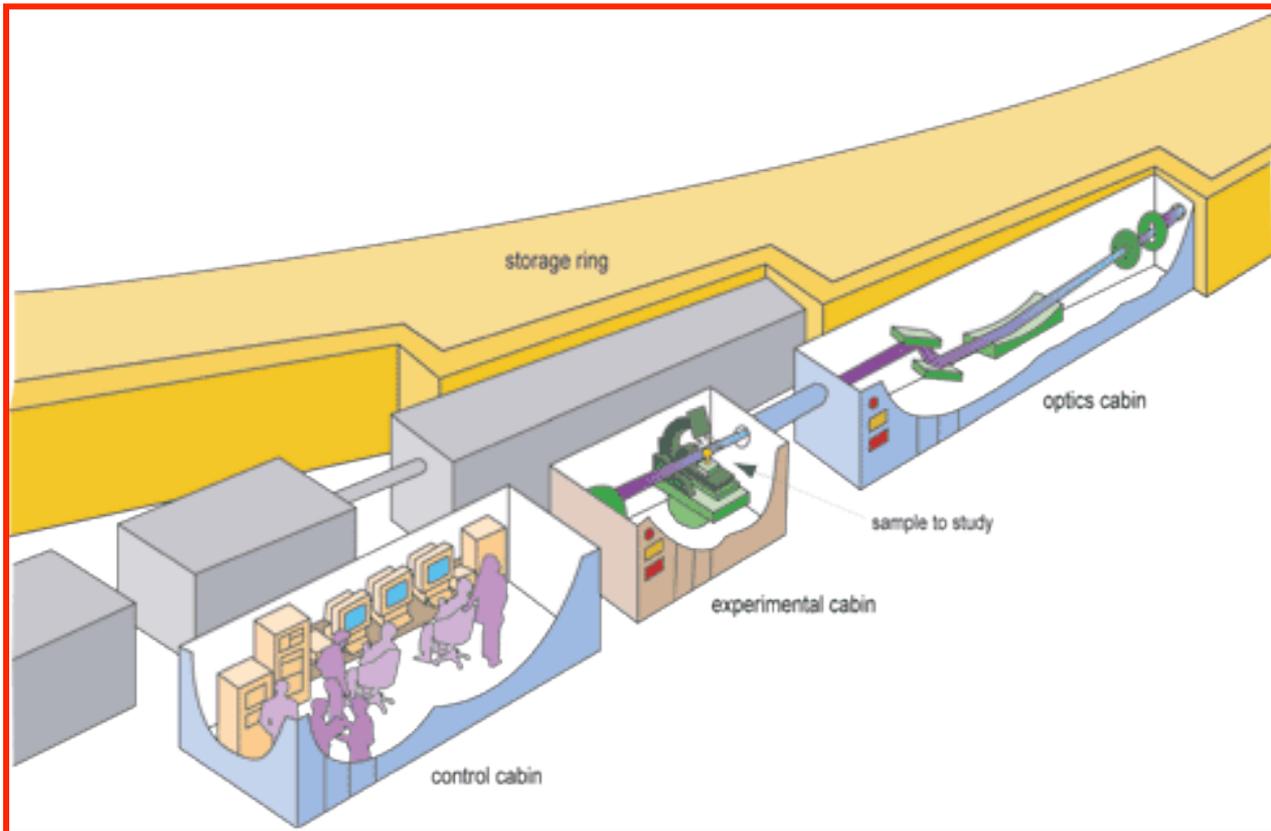
○ Scienze dell'ambiente

○ Medicina

○ Biologia

# Linee di luce o beamlines

La radiazione emessa da magneti curvanti,ondulatori e wiggler puo' essere ulteriormente 'specializzata' al tipo di attivita' di ricerca sperimentale o applicazione tecnologica che si intende svolgere.



I **sistemi ottici** che trasportano, focalizzano e rendono monocromatico il fascio prima che raggiunga la **camera sperimentale** (*linee di luce o beamlines*) sono costruiti in modo da fornire fotoni con caratteristiche specifiche per gli esperimenti progettati.

# *Linee di luce o beamlines*

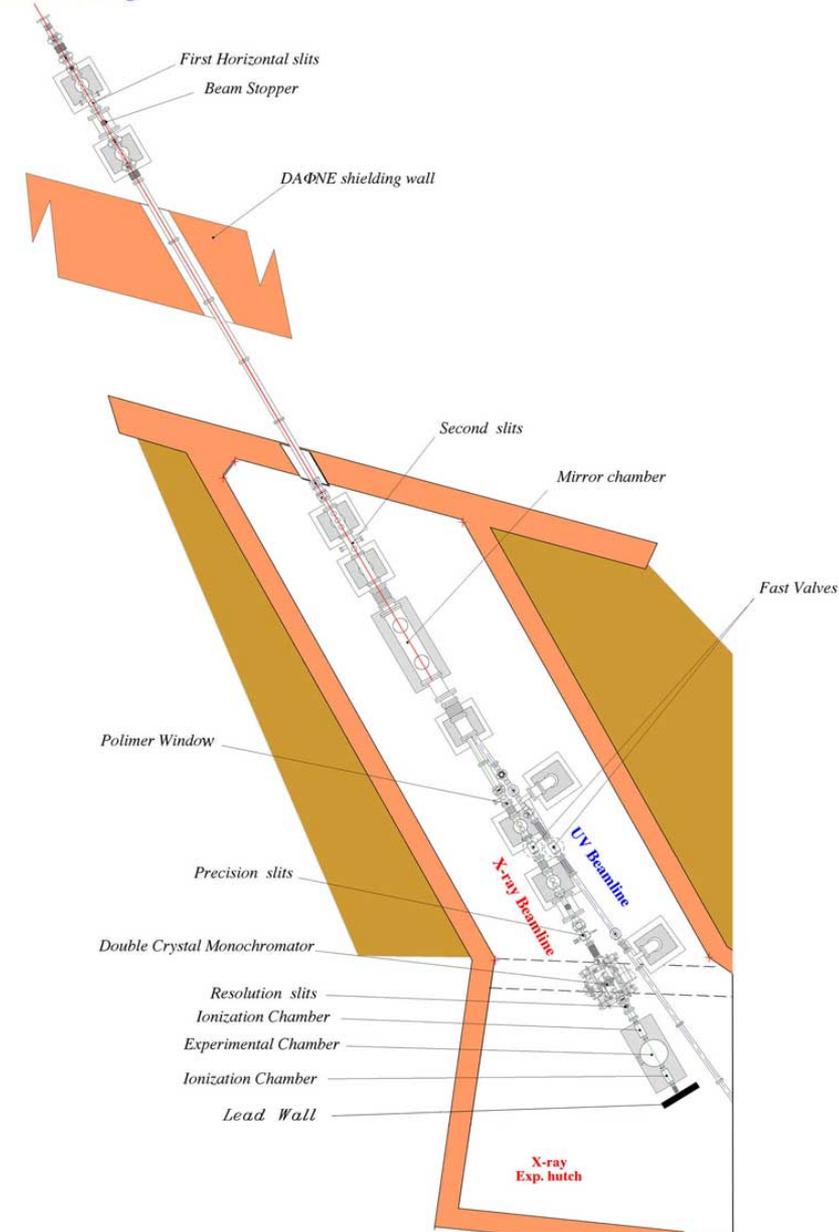
I parametri di interesse ossia intervallo di energie, risoluzione energetica, polarizzazione, coerenza, flusso, dimensioni dello spot, etc. non sono tutti ottimizzabili contemporaneamente.

Per un dato esperimento si potrà desiderare di:

- 1) *minimizzare il tempo di acquisizione* (studio di fenomeni cinetici)
- 2) *minimizzare le dimensioni del fascio di luce* (spettromicroscopie)
- 3) *massimizzare il potere risolutivo in energia* (spettroscopie in risonanza)
- 4) *avere il massimo flusso sul campione* (studio di sistemi diluiti)  
oppure scegliere una qualunque combinazione tra questi ed altri parametri di interesse.

Una volta *note le caratteristiche delle radiazione emessa dalla sorgente* disponibile, la *progettazione e la messa a punto di beamlines* per esperimenti specifici richiede un *notevole sforzo finanziario* ed una forte *capacità scientifica e tecnologica*.

DAΦNE Ring

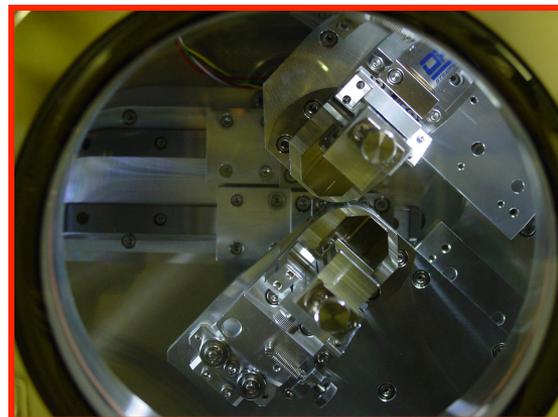
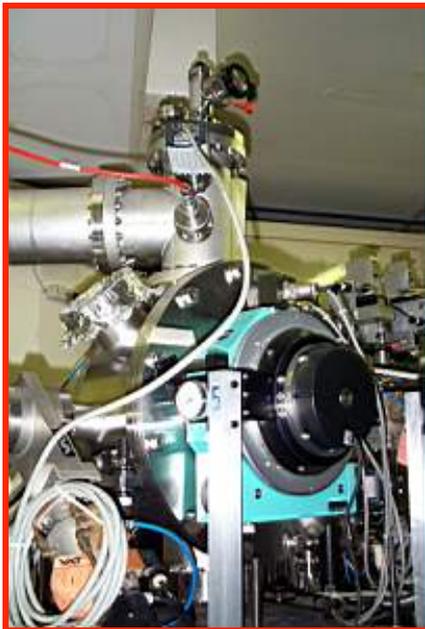


# DAΦNE-Luce Linea DXR1 Raggi X molli

*L'intervallo dei raggi X molli  
ossia lunghezza  
d'onda tra 0.3 nm e 5 nm  
riveste una particolare  
importanza come strumento di  
indagine poiche' **corrisponde  
alle dimensioni della  
struttura microscopica della  
materia** (atomi, molecole e  
strutture cristalline).*

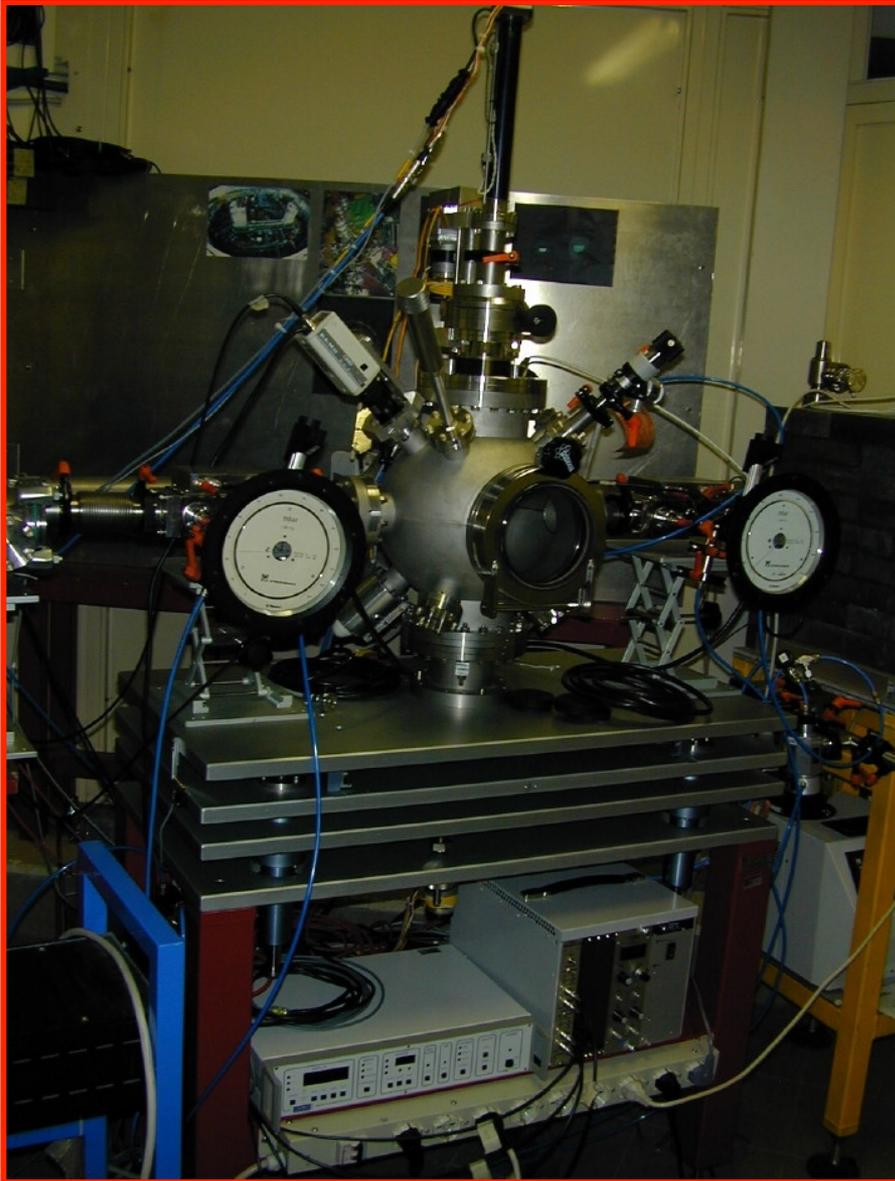
# Linea DXR1

Poiche' la linea di luce e' collegata all'anello di accumulazione, dove gli elettroni viaggiano in ultra alto vuoto tutti gli **elementi ottici sono inseriti in contenitori compatibili con l'alto vuoto** e tutti i movimenti meccanici sono spesso molto sofisticati proprio per le loro condizioni di funzionamento.



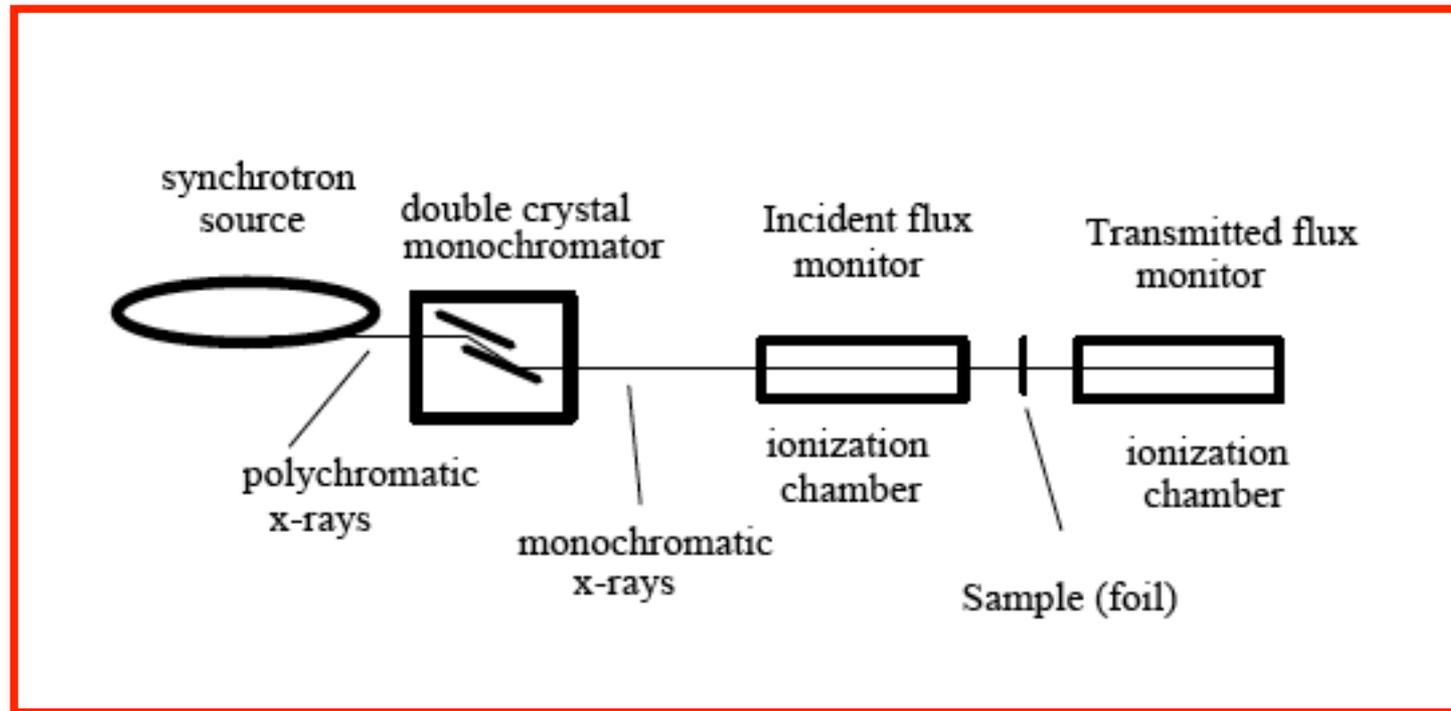
Elemento fondamentale della linea e' il **monocromatore**, cioe' un sistema che permette la selezione delle energie per il particolare esperimento progettato

# Linea DXR1



Altri elementi fondamentali sono i *rivelatori* e la *camera* nella quale verranno inseriti i *campioni* da studiare.

# *Schema della linea DXR1*



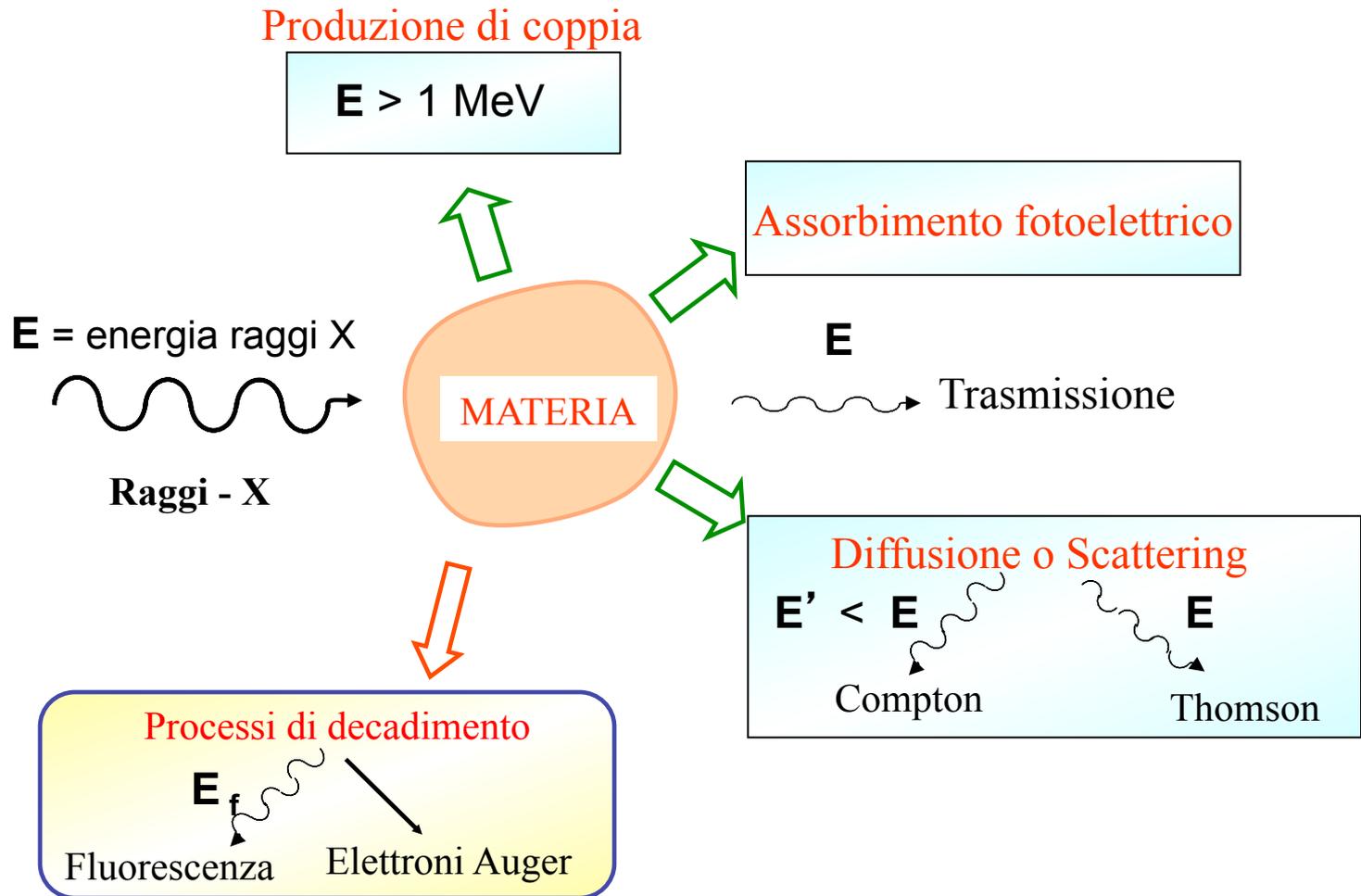
# *Interazione radiazione-materia*

Onde elettromagnetiche di *diversa frequenza*, manifestano *interazioni con la materia profondamente diverse*.

La materia e' composta di *atomi di vario tipo*. Gli *atomi a loro volta sono composti da nuclei* di *protoni* (cariche elettriche positive) e *neutroni* (particelle prive di carica elettrica) e dagli *elettroni*.

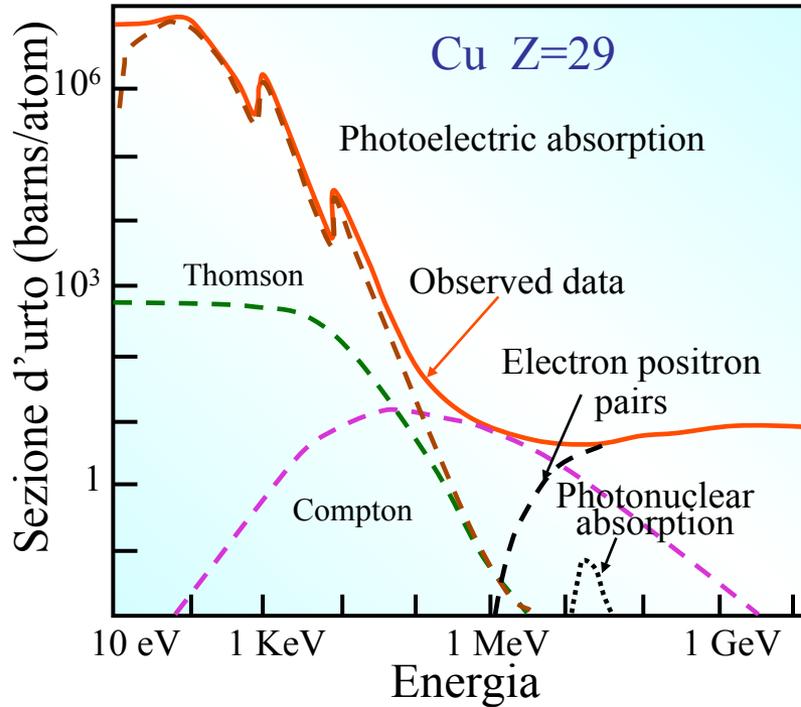
Prendiamo in considerazione l'interazione dei *raggi X con la materia*.

# Interazione Raggi X - Materia



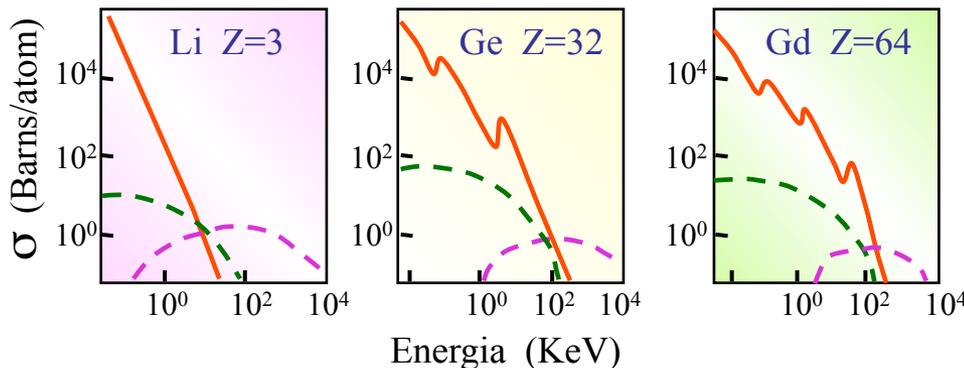
Nell'interazione fra raggi X e materia si possono verificare diversi processi: **l'effetto fotoelettrico**, la **diffusione elastica** (Thomson), la **diffusione anelastica** (Compton) e la **creazione di coppie elettrone-positrone**.

# Sezioni d'urto - $\sigma$



La sezione d'urto  $\sigma$  misura la probabilità che si verifichi un certo processo d'interazione.

$\sigma$  è funzione dell'energia e nel **intervallo delle energie dei raggi X il processo dominante è quello fotoelettrico.**



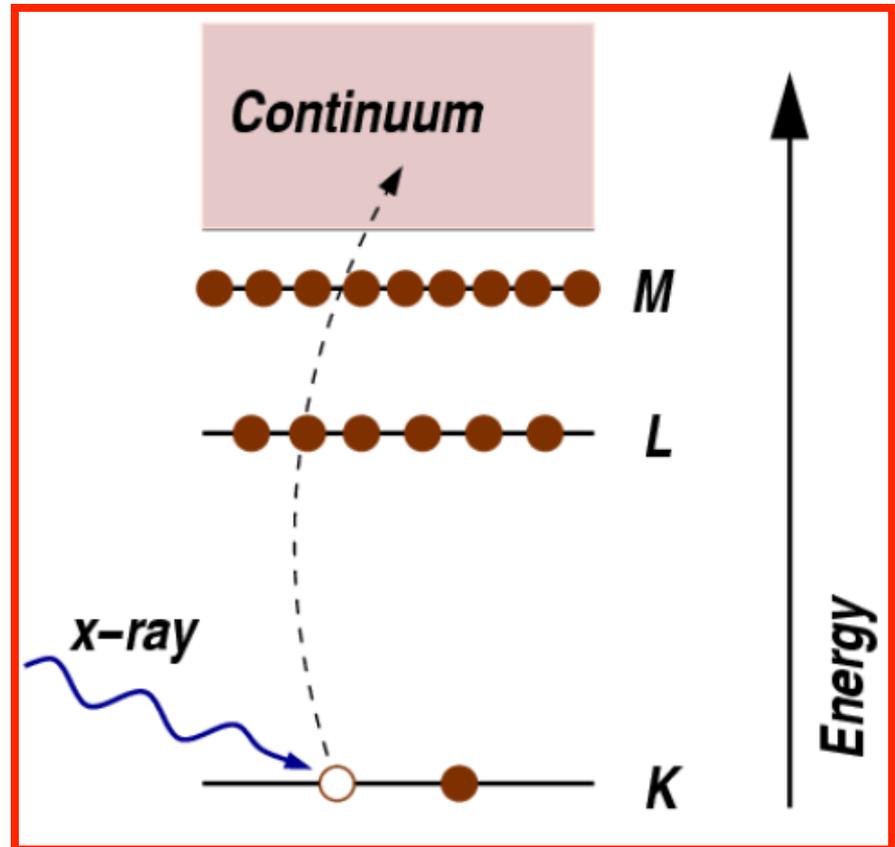
# Assorbimento dei raggi X

Nel **processo fotoelettrico** i raggi X **vengono assorbiti dagli atomi**.

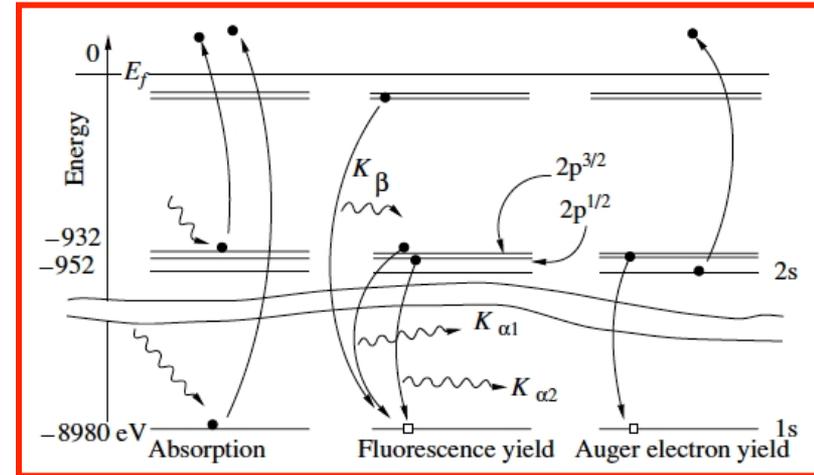
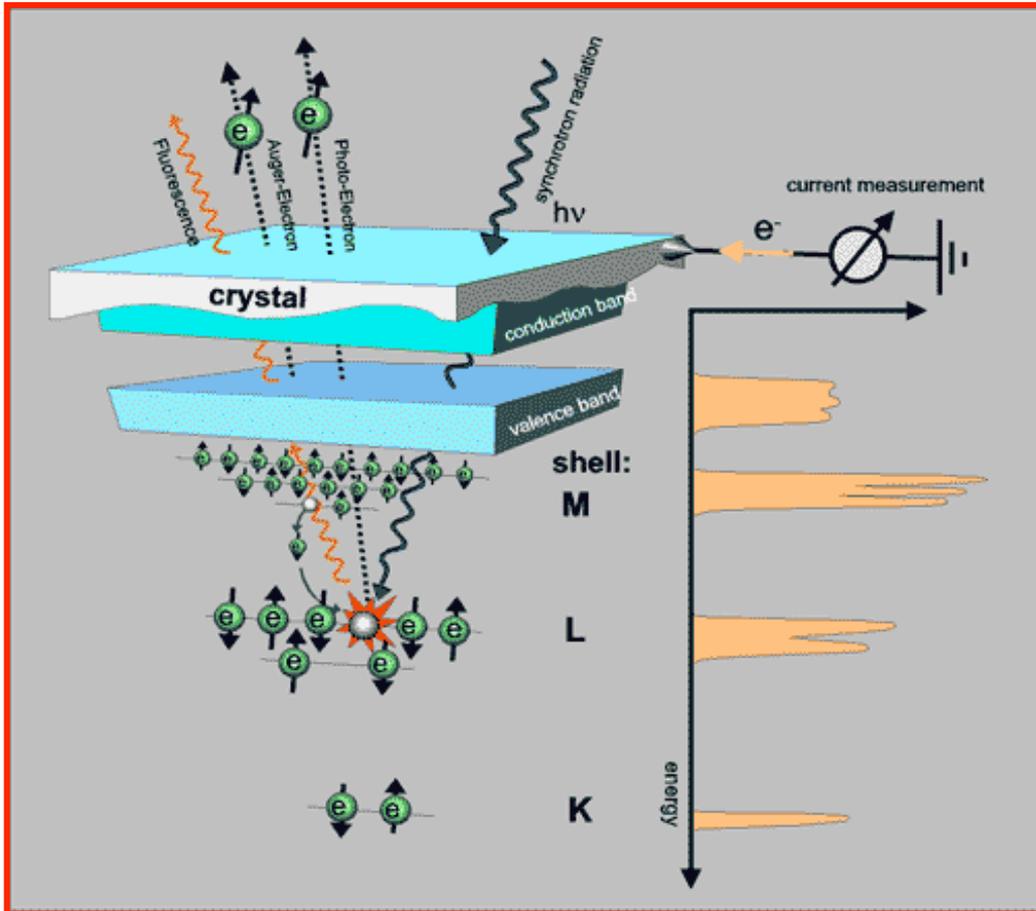
Nell'atomo questo causa la **transizione di un elettrone** (fotoelettrone) ad **uno stato non legato**.

Affinché questo accada **l'energia della radiazione incidente  $E$**  deve essere **maggiore all'energia di legame  $E_0$**  dell'elettrone.

La differenza  **$E - E_0$**  rappresenta **l'energia cinetica del fotoelettrone**.



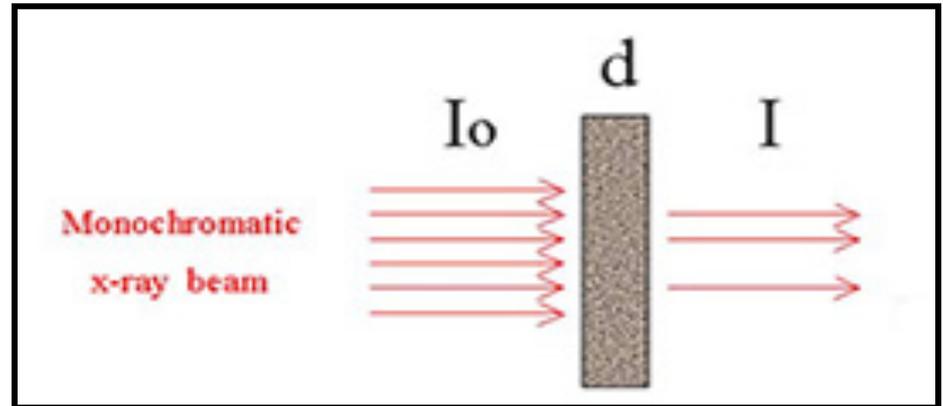
# Effetto fotoelettrico



**Assorbimento e processi di ricombinazione: XRF e AES**

# *Coefficiente di Assorbimento*

*Un fascio di raggi X monocromatico, di intensità  $I_0$ , che attraversi uno strato di **materiale di spessore  $d$**  viene assorbito secondo una nota legge:*



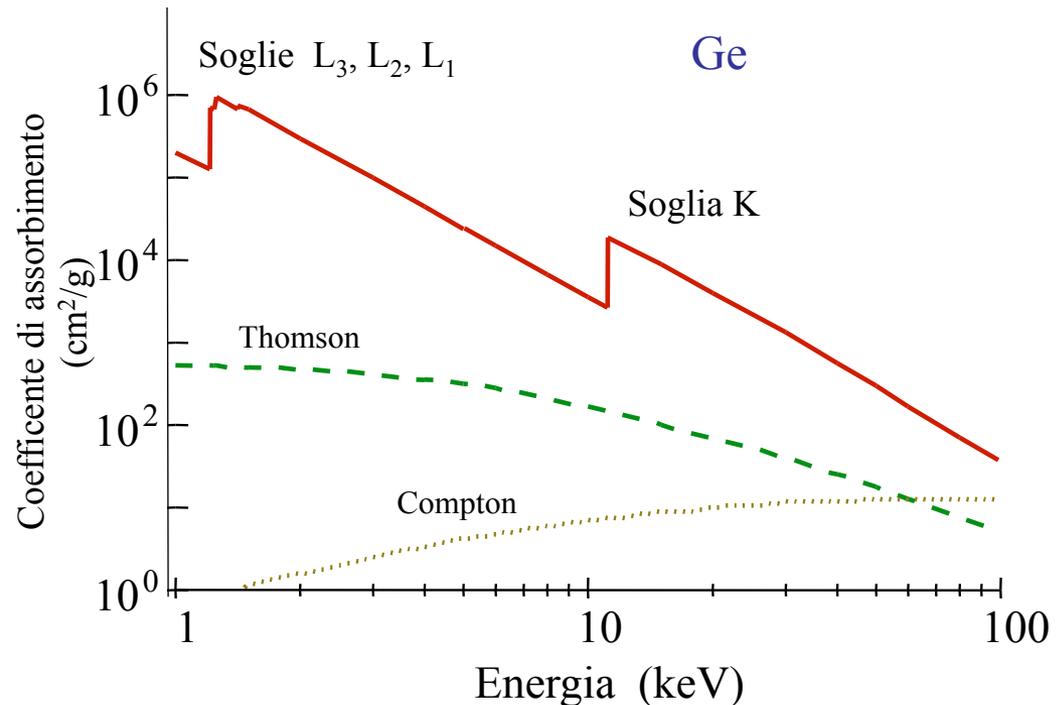
$$I = I_0 e^{-\mu(E)d}$$

*Dove  $I$  è l'intensità trasmessa dallo strato attraversato,  $\mu$  dipende dal materiale e dall'energia  $E$  ed è noto come **coefficiente di assorbimento**.*

# Soglie di assorbimento

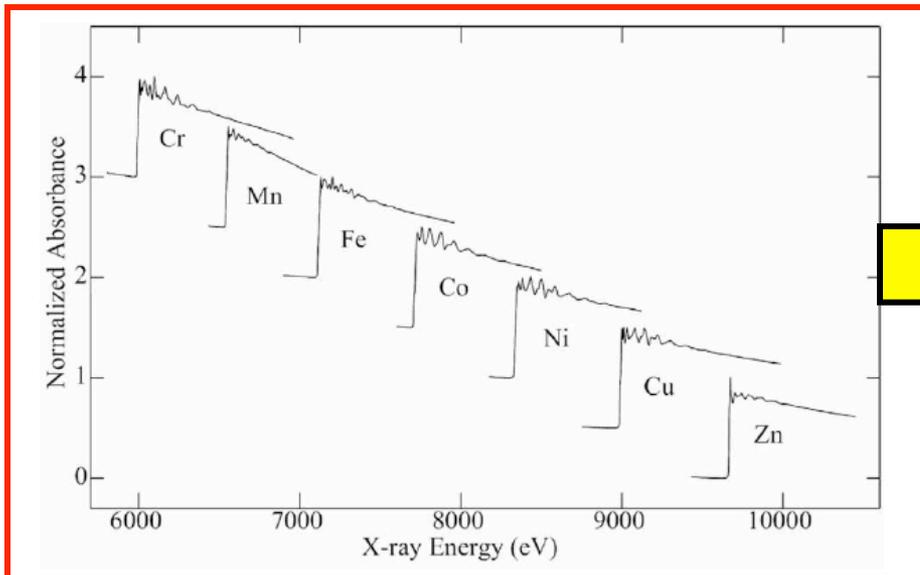
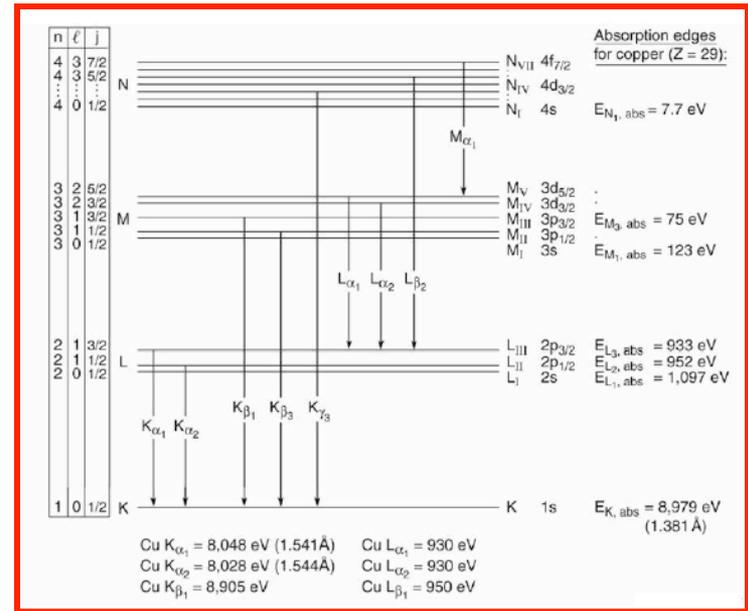
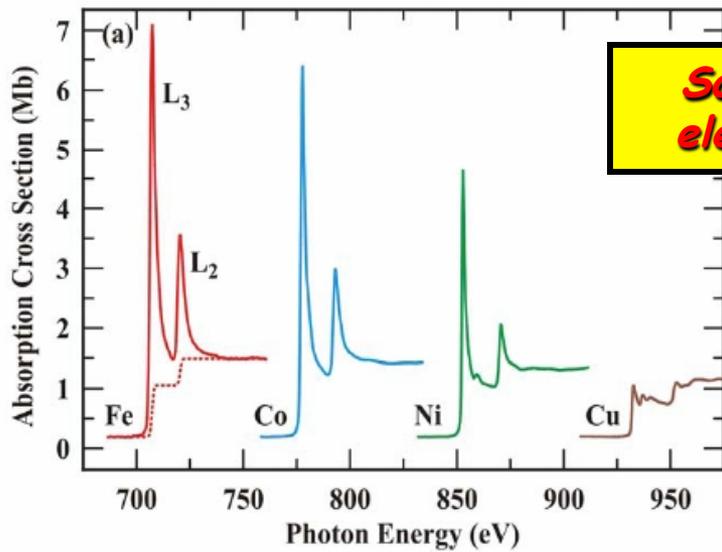
La dipendenza dalla energia del coefficiente di assorbimento è monotona decrescente tranne che in corrispondenza di alcune energie discrete in cui compaiono delle brusche discontinuità dette **soglie di assorbimento**.

Le posizioni in energia delle soglie corrispondono alle energie di legame  $E_0$ .



Quando **l'energia dei raggi X** è sufficiente ad eccitare un **elettrone 1s** del livello elettronico più profondo, si parla di **soglie K**, se si verifica una transizione al continuo di un **elettrone 2s** o **2p** si parla di **soglie L** e così' via.

# Soglie di assorbimento



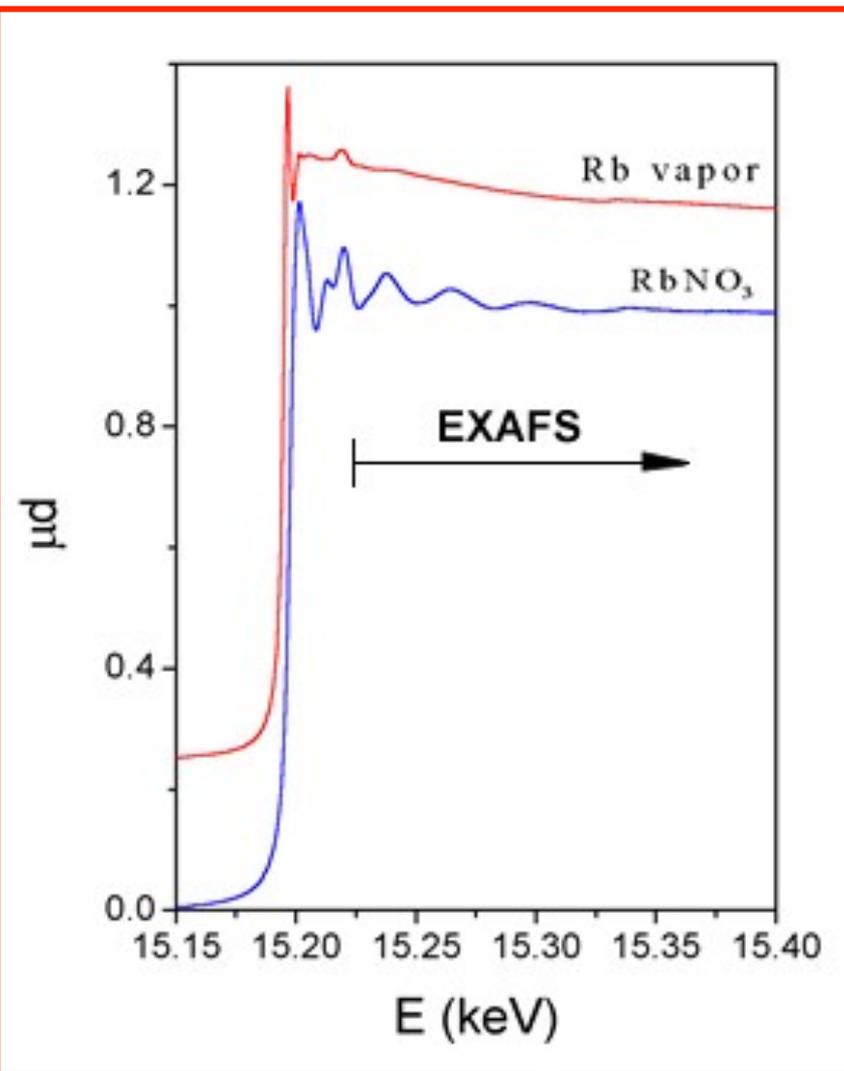
## Soglie di assorbimento Cu

## Soglie K elementi 3d

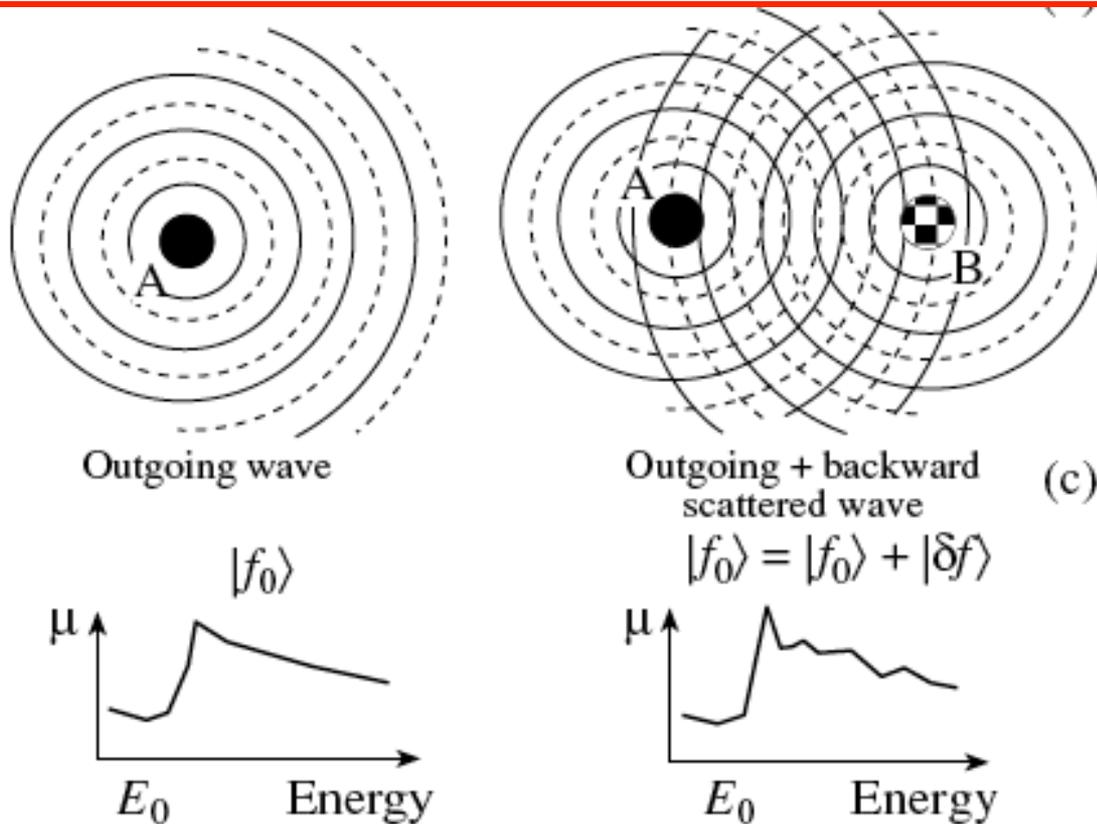
# XAFS - X ray Absorption Fine Structure

Nella materia condensata un esame attento delle singole soglie di assorbimento, in un intervallo che puo' estendersi fino a oltre 1000 eV dopo la soglia, mostra la presenza di una struttura fine oscillante a cui e' stato dato il nome di XAFS.

Questa struttura oscillante e' assente nei gas monoatomici. Questo indica che essa e' dovuta alla interazione del fotoelettrone dell'atomo assorbitore con gli atomi circostanti.



# Origine della Struttura Fine

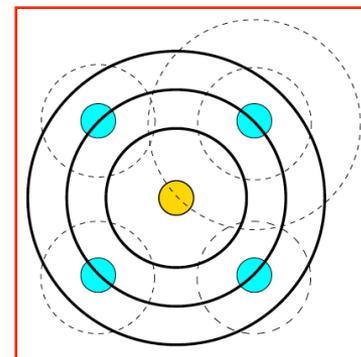
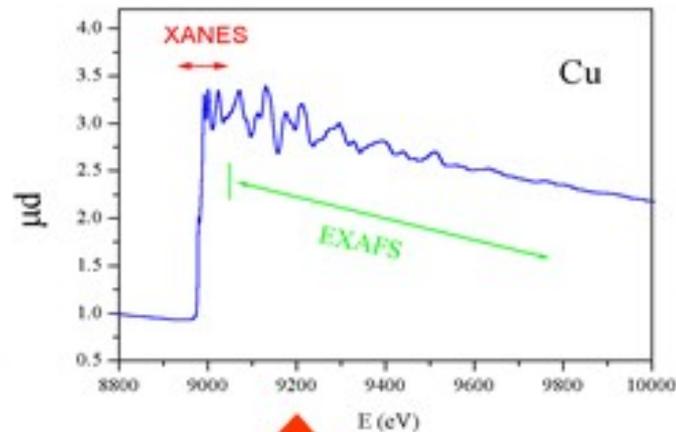
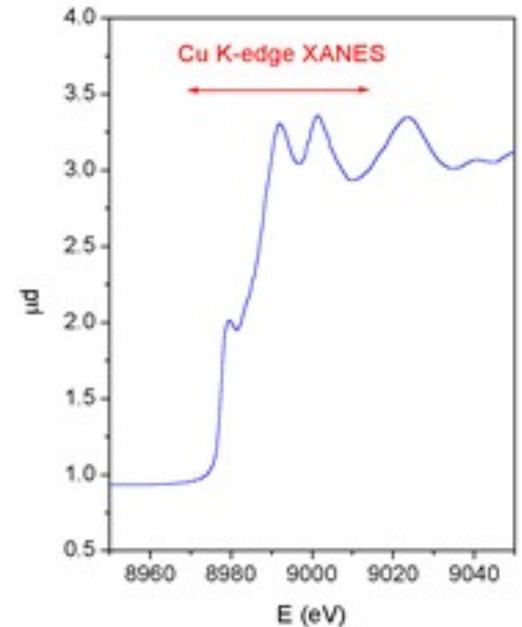
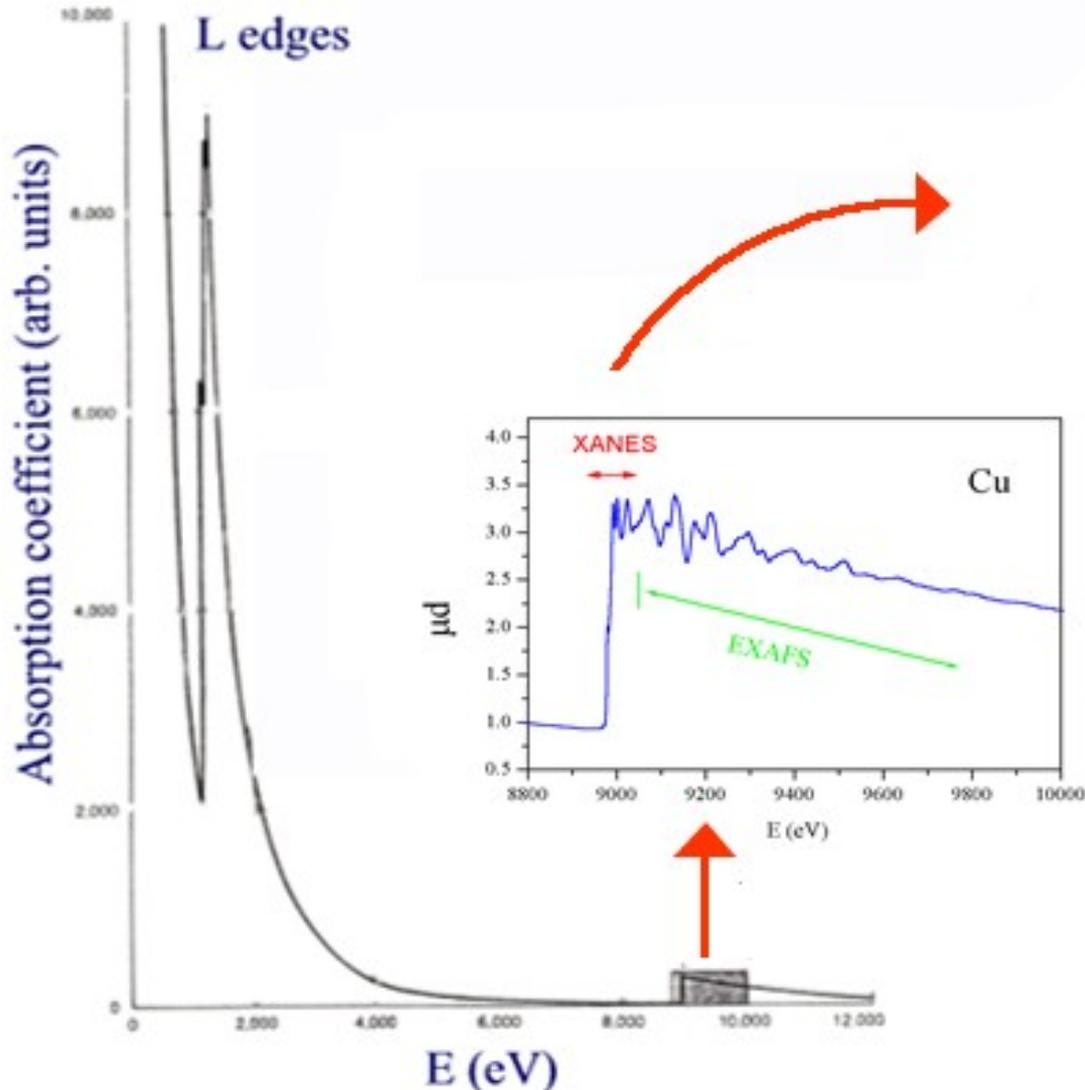


In sistemi monoatomici l'elettrone che si allontana dall'atomo assorbitore puo' essere visto come una **onda sferica**.

Nei sistemi poliatomici la **struttura fine** che si osserva e' dovuta alla **interferenza tra funzione d'onda del fotoelettrone uscente dall'atomo assorbitore e quella diffusa dagli atomi vicini**.

Il fenomeno di interferenza dipende dall'ambiente che circonda l'atomo assorbitore ed e' funzione dell'energia: grazie a questo fenomeno la **struttura fine custodisce informazioni strutturali locali**.

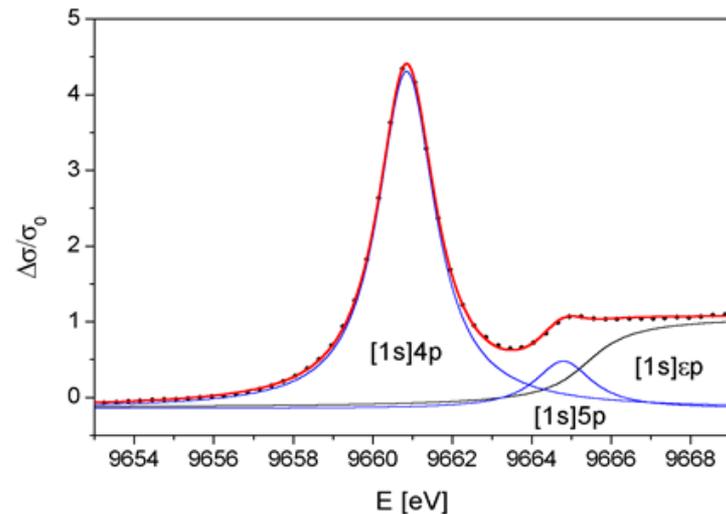
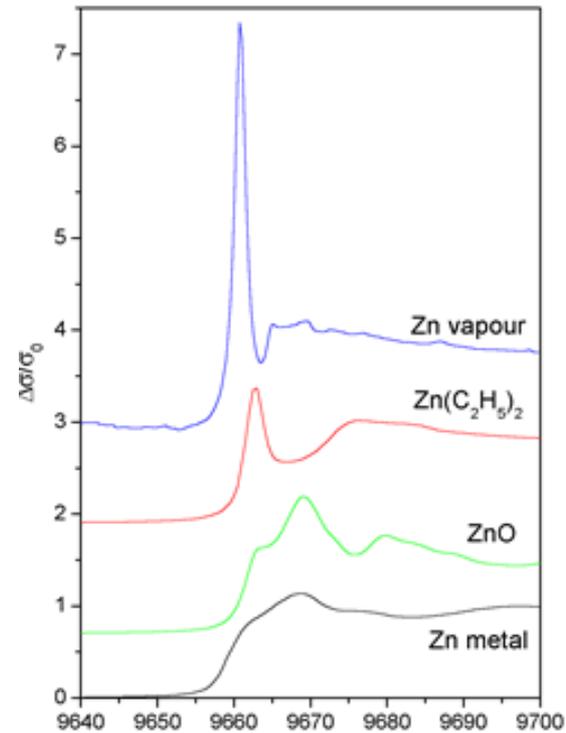
# XAFS - XANES & EXAFS



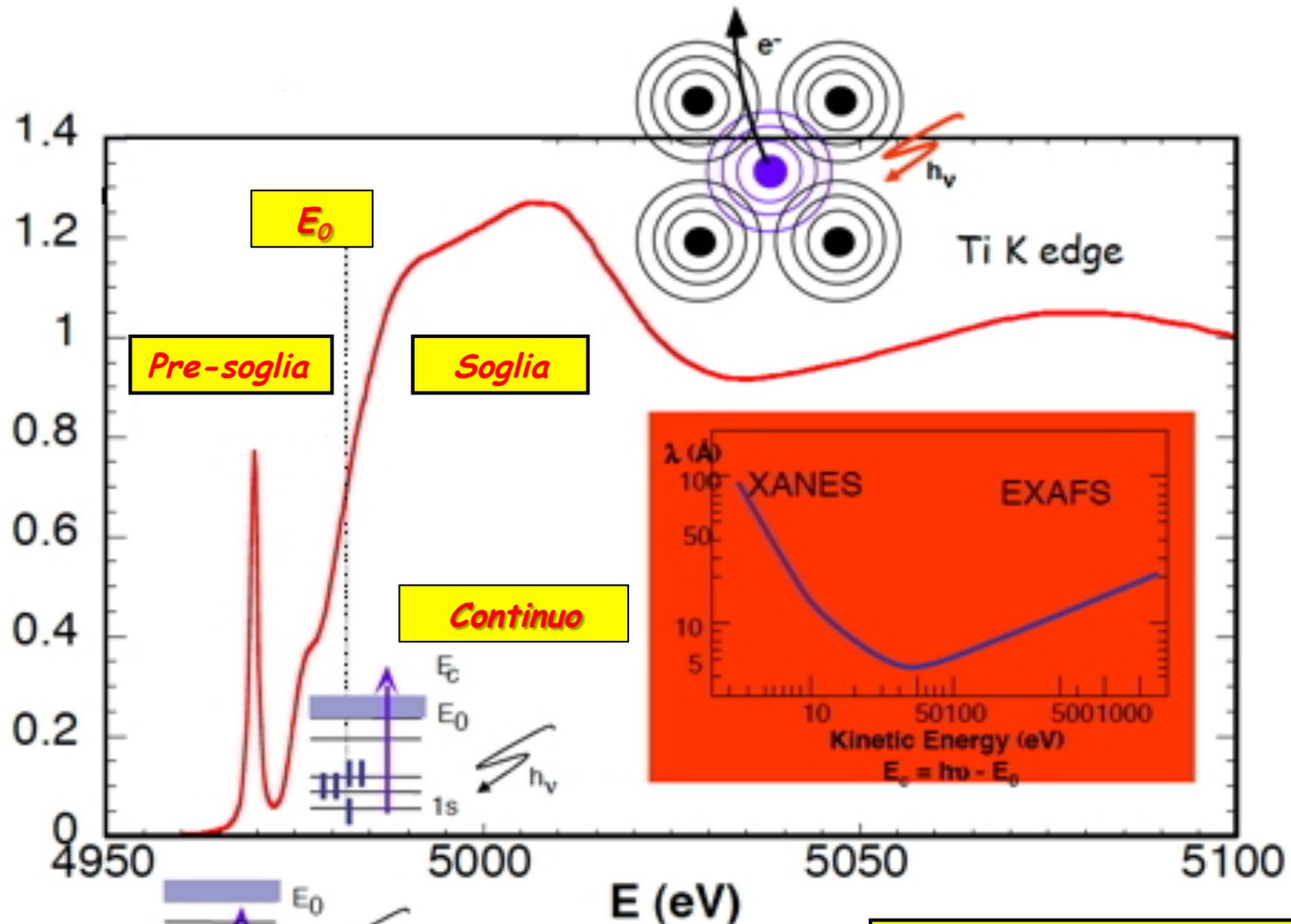
# XANES

La zona vicino alla soglia (edge) di assorbimento prende il nome di **XANES** o **X-ray Absorption Near Edge Structure**. Essa e' copre l'intervallo energetico da **pochi eV prima della soglia a circa 50 eV dopo la soglia**. In questo intervallo il fotoelettrone ha energia confrontabile ai livelli elettronici liberi.

Di fatto le XANES danno molte informazioni e permettono di studiare sia le **strutture elettroniche** atomiche che quelle della parte bassa della banda di conduzione.



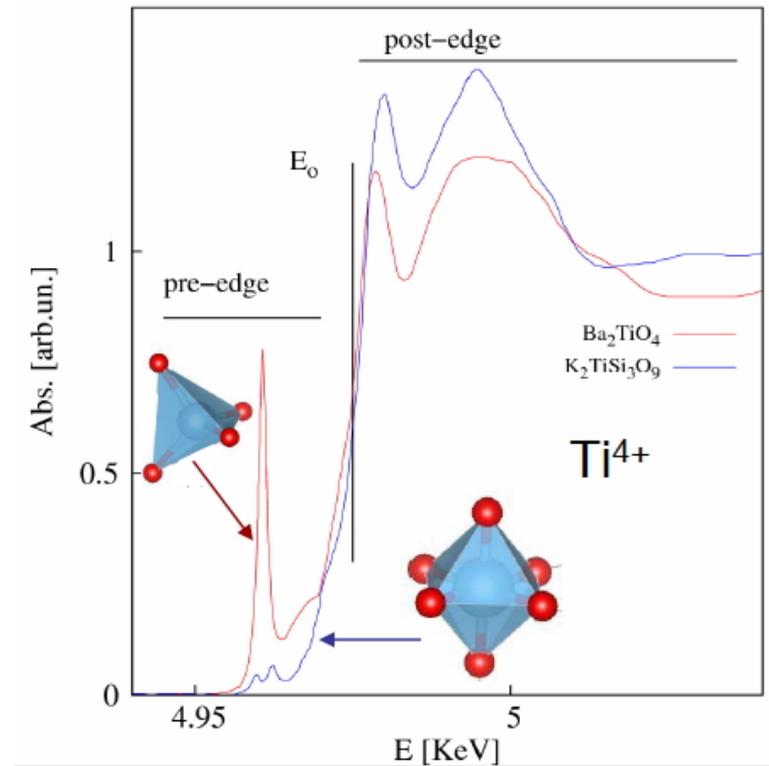
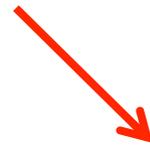
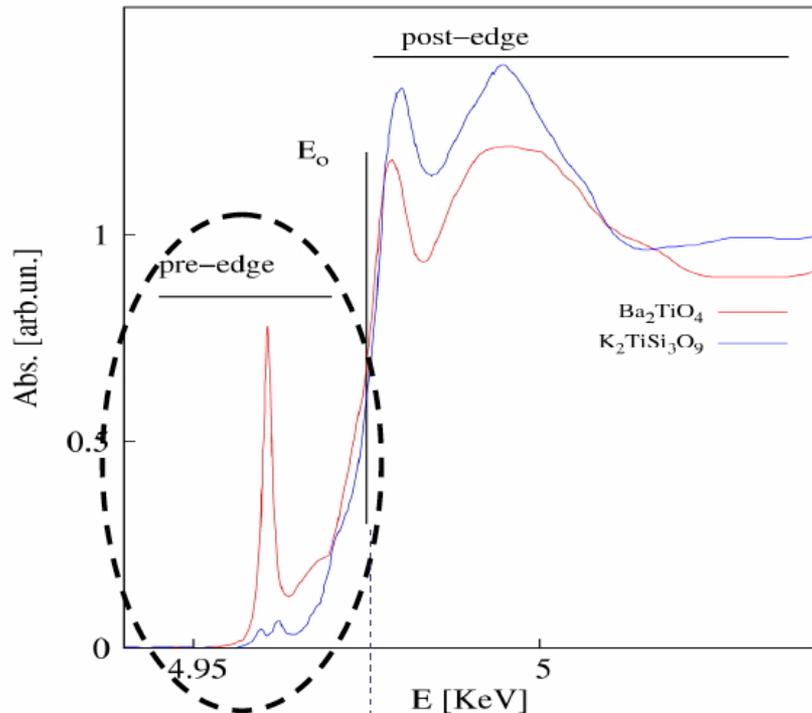
# Definizioni relative alle XANES



Stati localizzati

N.B.:  $E_0$  non definisce il livello di Fermi !

# Regione di pre-soglia



**Transizioni elettroniche a stati vicino al livello di Fermi: danno informazioni sulla struttura geometrica locale attorno all'atomo assorbitore**

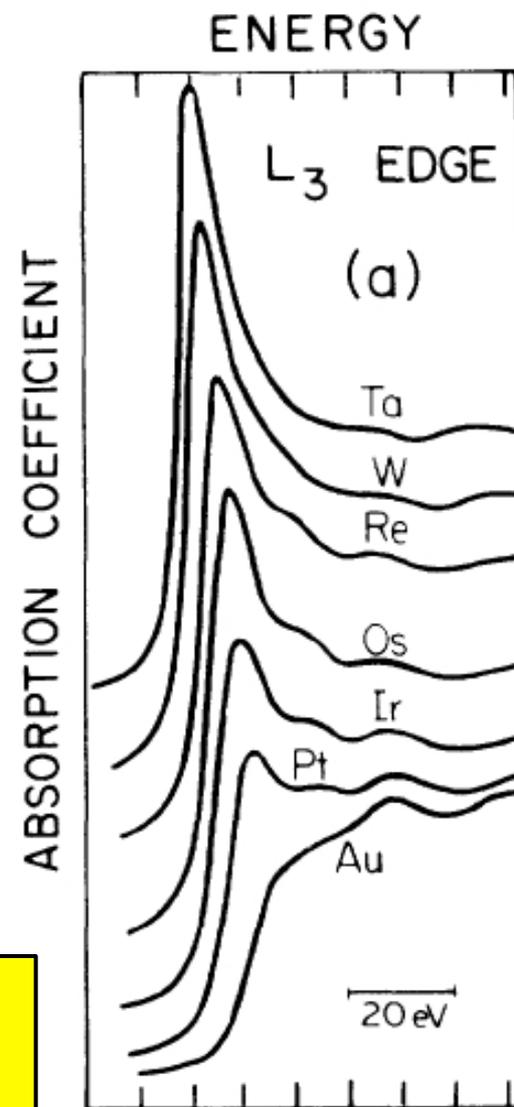
**In presenza di transizioni  $s \rightarrow p$  (soglia K) e struttura tetraedrica (non centrosimmetrica), ibridizzazioni tra livelli p e d rendono possibili transizioni di dipolo da cui dipende l'intensita' del picco pre-soglia.**

# Regione di soglia

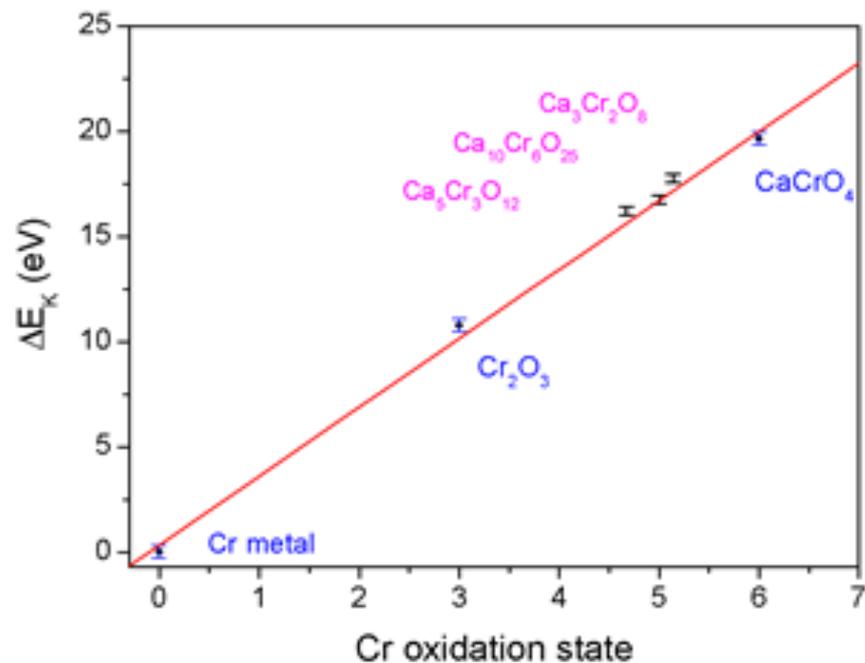
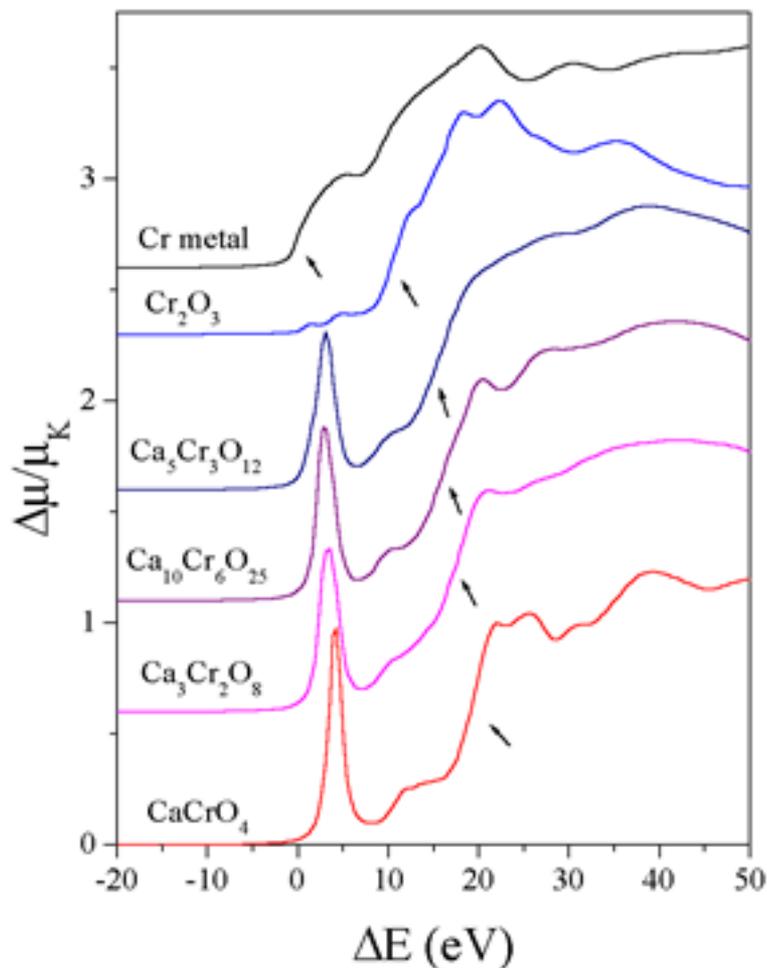
L'aumento della intensità del picco della soglia  $L_3$  noto come 'white line' fornisce, per gli elementi 4d e 5d, informazioni sulla occupazione dei livelli d.

| IA       | IIA   | IIIB  | IVB      | VB     | VIB    | VIB    | VIII     | VIII   | VIII   | IB    | IIB   | IIIA     | IVA    | VA     | VIA    | VIA    | VIIIA |
|----------|-------|-------|----------|--------|--------|--------|----------|--------|--------|-------|-------|----------|--------|--------|--------|--------|-------|
| 1 H      |       |       |          |        |        |        |          |        |        |       |       |          |        |        |        |        | 2 He  |
| 3 Li     | 4 Be  |       |          |        |        |        |          |        |        |       |       | 5 B      | 6 C    | 7 N    | 8 O    | 9 F    | 10 Ne |
| 11 Na    | 12 Mg |       |          |        |        |        |          |        |        |       |       | 13 Al    | 14 Si  | 15 P   | 16 S   | 17 Cl  | 18 Ar |
| 19 K     | 20 Ca | 21 Sc | 22 Ti    | 23 V   | 24 Cr  | 25 Mn  | 26 Fe    | 27 Co  | 28 Ni  | 29 Cu | 30 Zn | 31 Ga    | 32 Ge  | 33 As  | 34 Se  | 35 Br  | 36 Kr |
| 37 Rb    | 38 Sr | 39 Y  | 40 Zr    | 41 Nb  | 42 Mo  | 43 Tc  | 44 Ru    | 45 Rh  | 46 Pd  | 47 Ag | 48 Cd | 49 In    | 50 Sn  | 51 Sb  | 52 Te  | 53 I   | 54 Xe |
| 55 Cs    | 56 Ba | 57 La | 72 Hf    | 73 Ta  | 74 W   | 75 Re  | 76 Os    | 77 Ir  | 78 Pt  | 79 Au | 80 Hg | 81 Tl    | 82 Pb  | 83 Bi  | 84 Po  | 85 At  | 86 Rn |
| 87 Fr    | 88 Ra | 89 Ac | 104 Rf   | 105 Db | 106 Sg | 107 Bh | 108 Hs   | 109 Mt | 110 Ds |       |       |          |        |        |        |        |       |
|          |       |       | 58 Ce    | 59 Pr  | 60 Nd  | 61 Pm  | 62 Sm    | 63 Eu  | 64 Gd  | 65 Tb | 66 Dy | 67 Ho    | 68 Er  | 69 Tm  | 70 Yb  | 71 Lu  |       |
|          |       |       | 90 Th    | 91 Pa  | 92 U   | 93 Np  | 94 Pu    | 95 Am  | 96 Cm  | 97 Bk | 98 Cf | 99 Es    | 100 Fm | 101 Md | 102 No | 103 Lr |       |
| Groupe s |       |       | Groupe p |        |        |        | Groupe d |        |        |       |       | Groupe f |        |        |        |        |       |

L'intensità del picco di soglia aumenta al decrescere dell'occupazione dei livelli d. In Au i livelli 5d sono pieni.  
*Phys. Rev. B 36 (1987) 2972*

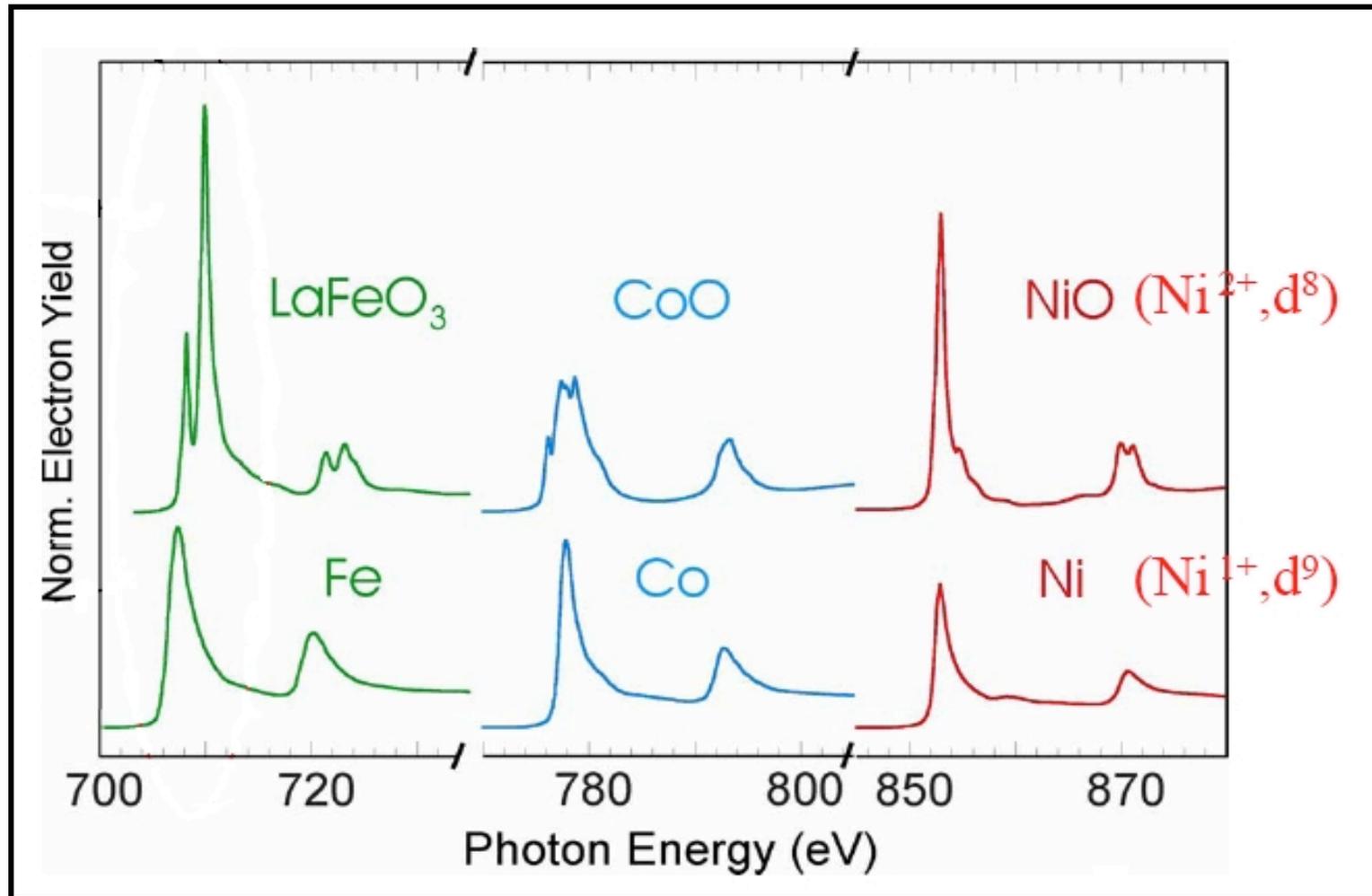


# *XANES e stati di ossidazione*



Le **XANES** sono sensibili al tipo di **legame chimico**.

# *XANES e chimica*



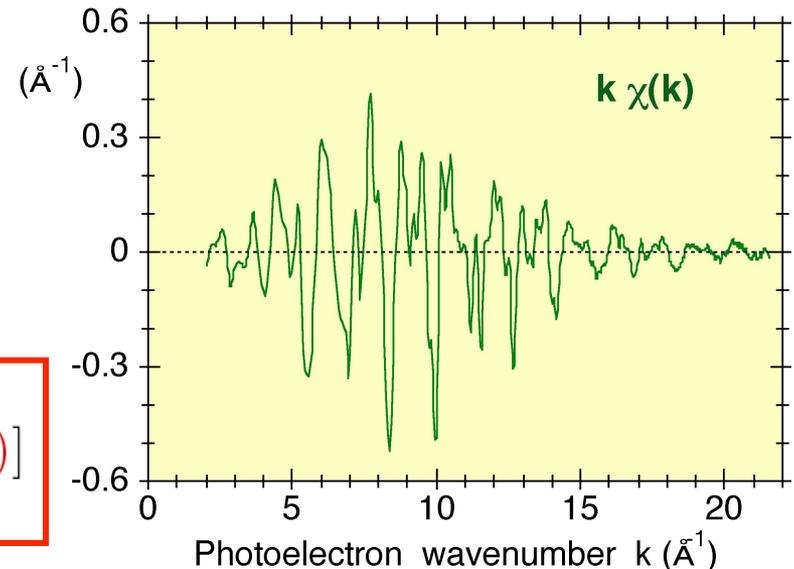
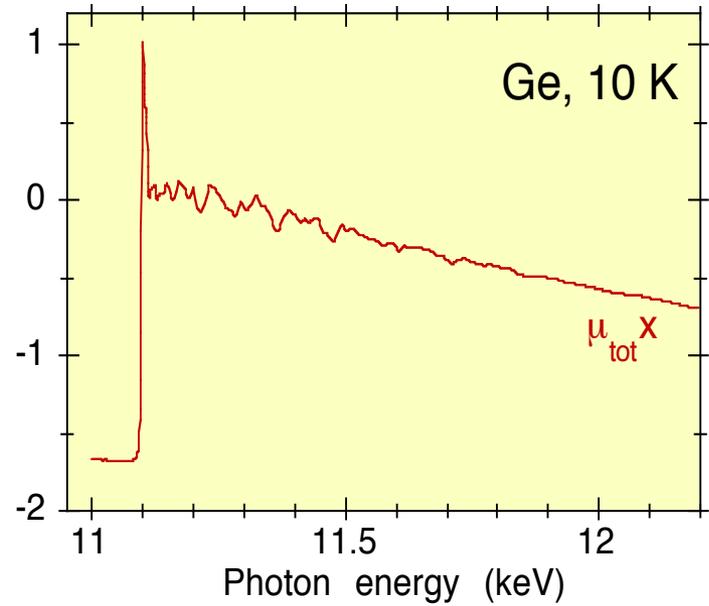
Le **XANES** sono sensibili al tipo di **legame chimico**.

# EXAFS

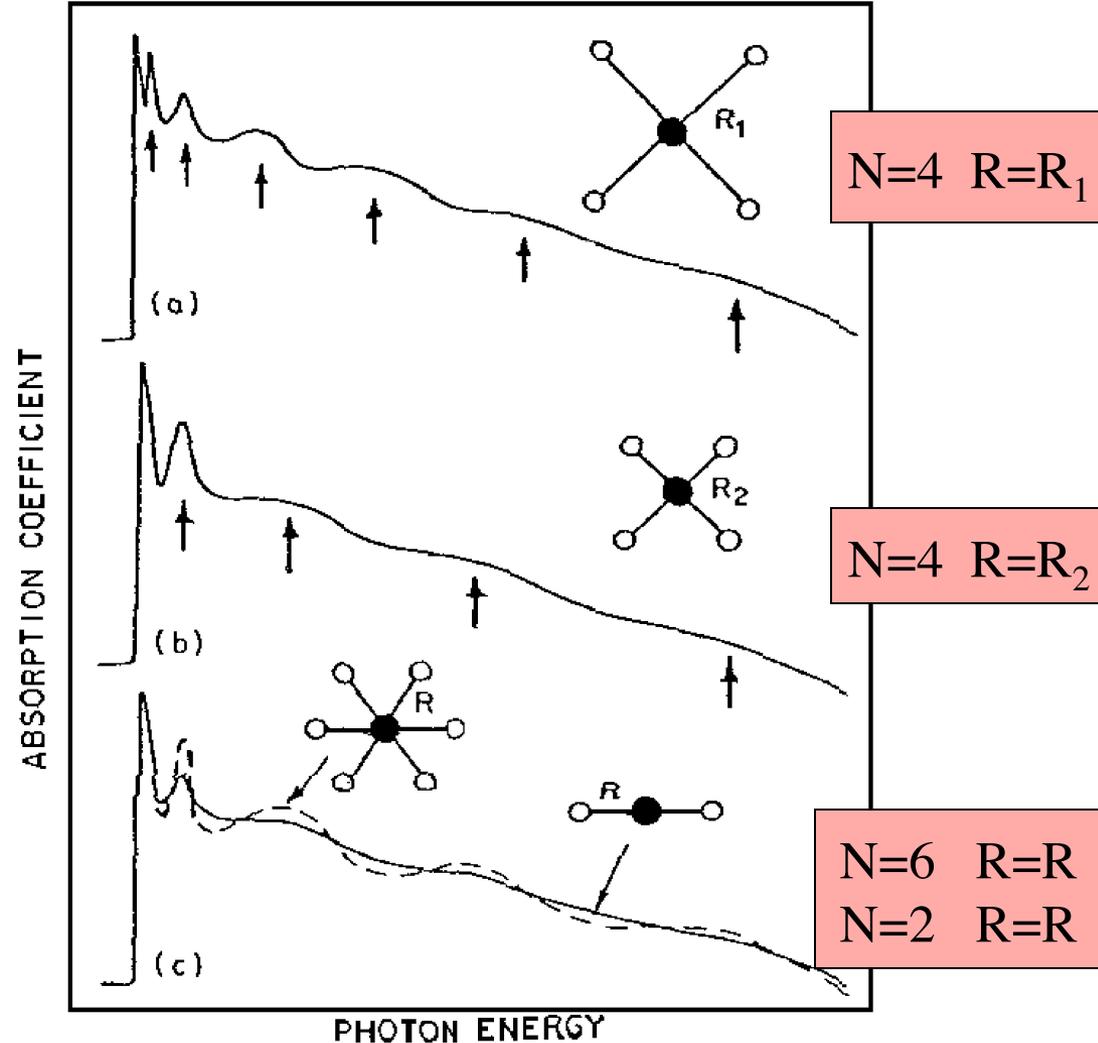
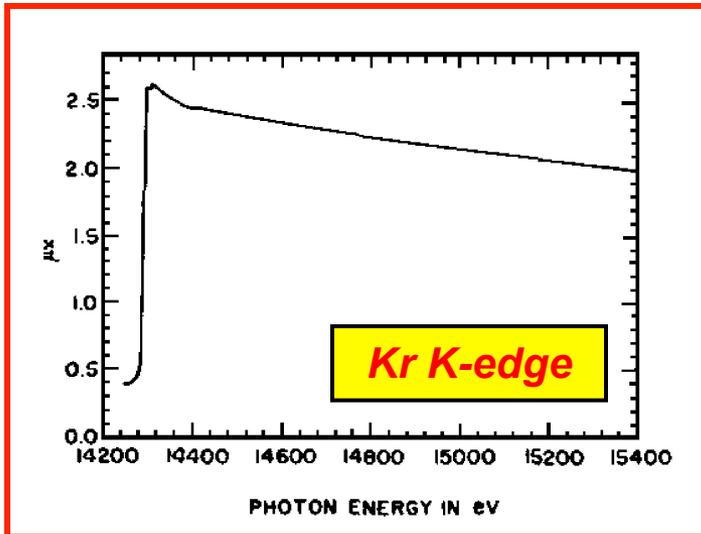
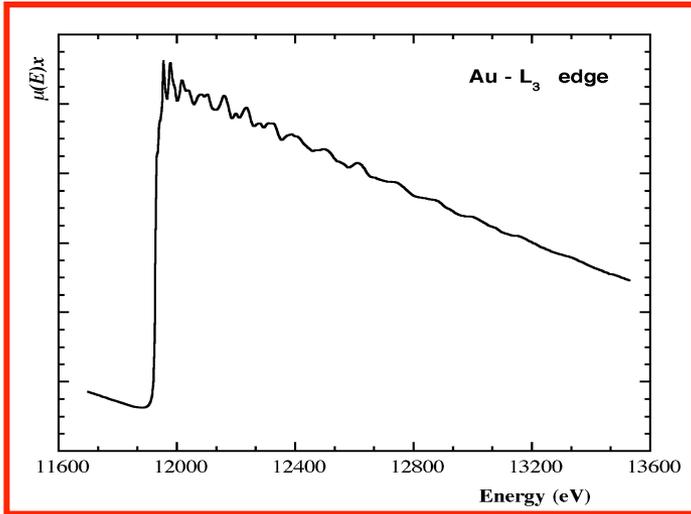
La parte che si estende lontano dalla soglia di assorbimento e' denominata **EXAFS** o **Extended X-ray Absorption Fine Structure**

La struttura EXAFS e' in grado di fornire informazioni sulle **distanze** interatomiche tra l'atomo assorbitore e i suoi vicini (**R**), sul tipo e **numero** di vicini (**N**), sul loro **disordine** termico e strutturale ( $\sigma^2$ ) e anche sugli **angoli di legame**.

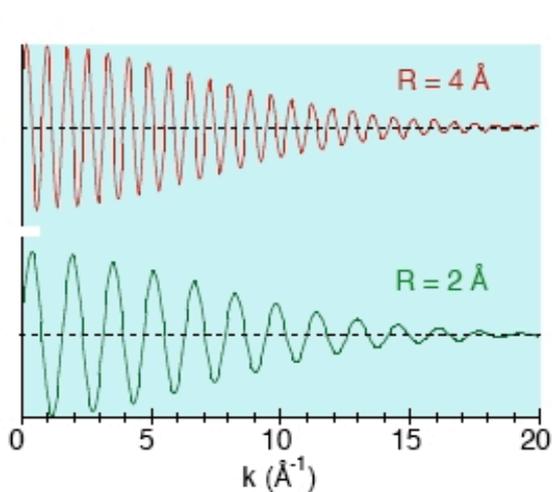
$$\chi(k) = \sum_j \frac{N_j f_j(k) e^{-2k^2 \sigma_j^2}}{k R_j^2} \sin[2kR_j + \delta_j(k)]$$



# Informazioni strutturali ed osservazione dei dati



# Informazioni strutturali

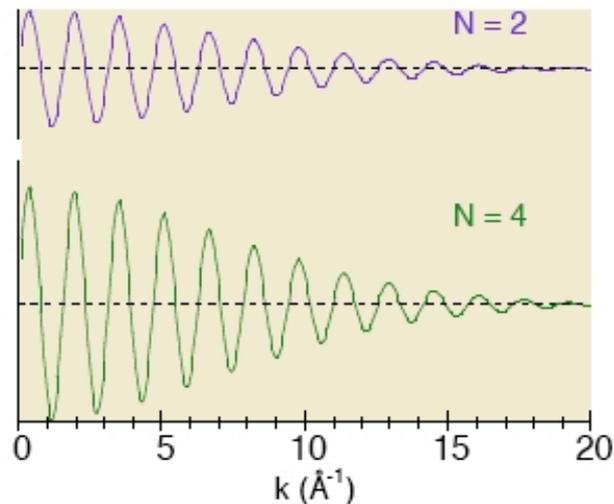


Frequency



Inter-atomic  
distance

**$R$**

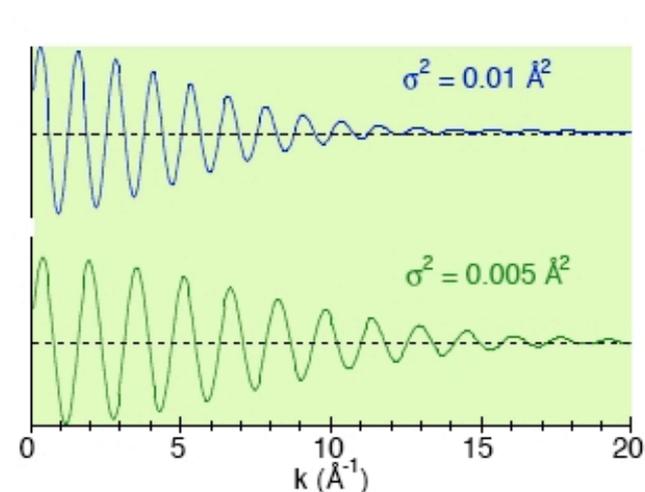


Amplitude



Coordination  
number

**$N$**



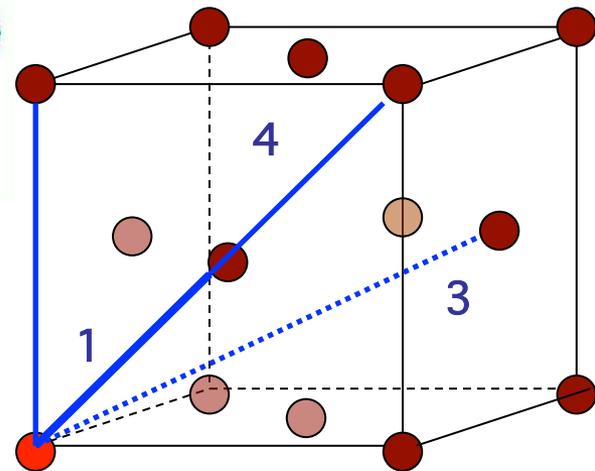
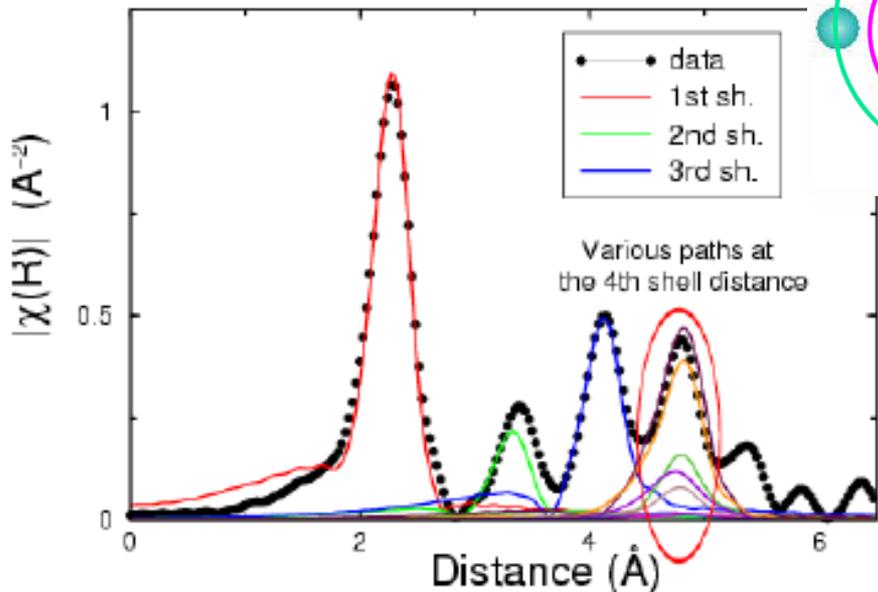
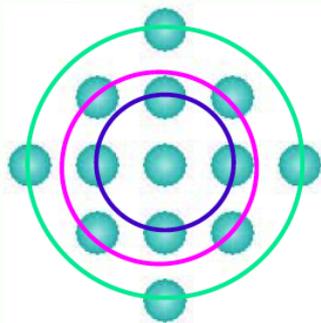
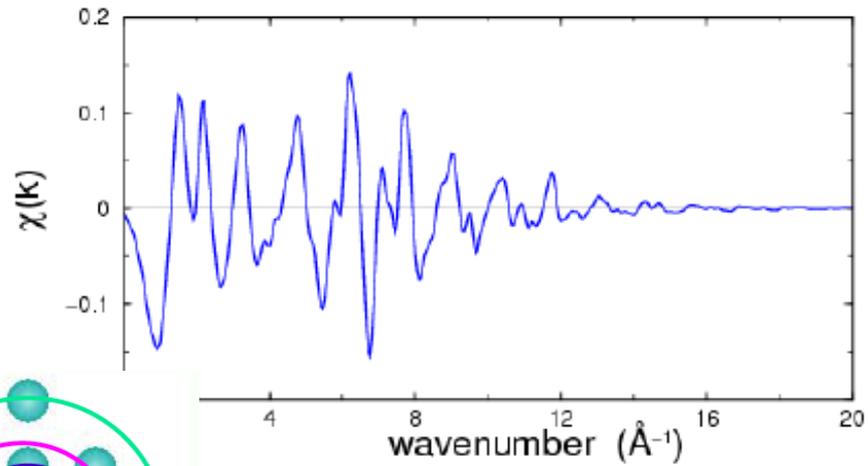
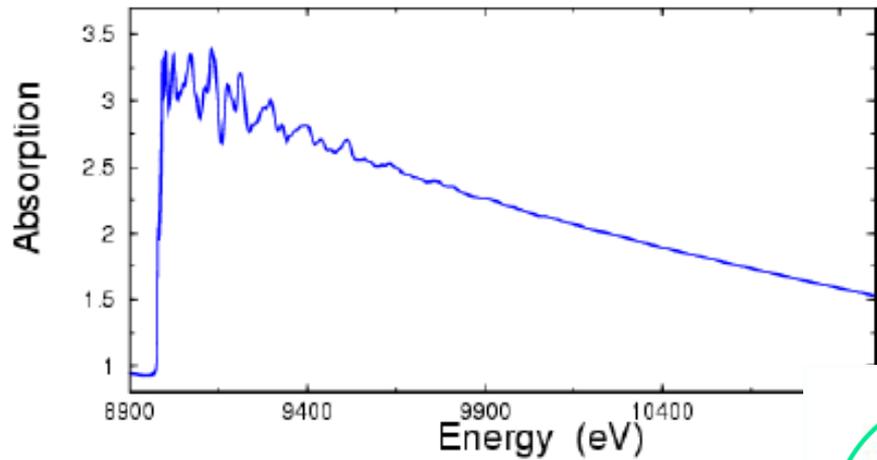
Damping



Disorder

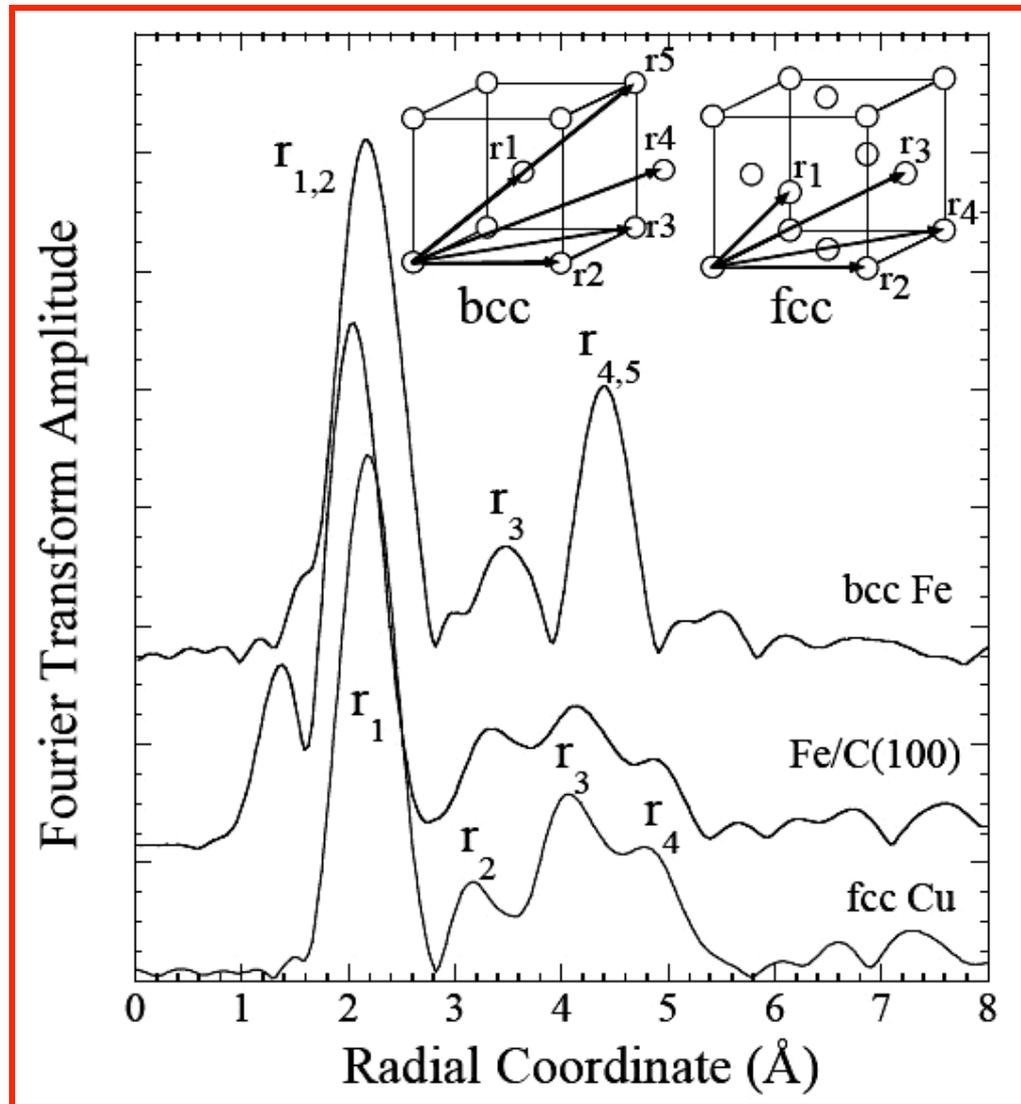
**$\sigma^2$**

# EXAFS - Cenni di analisi dei dati



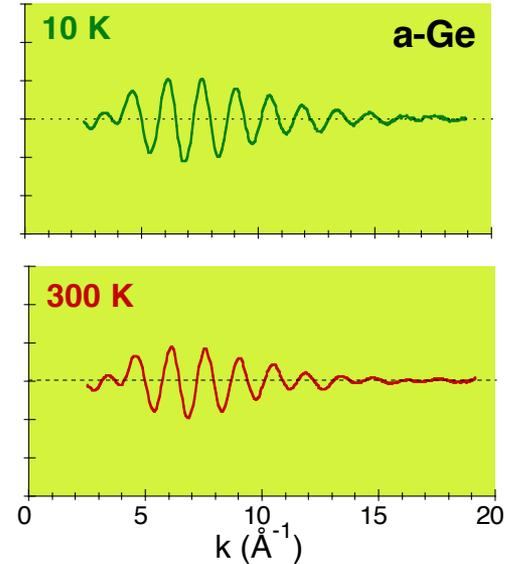
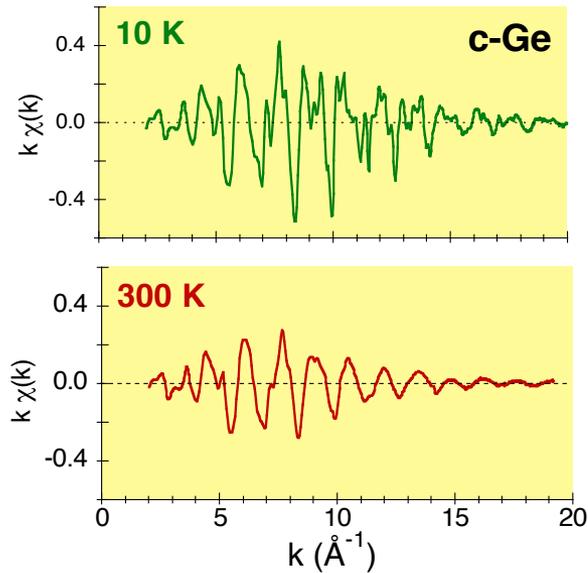
**Rame metallico- Struttura cubica a facce centrate FCC**

# EXAFS - Cenni di analisi dei dati

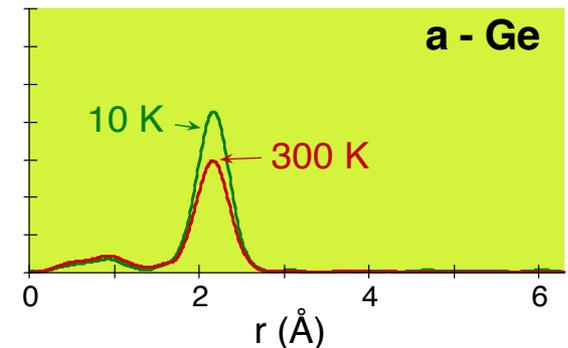
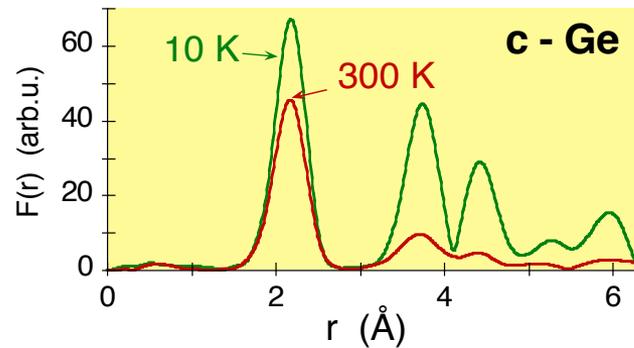


# EXAFS - Cenni di analisi dei dati

**EXAFS signals**

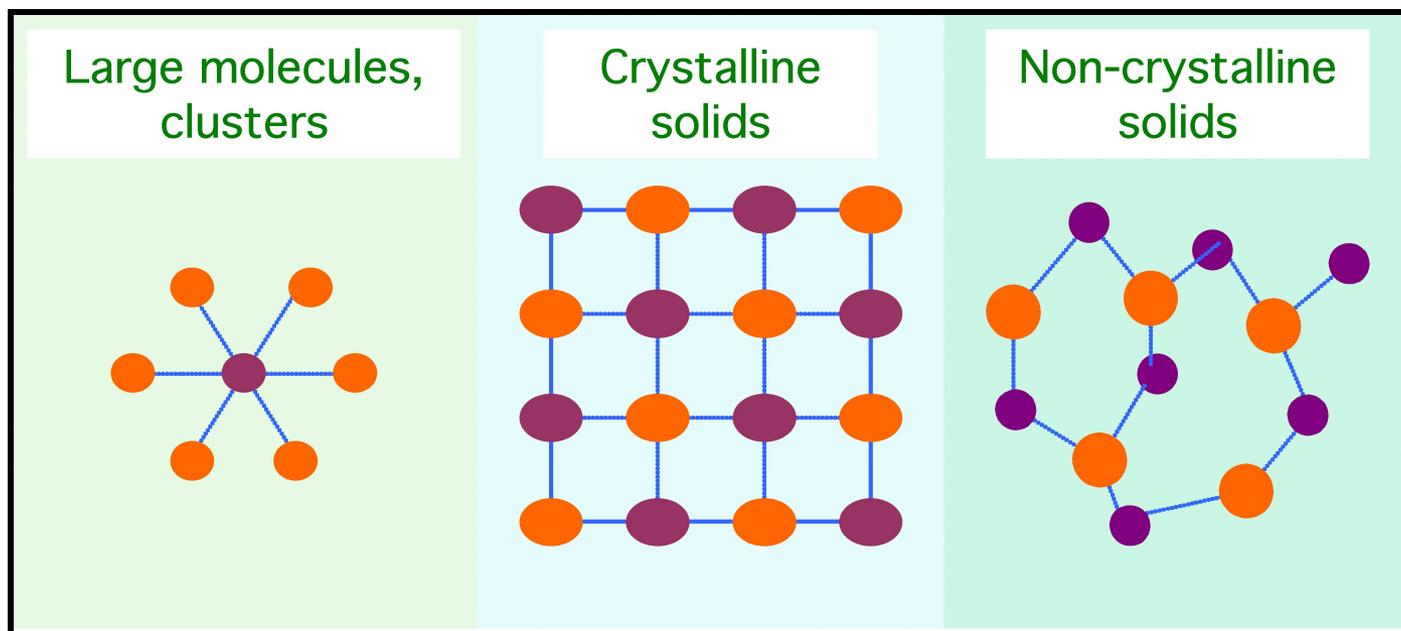


**Fourier transforms**



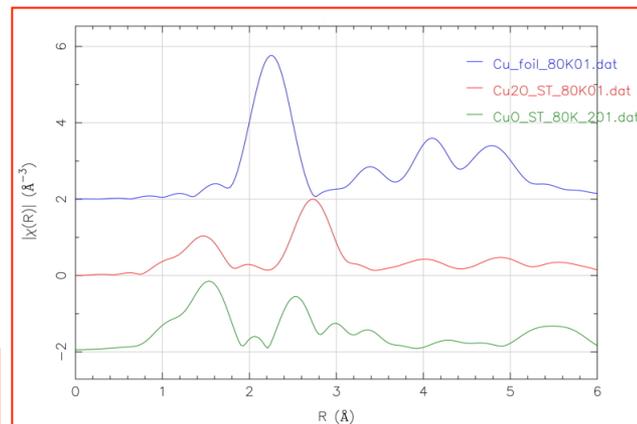
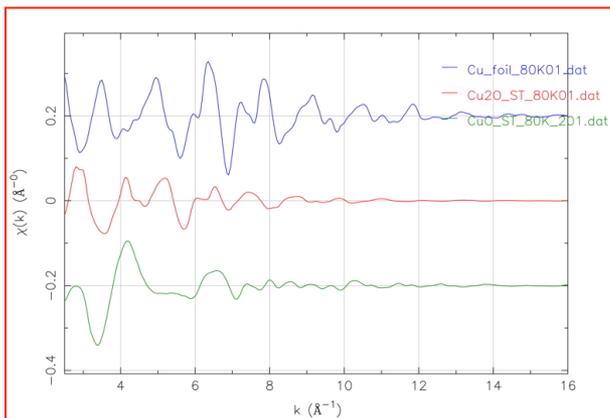
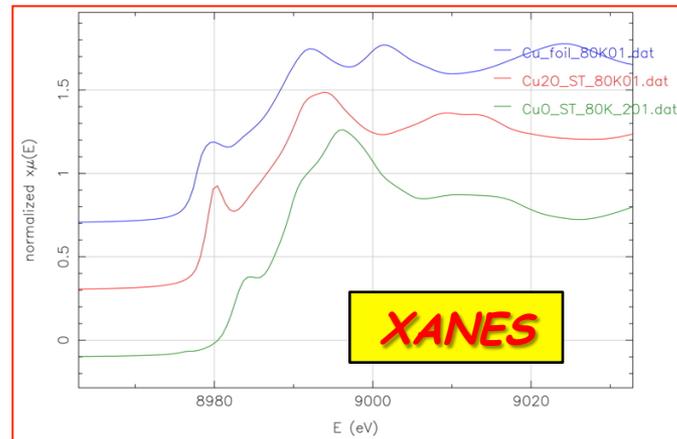
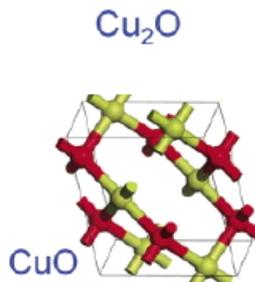
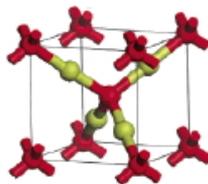
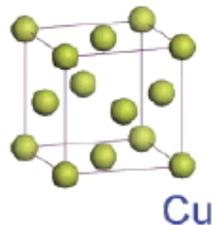
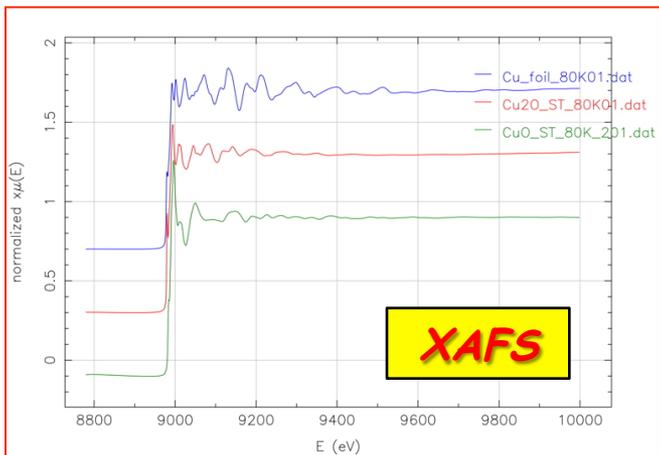
# Applicazioni possibili

La spettroscopia **XAS** e' una sonda della struttura geometrica locale ed elettronica delle specie atomiche nella materia, **garantisce selettivita' chimica** e **non richiede nessun specifico stato fisico del campione**.



La sensibilita' alla specie atomica e l' indipendenza dallo stato di aggregazione rendono questa tecnica di grande utilita' in molti campi della ricerca; le applicazioni si estendono **dalla fisica dello stato solido, alla chimica della catalisi, alla scienza dei materiali, alla biofisica, alla geofisica etc.**

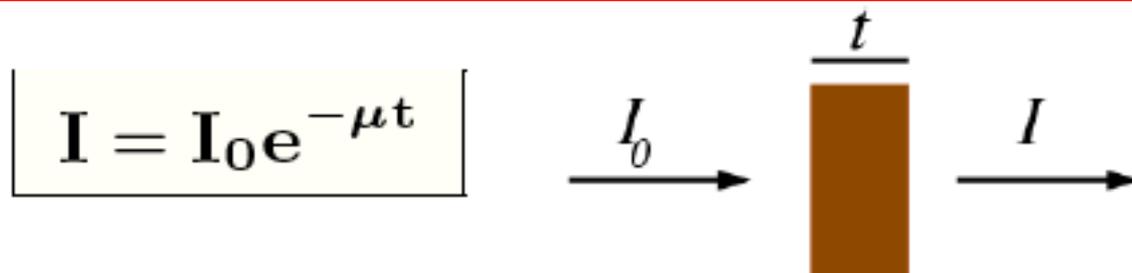
# Cu Cu<sub>2</sub>O CuO



**Cu metal FCC a = 3.61 Å**

|                    | Cu <sub>2</sub> O   | CuO  |
|--------------------|---------------------|--|
| Lattice parameter  | Cubic<br>a = 4.27 Å | Monoclinic<br>a = 4.6837 Å<br>b = 3.4226 Å<br>c = 5.1288 Å<br>β = 99.54° |
| Shortest distances |                     |  |
| d <sub>Cu-O</sub>  | 1.84 Å              | 1.95 Å   |
| d <sub>O-O</sub>   | 3.68 Å              | 2.62 Å   |
| d <sub>Cu-Cu</sub> | 3.02 Å              | 2.90 Å   |

# Misure di assorbimento



Se si misura l'intensità della radiazione incidente sul campione  $I_0$  e quella trasmessa dal campione di spessore  $t$  ossia  $I$  e se ne fa il logaritmo naturale, si ottiene:

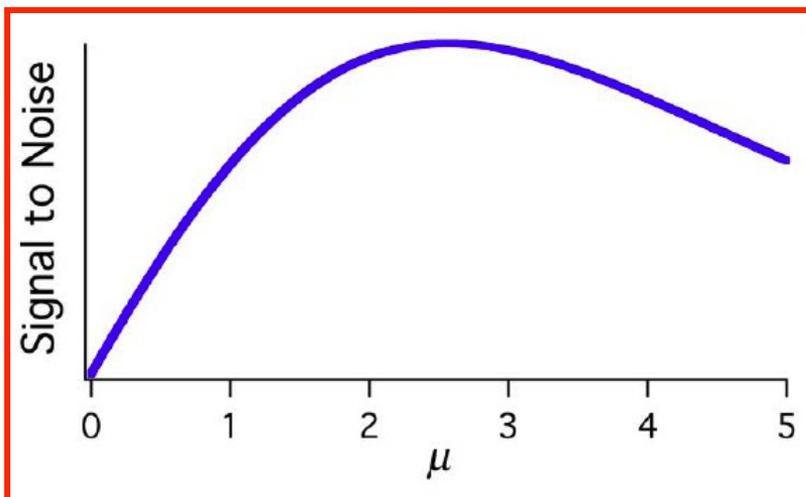
$$\mu(E)t = -\ln(I/I_0)$$

$\mu$ , ossia il coefficiente di assorbimento dipende fortemente dalla energia dei raggi X incidenti ( $E$ ), dal numero atomico ( $Z$ ), dalla densità del materiale ( $\rho$ ) e dalla massa atomica ( $A$ ).

$$\mu \approx \frac{\rho Z^4}{A E^3}$$

# Cenni sulla preparazione del campione

Per **misure in trasmissione** bisogna avere **campioni omogenei e di appropriato spessore** ( $\mu x \sim 1-2$  dove ora  $x$  e' lo spessore del campione) ossia il **campione non deve essere ne' troppo spesso ne' troppo sottile** altrimenti il rapporto **segnale/rumore** non e' ottimale. Il campione **non deve avere buchi** quindi usando polveri bisogna ridurre al minimo la dimensione dei grani.



$$\mu x = 2 = \mu_m \rho x = \ln(I_0/I)$$

dove  $\mu_m$  e' il coefficiente di assorbimento di massa e  $\rho$  e' la densita' del materiale.

$$2 = \mu_m \rho x = \mu_m \frac{m}{V} x = \mu_m \frac{m}{A} \Rightarrow$$

$$m = \frac{2A}{\mu_m}$$

La quantita' in grammi **m** di campione da depositare su un supporto di area **A**.

# *Riferimenti per approfondimenti*

- <http://cars.uchicago.edu/xafs/>
- [http://alpha.science.unitn.it/~fisica1/raggi\\_x/](http://alpha.science.unitn.it/~fisica1/raggi_x/)
- **Lezione M. Benfatto @**  
<http://www.inf.infn.it/edu/incontri/2004/programma.html>
- [http://www.bessy.de/guided\\_tour/en.02.sr.php?docs=0](http://www.bessy.de/guided_tour/en.02.sr.php?docs=0)
- [http://synchrotron.org.za/S@S2009/presentations/Briois\\_Valerie-XANES.pdf](http://synchrotron.org.za/S@S2009/presentations/Briois_Valerie-XANES.pdf)
- **I valori di  $\mu_m$  possono essere trovati sul sito:**  
[http://www.cxro.lbl.gov/optical\\_constants/pert\\_form.html](http://www.cxro.lbl.gov/optical_constants/pert_form.html)

[http://web.infn.it/Dafne\\_Light/](http://web.infn.it/Dafne_Light/)



# DAFNE-LIGHT

INFN-LNF Synchrotron Radiation Facility

INFN

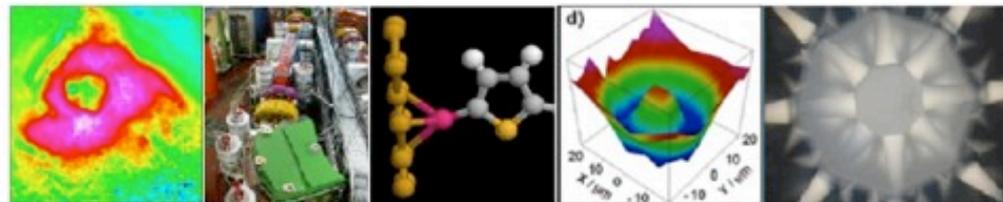
LNf

DAFNE Storage Ring

DAFNE-Light

## Menu

- Home
- Beamlines
- Organization
- Secretariat
- Technical Staff
- General publications
- Highlights
- DAFNE storage ring parameters
- DAFNE status
- How to apply



## DAFNE-Light

DAFNE-Light is the Synchrotron Radiation Facility at the Laboratori Nazionali di Frascati (LNF).

Three beamlines are operational using, in parasitic and dedicated mode, the intense photon emission of DAFNE, a 0.51 GeV storage ring with a routinely circulating electron current higher than 1 Ampere. Two of these beamlines (**DXR1** and **DXR2**) have one of the DAFNE wiggler magnets as synchrotron radiation source, while the third beamline (**SINBAD-IR**) collects the radiation from a bending magnet. New **XUV** bending magnet beamlines are nowadays under construction.

The beamlines **DXR1** and **SINBAD-IR** are open to **external users**.

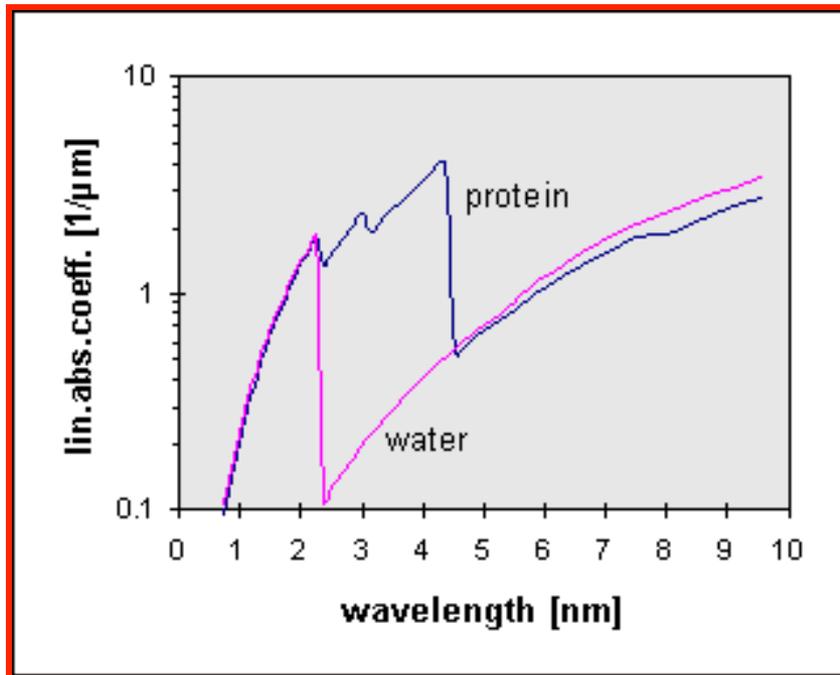
# *Appendici*

- *Water-window e raggi X molli*
- *Monocromatore a doppio cristallo*
- *Rivelatori per raggi X*
- *Camera ad ionizzazione*

# Water-window e raggi X molli

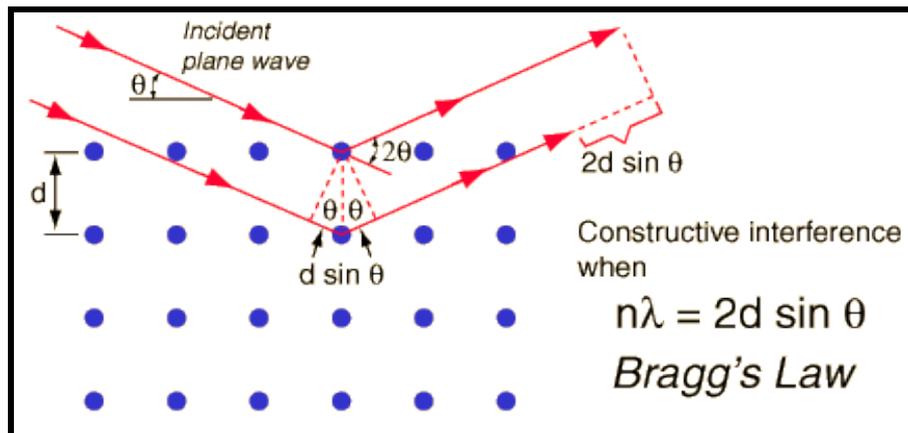
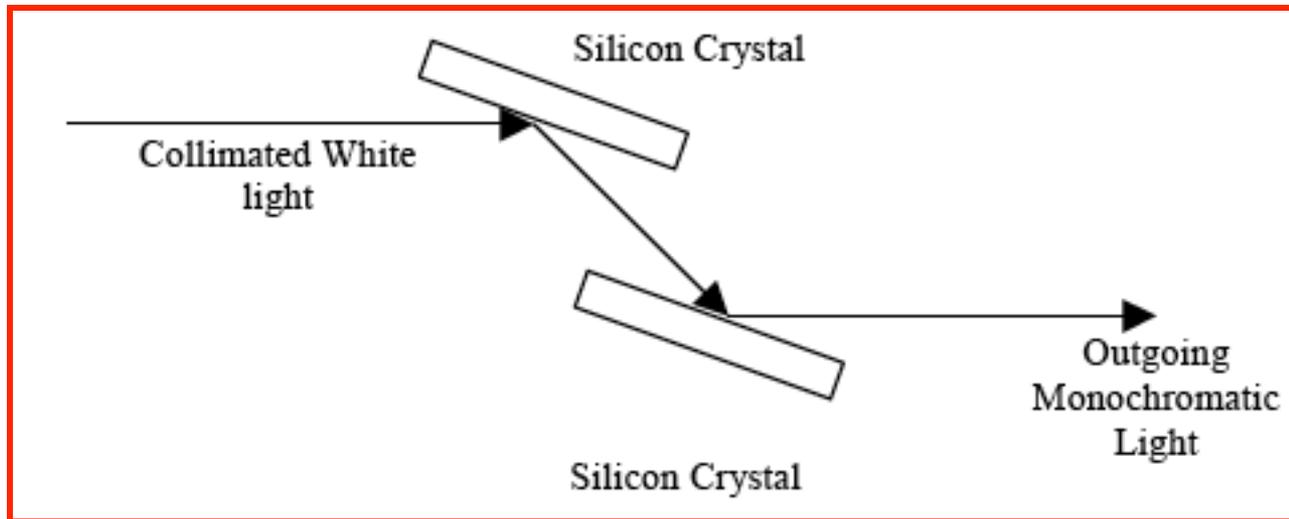
Questo intervallo di energia include le **soglie di assorbimento K** (energie di legame delle soglie dei livelli di core' 1s) degli elementi della prima serie del sistema periodico: **carbonio** (285 eV), **azoto** (410 eV) e **ossigeno** (545 eV).

L'accessibilità a queste soglie con fasci di fotoni estremamente intensi, apre notevoli possibilità nello studio di materiali organici, polimerici e nei sistemi biologici.



Particolarmente importante è l'intervallo 300-500 eV (**water window**) dove il carbonio (ovvero i materiali organici) assorbe la radiazione e l'ossigeno (ovvero l'acqua) è trasparente.

# Monocromatore a doppio cristallo



$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad \text{Bragg's Law}$$

# Rivelatori per raggi X

## Classificazione principale

CONTATORI

contano singoli fotoni di una certa energia

INTEGRATORI

generano segnali la cui ampiezza è proporzionale al flusso di fotoni

Scelta

Tipo di misura

Informazione

*Flusso, energia, posizione, tempo, ...*

**Alcune**

**proprietà':**

**Efficienza di rivelazione**

Frazione percentuale di fotoni che produce un segnale rivelabile rispetto al numero totale di fotoni che entrano nel rivelatore

**Intervallo dinamico**

Intervallo di livelli di segnale entro il quale il rivelatore fornisce una risposta lineare

**Efficienza quantica**

Numero di portatori di carica/fotone

**Risoluzione**

**Rumore (noise)**

Fluttuazioni del segnale rivelato dipendenti da cause diverse, che impongono un limite all'intensità minima di fotoni rivelabile

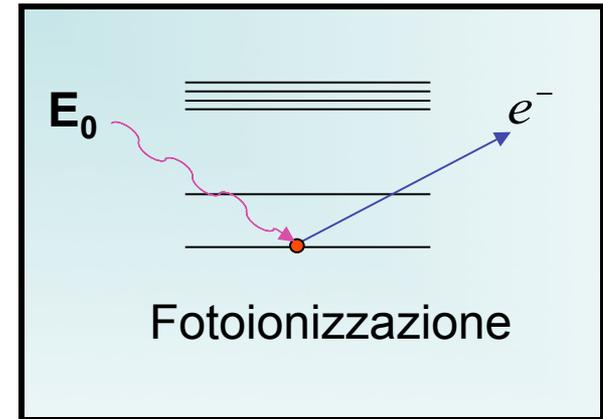
# INTEGRATORI

## Caratteristiche principali

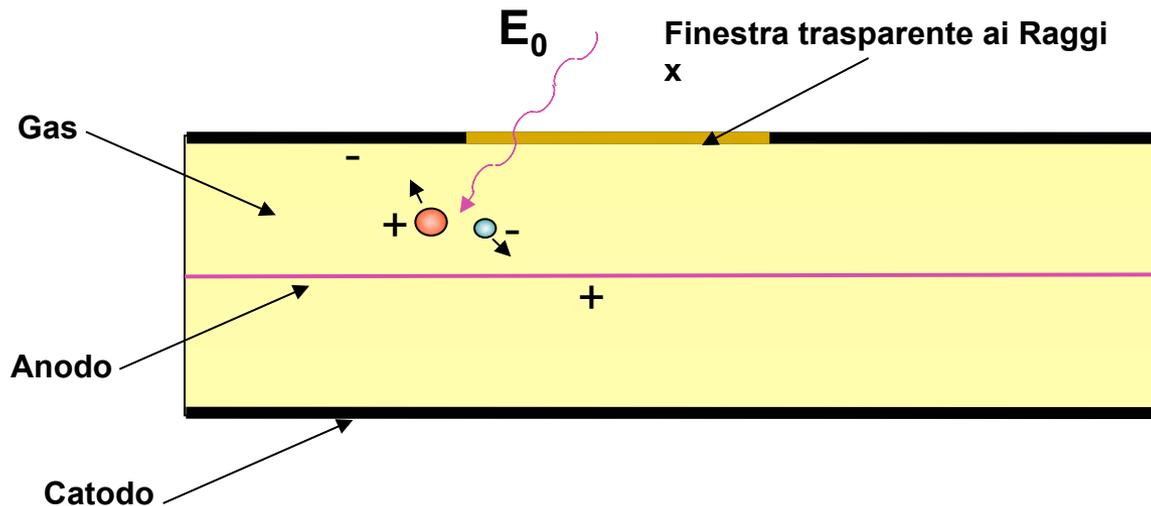
- Rumore di lettura  
read out noise
- Elevata dinamica
- Sorgenti luminose

# Integratori

## Processo primario: assorbimento



## Rivelatori a gas: schema di principio

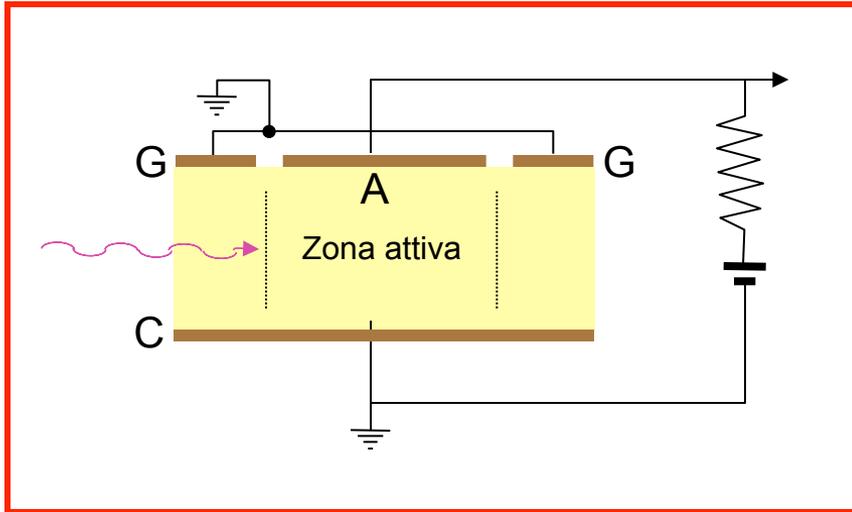


## Assorbimento in un un gas $\rightarrow$ ioni + elettroni

- Ione positivo
- Fotoelettrone di energia:

$$E = E_0 - E_b$$

# Camera ad ionizzazione



**G** anello di guardia  
**A** Anodo  
**C** catodo

L' **anello di guardia** riduce le distorsioni del campo elettrico ai confini della regione attiva. Gli **elettroni prodotti** dalla ionizzazione vengono **raccolti dall'anodo**.

Gli **ioni**, che hanno una mobilità molto minore di quella degli elettroni vengono raccolti dal **catodo**

La scelta del gas e della finestra viene ottimizzata in funzione **dell'intervallo di lunghezze d'onda di operazione** del rivelatore

Numero di coppie elettrone-ione prodotte:

$$N \cong \frac{E}{\langle V_i \rangle}$$

Nel caso il **flusso di fotoni** sia completamente assorbito entro la camera la **corrente misurata** e':

$$\langle V_i \rangle$$

**Potenziale di ionizzazione efficace**, cioè un valor medio tra i potenziali di ionizzazione di più elettroni dello stesso atomo

$$i = N e = I_0 T \gamma e$$

**$I_0$**  Intensità della radiazione incidente (ph/s)  
 **$T$**  trasmittanza della finestra  
 **$\gamma$**  efficienza di fotoionizzazione del gas (elettroni/ph)