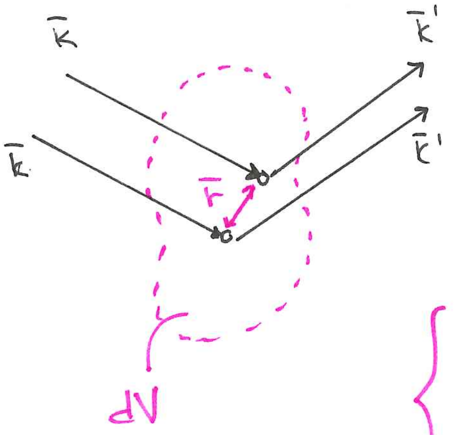
F4 Mån LV2

Amplitud på de diffrakterade strålarna




Totala fasskillnaden:

$$\phi = \bar{k}\bar{r} + (-\bar{k}'\bar{r})$$
$$= (\bar{k} - \bar{k}')\bar{r}$$

$\left\{ \text{spridn. sker pga växelverkan mellan röntgenljus och ämnets elektrondensitet } n(\bar{r}), \right\}$ ~~spridningsamplitud~~

spridningsamplitud: $\propto n(\bar{r})\,dV\,e^{i\phi}$
(från dV)

Totala amplituden: $$F = \int_{\text{prov}} dV\, n(\bar{r}) \exp(i(\bar{k} - \bar{k}')\bar{r})$$
$$= \int_{\text{prov}} dV\, n(\bar{r}) \exp(i\Delta k \bar{r})$$

(Intensitet $I = |F|^2$)

$$F = \sum_{\bar{R}} \int_{\text{cell}} dV\, n(\bar{r} + \bar{R}) \exp(-i\bar{G}(\bar{r} + \bar{R}))$$

$$F = \sum_{\bar{R}} \int_{\text{cell}} dV\, n(\bar{r}) \exp(i\bar{G}\bar{r}) = \overset{\text{antal celler i provet}}{N} \underbrace{\int dV\, n(\bar{r}) \exp(i\bar{G}\bar{r})}_{\text{strukturfaktorn } S_{\bar{G}}}$$

$$S_{\bar{G}} = \int dV\, n(\bar{r}) \exp(i\bar{G}\bar{r})$$

Vad händer om vi har en bas? $\{$Struktur = gitter + bas$\}$

↳ Antag s atomer i basen med positioner $\bar{r}_j$

$\{j = 1, 2, \ldots, s\}$

Total elektrondensitet → summan av elektrondensiteter associerade med varje atom j i basen:

$$n(\bar{r}) = \sum_{j=1}^{s} n_j(\bar{r} - \bar{r}_j)$$

Får strukturfaktorn enligt:

$$S_{\bar{G}} = \int dV\, n(\bar{r}) \exp(-i\bar{G}\bar{r}) = \sum_{j=1}^{s} \int dV\, n_j(\bar{r} - \bar{r}_j) \exp(-i\bar{G}\bar{r})$$

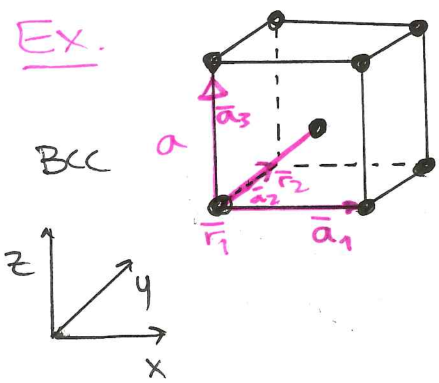
$$= \{\bar{d} = \bar{r} - \bar{r}_j\} = \sum_{j=1}^{s} \exp(-i\bar{G}\bar{r}_j) \int dV\, n_j(\bar{d}) \exp(-i\bar{G}\bar{d})$$

$$= \sum_{j=1}^{s} f_j \exp(-i\bar{G}\bar{r}_j), \quad f_j = \int dV\, n_j(\bar{d}) \exp(-i\bar{G}\bar{d})$$

↳ Formfaktorn

Ex.

BCC




SC + bas

Bas: $\bar{r}_1 = 0$

$\bar{r}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$

$$\begin{cases} \bar{a}_1 = a\hat{x} \\ \bar{a}_2 = a\hat{y} \\ \bar{a}_3 = a\hat{z} \end{cases}$$

## Reciproka rummet

$$b_i = \frac{2\pi}{a}\hat{j} \quad , \quad i = 1,2,3, \ \hat{j} = \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$$

## Strukturfaktorn:

$$S_{\bar{G}} = \sum_{j=1}^{2} \exp(-i G \bar{r}_j) = \left\{ \bar{G} = h\bar{b}_1 + k\bar{b}_2 + L\bar{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x} + k\hat{y} + L\hat{z}) \right\}$$

$$= \exp(-i\bar{G}\cdot 0) + \exp\left(-i\left(\frac{2\pi}{a}(h\hat{x}+k\hat{y}+L\hat{z}) \cdot \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}\right)\right)$$

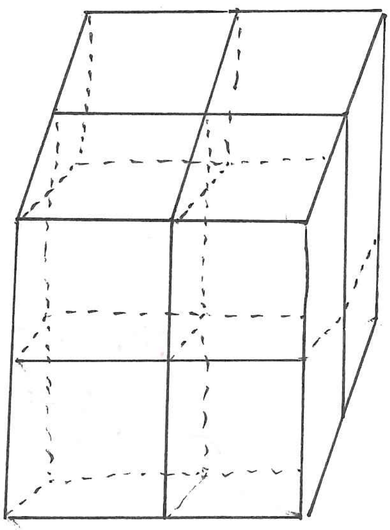
(formfaktor $f_j = 1$)

$$= 1 + \exp(-i\pi(h+k+L))$$

$$= 1 + \cos\pi(h+k+L) - \underbrace{i\sin\pi(h+k+L)}_{=0}$$

$$= 1 + (-1)^{h+k+L}$$

$$\bar{S}_G = \begin{cases} 2 & \text{om } h+k+L = \text{jämnt} \\ 0 & \text{om } h+k+L = \text{udda} \end{cases}$$



Formfaktor

↳ beror på $e^-$-densitet och spridn. vinkel

↳ Tunga atomer syns bra! (Lätta mindre bra)

↳ För $\theta = 0$ → skalad till det förväntade värdet för spridn. mot en elektron

# Debye-Waller-faktor (se App. A)

Kristallvibrationers inverkan $\to$ ej perfekt periodicitet i verkligheten!

$$\begin{cases} \bar{S}_G = \sum_{j=1}^{s} f_j \exp(-i\bar{G}\bar{r}_j) \\ \bar{r}_j(t) = \bar{r}_j + \bar{u}(t) \end{cases}$$

($u(t)$ = förskjutn. fr. jmv.läget!)

Termiska medelvärdet: $S_{\bar{G}} = \sum f_j \exp(-i\bar{G}\bar{r}_j)\langle \exp(i\bar{G}\bar{u})\rangle$

$$\langle \exp(i\bar{G}\bar{u})\rangle = 1 - \underbrace{i\langle \bar{G}\cdot\bar{u}\rangle}_{=0} + i^2 \frac{\langle(\bar{G}\cdot\bar{u})^2\rangle}{2} + \dots$$

$$\approx 1 - \frac{1}{2}\langle\underbrace{(\bar{G}\bar{u})^2}_{G^2\langle\bar{u}^2\rangle\langle\cos^2\theta\rangle}\rangle = 1 - \frac{1}{6}\langle\bar{u}^2\rangle G^2 = \exp(-i\bar{G}\bar{u}) \quad (1)$$

=0 ty förskjutningar är slumpmässiga och okorrelerade

$G^2\langle\bar{u}^2\rangle\underbrace{\langle\cos^2\theta\rangle}_{=\frac{1}{3}}$

Taylorutv. av $\exp(-\frac{1}{6}\langle\bar{u}^2\rangle\bar{G}) = 1 - \frac{1}{6}\langle\bar{u}^2\rangle G^2 + \dots$ (2)

$$\langle \exp(-i\bar{G}\bar{u})\rangle = \exp(-\frac{1}{6}\langle\bar{u}^2\rangle\bar{G}^2$$

$$\Rightarrow S_{\bar{G}}^{korr} = \sum_{j=1}^{s} f_j \exp(-i\bar{G}\bar{r}_j)\underbrace{\exp(-\tfrac{1}{6}\langle\bar{u}^2\rangle\bar{G}^2}_{\text{Debye-Waller-faktorn}}$$

spridningsamplituden är proportionell till $S_{\bar{G}}^{korr}$

Intensiteten är proportionell till $|S_{\bar{G}}^{korr}|^2 = |S_{\bar{G}}|^2\exp(-\frac{1}{3}\langle\bar{u}^2\rangle\bar{G})$

Harmonisk oscillator

→ Termisk medelvärde av den pot. energin

$$\begin{cases} \langle U \rangle = \frac{1}{2} k \langle u^2 \rangle \\ \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \end{cases}$$

↳ kraftfaktor

, m = atommassa

$$\left.\begin{aligned} &\langle U \rangle = \frac{1}{2} k \langle u^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle u^2 \rangle \omega^2 m \\ &\langle U \rangle = \frac{3}{2} k_B T \end{aligned}\right\} \rightarrow \langle u^2 \rangle = \frac{3 k_B T}{m \omega^2}$$

spridningstvärsnitt:

↳ ≈ sannolikhet av spridning

↳ Mäts i "barns" (1 barn = $10^{-24}$ cm$^2$)