

7

Diagram illustrating Compton scattering. An incident photon with momentum $\vec{k}$ strikes a stationary electron (labeled "work"). The scattered photon has momentum $\vec{k}'$ at an angle θ . The recoiling electron has momentum $\vec{p}'$. The Compton shift equation is shown: $\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$.

Rozpísl na částečky $\vec{r}=0$: $\psi(\vec{r}) \propto e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\vec{r}') \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{r}$
 dopadající vlna $\leftarrow$ $\hookrightarrow$ rozptyl vlna $\rightarrow$ rozptyl vlna

$$\psi(\vec{r}) \propto e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \left[e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{r} - \vec{R})} + f(\vec{q}') \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{R})}}{|\vec{r} - \vec{R}|} \right]$$

$$|\vec{r} - \vec{R}| \approx \sqrt{r^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{R}} \approx r - \vec{r} \cdot \vec{R} \quad (\text{for } |\vec{r}| \gg |\vec{R}|)$$

$$\psi(\vec{r}) \propto e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\vec{r}') \frac{e^{ikr}}{r} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}}$$
$$\psi(\vec{r}) \propto \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{\ell} f_{\ell} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_{\ell}} \quad (\text{must set } \vec{r} \text{ by } \vec{r}_0 + \vec{r}'$$

$$|\psi(\vec{r})|^2 \propto \frac{1}{r^2} \left| \sum_e f_e e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_e} \right|^2 \quad \text{intensita Fiecuință}$$

↓ *Shukluna frankia* (Charakteristika makkid'lu)

$$I(\vec{q}) = \left| \sum_{\ell} f_{\ell} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_{\ell}} \right|^2$$

formula plahe'pe difrakciu
na absolut'ne makroli
(luha'li'ha, kaspalina, --)

Ideálny kryštál:

$$\vec{R}_e = \vec{R} + \vec{r}_j$$

$\vec{R}$ = poloha bunky Bravaisovej mriežky

$\vec{r}_j$ = poloha j -kto atómu v bunke $\vec{R}$

$$I(\vec{q}) = \left| \sum_e f_e e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_e} \right|^2 = \left| \sum_R e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} \right|^2 \cdot \underbrace{\left| \sum_j f_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j} \right|^2}_{\text{faktor m'iriaci s tvarom b'ity}}$$

faktor m'iriaci

s typom Bravaisovej mriežky

Recipročná mriežka (k danej Bravaisovej mriežke $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$)

vydĺžujeme priamo rovnaké Bravaisovu mriežku

s primitívnymi vektormi $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$. Tvoríme ich takto:

$$\boxed{\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}}$$

riesenie: $\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

Príklad 1: pre sc mriežku $\vec{a}_1 = a\vec{x}, \vec{a}_2 = a\vec{y}, \vec{a}_3 = a\vec{z}$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\vec{x}, \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\vec{y}, \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\vec{z}$$

Príklad 2: pre fcc mriežku $\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{x} + \vec{y} + \vec{z}), \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(-\vec{x} + \vec{y} + \vec{z})$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{x} - \vec{y} + \vec{z})$$

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{a} \cdot \frac{1}{2}(\vec{x} + \vec{y}), \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{a} \cdot \frac{1}{2}(\vec{y} + \vec{z}), \vec{b}_3 = \frac{4\pi}{a} \cdot \frac{1}{2}(\vec{x} + \vec{z})$$

fcc mriežka v recipročnom priestore

body $\vec{K} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3$ -- body recipročnej (inverznej) mriežky
 $m_i = \text{cele čísla}$

Ukažeťme, že

$$\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} = \frac{(2\pi)^3}{v_0} \sum_{\vec{K}} \delta(\vec{q} - \vec{K}) \quad (*)$$

$$v_0 = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

objem jednotkovej
bunky Bravaisovej mriežkyTo znamená, že $I(\vec{q}) \neq 0$ iba keď $\vec{q}$ je vektorom recipročnej mriežky!
(pre ideálny kryštál)Dôkaz (*):

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

$$\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} = \sum_{n_1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{a}_1 n_1} \sum_{n_2} e^{i\vec{q} \cdot \vec{a}_2 n_2} \sum_{n_3} e^{i\vec{q} \cdot \vec{a}_3 n_3}$$

Uvažujme kryštál s N^3 elementárnymi bunkami.Hrany kryštálu teda sú $N\vec{a}_1, N\vec{a}_2, N\vec{a}_3$

Máme počítať

$$\sum_{n=0}^{N-1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{a} n} = \frac{1 - e^{i\vec{q} \cdot \vec{a} N}}{1 - e^{i\vec{q} \cdot \vec{a}}} = \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{a} N/2}}{e^{i\vec{q} \cdot \vec{a}/2}} \frac{\sin \frac{\vec{q} \cdot \vec{a} N}{2}}{\sin \frac{\vec{q} \cdot \vec{a}}{2}}$$

vzhľadom na to, že funkcia na počítaní vidno, že pre veľké N (už od ≈ 50)
potvorila to rady píku pri $\vec{q} \cdot \vec{a} = 2\pi m$ $m = \text{cele číslo}$ ľahko vidno (l'Hospital): $\vec{q} \cdot \vec{a} \rightarrow 2\pi m: \left| \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{a} n} \right| \rightarrow N$

$$\text{Teda } \sum_{n=0}^{N-1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{a} n} = C \sum_m \delta(\vec{q} \cdot \vec{a} - 2\pi m) \quad (**)$$

Najdime konstantu C : zintegrujme obe strany rovnice ^(**) podľa $x = \vec{q} \cdot \vec{a}$

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \sum_{n=0}^{N-1} e^{ixn} = C \sum_m \underbrace{\int_{-\pi}^{\pi} dx \delta(x - 2\pi m)}_{=C}$$

4. ľavá strana

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \sum_{n=0}^{N-1} e^{inx} = \int_{-\pi}^{\pi} dx \frac{1-e^{iNx}}{1-e^{ix}} \xrightarrow{z=e^{ix}} \oint \frac{dz}{iz} \frac{1-z^N}{1-z} = 2\pi i \cdot \text{Res}$$

iba pri $z=0 \rightarrow \text{Res} = \frac{1}{i}$

$$\rightarrow \int_{-\pi}^{\pi} dx \sum_{n=0}^{N-1} e^{inx} = 2\pi \stackrel{!}{=} C$$

Prieto

$$\sum_{\vec{R}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} = (2\pi)^3 \sum_{m_1, m_2, m_3} \underbrace{\delta(\vec{q} \cdot \vec{a}_1 - 2\pi m_1) \delta(\vec{q} \cdot \vec{a}_2 - 2\pi m_2) \delta(\vec{q} \cdot \vec{a}_3 - 2\pi m_3)}_{\text{odkiaľto vidno } \vec{q} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3}$$

Nabíre sa ukázať, že pravá strana = $\frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\vec{K}} \delta(\vec{q} - \vec{K})$

Dôkaz: integrujeme obe strany podľa $\int d^3q$

(oba strany totiž Fiadkaji, že $\vec{q} = \vec{K}$; treba overiť správnosť normy)

integrál $\frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\vec{K}} \delta(\vec{q} - \vec{K}) = \frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\vec{K}} \quad (1)$

$\int d^3q (2\pi)^3 \sum_{m_1, m_2, m_3} \delta(\vec{Q} - 2\pi \vec{m})$, kde sme zriedli

$$\vec{Q} = (\vec{q} \cdot \vec{a}_1, \vec{q} \cdot \vec{a}_2, \vec{q} \cdot \vec{a}_3)$$

$$\vec{m} = (m_1, m_2, m_3)$$

$$= (2\pi)^3 \sum_{\vec{m}} \int d^3Q \frac{\partial(q_x, q_y, q_z)}{\partial(Q_1, Q_2, Q_3)} \delta(Q_1 - 2\pi m_1) \delta(Q_2 - 2\pi m_2) \delta(Q_3 - 2\pi m_3)$$

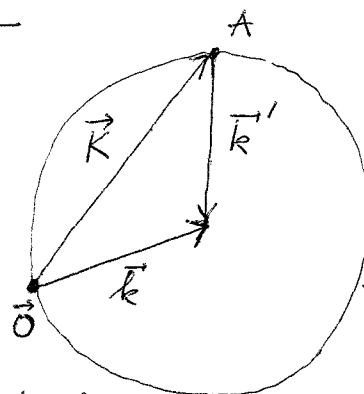
Jacobian $\frac{\partial(q_x, q_y, q_z)}{\partial(Q_1, Q_2, Q_3)} = \begin{vmatrix} a_{1x} & a_{1y} & a_{1z} \\ a_{2x} & a_{2y} & a_{2z} \\ a_{3x} & a_{3y} & a_{3z} \end{vmatrix} = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = V_0$

$$= (2\pi)^3 \sum_{\vec{m}} \frac{1}{V_0} \quad (2)$$

Výraz (1,2) sú ekvivalentné. QED

Experimentálna realita

Ewaldova konštrukcia:



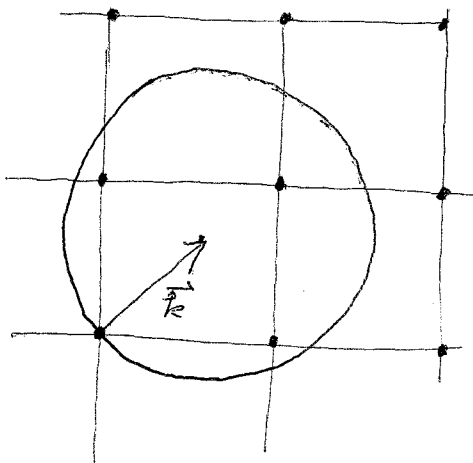
Keďže zachovanie energie bod A musí ležať na ~~konštr~~ guľi

Zdovet však bod A musí byť bodom recipročnej siete (aby $\vec{OA} = \vec{R}$)

Všeobecny prípad:

Žiaden bod siete
neleží na povrchu

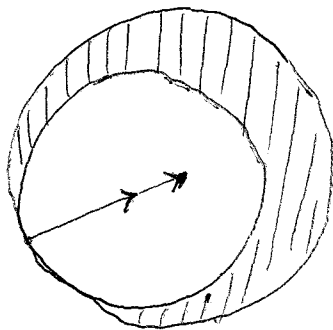
Ewaldovej guľe



Pre náhodne zvolenú $\vec{k}$
nedôjde k difrakcii!

3 spôsoby realizácie difrakčného experimentu:

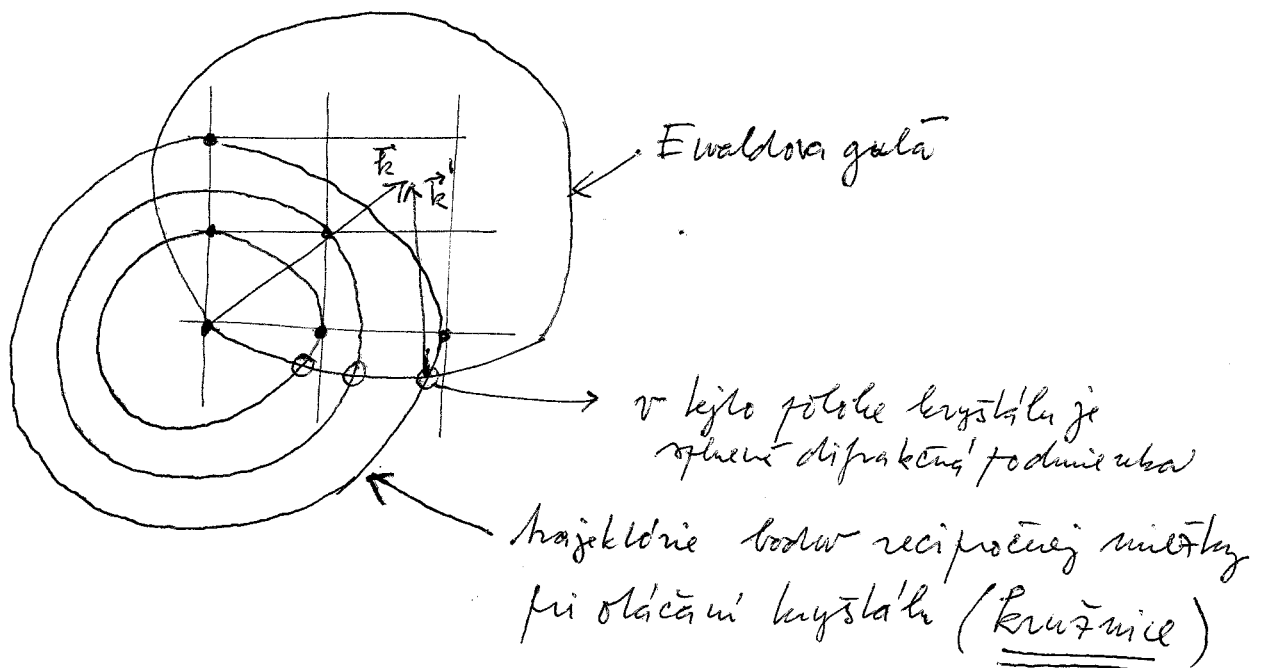
1. von Laueho metóda: použiť nemonochromatickú svetlo
s konečným rozsahom rln. dlžok



bod A môže ležať v transformovanej oblasti $\rightarrow$ môže v nej ležať bod recipročnej siete

veľkosti: veľké, krátke rln. dlžky (+ intervaly)
vedľa k difrakcii $\rightarrow$ metóda nie je translátívna

2. Metóda rotujúceho kryštálu



3. Prášková metóda

vtorka fotografa + množstvo náhodne orientovaných zrniek
(bezne kory sú polykryštály - "flepenec" náhodne orientovaných malých kryšt. zrniek)

analýza podobná ako pri rotujúcom kryštáli

Rozdiel: "najekvívnejšie" body recipročnej mriežky nie sú kružnice, ale poruchy guľ (fluktuácie nielen ^{uhlov} natočenia, ale aj os natočenia)

Na miernidlo: nie je dostatočne body, ale sú podobné kružnice:

