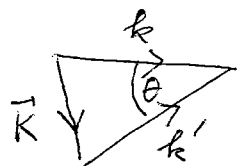


DIFRAKČNÉ EXPERIMENTY 2

7

Difrakčné uhly pri prúškovej metóde



$$\sin \frac{\theta}{2} = \frac{K}{2k} \rightarrow \begin{array}{l} \text{táčina od mriežky} \\ \text{táčina od Fraunhofera} \end{array}$$

$$\boxed{\theta = 2 \arcsin\left(\frac{K}{2k}\right)} \quad (*)$$

Príklad: SC mriežka K v jednotkách $\frac{2\pi}{a}$: $\sqrt{k^2 + l^2 + m^2} = 1, \sqrt{2}, \sqrt{3}, 2, \sqrt{5}, \sqrt{6}, \sqrt{8}, 3, \dots$

Rozpätie na mriežke a látan

Príklad 1: bcc mriežka máta chľap - ako SC mriežka s látan $0, \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right)$

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{a}(k, l, m)$$

$$\left| \sum_j f_j e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_j} \right|^2 = |f|^2 \left| 1 + e^{i\pi(k+l+m)} \right|^2 = \begin{cases} 4|f|^2, & k+l+m = \text{párne} \\ 0, & k+l+m = \text{nepárne} \end{cases}$$

(vzťahovanie difrakcií)
 ~~$\sqrt{2}, \sqrt{3}, 2, \sqrt{6}, \sqrt{8}, \dots$~~

Príklad 2: štruktúra CsCl - formuly pre atómy Cs, Cl rôzne:

$$\left| f_{\text{Cs}} + f_{\text{Cl}} e^{i\pi(k+l+m)} \right|^2 = \begin{cases} |f_{\text{Cs}} + f_{\text{Cl}}|^2, & k+l+m = \text{párne} \\ |f_{\text{Cs}} - f_{\text{Cl}}|^2, & k+l+m = \text{nepárne} \end{cases}$$

{ pily
uvažovaní,
len m
modulované

$$(*) \rightarrow \text{podmienka difrakcie: } 2k > K \rightarrow \frac{2}{\lambda} > \frac{2\pi}{a} \rightarrow \boxed{\lambda < \frac{a}{\pi}}$$



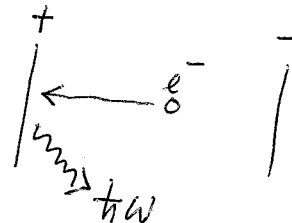
Typický pohľad na vlnu $\lambda \sim 1\text{\AA}$ a menej

(čím menšie λ , tým viac difrakčných čiar)

Volta diagnosticul cardiac

	dispersting talon	energia pri $\lambda = 1 \text{ \AA}$	interaksiya's	ul'cha vutkav	Form
fot'ong	$\varepsilon = hcR$	12 keV	kuchota elektronar	100 μm - 1 mm	$10^{-3} \text{ \AA}$
neut'ron	$\varepsilon = \frac{h^2 k^2}{2m_m}$	0.1 eV ~ 400 K	jadra ring elektronar	5 cm	$10^{-4} \text{ \AA}$
elektron	$\varepsilon = \frac{h^2 k^2}{2m}$	100 eV	elektronlarning potenciya'si	1 μm	$10 \text{ \AA}$

- Želiezň fotónuv: anódová žiarenie



K α žiara medi: 8,98 keV
 99% energie elektrónov
 sa premení na teplo
 → roztavená anóda

Typický výkon: 100 W
 výkonnejší želiezň: synchrotron
- neutónuv: $E \sim 400$ K keramické neutónuvy
 želiezň: jadrový reaktor
 výtlačok: magnetické ťaženie, možnosť úplného rozptylu
- elektrónuv: silné interakcie $\rightarrow$ umiernené roztavené roztoky



neutónuv

$\rightarrow$ komplikovaná interpretácia

neutónuv: vysokenergetické elektróny

Škrobloviny faktor (pre jeden typ rozptyľujúcich častíc)

$$S(\vec{q}) \equiv \frac{1}{N} I(\vec{q}) = \frac{1}{N} \left| \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_{\vec{r}}} \right|^2 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} \left\langle e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_{\vec{r}} - \vec{R}_{\vec{r}'})} \right\rangle$$

$\rightarrow$ počet čarčic
 $\rightarrow$ srednja hodnota

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} \int d^3 r \int d^3 r' e^{i \vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \langle \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) \delta(\vec{r}' - \vec{R}_{i'}) \rangle$$

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) \quad \text{--- kugeln als punkte}$$

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N} \int d^3r \int d^3r' e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \langle \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}') \rangle$$

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{R}$$

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N} \int d^3R e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \int d^3r \langle \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r} + \vec{R}) \rangle$$

všeobecne platí
vzorec (krystal,
kapalina, ...)

dipakety obráť je Fourierovu obrátenu funkciu

$$F(\vec{R}) = \frac{1}{N} \int d^3r \langle \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r} + \vec{R}) \rangle$$

Pattersonova funkcia

v prípade rozptýľených fotónov $\rho(\vec{r}) \approx$ hustota elektrónov

- charakteristika:
- 1, funkcia s periodickou symetriou
 - 2, maximum pre veľký $\vec{R}$ spájajúce 2 atómy
(pre hmotu s N atómami $\approx N(N-1)$ maximum)
↳ táto funkcia interpretovať

Riešenie: vložíme táto funkcia prvok na tužme mierlo v smere funkcie
potom $F(\vec{R})$ má vlnu maximum pre $\vec{R} = 0$
a pre $\vec{R} = \pm \vec{R}_i$, kde $\vec{R}_i$ sú spojnice okolitých
atómov s táto funkcia prvokom $\rightarrow$ ostatná iba nula;
či atómy sú v $+\vec{R}_i, -\vec{R}_i$, alebo v oboch

Štruktúrna korelácia

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N} \int d^3R e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \int d^3r \langle \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r} + \vec{R}) \rangle$$

$$= \sum_{e, e'} \int d^3r \langle \delta(\vec{r} - \vec{r}_e) \delta(\vec{r} + \vec{R} - \vec{r}_{e'}) \rangle =$$

$$= \sum_{e, e'} \langle \delta(\vec{R} + \vec{r}_e - \vec{r}_{e'}) \rangle = \sum_e \delta(\vec{R}) + \sum_{e \neq e'} \langle \delta(\vec{R} + \vec{r}_e - \vec{r}_{e'}) \rangle$$

$$\equiv N \delta(\vec{R}) + \frac{N^2}{V} g(\vec{R})$$

kde sme táto funkcia $g(\vec{R}) = \frac{V}{N^2} \sum_{e \neq e'} \langle \delta(\vec{R} + \vec{r}_e - \vec{r}_{e'}) \rangle$ korelačná funkcia

Ideálny plyn: $g(\vec{R}) = \text{const}$, lebo polohy častíc $\vec{r}, \vec{r}'$ sú nekorelované

norma: $\int d^3R g(\vec{R}) = \frac{N}{N^2} \sum_{\vec{r} \neq \vec{r}'} \underbrace{\int d^3R \langle \delta(\vec{R} + \vec{r} - \vec{r}') \rangle}_{=1}$
 $\stackrel{!}{=} V$

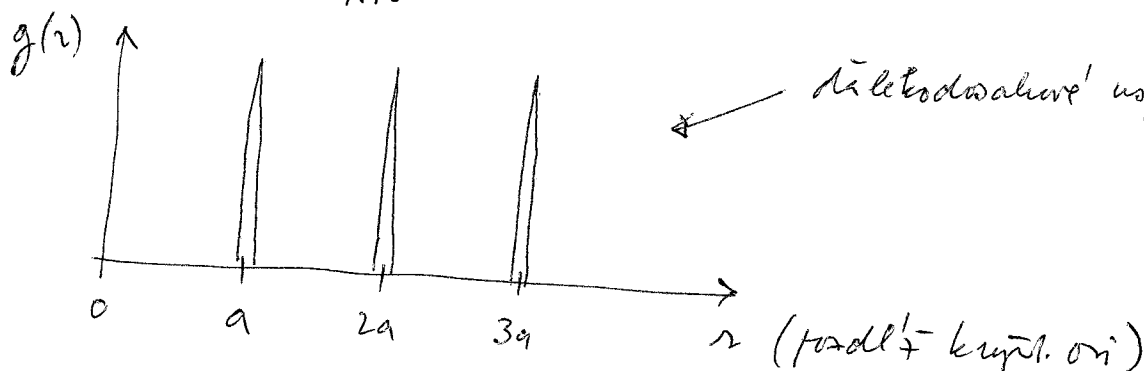
Preto pre ideálny plyn $\boxed{g(\vec{R}) = 1}$

Máme teda $S(\vec{q}) = \int d^3R e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} [\delta(\vec{R}) + n g(\vec{R})]$

$\boxed{S(\vec{q}) = 1 + n \int d^3R g(\vec{R}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}}}$

Meraním $S(\vec{q})$ určujeme $g(\vec{R})$ v kvapaline (veľa viac od mŕtve!)

Kryštál: $g(\vec{R}) = \frac{1}{n} \sum_{\vec{R} \neq 0} \delta(\vec{r} - \vec{R})$ $\vec{R}$ = vektory mriežky



Kvapalina
(vyšetrovať merania)
 $S(\vec{q})$

