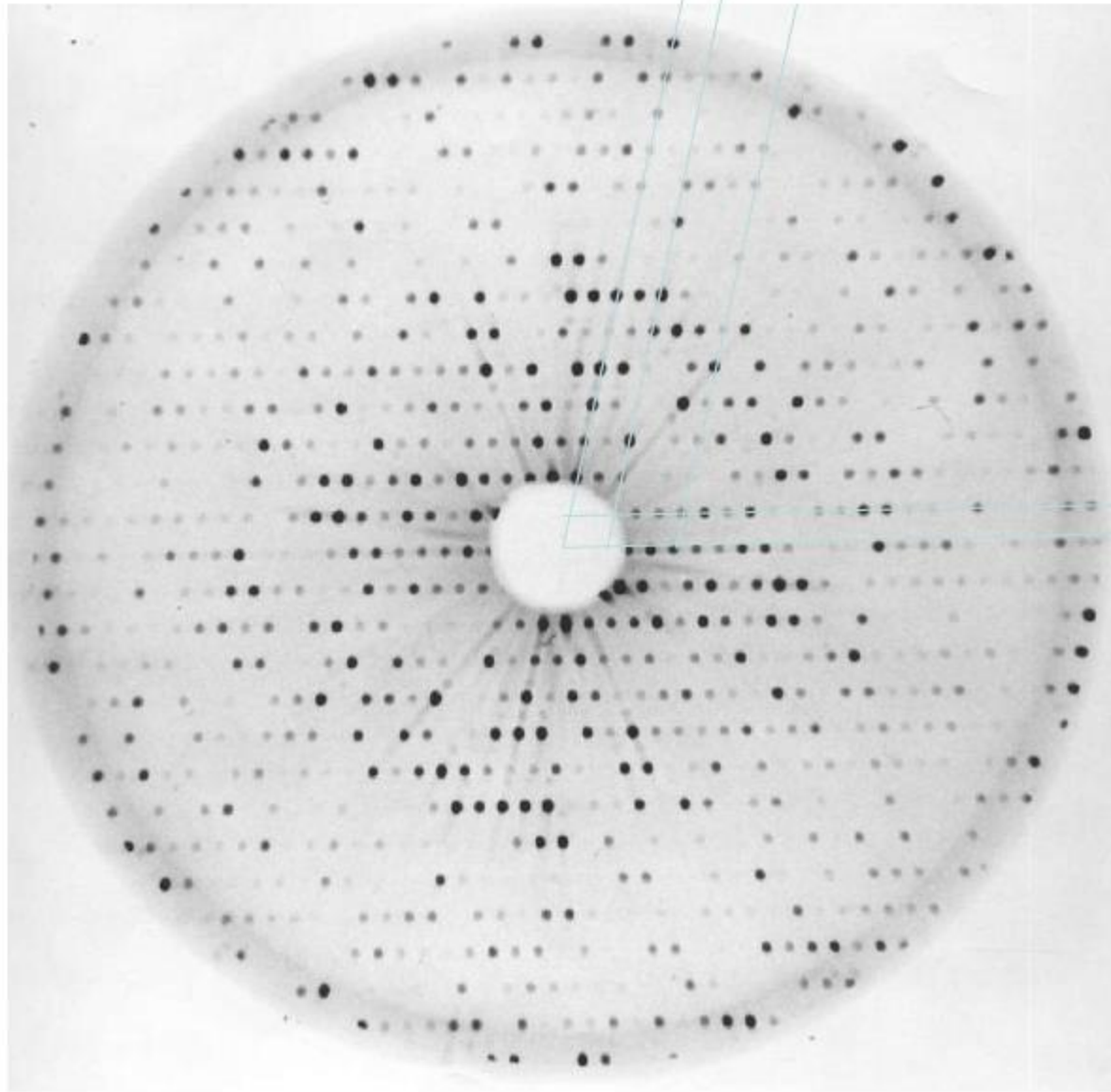
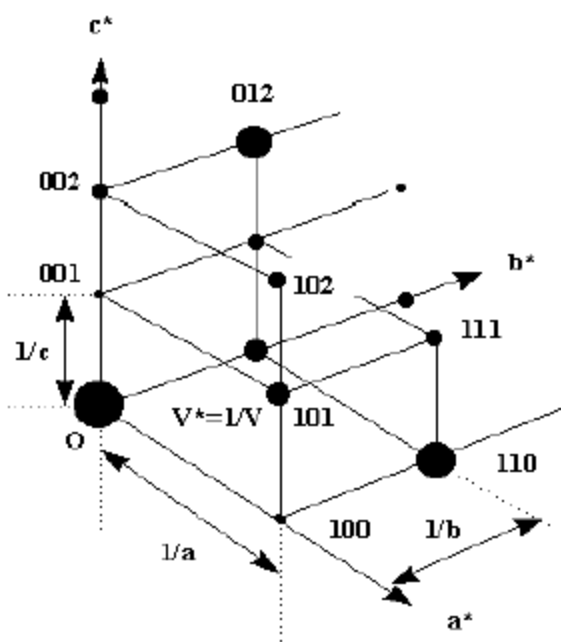


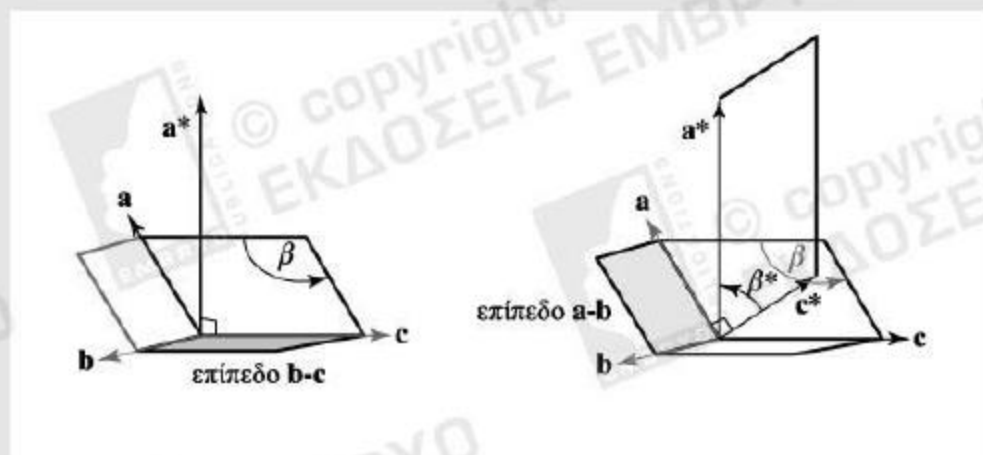
Στην εικόνα περίθλασης, οι ανακλάσεις σχηματίζουν ένα είδος πλέγματος, το αντίστροφο πλέγμα



Οι ανακλάσεις βρίσκονται πάνω σε ένα φανταστικό κρυσταλλικό πλέγμα (κορυφές) που αποτελεί το **αντίστροφο πλέγμα** (reciprocal lattice) που περιγράφεται με ένα σύστημα αξόνων με μοναδιαία διανύσματα a^*, b^*, c^* . Κάθε ανάκλαση χαρακτηρίζεται από τις συντεταγμένες της h, k, l σε αυτό το σύστημα αξόνων (όπου h, k, l είναι ακέραιοι αριθμοί). Για παράδειγμα η ανάκλαση 012 περιγράφεται από το διάνυσμα (ha^*, kb^*, lc^*) όπου $h=0, k=1, l=2$.

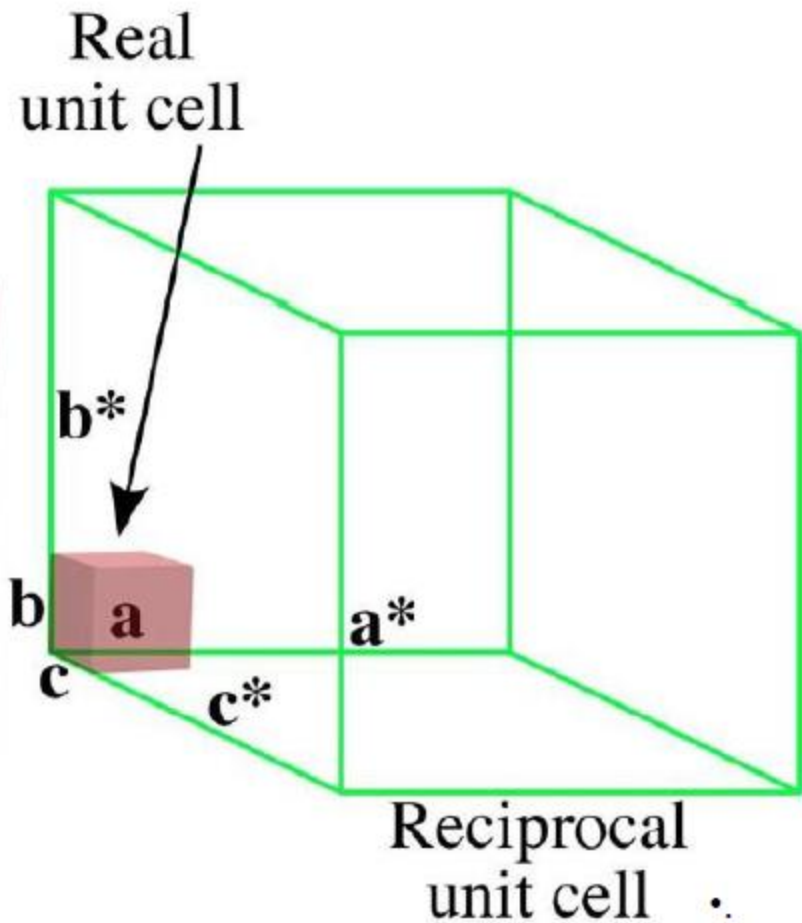
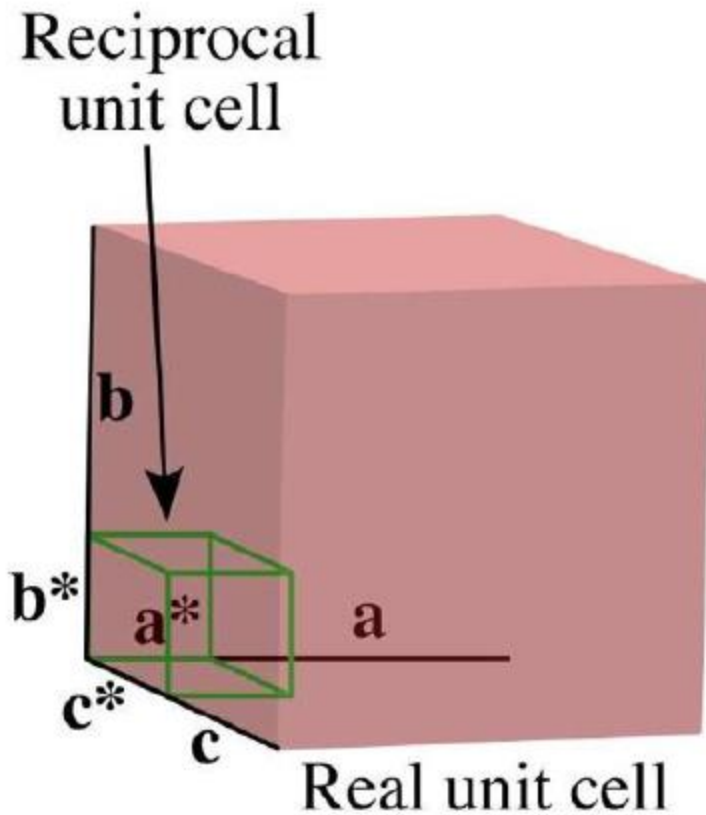


Κατασκευή της μοναδιαίας κυψελίδας του αντιστρόφου πλέγματος

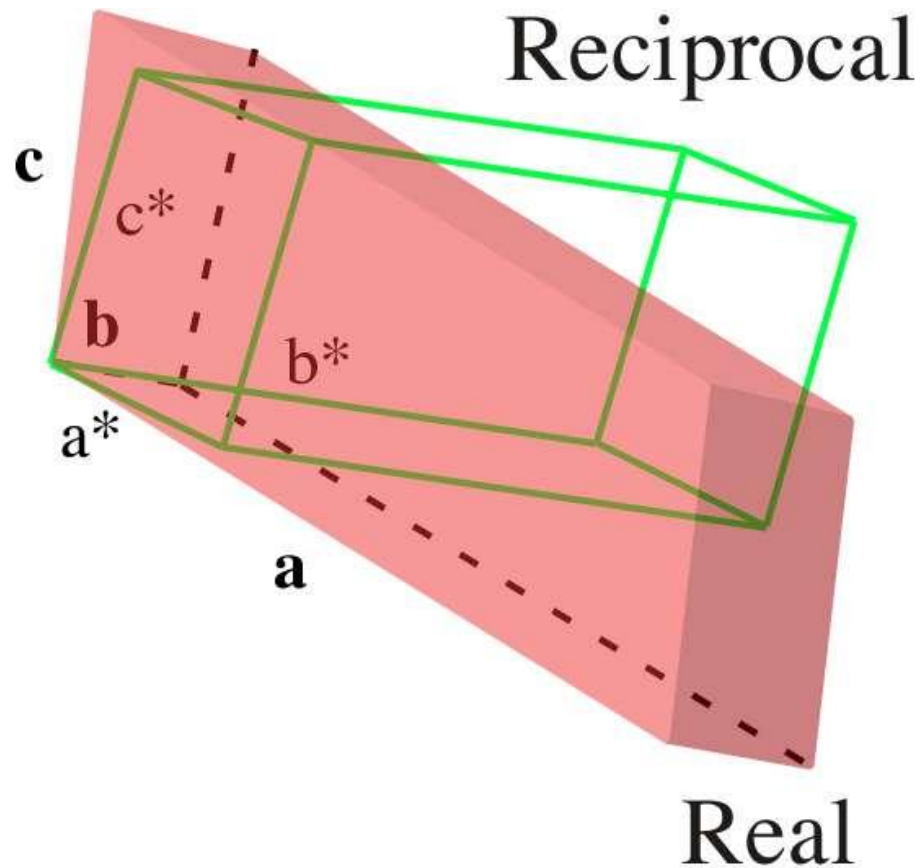


Εικόνα 6.14 Κατασκευή μιας μοναδιαίας κυψελίδας του αντίστροφου χώρου (αντίστροφη μοναδιαία κυψελίδα) από μία μοναδιαία κυψελίδα του πραγματικού χώρου. Στο αριστερό μέρος περιγράφεται ο αντίστροφος άξονας \mathbf{a}^* , ως το διάνυσμα σκέδασης που είναι κάθετο στο επίπεδο ανάκλασης $\mathbf{b-c}$ της μοναδιαίας κυψελίδας στον πραγματικό χώρο (όπου ο \mathbf{b} άξονας τείνει εκτός του επιπέδου της σελίδας). Ομοίως, ο άξονας \mathbf{c}^* είναι κάθετος στο πραγματικό επίπεδο $\mathbf{a-b}$. Η γωνία μεταξύ των \mathbf{a}^* και \mathbf{c}^* αξόνων είναι β^* (που είναι η παραπληρωματική της γωνίας β της πραγματικής μοναδιαίας κυψελίδας).

Στις περιπτώσεις που έχουμε κρυσταλλικό σύστημα όπου όλες τις γωνίες α, β, γ είναι ορθές, τότε και οι άξονες a^*, b^*, c^* αποτελούν ορθογώνιο σύστημα αξόνων (βλ. σχήμα παρακάτω). Επίσης ισχύει $a^* = 1/a, b^* = 1/b, c^* = 1/c$.



Μοναδιαία κυψελίδα στον αντίστροφο χώρο (Γενική περίπτωση – Τρικλινές σύστημα)



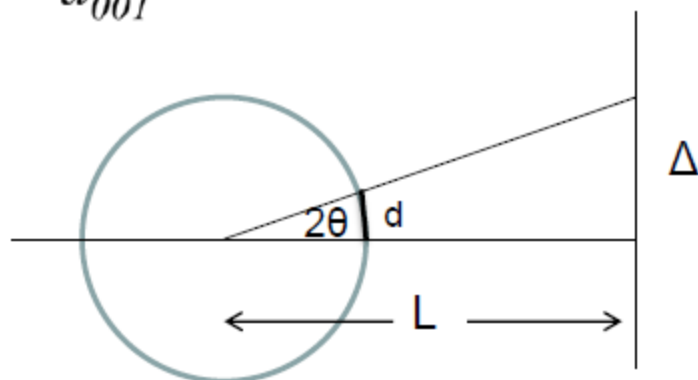
Από τις θέσεις των ανακλάσεων μπορούμε να προσδιορίσουμε τις διαστάσεις της κυψελίδας. Αυτό οφείλεται στο ότι οι αποστάσεις Δ ανάμεσα στις κηλίδες (που είναι ανάλογες με a^* , b^* , c^* αντίστοιχα) συσχετίζονται με τις ακμές a, b, c της μοναδιαίας κυψελίδας. Χρειάζεται να γνωρίζουμε ότι στη συγκεκριμένη περίπτωση, την απόσταση ανιχνευτή-κρυστάλλου L και το μήκος κύματος λ .

Χρησιμοποιώντας τριγωνομετρία, ισχύει

$$\frac{1/d_{hkl}}{1/\lambda} = \sin 2\theta = \sin(\tan^{-1}(\Delta/L))$$

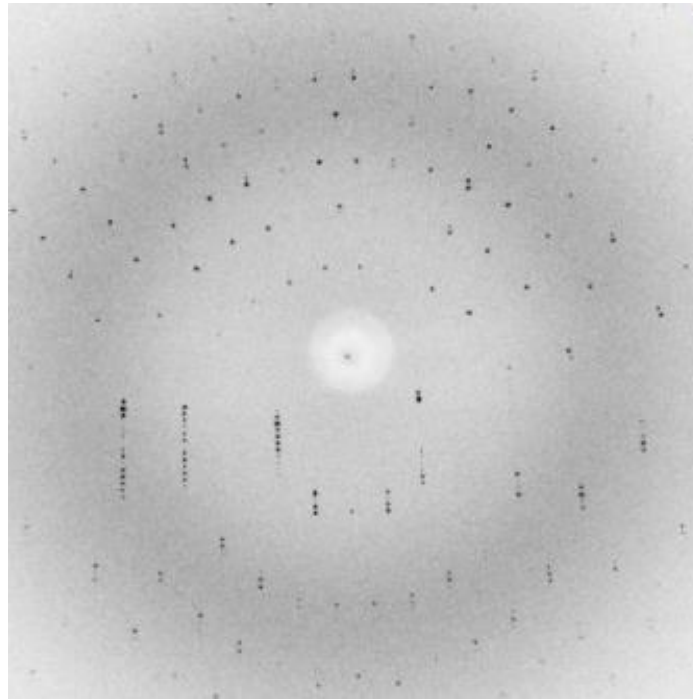
Το d_{hkl} μας δίνει τις αντίστοιχες διαστάσεις a, b της μοναδιαίας κυψελίδας:

$$a = d_{100} \quad b = d_{010} \quad c = d_{001}$$



Εικόνα περίθλασης ακτίνων-χ από ένα πραγματικό κρύσταλλο.

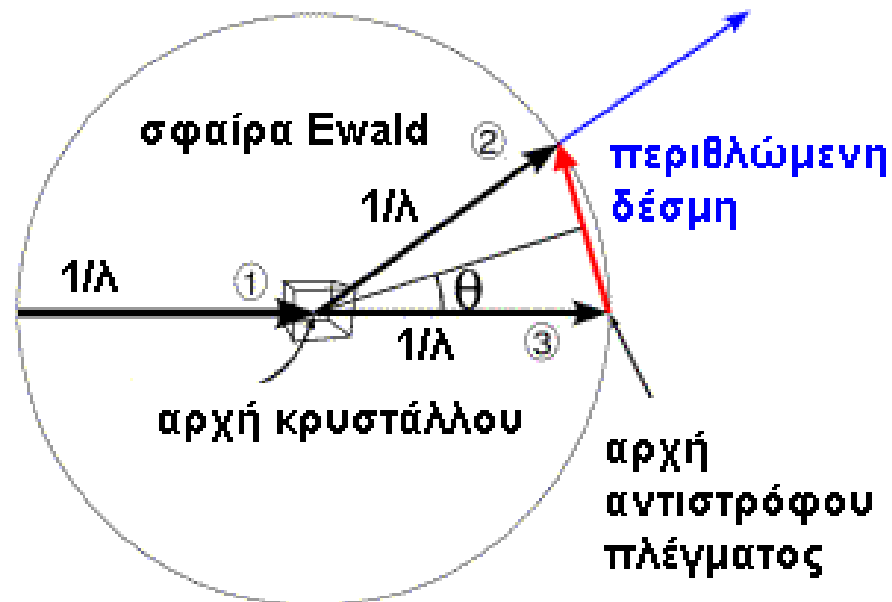
Αν τοποθετήσουμε ένα κρύσταλλο σε μια δέσμη ακτίνων-χ, μερικά από τα επίπεδα Bragg θα έχουν σωστό προσανατολισμό για να δώσουν περίθλαση και θα δούμε σημεία ανακλάσεων απ' αυτά. Αν περιστρέψουμε τον κρύσταλλο, κάποιες άλλες ομάδες επιπέδων θα παίρνουν το σωστό προσανατολισμό με αποτέλεσμα να παρατηρούμε σημεία καινούργιων ανακλάσεων.



Η εικόνα περίθλασης από κρύσταλλο πρωτεΐνης που τοποθετήθηκε σε δέσμη ακτίνων-χ. Ο κρύσταλλος ταλαντώθηκε μπρος-πίσω κατά 1 μοίρα γύρω από οριζόντιο άξονα

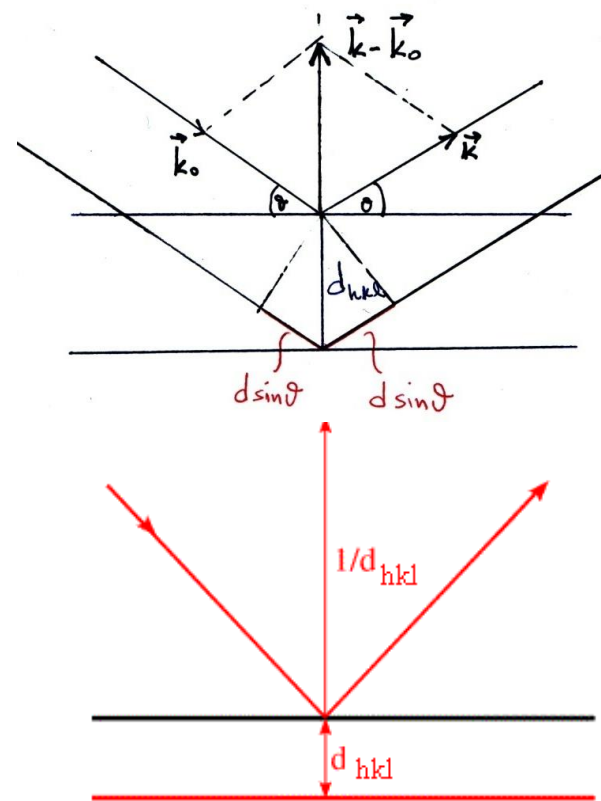
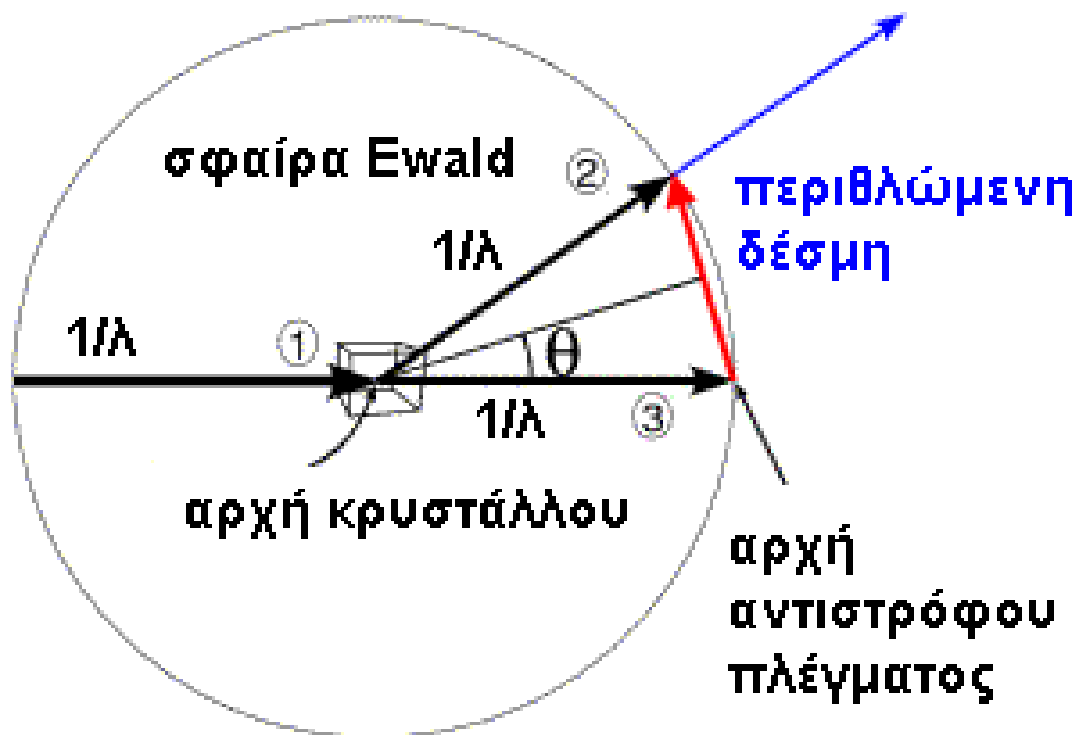
ΣΦΑΙΡΑ EWALD

Ένας άλλος τρόπος να αντιληφθούμε τον αντίστροφο χώρο είναι η γεωμετρική ερμηνεία, την οποία διατύπωσε ο **Ewald** και γι' αυτό ονομάζεται και "σύνθεση Ewald" ή "κατασκευή της σφαίρας περίθλασης". Είναι μια Γεωμετρική κατασκευή που μας εξυπηρετεί στο να αισθητοποιήσουμε ποιά επίπεδα Bragg έχουν το σωστό προσανατολισμό ώστε να προκαλέσουν περίθλαση. Στο σχήμα παριστάνουμε την εισερχόμενη (1) και την περιθλώμενη (2) δέσμη με διανύσματα που έχουν μέτρο $1/\lambda$ ίδιο και για τα δύο. Το διάνυσμα (3) συμβολίζει τη δέσμη ακτίνων-Χ, που περνάει μέσα από τον κρύσταλλο χωρίς να υποστεί περίθλαση. Η γωνία και για τις δύο δέσμες με την οικογένεια των επιπέδων Bragg είναι θ .

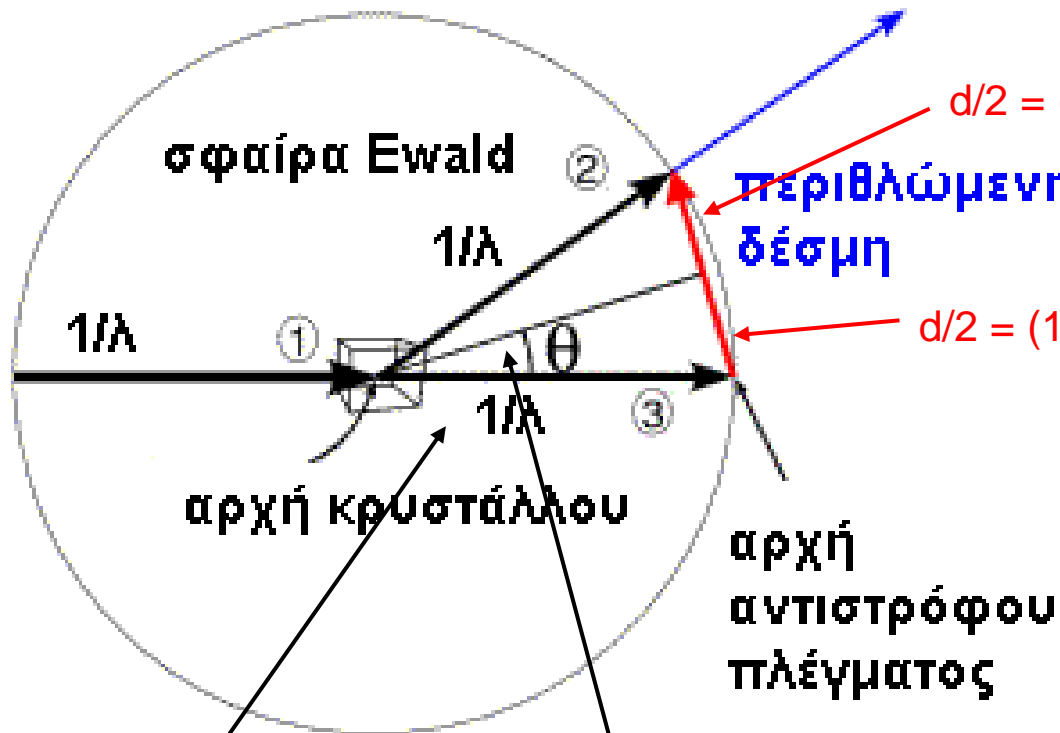


ΣΦΑΙΡΑ EWALD

Η διαφορά του ανακλώμενου από το προσπίπτον διάνυσμα σχεδιάζεται με το διάνυσμα σε κόκκινο χρώμα και, όπως αναφέραμε νωρίτερα, είναι κάθετο στα επίπεδα Bragg, που σημαίνει ότι συμπίπτει με τη διεύθυνση του διανύσματος του αντιστρόφου πλέγματος. Επειδή όλα αυτά τα διανύσματα του αντιστρόφου χώρου αρχίζουν από το ίδιο σημείο, η βάση του κόκκινου διανύσματος πρέπει να καθορίζει την αρχή των συντεταγμένων του αντιστρόφου χώρου.



ΣΦΑΙΡΑ EWALD

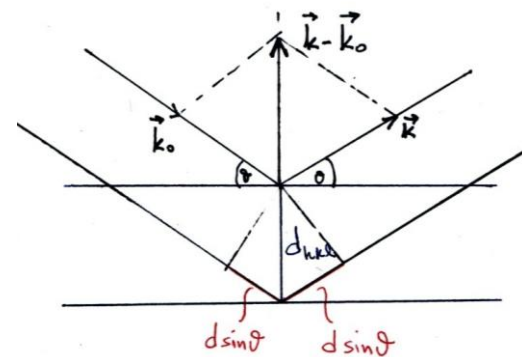


Ισοσκελές τρίγωνο με πλευρές 1/λ

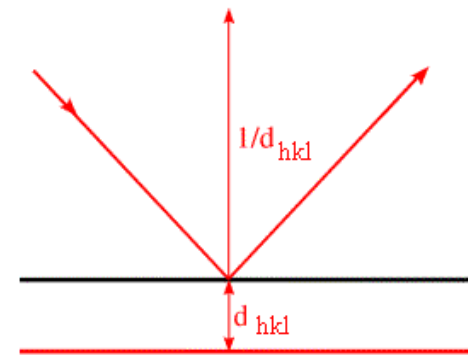
Διχοτόμος και ύψος και διάμεσος

Ικανοποιείται

Κατεύθυνση:



$$d = 2 \sin \theta / \lambda$$



Ικανοποιείται

Νόμος Bragg

$$d_{hkl}^* = \frac{1}{d_{hkl}} = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}$$

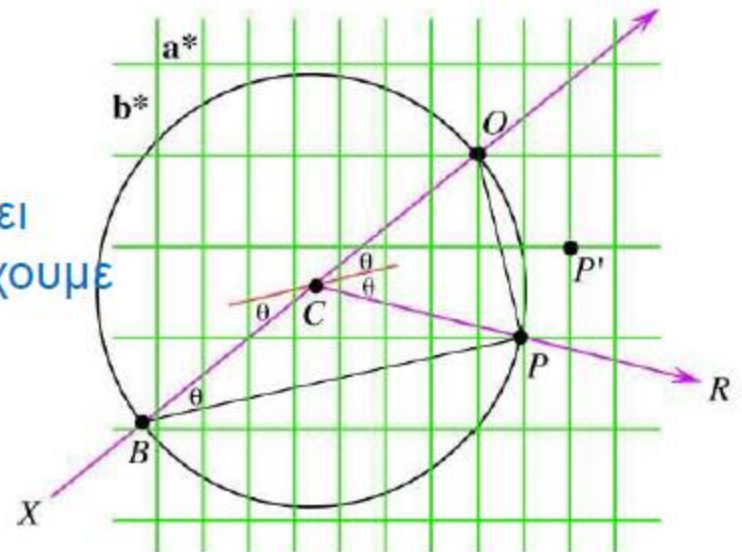
Μέτρο:

$$\frac{\mathbf{k} - \mathbf{k}_0}{2\pi} = \mathbf{d}_{hkl}^* = \mathbf{H}$$

Σφαίρα Ewald (ακτίνας $1/\lambda$)

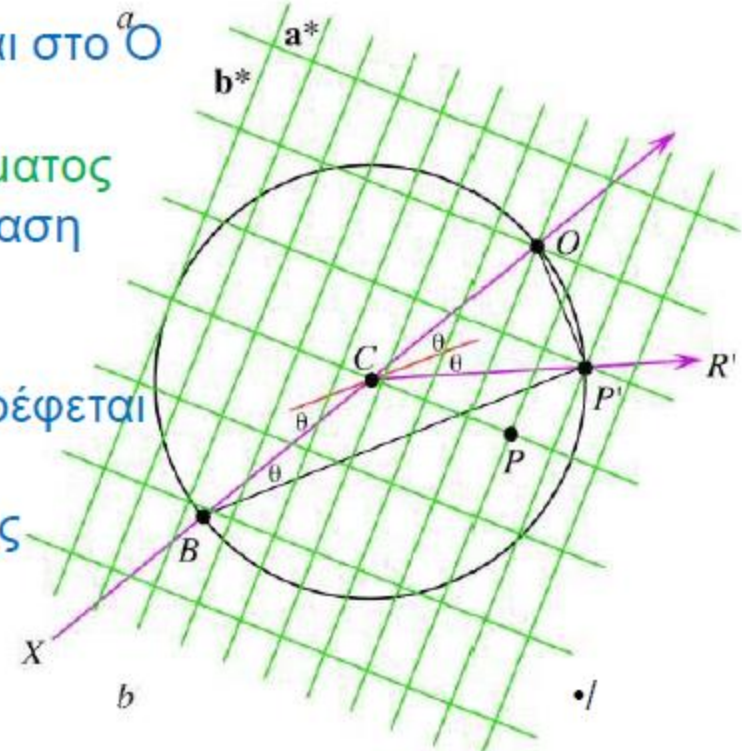
Η γεωμετρική αυτή κατασκευή μας επιτρέπει να προσδιορίσουμε ποιες ανακλάσεις θα έχουμε για συγκεκριμένο προσανατολισμό του κρυστάλλου.

- Ο κρύσταλλος είναι στο C
- XO είναι η κατεύθυνση των ακτίνων- X
- Η αρχή του αντιστρόφου πλέγματος είναι στο O

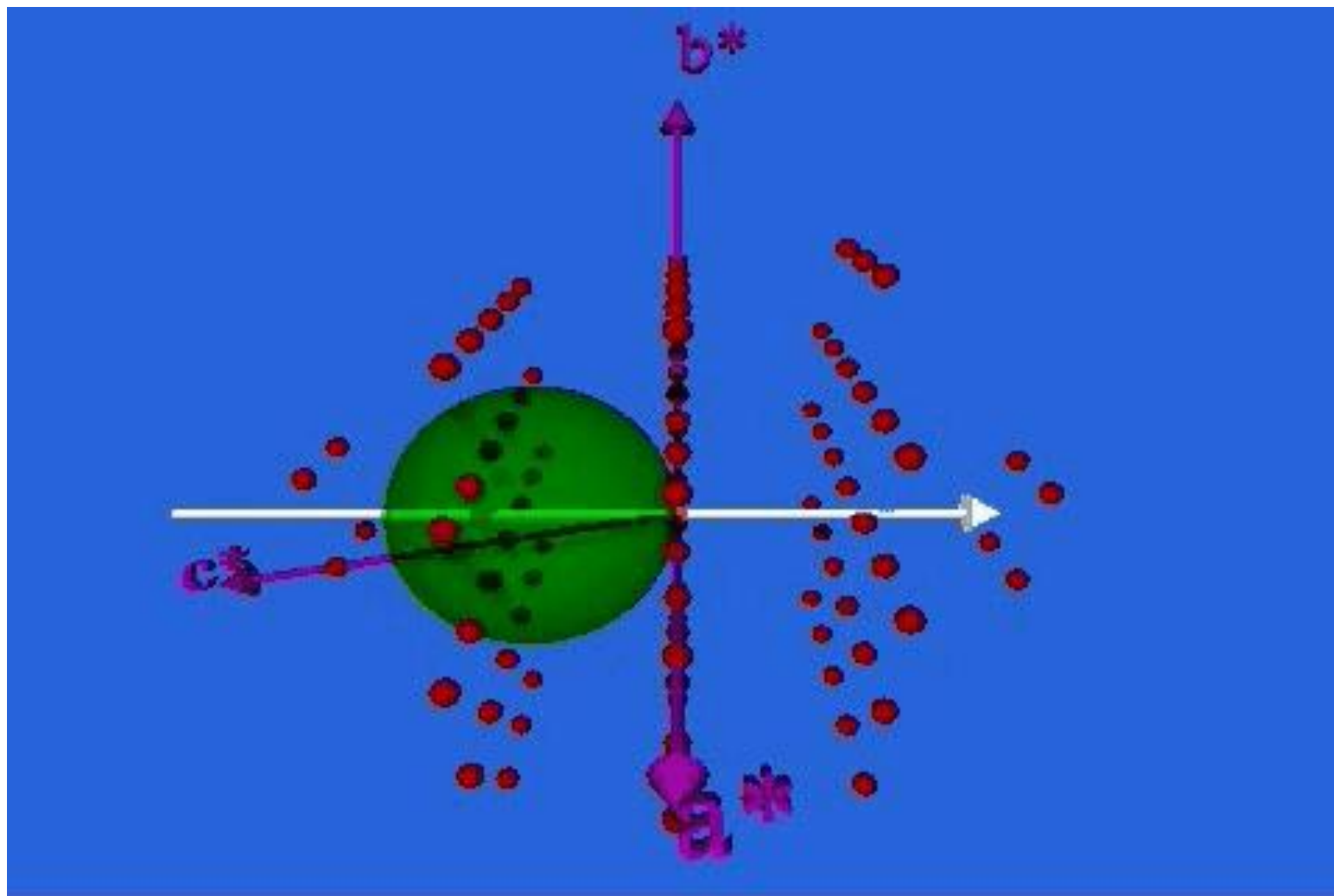


Αν κάποιο σημείο P του αντιστρόφου πλέγματος είναι πάνω στην σφαίρα τότε έχουμε ανάκλαση με κατεύθυνση CP .

Αν ο κρύσταλλος περιστραφεί, τότε περιστρέφεται και το αντίστροφο πλέγμα και ένα άλλο σημείο P' ικανοποιεί τη συνθήκη ανάκλασης



ΣΦΑΙΡΑ EWALD



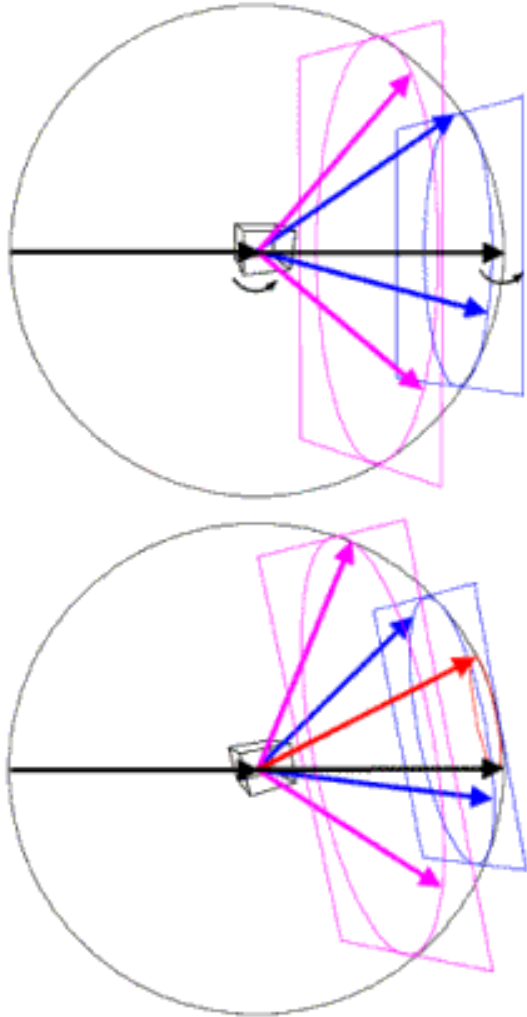
ΣΦΑΙΡΑ EWALD

Η γωνία 2θ μπορεί να είναι οποιαδήποτε ανάμεσα στις 0° και στις 180° . Η περιθλώμενη ακτίνα μπορεί να ακολουθήσει οποιαδήποτε διεύθυνση στις τρεις διαστάσεις, έτσι ώστε το διάνυσμα που την αντιπροσωπεύει μπορεί να έχει την αιχμή του σε οποιοδήποτε σημείο της σφαίρας με ακτίνα $1/\lambda$. Μια τέτοια σφαίρα, που φαίνεται στο σχήμα, ονομάζεται **σφαίρα του Ewald**. Η σκεδαζόμενη ακτίνα έχει τη βάση της στο κέντρο της σφαίρας και γι' αυτό τοποθετούμε εκεί την αρχή των συντεταγμένων του πραγματικού χώρου του κρυστάλλου. Μπορούμε να παρατηρήσουμε από αυτή την κατασκευή, ότι εάν μια οικογένεια επιπέδων βρίσκεται σε συνθήκη περίθλασης, το αντίστοιχο διάνυσμα του αντιστρόφου πλέγματος πρέπει να καταλήγει στην επιφάνεια της σφαίρας Ewald. Αντίστροφα, εάν η αρχική μας δέσμη δεν συναντάει τα επίπεδα με τη σωστή γωνία θ , το αντίστοιχο διάνυσμα του αντιστρόφου χώρου δεν θα καταλήγει επάνω στη σφαίρα του Ewald.

ΣΦΑΙΡΑ EWALD

Με την κατασκευή της σφαίρας Ewald, ορίζουμε δύο αρχές συντεταγμένων, που μπορεί να μας κάνουν να νιώθουμε λίγο άβολα μέχρι να αντιληφθούμε ότι όλη αυτή η περιγραφή είναι μόνο μια γεωμετρική κατασκευή που κάνει τα μαθηματικά της περίθλασης βολικά για να μπορούν να παρασταθούν γραφικά. Επαναλαμβάνουμε ότι η αρχή των συντεταγμένων του πραγματικού χώρου του κρυστάλλου είναι στο κέντρο της σφαίρας Ewald και οι εισερχόμενες ακτίνες- x περιθλώνται από αυτόν τον κρύσταλλο. Η αρχή των συντεταγμένων του αντιστρόφου χώρου βρίσκεται στο σημείο όπου η εισερχόμενη δέσμη των ακτίνων- x συναντά τη σφαίρα του Ewald. Αν περιστρέψουμε τον κρύσταλλο, περιστρέφουμε τα επίπεδα Bragg και συνεπώς περιστρέφεται μαζί ο αντίστροφος χώρος κατά την ίδια διεύθυνση.

ΣΦΑΙΡΑ EWALD

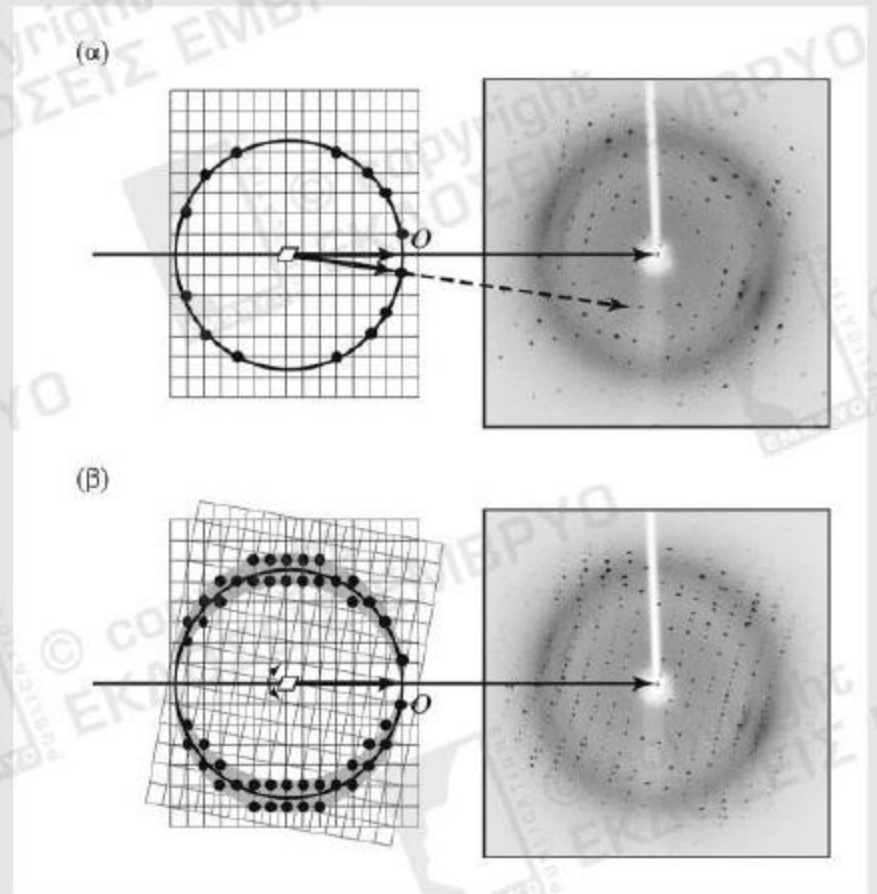


Με το διπλανό σχήμα μπορούμε να απεικονίσουμε επίπεδα σημείων του αντιστρόφου πλέγματος. Αυτά τα επίπεδα τέμνουν τη σφαίρα του Ewald σε κύκλους σημείων που υπακούνε σε συνθήκες περίθλασης.

Όταν τα επίπεδα ρυθμιστούν με κατάλληλες ευθυγραμμίσεις, ώστε να είναι κάθετα στη διεύθυνση διάδοσης των ακτίνων- x , αυτοί οι κύκλοι στην επιφάνεια της σφαίρας Ewald θα προβάλλονται σαν κύκλοι που σχηματίζονται με σημεία με μια κατανομή γύρω από τον άξονα που συμπίπτει με τη διεύθυνση διάδοσης της αρχικής δέσμης. Η επάνω εικόνα δείχνει ένα κρύσταλλο προσανατολισμένο κατά τέτοιο τρόπο, ώστε αυτά τα επίπεδα του αντιστρόφου πλέγματος να είναι κάθετα στη δέσμη των ακτίνων- x . Τα επίπεδα, οι κύκλοι και οι ενδεικτικές περιθλώμενες δέσμες χρωματίζονται με το αντίστοιχο χρώμα για κάθε περίπτωση. Όταν ο κρύσταλλος περιστρέφεται, περιστρέφονται και τα επίπεδα του αντιστρόφου πλέγματος, όπως φαίνεται στην κάτω εικόνα. Με το κόκκινο χρώμα μόλις εμφανίζεται ένα επίπεδο μηδενικής στάθμης λίγο μετά το φραγμό της αρχικής δέσμης.

Στην συλλογή δεδομένων ο κρύσταλλος περιστρέφεται ώστε να καταγραφούν όλες οι ανεξάρτητες ανακλάσεις του αντιστρόφου πλέγματος

Εικόνα 6.17 Περιθλασιγράμματα από ακίνητη και περιστροφική ταλάντωση. Περίθλαση που προκύπτει από την τομή των σημείων του αντιστρόφου πλέγματος με τη σφαίρα Ewald. (α) Εάν ο κρύσταλλος διατηρείται ακίνητος, η πιθανότητα τομής είναι μικρή, με συνέπεια να παρατηρούνται σχετικά λίγες ανακλάσεις. (β) Όταν ο κρύσταλλος περιστρέφεται, το αντίστροφο πλέγμα περιστρέφεται επίσης (κατά την ίδια φορά αλλά περί το σημείο O) και τέμνει τη σφαίρα Ewald σε άλλα σημεία, επιτρέποντας την παρατήρηση περισσότερων ανακλάσεων (σκιασμένες περιοχές).

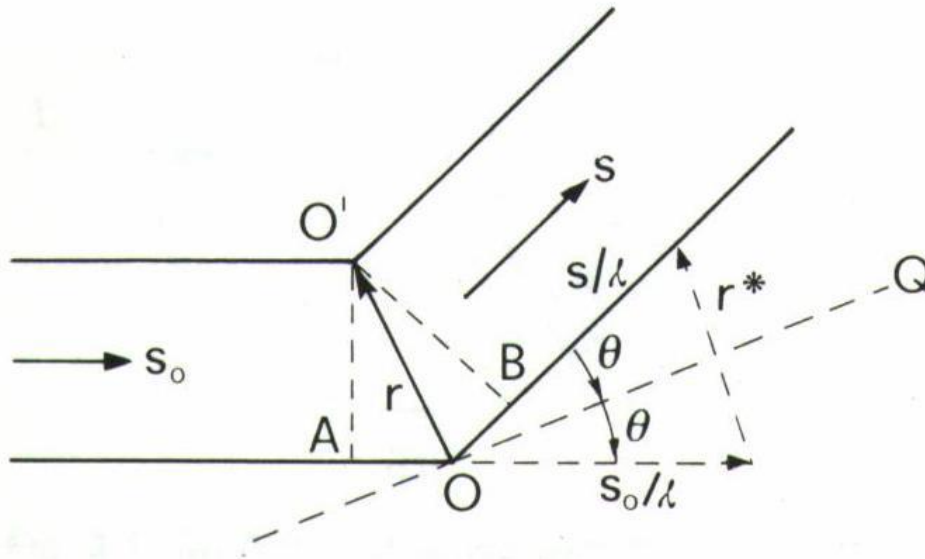


Ο ΠΑΡΑΓΟΝΤΑΣ ΔΟΜΗΣ

ΘΕΩΡΙΑ

ΣΥΜΒΟΛΗ ΣΚΕΔΑΖΟΜΕΝΩΝ ΚΥΜΑΤΩΝ

(από σημειακούς σκεδαστές)



\mathbf{s}_0, \mathbf{s} : Μοναδιαία διανύσματα στην κατεύθυνση της προσπίπτουσας και της σκεδαζόμενης δέσμης

$$\mathbf{k}_0 = \mathbf{s}_0 (2\pi/\lambda) \quad \mathbf{k} = \mathbf{s} (2\pi/\lambda)$$

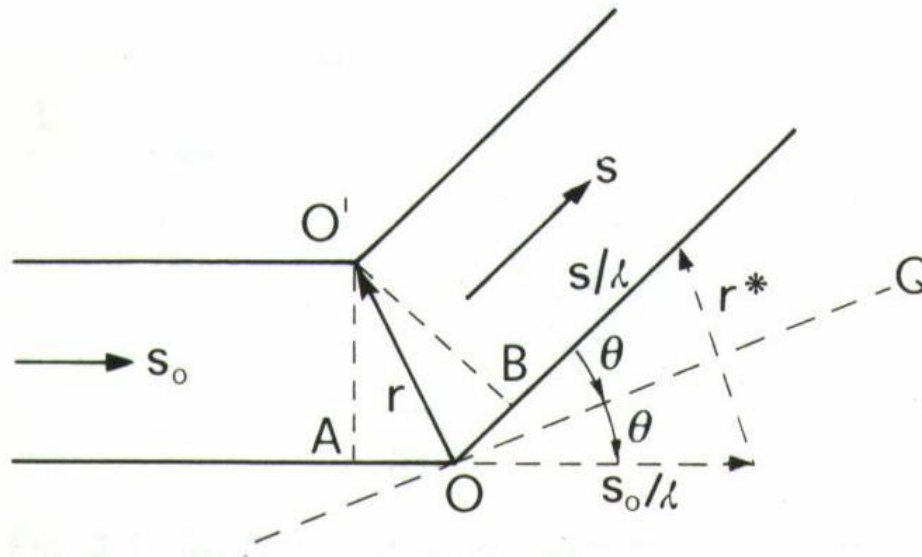
Η διαφορά φάσης μεταξύ των κυμάτων που σκεδάζονται από το O και το O' στην κατεύθυνση \mathbf{s} θα είναι:

$$\delta = (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r} = \frac{2\pi}{\lambda} (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{r} = 2\pi \mathbf{d}^* \cdot \mathbf{r} = 2\pi \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}$$

όπου: $\mathbf{H} = \mathbf{d}^* = \lambda^{-1}(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) = (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)/(2\pi)$ *διάνυσμα σκεδάσεως*

ΣΥΜΒΟΛΗ ΣΚΕΔΑΖΟΜΕΝΩΝ ΚΥΜΑΤΩΝ

(από σημειακούς σκεδαστές)



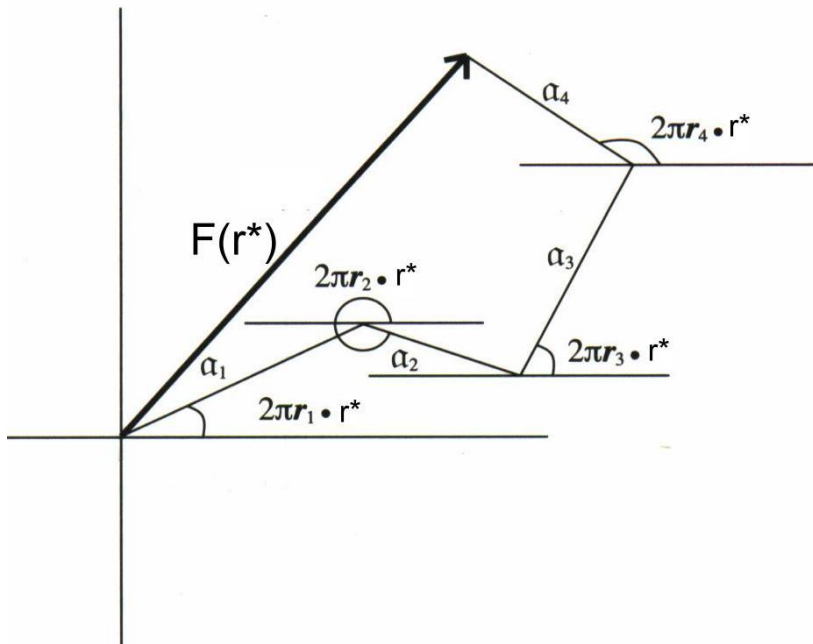
$$|\mathbf{H}| = d^* = 2 \sin\theta / \lambda$$

2θ : Η γωνία που σχηματίζει η προσπίπτουσα δέσμη με την διεύθυνση παρατήρησης

Εάν σκεδαζόμενο κύμα από O : Πλάτος A_0 , φάση θ
τότε από O': $A_0 \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r})$

N σημειακοί σκεδαστές

στις θέσεις \mathbf{r}_j ($j = 1, \dots, N$) ως προς την επιλεγμένη αρχή και A_j το πλάτος σκεδαζομένου κύματος από τον j -σκεδαστή στην διεύθυνση $\mathbf{H} = \mathbf{d}^* = \lambda^{-1}(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0)$



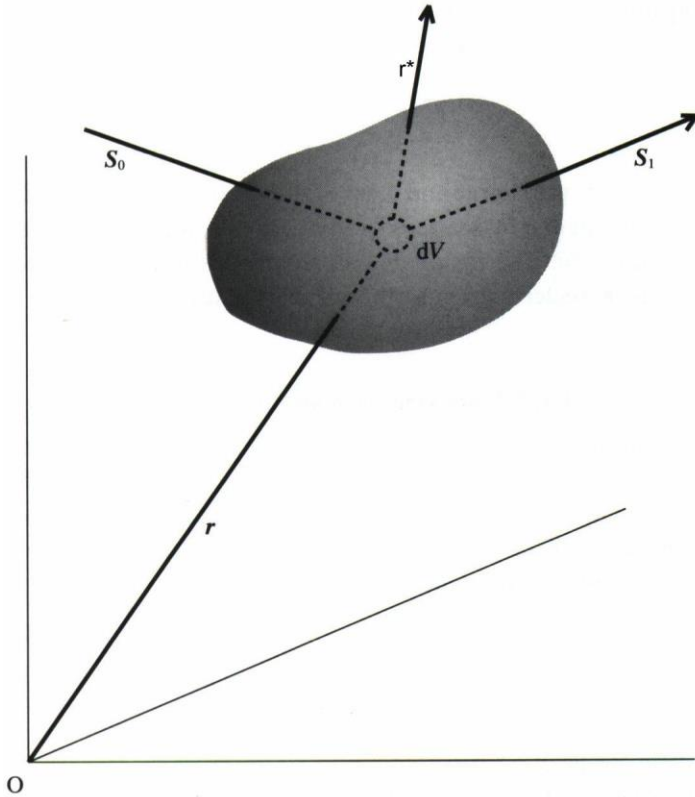
Το συνολικό σκεδαζόμενο κύμα στην διεύθυνση \mathbf{H} , θα δίνεται ως:

$$F(\mathbf{H}) = \sum_{j=1}^N A_j \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_j)$$

Η ένταση της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας στην διεύθυνση \mathbf{r}^* θα είναι:

$$I(\mathbf{H}) = |F(\mathbf{H})|^2$$

Σκέδαση από συνεχή κατανομή σκεδαστικής ύλης



κατανομή πυκνότητας $\rho(\mathbf{r}) \rightarrow$
στον στοιχειώδη όγκο dV
 $\rho(\mathbf{r})dV$ στοιχ. σκεδαστ.
το σκεδαζόμενο κύμα:
 $\rho(\mathbf{r}) dV \exp (2\pi i \mathbf{r}^* \cdot \mathbf{r})$

Το συνολικό σκεδαζόμενο κύμα στην διεύθυνση \mathbf{r}^* , θα δίνεται τότε ως:

$$F(\mathbf{H}) = \int_V \rho(\mathbf{r}) \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}) dV$$

$$F(\mathbf{H}) = \text{F.T.} [\rho(\mathbf{r})]$$

Σκέδαση από ελεύθερο ηλεκτρόνιο - Σκέδαση Thomson

$$I_{2\theta} = I_0 \frac{e^4}{m^2 r^2 c^4} \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}$$

Όπου: e και m , φορτίο και μάζα ηλεκτρονίου, c ταχύτητα φωτός

I_0 ένταση μη πολωμένης προσπίπτουσας δέσμης

$I_{2\theta}$ ένταση σκεδαζόμενης ακτινοβολίας στη διεύθυνση 2θ ανά μονάδα στερεάς γωνίας

$$P = (1 + \cos^2 2\theta) / 2$$

Παράγοντας πόλωσης

✗ Νετρόνια

✗ Πρωτόνια $(e/m)^2$ 1837^2 μικρότερος των ηλεκτρονίων

Σύμφωνη σκεδαζόμενη ακτινοβολία

$$\frac{I}{I_{eTh}} = f^2$$

f → Παράγοντας Σκέδασης

Σκέδαση από άτομα

$\psi_1(\mathbf{r}), \dots, \psi_Z(\mathbf{r})$: κυματοσυναρτήσεις Z ατομικών ηλεκτρονίων
 $\rho_{ej} d\nu = |\psi_j(\mathbf{r})|^2 d\nu$: πιθανότητα να βρίσκεται το j ηλεκτρόνιο στον όγκο $d\nu$

Αν κάθε συνάρτηση $\psi_j(\mathbf{r})$ θεωρείται ανεξάρτητη από τις άλλες τότε:

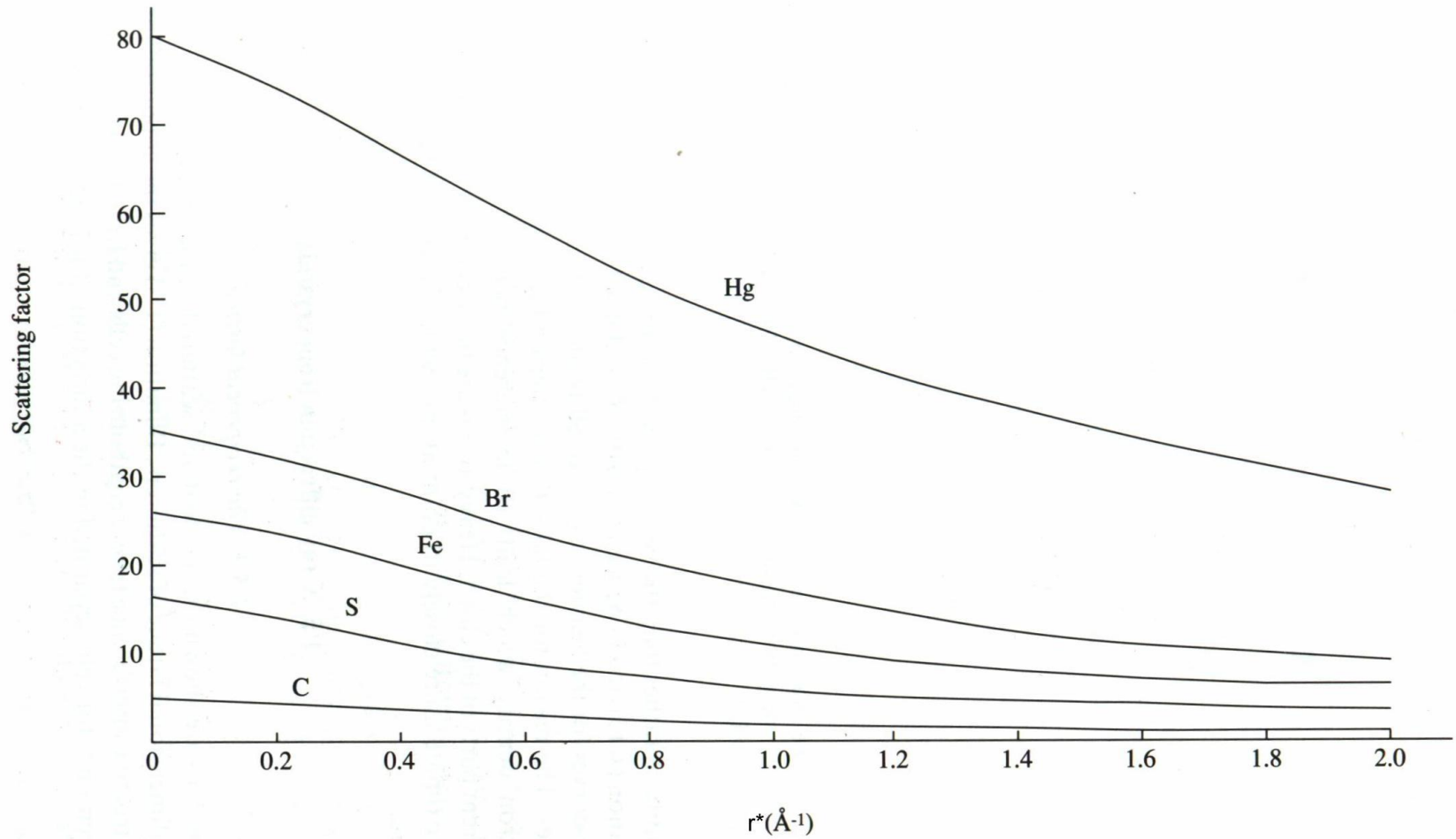
$$\rho_a(\mathbf{r}) d\nu = \left(\sum_{j=1}^Z \rho_{ej} \right) d\nu \quad \text{Πιθανότητα ένα } e^- \text{ να βρίσκεται στον όγκο } d\nu$$

Ατομικός παράγοντας Σκέδασης

Υπόθεση σφαιρικής συμμετρίας

$$f_a(\mathbf{H}) = \sum_{j=1}^Z f_{ej}$$

Ατομικοί παράγοντες σκέδασης συναρτήσει του $H = r^*$



Σκέδαση από μόριο ή μοναδιαία κυψελίδα

$$\rho_M(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N \rho_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$$

$\rho_M(\mathbf{r})$: ηλεκτρονική πυκνότητα ενός προσεγγιστικού προτύπου του μορίου - συνάθροιση σφαιρικών ελεύθερων ατόμων που τοποθετούνται στη γεωμετρία του μορίου

$$\begin{aligned} F_M(\mathbf{H}) &= \int_S \sum_{j=1}^N \rho_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{j=1}^N \int_S \rho_j(\mathbf{R}_j) \exp[2\pi i \mathbf{H} \cdot (\mathbf{r}_j + \mathbf{R}_j)] d\mathbf{r} \\ &= \sum_{j=1}^N f_j(\mathbf{H}) \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_j) \end{aligned}$$

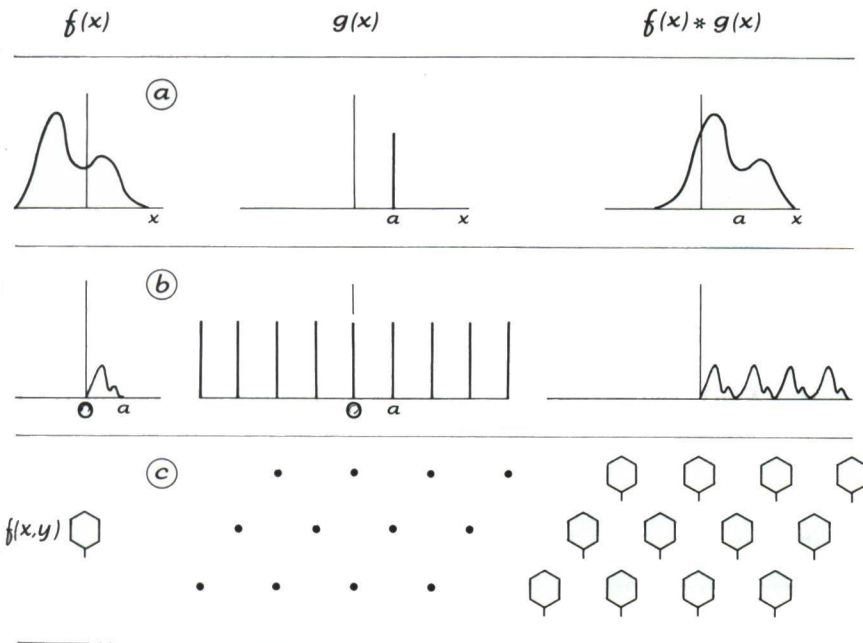
Περίθλαση από κρύσταλλο

$$L(\mathbf{r}) = \sum_{u,v,w=-\infty}^{+\infty} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{u,v,w})$$

Όπου: δ-συνάρτηση Dirac

και $\mathbf{r}_{u,v,w} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$ (u, v, w ακέραιοι)

ένα γενικό διάνυσμα του πλέγματος



Η συνάρτηση που δίνει την ηλεκτρονική πυκνότητα για όλον τον κρύσταλλο

$$\rho_{\text{κρ.}}(\mathbf{r}) = \rho_M(\mathbf{r}) \otimes L(\mathbf{r})$$

Συνέλιξη

Σκεδαζόμενο κύμα από όλο τον κρύσταλλο στην διεύθυνση \mathbf{H}

$$F(\mathbf{H}) = FT[\rho_M(\mathbf{r})] \cdot FT[L(\mathbf{r})]$$

Ο ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΟΣ ΧΩΡΟΣ

$$FT[L(\mathbf{r})] = FT\left[\sum_{u,v,w=-\infty}^{+\infty} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{u,v,w})\right] = \frac{1}{V} L(\mathbf{r}^*) = \frac{1}{V} \sum_{h,k,l=-\infty}^{+\infty} \delta(\mathbf{r}^* - \mathbf{H})$$

Ο FT ενός πλέγματος στον ορθό χώρο \rightarrow Πλέγμα στον αντίστροφο χώρο Fourier

Αντίστροφος χώρος

$V = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \wedge \mathbf{c}$ όγκος της μοναδιαίας κυψελίδας

$$\mathbf{a}^* = \mathbf{b} \wedge \mathbf{c} / V, \quad \mathbf{b}^* = \mathbf{c} \wedge \mathbf{a} / V, \quad \mathbf{c}^* = \mathbf{a} \wedge \mathbf{b} / V$$

$$\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{c} = \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{a} = \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c} = \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{a} = \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{b} = 0 \quad \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a} = \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{b} = \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{c} = 1$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}^* = h$$

$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{r}^* = k$$

$$\mathbf{c} \cdot \mathbf{r}^* = l$$

$$\mathbf{r}^*_{\mathbf{H}} = \mathbf{H} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$$

ένα γενικό διάνυσμα του *αντίστροφου χώρου*, ο οποίος ορίζεται από τα διανύσματα \mathbf{a}^* , \mathbf{b}^* , \mathbf{c}^* , και είναι κάθετο στην οικογένεια των πλεγματικών επιπέδων (hkl)

ΠΑΡΑΓΟΝΤΑΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗΣ ΔΟΜΗΣ

$$F(\mathbf{r}^*) = FT[\rho_M(\mathbf{r})] \cdot FT[L(\mathbf{r})] = F_M(\mathbf{r}^*) \cdot \frac{1}{V} \sum_{h,k,l=-\infty}^{+\infty} \delta(\mathbf{r}^* - \mathbf{H})$$

Ο κρύσταλλος, εμφανίζει περιοδικότητα στη διάταξη των δομικών μονάδων του, με αποτέλεσμα να παρατηρείται μη-μηδενικό πλάτος για το σκεδαζόμενο σε αυτόν κύμα μόνο όταν το \mathbf{r}^* ταυτίζεται με ένα σημείο του αντίστροφου πλέγματος δηλαδή:

$$\mathbf{r}^* = \mathbf{H}$$

Για την περίθλαση της ακτινοβολίας από κρύσταλλο, η συνάρτηση $F(\mathbf{H})$ ονομάζεται *παράγοντας δομής* με διανυσματικό δείκτη \mathbf{H} (ή δεικτών h, k, l)

$$F_{\mathbf{H}} = \sum_{j=1}^N f_j \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_j)$$

Π.Θ.

όπου N είναι ο αριθμός των ατόμων στη μοναδιαία κυψελίδα

Παράγοντας δομής \leftarrow FT \rightarrow Συνάρτηση Ηλεκτρονικής πυκνότητας

$$F_{\mathbf{H}} = |F_{\mathbf{H}}| \exp(i\varphi_{\mathbf{H}})$$

$\varphi_{\mathbf{H}}$: φάση του παράγοντα δομής $F_{\mathbf{H}}$

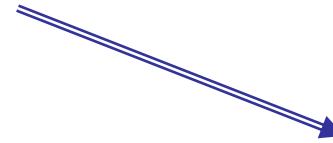
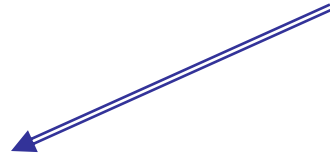
$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{h,k,l=-\infty}^{+\infty} |F_{\mathbf{H}}| \exp[-2\pi i(hx + ky + lz)]$$

όπου x, y, z , είναι οι κλασματικές συντεταγμένες του σημείου που ορίζεται από το διάνυσμα \mathbf{r} . Οι ατομικές θέσεις θα αντιστοιχούν στα μέγιστα της $\rho(\mathbf{r})$.

ΣΥΝΘΕΣΗ FOURIER \rightarrow «*Μαθηματικοί φακοί*» για την
εστίαση των ακτίνων-x i



ΜΕΘΟΔΟΙ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΩΝ ΔΟΜΩΝ



Μόνο από τα δεδομένα περίθλασης
στο συγκεκριμένο μονοκρύσταλλο

Φυσικές Μέθοδοι

Επιπλέον των δεδομένων περίθλασης

1) Μέθοδος επαναληπτικών δοκιμών
(Trial-and-error method)

1) Μέθοδος ισόμορφης αντικατάστασης

2) Μέθοδος Patterson

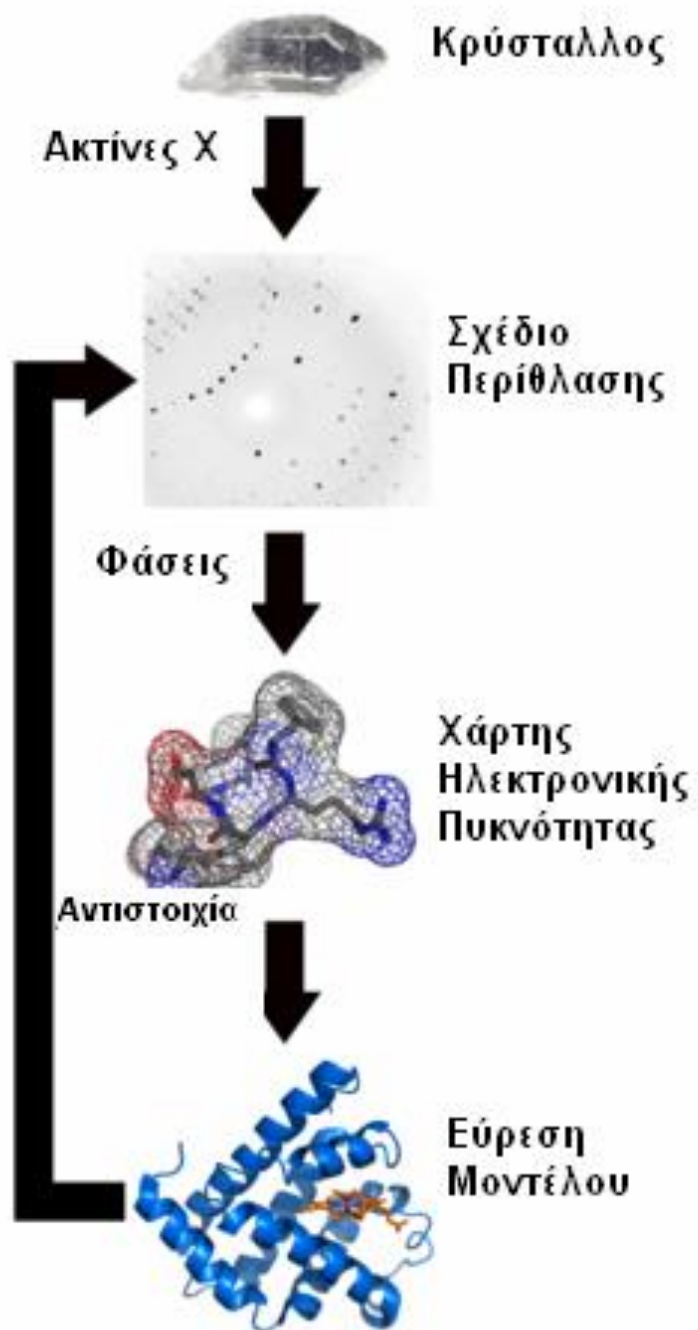
2) Μέθοδος ανώμαλης σκέδασης

3) Άμεσες Μέθοδοι

(Μέθοδος Διδύμων Μεταβλητών)

3) Επέκταση και βελτιστοποίηση φάσεων

4) Μέθοδος ανακλάσεων από πολλαπλές
ακτίνες (multi-beam reflection methods)



Ο δείκτης αξιοπιστίας R

Στην κρυσταλλογραφία, ο παράγοντας-R (**R-factor**) ή δείκτης αξιοπιστίας R, είναι μια μέτρηση της συμφωνίας μεταξύ του κρυσταλλογραφικού μοντέλου και των πειραματικών δεδομένων περίθλασης ακτίνων-X. Είναι, δηλ., μια μέτρηση του πόσο καλά η βελτιστοποιημένη δομή μπορεί να «προβλέψει» τα πειραματικά δεδομένα.

$$R = \frac{\sum ||F_{\text{obs}}| - |F_{\text{calc}}||}{\sum |F_{\text{obs}}|}$$

Όπου: $|F_{\text{obs}}|$ είναι το μέτρο των παραγόντων δομής που προσδιορίζεται πειραματικά $I_{hkl} \propto |F(hkl)|^2$

$|F_{\text{calc}}|$ είναι το μέτρο των (υπολογισμένων) παραγόντων δομής που εξάγονται από το προτεινόμενο μοντέλο

και η άθροιση (Σ) εκτείνεται σε όλες τις πειραματικά παρατηρούμενες ανακλάσεις hkl

Ο δείκτης αξιοπιστίας R

$$R = \frac{\sum ||F_{\text{obs}}| - |F_{\text{calc}}||}{\sum |F_{\text{obs}}|}$$

- Θεωρητικά, η ελάχιστη τιμή που μπορεί να πάρει ο R, είναι μηδέν. Σε αυτήν την περίπτωση θα είχαμε τέλεια συμφωνία μεταξύ των πειραματικών δεδομένων και των παραγόντων δομής που προκύπτουν από το μοντέλο.
- Δεν υπάρχει κάποια μέγιστη θεωρητική τιμή για τον R. Στην πράξη, οι τιμές του θα πρέπει (για μικρά μόρια) να είναι μικρότερες της μονάδας.
- Διάφορα πειραματικά σφάλματα, ανεβάζουν την τιμή του R ακόμα και αν το μοντέλο είναι τέλει και η συμβολή τους είναι ακόμη μεγαλύτερη όταν τα πειραματικά δεδομένα είναι ασθενή ή ελλιπή όπως π.χ. στην περίπτωση δεδομένων χαμηλής διακριτότητας.
- Οι ατέλειες του μοντέλου (λανθασμένα ή ημιτελή μέρη του, μη ορθά αποδιδόμενη αποδιάταξη, κλπ) συμβάλουν σημαντικά στην αύξηση του R. Με αυτόν τον τρόπο, η τιμή του R καθίσταται σημαντικό κριτήριο για την εκτίμηση της προόδου και του τελικού αποτελέσματος της βελτιστοποίησης του κρυσταλλογραφικού μοντέλου.



ELSEVIER



Note

An investigation of the inclusion complex of cyclomaltoheptaose (β -cyclodextrin) with *N*-methylantranilic acid in the solid state

N. R. Lien^a, J. R. Telford^{b,*}

^a Department of Chemistry, Whitman College, Walla Walla, WA 99362, USA

^b College of Liberal Arts and Sciences, Maryville University, St. Louis, MO 63141, USA

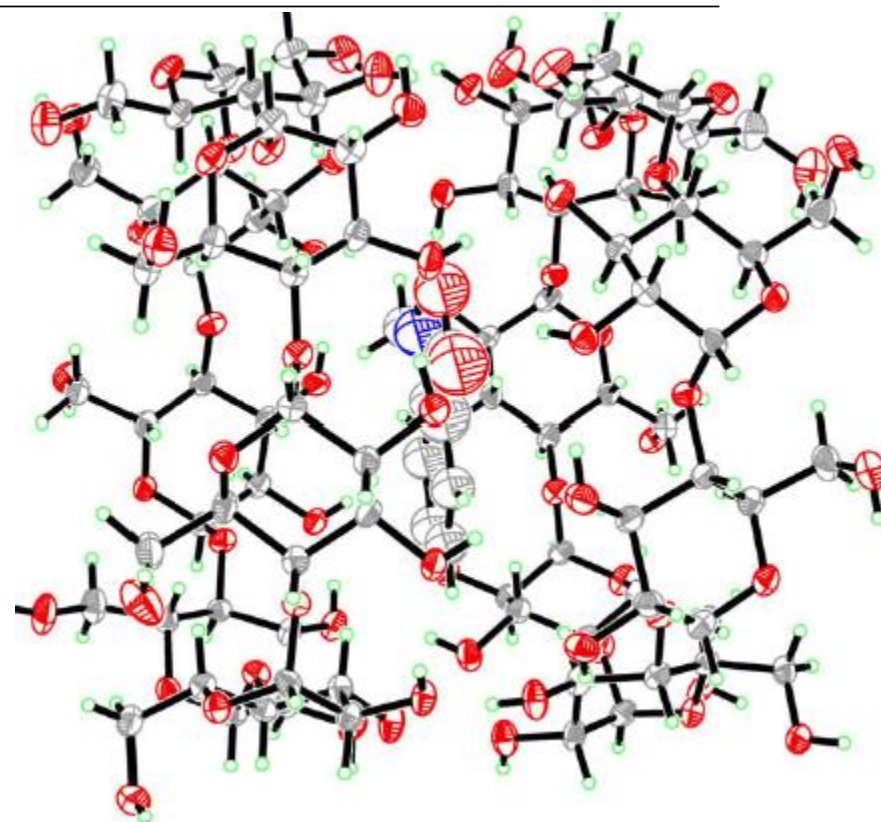
Table 2
Summary of crystal data and intensity collection and structure refinement parameters

Formula (monomer)	C ₉₂ H ₁₄₉ NO ₇₂
Molecular weight	2421.13
Color and habit	Colorless prism
Crystal system	Triclinic
Space group	P1
<i>Unit cell dimensions</i>	
<i>a</i> (Å)	15.2773(15)
<i>b</i> (Å)	15.4710(15)
<i>c</i> (Å)	17.9627(18)
α (°)	99.632(5)
β (°)	113.416(5)
γ (°)	102.818(5)
<i>V</i> (Å ³)	3640.7(6)
<i>Z</i>	1
Crystal dimensions (mm)	0.36 × 0.22 × 0.22
<i>D</i> _{calcd} (g cm ⁻³)	1.410
Absorption coefficient (mm ⁻¹)	0.164
Goodness-of-fit on <i>F</i> ^{2a}	1.036
<i>R</i> ₁ ^b	0.0560
<i>wR</i> ₂ ^c	0.1545

^a $GOF = [\sum[w(F_o^2 - F_c^2)^2]/(M - N)]^{1/2}$ (*M* = number of reflections, *N* = number of parameters refined).

^b $R_1 = \sum||F_o| - |F_c||/\sum|F_o|$.

^c $wR^2 = [\sum[w(F_o^2 - F_c^2)^2]/\sum[w(F_o^2)^2]]^{1/2}$.



ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ι

Αλληλεπίδραση Η/Μ ακτινοβολίας - Ύλης

Πόλωση Η/Μ ακτινοβολίας μέσα στο υλικό → διαχωρισμό φορτίων μέσα στο υλικό → εμφανίζεται δίπολο που δονείται με την συχνότητα κύματος

Τα e των κρυστάλλων που δέχονται τις ακτίνες- x συμπεριφέρονται σαν διηλεκτρικά γι' αυτά τα μικρά μήκη κύματος.

Παραλείπουμε τις πλεγματικές ανωμαλίες. Τα e δονούνται με $y = y_0 \exp(i\omega t)$

Η πολωσιμότητα υπολογίζεται από την εξίσωση κίνησης:

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = \frac{eE}{m} = \frac{eE_0}{m} \exp(i\omega t) \Rightarrow y = \frac{-eE}{m\omega^2} + c$$

Η πόλωση α είναι η διπολική ροπή ανά μονάδα πεδίου: $\alpha = ey/E = -$

$\frac{e^2}{m\omega^2}$
Γνωρίζουμε ότι ο δείκτης διάθλασης: $n \sim 1 + \alpha N/\epsilon_0$ (N αρ. e ανά μονάδα όγκου)

$$n^2 = 1 - \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m \omega^2} = 1 - \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m 4\pi^2 \nu^2} = 1 - \frac{\nu_p^2}{\nu^2}$$

Δείκτης διάθλασης για κάθε διηλεκτρικό όταν η πόλωση οφείλεται σε «ελεύθερα» e^-

Η ν_p είναι τυπική για κάθε διηλεκτρικό. Για μέταλλα αντιστοιχεί σε συχνότητα **υπεριώδους ακτινοβολίας**.



Σκέδαση νετρονίων

Νετρόνιο: Αδρόνιο – βαρυόνιο, spin $\frac{1}{2}$

Τα πειράματα περίθλασης νετρονίων (n-diffraction) απαιτούν υψηλές ροές που παράγονται στους σύγχρονους αντιδραστήρες.

Εκμεταλλευόμαστε: Υψηλές εντάσεις, χαμηλού μήκους κύματος ($\lambda < 1\text{\AA}$)

Αλληλεπίδραση νετρονίων – ατόμων

Συνίσταται: - στην αλληλεπίδραση νετρονίου – πυρήνα (αποκλειστική για Μη Μαγνητικά υλικά)
- και στην αλληλεπίδραση της μαγνητικής ροπής που συνδέεται με το spin του νετρονίου με τη μαγνητική ροπή του ατόμου (άτομα με ασυμπλήρωτες τις εξωτερικές στοιβάδες ηλεκτρονίων – Μαγνητικά υλικά)

Η αλληλεπίδραση των νετρονίων με την ύλη είναι ασθενέστερη συγκριτικά με αυτήν των ακτίνων-x και των ηλεκτρονίων. Για το λόγο αυτό η μέτρηση εντάσεων σκεδαζομένων νετρονίων απαιτεί **μεγάλη ροή νετρονίων και κρυστάλλους μεγέθους αρκετών mm.**



Σύμφωνες πηγές

Η απλούστερη κατάσταση που οδηγεί σε συμβολή παρουσιάζεται, όταν έχουμε δύο απaráλλαχτες σημειακές πηγές σε διαφορετικές θέσεις και η καθεμία εκπέμπει αρμονικά οδεύοντα κύματα της ίδιας συχνότητας σ' ένα ανοιχτό ομογενές μέσο. Αν κάθε πηγή έχει ακριβώς ορισμένη συχνότητα (και όχι μια κύρια συχνότητα και πεπερασμένο εύρος ζώνης συχνοτήτων), η σχετική φάση των δύο πηγών (η διαφορά μεταξύ των σταθερών φάσης τους) δεν αλλάζει με τον χρόνο. Οι δύο πηγές αυτές λέγονται σχετικά σύμφωνες ή απλώς **σύμφωνες**. (Ακόμη κι αν έχουν διαφορετικές συχνότητες, αυτές είναι «σύμφωνες», αν καθεμία είναι μονοχρωματική, αφού η σχετική τους φάση είναι πάντα πλήρως ορισμένη.) Αν κάθε πηγή έχει την ίδια κύρια συχνότητα με ένα πεπερασμένο εύρος ζώνης $\Delta\nu$, τότε, αν οι πηγές είναι «ανεξάρτητες», η σχετική τους φάση θα παραμένει σταθερή μόνο για χρονικά διαστήματα της τάξης του $(\Delta\nu)^{-1}$. Από την άλλη μεριά, δύο πηγές μπορεί να «αναγκάζονται» να έχουν σταθερή διαφορά φάσης μεταξύ τους, επειδή διεγείρονται από κοινή διεγείρουσα δύναμη. Σε αυτήν την περίπτωση, αν και η σταθερά φάσης κάθε πηγής μετατοπίζεται ανεξέλεγκτα κατά μία ποσότητα της τάξης του 2π σε χρόνο $(\Delta\nu)^{-1}$, όπου $\Delta\nu$ το εύρος ζώνης της κοινής διεγείρουσας δύναμης, η σχετική φάση θα παραμένει σταθερή. Τότε οι πηγές λέγονται σύμφωνες, μολοντί δεν είναι μονοχρωματικές.

Γι' αυτό χρησιμοποιούμε σχισμές στα παραδείγματα μας. Εάν αντικαταστήσουμε τις σχισμές με δύο όμοιες αλλά ανεξάρτητες πηγές φωτός, όπως π.χ. δύο κοινούς λαμπτήρες πυρακτώσεως, η διαφορά φάσης μεταξύ των κυμάτων που εκπέμπονται από αυτούς θα μεταβάλλεται ταχέως και τυχαία. Αυτό συμβαίνει επειδή το φως εκπέμπεται από τεράστιο πλήθος ατόμων ευρισκομένων στα πυρακτωμένα σύρματα. Τα άτομα αυτά δρουν τυχαία και ανεξάρτητα σε πολύ βραχεία χρονικά διαστήματα (της τάξης των nanoseconds) με αποτέλεσμα, σε κάθε σημείο της οθόνης-ανιχνευτή, η συμβολή των κυμάτων από τις δύο πηγές να μεταβάλλεται ταχέως και τυχαία από πλήρως ενισχυτική σε πλήρως αναιρετική. Το ανθρώπινο μάτι (και οι περισσότεροι οπτικοί ανιχνευτές) δεν μπορούν να παρακολουθήσουν τέτοιες αλλαγές και επομένως δεν είναι δυνατόν να παρατηρηθεί πρότυπο συμβολής. Η «οθόνη» θα φαίνεται σαν είναι ομοιόμορφα «φωτισμένη».

Το laser διαφέρει από τις κοινές πηγές φωτός εξαιτίας του ότι τα άτομα εκπέμπουν φως «συνεργαζόμενα»... Το φως του laser είναι περίπου μονοχρωματικό, εκπέμπεται σε λεπτές ακτίνες με «λίγο άπλωμα» και μπορεί να εστιαστεί σε ένα «πλάτος» το οποίο ταιριάζει με το μήκος κύματος του



Σκέδαση Compton

Όροι *ελαστικής σκέδασης* μεταξύ φωτονίου και ελεύθερου ηλεκτρονίου

$$\Delta\lambda (\text{\AA}) = 0.024 (1 - \cos 2\theta)$$

$\Delta\lambda$ δεν εξαρτάται από το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας

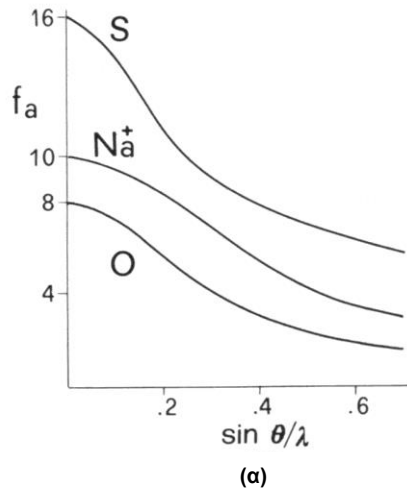
Μέγιστη τιμή ($\Delta\lambda = 0.048$) για $2\theta = \pi$ (οπισθοσκέδαση)

$\Delta\lambda = 0$ για $2\theta = 0$

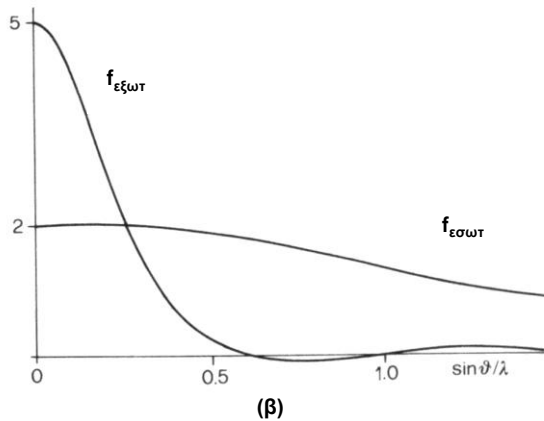
Ασύμφωνη σκεδαζόμενη ακτινοβολία

Όχι φαινόμενο συμβολής

Ατομικός παράγοντας Σκέδασης



- για τα «ελαφρότερα» άτομα υπολογίζεται μέσω της μεθόδου Hartree–Fock
- για τα «βαρύτερα» μέσω της προσέγγισης Thomas–Fermi



Σχήμα 1.2: (α) Ατομικοί παράγοντες σκέδασης για τα S, Na^+ , O. (β) Παράγοντες σκέδασης για τα εσωτερικά και εξωτερικά ηλεκτρόνια του ατόμου του N.

Θερμική κίνηση των ατόμων – Παράγοντας θερμικής ταλάντωσης

Οι θερμικές ταλαντώσεις επηρεάζουν τη συνάρτηση της ηλεκτρονικής πυκνότητας για κάθε άτομο και συνεπώς και τη σκεδαστική τους ικανότητα

$$f_{\text{at}}(\mathbf{r}^*) = f_a(\mathbf{r}^*) q(\mathbf{r}^*)$$

όπου $q(\mathbf{r}^*) = \int_{S'} \rho(\mathbf{r}') \exp(2\pi i \mathbf{r}^* \cdot \mathbf{r}') d\mathbf{r}'$ (Παράγοντας Debye-Waller)

Υπόθεση ισοτροπίας (η θερμική κίνηση του ατόμου παρουσιάζει σφαιρική συμμετρία και συνεπώς μπορεί να περιγραφεί από μια συνάρτηση του Gauss σε οποιοδήποτε σύστημα αναφοράς)

$$\rho(\mathbf{r}') = \rho(r') = (2\pi)^{-1/2} U^{-1/2} \exp[-(r'^2/2U)]$$

όπου: r' σε \AA , $U = \langle r'^2 \rangle$ είναι η μέση τιμή του τετραγώνου της μετατόπισης του ατόμου από τη θέση ισορροπίας του.

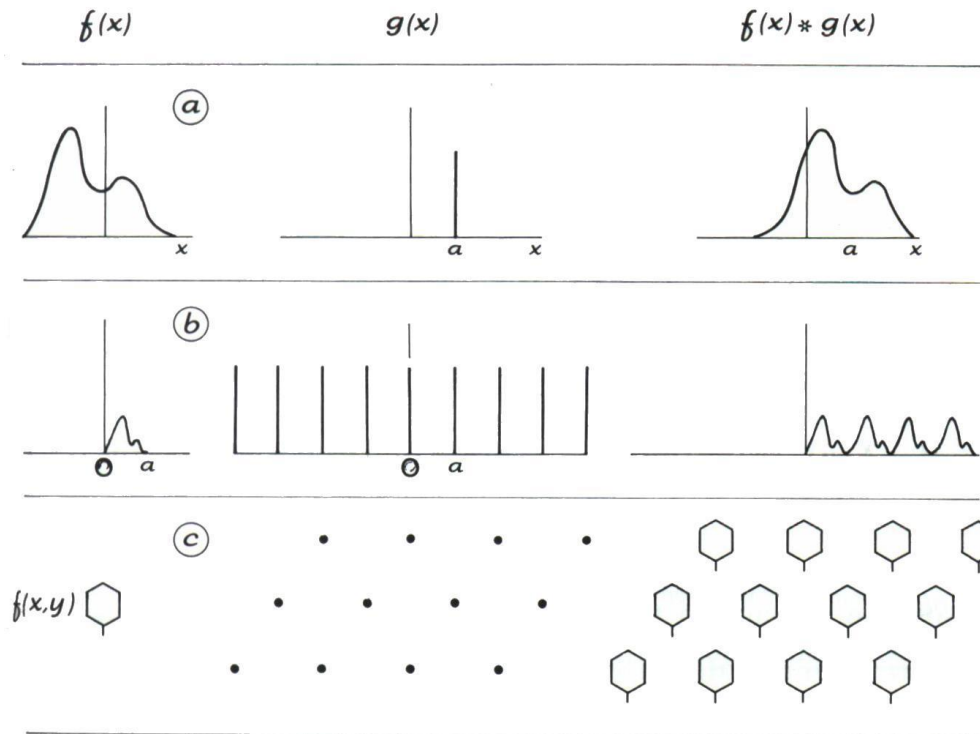
$$q(\mathbf{r}^*) = \exp(-2\pi^2 U r^{*2}) = \exp(-8\pi^2 U \sin^2\theta/\lambda) = \exp(-B \sin^2\theta/\lambda^2)$$

όπου $B = 8\pi^2 U$ (\AA^2) γνωστός ως *ατομικός παράγοντας θερμοκρασίας*.





Η πράξη της συνέλιξης



$$C(\mathbf{u}) = \rho(\mathbf{r}) \otimes g(\mathbf{r}) = \int_S \rho(\mathbf{r})g(\mathbf{u} - \mathbf{r})d\mathbf{r}$$

$$FT [\rho(\mathbf{r}) \otimes g(\mathbf{r})] = FT[\rho(\mathbf{r})] \cdot FT[g(\mathbf{r})]$$

$$P(\mathbf{u}) = \rho(\mathbf{r}) \otimes \rho(-\mathbf{r}) = \int_S \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{u} + \mathbf{r})d\mathbf{r} \xleftrightarrow{FT} FT[P(\mathbf{u})] = [A(\mathbf{r}^*) + iB(\mathbf{r}^*)][A(\mathbf{r}^*) - iB(\mathbf{r}^*)] = |F(\mathbf{r}^*)|^2$$

Παράγοντας θερμοκρασίας

Η θερμική διαταραχή των ατόμων εμφανίζεται στον παράγοντα δομής, αν ο παράγοντας σκέδασης f_j αντικατασταθεί, χρησιμοποιώντας τις σχέσεις:

$$f_j = f_{0j} \exp(-B \sin^2 \theta / \lambda^2) \quad \text{Ισοτροπικός}$$

$$f_j = f_{0j} \exp(-8\pi^2 U_j \sin^2 \theta / \lambda^2) \quad \text{Ανισοτροπικός}$$

Όπου f_{0j} ο παράγοντας σκέδασης του j -οστού ατόμου όταν αυτό βρίσκεται σε ηρεμία.

$$F_{\mathbf{H}} = \sum_{j=1}^N f_{0j} \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_j - B \sin^2 \theta / \lambda^2)$$

$$F_{\mathbf{H}} = \sum_{j=1}^N f_{0j} \exp(2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_j - 8\pi^2 U_j \sin^2 \theta / \lambda^2)$$



ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙΙ

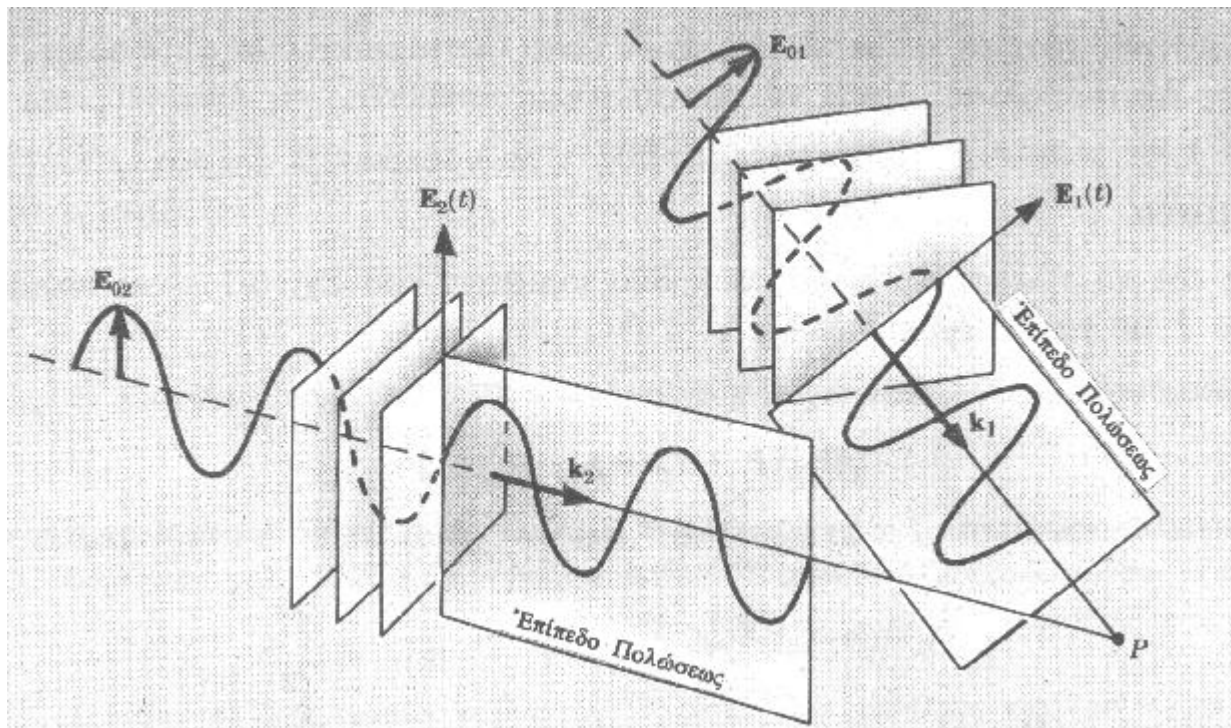
ΣΥΜΒΟΛΗ ΔΥΟ ΚΥΜΑΤΩΝ

Ας θεωρήσουμε δύο γραμμικά πολωμένα επίπεδα κύματα, που έχουν το ίδιο μήκος κύματος της μορφής

$$\mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{01} \cos(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - \omega t + \varepsilon_1)$$

$$\mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{02} \cos(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r} - \omega t + \varepsilon_2)$$

και τα οποία συναντιούνται στο σημείο P ($\mathbf{OP} = \mathbf{r}$). Υποθέτουμε ότι τα μεγέθη \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_2 , ω , ε_1 και ε_2 είναι όλα σταθερά. Τα κύματα αυτά μπορεί π.χ να προέρχονται από δύο πολύ μακρινές σημειακές πηγές. Το συνιστάμενο πεδίο θα είναι $\mathbf{E} = \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2$



Στις οπτικές (και μεγαλύτερες $> 10^{14}$ Hz) συχνότητες τα μεγέθη \mathbf{E} , \mathbf{B} και \mathbf{S} μεταβάλλονται πολύ γρήγορα και είναι αδύνατο να μετρήσουμε στιγμιαίες τιμές του \mathbf{S} . Γι' αυτό προσδιορίζουμε τη μέση τιμή $\langle \mathbf{S} \rangle$ για ένα κατάλληλο χρονικό διάστημα. Το μέγεθος αυτό το ονομάζουμε ένταση ακτινοβολίας.

$$I \equiv \langle \mathbf{S} \rangle$$

Έστω Η/Μ κύμα στο κενό που περιγράφεται από τη σχέση: $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos(kx - \omega t)$

Το πεδίο \mathbf{B} έχει τη μορφή: $\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 \cos(kx - \omega t)$ και συνεπώς

$$\mathbf{S} = c^2 \varepsilon_0 \mathbf{E} \times \mathbf{B} = c^2 \varepsilon_0 \mathbf{E}_0 \times \mathbf{B}_0 \cos^2(kx - \omega t)$$

$$\text{Άρα } \langle \mathbf{S} \rangle = c^2 \varepsilon_0 |\mathbf{E} \times \mathbf{B}| \langle \cos^2(kx - \omega t) \rangle$$

Υπολογίζοντας τη μέση τιμή για ένα χρονικό διάστημα T βρίσκουμε:

$$\langle \cos^2(kx - \omega t) \rangle = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \cos^2(kx - \omega t') dt' = \frac{1}{2} - \frac{1}{4\omega T} \left\{ \sin[2kx - 2\omega(t+T)] - \sin 2(kx - \omega t) \right\}$$

Όταν (χρόνος μετρήσεως) $T \gg \tau$ (=περίοδος ταλάντωσης),

τότε $\omega T \gg 1$ και $\langle \cos^2(kx - \omega t) \rangle = 1/2$

Επομένως, αφού $E_0 = cB_0$,

$$I = \frac{c\varepsilon_0}{2} E_0^2 = c\varepsilon_0 \langle \mathbf{E}^2 \rangle$$

Το φως που χρησιμοποιούμε για τις μελέτες μας στο ερευνητικό πεδίο αυτού του ΠΜΣ αντιστοιχεί σε οπτικές και μεγαλύτερες συχνότητες, επομένως, τα πεδία ταλαντώνται με συχνότητες μεγαλύτερες από 10^{14} Hz.

Αυτό που μπορεί να μετρηθεί απευθείας και συνεπώς έχει πρακτικό ενδιαφέρον είναι η ένταση της ακτινοβολίας.

Αν παραλείψουμε ένα σταθερό παράγοντα, μπορούμε να θεωρήσουμε ως ένταση ακτινοβολίας τη μέση χρονική τιμή του ολικού πεδίου

$$I = \langle \mathbf{E}^2 \rangle$$

όπου $\mathbf{E}^2 \equiv \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}$ αλλά $\mathbf{E}^2 = (\mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2) \cdot (\mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2) = \mathbf{E}_1^2 + \mathbf{E}_2^2 + 2\mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_2$

Παίρνοντας τη μέση χρονική τιμή βρίσκουμε

$$I = I_1 + I_2 + I_{12}$$

όπου $I_1 = \langle \mathbf{E}_1^2 \rangle$, $I_2 = \langle \mathbf{E}_2^2 \rangle$ και $I_{12} = 2\langle \mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_2 \rangle$

Ο παράγοντας I_{12} ονομάζεται παράγοντας συμβολής, εξαιτίας αυτού η I δεν ισούται με το απλό άθροισμα των εντάσεων των συνιστωσών κυμάτων, δηλ. $I_1 + I_2$.

Η μέση χρονική τιμή μιας συνάρτησης $f(t)$ δίνεται από τη σχέση:

$$\langle f(t) \rangle = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} f(t') dt'$$

Εδώ ο χρόνος μέτρησης T είναι πολύ μεγαλύτερος από την περίοδο ταλάντωσης τ των κυμάτων. Αν κάνουμε τους υπολογισμούς για τα δύο προηγούμενα επίπεδα κύματα ο παράγοντας συμβολής γράφεται

$$I_{12} = 2 \langle \mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_2 \rangle = \mathbf{E}_{01} \cdot \mathbf{E}_{02} \cos \delta$$

Όπου η **διαφορά φάσεως δ** δίνεται από τη σχέση:

$$\delta = (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}) - (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}) + \varepsilon_1 - \varepsilon_2$$

Από τις δύο τελευταίες σχέσεις είναι φανερό ότι καθώς το \mathbf{r} μεταβάλλεται από σημείο σε σημείο στο χώρο (διαφορετικό σημείο συμβολής P), μεταβάλλονται και τα δ , I_{12} και I .

Διαφορά φάσης

$$\delta = (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}) - (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}) + \varepsilon_1 - \varepsilon_2$$

✓ Η ύπαρξη του όρου $(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}) - (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r})$ στη διαφορά φάσης οφείλεται στη διαφορά των οπτικών δρόμων που καλύπτουν τα κύματα, καθώς διαδίδονται από τα σημεία της πηγής προς το P.

✓ Η διαφορά $\varepsilon_1 - \varepsilon_2$ οφείλεται σε μια αρχική διαφορά φάσης δύο διαφορετικών σημειακών πηγών, και αν είναι σταθερή, όπως υποθέσαμε, λέμε ότι οι δύο πηγές είναι σύμφωνες.

* Θα ακολουθήσουμε τον εξής κανόνα:

- αν τα επάλληλα κύματα είναι σύμφωνα, τότε, για να βρεθεί η ολική ένταση της ακτινοβολίας, τα ηλεκτρικά πεδία πρέπει να προστεθούν και το αποτέλεσμα να υψωθεί στο τετράγωνο (coherent - σκέδαση Thomson).

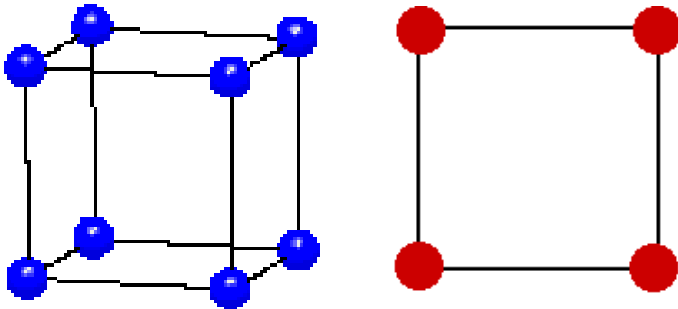
- αν τα κύματα δεν είναι σύμφωνα, τότε τα πεδία των κυμάτων είναι ουσιαστικά ανεξάρτητα και για να βρεθεί η ολική ένταση της ακτινοβολίας, αρκεί να προσθέτουμε απευθείας τις εντάσεις των κυμάτων (incoherent σκέδαση Compton = noise)

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙΙΙ

UNIT CELL

Primitive

- Single lattice point per cell
- Smallest area in 2D, or
- Smallest volume in 3D

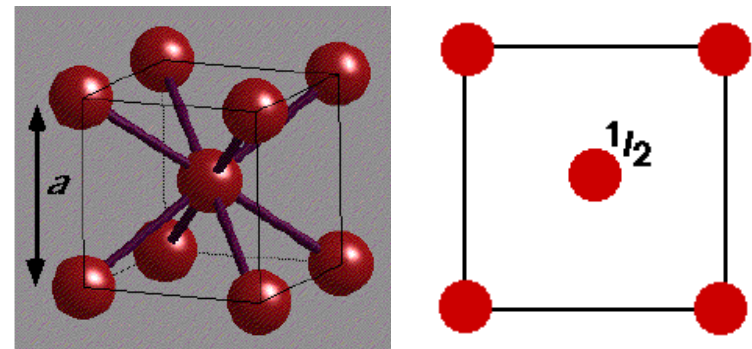


Simple cubic(sc)

Conventional = Primitive cell

Conventional & Non-primitive

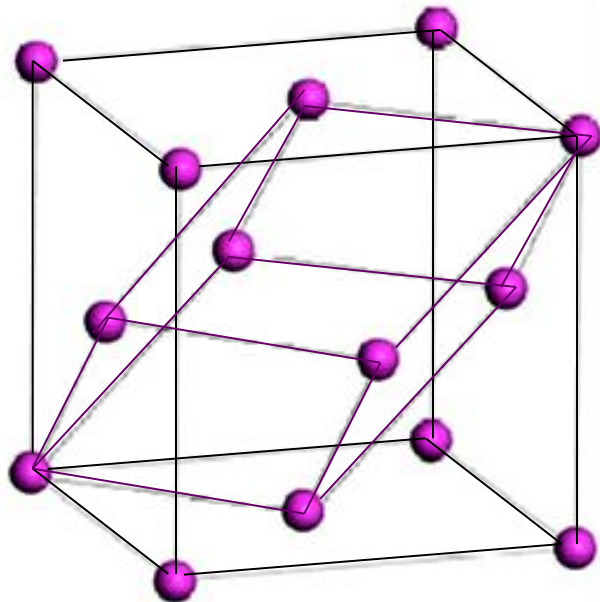
- More than one lattice point per cell
- Integral multiples of the area of primitive cell



Body centered cubic(bcc)

Conventional \neq Primitive cell

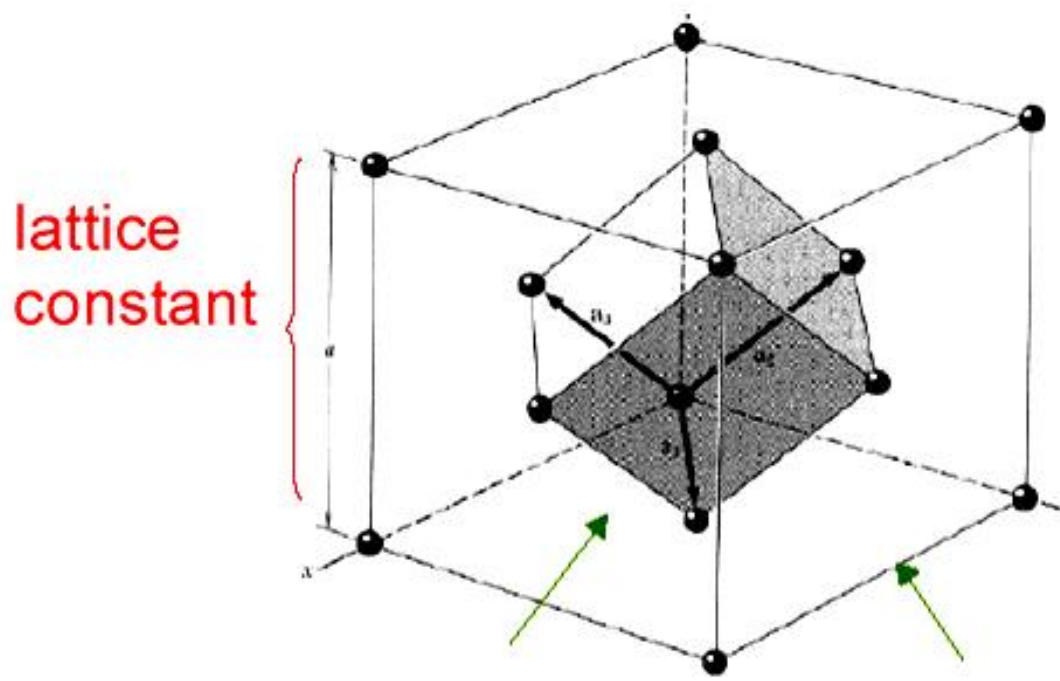
The Conventional Unit Cell



FCC Bravais lattice

- A unit cell just fills space when translated through a subset of Bravais lattice vectors.
- The conventional unit cell is chosen to be larger than the primitive cell, but with the full symmetry of the Bravais lattice.
- The size of the conventional cell is given by the lattice constant a .

Primitive and conventional cells of FCC



primitive vectors

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}),$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}),$$

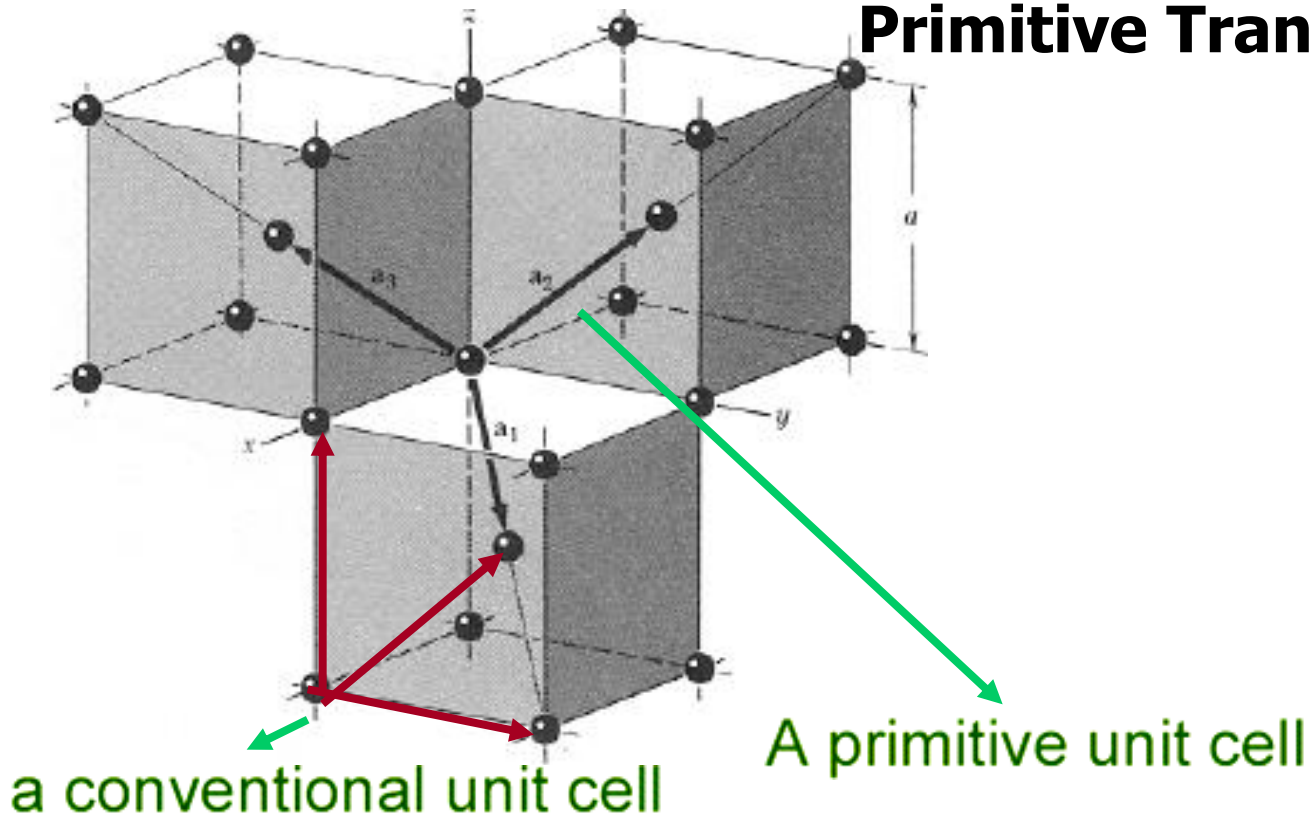
$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x}).$$

A primitive unit cell

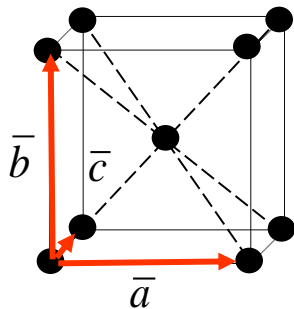
a conventional unit cell

Primitive and conventional cells of BCC

Primitive Translation Vectors:



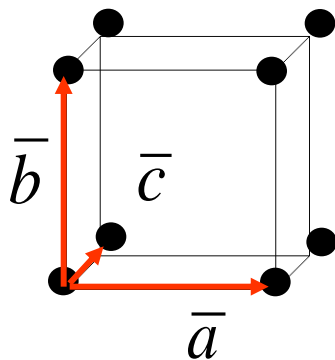
Primitive and conventional cells



Body centered cubic (bcc):
conventional ≠ primitive cell

Fractional coordinates of lattice points in conventional cell:

000, 100, 010, 001, 110, 101, 011, 111, $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$

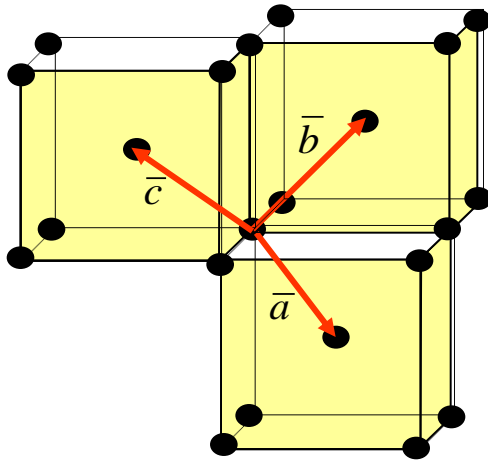


Simple cubic (sc):
 primitive cell = conventional cell

Fractional coordinates of lattice points:

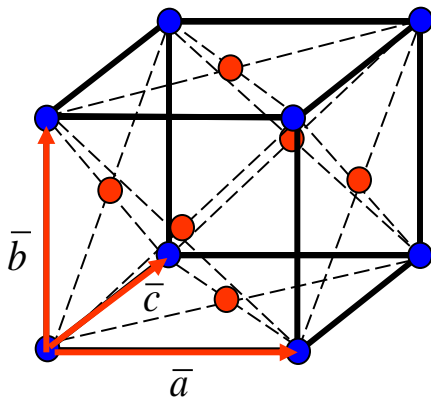
000, 100, 010, 001, 110, 101, 011, 111

Primitive and conventional cells



Body centered cubic (bcc):
primitive (rhombohedron) \neq conventional cell

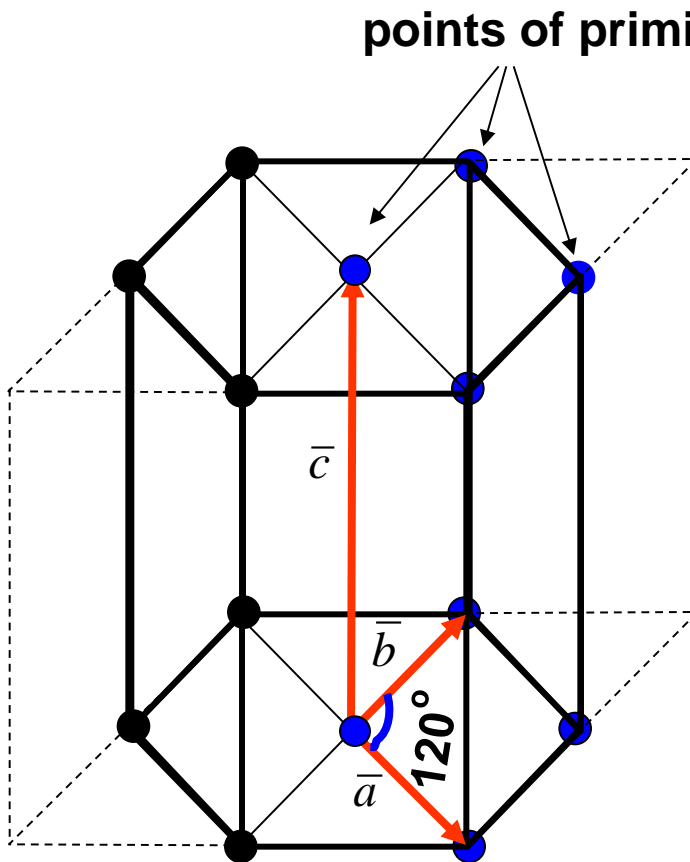
Fractional coordinates:
 $000, 100, 101, 110, 110, 101, 011, 211, 200$



Face centered cubic (fcc):
conventional \neq primitive cell

Fractional coordinates:
 $000, 100, 010, 001, 110, 101, 011, 111, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0, \frac{1}{2}$
 $0 \frac{1}{2}, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} 1 \frac{1}{2}, 1 \frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 1$

Primitive and conventional cells- hcp

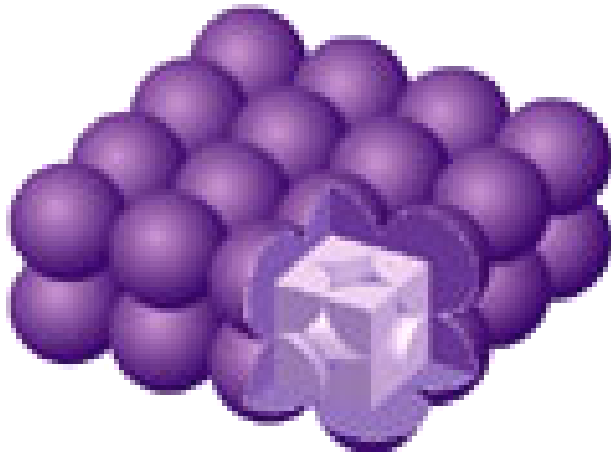
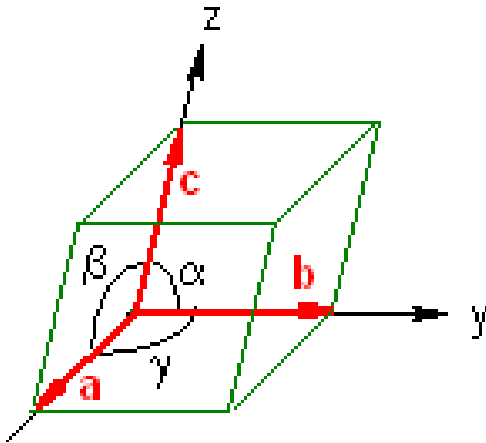


Hexagonal close packed cell
(hcp): **conventional** = primitive
cell

Fractional coordinates:

100, 010, 110, 101, 011, 111, 000, 001

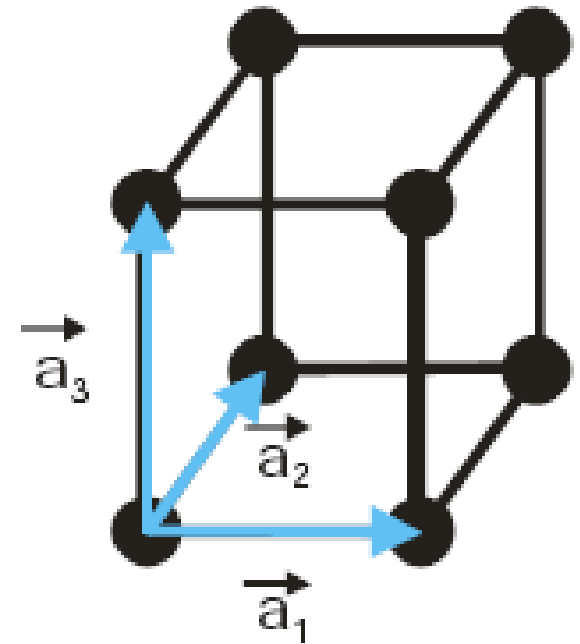
Unit Cell



- The **unit cell** and, consequently, the entire lattice, is *uniquely* determined by the six lattice constants: **a, b, c, α , β and γ .**
- **Only 1/8 of each lattice point in a unit cell can actually be assigned to that cell.**
- Each **unit cell** in the figure can be associated with **$8 \times 1/8 = 1$** lattice point.

Primitive Unit Cell and vectors

- A primitive unit cell is made of primitive translation vectors a_1 , a_2 , and a_3 such that there is no cell of smaller volume that can be used as a building block for crystal structures.
- A primitive unit cell will fill space by repetition of suitable crystal translation vectors. This defined by the parallelepiped a_1 , a_2 and a_3 . The volume of a primitive unit cell can be found by
- $V = a_1 \cdot (a_2 \times a_3)$ (vector products)



Cubic cell volume = a^3

Primitive Unit Cell

- The **primitive unit cell** must have **only one lattice point**.
- There can be **different choices** for lattice vectors , **but the volumes of these primitive cells are all the same.**

