
VIII. ÖVRIGA METODER

I detta kapitel behandlas optiska metoder som inte baserar sig på övergångar mellan tillstånd (med undantag av cirkulär dikroism, där den mest centrala grunden dock är klassisk). Diskussionen börjar med en repetition av ljusets egenskaper och speciellt polarisering. Därefter diskuteras molekylernas optiska rotationsförmåga som en tillämpning av cirkulär polarisering. Cirkulär polarisering är grunden för ellipsometri. Cirkulärt polariserat ljus används även i cirkulär dikroism spektrometri där man dock studerar molekylernas förmåga att absorbera synligt ljus. Avslutningsvis behandlas diffraktionsmetoder som används för att bestämma fasta materials struktur.

VIII.1. Ljus

Ljusets egenskaper har diskuterats i ett tidigare kapitel. Där konstaterade man att ljuset är **elektromagnetisk strålning** som består av ett elektriskt och ett magnetiskt fält som ligger vinkelräta mot varandra och mot fotonens propageringsriktning. Elektromagnetisk strålning illustreras i Fig. VIII.1. Vågrörelsen kan beskrivas med ekvationen

$$a(x, t) = a_0 \cos \left[2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \right]. \quad (\text{VIII.1})$$

Detta är en **planvåg**. Den är en vektorstorhet som har samma riktning som fältet $\vec{E}$. Här är a_0 fältets **amplitud**, λ dess **våglängd** och ν dess **frekvens**.

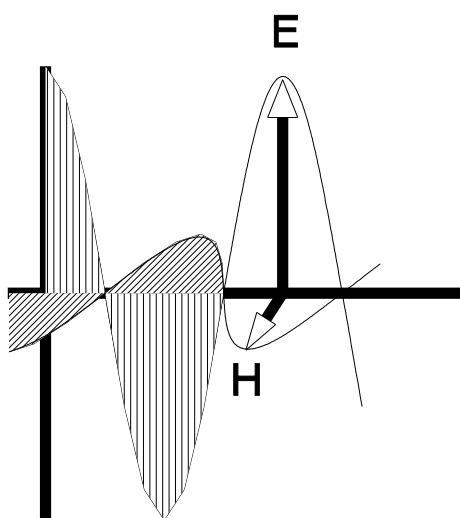


Fig. VIII.1. Elektromagnetisk strålning.

Ljuset är **planpolariserat** om den elektriska vektorn av varje foton ligger i ett givet **polariseringsplan**. Ljuset är **cirkulärt polariserat** (eller mera allmänt **elliptiskt polariserat**) om polariseringsriktningen ändras ständigt i fotonens propageringsriktning. Opolariserat och planpolariserat ljus visas i Fig. VIII.2.

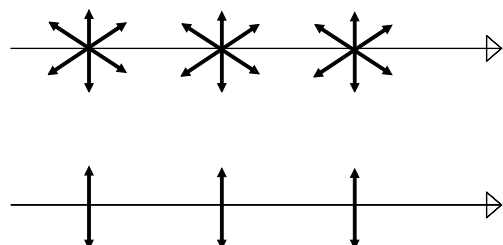


Fig. VIII.2. Opolariserat och planpolariserat ljus.

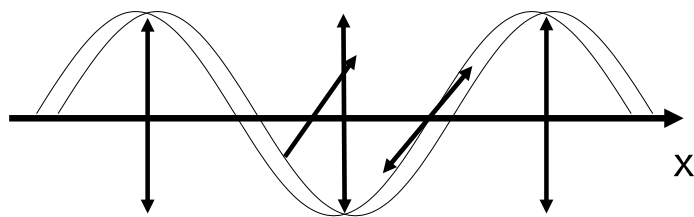


Fig. VIII.3. Cirkulärt polariserat ljus.

Cirkulärt polariserat ljus visas i Fig. VIII.3.

Ljuset följer **Snells lag** när det penetrerar genom en gränsyta mellan två optiska material. Låt ljuset falla på ytan i vinkel ϕ mot ytans normal och framskrida i en vinkel θ mot normalen efter gränsytan. Låt **brytningsindexen** för de optiska materialen vara n_1 och n_2 . Då gäller att

$$n_1 \sin \phi = n_2 \sin \theta. \quad (\text{VIII.2})$$

Snells lag exemplifieras i Fig. VIII.4.

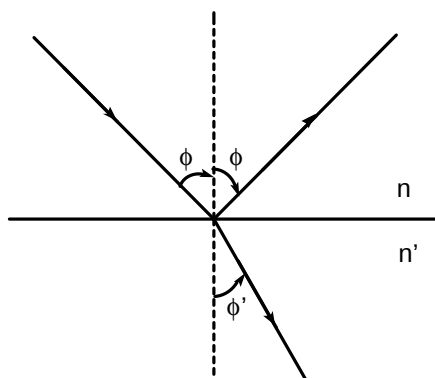


Fig. VIII.4. Snells lag.

Vissa material är **dubbelbrytande**. Många naturliga kristaller har denna egenskap. Man kan dela det infallande ljusets polariseringsplan i två vinkelräta komponenter på ett sådant sätt att den ena komponenten följer Snells lag. Den komponenten kallas **ordinär** stråle. Den andra komponenten däremot följer inte Snells lag och kallas därför **extraordinär** stråle. Dubbelbrytningens princip visas i Fig. VIII.5.

Som en tillämpning av dubbelbrytande material kan nämnas **Glan prisma**. Den är en **polarisator** som planpolariserar det infallande ljuset. Många andra typer av polaristorer finns. Glan prisma visas i Fig. VIII.6.

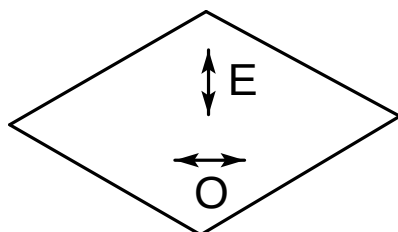
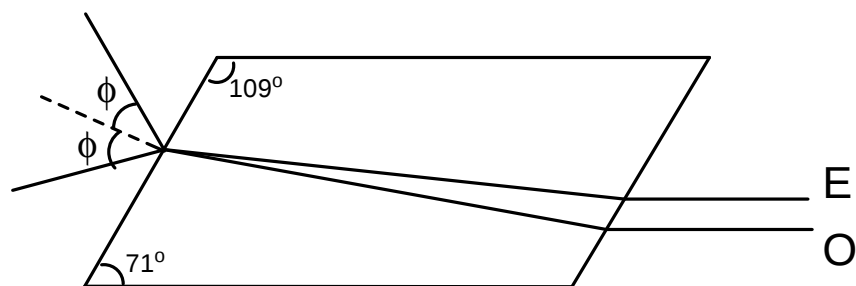


Fig. VIII.5. Dubbelbrytning.

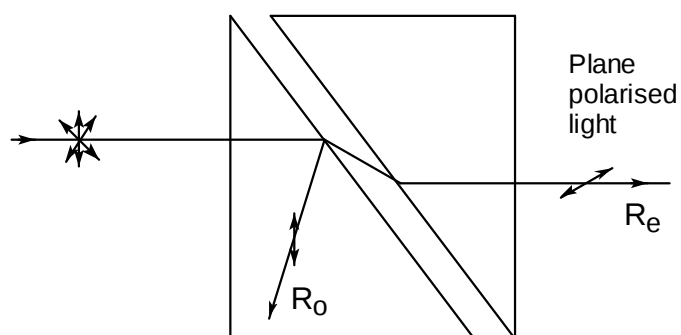


Fig. VIII.6. Glan prisma.

VIII.2. Optisk rotation

Fig. VIII.7 visar en apparat för mätning av den **optiska rotationsvinkeln** som ett prov orsakar. Det infallande ljuset planpolariseras i en viss riktning med hjälp av en **polarisator**. Det polariserade ljuset passerar igenom provet som vrider polariseringsplanet om det är optiskt aktivt. Polariseringsriktningen av ljuset bestäms efter provet med hjälp av en **analysator**. Analysatorn är egentligen en polarisator som kan vridas så att dess polariseringsplan sammanfaller med ljusets polariseringsriktning. Om analysatorns polariseringsplan ligger vinkelrätt mot det infallande planpolariserade ljusets polariseringsplan släpps inget ljus igenom. Om planen är parallella släpps allt ljus igenom. Analysatorn justeras så att detektorn visar maximal ljusintensitet och analysatorns ställning avläses.

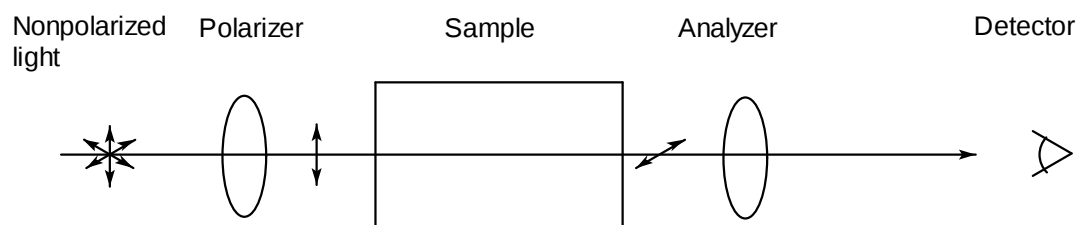


Fig. VIII.7. Bestämning av den optiska rotationsvinkeln.

Materialen kan vrida polariseringsplanet till vänster eller till höger. Diagrammet i Fig. VIII.8 är ritat vid detektorn så att ljuset kommer mot läsaren. **Vänsterroterande** material kallas **laevorotatory** och **högerroterande** material **dextrorotatory**.

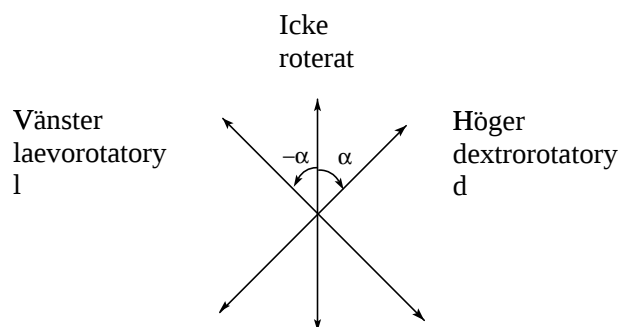


Fig. VIII.8. Optisk rotation till vänster (*laevo*) eller till höger (*dextro*).

Materialens förmåga att rotera polariseringsplanet eller den **optiska rotationsstyrkan** varierar. Tabell VIII.1 visar några exempel på organiska ämnens specifika rota-

tionsstyrka. Den varierar beroende på halten och på våglängden av det infallande ljuset.

Substance	Solvent	Grams in 100 ml Solution	Temp- erature °C	[α] in Degrees at Wavelength in nm							
				589.3	546.1	500.0	400.0	350.0	300.0	250.0	200.0
Sucrose	Water	26	20	66.53	78.34						
Sucrose	Water	0.1	23 - 25			95.8	160		339	540	1340
<i>d</i> -Tartaric Acid	aq. <i>HCl</i> pH 0.3	3.0	25	13.1	14.5	15.7	12.3	-7.9	-107.3		
10-Camphor	Water	1	25	22.1	29.0	41.6	127.4	331.1			
Sulphonic acid		0.2	25						1840	-2024	-3637

Tabell VIII.1. Specifik optisk rotationsstyrka för vissa organiska ämnen.

Optisk rotation för det infallande planpolariserade ljuset kan diskuteras genom att beskriva den elektriska vektorn $\vec{E}$ med hjälp av två i motsatt riktning roterande vektorer. **Komponenterna** motsvarar *d* och *l*-cirkulär polarisering. Uppdelningen illustreras i Fig. VIII.9. Om både *d* och *l* vågen upplever samma brytningsindex i materialet ligger summa-vektorn för de två roterande komponenterna av $\vec{E}$ exakt vertikalt. Om brytningsindexen för *d* och *l* vågorna är olika propagerar de med olika hastigheter i materialet. Då är vågor-
na inte i samma fas i en given punkt vid en given tid och summa-vektorn ligger inte mera vertikalt utan vrids. Då får man en cirkulär polarisering av den elektriska vektorn.

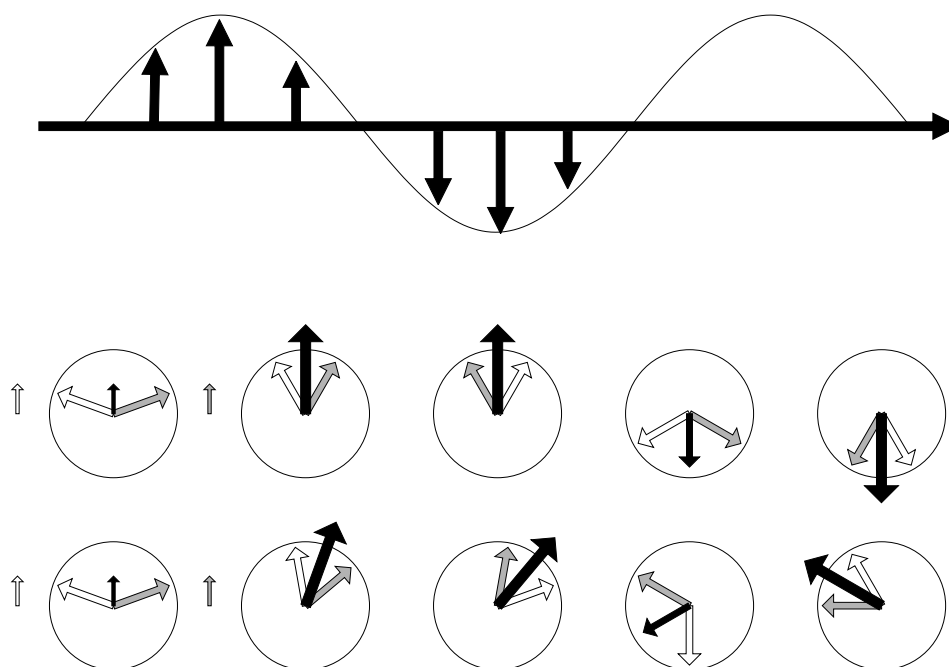


Fig. VIII.9. Optisk rotation till vänster (*laevo*) eller till höger (*dextro*).

VIII.3. Cirkulär dikroism spektrometri

Dubbelbrytande material har två polariseringsriktningar, den ordinära och den extraordinära, som ligger vinkelrätt mot varandra. Om man bestrålar sådant material med planpolariserat ljus i 45° vinkel mot dess så delas det infallande ljuset i komponenter V_o och V_e som propagerar i materiet med hastigheterna v_o och v_e därför att brytningsindexet i dessa riktningar är olika. Om nu v_e är mindre blir den extraordinära strålen efter och det uppstår således en fasförskjutning mellan den ordinära och den extraordinära strålen. Om kristallens tjocklek råkar vara sådan att fasförskjutningen är 90° är ljuset **cirkulärt polariserat** efter kristallen, i annat fall **elliptiskt polariserat**.

Betrakta ett prov som **absorberar** synligt eller ultraviolett ljus vid våglängden λ . Låt provets specifika absorptionskoefficient i vanlig UV-vis spektrometri vara ϵ . Om man använder cirkulärt polariserat ljus som roterar till höger i experimentet i stället för vanligt ljus är den specifika absorptionskoefficienten ϵ_d . Med l -polariserat ljus får man på motsvarande sätt absorptionskoefficienten ϵ_l .

Cirkulär dikroism spektrometri innebär att man mäter skillnaden i provets förmåga att absorbera l och d polariserat ljus. Ett spektrum visas schematiskt i Fig. VIII.10.

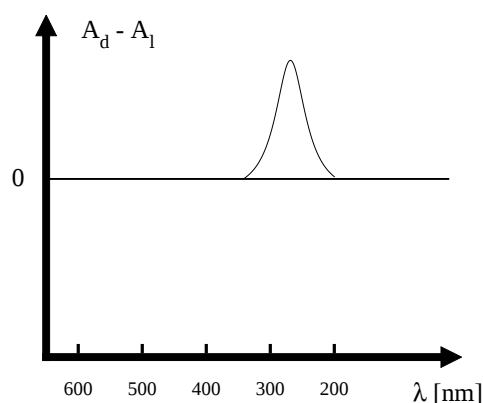


Fig. VIII.10. CD spektrum schematiskt.

Fig. VIII.11 visar en apparat för mätning av CD spektra. Den består av en ljuskälla som förmår avge både d och l cirkulärt polariserat ljus, en lämplig provkammare där båda strålarna passerar genom provet och två detektorer, en för vardera strålen, kopplade till en elektronisk krets som jämför signalstyrkan i de två kanalerna.

CD spektrometri används för att studera **optiskt aktiva molekyler**. Man kan bl.a. bestämma den absoluta konformationen eller förhållandet d till l med denna metod.

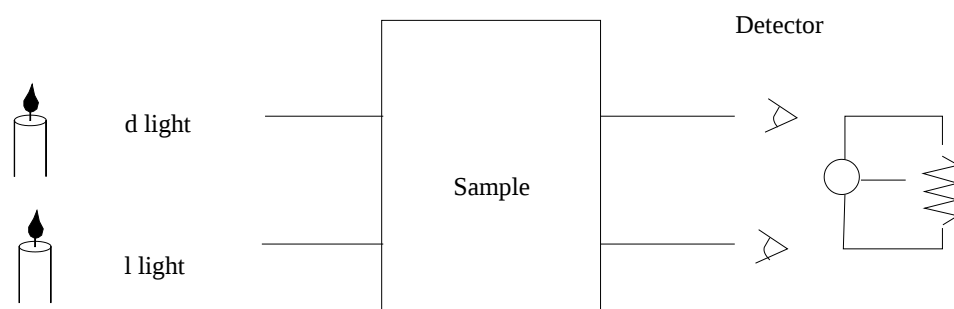


Fig. VIII.11. CD spektrometer schematiskt.

VIII.4. Ellipsometri

Ellipsometri innebär att man använder cirkulärt eller mera allmänt elliptiskt polariserat ljus för att studera ytor av fasta ämnen (t. ex. kristaller av optiskt aktiva ämnen), tunna filmer *etc.*.

Mätinstrumentet är en **ellipsometer** som visas schematiskt i Fig. VIII.12. Den består av en ljuskälla som avger elliptiskt polariserat ljus, provhållare samt detektor.

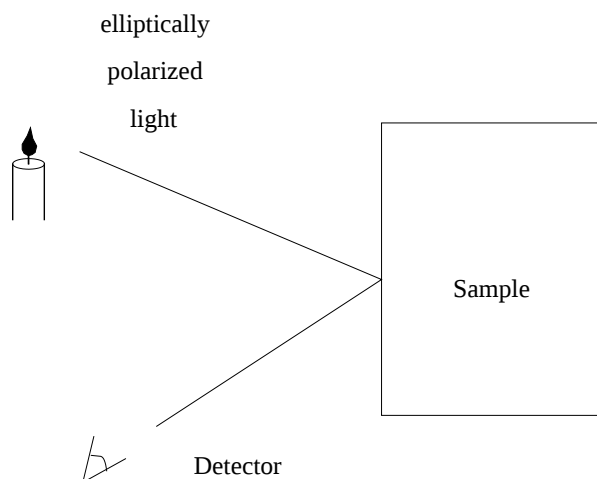


Fig. VIII.12. Ellipsometer schematiskt.

Ellipsometri används för karakterisering av ytor. Man kan bestämma bl. a. kontamination av rena ytor. Metoden är mycket känslig vilket gör att mycket små mängder av föroreningar kan detekteras. Ellipsometri kan också användas för att mäta tjocklek av tunna filmer på substratytor, för att bestämma dielektriska och optiska ytegenskaper, mm.

VIII.5. Diffraction

PRINCIP

Diffraktionsmetoder används för att bestämma fasta kristallina ämnens struktur. Kristallint material består av **enhetsceller** med en väl definierad symmetri och fasta avstånd mellan atomlager såsom det har diskuterats i kursen molekylmodellering. Avståndet mellan atomlagren betecknas med symbolen d .

Ex. VIII.1.

I bergsaltkristallen $NaCl$ är avståndet mellan atomlagren

$$d \sim 0.28\text{nm}$$

Om den infallande strålningens våglängd λ är **mycket** större än enhetscellens karakteristiska dimension d observerar man **reflexion** från provets yta. Om våglängden λ är av samma storleksordning som dimensionen d observerar man **diffraction**. Diffraction innebär att strålningen penetrerar in i kristallen och reflekteras från de olika atomlagren. Dessa reflexioner interfererar. Lämpliga våglängder för diffractionsexperiment finnes i

- röntgenstrålning
- elektronstrålar
- neutronstrålar

Braggs lag¹²

ger interferensmaxima vid diffraction. Lagen lyder

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (\text{VIII.3})$$

¹ Sir William Henry Bragg (1862 - 1942) Brittisk fysiker, professor i Adelaide, Leeds och London, president vid the Royal Society i London 1935 - 40. Forskade i materiets absorptions- och joniseringsförmåga av radioaktiv strålning och dess beroende av provets avstånd från strålningskällan (Bragg-kurva). Han övergick senare till röntgenstrålningens egenskaper och utvecklade kristallrotationsmetoden tillsammans med sin son W. L. Bragg år 1913. Därmed lade han grunden för röntgenstrukturanalysen. Han fick Nobel-priset i fysik tillsammans med sin son år 1915 för detta arbete.

² Sir William Lawrence Bragg (1890 - 1971). Brittisk fysiker, professor i Manchester, Cambridge och London. Han utvecklade kristallrotationsmetoden i röntgenkristallografi tillsammans med sin far och lade den matematiska grunden för kristallstrukturanalysen (Braggs ekvation). Han fick Nobelpriset i fysik år 1915 tillsammans med sin far för sina teoretiska insatser.

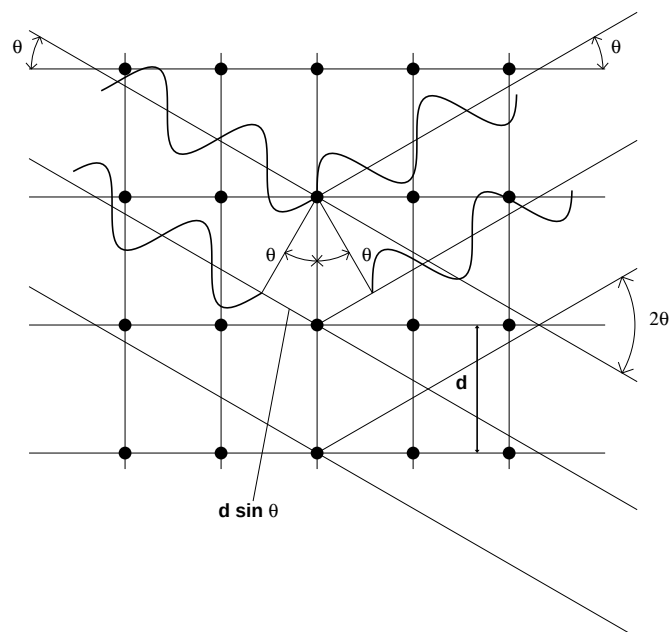


Fig. VIII.13. Diffraction.

där n är ett heltal, λ är den infallande strålningens våglängd, d är avståndet mellan atomlagren och θ är vinkeln för den infallande (eller reflekterade) strålningen. Dessa storheter definieras i Fig. VIII.13.

Den vanligaste typen av infallande strålning är röntgen strålning. Då brukar man prata om **röntgenkristallografi** (*x-ray crystallography*).

RÖNTGENDIFFRAKTION FRÅN ENKRISTALL

Det kristallina materiets struktur kan bestämmas genom att analysera reflexionerna från en **enkristall**. Denna metod utvecklades av von Laue³. Man kan räkna ut varje atoms position i enhetscellen på basen av de uppmätta reflexionerna. Metoden kan tillämpas på allting från enkla oorganiska föreningar till proteiner förutsatt att man kan tillverka en tillräckligt stor enkristall. Detta är ofta också det största problemet i kristallografin. När man har enkristallen är det lätt att samla upp reflexionerna. Analysen baserar sig på en Fourier-analys och diskuteras senare.

Kristallen placeras i en kamera där filmen ligger runt provet. Den infallande röntgenstrålningen passerar genom kameran. Därför har man två hål i filmen, den ena där röntgenkällan ligger och den andra där röntgenstrålen styrs ut. Dessa hål används vid analysen för att fastställa skalan för vinkeln θ . Kamerans konstruktion visas i Fig. VIII.14.

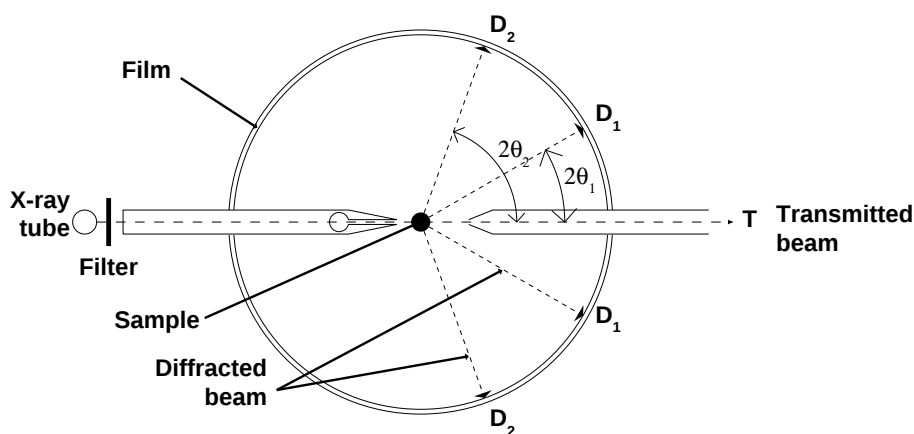


Fig. VIII.14. En Laue-kamera schematiskt.

Provet roteras i kameran så att vinkeln för den infallande strålningen, θ , ändras såsom det visas i Fig. VIII.15. Då får man reflexioner vid vissa vinklar. De primära reflexionerna med $n = 1$ i ekv. (VIII.3). är starkare än de sekundära ($n = 2$) etc. reflexionerna.

Röntgenstrålen lämnar spår i filmen vid dessa väldefinierade vinklar. Resultatet visas schematiskt i Fig. VIII.16.

³ Max von Laue (1879 - 1960). Tysk fysiker, professor i Berlin och Göttingen, direktör för Kaiser-Wilhelm-Institutet för fysikalisk kemi och elektrokemi. Han utvecklade teorin om röntgenstrålarnas böjning i kristaller och bevisade därmed att röntgenstrålning har vågkaraktär. Han beviljades Nobel-pris i fysik för dessa arbeten år 1914. Han utvecklade relativitetsteorin och den relativistiska termodynamiken.

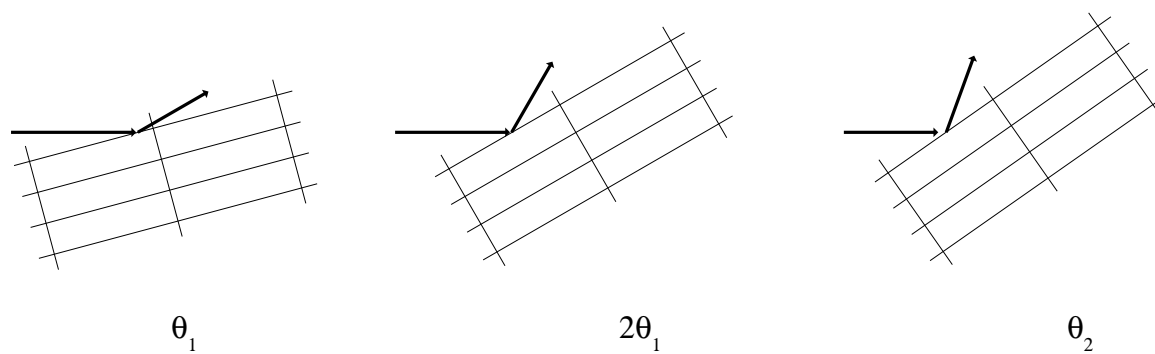


Fig. VIII.15. Effekten av rotation av provet.

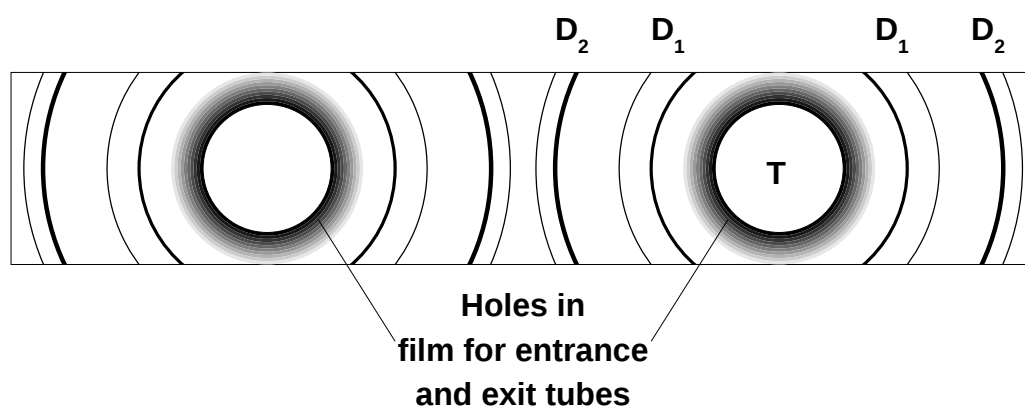


Fig. VIII.16. Diffraktionsmönstret på film schematiskt.

RÖNTGENDIFFRAKTION FRÅN PULVER

Röntgendiffraktion kan mätas från ett **pulverprov** med en likartad metod som från en enkristall. Denna metod utvecklades av Debye⁴ och Scherrer.⁵ Eftersom pulvret består av mikrokristaller som är slumpmässigt orienterade behöver man inte rotera ett pulverprov. Alla tänkbara vinklar θ av infallande strålning är representerade i pulvret.

Röntgendiffraktion från pulver används för att identifiera material. Från det uppmätta diffraktionsmönstret avläses varje vinkel θ som förekommer och de motsvarande intensiteterna. Dessa uppgifter jämförs med tabellerade värden för olika kristallina material. Varje ämne har sin karakteristiska kristallstruktur, m.a.o. karakteristiska avstånd mellan atomlagren, d , och därmed karakteristiska vinklar så att en entydig identifiering är möjlig. De karakteristiska vinklarna och de motsvarande intensiteterna kan skaffas i form av ett kartotek. Nuförtiden finns kartoteket även i datorformat vilket tillåter en automatisk sökning

⁴ Peter (Petrus) Josephus Wilhelms Debye (1884 - 1966). Holländsk-amerikansk fysiker och fysikokemist, professor i Zürich, Utrecht, Göttingen, Leipzig, Berlin. År 1940 flyttade han till USA (medborgarskap 1946) och var professor i kemi vid Cornell-universitetet 1948 - 52. En verklig mångsysslare och en av de mest betydande fysikerna på 1900-talet. Han härledde teorin om dipolväxelverknningar år 1912 och teorin om molekylernas polarisering under ett elektriskt fält något senare. Han utvecklade kristallpulvermetoden i röntgenkristallografin tillsammans med Scherrer år 1916. Debye-Huckel-teorin för lösningar av starka elektrolyter utkom år 1923. Studierna av molekylstrukturer via böjning av elektron- och röntgenstrålar i gaser och vätskor gav honom Nobel-priset i kemi år 1936. År 1938 kom han med en metod att uppnå mycket låga temperaturer. Under de sista åren studerade han polymera material.

⁵ Paul Scherrer (1879 - 1960). Schweizisk fysiker, professor vid ETH. Forskade i kvantteori, kärnfysik, magnetism och röntgenstrålning. Han var med om att utveckla Debye-Scherrer metoden.

i databasen. Ett kort visas i Fig. VIII.17.

1336 d 1-0576	3.49	6.5	2.11	6.5	ZnI ₂					
I/I ₁ 1-0575	100	28B	28	28B	Zinc Iodide					
Rad.	λ 0.709		Filter ZrO ₂		d Å	I/I ₁	hkl	d Å	I/I ₁	hkl
Dia.	16 inches		Cut off Coll.		6.5	28B				
I/I ₁	Calibrated strips d corr. abs? No				5.7	20B				
Ref. H					4.5	12				
					3.98	12				
Sys. Cubic					3.49	100				
a ₀	b _e	c _e	A	C						
α	β	γ	Z		3.06	8				
Ref.					2.93	4				
					2.75	4				
ϵ_{α} n ω β ϵ_{β} Sign					2.17	16				
2V	D 4.666mp 446 Color Colorless,									
Ref.	HCP				1.84	20				
					1.79	8				
B.P. 624					1.74	4				
					1.53	4				
					1.38	4				
					1.24	4				

Fig. VIII.17. Tabellerade reflexioner för zinkjodid.

Den statistiska fördelningen av orientationer gör att signalernas intensiteter inte är särskilt noggranna utan kan variera häftigt. Därför kan man inte använda pulverprov för att bestämma kristallparametrar. För detta ändamål måste man ha en enkristall.

Om pulvret är malt för fint så att mikrokristallerna är för små blir diffraktionssignalerna bredare. Man kan utnyttja detta i vissa fall för att bestämma kristallstorleken.

PARKORRELATIONSFUNKTION

Detta avsnitt visar hur man analyserar diffraktionsresultat från en enkristall. Precis samma matematik gäller givetvis även för pulverprov.

Betrakta en kristall där avståndet mellan atomlagren är d . Braggs lag säger att man finner reflexionsmaxima vid $\theta, 2\theta, \dots$. De högre interferensmaxima har lägre intensitet. Intensiteten kan räknas från formeln

$$I(\theta) = \frac{\sin(2\pi n)}{n} \quad (\text{VIII.4})$$

där storheten n kan härledas från ekvation (VIII.3) som

$$n = \frac{2d}{\lambda} \sin \theta. \quad (\text{VIII.5})$$

Observera att n inte behöver vara heltaligt här. Intensitetsmönstret visas schematiskt i Fig VIII.18.

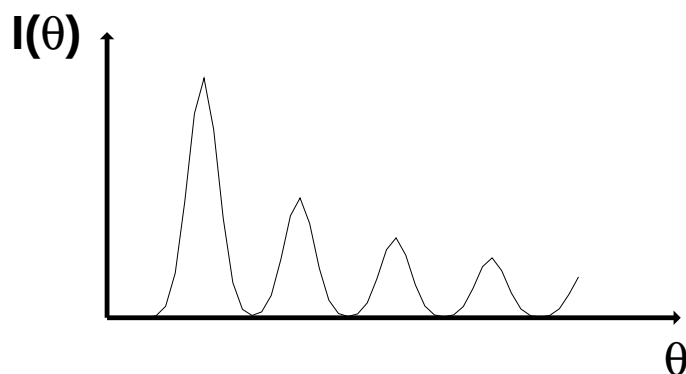


Fig. VIII.18. Intensitetsmönstret schematiskt.

Intensiteterna påverkas också av antalet atomer (eller spridningscentra) i atomlagret. Denna effekt införs i form av en parameter P som multiplicerar intensiteten.

Om det finns två karakteristiska avstånd d_1 och d_2 i kristallen är intensiteterna additiva,

$$I(\theta) = P_1 \frac{\sin(2\pi n_1)}{n_1} + P_2 \frac{\sin(2\pi n_2)}{n_2}. \quad (\text{VIII.6})$$

Man kan generalisera detta uttryck för oändligt många karakteristiska avstånd och skriva

$$I(\theta) \sim \int_0^\infty P(d) \frac{\sin\left(\frac{4\pi d}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)}{\frac{4\pi d}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (\text{VIII.7})$$

Den uppmätta informationen är intensiteterna $I(\theta)$. Den önskade informationen är kristallens karakteristiska dimensioner $P(d)$ som kan räknas ut via en Fourier transformation.

Den storheten som anges oftast i litteraturen är inte tätheten av spridningscentra för varje avstånd d utan en **parkorrelationsfunktion** $g_2(d)$ som definieras genom

$$P(d) = 4\pi d^2 n g_2(d). \quad (\text{VIII.8})$$

I fullkomligt homogent material är parkorrelationsfunktionen $g_2(d) \equiv 1$ och $n =$ antalet atomer i enhetscellen $= 1$.

KRISTALLSTRUKTURER

Röntgendiffraktion baserar sig på spridning från atomerna i enhetscellen. Varje atom fungerar som ett spridningscentrum men atomernas spridningstvärsnitt varierar. Atomens förmåga att sprida infallande strålning beror på elektrontätheten runt atomerna, $|\Psi(\tau)|^2$, enligt formeln

$$f_s = \int_{\Omega} e^{i\phi} |\Psi(\tau)|^2 d\tau, \quad (\text{VIII.9})$$

där

$$\begin{aligned} f_s &= \text{den } \mathbf{atomära} \text{ } \mathbf{strukturfaktorn} \\ \tau &= \text{avstånd och riktning från atomkärnan} \\ \phi &= \frac{4\pi d}{\lambda} \sin \theta = \text{strukturinformation} \\ \Psi &= \text{elektronisk} \quad \text{vågfunktion} \end{aligned}$$

Hela kristallens förmåga att sprida (**strukturfaktor**) är summan av de atomära bidragen,

$$\begin{aligned} F &= \sum f_s \\ &= \int_{\Omega} e^{i\phi(d)} |\Psi_{\text{kristall}}(d)|^2 dd. \end{aligned} \quad (\text{VIII.10})$$

Den observerade intensiteten är

$$I(\theta) \sim |F|^2 \quad (\text{VIII.11})$$

Den önskade informationen är en elektrontäthetskarta som kan fås genom en Fourier transformation. En elektrontäthetskarta visas i Fig. VIII.19.

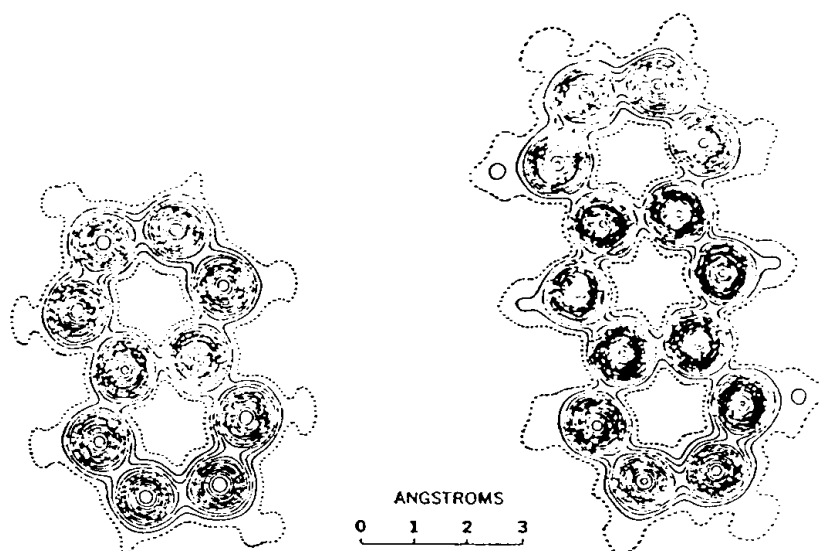


Fig. VIII.19. Elektrontäthetskarta.

De tunga atomerna sprider effektivt och ger starka reflexioner medan de lätta atomerna är svåra att observeras. Därför dopar man ibland organiska kristaller med metallatomer för att förankra vissa lägen i kristallen. Andra radens atomer, speciellt kol, kväve och syre ger tämligen starka signaler. Väteatomerna däremot kan sällan observeras direkt utan deras lägen extrapoleras på basen av molekylskelettet i efterhand.

Ju noggrannare man mäter den primära informationen, dvs. reflexionerna, desto bättre upplösning har man i den beräknade elektrontäthetskartan. Man anger ofta strukturbestämningens noggrannhet genom att ange den minsta dimensionen d som kan urskiljas. Noggrannheten 1 nm är acceptabel och ger en grov bild av strukturen. Värdena $d = 0.6$ eller $d = 0.3$ nm förekommer allmänt. De ger en bra bild av molekylskelettet. Lägre värden ger även en antydning av väteatomernas lägen.

Fourier-transformationen ger en möjlighet till olika tolkningar ty informationsmängden som behövs är stor. Därför måste man ofta komplettera analysen med rimliga antaganden om molekylens struktur. Detta gäller speciellt för stora molekyler som proteiner. Då använder man sig av olika molekylmodelleringsmetoder.

LÅGVINKELRÖNTGENSPRIDNING

Tämligen stora partiklar kan analyseras genom att använda små vinklar θ för den infallande strålningen. Denna metod utvecklades av Guinier⁶ och kallas **låg vinkelröntgenspridning**.

Den fysikaliska mekanismen i lågvinkelspridning är likartad med vanlig röntgendiffraktion, elektronrörelserna måste vara i resonans med den infallande röntgenstrålningens elektriska fält. Då är utgångspunkten också precis samma ekvation som i röntgendiffraktion,

$$I(\theta) \sim \int P(d) \frac{\sin(kd)}{kd} dd \quad k = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta. \quad (\text{VIII.12})$$

När vinkeln för den infallande strålningen är liten observeras inte små inhomogeniteter utan bara stora strukturer ger en signal. Detta illustreras i Fig. VIII.20. Man ser alltså endast skillnaden mellan det homogena lösningsmedlet och de stora kolloidala partiklarna.

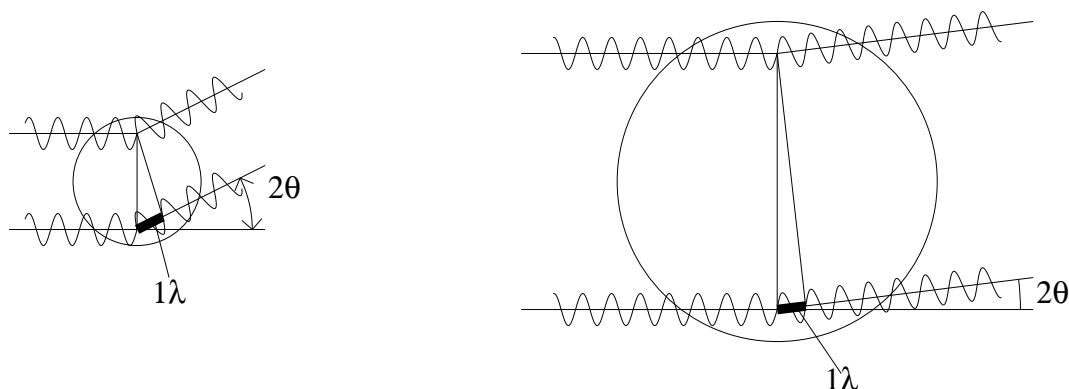


Fig. VIII.20. Intensitetsmönstret schematiskt.

Från lågvinkelröntgenspridning kan man räkna ut massan, storleken och formen av stora kolloidala partiklar. I princip jämför man den observerade intensitetskurvan med en teoretisk intensitetskurva som man har räknat ut för en modellpartikel. Några kurvor visas schematiskt i Fig. VIII.21. Man kan räkna ut vissa egenskaper direkt från ursprungsdata. Medelradien av partiklarna, R kan läsas från en Guinier plot [$I(\theta)$ vs. $(2\theta)^2$] som tangenten då $2\theta \rightarrow 0$. Om de kolloidala partiklarna är stavformiga kan man multiplicera intensitetskurvan $I(\theta)$ med en faktor 2θ för att räkna den sk. tvärsnittsfaktorn, dvs. en kurva som endast beror av stavens dimensioner. För flingor kan man använda faktorn $(2\theta)^2$ istället för att räkna en tjockleksfaktor.

⁶ André Guinier (1911 -). Fransk fysiker.

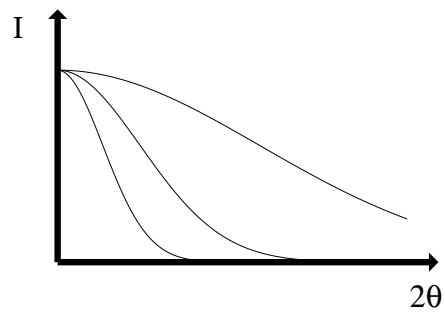


Fig. VIII.21. Intensitetsmönstret schematiskt.

