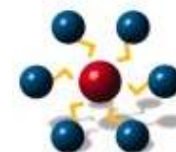


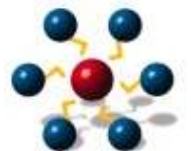
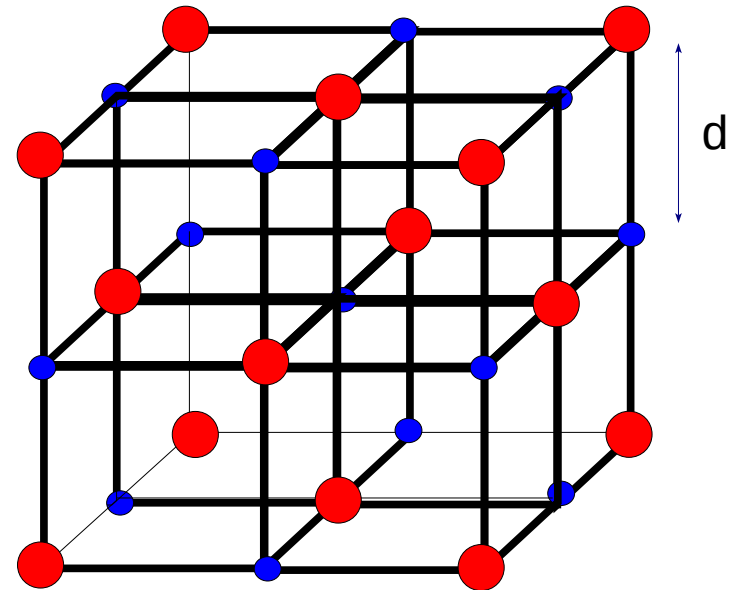
Diffraction

Matti Hotokka
Fysikalisk kemi



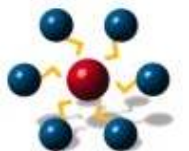
Fenomen

- ⇒ Betrakta en kristall med avståndet d mellan atomlagren
 - ▶ NaCl: $d \sim 0.28 \text{ nm}$
- ⇒ Om infallande ljusets våglängd λ är
 - ▶ Mycket större än $d \Rightarrow$ reflektion
 - ▶ Ungefär samma som $d \Rightarrow$ spridning
 - ▶ Spridning från olika lager interfererar $\Rightarrow$ diffraktion

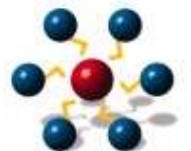
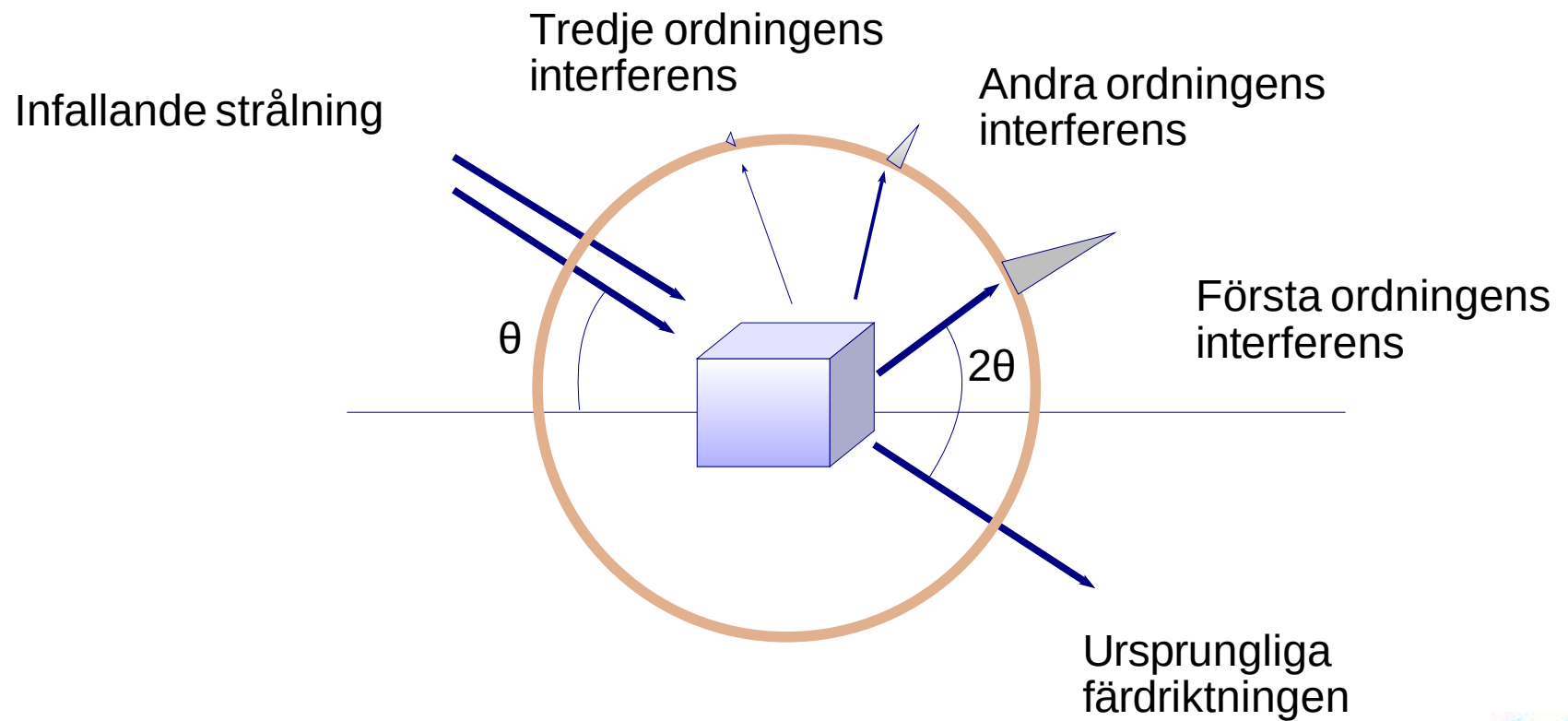


Vilken sorts ljus?

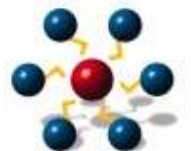
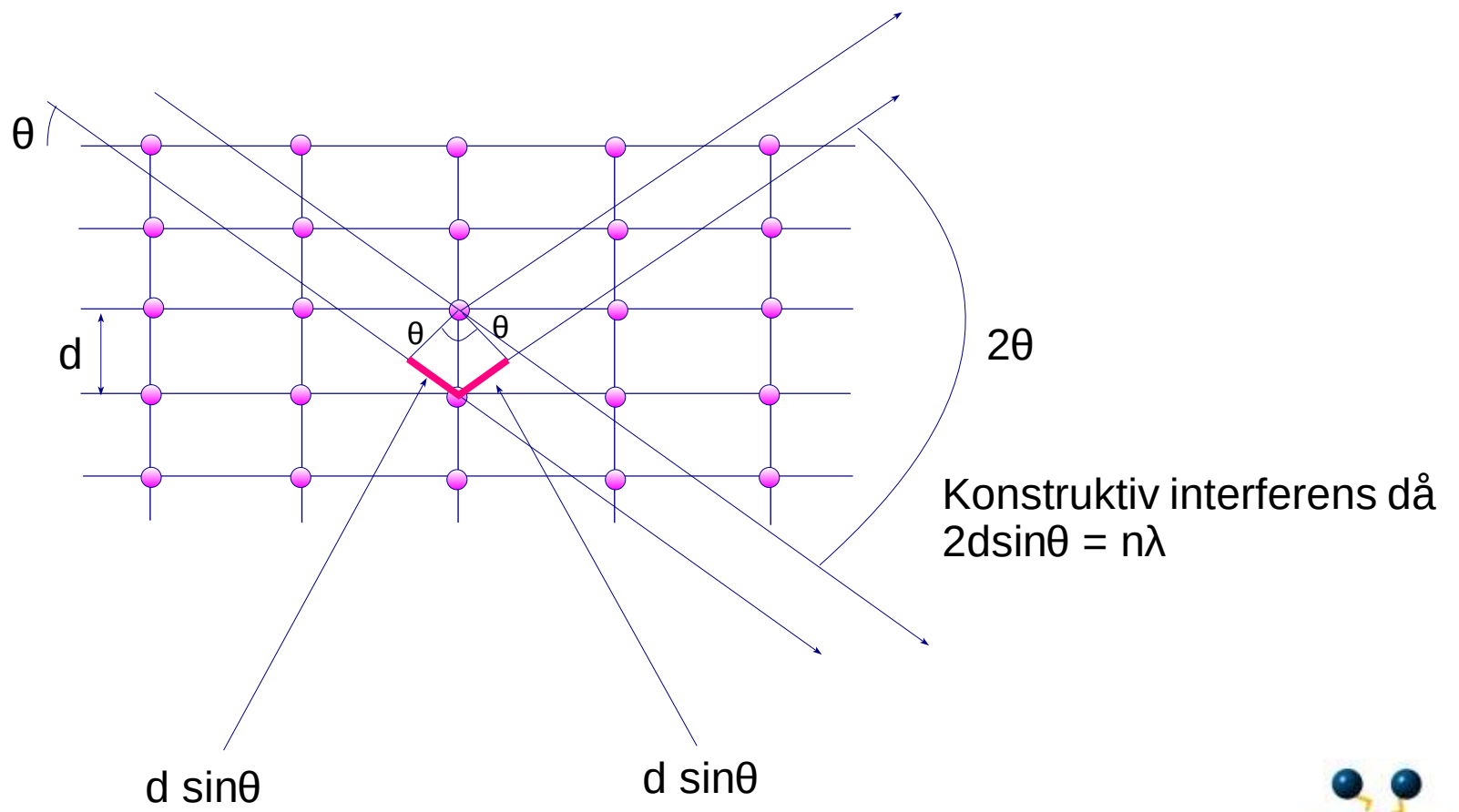
- ⇒ Man finner tillräckligt korta våglängder i
 - Röntgenstrålning (ca 0.1 nm)
 - Elektronstrålar (ca 0.01 nm)
 - Neutronstrålar (ca 0.3 nm)
- ⇒ Här betraktas röntgenstrålning



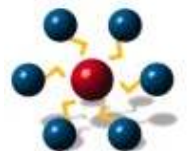
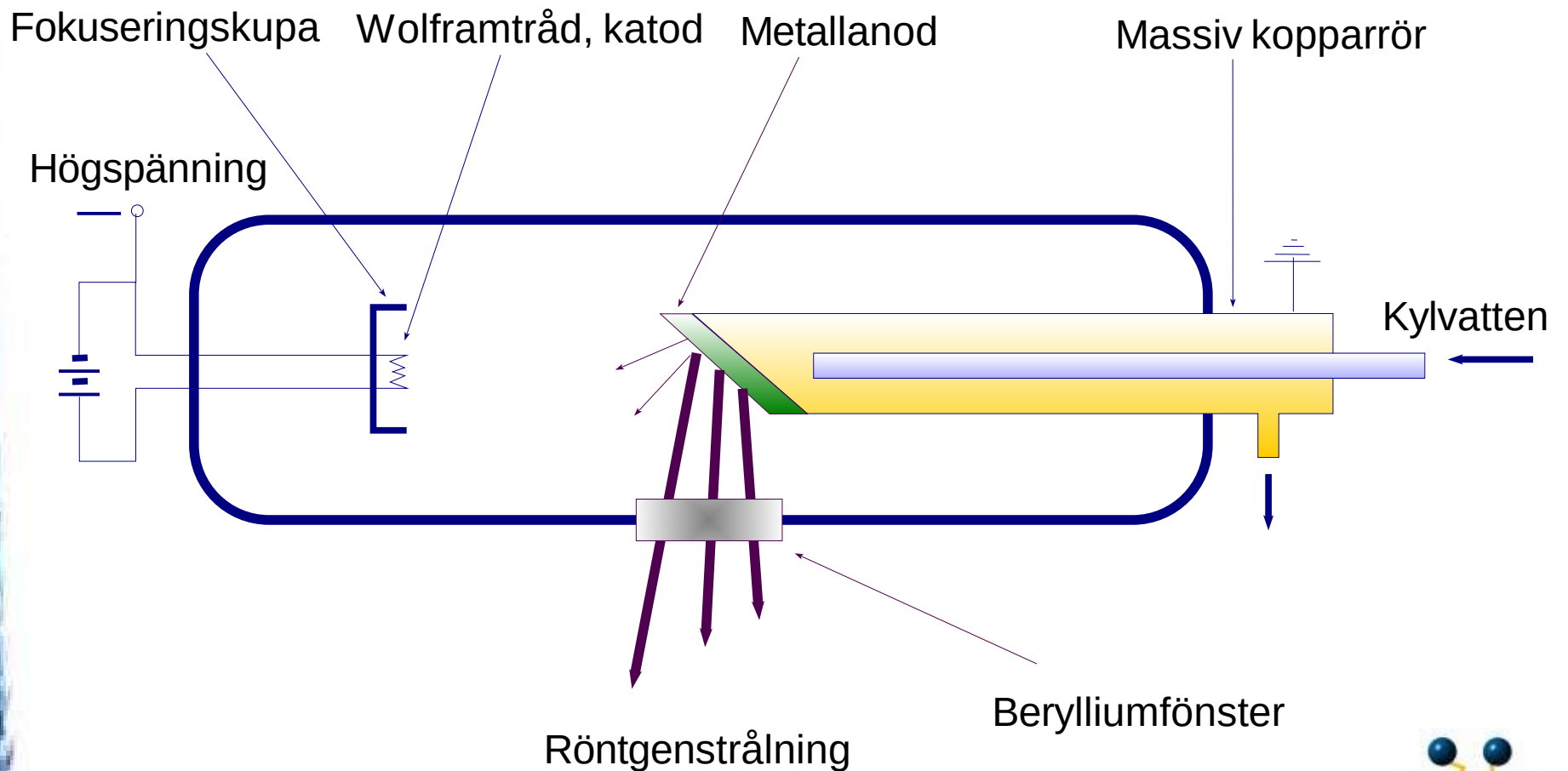
Interferens



Braggs lag



Röntgenrör



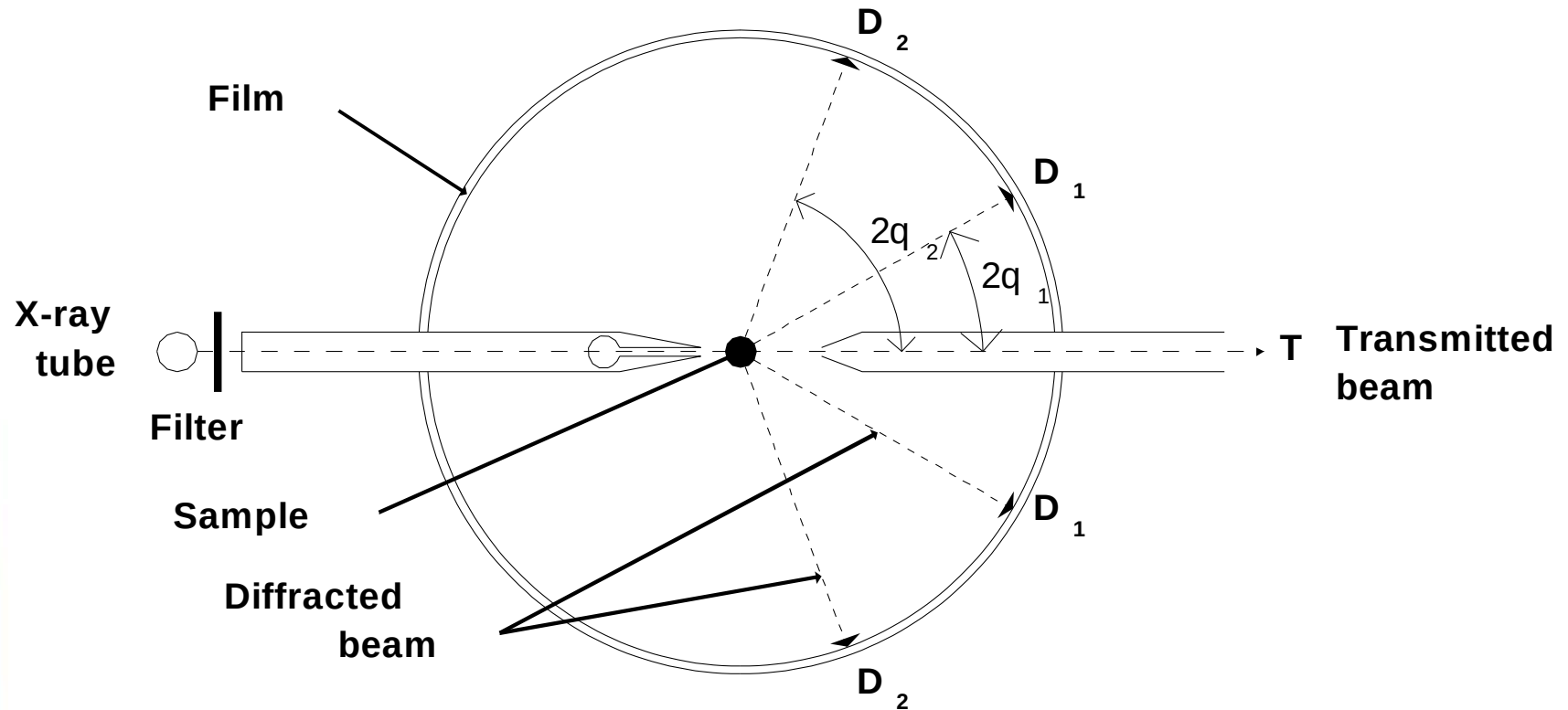
Röntgenrör

⇒ Anodmaterial bestämmer våglängden

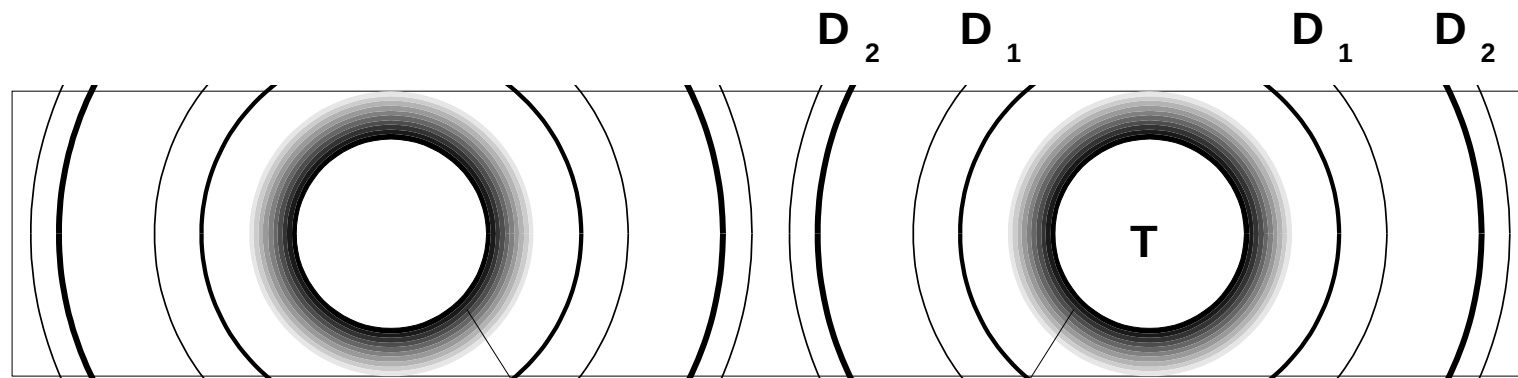
Cr	0.228962 nm	Zn	0.143510 nm
Mn	0.210174 nm	Mo	0.070926 nm
Fe	0.193597 nm	Rh	0.061326 nm
Co	0.178890 nm	Pd	0.058545 nm
Ni	0.165783 nm	Ag	0.055941 nm
Cu	0.154959 nm		



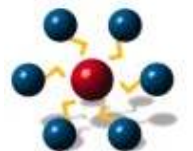
Lauecamera



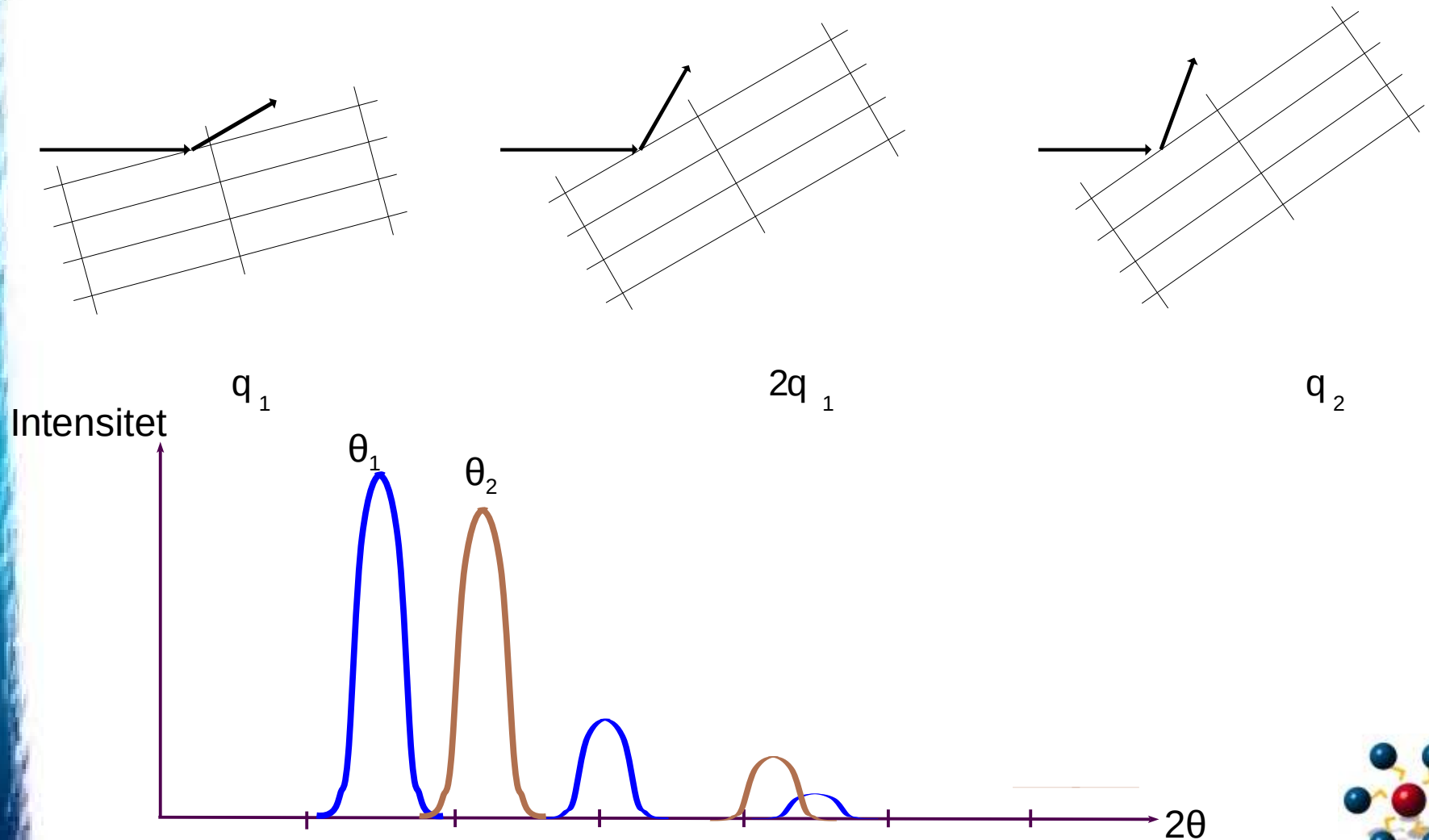
Lauekameras film



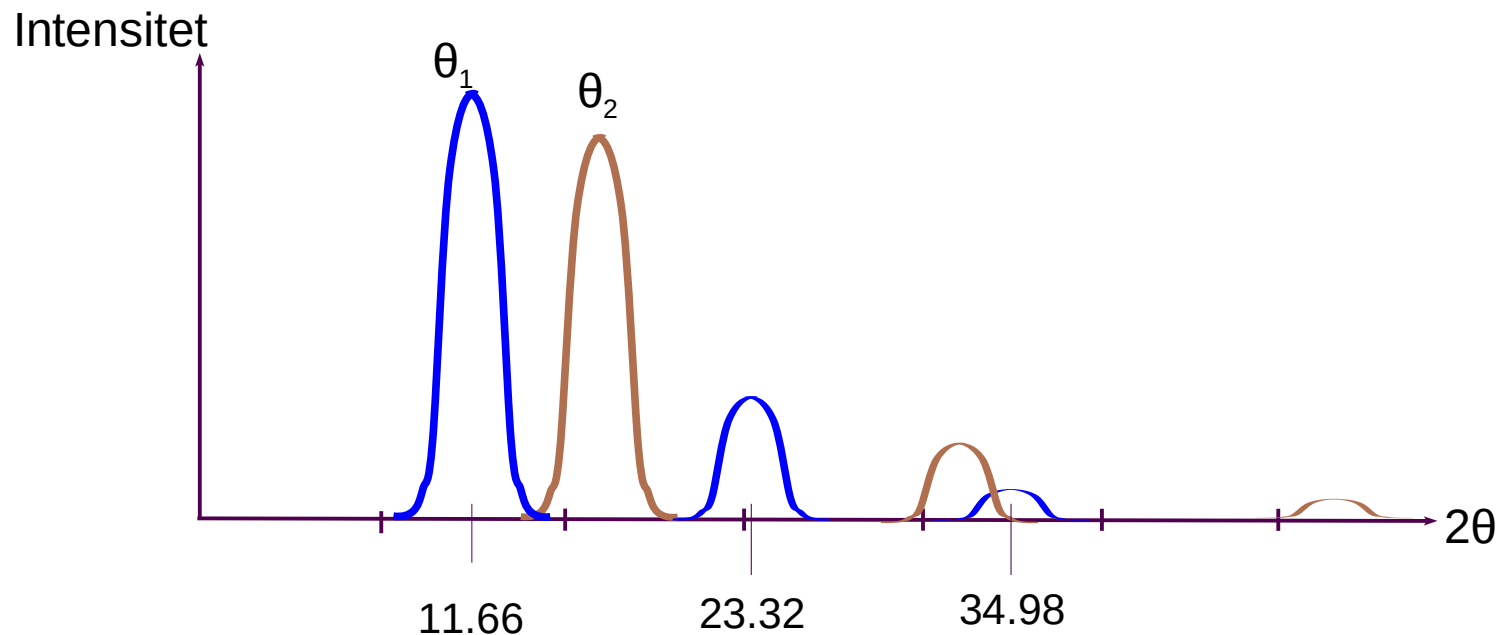
Holes in
film for entrance
and exit tubes



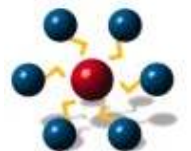
Roterande enkristall



Exempel

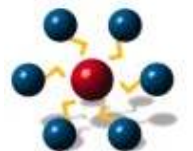


Braggs lag $2d \sin\theta = n\lambda \Rightarrow d = n\lambda/2 \sin\theta$
 $2\theta = 11.66^\circ \Rightarrow \theta = 5.83^\circ \Rightarrow \sin \theta = 0.1016$
Anodmaterial molybden $\Rightarrow \lambda = 0.070926 \text{ nm}$
 $d = 0.349 \text{ nm}$ ($n=1$) eller 0.698 nm ($n=2$) eller ...



Kristallens symmetri

- ⇒ En sekvens $\Rightarrow$ endast en kristallkonstant
 $\Rightarrow$ kubisk struktur
- ⇒ Två sekvenser $\Rightarrow$ kanske tetragonal



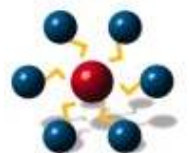
Enkristall

- ⇒ Exakta kristallkoordinater
- ⇒ Ofta mycket arbetsdryg analys
 - Fourieranalys
 - Molekylmodellering
- ⇒ Största problemet att tillverka en bra enkristall
- ⇒ Används för att få exakt molekylstruktur



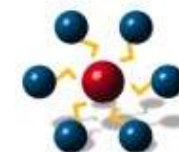
Pulverprov

- ⇒ Apparaten liknar en Lauekamera
- ⇒ Provet roterar inte, alla tänkbara vinklar finns färdigt i provet
- ⇒ Pulvret ger inte lika noggranna resultat som enkristall
 - ▶ Intensiteten varierar
 - ▶ Signalen blir bred om pulvret är finfördelat
- ⇒ Används för identifiering av material



Datatabell

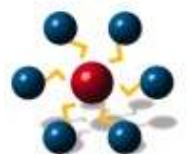
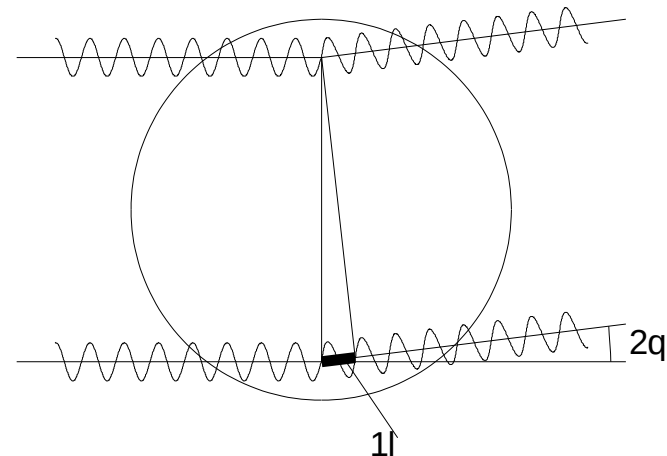
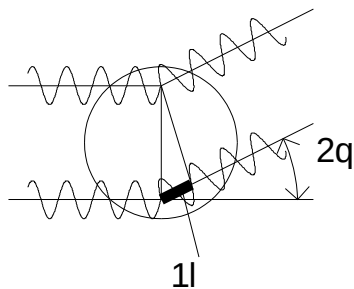
1336					ZnI ₂						
d	3.49	6.5	2.11	3.49							
1-0576											
I/I ₁					Zin Iodide						
1-0576	100	28B	28	28B							
Rad. λ 0.709 Filter ZnO ₂					d Å	I/I ₁	hkl	d Å	I/I ₁	hkl	
Dia. 16 inches Cut Off Coll.											
I/I ₁ Calibrated strips d corr abs? No					6.5	28B		1.38	4		
Ref. H					5.7	20B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



Lågvinkelspridning

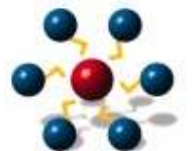
SAXS = Small Angle X-ray Scattering

- ⇒ Vinkeln 2θ från 1° till 6°
- ⇒ d är mellan 1 och 100 nm
- ⇒ Används för att studera kolloidalt och nanomaterial



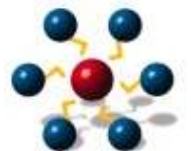
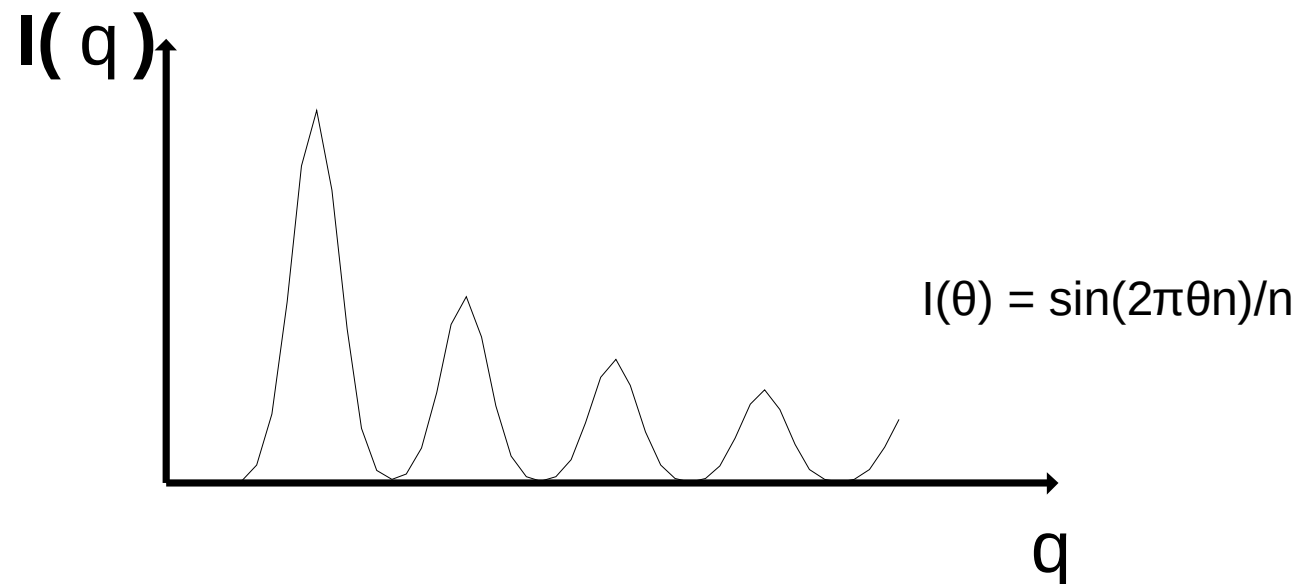
Krystallstruktur

- ⇒ Räknas från röntgenspridningen med Fouriertransformation
- ⇒ Ju mera datapunkter desto noggrannare struktur
 - ▶ Ju längre mättid desto mera datapunkter
- ⇒ Noggrannheten anges med minsta d som kan observeras (dvs. upplösning)
 - ▶ 1.2 nm tillfredställande
 - ▶ 0.6 nm bra
 - ▶ 0.3 nm utmärkt



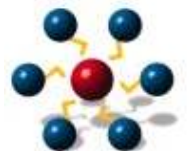
Interferensmönster

- ⇒ En sekvens interferenser observeras
 - Primär, andra ordningens, tredje ordningens,...



Interferensmönster

- ⇒ Ordningen kan räknas från Braggs lag
 - ▶ $n = 2d / \lambda \sin\theta$
- ⇒ Intensiteten beror på ordningen n
 - ▶ $I(\theta) = \sin(2\pi\theta n)/n$
- ⇒ Intensiteten beror också på antalet spridande atomer
 - ▶ Om P atomer sprider är $I(\theta) = P \sin(2\pi\theta n)/n$



Additiva intensiteter

- ⇒ Två kristallkonstanter d_1 och d_2 ger additiva intensiteter

$$I(\theta) = P_1 \frac{\sin(2\pi n_1)}{n_1} + P_2 \frac{\sin(2\pi n_2)}{n_2}$$

- ⇒ Oändligt många olika d ger en integral

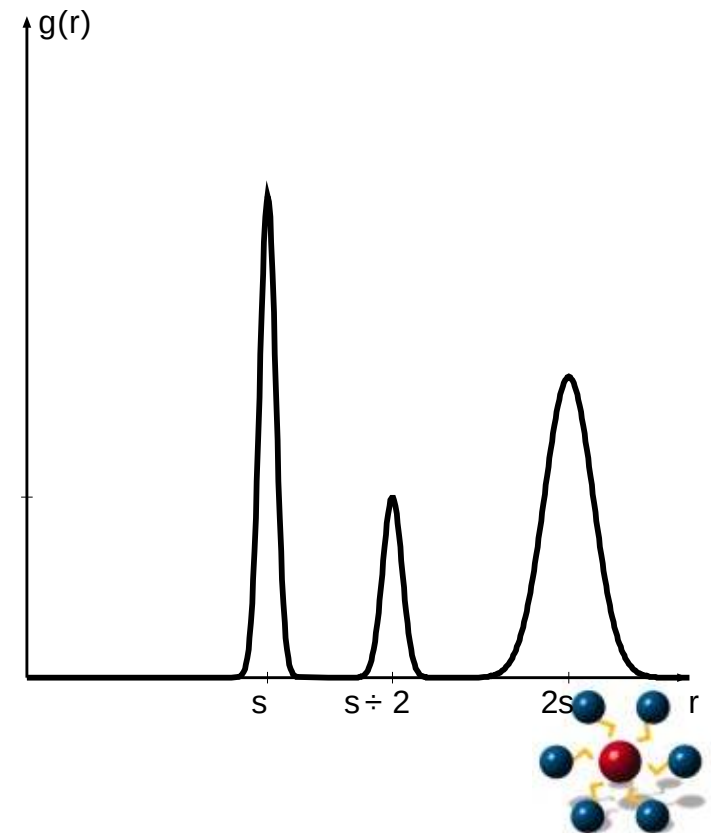
$$I(\theta) \approx \int_0^\infty P(d) \frac{\sin\left(\frac{4\pi d}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)}{\frac{4\pi d}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)} dd$$



Parkorrelationsfunktion

- ⇒ Fördelningen av karakteristiska avstånd $P(d)$ fås genom Fouriertransformation
- ⇒ Från $P(d)$ kan parkorrelationsfunktionen $g_2(d)$ räknas

$$g_2(d) = \frac{P(d)}{4\pi d^2 n}$$



Kristallens strukturfaktor

⇒ Strukturfaktorn F beror på kristallens elektronfördelning

$$F = \int_{\Omega} e^{i\phi(d)} \rho_{el, kristall}(d) dd$$

$\phi(d)$ = strukturinformation

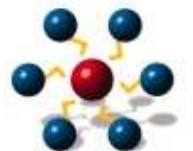
$$\phi(d) = \frac{4\pi d}{\lambda} \sin(\theta)$$

$\rho_{el, kristall}$ = kristallens elektrontäthet = $|\Psi_2|$

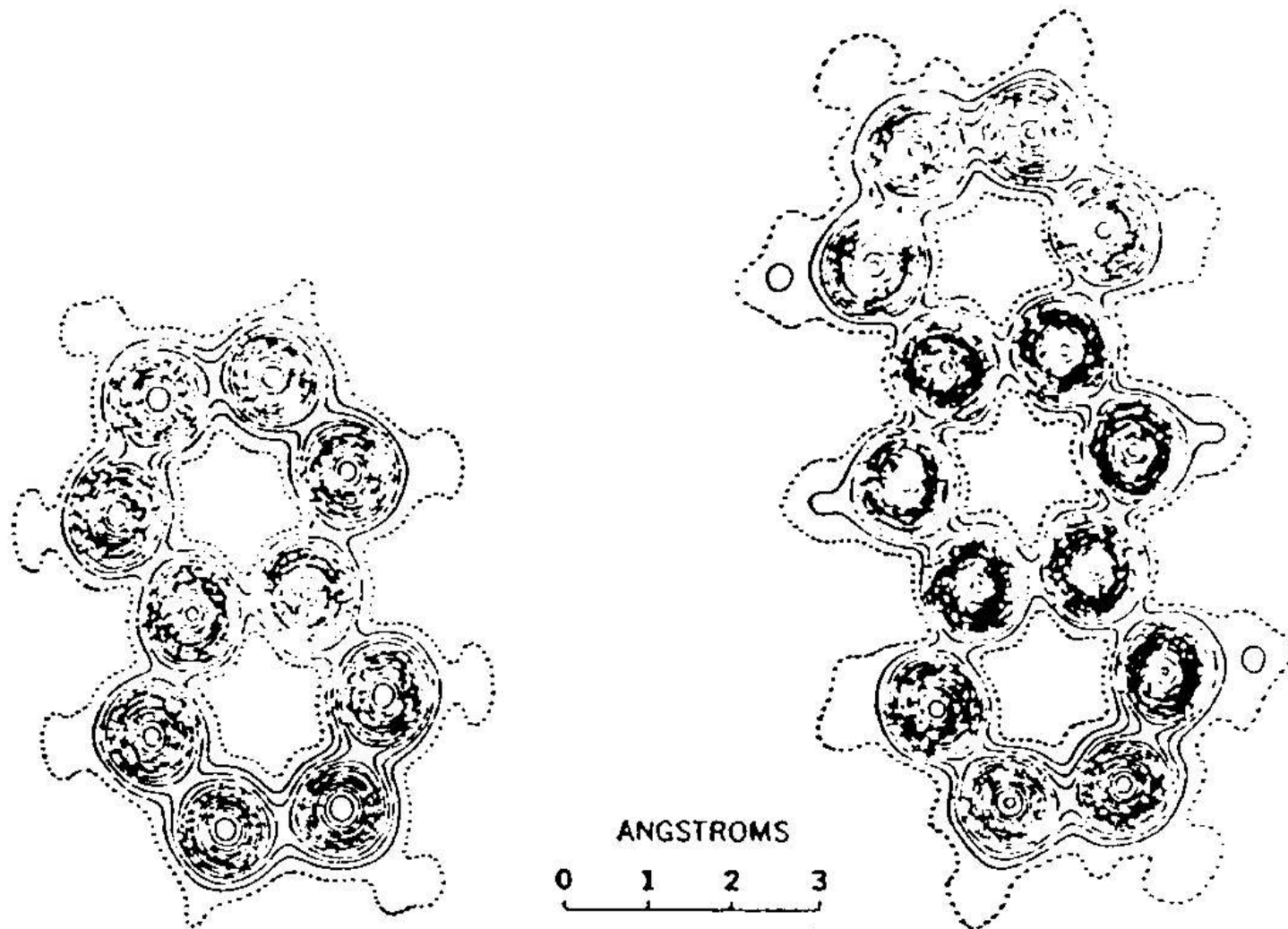


Kristallens elektrontäthet

- ⇒ Spridningsintensiteten $I(\theta)$ är relaterad till strukturfaktorn via $I(\theta) \approx |F|^2$ och därmed till elektrontätheten
- ⇒ Elektrontäthet kan räknas från intensiteten
- ⇒ Visas som en elektrontäthetskarta
- ⇒ Röntgenkristallografi visar inte var atomerna är utan var elektronerna är!



Elektrontäthetskarta



Krystallstruktur

Kräver modellering

