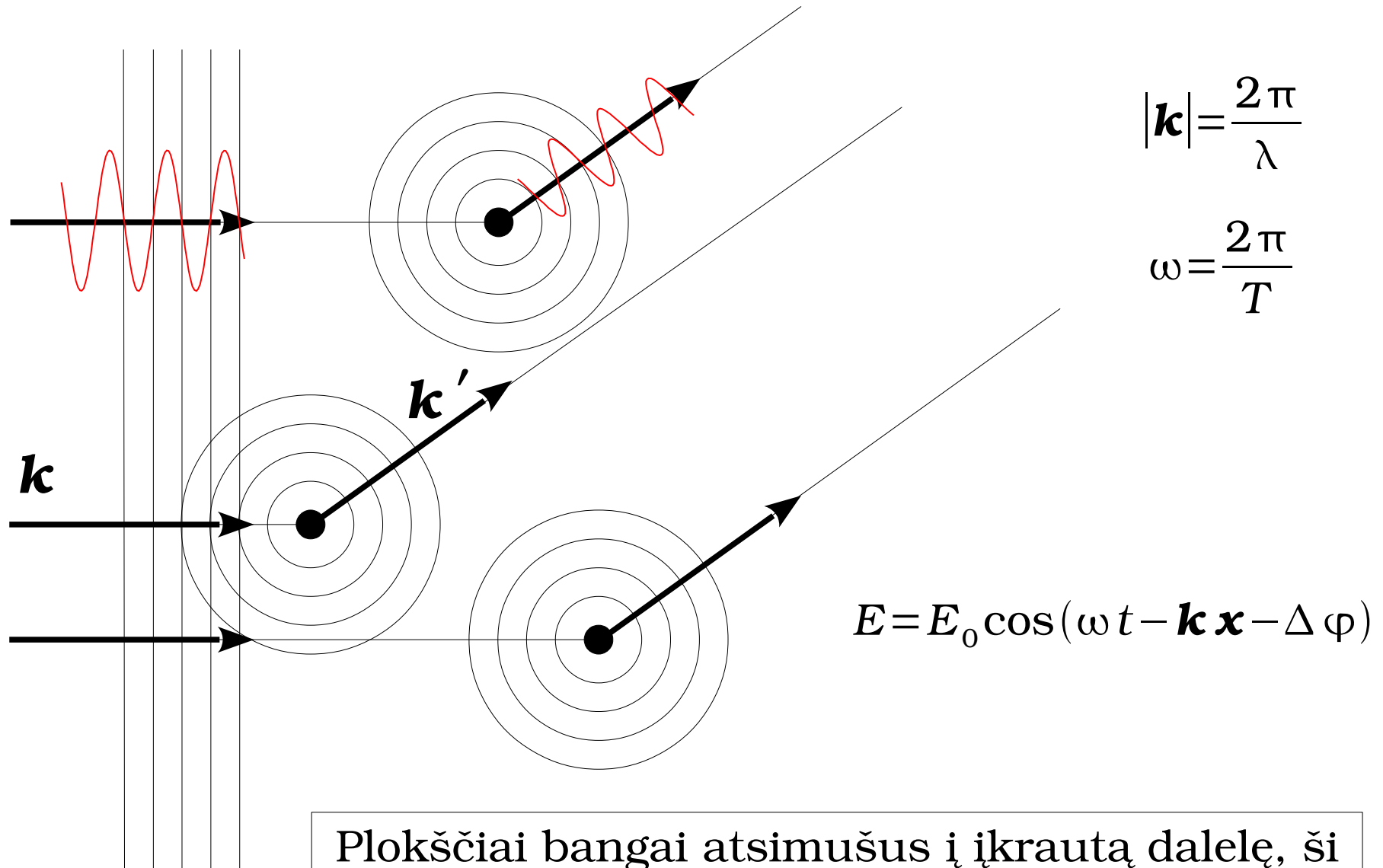


Žaidimai bangose

Difrakcijos teorija

Saulius Gražulis
2012

Rentgeno spindulių sklaidymas



Plokščiai bangai atsimušus į įkrautą dalelę, ši pradeda skleisti sferines bangas.

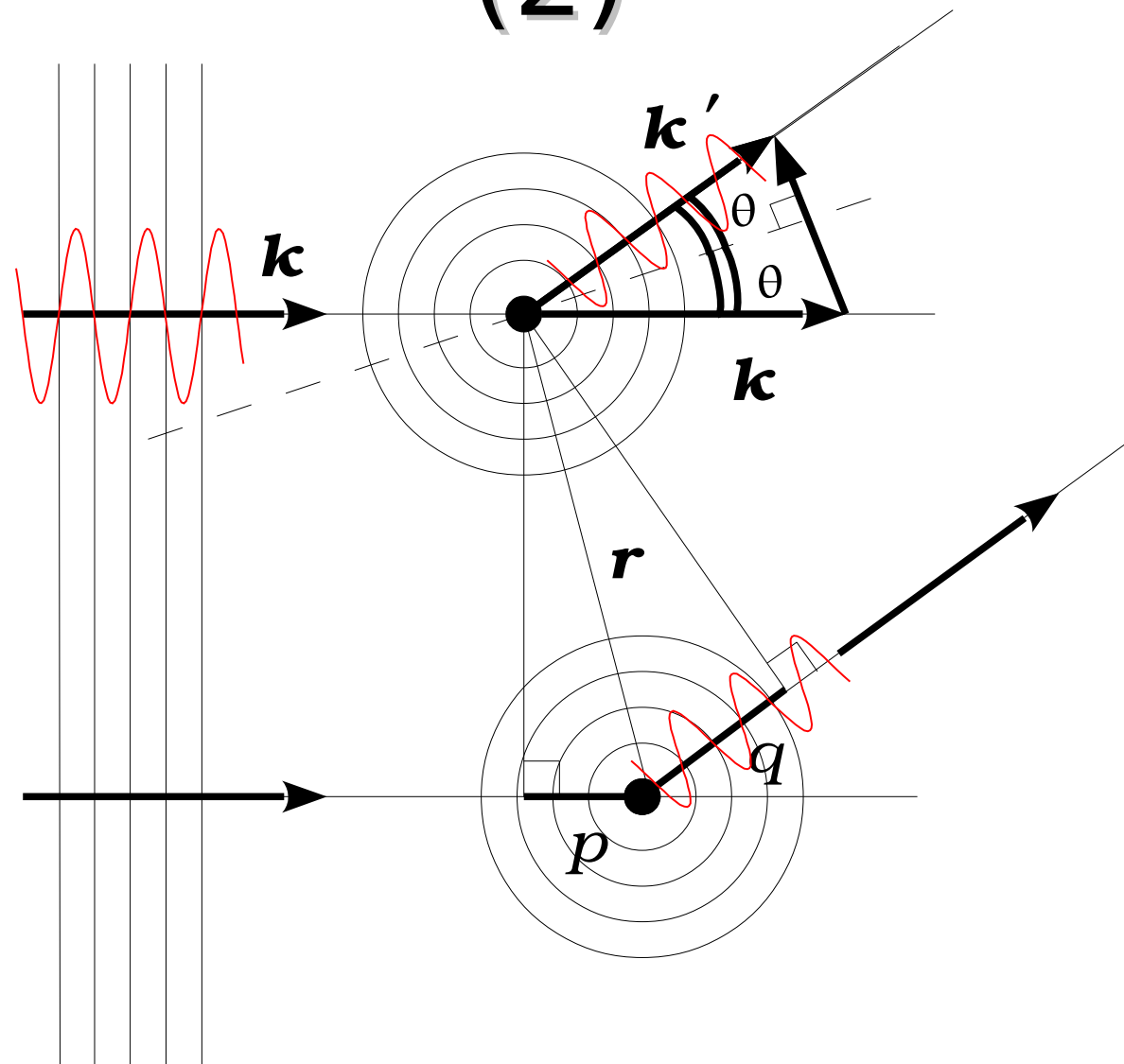
Krūvio sklaidymas – Tomsono (Thomson) formulė

$$\sigma = \frac{I_{scattered}}{I_{incident}} = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot mc^2} \right)^2$$

$$m_p \approx 1800 \cdot m_e$$

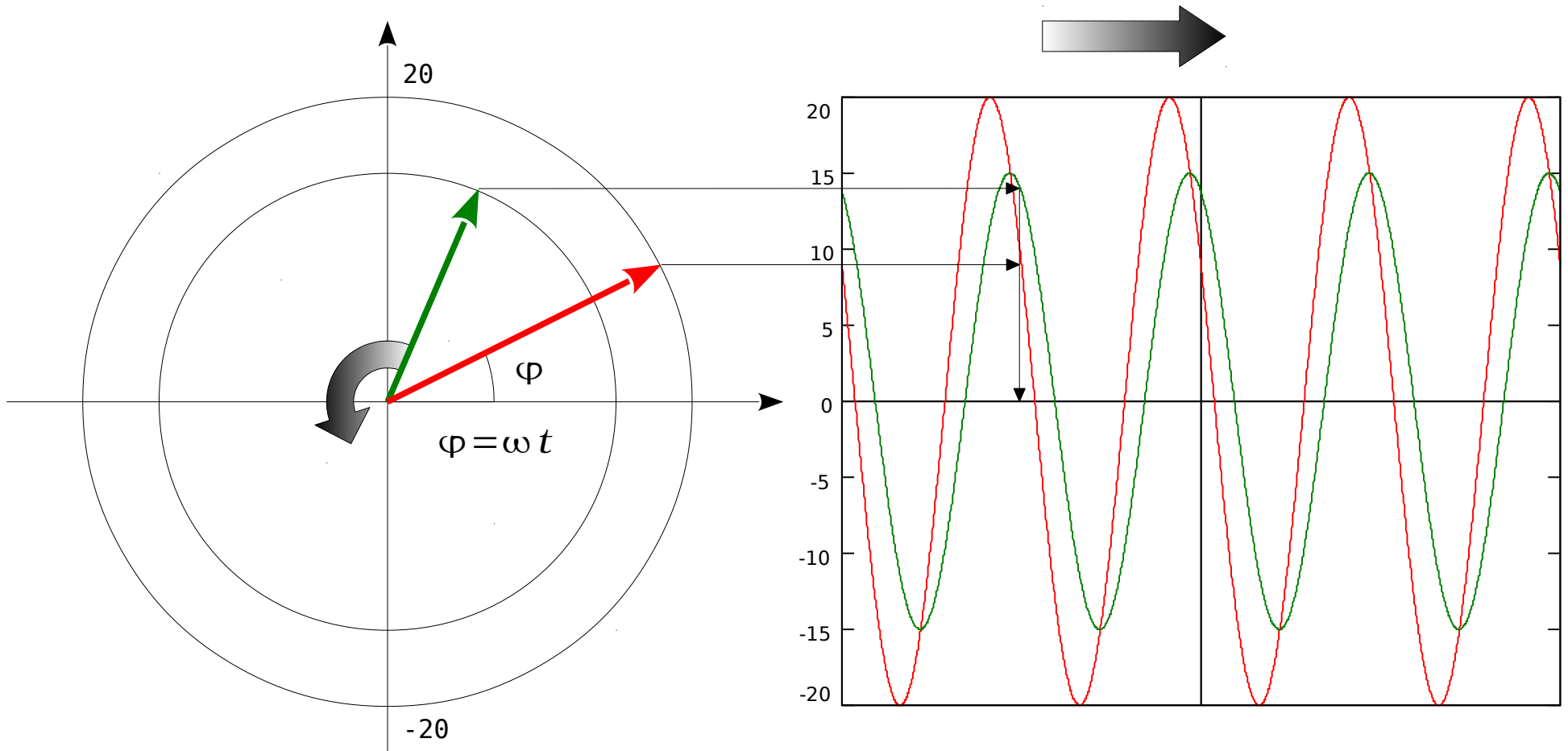
Medžiagoje Rentgeno spindulius sklaido praktiškai tik elektronai, protonų (ir sunkesnių) dalelių sklaidymo galime nepaisyti.

Rentgeno spindulių sklaidymas (2)



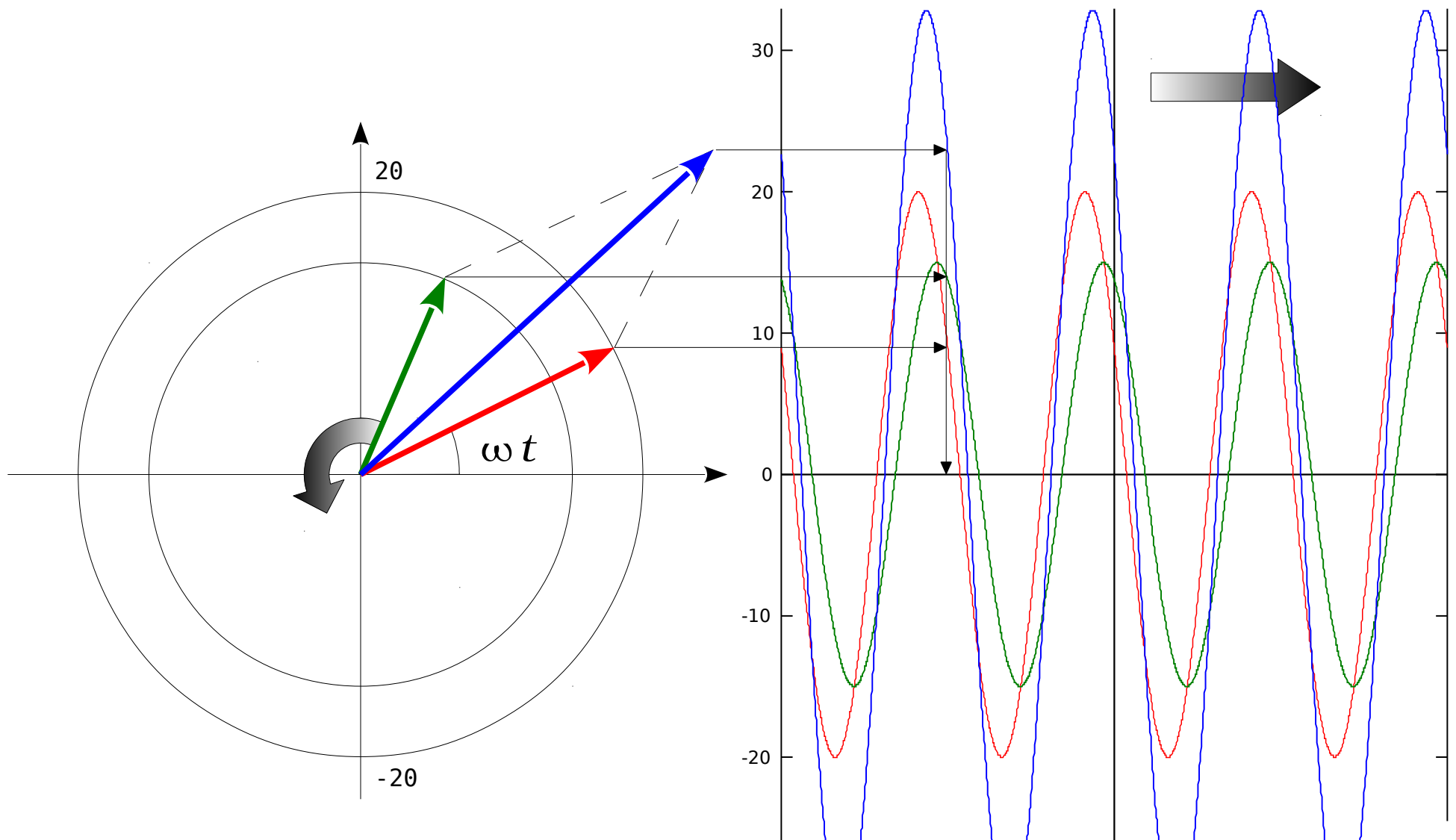
Skirtingose vietose esančių dalelių išsklaidytos bangos
nukeliauja skirtingą kelią

Harmoninių bangų sudėtis



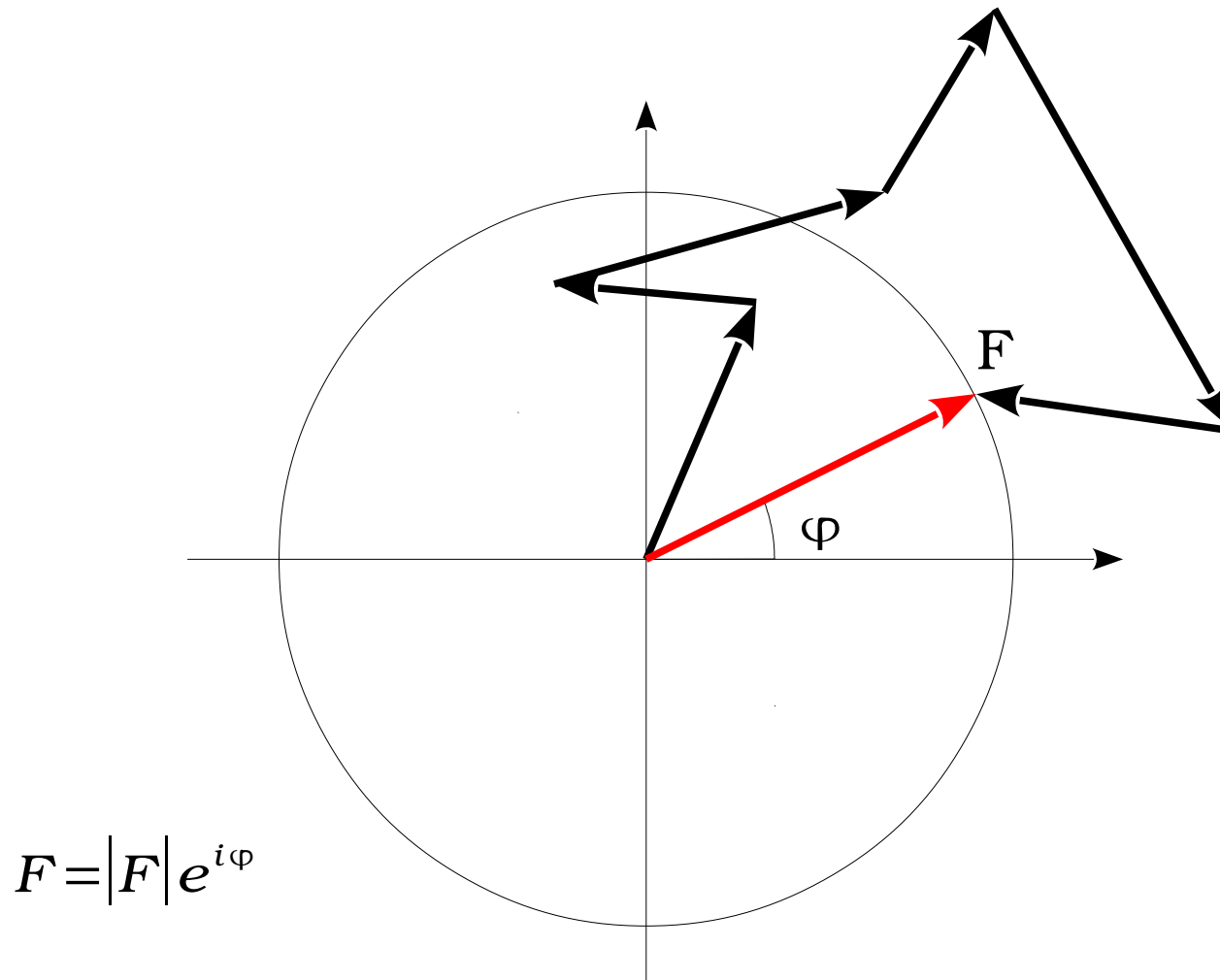
Harmoninės bangos gali būti pavaizduotos kaip besisukantys vektoriai.

Harmoninių bangų sudėtis (2)



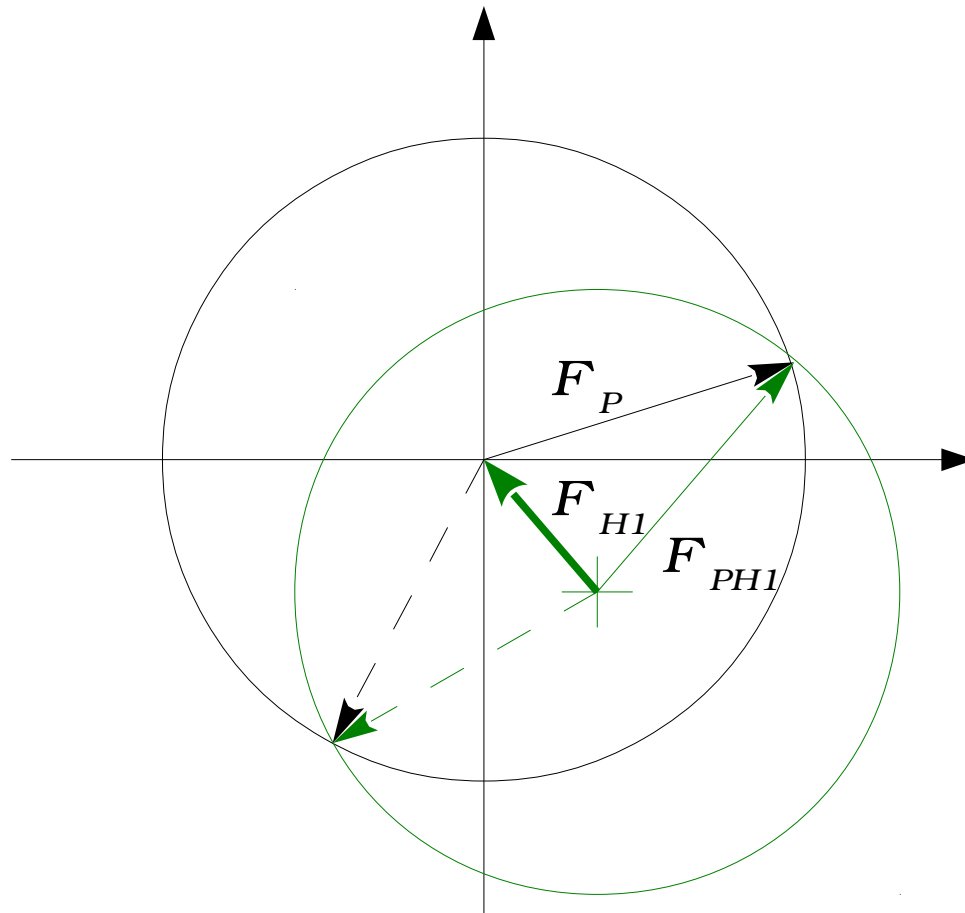
Harmoninių bangų suma yra vėl harmoninė banga su tuo pačiu dažniu, bet skirtinga amplitude ir faze.

Daugelio bangų sudėtis

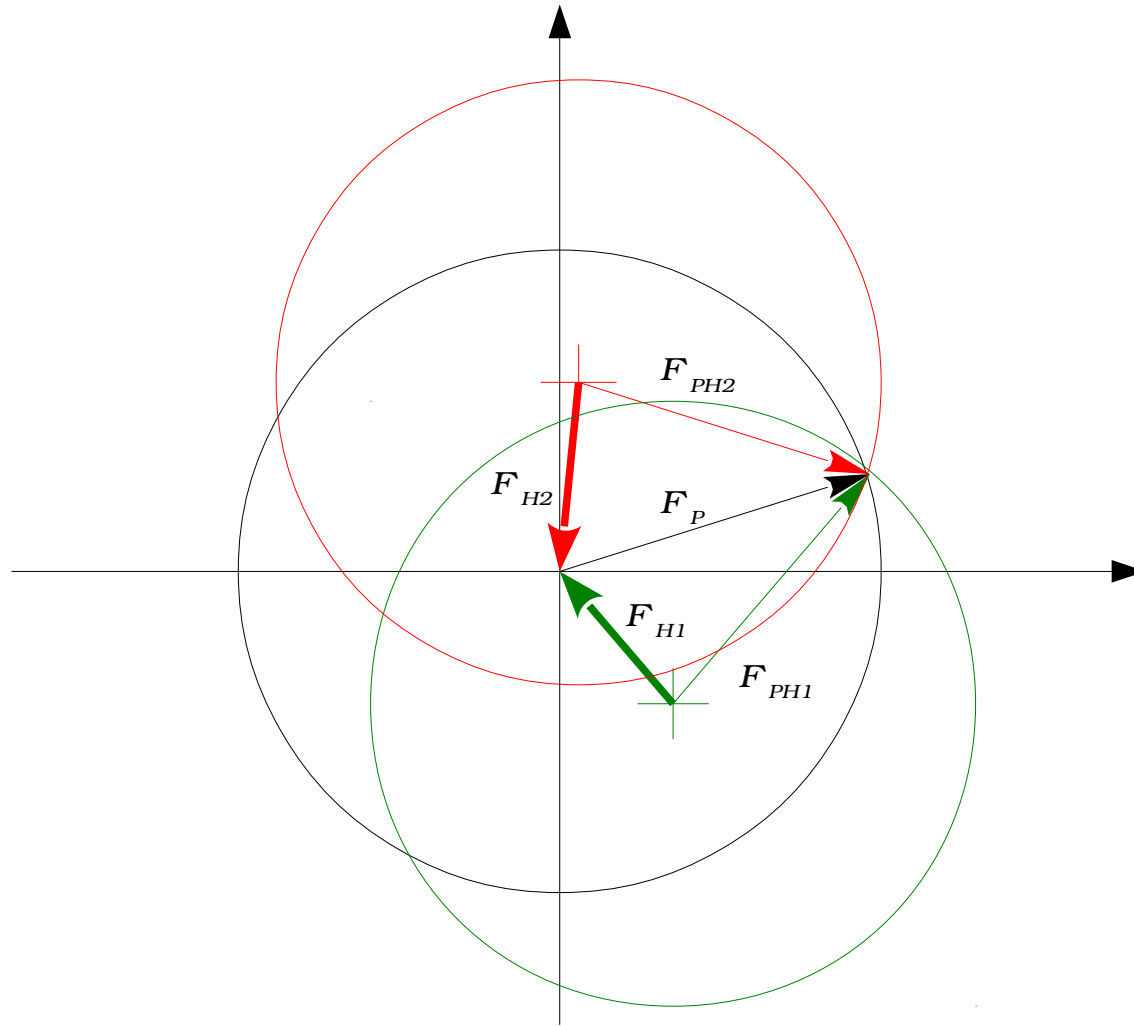


Keletas harmoninių bangų sumuojasi, duodamos naują to paties dažnio harmoninę bangą.

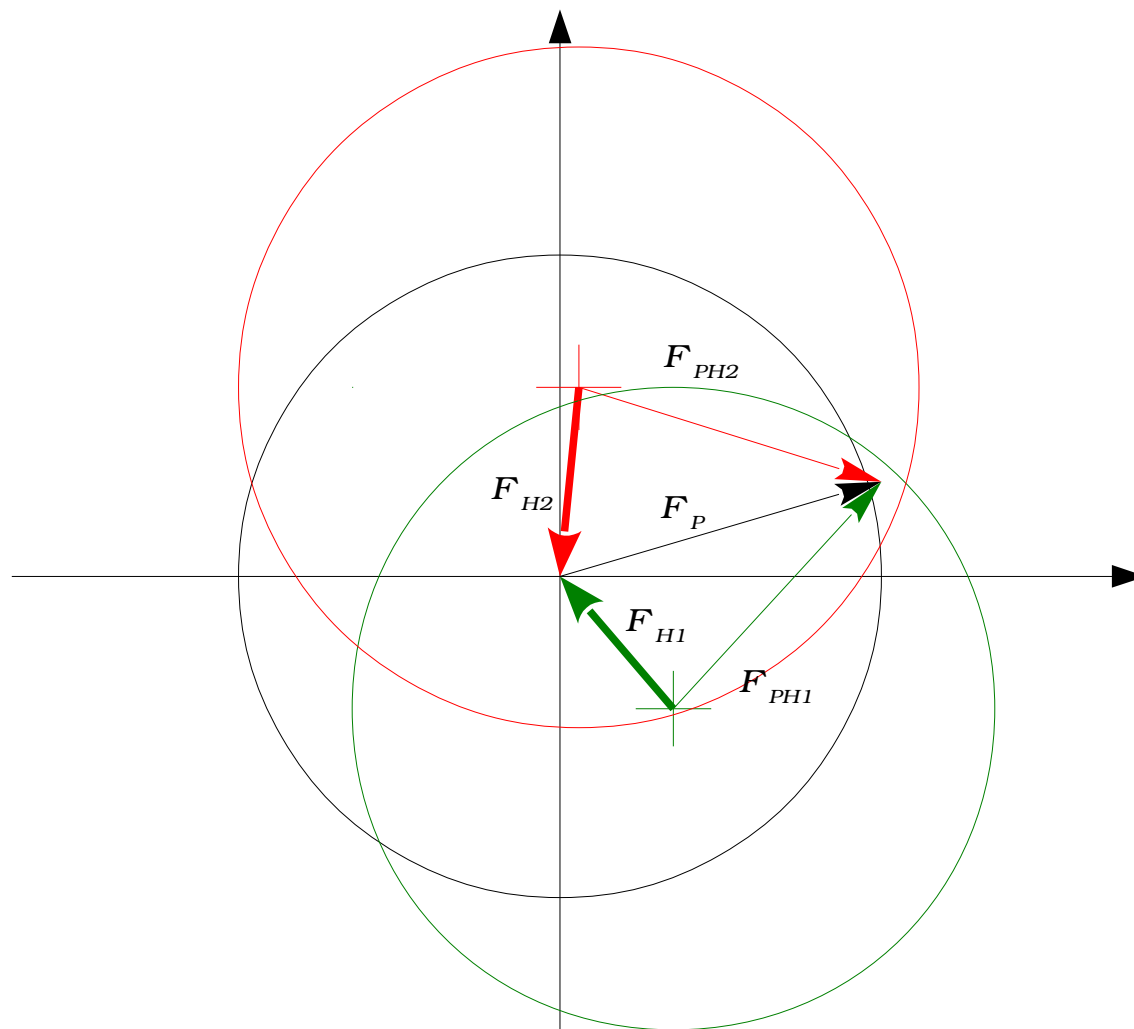
Vienkartinis izomorfinis pakeitimas (SIR)



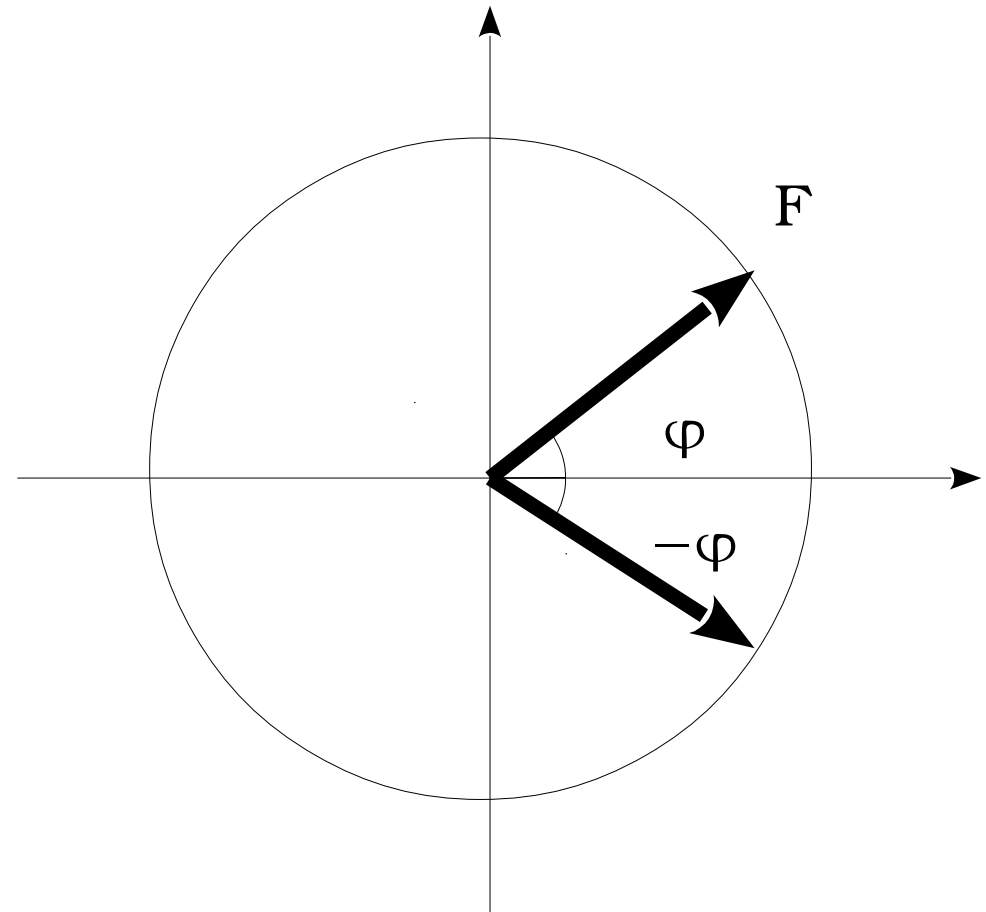
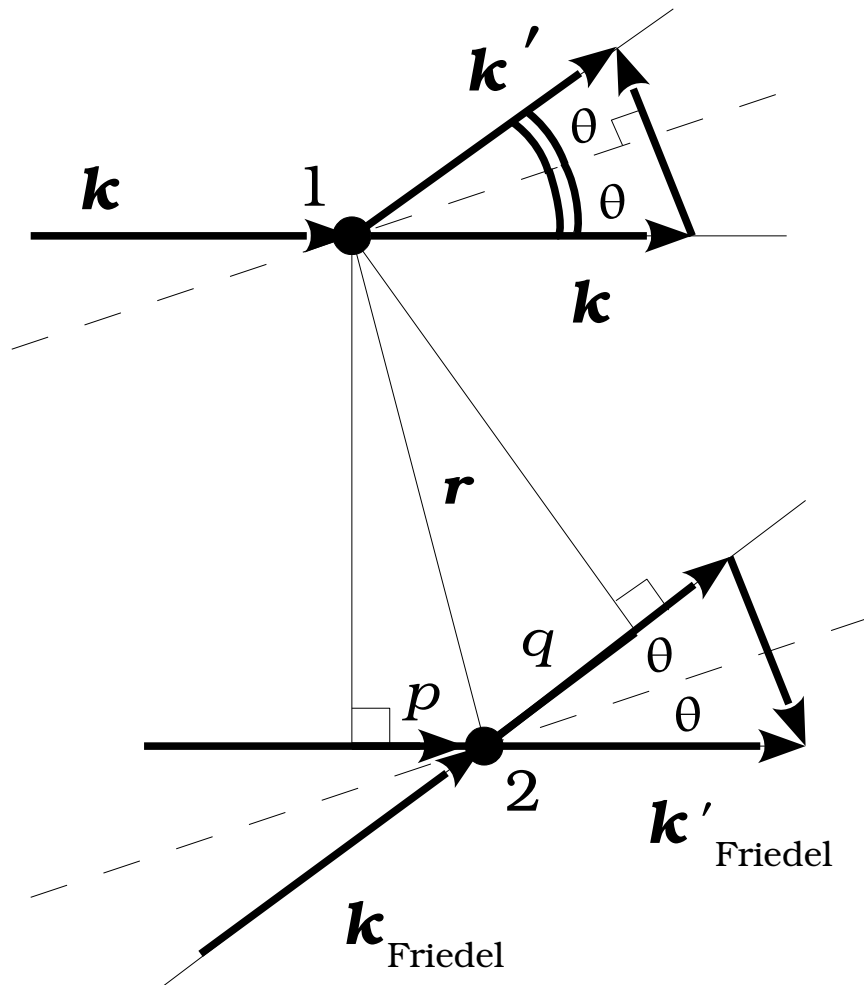
Daugkartinis izomorfinis pakeitimas MIR



Rūsti reālybē ...

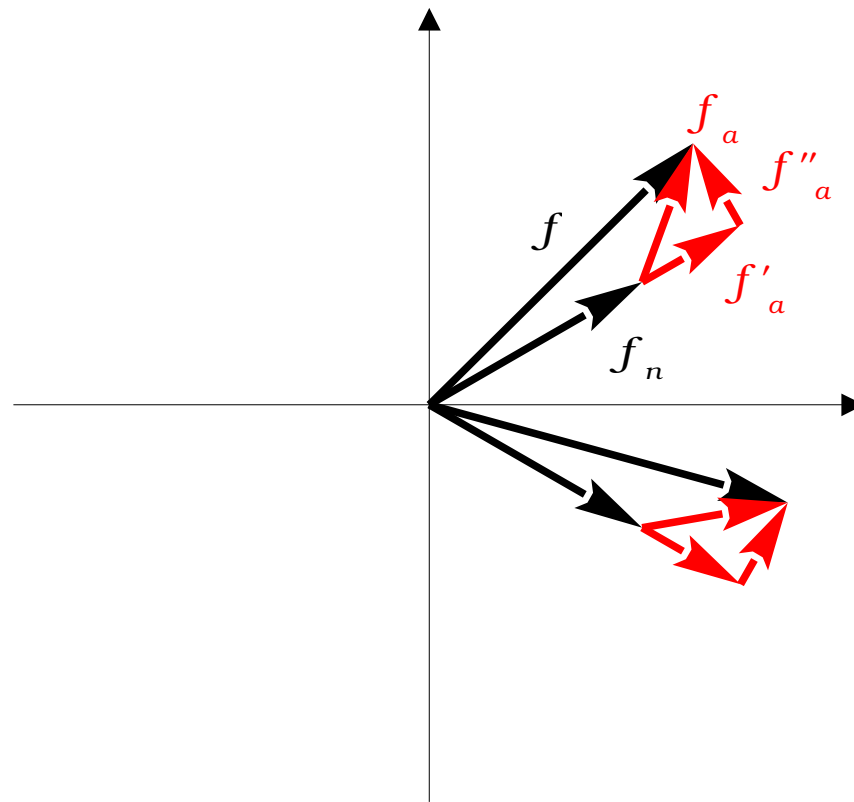
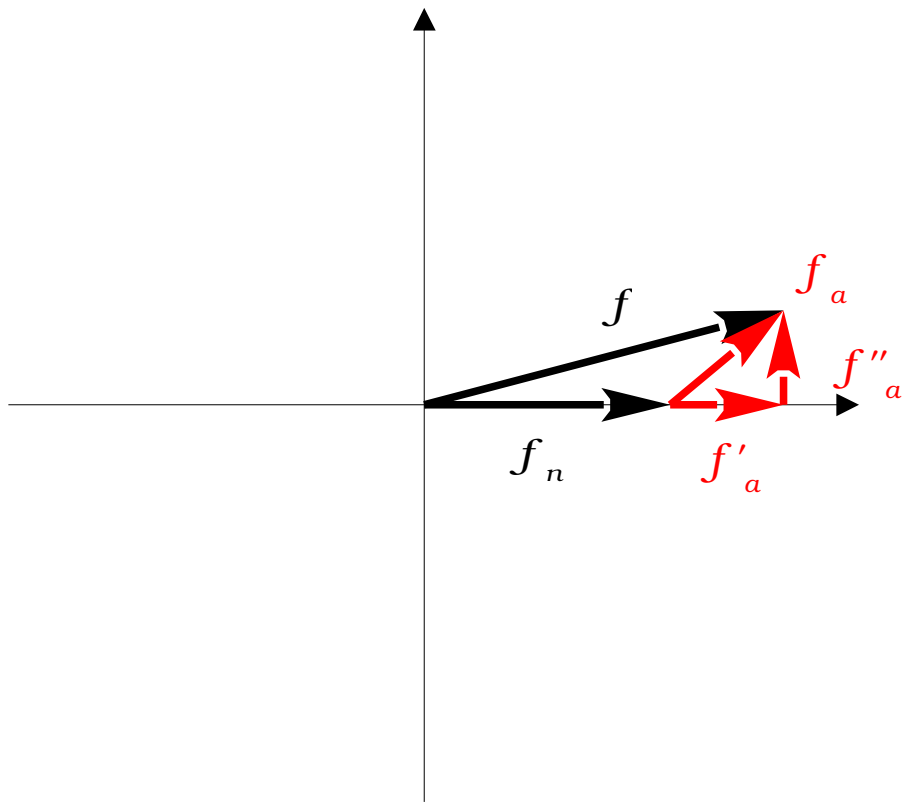


Friedelio dėsnis (Friedel's law)

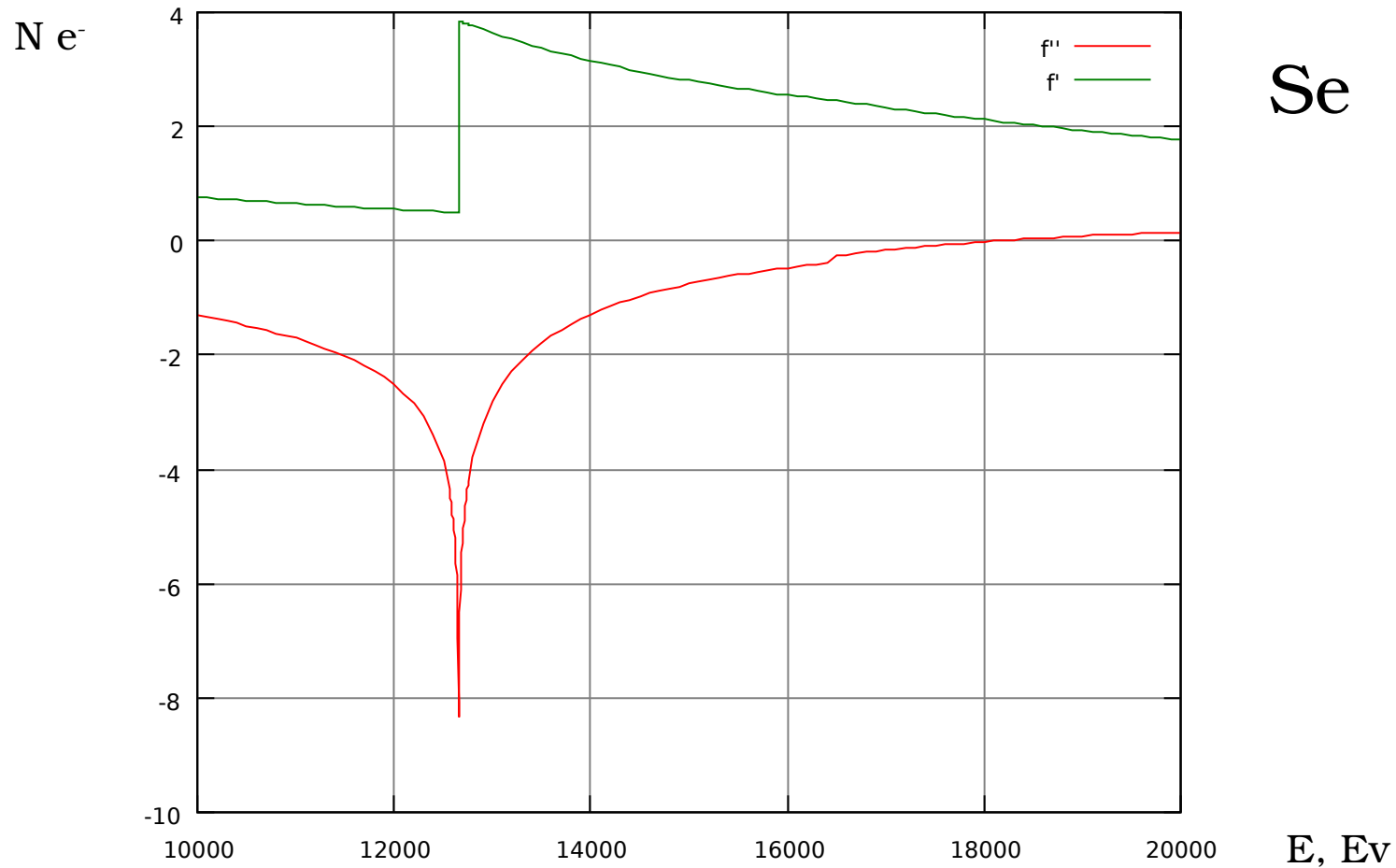


Atspindys su sklaidymo vektoriumi $-\mathbf{S}$ turi tą pačią amplitudę, bet priešingo ženklo fazę.

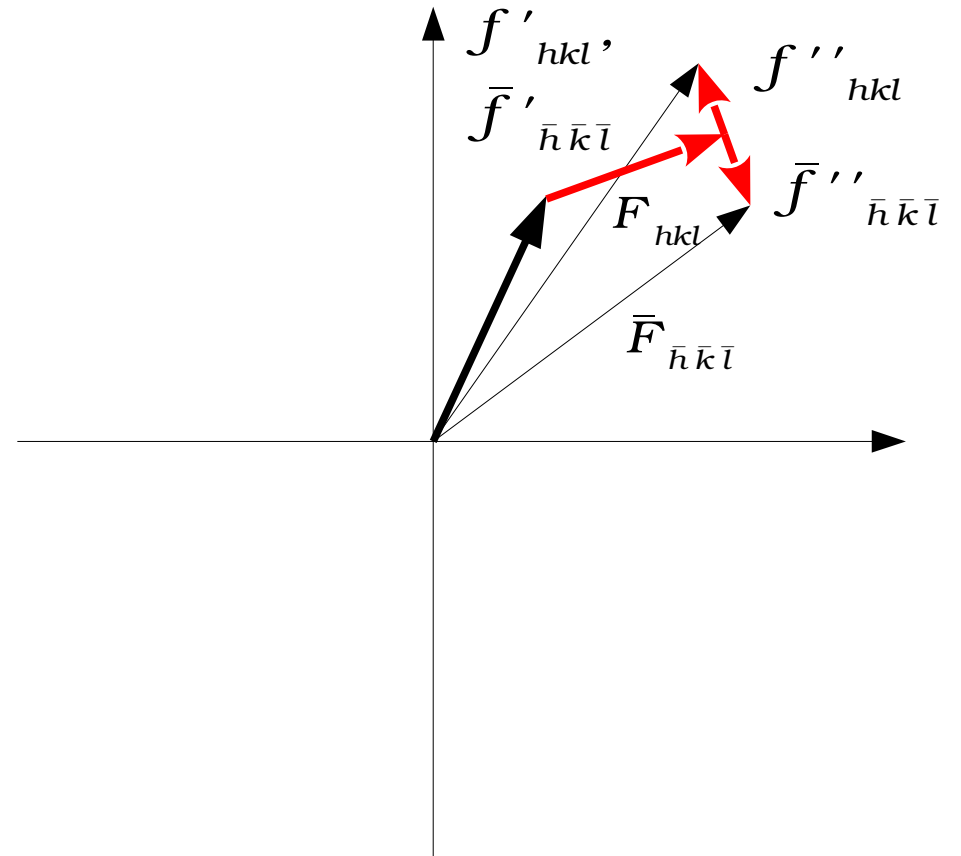
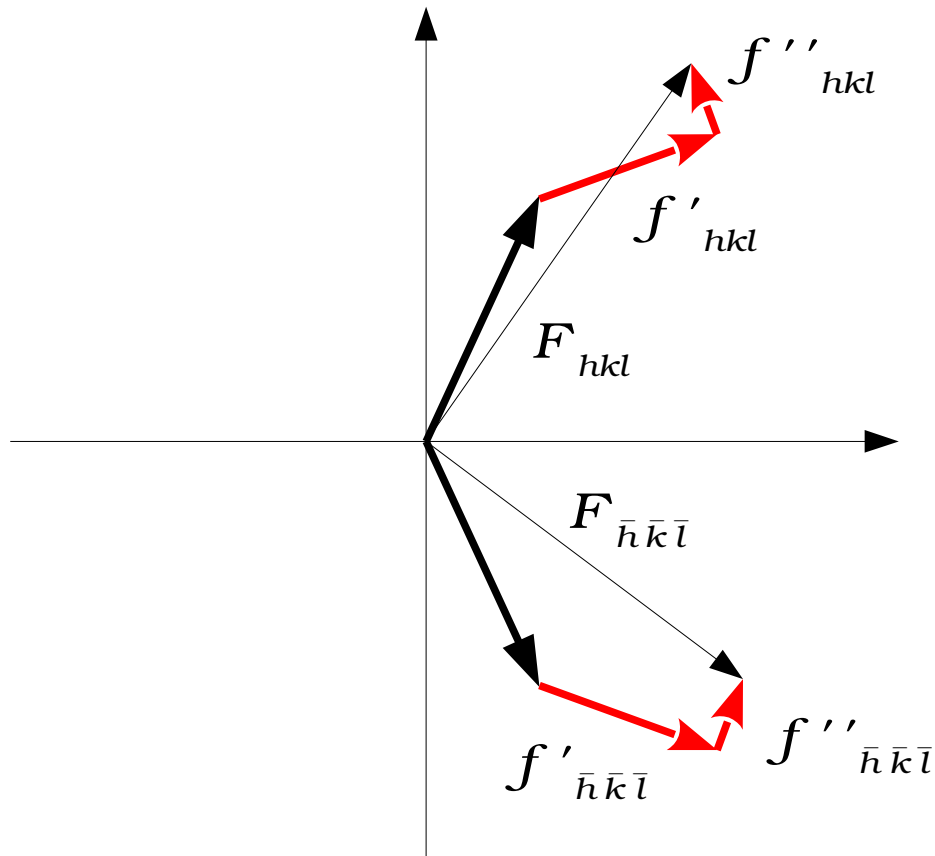
Anomalous scattering



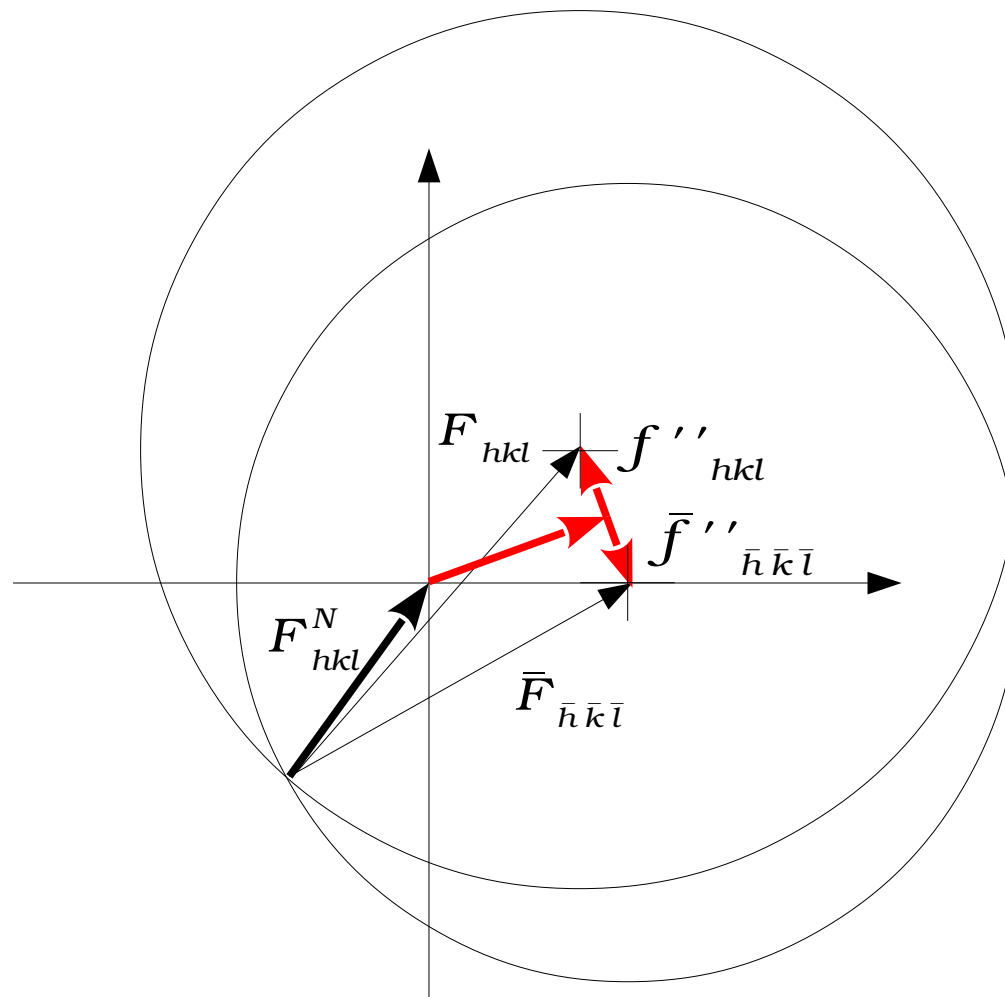
Anomalous signal priklausomybė nuo bangos energijos



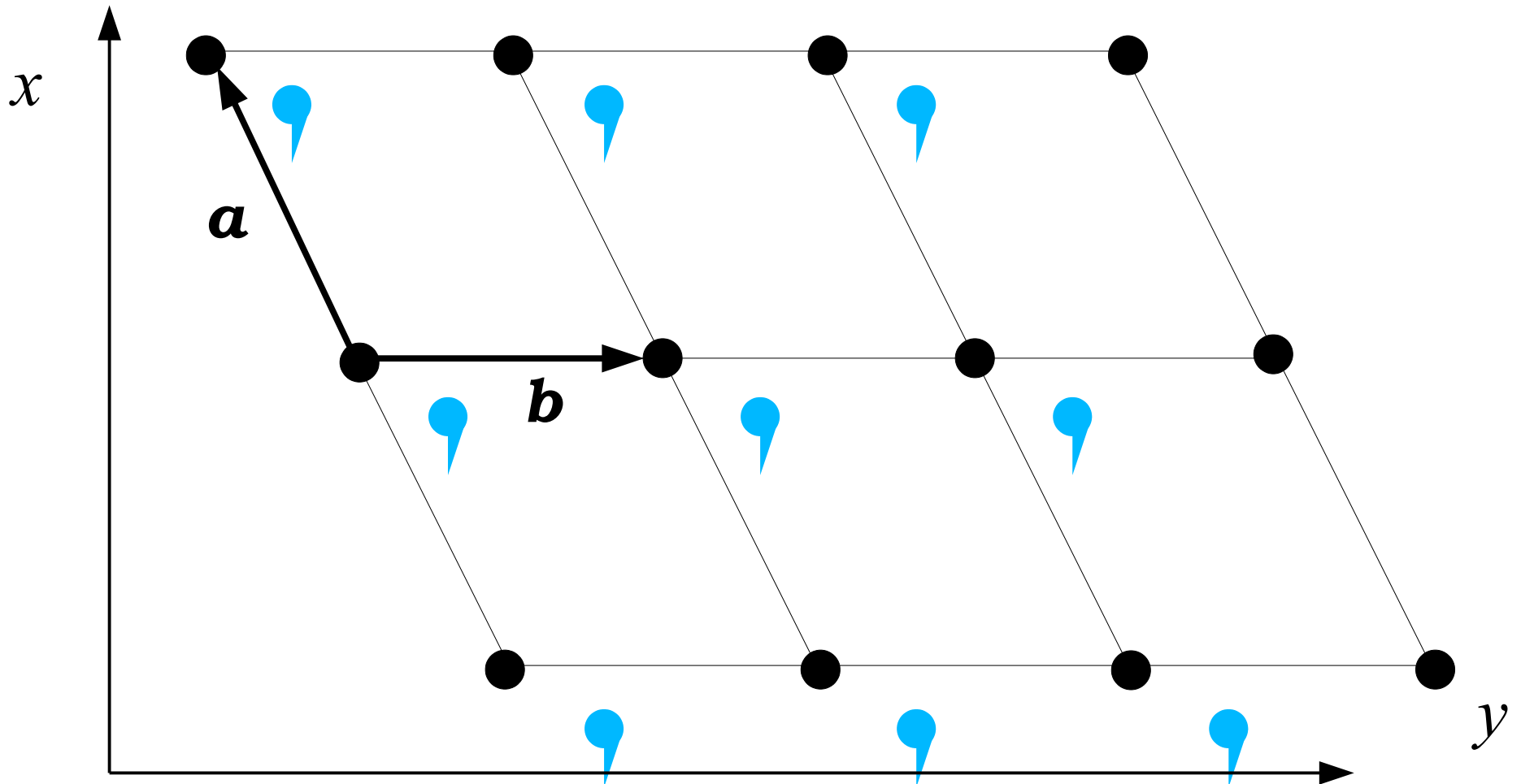
Anomalūs skirtumai



Fazių apskaičiavimas (SAD, MAD)

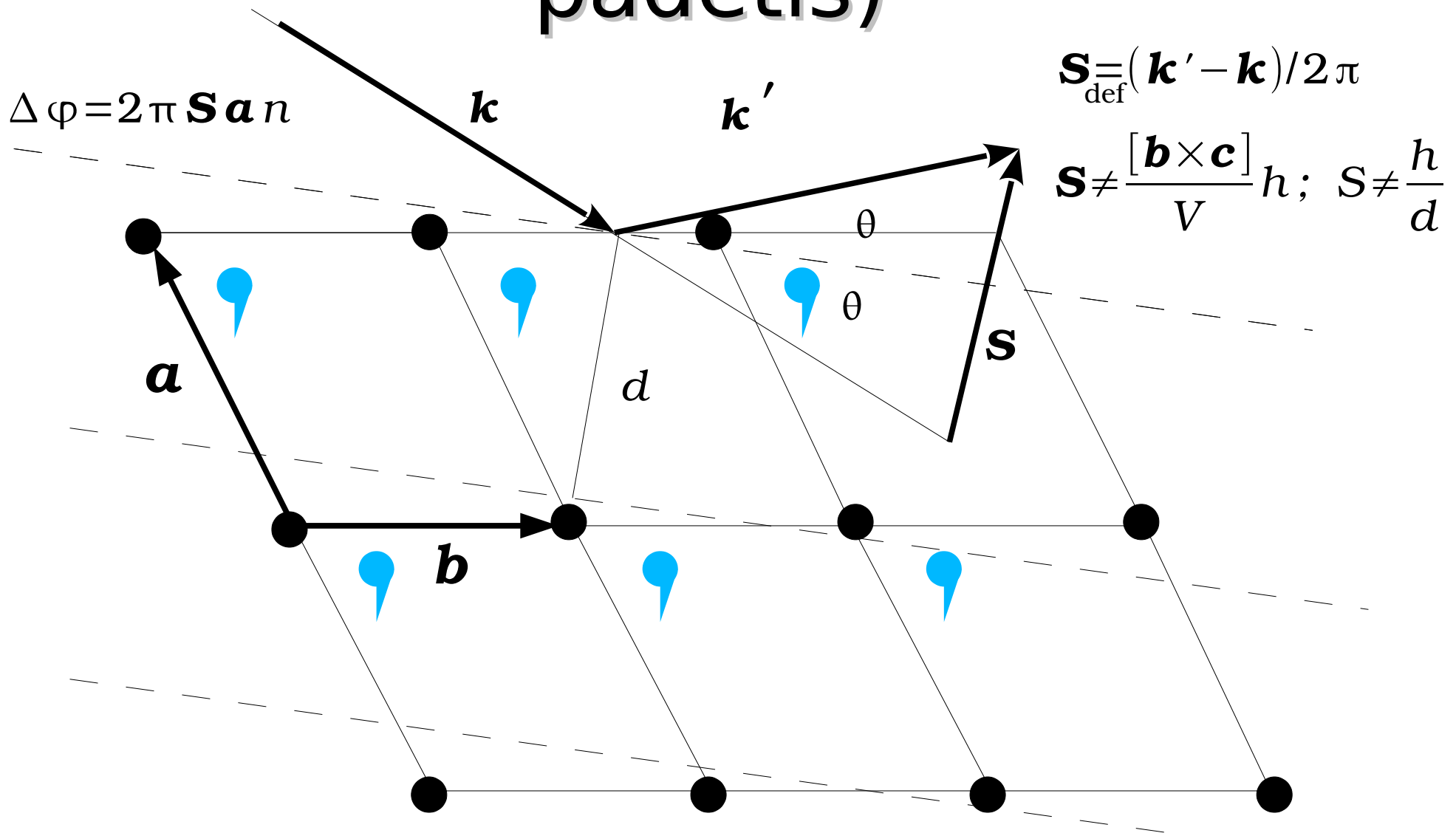


Kristalai



Kristalas yra periodinis molekulių masyvas; jo gardelę galime aprašyti **trimis gardelės vektoriais a , b ir c .**

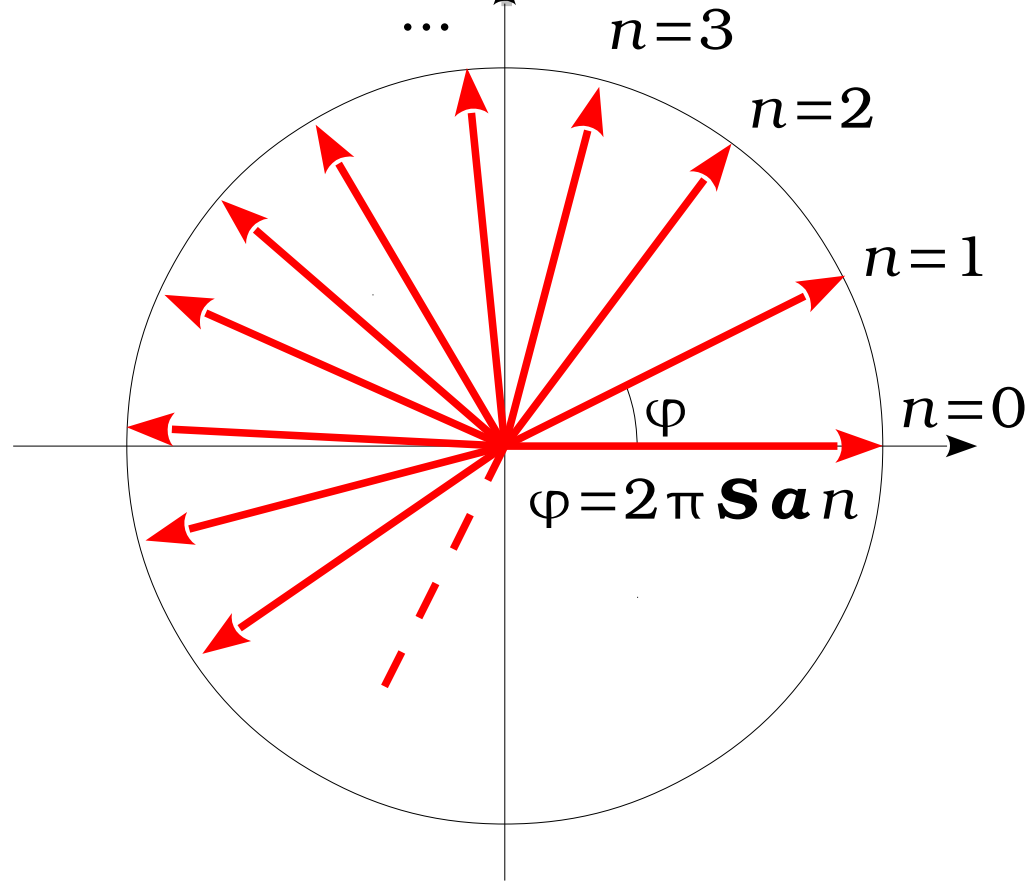
Atspindys nuo kristalo (bedroji padėtis)



Bendru atveju, kiekvienam kristalo atomui galime surasti atomą, sklaidantį su **priešinga faze**.

Atspindžiai nuo bendros padėties plokštumų

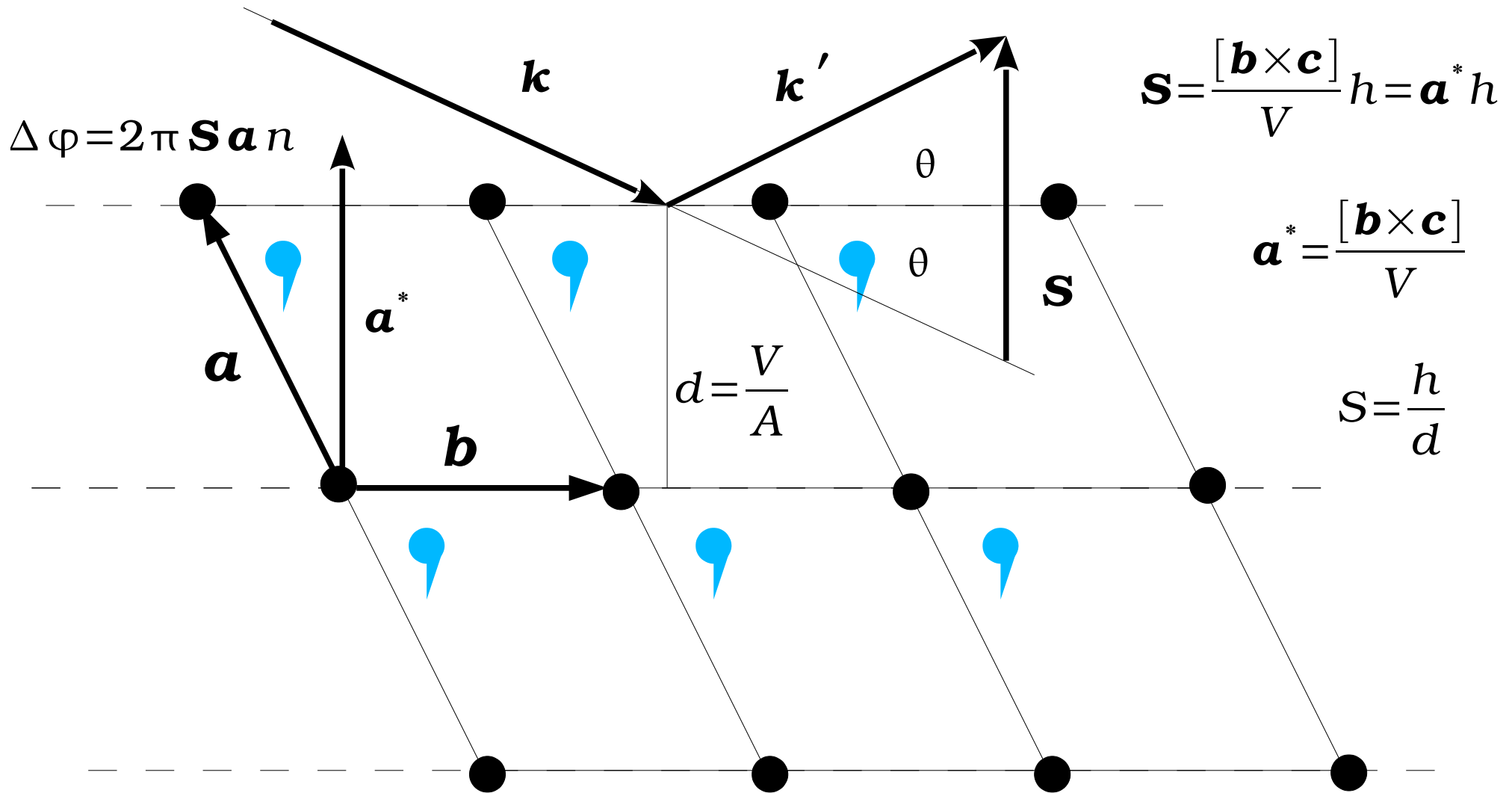
$\mathbf{S} \mathbf{a} \notin \mathbb{Z}$



Bangos nuo pasvirusių plokštumų bendroje sumoje duoda nulį.

(Pritaikyta iš: J. Drenth, “Principles of Protein X-ray Crystallography”)

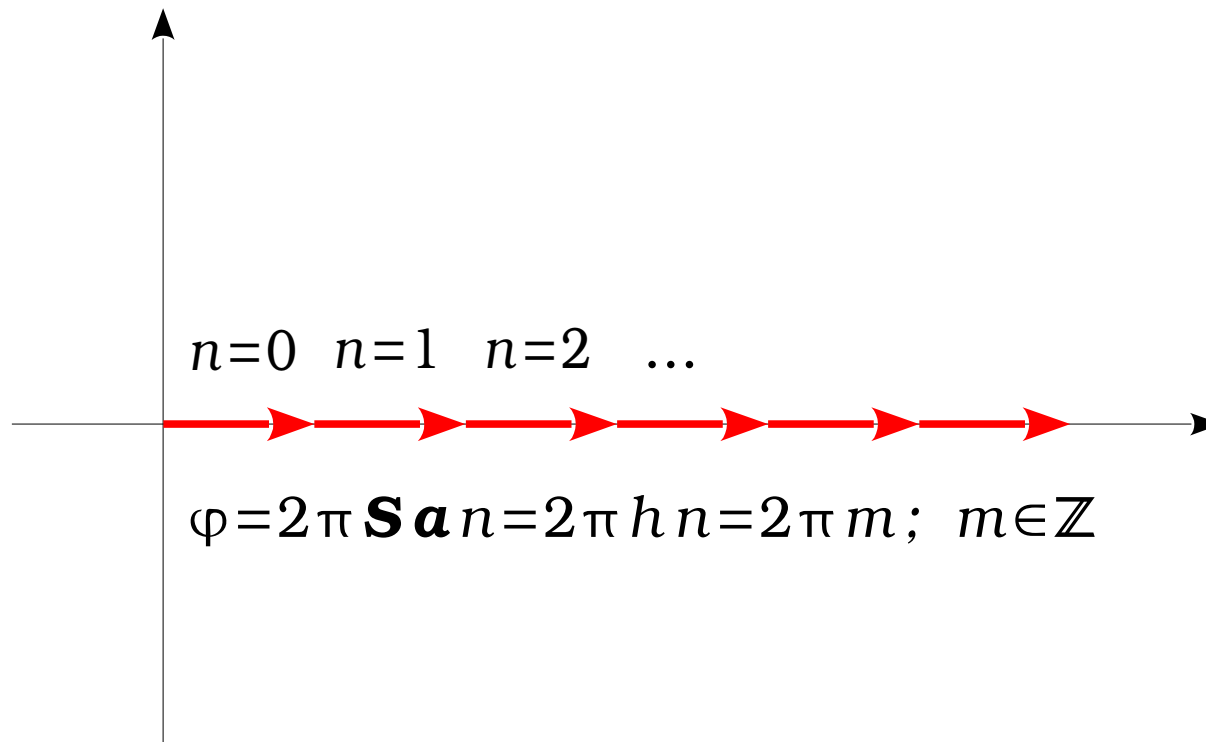
Atspindžiai nuo kristalo



Kai gardelės plokštumos sutampa su „atspindinčia plokštuma“, visos bangos sumuojasi su ta pačia faze.

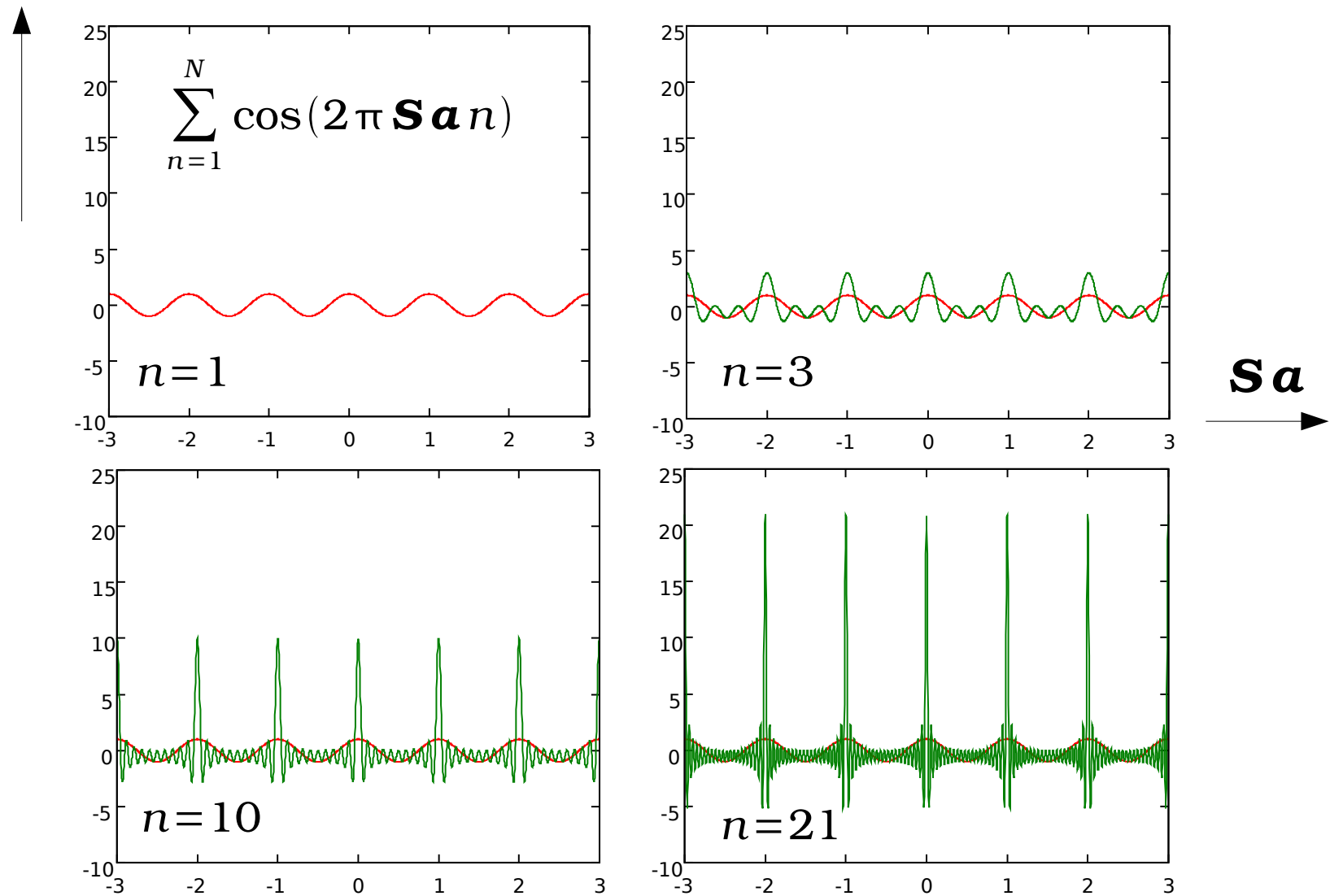
Atspindžiai nuo kristalo plokštumos

$$\mathbf{S}\mathbf{a}=h; h\in\mathbb{Z}$$



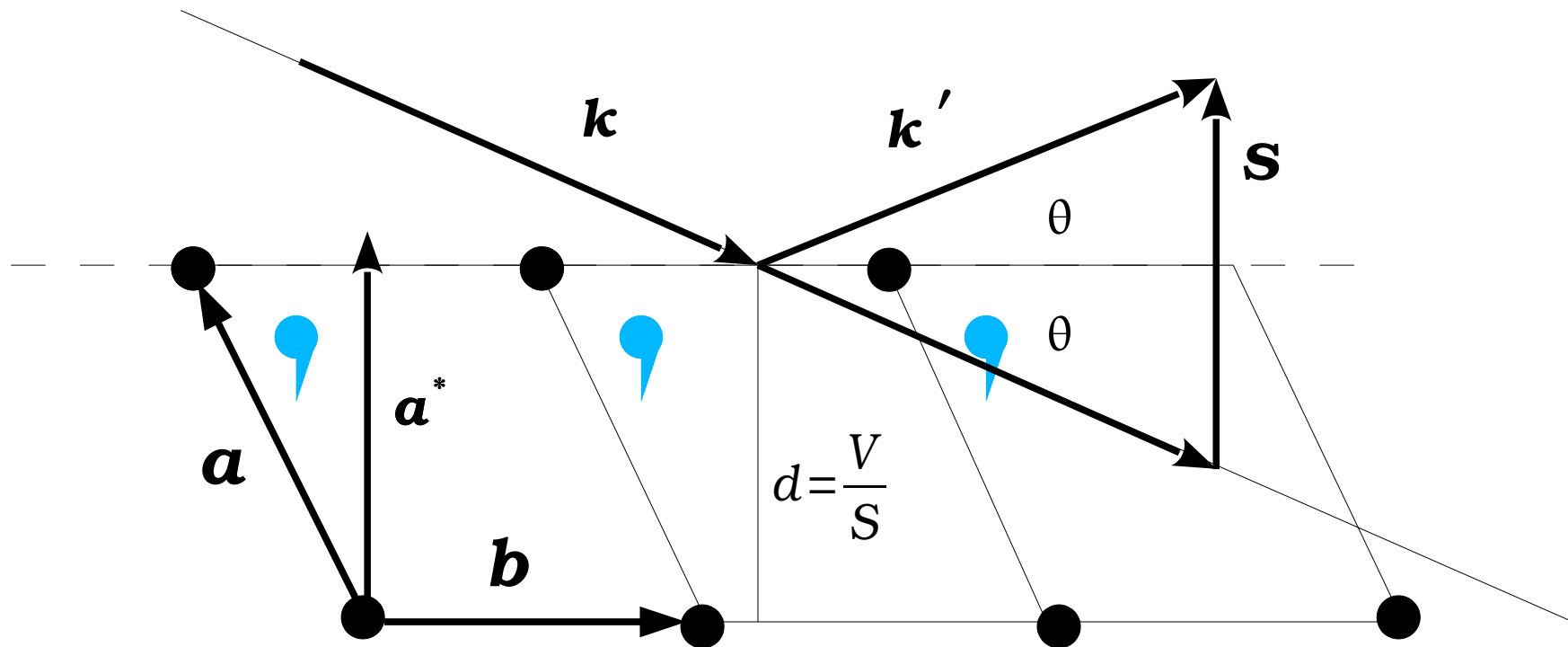
Waves from such the in-phase scattering atoms add up to give an appreciable amplitude.

Harmoninių bangų sudėtis



Bangos sumuojasi ir duoda pastebimą intensyvumą tik tada, kai **Sa** yra sveikas skaičius.

Atspindžiai nuo kristalo



1) Lauės sąlygos
(Laue conditions) :

$$\mathbf{S}\mathbf{a}=h; \mathbf{S}\mathbf{b}=k; \mathbf{S}\mathbf{c}=l$$

$$\mathbf{S}=h\mathbf{a}^*+k\mathbf{b}^*+l\mathbf{c}^*$$

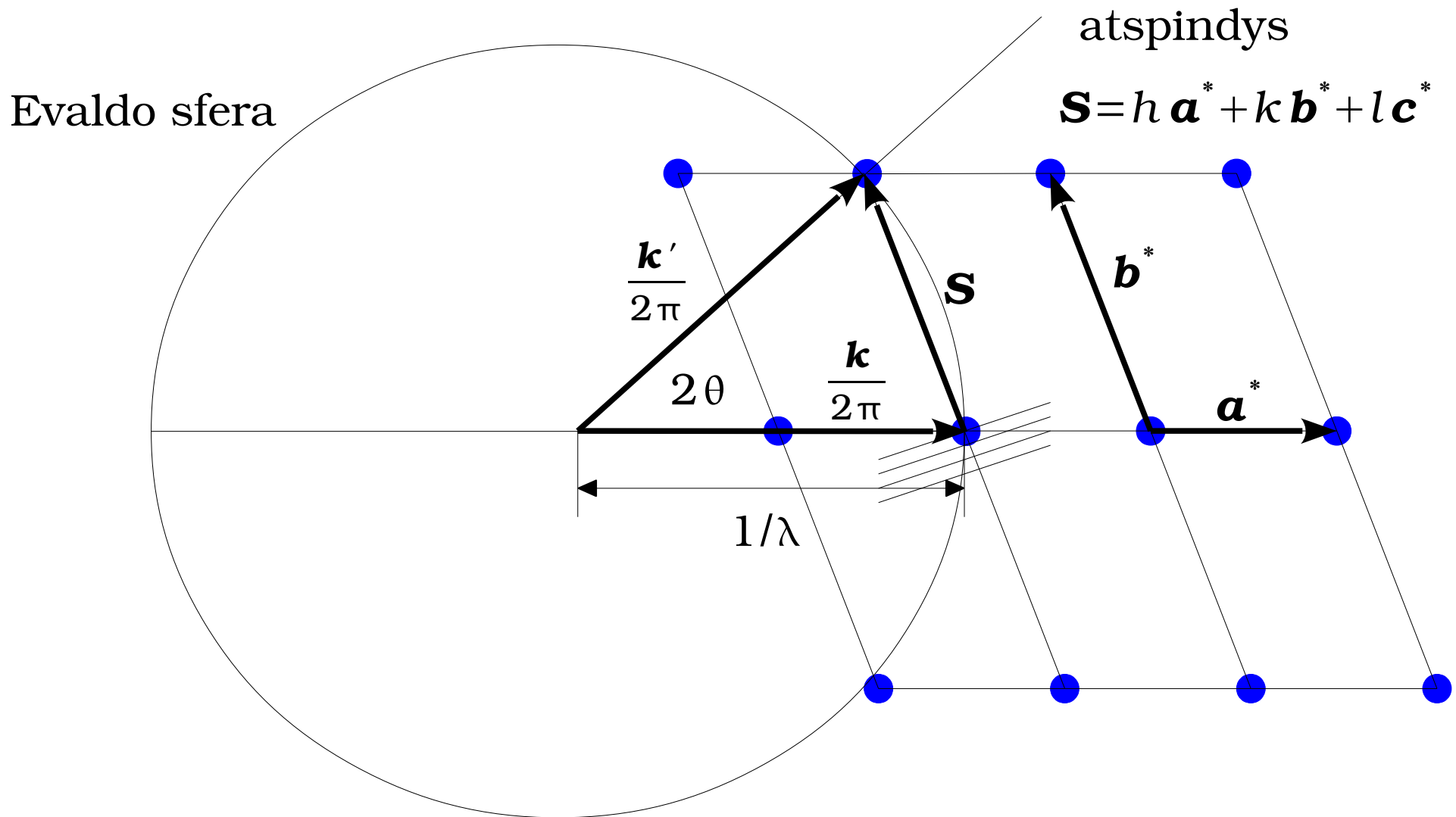
2) Brego dėsnis
(Bragg's law):

$$|\mathbf{S}|d=n=d\frac{2\sin\theta}{\lambda} \quad (n \in N_0)$$

$$\mathbf{S}=(\mathbf{k}'-\mathbf{k})/2\pi$$

Kad Rentgeno spindulys atspindėtų nuo kristalo, pasirinktam Brego atspindžiui turi būti patenkintos Lauės sąlygos.

Evaldo (Ewald) konstrukcija



Atspindžiai nuo kristalo stebimi tada, kai atvirkštinės gardelės mazgas patenka ant Evaldo sferos