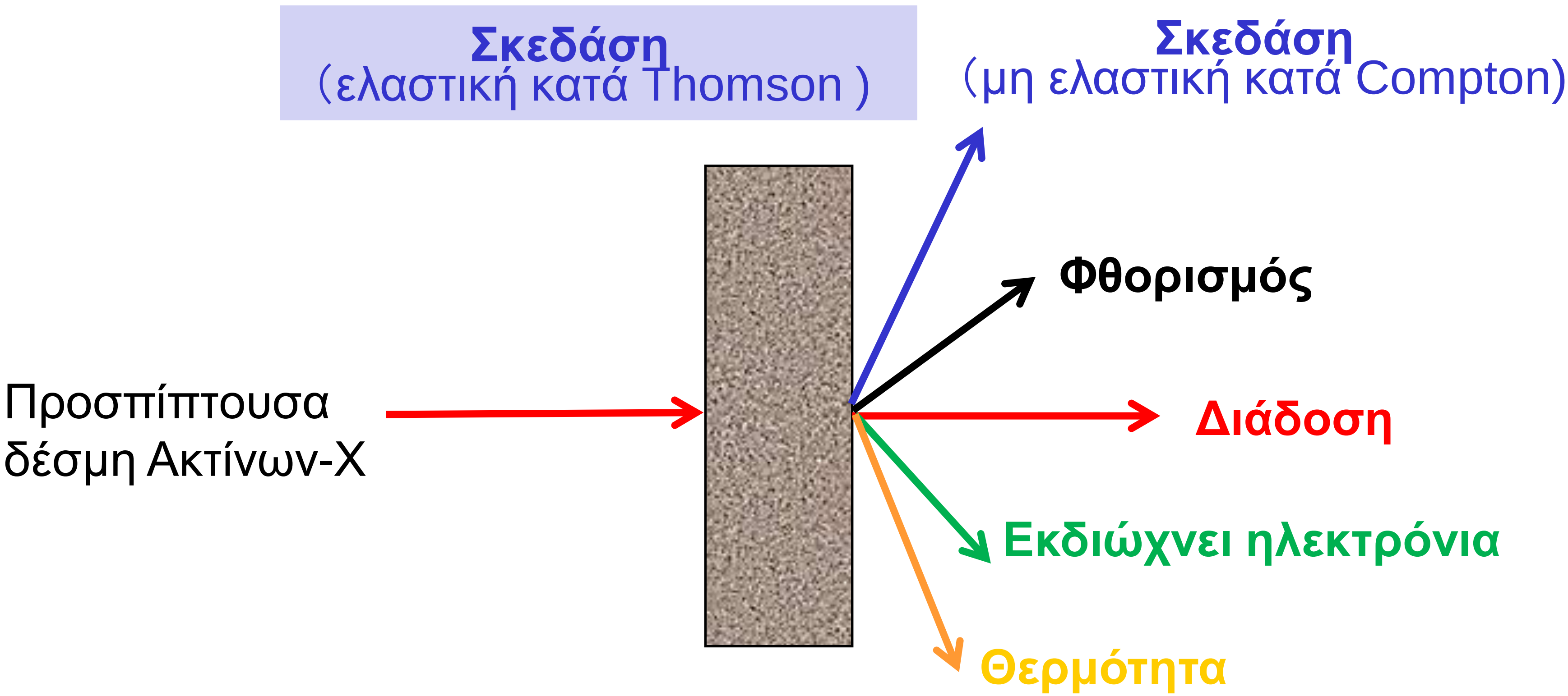
Σκέδαση από ένα ηλεκτρόνιο

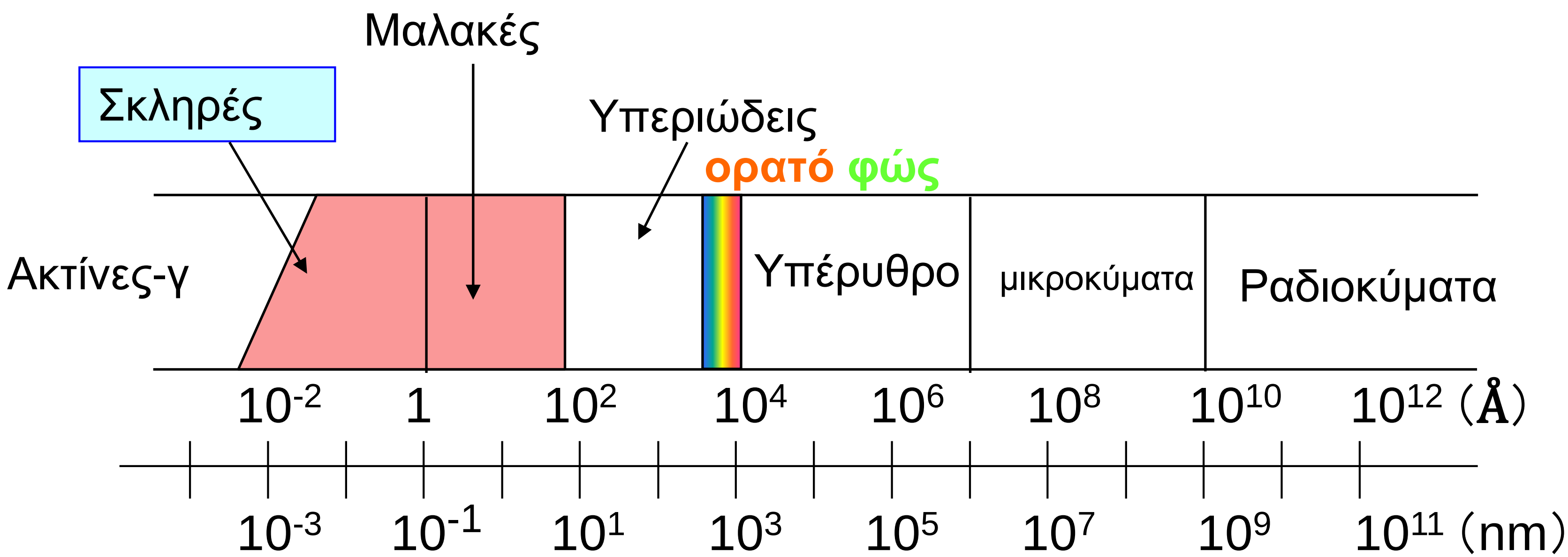
Αλληλεπίδαση Ακτίνων-Χ με την ύλη

- Κατά τη διάδοση των ακτίνων διαμέσου της ύλης συμβαίνουν τα παρακάτω φαινόμενα:

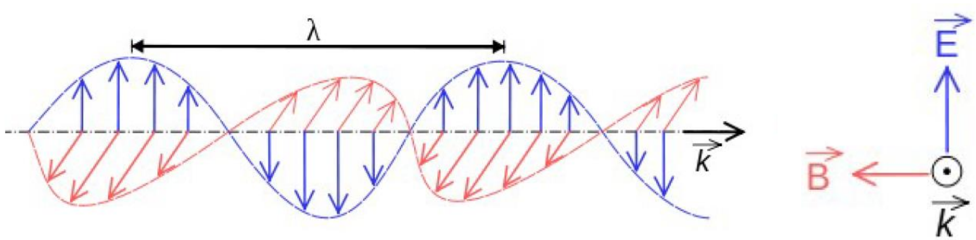


Η ελαστική σκέδαση κατά Thomson συνεισφέρει στην περίθλαση των ακτίνων-Χ

Ακτίνες-X: ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία με μικρό μήκος κύματος



Ηλεκτρομαγνητικό κύμα

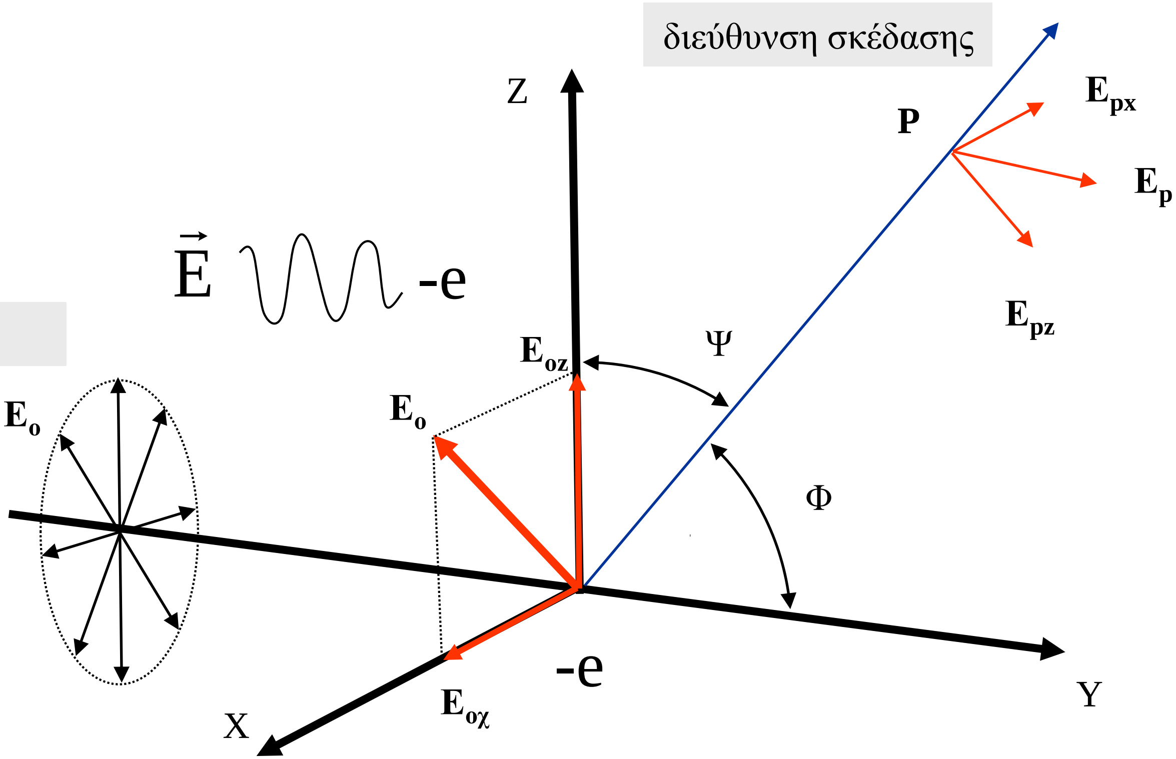


(PDF) Inherent Energy Loss of the Thomson Scattering, **Herbert Weidner, 2013**

Η ένταση της μαγνητικά σκεδαζόμενης ακτινοβολίας είναι 10^{-6} μικρότερη από αυτή που προέρχεται από τη σκέδαση του ηλεκτρικού πεδίου

Brückel, T. Scattering techniques II: Magnetic x-ray scattering Schriften des Forschungszentrum Jülich, Materie und Material 26 (2005), B5.1 - B5-34

Σκέδαση Thomson



$$\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m_e} = -\frac{e}{m_e}\vec{E}$$

$$a_x = -\frac{e}{m_e}E_{ox}$$

$$E_{px} = \frac{a_x e}{rc^2} = -\frac{e^2}{rm_e c^2}E_{ox}$$

$$a_z = -\frac{e}{m_e}E_{oz}$$

$$E_{pz} = \frac{a_z e}{rc^2} = -\frac{e^2}{rm_e c^2}E_{oz}\sin\psi = -\frac{e^2}{rm_e c^2}E_{oz}\cos\Phi$$

$$I_e = \frac{c}{4\pi} E^2$$

$$E^2 = E_{px}^2 + E_{pz}^2 = \frac{e^4}{r^2 m^2 c^4}(E_{ox}^2 + E_{oz}^2 \cos^2\Phi)$$

I: ένταση ακτινοβολίας

E: ένταση ηλεκτρικού πεδίου

Για μη πολωμένη δέσμη:

$$I_e = \frac{c}{4\pi}\left\langle E^2 \right\rangle$$

$$\left\langle E_{ox}^2 \right\rangle = \left\langle E_{oz}^2 \right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle E_o^2 \right\rangle$$

$$I_e = I_o \frac{e^4}{r^2 m_e^2 c^4} \underbrace{\left(\frac{1+\cos^2\Phi}{2}\right)}_{\text{παράγοντας πόλωσης}}$$

$$\frac{e^4}{m_e^2 c^4} = 7.94x10^{-26} cm^2$$

Ενεργός διατομή του ηλεκτρονίου

Σκέδαση από ηλεκτρόνια: $m_p/m_e = (1836)$

Σκέδαση από ένα άτομο

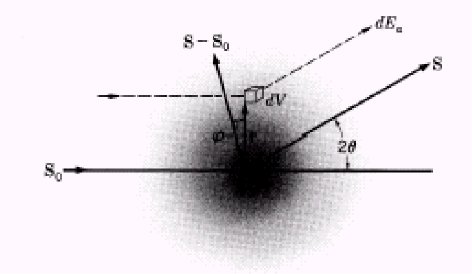
ΣΚΕΔΑΣΗ ΑΠΟ ΑΤΟΜΟ

Ο ατομικός παράγοντας σκέδασης f εκφράζει το λόγο του σκεδαζόμενου πλάτους από ένα άτομο E_α ως προς αυτό που σκεδάζεται από ένα μεμονωμένο ηλεκτρόνιο E_e, **κάτω από τις ίδιες συνθήκες**

$$f = \frac{E_a}{E_e}$$

Από ένα φορτίο dq που καταλαμβάνει όγκο dv

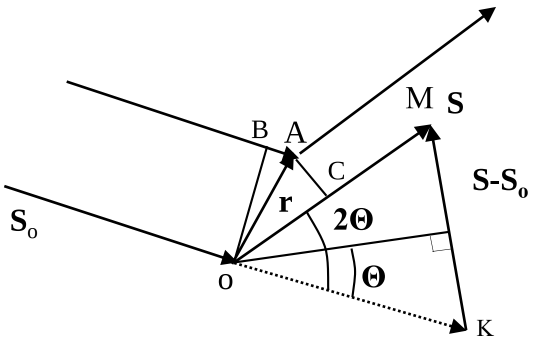
$$df = \frac{dE_a}{E_e} = \frac{dq}{e} = \frac{\rho dV}{e}$$



Όταν θέλουμε να αθροίσουμε τη συνεισφορά κάθε στοιχειώδους φορτίου **dq** που συνθέτει το ηλεκτρονικό νέφος πρέπει να λάβουμε υπόψη τη θέση κάθε στοιχειώδους όγκου **dv** μέσα στο άτομο,

διαστάσεις (;)

Σε όλες τις περιπτώσεις σκέδασης που εξετάζουμε στη συνέχεια θεωρούμε ότι οι ακτίνες-Χ που συνθέτουν την προσπίπτουσα δέσμη αποτελείται από παράλληλες ακτίνες που διαδίδονται εν φάση.



Διαφορά διαδρομής

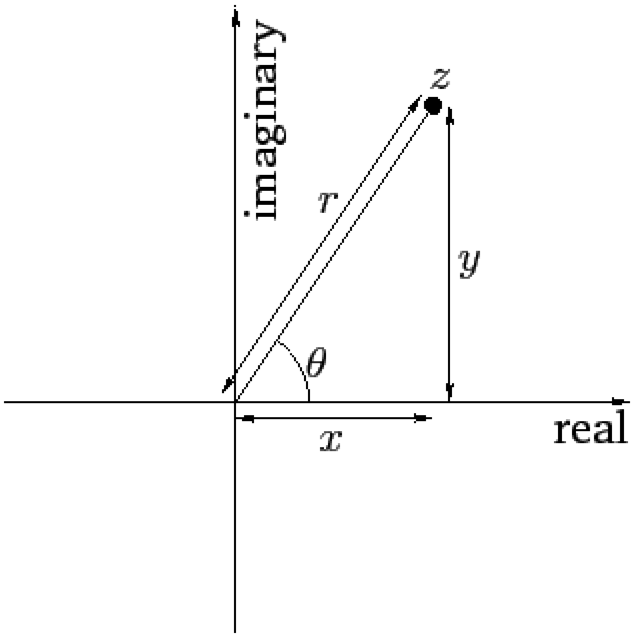
(OC)-(AB)= $\mathbf{S}\cdot\mathbf{r} - \mathbf{S_o}\cdot\mathbf{r} = (\mathbf{S}-\mathbf{S_o})\cdot\mathbf{r}$

Διαφορά φάσης

$(2\pi/\lambda)\,(\mathbf{S}-\mathbf{S_o})\cdot\mathbf{r}$

$|(\mathbf{S}-\mathbf{S_o})|$ ισούται με ΚΜ= $|(\mathbf{S}-\mathbf{S_o})|$ = =2x|ΚΛ|=2sinΘ

$$df = \frac{\rho(r)}{e}\, e^{(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}-\mathbf{S}_0)\cdot\mathbf{r}}\, dV$$



$$z = x + iy$$

$$z^* = x - iy$$

$$z = r\cos\theta + i\, r\sin\theta$$

$$|z| = \sqrt{x^2 + y^2 = r}$$

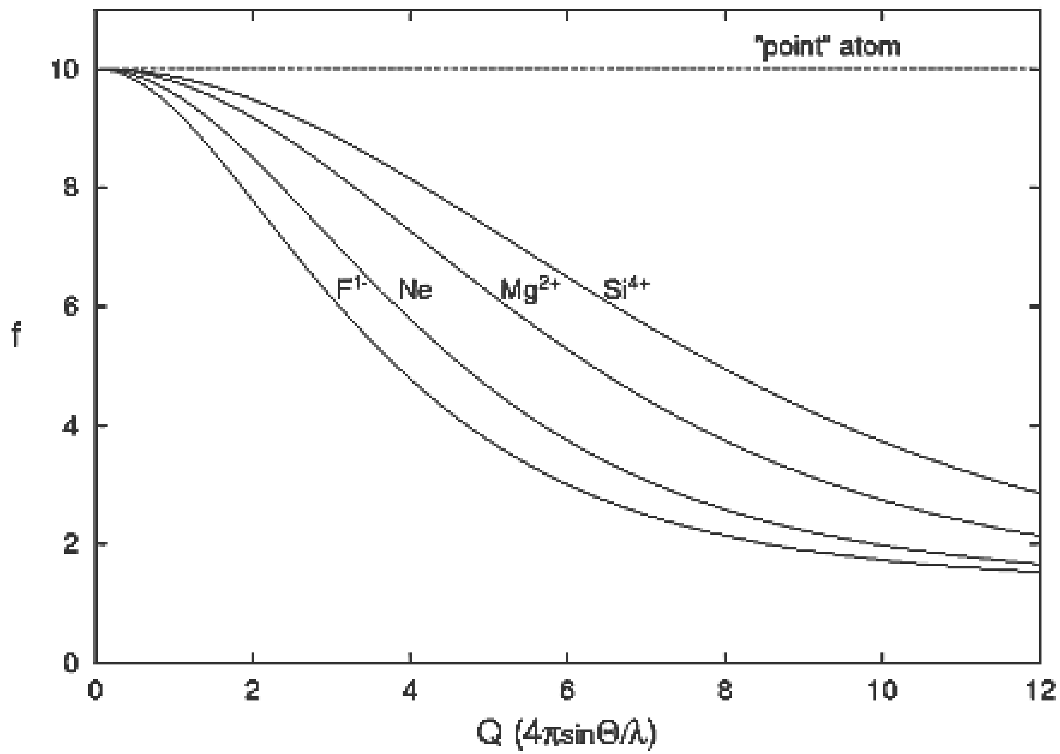
$$|z|^2 = z\, z^* = x^2 + y^2$$

$$z = r(\cos\theta + i\sin\theta)$$

Σχέση Euler: $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$

$$z = r\, e^{i\theta}$$

$$f = \frac{4\pi}{e} \int_0^\infty r^2 \rho(r) \frac{\sin kr}{kr}\, dr$$



Ατομικοί παράγοντες σκέδασης από τρία ιόντα που έχουν συνολικό αριθμό 10 ηλεκτρονίων παρουσιάζονται μαζί με αυτόν του στοιχείου Ne (Z=10) και ενός σημειακού φορτίου με φορτίο 10. Στους υπολογισμούς έχουν χρησιμοποιηθεί οι συναρτήσεις των ατομικών τροχιακών για τα συγκεκριμένα άτομα.

Σκέδαση από κρύσταλλο

ΣΚΕΔΑΣΗ ΑΚΤΙΝΩΝ-Χ ΑΠΟ ΙΔΑΝΙΚΟΥΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΟΥΣ

Μοναδιαία κυψελίδα:

$$\mathbf{r} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c}$$

x, y, z πραγματικοί αριθμοί από το διάστημα βρίσκονται στο διάστημα [0,1].

Πλέγμα χώρου:

$$m_1\,\mathbf{a} + m_2\,\mathbf{b} + m_3\,\mathbf{c}$$

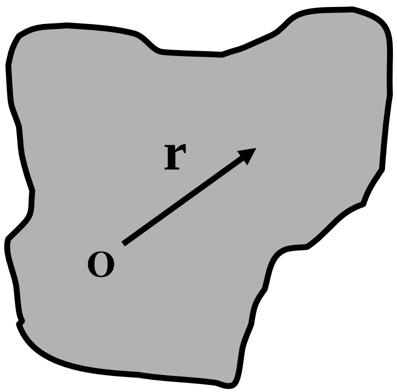
m_1, m_2, m_3 ακέραιοι αριθμοί

Πλεγματικό επίπεδο :

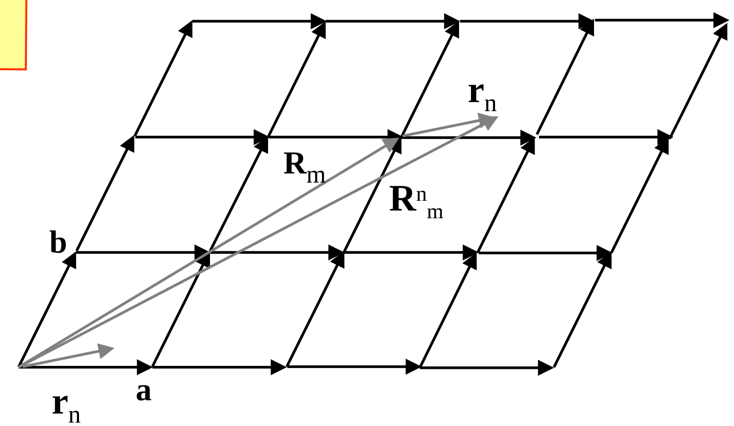
ένα επίπεδο που ορίζεται από τρία μη συγκραμμικά πλεγματικά σημεία.

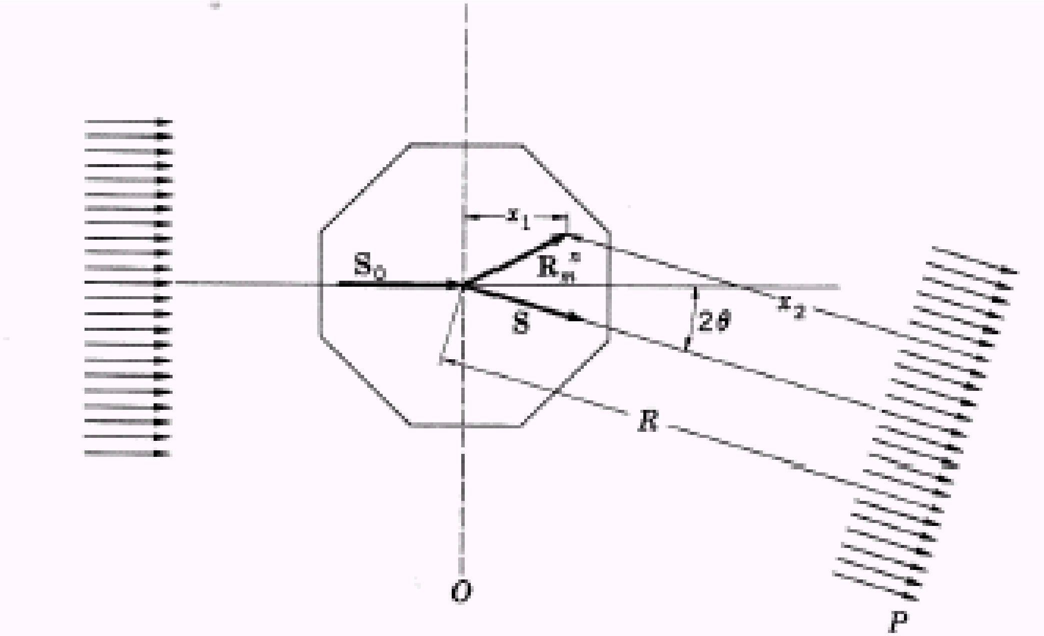
Κρύσταλλος=Περιοδικότητα

$$\mathbf{r} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c}$$



$$\mathbf{R}^n_m = \mathbf{R}_m + \mathbf{r}_n = m_1\,\mathbf{a} + m_2\,\mathbf{b} + m_3\,\mathbf{c} + \mathbf{r}_n$$





$\mathbf{R}^{n}{}_{m} = \mathbf{R}_{m} + \mathbf{r}_{n} = m_1\,\mathbf{a} + m_2\,\mathbf{b} + m_3\,\mathbf{c} + \mathbf{r}_{n}$

$(2\pi/\lambda)\,(\mathbf{S}\text{-}\mathbf{S}_{\mathbf{o}})\cdot\mathbf{R}^{n}{}_{m}$

Για να βρούμε το συνολικό πλάτος πστο σημείο P θα πρέπει να αθροίσουμε όλα τα πλάτη $\boldsymbol{\varepsilon}_{p,n}$ που φθάνουν σε αυτό το σημείο

$$\varepsilon_{p,n} = E_e\, f_n exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S}\text{-}\boldsymbol{S}_o)\cdot \mathbf{R}^{n}{}_{m} - i\omega t)]$$

$$\varepsilon_{p,n} = E_e f_n exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S}\text{-}\boldsymbol{S}_o)\cdot (m_1\,\mathbf{a} + m_2\,\mathbf{b} + m_3\,\mathbf{c} + \mathbf{r}_n) - i\omega t)]$$

$$\varepsilon_p = E_e \textstyle\sum_{n,m1,m2,m3} f_n exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S} - \boldsymbol{S}_o)\cdot (m_1\,\mathbf{a} + m_2\,\mathbf{b} + m_3\,\mathbf{c} + \mathbf{r}_n) - i\omega t)]$$

$$\varepsilon_p = E_e\, exp(-i\omega t) \textstyle\sum_n f_n exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S} - \boldsymbol{S}_o)\cdot \boldsymbol{r}_n\ ]\ \mathrm{X} \displaystyle\sum_{m1} exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S} - \boldsymbol{S}_o)\cdot m_1\,\mathbf{a}]$$

$$\mathrm{X} \sum_{m2} exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S} - \boldsymbol{S}_o)\cdot \mathrm{m2}\ \boldsymbol{b}]\ \ \mathrm{X} \sum_{m3} exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S} - \boldsymbol{S}_o)\cdot \mathrm{m3}\ \boldsymbol{c}]$$

$$\varepsilon_p = E_e \sum_{n,m1,m2,m3} f_n exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}_o)\cdot(\mathrm{m}_1\,\mathbf{a}+\mathrm{m}_2\,\mathbf{b}+\mathrm{m}_3\,\mathbf{c}+\mathbf{r}_\mathrm{n}) - i\omega t)]$$

$$\varepsilon_p = E_e\, exp(-i\omega t)\, \Sigma_n f_n\, exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}_o)\cdot \boldsymbol{r}_n\, X$$

$$X\, \Sigma_{m1,m2,m3}\, exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}_o)\cdot(\mathrm{m}_1\,\mathbf{a}+\mathrm{m}_2\mathbf{b}+\mathrm{m}_3\mathbf{c})$$

Παράγοντας δομής: Άθροισμα πάνω σε όλα τα άτομα στην κυψελίδα

$$\varepsilon_p = E_e\; exp(-i\omega t)\; \overbrace{\sum_n f_n exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}_o)\cdot \boldsymbol{r}_n\ ]}^{\boldsymbol{F}}\ \mathrm{X} \sum_{m1} exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}_o)\cdot \mathrm{m}_1\,\mathbf{a}]$$

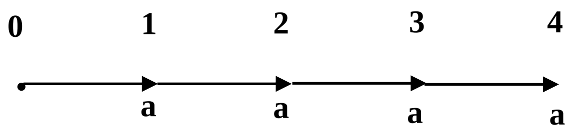
$$\mathrm{X}\ \sum_{m2} exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}_o)\cdot \mathrm{m}_2\,\boldsymbol{b}]\ \mathrm{X}\ \sum_{m3} exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}_o)\cdot \mathrm{m}_3\,\boldsymbol{c}]$$

$$\Sigma_{m1}\ exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}\text{-}\mathbf{S}_o)\cdot(\mathrm{m}_1\ \mathbf{a})]=$$

Υπολογισμός αθροίσματος πάνω σε όλες τις περιόδους π.χ. παράλληλα προς τον άξονα **a**

$$\Sigma_{m1}\ exp[m_1(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}\text{-}\mathbf{S}_o)\cdot \mathbf{a}] =$$

$$\sum_{m1=0}^{M1\text{-}1} \{exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}\text{-}\mathbf{S}_o)\cdot \mathbf{a}]\}^{m_1}$$



M1 τα πλεγματικά σημεία // στον **a**

αν $A=exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}\text{-}\mathbf{S}_o)\cdot \mathbf{a}]$ *τότε κάθε ένα από αυτά τα αθροίσματα είναι άθροισμα όρων γεωμετρικής προόδου*

$$\sum_{m1=0}^{M1\text{-}1} A^{m_1} = 1+A+A^2+\ldots = \frac{A^{\mathrm{M1}}-1}{A-1}$$

$$\sum_{m1=0}^{M1\text{-}1} \{exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}\text{-}\mathbf{S}_o)\cdot \mathbf{a}]\}^{m_1} = \frac{\{exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}-\mathbf{S}_o)\cdot \mathbf{a}]\}^{\mathrm{M1}}-1}{\{exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}-\mathbf{S}_o)\cdot \mathbf{a}]\}-1}$$

Η ίδια σχέση προκύπτει και για τα αθροίσματα παράλληλα προς τον **b** και **c**

$$\varepsilon_p = E_e \; exp(-i\omega t) \quad \overbrace{\textstyle\sum_n f_n exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}-\mathbf{S}_o)\cdot \boldsymbol{r}_n \;]}^{\boldsymbol{F}} \; \mathrm{X} \sum_{m1} exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}-\mathbf{S}_o)\cdot \mathrm{m}_1 \, \mathbf{a}]$$

$$\mathrm{X} \sum_{m2} exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}-\mathbf{S}_o)\cdot \mathrm{m2}\, \boldsymbol{b}] \;\; \mathrm{X} \;\; \sum_{m3} exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}-\mathbf{S}_o)\cdot \mathrm{m3}\, \boldsymbol{c}]$$

$$\varepsilon_p = E_e \quad exp(-i\omega t) \quad F \;\; X \quad \frac{\{exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}-\mathbf{S}_o)\cdot \mathbf{a}]\}^{\mathrm{M1}}-1}{\{exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}-\mathbf{S}_o)\cdot \mathbf{a}]\}-1}$$

$$X \frac{\{exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}-\mathbf{S}_o)\cdot \boldsymbol{b}]\}^{\mathrm{M1}}-1}{\{exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}-\mathbf{S}_o)\cdot \boldsymbol{b}]\}-1} \qquad X \frac{\{exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}-\mathbf{S}_o)\cdot \boldsymbol{c}]\}^{\mathrm{M1}}-1}{\{exp[(2\pi i/\lambda)(\mathbf{S}-\mathbf{S}_o)\cdot \boldsymbol{c}]\}-1}$$

Η ένταση της ακτινοβολίας υπολογίζεται από τη σχέση:

$$I_P = \left(\frac{c}{4\pi}\right) |\varepsilon_p|^2 = \left(\frac{c}{4\pi}\right) \varepsilon_p \varepsilon_p^{\,*}$$

επειδη ο ε_p *ειναι μιγαδικός αριθμός* $\quad \varepsilon_p|^2 = \varepsilon_p \varepsilon_p^{\,*}$

$$I_P = \left(\frac{c}{4\pi}\right) \varepsilon_p \varepsilon_p^{\,*} \quad = I_e \; exp(-i\omega t) \; exp(i\omega t) \; F \; F^* \;\; X\ldots$$

$$\mathrm{I_e} = \frac{\mathrm{c}}{4\pi} \mathrm{E}_e^{\,2}$$

Το μέτρο κάθε όρου:

$$\frac{\{exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}_o)\cdot \mathbf{a}]\}^{M1}-1}{\{exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}_o)\cdot \mathbf{a}]\}-1}$$

με $(2\pi/\lambda)(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}_o)\cdot\ \boldsymbol{a}=x$

Υπολογίζεται από το γινόμενο κάθε όρου επί το συζυγή μιγαδικό

$$\frac{\exp(iM1x)-1}{\exp(ix)-1}\mathrm{X}\frac{\exp(-iM1x)-1}{\exp(-ix)-1} = \frac{\exp(0)-\exp(iM1x)-\exp(-iM1x)+1}{\exp(0)-\exp(ix)-\exp(-ix)+1}$$

$$\frac{1-\cos(M1x)-isin(M1x)-\cos(M1x)+isin(M1x)+1}{1-\cos(x)-isin(x)-\cos(x)+isin(x)+1}=$$

$$\frac{2-2\cos(M1x)}{2-2\cos(x)}=\frac{2-2\cos(M1x)}{2-2\cos(x)}=\frac{1-\cos(M1x)}{1-\cos(x)}=\frac{Sin^2(\frac{1}{2}M1\chi)}{Sin^2(\frac{1}{2}\chi)}$$

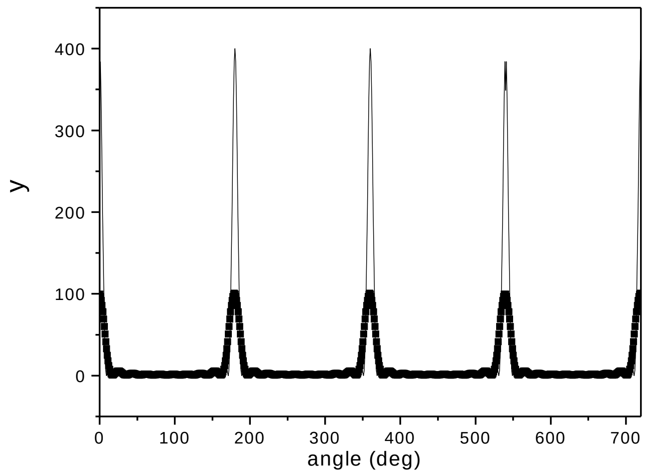
$$=\frac{Sin^2(\frac{\pi}{\lambda}(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}o)\cdot M1\boldsymbol{a})}{Sin^2(\frac{\pi}{\lambda}(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}o)\cdot\boldsymbol{a})}$$

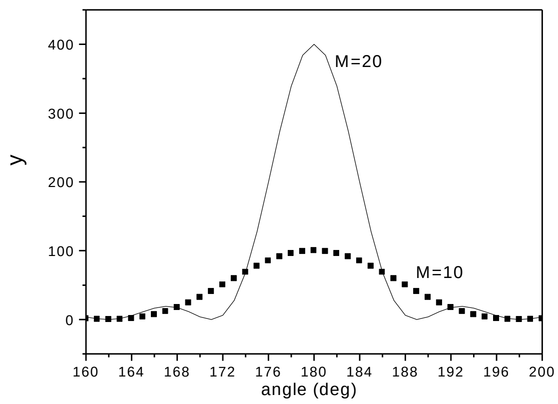
$$I_p = I_e\,|F|^2 \;\mathrm{X}\; \frac{Sin^2(\frac{\pi}{\lambda}(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}o)\cdot M_1\boldsymbol{a})}{Sin^2(\frac{\pi}{\lambda}(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}o)\cdot \boldsymbol{a})} \;\mathrm{X}\; \frac{Sin^2(\frac{\pi}{\lambda}(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}o)\cdot M_2\boldsymbol{b})}{Sin^2(\frac{\pi}{\lambda}(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}o)\cdot \boldsymbol{b})}$$

$$\mathrm{X}\; \frac{Sin^2(\frac{\pi}{\lambda}(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}o)\cdot M_3\boldsymbol{c})}{Sin^2(\frac{\pi}{\lambda}(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}o)\cdot \boldsymbol{c})}$$

$$(\pi/\lambda)(\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}_o)\cdot \boldsymbol{a}=\psi$$

$$\mathbf{y}=(\sin^2 M\psi)/\sin^2\psi$$





Για ψ=nπ παίρνει την τιμή M^2 και είναι πρακτικά 0 σε οποιοδήποτε άλλο σημείο

(S-So)•a=hλ **(S-So)•b=kλ** **(S-So)•c=lλ**

Εξισώσεις Laue

$(\mathbf{S}-\mathbf{So})\bullet\mathbf{a}=h\lambda$ $(\mathbf{S}-\mathbf{So})\bullet\mathbf{b}=k\lambda$ $(\mathbf{S}-\mathbf{So})\bullet\mathbf{c}=l\lambda$

το διάνυσμα $(\mathbf{S}-\mathbf{S}o)/\lambda$

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

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

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

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

$\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$, $\mathbf{c}^*$ αποτελούν βάση ενός διανυσματικού χώρου

Κάθε διάνυσμα $\mathbf{r}^*=h\mathbf{a}^*+k\mathbf{b}^*+l\mathbf{c}^*$ για το οποίο τα $\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$, $\mathbf{c}^*$ επαληθεύουν τις παραπάνω σχέσεις ικανοποιεί τις σχέση Laue

το **σύνολο των σημείων** που προκύπτει από όλους τους γραμμικούς συνδιασμούς αυτών των διανυσμάτων με τους ακέραιους **h, k, l** αποτελεί το **αντίστροφο πλέγμα**

Η ένταση επομένως θα παίρνει υψηλές τιμές μόνο γύρω από τα σημεία **(h,k,l)** ή **κόμβους** του **αντιστρόφου πλέγματος**

το διάνυσμα (**S**-**S**o)/λ γράφεται

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

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

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

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

$$F = \sum_n f_n exp[(2\pi i/\lambda)(\boldsymbol{S} - \boldsymbol{S}_o) \cdot \boldsymbol{r}_n]$$

$$\mathbf{r}^* \cdot \boldsymbol{r}_n = (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) \cdot (x_n\, \mathbf{a} + y_n \mathbf{b} + z_n\, \mathbf{c})$$

$$\mathbf{r}^* \cdot \boldsymbol{r}_n = h\, x_n + k y_n + l\, z_n$$

$$F = \sum_n f_n exp[(2\pi i/\lambda)(h\, xn + ky_n + l\, zn)]$$

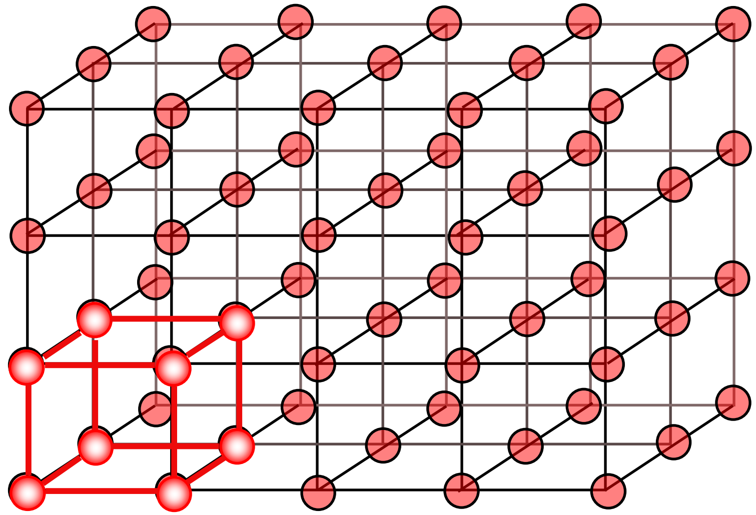
$$F \Leftrightarrow F_{hkl}$$

$$I_{hkl} = I_e\, |F|^2{}_{hkl} M^2$$

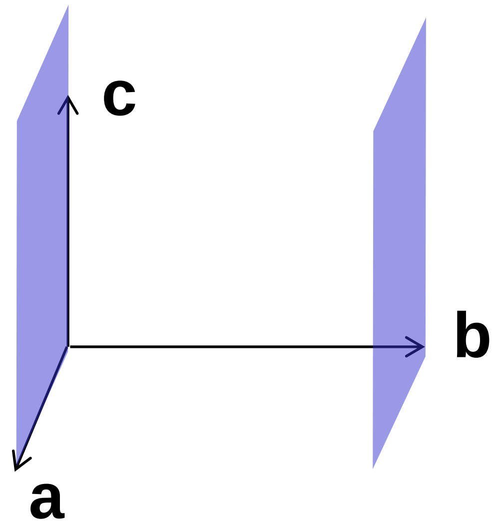
$$R_{hkl} = \frac{\lambda^3 e^4}{m^2 c^4} \frac{1}{V_{cell}^2} \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2\sin 2\theta} |F_{hkl}|^2 \Delta V$$

Ολοκληρωμένη ένταση

Μοναδιαία κυψελίδα



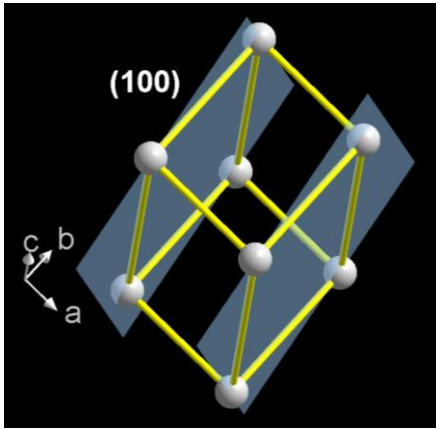
Πλεγματικό επίπεδο : ένα επίπεδο που ορίζεται από τρία μη συγγραμμικά πλεγματικά σημεία.

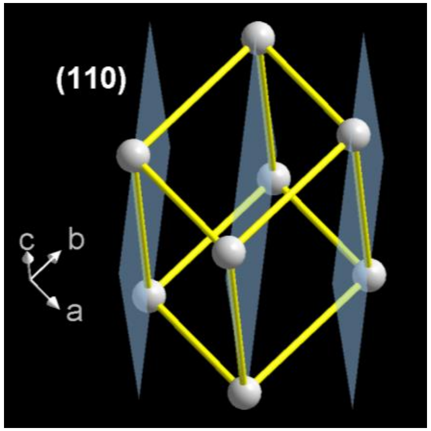


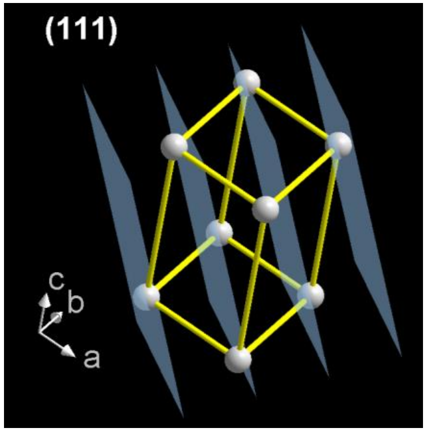
Επίπεδο με δείκτες Miller h,k,l: (h k l)

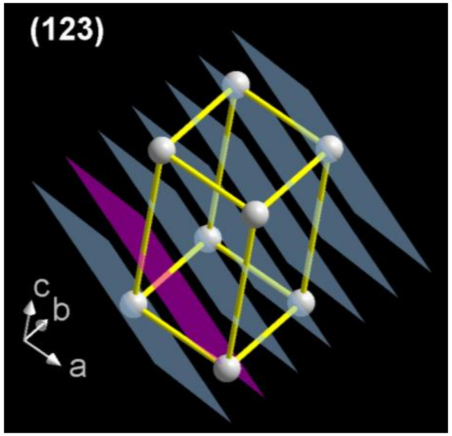
Το κοντινότερο επίπεδο από την αρχή των αξόνων τέμνει τους άξονες στα σημεία: **a**/h **b**/k **c**/l

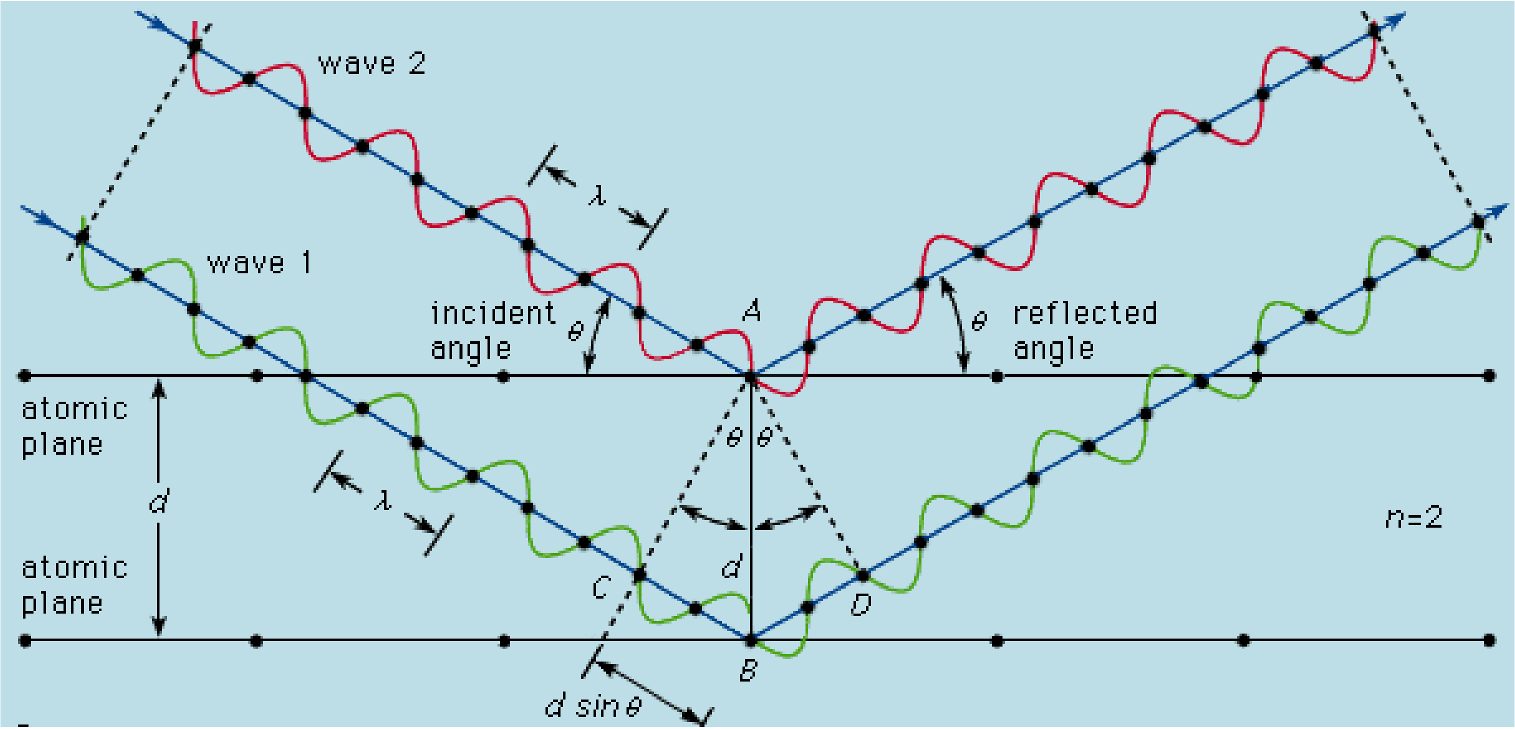
1 ∞ ∞	1 1 ∞	1 1 1	1 2 3
1 0 0	1 1 0	1 1 1	1 1/2 1/3







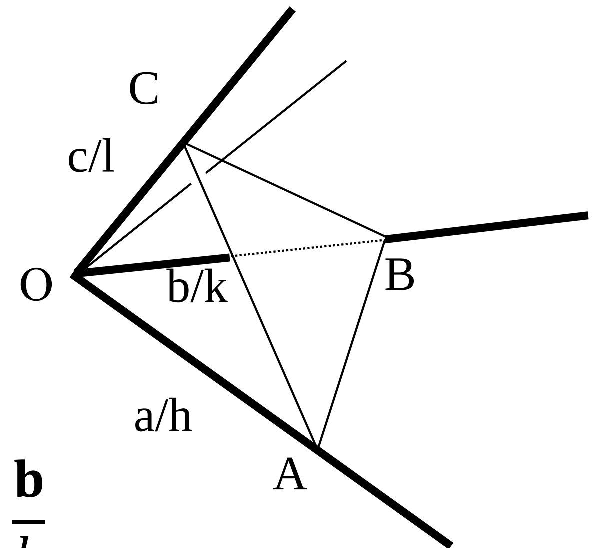




Bragg law: 2dsin Θ=nλ

$\mathbf{r}^{*}=h\mathbf{a}^{*}+k\mathbf{b}^{*}+l\mathbf{c}^{*}$ είναι ⊥ στο επίπεδο (hkl)

Στο σχήμα παρουσιάζεται το επίπεδο της οικογένειας (h,k,l). Οι τομές στους τρείς άξονες είναι



$$\overline{OA} = \frac{\mathbf{a}}{h} \quad \overline{OB} = \frac{\boldsymbol{b}}{k} \quad \overline{OC} = \frac{\boldsymbol{c}}{l}$$

Επομένως

$$\overline{BA} = \frac{\mathbf{b}}{k} - \frac{\mathbf{a}}{h} \quad \overline{CA} = \frac{\mathbf{c}}{l} - \frac{\mathbf{a}}{h} \quad \overline{CB} = \frac{\mathbf{c}}{l} - \frac{\mathbf{b}}{k}$$

$$\mathrm{r}^{*} \bullet \overline{BA} = (h\mathbf{a}^{*} + k\mathbf{b}^{*} + l\mathbf{c}^{*}) \bullet (\frac{\mathbf{b}}{k} - \frac{\mathbf{a}}{h}) = 0$$

και $$\mathrm{r}^{*} \bullet \overline{CA} = (h\mathbf{a}^{*} + k\mathbf{b}^{*} + l\mathbf{c}^{*}) \bullet (\frac{\mathbf{c}}{k} - \frac{\mathbf{a}}{h}) = 0$$

Επειδή το άνυσμα $\mathbf{r}^{*}$ είναι κάθετο σε δύο ανύσματα του επιπέδου (hkl) είναι κάθετο και στο επίπεδο.

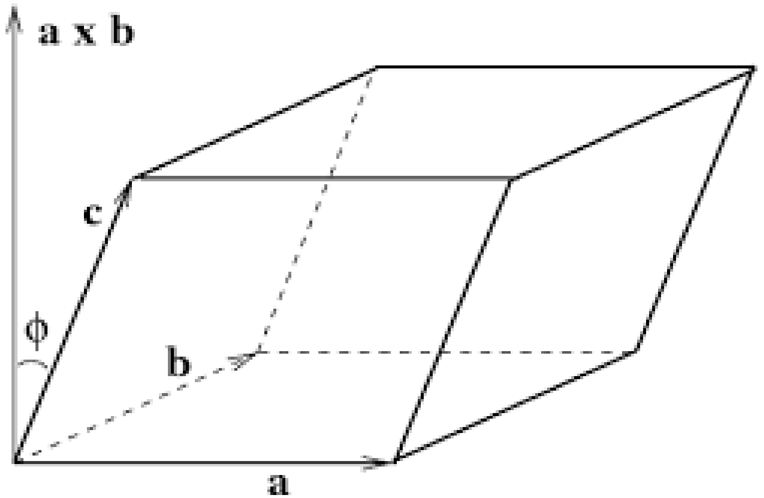
$$d_{hkl} = \left(\frac{\vec{a}}{h}\right) \bullet \frac{\boldsymbol{r}*}{|\boldsymbol{r}*|} = \frac{1}{|\boldsymbol{r}*|}$$

Σχέση ανυσμάτων ευθέως και αντιστρόφου πλέγματος:

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

$V = (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c}$

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



$\mathbf{c}^* \perp \mathbf{a}, \mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{c}^* \,//\, \mathbf{a} \times \mathbf{b} \Rightarrow$

$\mathbf{c}^* = \psi\, \mathbf{a} \times \mathbf{b}$

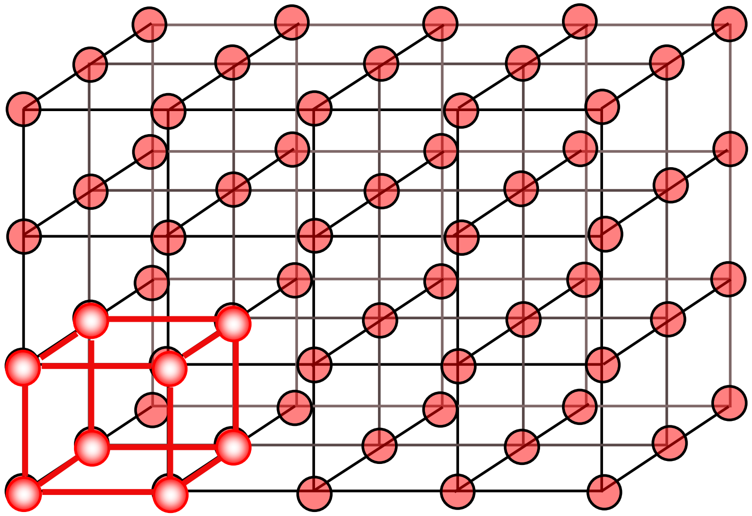
$\mathbf{c}^* \bullet \mathbf{c} = 1 \Rightarrow \quad (\psi\, \mathbf{a} \times \mathbf{b}) \bullet \mathbf{c} = \mathbf{1} \Rightarrow \psi\, (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \bullet \mathbf{c} = \mathbf{1} \Rightarrow \psi = 1/V$

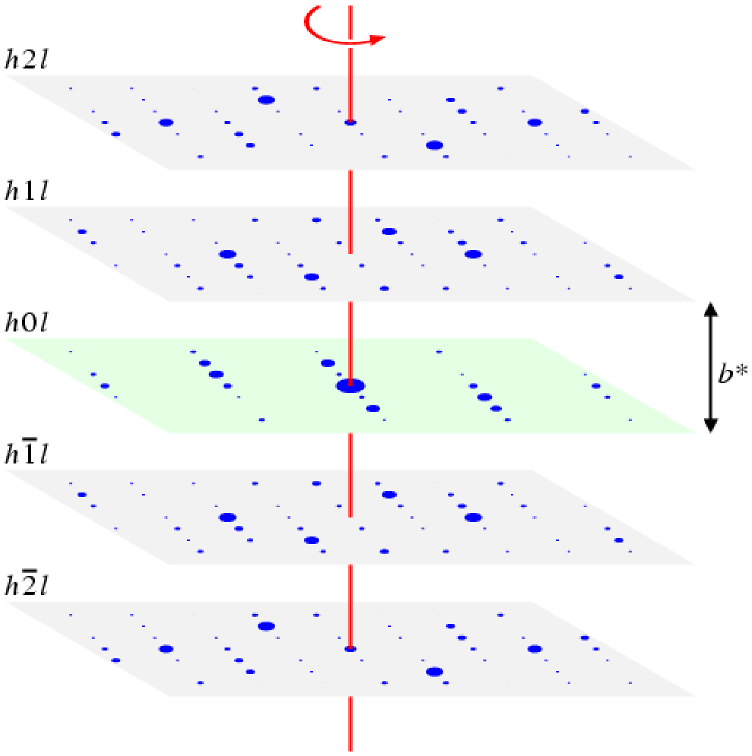
$\mathbf{a}^* = \mathbf{b} \times \mathbf{c} / (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c}$ $\quad \mathbf{b}^* = \mathbf{a} \times \mathbf{c} / (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c}$ $\quad \mathbf{c}^* = \mathbf{a} \times \mathbf{b} / (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c}$

System	$d^{*2}(hkl)$	$d^2(hkl)$
Triclinic	$h^2a^{*2}+k^2b^{*2}+l^2c^{*2}+$ $2klb^*c^*\cos\alpha^*+$ $2lhc^*a^*\cos\beta^*+$ $2hka^*b^*\cos\gamma^*$	$1/d^{*2}(hkl)$
Monoclinic	$h^2a^{*2}+k^2b^{*2}+l^2c^{*2}+$ $2hla^*c^*\cos\beta^*$	$\left\{\frac{1}{\sin^2\beta}\left[\frac{h^2}{a^2}+\frac{l^2}{c^2}-\frac{2hl\cos\beta}{ac}\right]+\frac{k^2}{b^2}\right\}^{-1}$
Orthorhombic	$h^2a^{*2}+k^2b^{*2}+l^2c^{*2}$	$\left\{\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{c^2}\right\}^{-1}$
Tetragonal	$(h^2+k^2)a^{*2}+l^2c^{*2}$	$\left\{\frac{h^2+k^2}{a^2}+\frac{l^2}{c^2}\right\}^{-1}$
Hexagonal and trigonal (P)	$(h^2+k^2+hk)a^{*2}+l^2c^{*2}$	$\left\{\frac{4(h^2+k^2+hk)}{3a^2}+\frac{l^2}{c^2}\right\}^{-1}$
Trigonal (R) (rhombohedral)	$[h^2+k^2+l^2+$ $2(hk+kl+hl)(\cos\alpha^*)]a^{*2}$	$a^2(TR)^{-1}$, where $T=h^2+k^2+l^2+$ $2(hk+kl+hl)[(\cos^2\alpha-\cos\alpha)/\sin^2\alpha]$ and $R=(\sin^2\alpha)/(1-3\cos^2\alpha+2\cos^3\alpha)$
Cubic	$(h^2+k^2+l^2)a^{*2}$	$\left\{\frac{h^2+k^2+l^2}{a^2}\right\}^{-1}=\frac{a^2}{h^2+k^2+l^2}$

$$|F_{hkl}|^2$$

$$F_{hkl} = \sum_n f_n exp[(2\pi i/\lambda)(\mathrm{h\ xn + ky_n + l\ zn})]$$

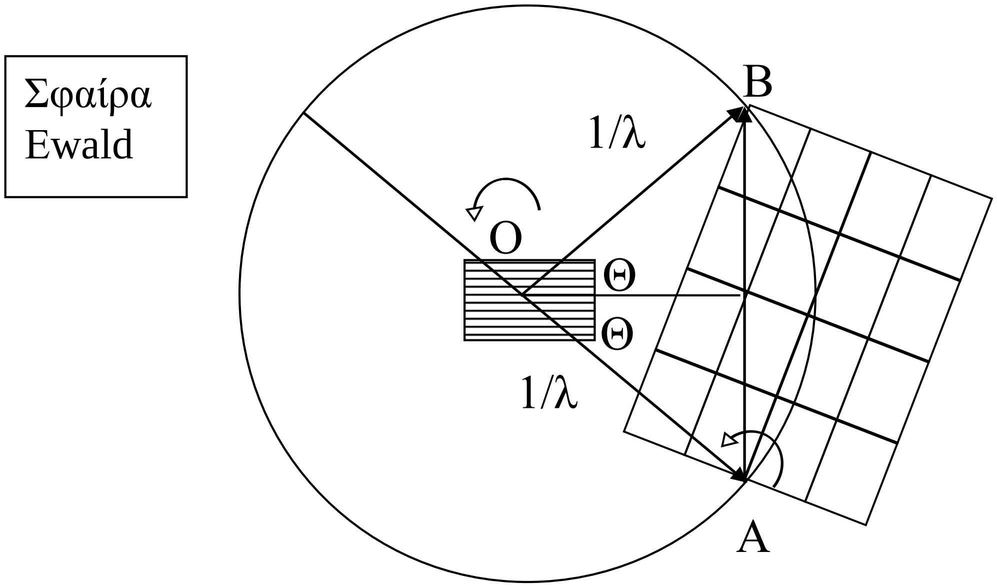




Μοναδιαία κυψελίδα, περιοδικότητα

⇒ Κρυσταλλος

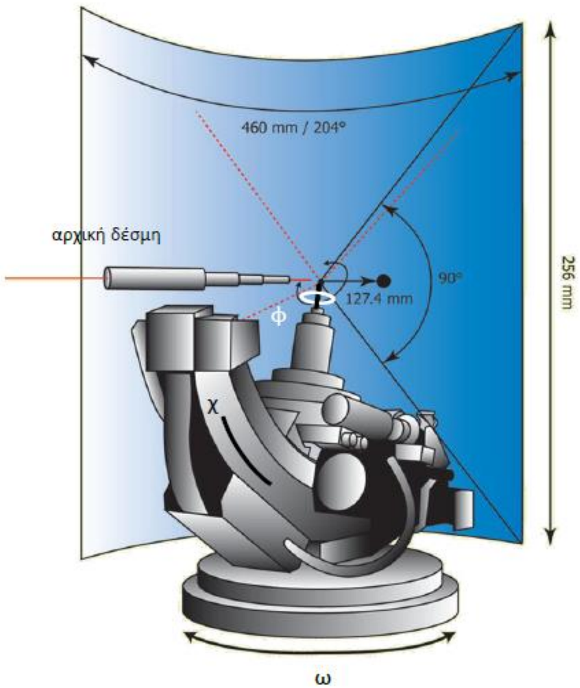
$$\mathbf{r}_{\mathbf{hkl}}^* = \mathrm{h}\mathbf{a}^* + \mathrm{k}\mathbf{b}^* + \mathrm{l}\mathbf{c}^*$$

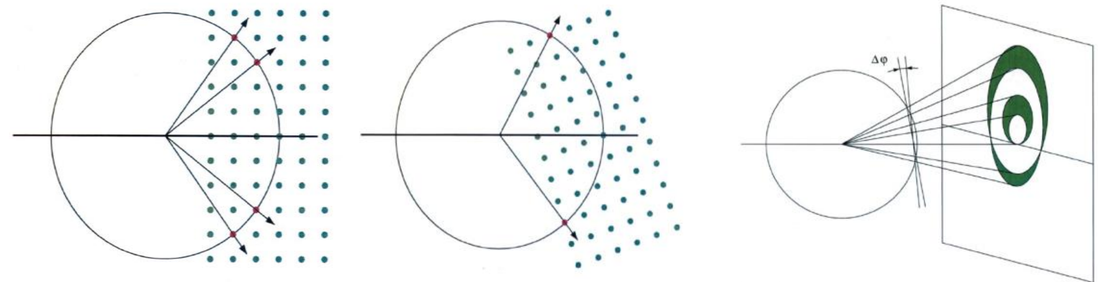


$$(AB)=2\sin\Theta/\lambda$$

$$(AB)=d^*=1/d$$

$$2d\sin\Theta=\lambda$$


460 mm / 204°
αρχική δέσμη
127.4 mm
90°
256 mm
φ
χ
ω


Δφ