Ειδικά Δομικής βιολογίας

Διάλεξη 3η :

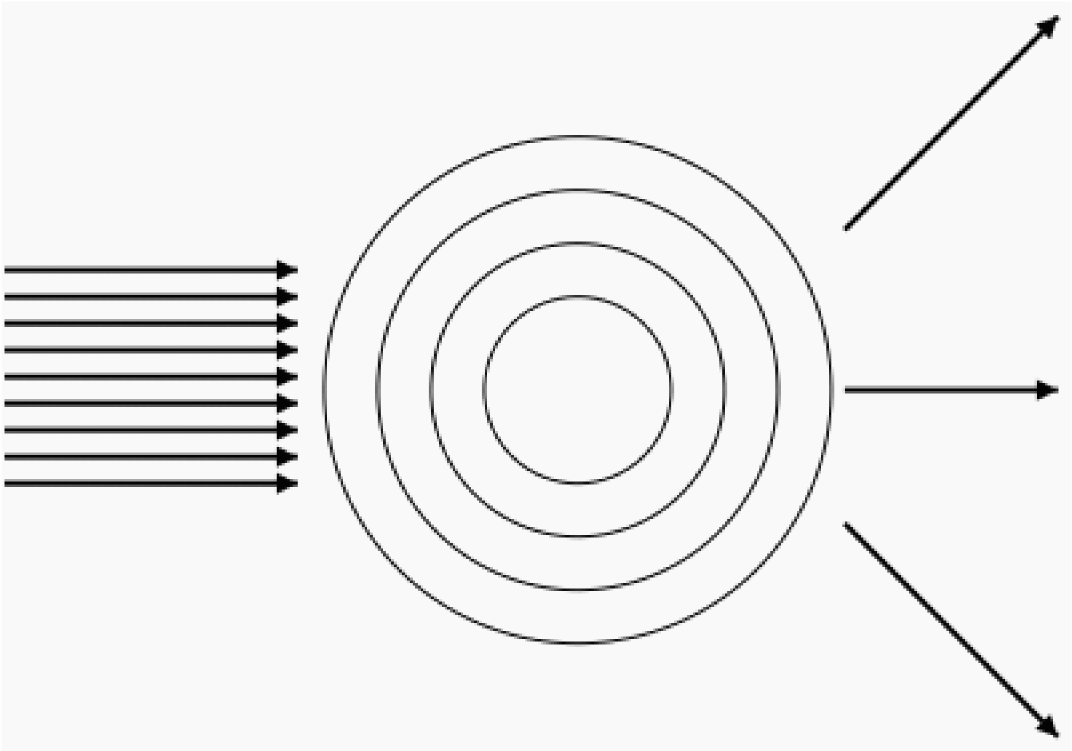
Ατομικοί παράγοντες σκέδασης.
Σκέδαση ακτινοβολίας από περιοδικά αντικείμενα : περίθλαση.

Παράγοντας δομής

$$\vec{\mathrm{F}}_{\vec{h}} = \int_V \rho(\vec{r}) e^{2\pi i \vec{r}\cdot\vec{h}} dV$$

Επειδή η ύλη είναι συνήθως οργανωμένη σε άτομα, μπορούμε να αντικαταστήσουμε το ολοκλήρωμα (στον όγκο του αντικειμένου) με ένα άθροισμα (για κάθε άτομο του αντικειμένου). Το μόνο που χρειαζόμαστε για αυτό είναι να γνωρίζουμε το πως σκεδάζουν τα άτομα (υποθέτοντας για απλότητα ότι έχουν σφαιρική συμμετρία).

Ατομικοί παράγοντες σκέδασης



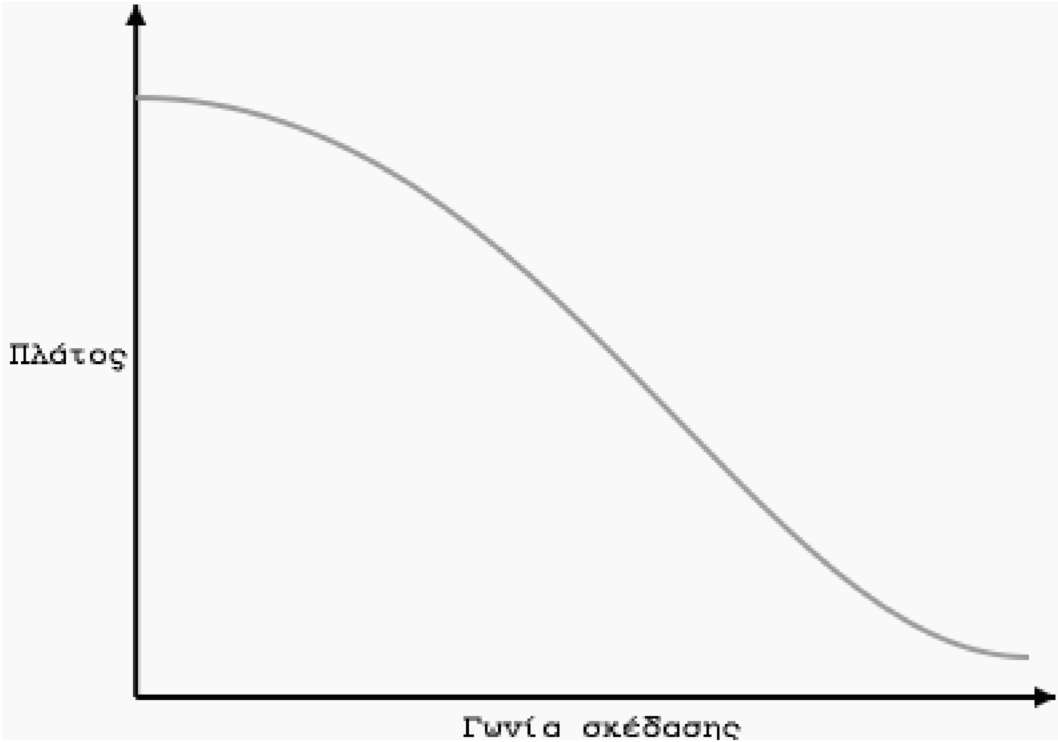
Ατομικοί παράγοντες σκέδασης

Επειδή τα άτομα θεωρούνται ότι έχουν σφαιρική συμμετρία, η σκέδαση από αυτά θα έχει επίσης σφαιρική συμμετρία. Άρα, η σκέδαση από ένα μεμονωμένο άτομο μπορεί να περιγραφεί ως συνάρτηση μιας μόνο παραμέτρου : της γωνίας σκέδασης.

Οι ατομικοί παράγοντες σκέδασης είναι οι συναρτήσεις εκείνες οι οποίες περιγράφουν το πλάτος της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας (ως συνάρτηση της γωνίας σκέδασης) για κάθε ατομικό τύπο.

Οι ατομικοί παράγοντες σκέδασης έχουν όλοι την ίδια μορφή :

Ατομικοί παράγοντες σκέδασης

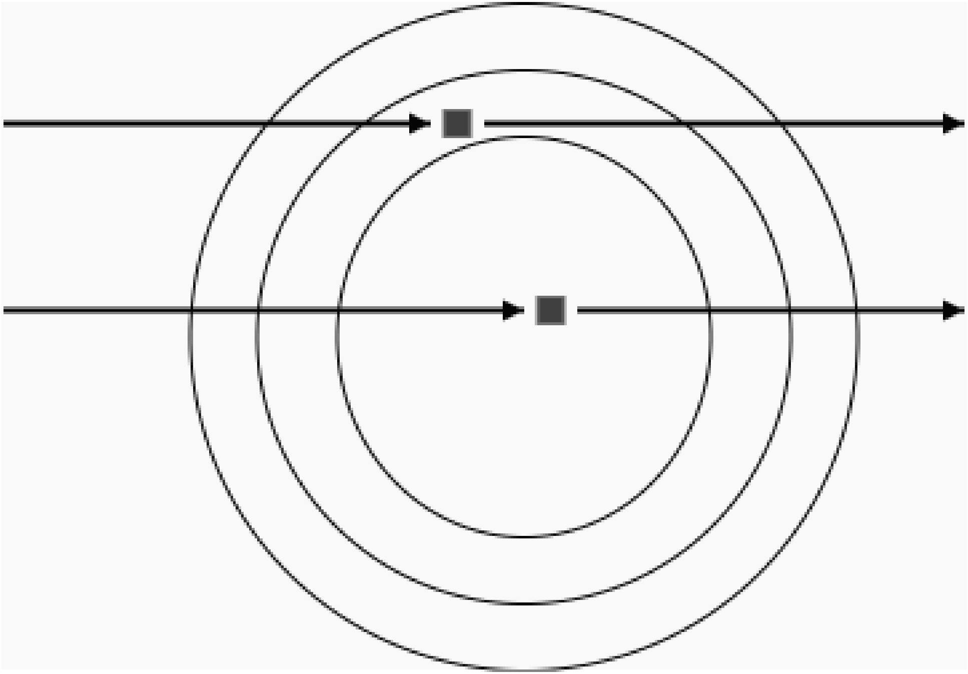


Ατομικοί παράγοντες σκέδασης

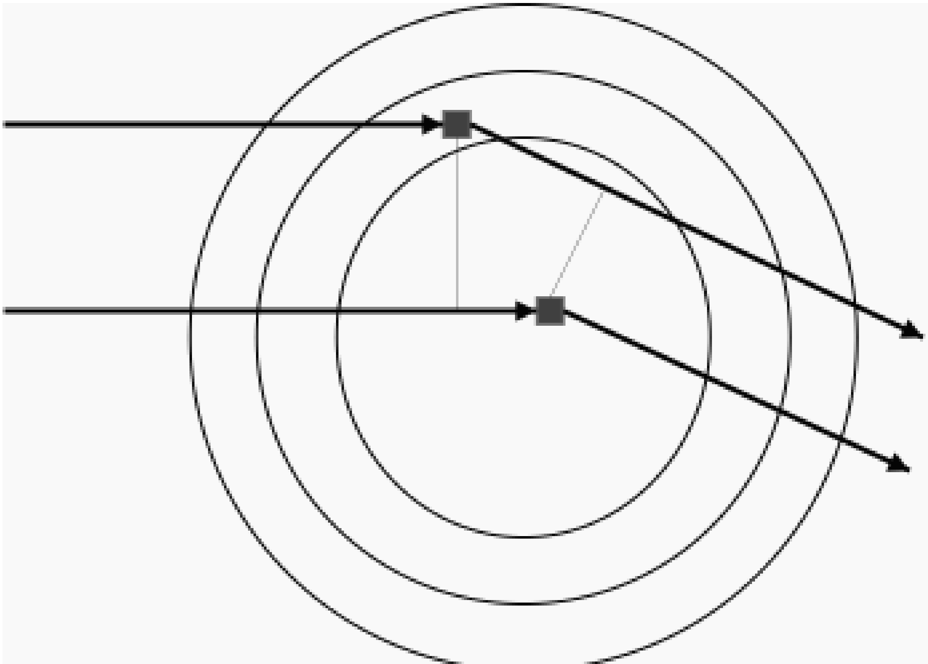
Η αναλυτική απόδειξη της μορφής αυτών των συναρτήσεων είναι έξω από τα πλαίσια του μαθήματος.

Μια ποιοτική όμως ερμηνεία η οποία στηρίζεται στην αύξηση της διαφοράς δρόμων μεταξύ των σκεδαζόμενων κυμάτων καθώς η γωνία σκέδασης αυξάνει, είναι ευνόητη :

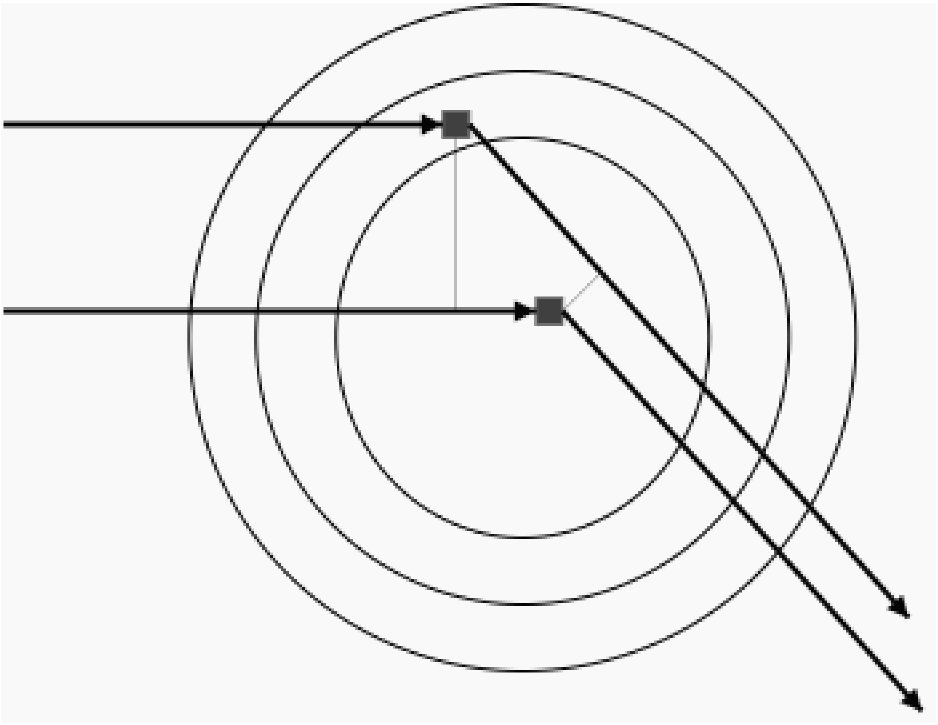
Ατομικοί παράγοντες σκέδασης



Ατομικοί παράγοντες σκέδασης



Ατομικοί παράγοντες σκέδασης



Παράγοντας δομής

Εάν, λοιπόν, το αντικείμενο αποτελείται από j άτομα στις θέσεις r(j), και με f(j,h) συμβολίσουμε την τιμή του ατομικού παράγοντα σκέδασης για το (j) άτομο και για την γωνία σκέδασης που αντιστοιχεί στο συγκεκριμένο (h), τότε :

$$\vec{\mathbf{F}}_{\vec{h}} = \sum_{j=1}^{N} f_{j,\vec{h}} e^{2\pi i \vec{r_j} \cdot \vec{h}}$$

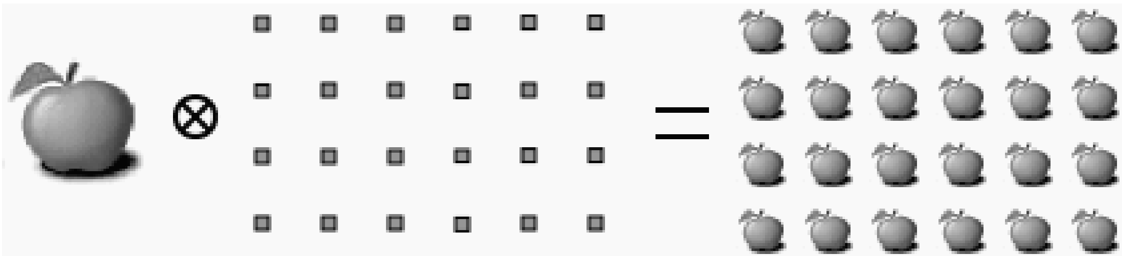
Κρύσταλλοι

Η μέχρι τώρα συζήτηση έχει παντελώς αγνοήσει το ενδεχόμενο του να είναι το υπό μελέτη αντικείμενο ένας κρύσταλλος.

Το ζητούμενο είναι να βρεθεί η εξίσωση που περιγράφει τη σκέδαση (περίθλαση) από κρυστάλλους ως συνάρτηση της δομής τους. Ισοδύναμα, θέλουμε να προσδιορίσουμε την μορφή της εξίσωσης του μετασχηματισμού Fourier στην ειδική περίπτωση που το αντικείμενο είναι κρύσταλλος.

Η εισαγωγή της μεταθετικής συμμετρίας στις εξισώσεις που συνάγαμε προηγουμένως, θα γίνει μέσω του θεωρήματος της συνέλιξης (convolution theorem).

Συνέλιξη



$$
\begin{aligned}
conv(u) &= f(x) \otimes g(x) \\
&= \int_x f(x) g(u - x) dx
\end{aligned}
$$

Συνέλιξη

Παράδειγμα 2ο : συνέλιξη και συναρτήσεις δ

Η συνάρτηση δ(x-xo) είναι μια συνάρτηση τέτοια ώστε

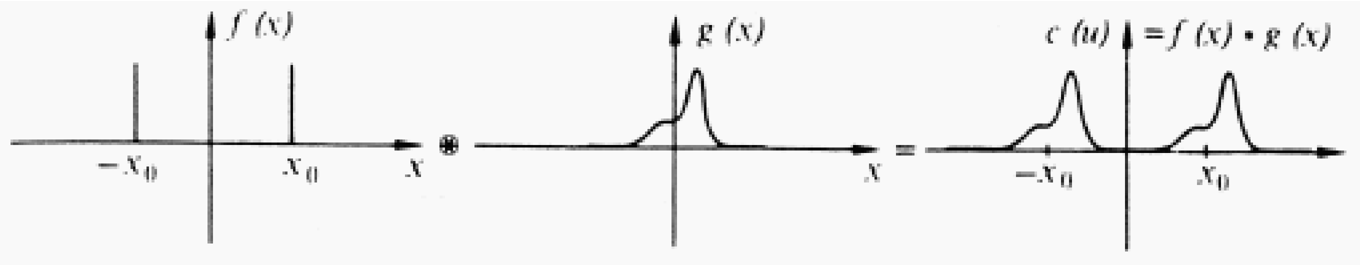
$$\delta(x - x_o) = 0, x \neq x_o$$

$$\int \delta(x - x_o) = 1, x = x_o$$

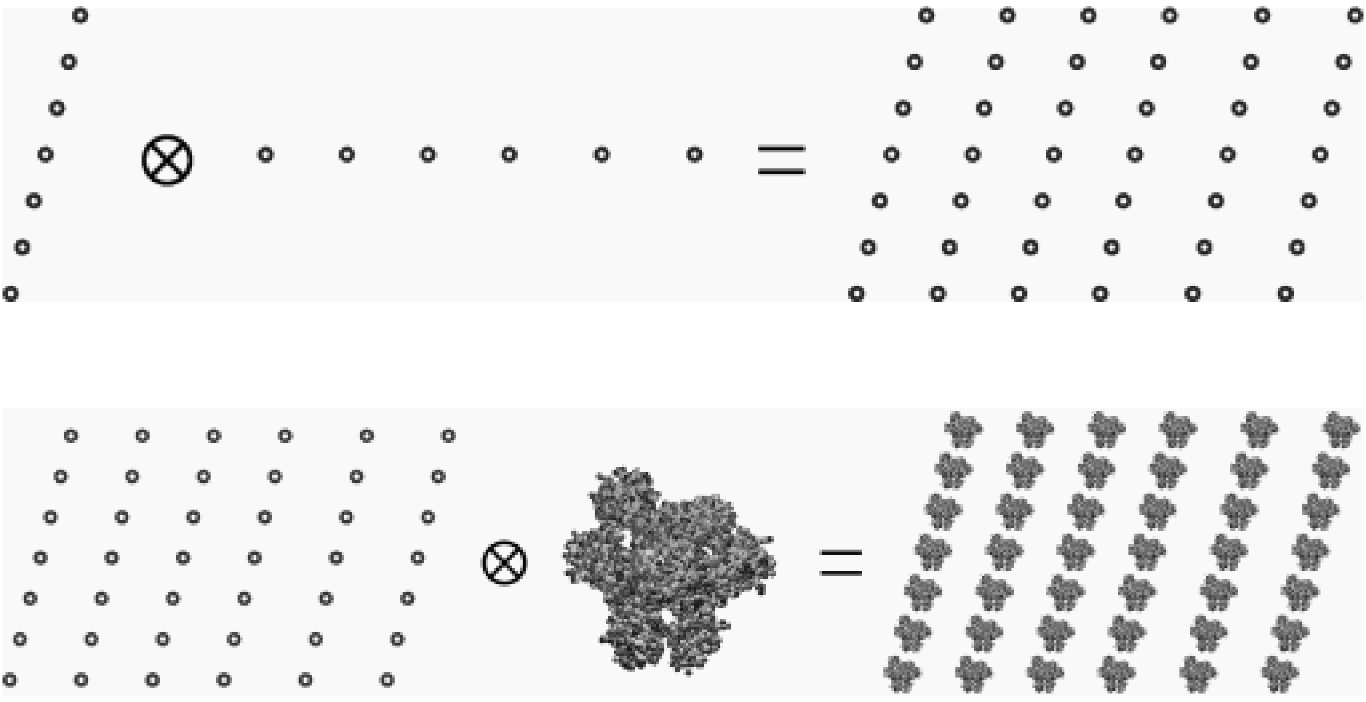
Συνέλιξη

Παράδειγμα 2ο : συνέλιξη και συναρτήσεις δ

Η εφαρμογή της στην κρυσταλλογραφία (σε συνδυασμό με την πράξη της συνέλιξης) είναι προφανής :



Συνέλιξη



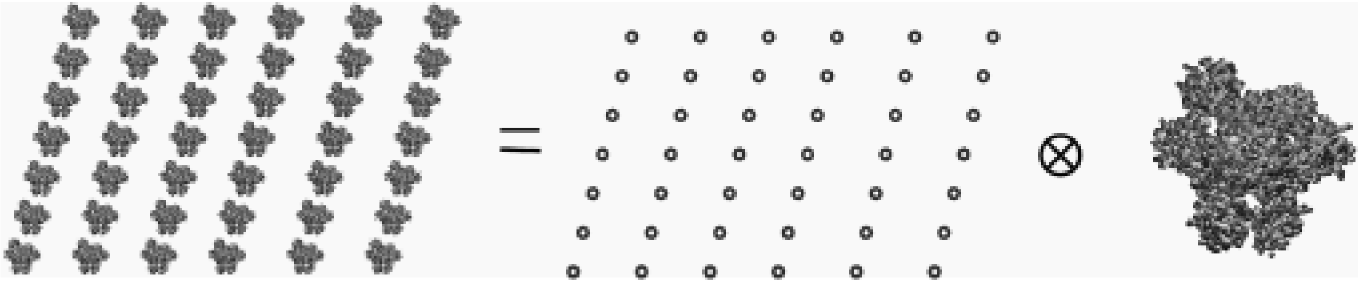
Το θεώρημα της συνέλιξης

Ο μετασχηματισμός Fourier της συνέλιξης δυο συναρτήσεων είναι ίσος (ταυτίζεται) με το γινόμενο των μετασχηματισμών Fourier των επιμέρους συναρτήσεων. Δηλ.

$$\mathcal{FT}(f \otimes g) = \mathcal{FT}(f) \cdot \mathcal{FT}(g)$$

Το θεώρημα της συνέλιξης

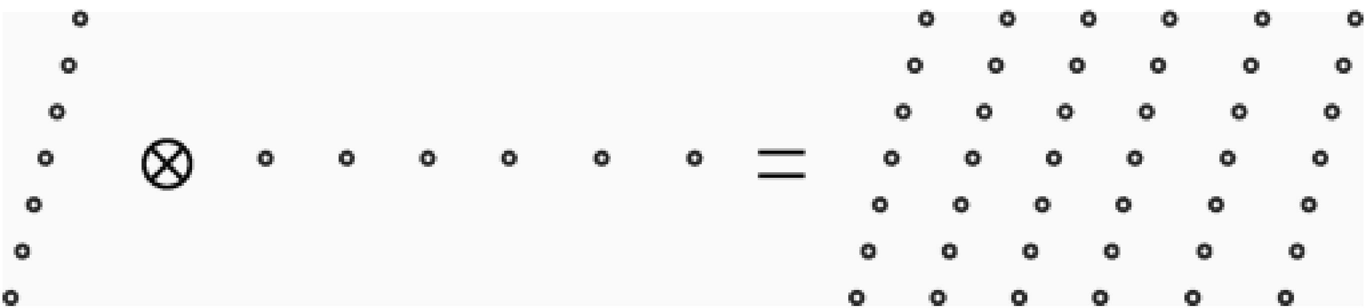
Αλλά, ο κρύσταλλος είναι η συνέλιξη του πλέγματος με την ηλεκτρονική πυκνότητα του περιεχομένου της στοιχειώδους κυψελίδας :



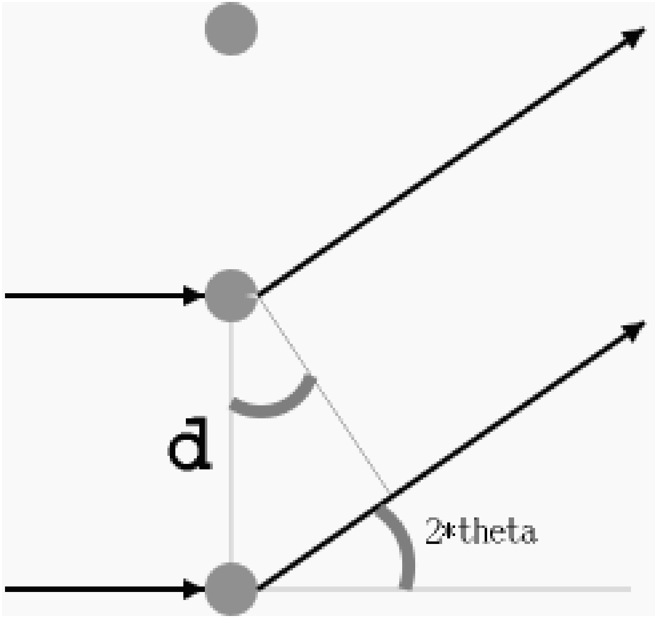
Άρα, FT(κρυστάλλου)=FT(πλέγματος)·FT(μορίου)

Το αντίστροφο πλέγμα

Ο μετασχηματισμός Fourier ενός πλέγματος είναι επίσης ένα πλέγμα, το λεγόμενο αντίστροφο πλέγμα. Η απόδειξη αυτού του αποτελέσματος είναι γίνεται σχετικά εύκολα μέσω του θεωρήματος της συνέλιξης ξεκινώντας από ένα μονοδιάστατο πλέγμα :



Το αντίστροφο πλέγμα



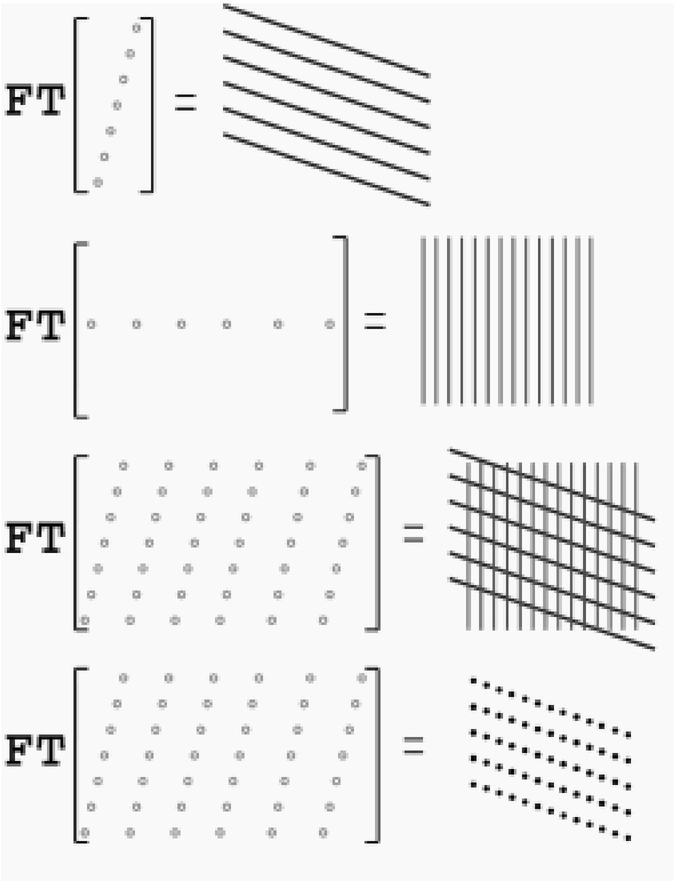
$$d\sin(2\theta) = n\lambda$$

Το αντίστροφο πλέγμα

Άρα, ο μετασχηματισμός Fourier ενός μονοδιάστατου πλέγματος είναι ένα σύνολο από ισαπέχοντα παράλληλα επίπεδα τα οποία είναι κάθετα στον άξονα του μονοδιάστατου πλέγματος. Η απόσταση μεταξύ των επιπέδων είναι αντιστρόφως ανάλογη της απόστασης μεταξύ των σημείων του μονοδιάστατου πλέγματος.

Με βάση αυτό, εύκολα συνάγονται τα υπόλοιπα :

Το αντίστροφο πλέγμα



Περίθλαση από κρυστάλλους

FT(κρυστάλλου)=FT(πλέγματος)·FT(μορίου)

Ο μετασχηματισμός Fourier ενός κρυστάλλου είναι παντού μηδέν εκτός από τα σημεία εκείνα που αντιστοιχούν στο αντίστροφο πλέγμα.
Στα σημεία αυτά, η τιμή του μετασχηματισμού Fourier του κρυστάλλου ταυτίζεται με την τιμή του μετασχηματισμού Fourier της συνάρτησης ηλεκτρονικής πυκνότητας της στοιχειώδους κυψελίδας .

Περίθλαση από κρυστάλλους

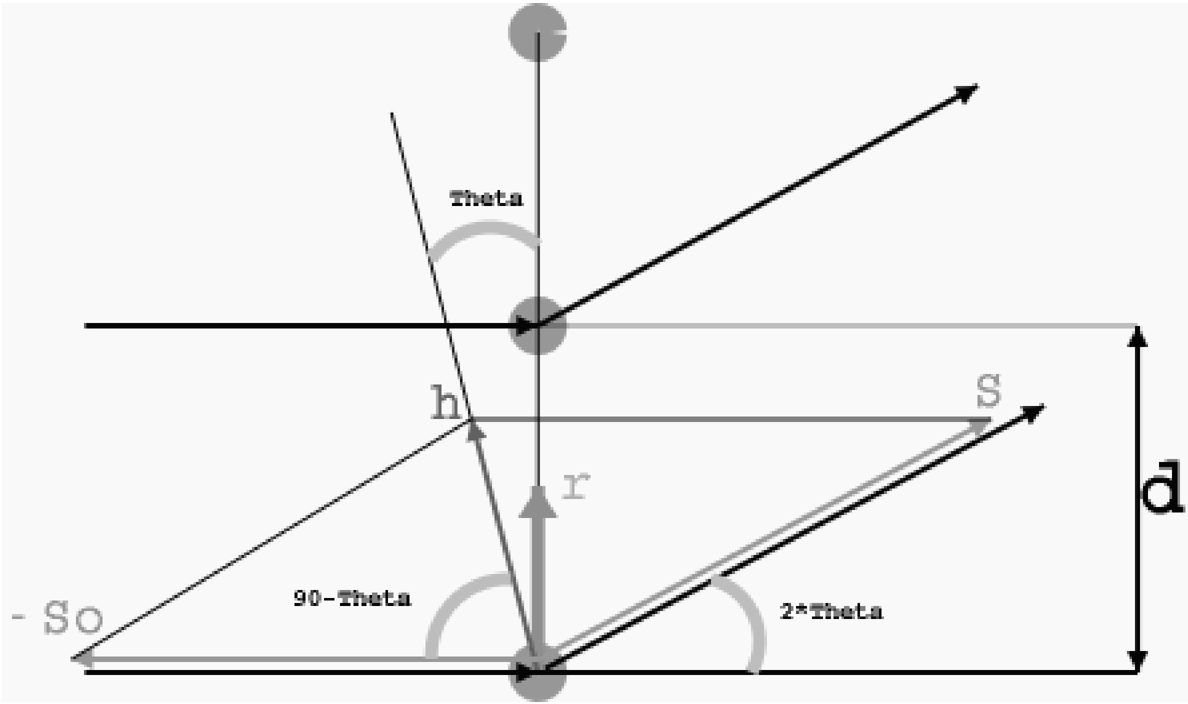
$$\vec{\mathrm{F}}_{\vec{h}} = \int_V \rho(\vec{r}) e^{2\pi i \vec{r}\cdot\vec{h}} dV$$

$$\vec{\mathbf{F}}_{\vec{h}} = \sum_{j=1}^{N} f_{j,\vec{h}} e^{2\pi i \vec{r_j}\cdot\vec{h}}$$

Περίθλαση από κρυστάλλους

Λόγω του ότι ο μετασχηματισμός Fourier ενός κρυστάλλου παίρνει μη μηδενικές τιμές μόνο στα σημεία του αντίστροφου πλέγματος, η εξίσωση του παράγοντα δομής απλοποιείται ακόμα περισσότερο. Η απλοποίηση θα δειχτεί στη μια διάσταση, αλλά μεταφέρεται αυτούσια στις δύο και τρεις διαστάσεις.

Περίθλαση από κρυστάλλους



$$
\begin{aligned}
\vec{r} \cdot \vec{h} &= (x\vec{d}) \cdot \vec{h} \\
&= x(\vec{d} \cdot \vec{h}) \\
&= x(|\vec{d}||\vec{h}| \cos(\theta)) \\
&= x|\vec{d}| \cos(\theta)|\vec{h}| \\
&= xd \cos(\theta)[2 \cos(90 - \theta)/\lambda] \\
&= xd \cos(\theta)[2 \sin(\theta)/\lambda] \\
&= xd[2 \sin(\theta) \cos(\theta)/\lambda] \\
&= xd[\sin(2\theta)/\lambda] \\
&= xn
\end{aligned}
$$

Παράγοντας δομής

$$\vec{\mathbf{F}}_{hkl} = \sum_i f_{i,\mathbf{h}} e^{2\pi i(hx+ky+lz)}$$

$$\rho(xyz) = \sum_{hkl} \vec{\mathbf{F}}_{hkl} e^{-2\pi i(hx+ky+lz)}$$