

2. Röntgendiffraktion

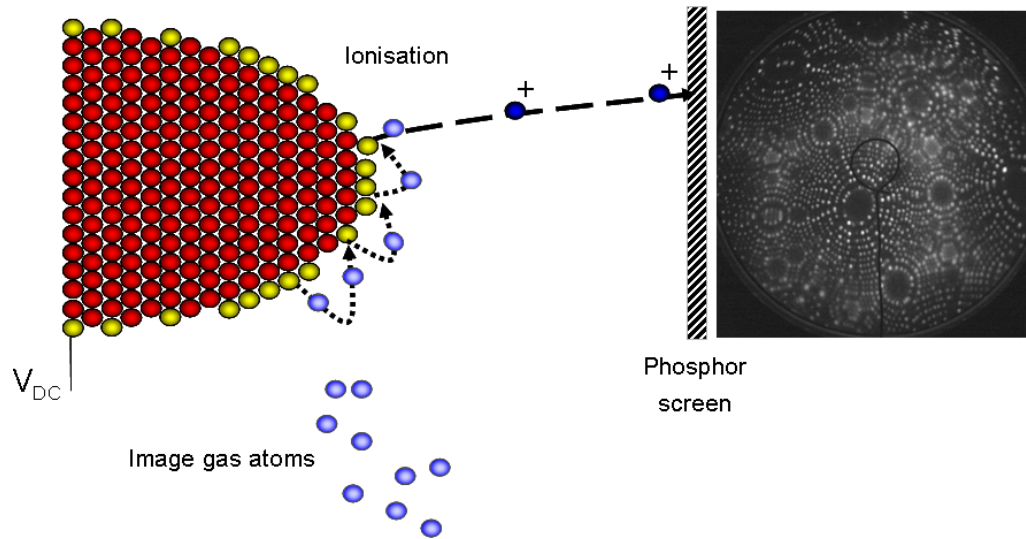
2.1. Översikt över sätt att mäta atomär struktur

Hur vet man då allt som beskrivits tidigare om kristallers struktur??

Nästan all information har ursprungligen härletts med röntgendiffraktion. Elektron- och neutrodiffraction kan också användas för att mäta gitterstrukturer, men röntgendiffraktion är helt klar den bästa metoden i flesta fall.

Sedan 1950-talet har det också varit möjligt att observera kristallstrukturer direkt:

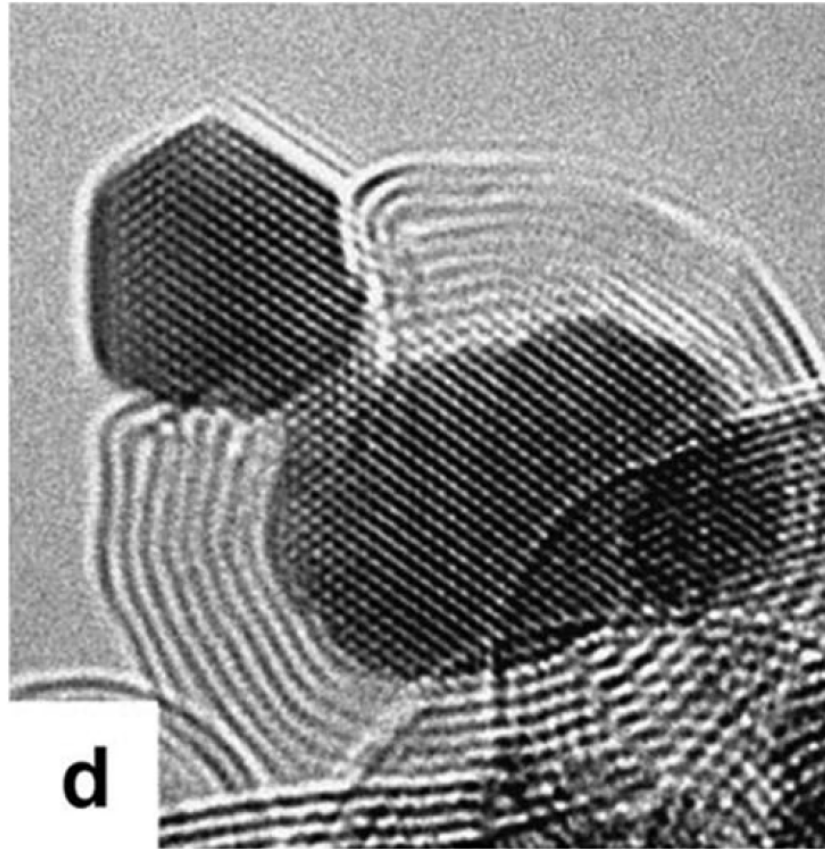
- På 1950-talet uppfanns fältjonmikroskopet (Field Ion Microscope, FIM) med vilka man kunde observera kristallstrukturen i tunga hårda metaller som W och Pt direkt.



<http://www-fim.materials.ox.ac.uk/techniques.html>

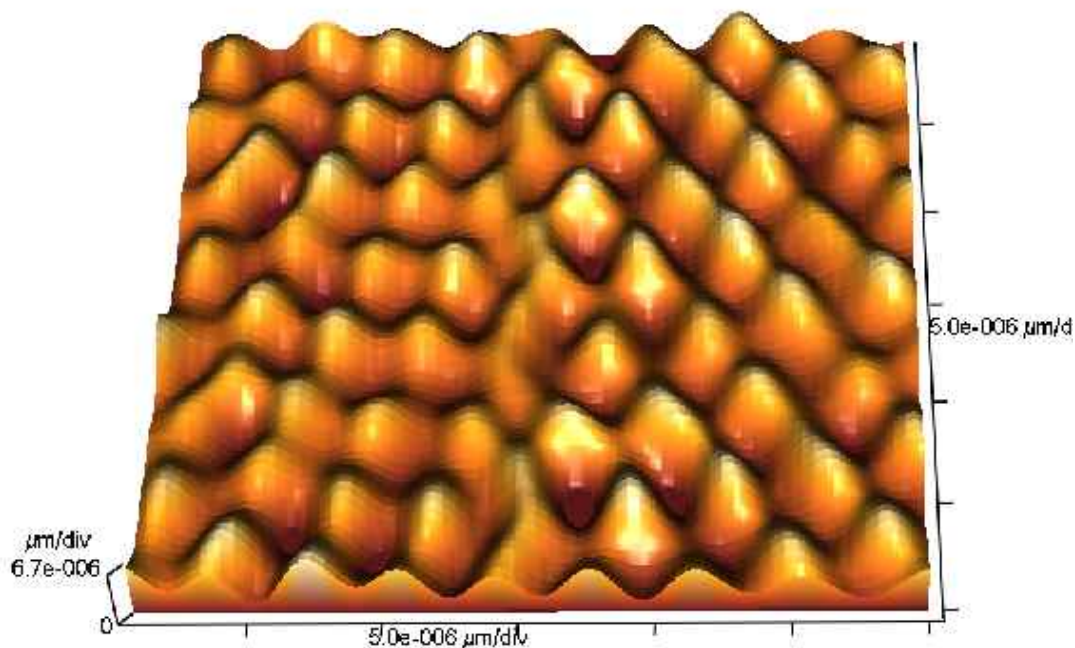
- På 1970-talet ungefär blev transmissions-elektronmikroskop (TEM) så bra att man kunde observera kristallstruktur i tunna filmer i ett stort antal material med tunga atomer direkt. På 1990-talet förbättrades mikroskoperna ytterligare med så kallad "aberration correction" som möjliggör direkt observation av också lätta atomer.

Exempel på TEM-bild, Au-nanoclustrar som pressas ut ur fullerenlager:



[L. Sun, A. V. Krasheninnikov, T. Ahlgren, K. Nordlund, and F. Banhart, Phys. Rev. Lett. 101, 156101 (2008)]

- År 1983 uppfanns det "Scanning tunneling microscope", STM, med vilket man kan observera atomer på ledande ytor direkt (se bilden på första sidan av kursens anteckningar):



Men (röntgen)diffraction är och förblir den primära metoden för att bestämma materials strukturer, och det är helt centralt att förstå dess princip.

Den grundläggande iden för röntgendiffraction kan formuleras på två ekvivalenta sätt.

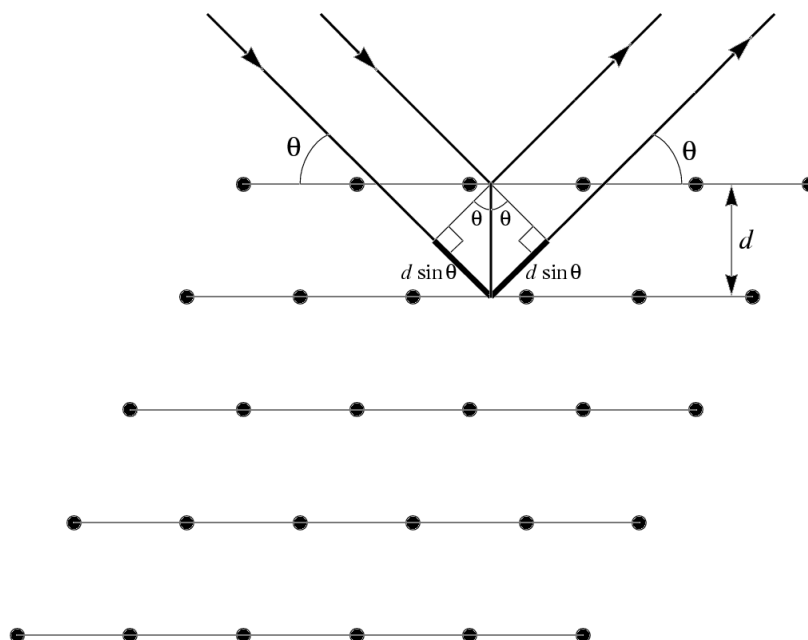
I både formuleringarna betraktar man röntgenstrålar som sprids *elastiskt* från atomer i ett gitter, dvs. att röntgenkvantumen inte förlorar energi i spridningen. Då fotonens energi $E = hc/\lambda$, har de alltså också samma våglängd. Likaså antar man att under hela mätningprocessen sprids varje röntgenstråle bara en gång. Båda är mycket goda approximationer för röntgenstrålar. (Däremot inte nödvändigtvis för elektroner).

Nu härleder vi både formuleringarna, och beskriver dessutom varför de hänger ihop med varandra och varför den senare är bättre motiverad fysikaliskt.

2.2. Bragg's formulering

Den första formulationen ges av **Braggs lag**.

Betrakta ett gitter av punkter, och anta att röntgenstrålar reflekteras från en viss grupp av plan i gittret.



Här antar man att diffraktionen av den inkommande vågen sker *spekulärt*, dvs. med samma inkommande och utgående vinkel.

Betrakta de två vågorna (övre och nedre) i bilden. Villkoret för att konstruktiv interferens sker är att antalet våglängder λ måste vara ett heltal n gånger den extra vägen som den nedre vågen rör sig.

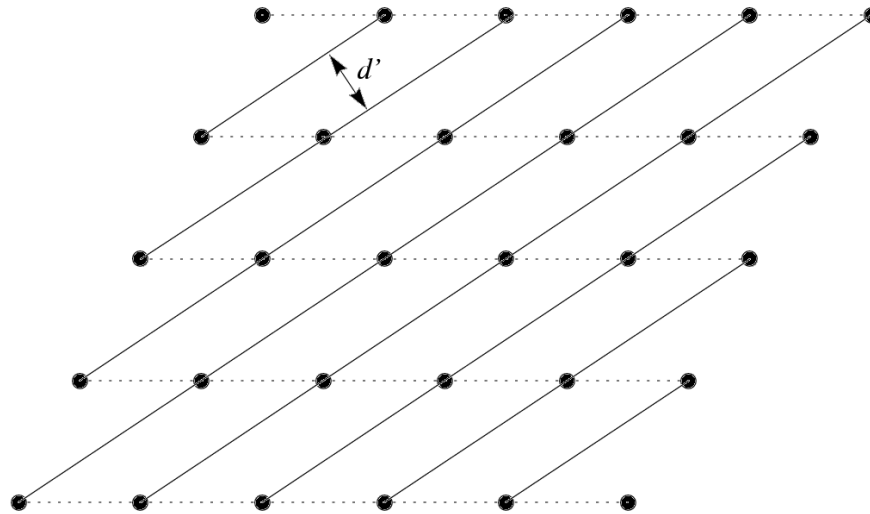
Den extra vägen är helt enkelt $2 \times d \sin \theta$, där d är avståndet mellan gitterplanen. Alltså fås villkoret

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (1)$$

Detta betyder i praktiken att om man belyser en enhetskristall ur en vinkel θ i förhållande till gitterplan i kristallen, kommer de reflekterade strålarna att producera pikar i ett spektrum av inkommande 'vitt' röntgenljus vid våglängderna λ . Dessa pikar kallas **Bragg-pikar**.

Alternativt, om man belyser en kristall med röntgenljus med en fixerad våglängd λ , kommer man att observera reflektion av strålarna bara vid vissa vinklar θ .

Det är viktigt att inse att det finns ett oändligt antal gitterplan i en kristall:



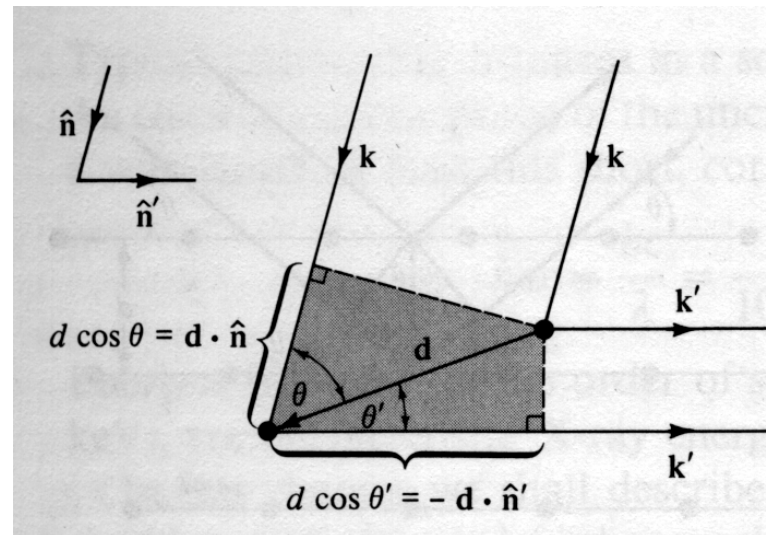
Alltså kommer olika geometriska konstruktioner vid ett röntgenexperiment att kunna ge olika Bragg-pikar.

Denna härledning har dock ett konceptuellt problem: då röntgenstrålarna i själva verket sprids från enskilda atomer, hur “vet” de var gitterplanen ligger? Von Laue’s härledning kringgår detta problem.

2.3. von Laue's formulering och det reciproka gittret

Den alternativa formuleringen presenterades av von Laue, och är mer attraktiv i det att man inte behöver betrakta gitterplan, eller anta spekulär reflektion.

Här betraktar man endast två godtyckliga punkter (atomer) i gittret:



Vågor med vektorerna \mathbf{k} kommer in i riktningen $\hat{\mathbf{n}}$ och reflekteras från de två atomerna, och går ut i en godtycklig riktning $\hat{\mathbf{n}}'$ med vågvektorn \mathbf{k}' . För vågvektorerna gäller per definition $\mathbf{k} = 2\pi\mathbf{n}/\lambda$.

Från bilden ser man trivialt att den extra vägen som den lägre vågen rör sig är

$$d \cos \theta + d \cos \theta' = \mathbf{d} \cdot (\hat{\mathbf{n}} - \hat{\mathbf{n}}')$$

Enligt samma argument som i Bragg's formulering, måste denna väg ha ett heltal våglängder för att konstruktiv interferens skall kunna ske. Alltså fås kriteriet

$$\mathbf{d} \cdot (\hat{\mathbf{n}} - \hat{\mathbf{n}}') = m\lambda$$

där m är ett godtyckligt heltal. Multiplicering av båda sidorna med $2\pi/\lambda$ ger

$$\mathbf{d} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m$$

Om vi nu betraktar ett stort antal diffraktionspunkter i ett gitter, måste kriteriet ovan gälla för alla dessa punkter. Då nu dessa punkter är i ett Bravais-gitter, gäller per definition att alla avstånd mellan atomerna \mathbf{d} är helt enkelt punkter i Bravais-gittret \mathbf{R} . Ofta betecknar man skillnaden i

vågvektor ($\mathbf{k} - \mathbf{k}'$) helt enkelt med \mathbf{K} . Alltså fås

$$\mathbf{R} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \mathbf{R} \cdot \mathbf{K} = 2\pi m$$

Detta kan även skrivas i formen

$$e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} = 1 \quad (2)$$

som alltså bör gälla för alla punkter i ett Bravais-gitter \mathbf{R} . Detta är Laue's kriterium.

Här noterar de som gått sin elektrodynamik genast att termen $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_i)$ är samma sak som amplitudens fasfaktor för uttrycket för spridning av elektromagnetisk strålning från ett spridningscentrum i platsen \mathbf{R}_i . För ett stort antal N spridningscentra är intensiteten $I(\mathbf{K})$ för elektromagnetisk spridning

$$I(\mathbf{K}) = \left| \sum_i^N e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_i} \right|^2 \quad (3)$$

(se Jackson, Classical electrodynamics ekv. 9.97).

Och detta är ju bara Fourier-transformationen av gittret \mathbf{R}_i .

Alltså kan Laue's kriterium också tolkas att visa att Fourier-transformationen av ett Bravais-gitter kommer att avvika från noll bara i vissa punkter i \mathbf{K} -rymden, som definieras av kriterium (2).

\mathbf{K} -rymden kallas i detta sammanhang den **reciproka rymden**.

(Ett annat sätt att definiera det reciproka gittret är att säga att den är mängden av plana vågor som har samma periodicitet som Bravais-gittret. Detta ger kanske en mera intuitiv bild av vad det hela betyder: den reciproka rymden beskriver vågor som "kan röra sig" i ett gitter. De reciproka gitterpunkterna beskriver stående vågor i gittret, med en grupphastighet på 0).

Teorem: de punkter i \mathbf{K} -rymden som uppfyller Laue-kriteriet (2) bildar ett Bravais-gitter.

Bevis: Den matematiska definitionen på ett Bravais-gitter var ju

Ett Bravais-gitter är en diskret mängd vektorer som alla inte ligger i samma plan, och har egenskapen att den är stängd under vektoraddition och -subtraktion.

Alltså om vektorerna \mathbf{R}_1 och \mathbf{R}_2 är vektorer i ett Bravais-gitter, är också

$$\mathbf{R}_3 = \mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2$$

$$\mathbf{R}_4 = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$$

vektorer i gittret.

Betrakta nu två vektorer \mathbf{K}_1 och \mathbf{K}_2 som uppfyller kriteriet 2, och bilda deras summa och differens: $\mathbf{K}_3 = \mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2$, $\mathbf{K}_4 = \mathbf{K}_1 - \mathbf{K}_2$. Nu gäller

$$e^{i\mathbf{K}_3 \cdot \mathbf{R}} = e^{i\mathbf{K}_1 \cdot \mathbf{R}} e^{i\mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{R}} = 1$$

$$e^{i\mathbf{K}_4 \cdot \mathbf{R}} = e^{i\mathbf{K}_1 \cdot \mathbf{R}} / e^{i\mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{R}} = 1$$

Alltså hör också \mathbf{K}_3 och \mathbf{K}_4 till samma mängd vektorer som fyller Laue-kriteriet, dvs. denna mängd är stängd under vektor-addition och subtraktion, dvs. bildar vektorerna \mathbf{K} också ett Bravais-gitter, v.s.b.

Detta gitter av \mathbf{K} -vektorer i reciproka rummet kallas det **reciproka gittret**. Som motsats till detta kallas det ursprungliga gittret emellanåt det **direkta gittret**. Motsvarande rummet kallas den **reciproka rummet** och den **verkliga rummet** (“reciprocal space” and “real space”).

Mängden av alla vektorer i det reciproka gittret betecknas ofta med \mathbf{G} eller \mathbf{G}_{hkl} . Tyvärr betecknas ofta vilseledande också en enda vektor i reciproka gittret också med \mathbf{G} ...

Alltså har vi nu visat att en röntgendiffraktionsmätning av ett Bravais-gitter kommer att ge Bragg-pikar i punkter som själva bildar ett Bravais-gitter.

Om man kunde göra en röntgenmätning i tre dimensioner i den reciproka rummet, skulle man alltså se ett Bravais-gitter. I praktiken är dock de flesta röntgenmätningar 1- eller 2-dimensionella, så man ser en mängd med pikar i en 1- eller 2-dimensionell bild.

2.4. Egenskaper hos det reciproka gittret

2.4.1. Generering av det reciproka gittret

[HH s. 320, AM s. 86]

Teorem: Det reciproka gittret för ett Bravais-gitter med primitiva vektorerna \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 och \mathbf{a}_3 kan genereras med de primitiva (reciproka) vektorerna

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \end{aligned} \tag{4}$$

Bevis

Med lite primitiv vektoralgebra (Pentikäinen s. 89) kan man visa att för vektorerna \mathbf{a}_i och \mathbf{b}_j gäller

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (5)$$

där δ_{ij} är Kroneckers delta-funktion.

I.o.m. att vektorerna \mathbf{b}_i per definition inte ligger i samma plan, kan en godtycklig vektor \mathbf{k} skrivas som en summa av dem

$$\mathbf{k} = k_1\mathbf{b}_1 + k_2\mathbf{b}_2 + k_3\mathbf{b}_3 \quad (6)$$

där k_i är reella tal.

Nu om \mathbf{R} är en gittervektor i det direkta gittret, gäller för den per definition

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

där n_i är heltal.

Alltså följer

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} = 2\pi(k_1n_1 + k_2n_2 + k_3n_3)$$

Nu om $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}$ är 2π gånger ett heltal, gäller Laue's kriterium

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} = 1.$$

Enda sättet med vilket detta kan gälla för godtyckliga n_i är att alla k_i är också heltal. Dvs. om vektorn \mathbf{k} är en summa av godtyckliga heltal gånger vektorerna (4), är den del av ett Bravaisgitter. Per definitionen på ett Bravaisgitter gäller alltså att vektorerna (4) är en grupp med primitiva vektorer för det reciproka gittret, v.s.b.

2.4.2. Det reciproka av det reciproka gittret

I.o.m. att det reciproka gittret också är ett Bravaisgitter, kan man konstruera det reciproka av detta gitter. Om \mathbf{K} är en vektor i det reciproka gittret gäller enligt Laue's definition (2) för en godtycklig vektor \mathbf{X} i det reciproka reciproka gittret att

$$e^{i\mathbf{X}\cdot\mathbf{K}} = 1 \quad (7)$$

Jämförelse med ekvation (2) visar genast att alla vektorer \mathbf{R} i det ursprungliga direkta gittret fyller denna definition. Dessutom kan ingen annan vektor $\mathbf{x} = x_1\mathbf{a}_1 + x_2\mathbf{a}_2 + x_3\mathbf{a}_3$ fylla kriteriet, ty om vektorn inte är i det direkta gittret är åtminstone ett index x_i inte ett heltal. För detta i gäller då

$$e^{i\mathbf{b}_i\cdot\mathbf{x}} = e^{2\pi i x_i} \neq 1$$

och därmed uppfylls inte villkoret (7) för vektorn $\mathbf{K} = \mathbf{b}_1$ i det reciproka gittret.

Givetvis kan man göra detta bevis också genom att härleda det reciproka reciproka gittrets primitiva vektorer \mathbf{c}_i med ekvation (4) och visa att det är lika med vektorerna \mathbf{a}_i .

2.4.3. Viktiga exempel på reciproka gitter

[HH s. 322, AM s. 86]

Det överlägset viktigaste exemplet på reciproka gitter är det reciproka gittret för den enkla kubiska kristallen. Detta därför att i praktiken då man behandlar övriga kubiska kristaller arbetar man ju oftast med den enkla kubiska kristallen och en bas som utgångspunkt.

Om man skriver de primitiva vektorerna för den enkla kubiska kristallen

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{i}, \quad \mathbf{a}_2 = a\mathbf{j}, \quad \mathbf{a}_3 = a\mathbf{k}$$

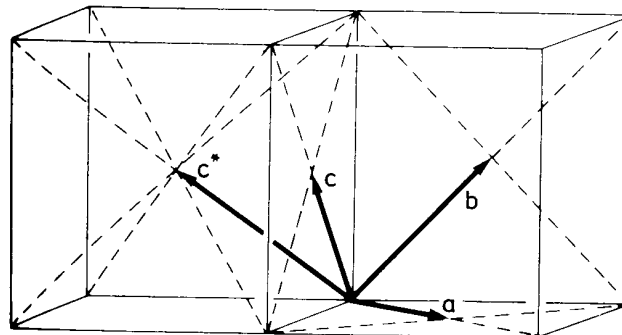
kan man lätt visa med ekvationerna (4) att

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\mathbf{i}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\mathbf{j}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\mathbf{k},$$

vilket ju är bara ett annat enkelt kubiskt gitter med samma orientering som det ursprungliga, men sidlängden $2\pi/a$.

Detta exempel är mycket viktigt därför att åtminstone inom klassisk röntgenfysik är den vanligaste konventionen för kubiska kristaller att arbeta just med reciproka gittervektorer \mathbf{G} med längden $2\pi/a$ gånger längden av reflektionens Miller-index (se nedan).

För **FCC-gittret** är det reciproka gittret ett BCC-gitter. Det kan visas på följande sätt för ett FCC-gitter med en kub med sidlängden a :



De primitiva vektorerna i bilden ovan är

$$\mathbf{a} = \frac{1}{2}a(\mathbf{j} + \mathbf{k}), \mathbf{b} = \frac{1}{2}a(\mathbf{k} + \mathbf{i}), \mathbf{c} = \frac{1}{2}a(\mathbf{i} + \mathbf{j}),$$

Genom att använda ekvationerna 4 får vi nu för vektorerna i det reciproka gittret

$$\mathbf{a}^* = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{j} + \mathbf{k} - \mathbf{i}), \mathbf{b}^* = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{k} + \mathbf{i} - \mathbf{j}), \mathbf{c}^* = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k})$$

Om man lite funderar och ser på bilden inser man att detta är primitiva vektorer för ett BCC-gitter. Alltså är det reciproka gittret för ett FCC-gitter ett BCC-gitter.

Vad är då det reciproka gittret för ett BCC-gitter? Från diskussionen ovan bör detta vara uppenbart...

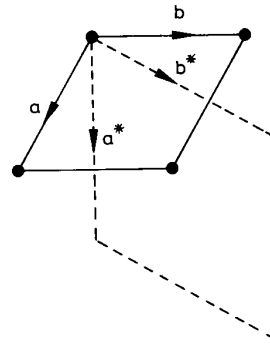
För ett **enkelt hexagonalt gitter** kan de primitiva vektorerna skrivas i kartesiska koordinater

$$\mathbf{a} = a\mathbf{i}, \quad \mathbf{b} = a \left(-\frac{i}{2} + \frac{\sqrt{3}\mathbf{j}}{2} \right), \quad \mathbf{c} = c\mathbf{k}$$

Nu är $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \sqrt{3}/2a^2c$ och efter lite vektoralgebra

$$\mathbf{a}^* = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(-\frac{\mathbf{j}}{2} + \frac{\sqrt{3}\mathbf{i}}{2} \right), \quad \mathbf{b}^* = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\mathbf{j}, \quad \mathbf{c}^* = \frac{2\pi}{c}\mathbf{k}$$

Jämförelse av dessa primitiv-vektorer med det ursprungliga visar att det ju bara är samma vektorer med lite olika orientation, se bilden nedan:



Vad är då det reciproka gittret av HCP-strukturen? Frågan saknar betydelse, då HCP ju inte är ett Bravais-gitter! Istället beskrivs det med det enkla hexagonala gittret och en bas, så den reciproka motsvarigheten till HCP är ett annat enkelt hexagonalt gitter och en bas.

2.4.4. Det reciproka gittret och gitterplan

[AM s. 88-]

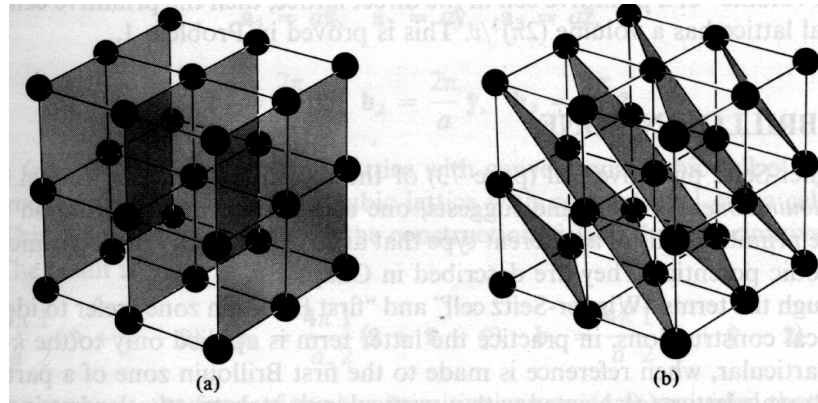
Det finns ett nära samband mellan gitterplan och vektorer i det reciproka gittret.

Med ett **gitterplan** i ett Bravais-gitter menar man vilket som helst plan som innehåller minst tre punkter i Bravais-gittret. P.g.a. translations-symmetrin i ett Bravais-gitter innehåller varje sådant plan i själva verket oändligt många punkter i gittret. Likaså följer att punkterna i planet i själva verket också alltid bildar ett tvådimensionellt Bravais-gitter.

Beviset på detta är enkelt: ifall tre gitterpunkter som ligger bredvid varann i planet har koordinaterna \mathbf{R}_1 , \mathbf{R}_2 och \mathbf{R}_3 , ligger vektorerna $\mathbf{R}_a = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$ och $\mathbf{R}_b = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_3$ i planet. Då kommer vektorerna \mathbf{R}_a och \mathbf{R}_b att vara primitiva vektorer för ett två-dimensionellt Bravais-gitter, ty uppenbart ligger alla summor $i\mathbf{R}_a + j\mathbf{R}_b$ i planet, och pga. definitionen på det tredimensionella Bravais-gittret ligger det också gitterpunkter i alla dessa summor.

Med en **familj av gitterplan** menas alla parallella gitterplan som har samma avstånd till sina

närmaste grannar, och innehåller *alla* punkter i Bravais-gittret. Det är tämligen uppenbart att det finns oändligt många sätt att dela upp en gitter i familjer av gitterplan:



Det visar sig att det reciproka gittret ger ett mycket behändigt sätt att klassificera alla dessa gitterplan. Detta kan uttryckas på följande vis.

Teorem: a) För vilken som helst familj av gitterplan som skiljs åt av avståndet d , existerar det reciproka gittervektorer som är vinkelräta mot planen, och de kortaste av dessa har längden $2\pi/d$.

b) För vilket som helst vektor \mathbf{K} i det reciproka gittret, existerar det en familj med gitterplan som är vinkelräta mot \mathbf{K} och åtskiljs av ett avstånd d , där $2\pi/d$ är längden av den kortaste reciproka gittervektorn som är lika riktad som \mathbf{K} .

Nu får det reciproka gittret en enkel geometrisk tolkning: den kan helt enkelt tolkas vara en beskrivning av gitterplanen i det direkta gittret.

Vi bevisar här del a) av satsen ovan. Beviset av del b) är i stort sätt beviset på a) åt motsatt håll.

Låt $\hat{\mathbf{n}}$ vara en enhetsvektor vinkelrät mot gitterplanen. Betrakta plana vågen $\mathbf{K} = 2\pi\hat{\mathbf{n}}/d$. Med en enkel geometrisk konstruktion kan man visa att $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$ är konstant i plan vinkelräta mot \mathbf{K} för alla värden på \mathbf{r} som ger en punkt i planet: betrakta två olika värden \mathbf{r}_1 och \mathbf{r}_2 . Nu gäller $\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = 0$ ty vektorn $(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ ligger i planet och \mathbf{K} är vinkelrät mot den.

Dessutom, pga. periodiciteten har sin- och cos-funktionerna har $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$ samma värde i alla plan som separeras av $\lambda = 2\pi/K = d$. Betrakta nämligen ett punkt \mathbf{r} i ett plan, och en annan punkt $\mathbf{r} + d\hat{\mathbf{n}}$ i följande plan. För den senare punkten gäller:

$$e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}+d\hat{\mathbf{n}})} = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}+\mathbf{K}\cdot(2\pi/K)\hat{\mathbf{n}}} = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} e^{i2\pi} = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \quad (8)$$

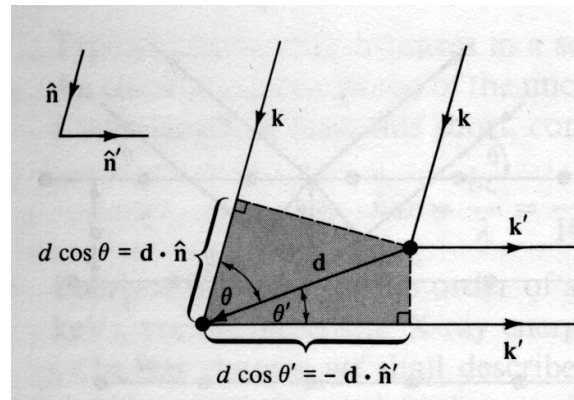
För att ett av gitterplanen måste innehålla origo, måste $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$ vara = 1 för alla punkter i alla plan.

Då dessutom gitterplanen innehåller alla punkter \mathbf{R} i ett Bravais-gitter, måste alltså \mathbf{K} vara en vektor i det reciproka gittret enligt Laues kriterium (2).

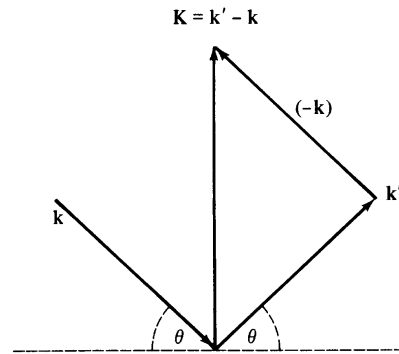
Vidare är $\mathbf{K} = 2\pi\hat{\mathbf{n}}/d$ den kortaste möjliga reciproka vektorn vinkelrät mot planet, ty för att en kortare vektor skulle inte villkoret 8 inte uppfyllas.

Förrän vi fortsätter med klassificering av gitterplanen, använder vi teoremet ovan för att visa att Bragg- och Laue-formuleringarna för röntgendiffraktion är ekvivalenta.

2.4.5. Ekvivalens av Bragg- och Laue-formuleringarna



Betrakta, som i definition av Laue-kriteriet, en inåtkommande \mathbf{k} och en utåtgående \mathbf{k}' våg som uppfyller Laue-kriteriet att $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ är en vektor i det reciproka gittret. Betrakta vidare följande konstruktion (att vinklarna θ är lika är lätt att visa p.g.a. att $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$).



För att visa att denna reflektion uppfyller Bragg-kriteriet (1) noterar vi att enligt teoremet ovan är $\mathbf{K} = m\mathbf{K}_0$, där m är ett heltal och \mathbf{K}_0 den kortaste möjliga reciproka vektorn som är parallell med \mathbf{K} . För denna vektorn gäller enligt teoremet ovan

$$|\mathbf{K}_0| = K_0 = \frac{2\pi}{d} \implies |\mathbf{K}| = K = m \frac{2\pi}{d}$$

där d är det kortaste möjliga avståndet mellan två gitterplan som är vinkelräta mot \mathbf{K} . Å andra sidan ser vi ur bilden ovan att

$$K = 2k \sin \theta$$

så ur dessa två ekvationer följer

$$2k \sin \theta = m \frac{2\pi}{d}$$

och då per definition $k = 2\pi/\lambda$ fås

$$\frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta = \frac{m\pi}{d} \implies m\lambda = 2d \sin \theta$$

som ju är exakt Bragg-kriteriet (1)!

Alltså har vi nu bevisat att von Laue- och Bragg-kriterierna är ekvivalenta. Detta har nu förklarat det fysikaliska dilemma som nämndes i början av kapitlet: *då röntgenstrålarna i själva verket sprids från enskilda atomer, hur "vet" de var gitterplanen ligger?* .

I von Laue-härledningen behövs inte gitterplan. I Laues formulering härledde vi ett kriterium för vilka vågvektorer \mathbf{K} som sprids från ett gitter, *utgående från att spridningen sker från enskilda atomer*. Sedan bevisade vi att dessa vågvektorer har ett rent geometriskt samband med gitterplanen, och till slut att Braggs lag kan härledas utgående från Laues formulering.

Därmed förklaras att Braggs lag antar spridning från gitterplan med att spridningen nog egentligen sker från atomer, men att detta är geometriskt ekvivalent med spridning från gitterplan.

2.5. Miller-index: notation för gitterplan

[AM s. 91-, HH S 1.2.3]

I allmänhet brukar man ju beskriva ett plan i vektornotation genom att ge en vektor som är vinkelrät mot planet. För det specifika fallet av gitterplan är det nu naturligt att använda de reciproka vektorerna för att beskriva detta, då vi har just visat att alla gitterplan har motsvarande reciproka vektorer. För att göra valet unikt, väljer vi dessutom den kortaste möjliga av de reciproka vektorerna.

På detta sätt kommer vi fram till **den första definitionen** på Miller-index:

Miller-indexena för ett gitterplan är koordinaterna i den reciproka rymden för den kortaste möjliga reciproka gittervektorn som är vinkelrät mot planet, i enheter av någon grupp av primitiva reciproka gittervektorer. Alltså är ett plan med Miller-indexena h, k, l vinkelrät mot den reciproka gittervektorn $h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$.

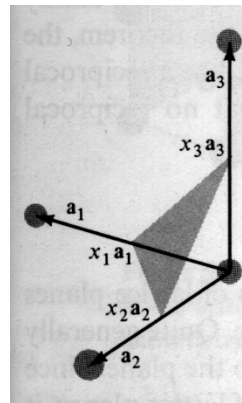
Därmed är alltså Miller-indexena för ett plan alltid heltal, och de har inga gemensamma faktorer. Men indexenas nummer beror alltså på valet av primitiva vektorer !

Den andra, kristallografiska, definitionen är helt ekvivalent med den första, men kanske enklare att förstå.

Miller-indexena är en grupp heltal med inga gemensamma faktorer, som är inverst proportionella till de punkter där gitterplanet korsar de primitiva gittervektorerna.

Om punkterna där planet korsar vektorerna är x_1 , x_2 och x_3 är alltså Miller-indexena

$$h : k : l = \frac{1}{x_1} : \frac{1}{x_2} : \frac{1}{x_3}$$



Denna senare definitionen kan lätt härledas ur den förra: Planet (hkl) är alltså vinkelrät mot vektorn $\mathbf{K} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$. För detta gäller $\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} = A$, där \mathbf{r} är en godtycklig vektor i för en punkt i planet och A är en konstant.

Nu kommer detta plan att korsa gittervektorerna i punkterna $x_1\mathbf{a}_1, x_2\mathbf{a}_2, x_3\mathbf{a}_3$, där värdena på x_i bestäms av att vektorerna $x_i\mathbf{a}_i$ skall faktiskt uppfylla villkoret $\mathbf{K} \cdot (x_i\mathbf{a}_i) = A$. För att t.ex. för $i = 1$

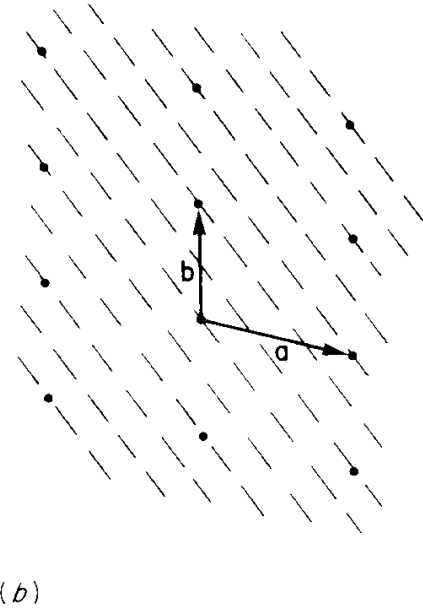
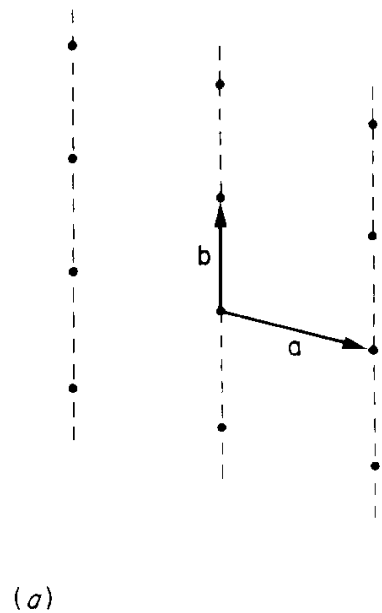
$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_1 = (h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3) \cdot \mathbf{a}_1 = h\mathbf{b}_1\mathbf{a}_1 = 2\pi h$$

(detta följer ur definitionen på det reciproka gittret (4) och ekvation (5)) får vi

$$x_1 = \frac{A}{2\pi h}, \quad x_2 = \frac{A}{2\pi k}, \quad x_3 = \frac{A}{2\pi l}.$$

Alltså är Miller-indexena inverst proportionella till punkterna där planet skär gittervektorerna, vilket är just den senare definitionen.

Här är några enkla exempel på plan och deras Miller-index i ett tvådimensionellt gitter:



(a) är (1 0)-plan i gittret, (b) (3 2)-plan.

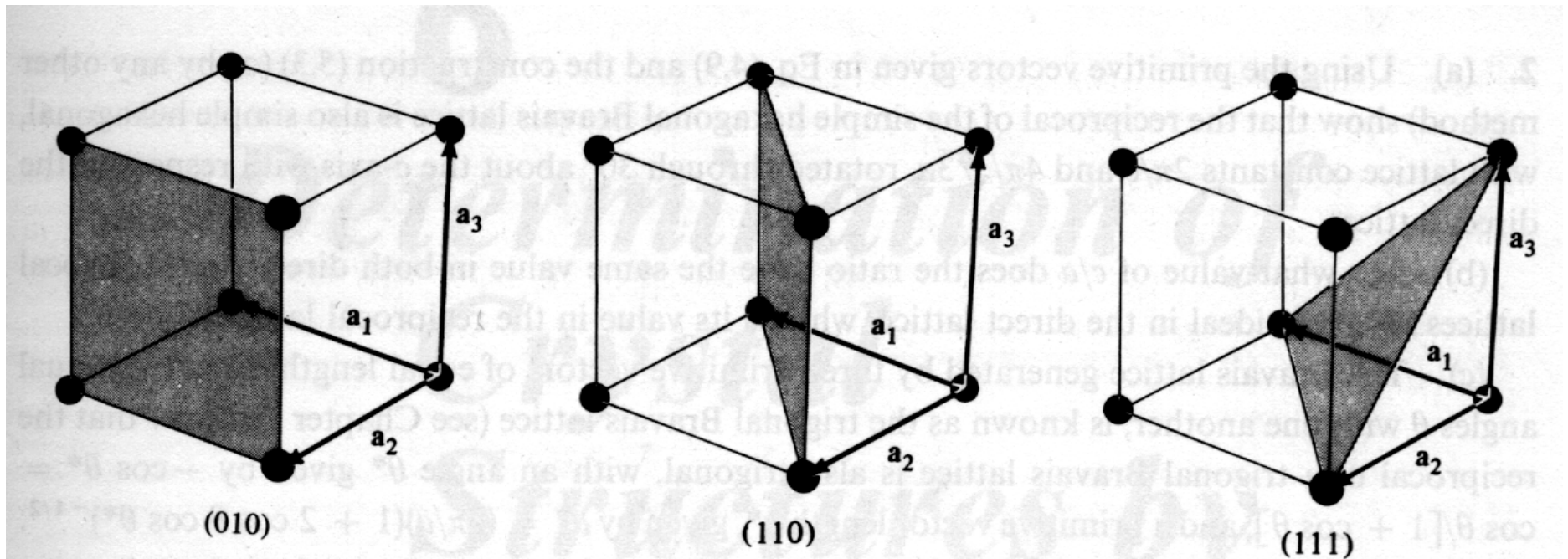
Notera att om ett Miller-index är 0, motsvarar det ett oändligt värde på x_i i den kristallografiska definitionen på gittret. Detta är helt logiskt såtillvida att planet ju aldrig skär nästa gitterplan.

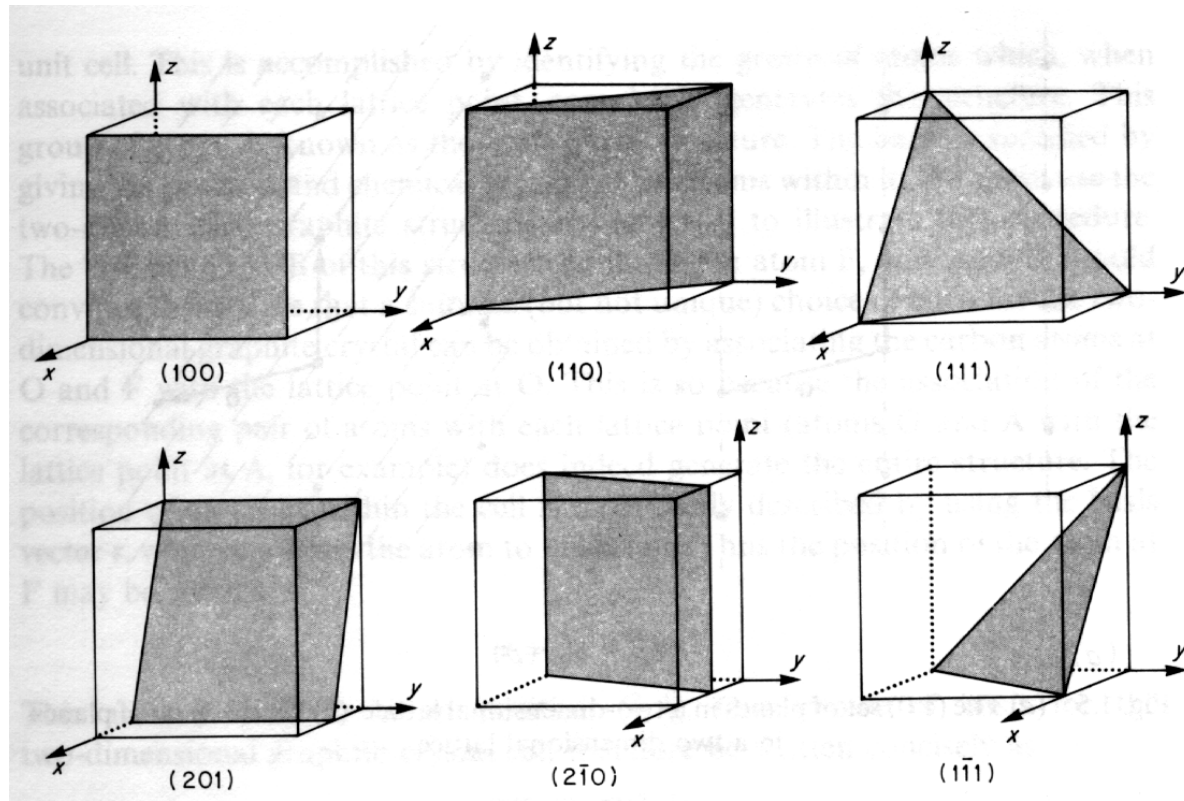
I ett enkelt kubiskt system är det ännu enklare att tolka Miller-index. De är helt enkelt heltals-

komponenterna för en vektor som är vinkelrät mot planet i det normala kartesiska koordinatsystemet !

P.g.a. denna behändiga definition brukar man nästan alltid också beskriva plan i FCC- och BCC-gittren i det enkla kubiska systemet.

Här är några enkla exempel på plan och deras Miller-index i kubiska gitter:





2.5.1. Notation för att beteckna plan och riktningar

Det finns en väldefinierad notations-konvention för att beskriva gitterplan- och riktningar på basen av Miller-index.

Ett gitterplan betecknas med parenteser: (100) , (010) , (531)

En riktning i gittret betecknas med $[\]$: $[100]$, $[001]$, $[220]$ etc.

För plan där alla index är under 10 kan man alltså lämna bort kommatecknen. För att beteckna negativa index används istället för "-"-tecken ett sträck ovanför siffran, t.ex. $(\bar{1}00)$, $(5\bar{3}1)$

Men pga. den kubiska symmetrin är ju många av dessa ekvivalenta. Därför har man också infört en notation för att beteckna mängder av ekvivalenta gitterplan och gitterriktningar.

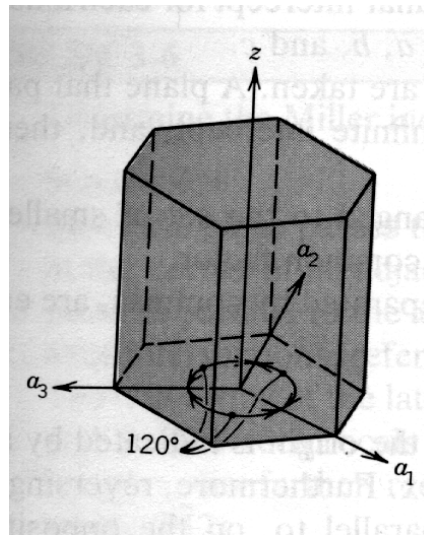
Notationen för en mängd ekvivalenta gitterplan är $\{ \}$. Alltså kan t.ex. (100) , $(0\bar{1}0)$, (001) , ... mm. planen alla betecknas som $\{100\}$ -planen.

På liknande sätt används för en mängd ekvivalenta gitterriktningar notationen $\langle \rangle$. Alltså kan t.ex. $[531]$, $[1\bar{3}5]$, $[513]$, ... mm. ritningarna kollektivt betecknas som $\langle 531 \rangle$ -riktningen.

2.5.2. Miller-index-konvention i hexagonala system

[Callister s. 41-42]

I hexagonala system leder den vanliga definitionen på Miller-index till att vissa kristallografiskt ekvivalenta riktningar inte har samma mängd av index. För att kringgå detta använder man ofta det s.k. Miller-Bravais-index-systemet som har fyra axlar i stället för tre. De tre första axlarna a_1 , a_2 och a_3 ligger i det hexagonala planet, med 120° vinkel mellan varann, medan det fjärde (c eller z) pekar uppåt som normalt.

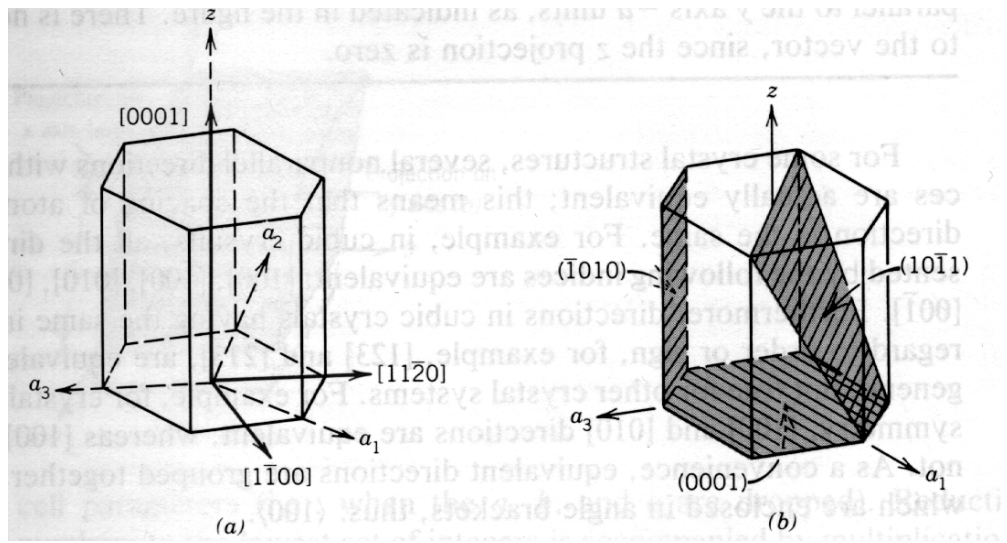


Konversionen från systemet $(hkl) \rightarrow (uvw)$ kan göras med ekvationerna

$$\begin{aligned}u &= \frac{n}{3}(2h - k) \\v &= \frac{n}{3}(2k - h) \\t &= -(h + k) \\w &= nl\end{aligned}$$

där faktorn n är ett heltal som kan behövas för reducera (uvw) till minsta möjliga grupp av heltal. På detta sätt blir t.ex. $[010]$ -riktningen $[\bar{1}2\bar{1}0]$ i det hexagonala systemet.

Här några övriga exempel på riktningar och plan i detta system:



2.6. Experimentella metoder för bestämning av kristallstruktur

[HH 1.4.2, AM s. 100-]

För att experimentellt bestämma en kristall-struktur kan man använda två typer av röntgenstrålning: **monokromatisk** eller **vitt** röntgenljus. Men monokromatiskt ljus menas röntgenljus som består (nästan) bara av en våglängd, och med vitt ljus röntgenstrålning som har ett brett, relativt flatt spektrum av våglängder.

Både typerna av ljus kan produceras på två olika sätt. Det **klassiska** sättet är att accelerera elektroner över en spänning av storleksordningen 30 kV, och låta dem kollidera med ett metall-prov så att de exciterar elektroner inne i provet så att de avger röntgenstrålning vid vissa karakteristiska emissionslinjer (K, L, M, ..., jfr. kursen Materiens Struktur). Genom att spela med valet av accelereringsspänning och metall är det möjligt att skapa nästan helt vitt eller nästan monokromatiskt ljus.

En annan, mycket nyare metod är att använda synkrotron-strålning. Med detta menas den uppbrömsningsstrålning (bremsstrahlung) som kommer då elektroner eller andra laddade partiklar deflekteras från sin bana i en cirkelformad synkrotron. Normalt kommer strålningen ur en synkrotron i ett brett

spektrum under någon maximi-våglängd som bestäms av synkrotronens radie och elektronernas energi. Men genom att använda en s.k. undulator kan man också få nästan monokromatisk strålning från en synkrotron.

Den stora fördelen med synkrotroner är dock att röntgen-intensiteten man får ut är flera storleksordningar högre än hos de klassiska röntgenkällorna. Detta har möjliggjort något av en revolution inom röntgenfysiken under de senaste ungefär 20 åren: nu kan man forska i en stor mängd saker som tidigare var omöjligt.

Vetenskaps-politik-parentes: Nuförtiden byggs flera synkrotroner enbart för att skapa synkrotronstrålning. Man bygger en elektronsynkrotron vars energi går upp kring kanske en GeV, och omger dess bana med tiotals s.k. "beamline":s. Vid varje beamline kan man typiskt göra ett experiment åt gången, och de designas för olika typs experiment. Synkrotronen och experimenten körs dygnet runt.

Att bygga en modern synkrotron kostar i giga-€-klassen, så det finns inte alltför många av dem. En av de bästa synkrotronerna i världen är ESRF, European Synchrotron Radiation Facility i Grenoble, som används mycket också av vår institution.

De flesta forskningsgrupper måste ansöka om tid för att få göra experiment vid en av dessa synkrotroner, och en normal röntgenfysikgrupp får sedan kanske 2-8 veckor tid i året för sina experiment. När de har tiden åker typiskt 2-4 forskare till synkrotronen och jobbar där dygnet runt i skift på 12-16 timmar per person.

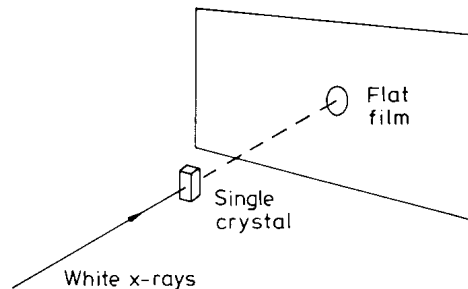
Ett ännu nyare koncept är att tillverka röntgenlasrar. I dessa så kallade "free electron lasers" används en linjäraccelerator för elektroner till att skapa en laser i röntgenområdet. Det ger pulserade röntgenstrålar med otroligt hög intensitet. Den kan vara så hög att provet som mäts exploderar, men före den gör det, kan man samla tillräckligt med data att bestämma dess struktur. Detta möjliggör bestämning av strukturen hos stora enskilda biomolekyler, även om de inte är i en kristall!

Det existerar en stor mängd sätt att göra röntgendiffraktions-experiment, men för bestämning för kristall-struktur är tre relativt enkla grundmetoder kanske de viktigaste och beskrivs kort här.

De är alla också relevanta för synkrotronmätningar.

2.6.1. Laue-bilder

Den historiskt första typen av röntgenmätning är den s.k. Laue-bilden. Den är konceptuellt mycket enkel: man belyser helt enkelt en **enhetskristall** med **vitt röntgenljus**:



Enligt Braggs eller Laues kriterium kommer nu konstruktiv interferens att ske bara för några bestämda våglängder, som motsvarar de reciproka gittervektorerna, och dessa kommer att spridas i någon viss riktning beroende på kristallens orientation i förhållande till den inkommande röntgenstrålen. Om man mäter i samma riktning som den dit strålen kommer, ser man en stor central punkt som kommer rakt från röntgenstrålning som gått rakt igenom, men sedan några svagare punkter runt kring den centrala punkten:

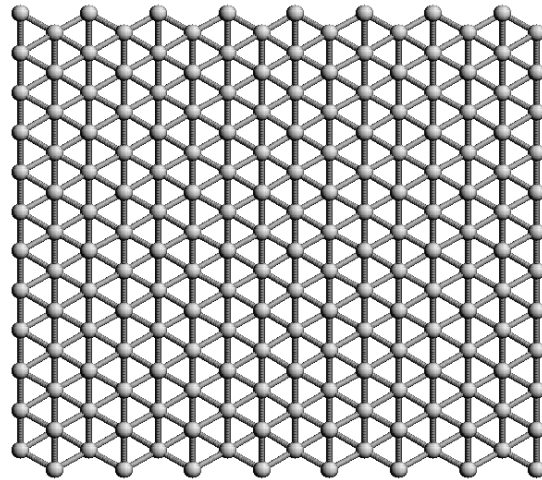


Dessa punkter är alltså inget annat än punkter i det reciproka gittret - man mäter alltså rakt det reciproka gittret med denna metod ! Och för att vektorerna i det reciproka gittret per definition har samma symmetri som själva kristallen, mäter man alltså direkt symmetrin i det underliggande gittret.

T.ex. bilden ovan är från en mätning av en kisel-kristall där kristallens $[111]$ -riktning är i samma riktning som röntgenstrålen. Man ser (speciellt från punkterna närmast den centrala) att spridningen har 3/6-faldig symmetri.

Nu kan de som minns att kisel har en kubisk diamant-struktur undra hur i all världen den kubiska

strukturen leder till 3 eller 6-faldig symmetri. Orsaken är att om man ser på diamant-strukturen från $[111]$ -riktningen har den visst 6-faldig symmetri:



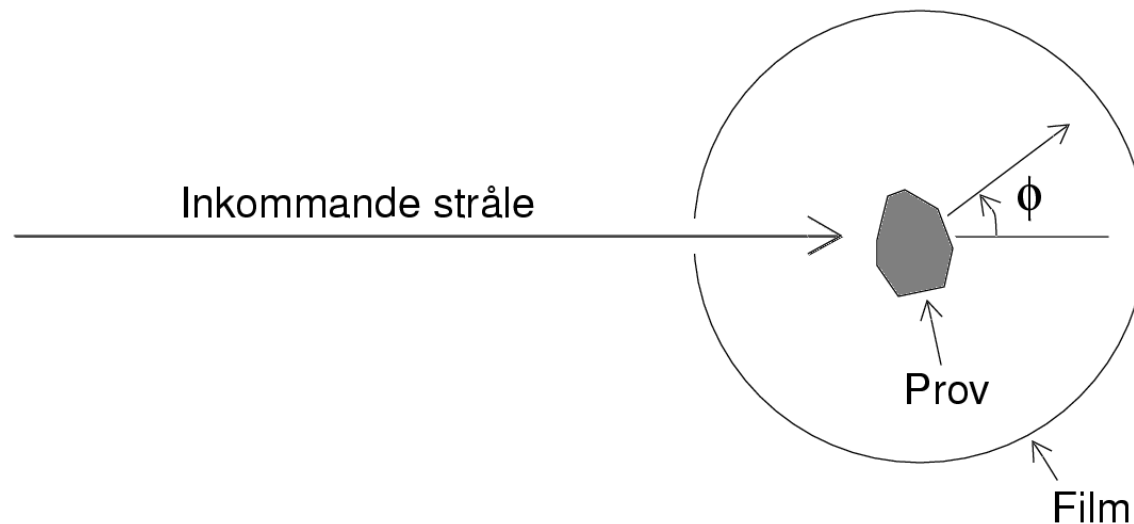
Laue-metoden kan alltså användas för att bestämma kristallstrukturen, men är också behändig för att mäta orienteringen av en enhetskristall som inte har uppenbart synliga makroskopiska kristallplan.

2.6.2. Roterande kristall-metoden

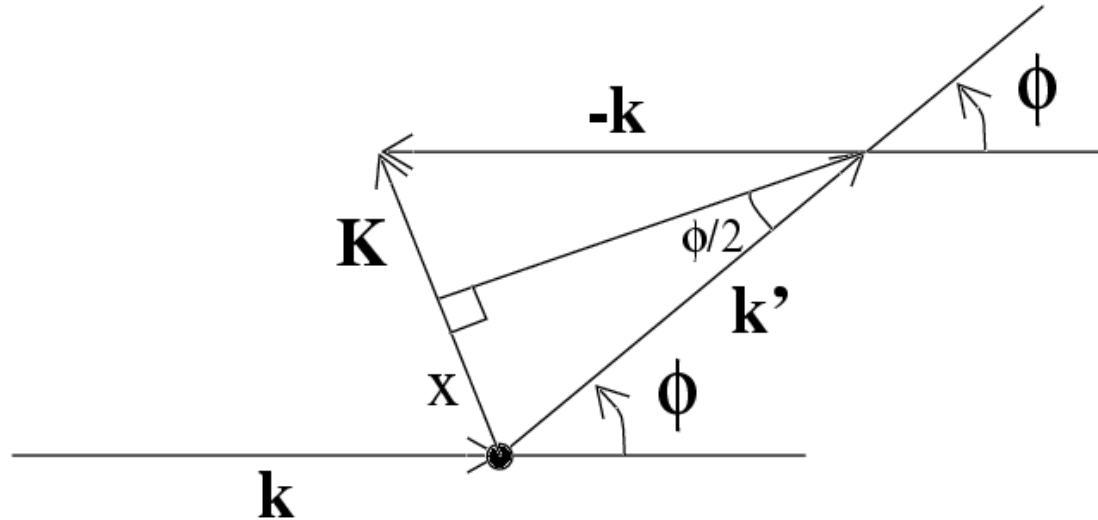
Om man belyser en **enhetskristall** med **monokromatiskt röntgenljus**, och ser på den i en godtycklig riktning, är det inte sannolikt att man ser något överhuvudtaget. Men om man roterar kristallen, kommer man för eller senare högst sannolikt att ha hitta något kristallplan som uppfyller Bragg-kriteriet. Typiskt omger man då kristallen med en film i cylinderform som är parallell med rotationsaxeln, och de resulterande diffraktions-punkterna kan analyseras för att lista ut kristallstrukturen.

2.6.3. Pulverbilder (“powder photograph”)

Ett annat sätt att försäkra sig om att man hittar Bragg-pikar för **monokromatiskt** röntgenljus är att ha ett **prov i pulverform**, där de enskilda pulverbitarnas orientering är helt slumpmässig. Om man nu belyser detta prov med röntgenljuset, kommer för varje vinkel θ som uppfyller Bragg-kriteriet säkert några av pulverbitarna ha just vinkeln θ mellan den inkommande röntgenstrålen och gitterplanen.



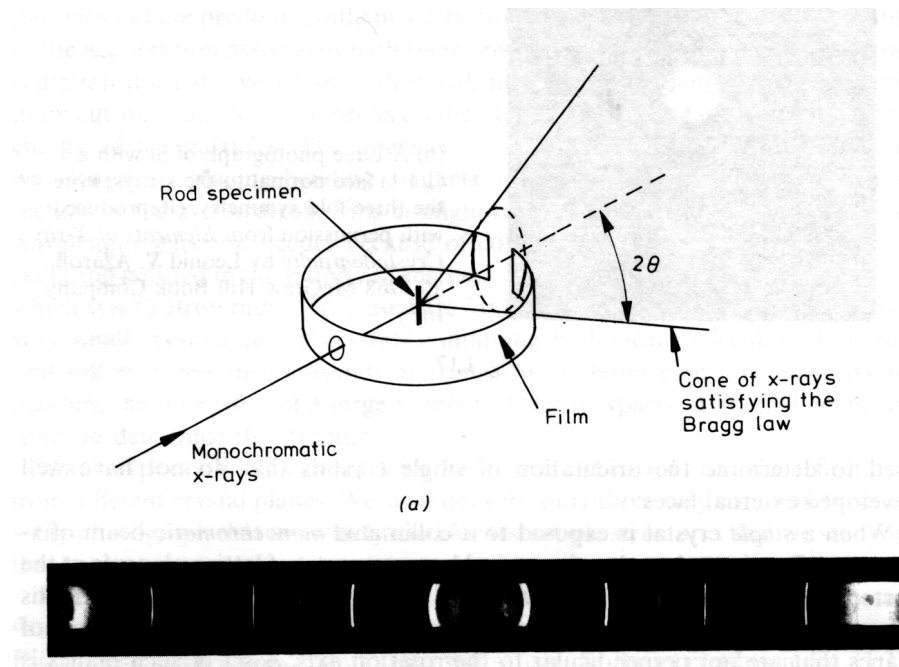
Man kan visa detta på följande sätt:



Enligt härledningen av Laue-kriteriet är ju en vektor i det reciproka gittret $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$. För att $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ är triangeln likbent, och man ser lätt att $x = k \sin \varphi/2$ och alltså

$$K = 2k \sin \varphi/2 \quad (9)$$

Man kommer nu alltså att mäta ett antal linjer i vissa vinklar i förhållande till den inkommande strålen:



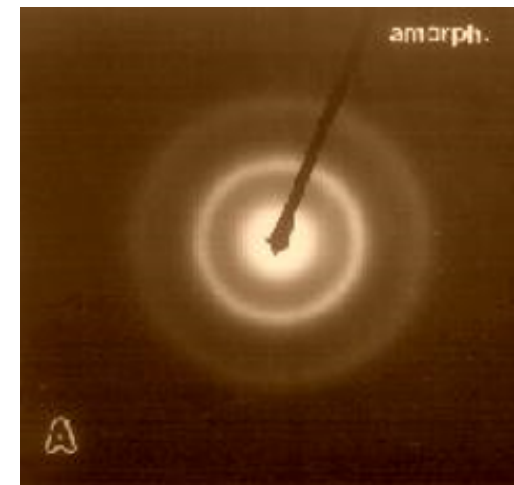
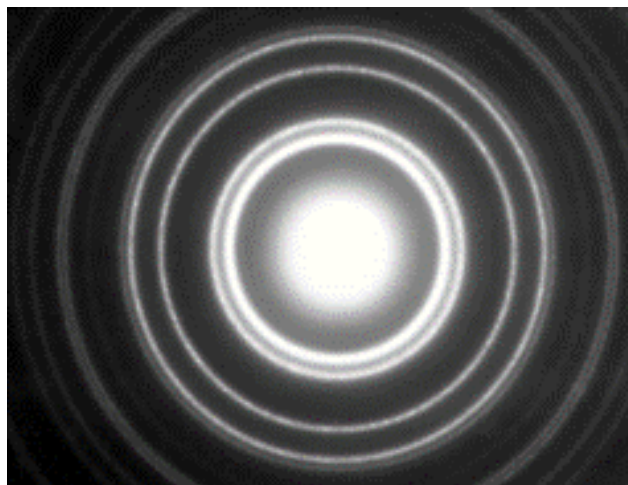
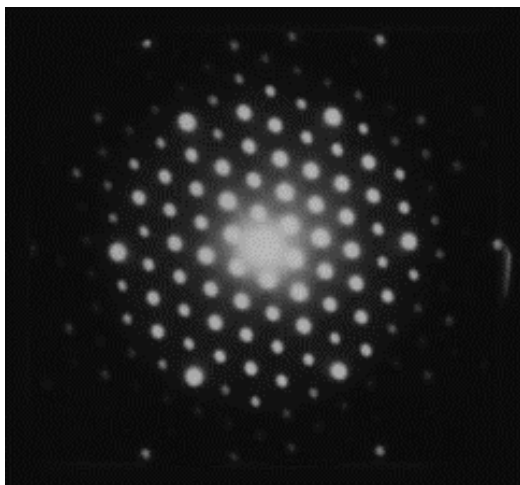
Positionen av dessa vinklar bestäms av ekvation 9 av våglängden ($\lambda = 2\pi/k$) på den inkommande strålningen, och längden K av de minsta vektorerna \mathbf{K} i det reciproka gittret \mathbf{G} av provet.

Detta är för övrigt just metoden som används i ett av ämnes-laborationsarbetena.

2.7. Bestämning av grundstrukturen i ett material

En kombination av det som beskrivits i de tidigare underkapitlen ger insikten att man kan använda ett diffraktionsmönster enkelt för att se huruvida ett material är enhets- eller mångkristallint, eller amorft.

Om den är enhetskristallint, får man alltså diskreta pikar. Fallet med ett mångkristallint prov (med slumpmässig kristallorientering) skall ju motsvara en pulverdiffraktionsbild, alltså ett mönster med ringar. Till slut, i ett amorft material är dessutom bindningsavstånden olika långa, vilket leder till ett mönster med diffusa (utspridda) ringar:



2.8. Diffraction från ett gitter med en bas

[HH 11.2.1, AM s. 104-]

Som ovan konstaterades, kan diffraktionsamplituden för ett antal atomer skrivas

$$A(\mathbf{K}) = \sum_i^N e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_i} \quad (10)$$

(den verkliga intensiteten som mäts är $I = |A|^2$) där \mathbf{r}_i är positionerna för atomerna. I ett Bravaisgitter gäller ju helt enkelt att atompositionerna $\mathbf{r} = \text{Bravais-gittrets vektorer } \mathbf{R}$, så diffraktionsamplituden A blir exakt det reciproka gittret.

Men i en kristall som består av ett gitter och en bas, är inte diffraktionsamplituden exakt ett Bravaisgitter. Men vi kan ju skriva koordinaterna för atomerna i ett godtyckligt gitter

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{R}_j + \mathbf{d}_l$$

där \mathbf{R} är de reciproka gittervektorerna och \mathbf{d} de N_l bas-vektorerna.

Nu kan amplituden skrivas

$$A(\mathbf{K}) = \left(\sum_j e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_j} \right) \times \left(\sum_l^{N_l} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{d}_l} \right) \quad (11)$$

vilket formellt kan också skrivas

$$A(\mathbf{K}) = (\text{summa över gitterpunkter}) \times (\text{summa över atomer i basen})$$

Den förra summan ger alltså ett av de normala reciproka gittren, som vi redan känner. Men denna summa "moduleras" nu av den s.k. **geometriska struktur-faktorn** $S_{\mathbf{K}}$,

$$S(\mathbf{K}) = \sum_l^{N_l} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{d}_l}. \quad (12)$$

som alltså kan inverka på styrkan av Bragg-pikarna för ett reciprokt gitter. I själva verket kan denna inverkan vara så stor att en Bragg-pik försvinner helt ! Detta beror på att atomerna i basen kan vara arrangerade så att de leder till perfekt destruktiv interferens vid någon Bragg-pik.

Detta illustreras bäst med ett par exempel.

Exempel 1: ett BCC-gitter betraktat som ett enkelt kubiskt gitter med en bas.

Som tidigare konstaterats, kan ett BCC-gitter med kubsidan a beskrivas som ett enkelt kubiskt gitter med en bas av $\mathbf{d}_1 = \mathbf{0}$ och $\mathbf{d}_2 = (a/2)(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})$. Nu är ju det reciproka gittret alltså också enkelt kubiskt, med en sidlängd av $2\pi/a$, och de reciproka gittervektorerna är $\mathbf{K} = 2\pi/a(h\mathbf{i} + k\mathbf{j} + l\mathbf{k})$.

Men strukturfaktorn är nu

$$S(\mathbf{K}) = 1 + e^{i\mathbf{K} \cdot (a/2)(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})}$$

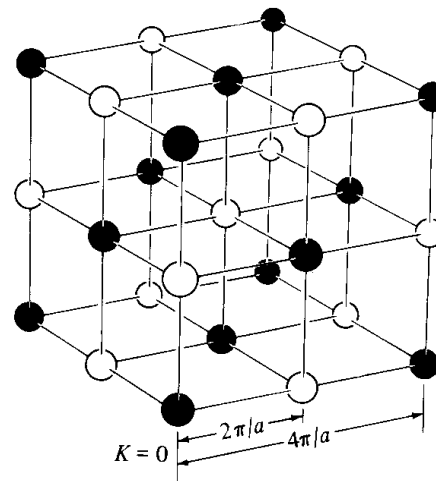
varur fås genom insättning av \mathbf{K}

$$S(\mathbf{K}) = 1 + e^{i\pi(h+k+l)} = 1 + (-1)^{h+k+l}$$

som är $= 0$ om $h + k + l$ är udda, $= 2$ om $h + k + l$ är jämnt. Alltså försvinner varannan Bragg-pik p.g.a. basen !

Sådana försvinnande pika kallas **förbjudna pika** eller **förbjudna reflektioner** ("forbidden reflections").

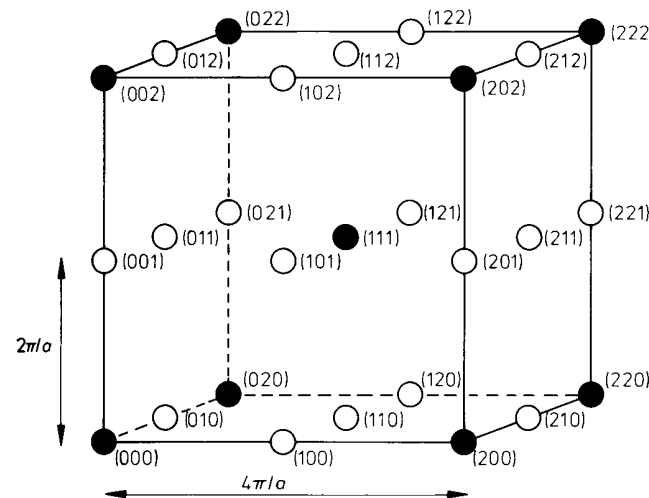
Nedan visas punkterna i det enkla kubiska reciproka gittret, men så att de vita cirklarna visar Bragg-pikar som kommer att försvinna för BCC-gittret:



Om man nu ser på de mörka cirklarna, inser man att de bildar ett FCC-gitter, vilket vi ju redan visste att är det reciproka gittret för BCC. Så man kan alltså ersätta ett gitter med ett annat som har en bas, bara man kommer ihåg att inkludera $S(\mathbf{K})$ i beräkningarna får man fortfarande rätt röntgendiffraktion.

Exempel 2: ett FCC-gitter betraktat som ett enkelt kubiskt gitter med en bas.

Med en helt liknande beräkning som ovan, kan man visa att strukturfaktorn S avviker från noll om och bara om h, k, l är alla udda eller alla jämna. Man får följande konstruktion:



där de mörka cirklarna visar vilka Bragg-pikar i det enkla kubiska gittret ännu existerar. De mörka cirklarna bildar ett BCC-gitter som sig bör.

Men denna bild visar också indexerna (hkl) för det enkla kubiska gittret vid pikarna. Detta är den överlägset vanligaste notationen för Bragg-pikar: men betecknar dem som gitterplan i ett enkelt kubiskt gitter, vilket ju är logiskt såtillvida att i Bragg-formuleringen sker spridningen just från gitterplan.

Vi ser alltså att t.ex. (100)-, (221)-, etc. Bragg-pikarna försvinner. _____

Exempel 3: ett diamantgitter.

Diamantgittret är ju ett FCC-gitter med en bas på $\mathbf{d}_1 = \mathbf{0}$ och $\mathbf{d}_2 = (a/4)(\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k})$. Det reciproka gittret för FCC är BCC med en cell-sida av $4\pi/a$. Om vi tar som primitiva vektorer för detta BCC-gitter

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{j} + \mathbf{k} - \mathbf{i}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{k} + \mathbf{i} - \mathbf{j}), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k})$$

blir strukturfaktorn för vektorerna $\mathbf{K} = (h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3)$.

$$S(\mathbf{K}) = 1 + e^{\frac{1}{2}i\pi(h+k+l)}$$

som är = 0 om $h + k + l$ är två gånger ett udda nummer, = $(1 \pm i)$ om $h + k + l$ är udda och = 2 om $h + k + l$ är två gånger ett jämnt nummer. Men notera att dessa index inte är de samma som i ett enkelt kubiskt gitter. I den enkla kubiska notationen blir villkoren:

$S = (1 \pm i)$ om h, k, l är alla udda

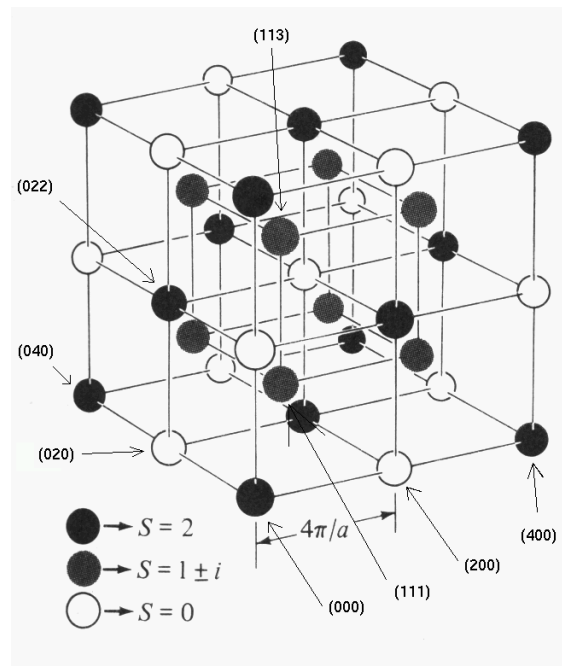
Annars om h, k, l är alla jämna:

$S = 0$ om $h + k + l$ är inte delbart med 4

$S = 2$ om $h + k + l$ är delbart med 4

Annars är $S=0$.

Om man nu ritar upp det reciproka BCC-gittret och tillämpar dessa villkor i den fås följande mönster. Den konventionella notationen för enkla kubiska gitter för några Bragg-pikar är utmärkt i bilden.



Vad lär vi oss härav - jo, att diamantgittret har liknande diffraktionsmönster som FCC utom att ännu mera pikar saknas. Det verkliga gittret är ju liknande som FCC utom att det finns fler atomer i det – så det reciproka gittret fungerar faktiskt reciprokt till det verkliga !

Sen är ännu en annan femma att i själva verket kan man mäta en mycket svag (222)-pik i kisel, trots att den i princip är förbjuden. Orsaken är att elektronfördelningen för atomer i de två delgittrena inte är helt symmetriskt, då de har en kovalent bindning mellan varann, så den destruktiva interferensen blir inte alldeles perfekt.

2.9. Atom-formfaktorn

En ytterliga komplikation måste ännu beaktas för att beskriva diffraktions-experiment. Alla ekvationer i detta kapitel hittills har strängt taget skrivits för diffraktion från punkter i ett gitter. För verkliga atomer visar det sig dock att mängden av röntgenspridning ännu dessutom beror på vilken typ av atom spridningen sker från. Olika atomer ger olika intensitet för spridningen för olika energier (våglängder) hos röntgenstrålen. Detta brukar betecknas med en atom-formfaktor $f_l(\mathbf{K})$, som alltså beror på atomens l typ. Om man beaktar den blir hela uttrycket för röntgenamplituden:

$$A(\mathbf{K}) = \left(\sum_j e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_j} \right) \times \left(\sum_l^{N_l} f_l(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{d}_l} \right) \quad (13)$$

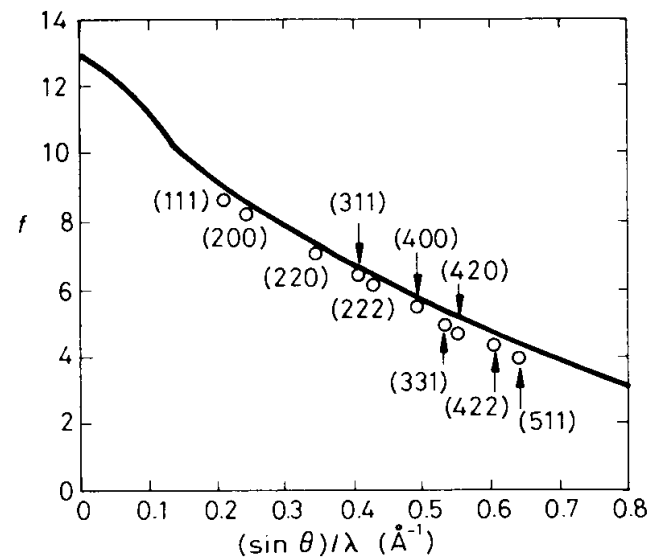
Atom-formfaktorn kan ungefärligt beräknas om man känner till varje atoms distribution av elektroner runt kärnan $\rho_l(\mathbf{r})$ genom att ta Fourier-transformationen av den:

$$f_l(\mathbf{K}) = -\frac{1}{e} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \rho_l(\mathbf{r})$$

Man kan tolka form-faktorn att vara ett mått på hur många elektroner en atom har och hur

utspridda de är från atomkärnan; p.g.a. att röntgenstrålarna sprids huvudsakligen från elektronerna kommer detta att påverka spridningen.

För aluminium ser mätta formfaktorer (cirklar) och en teoretisk förutspåelse ut på följande sätt:



Teorin är alltså inte helt perfekt. Men i praktiken finns det noggranna tabeller och anpassade analytiska uttryck ur vilket man kan få atom-form-faktorerna.

Vad har du åtminstone lärt dig i detta kapitel?

- Du känner till Bragg- och von Laue-formuleringarna av diffraktion, och vet hur de hänger ihop.
- Du förstår begreppet reciprokt gitter och kan behandla det matematiskt.
- Du känner till Miller-index och Miller-Bravais-index och kan använda dem.
- Du känner till de fyra beteckningssätten för gitterriktningar och -plan.
- Du vet principerna hur man mäter röntgenspektra.
- Du kan beräkna diffraktionsmönstret också från gitter med en bas.