



POZNÁMKA K VÝPOČTU STRUKTURNÍHO FAKTORU

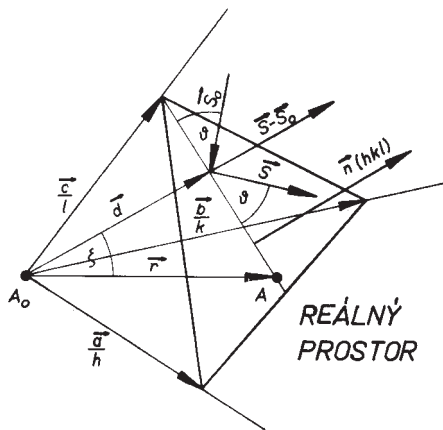
V. Pučálka

Suma všech amplitud rentgenového záření rozptýleného N atomy elementární buňky do směru \mathbf{s} je

$$F(\mathbf{s}) = \sum_{n=1}^N f_n \exp \left[\frac{2\pi i}{\lambda} (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{r} \right] \quad (1)$$

kde f_n je faktor atomového rozptylu atomu, jeho poloha je dána polohovým vektorem \mathbf{r} , \mathbf{s}_0 a \mathbf{s} jsou jednotkové vektory ve směru dopadajícího a rozptýleného záření a λ je vlnová délka monochromatického rentgenového záření. V případě geometrického uspořádání podle obr. 1 je vektor $\mathbf{s} - \mathbf{s}_0$ v dy kolmý na příslušnou strukturální rovinu (hkl) a velikost tohoto vektoru je

$$|\mathbf{s} - \mathbf{s}_0| = 2 \sin \vartheta \quad (2)$$



Obr. 1

Dále

$$(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{r} = 2r \sin \vartheta \cos \zeta \quad (3)$$

kde je úhel mezi polohovými vektory \mathbf{r} a $|\mathbf{s} - \mathbf{s}_0|$, ale také mezi vektory \mathbf{d} a \mathbf{r} a dále také mezi vektory \mathbf{r} a \mathbf{n} , kde \mathbf{n} je normálový vektor na strukturální rovinu (hkl). Vektor \mathbf{n} má ve vektorové analytické geometrii rozměr plochy.

Vektorovou rovnici strukturální roviny

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{r} - V = 0$$

lze odvodit z podmínky, že objem sestavený ze tří vektorů ležících v jedné rovině a neležících v jedné přímce je rovný nule:

$$\left[\begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ h \end{pmatrix} - \mathbf{r} \right] \left[\begin{pmatrix} \mathbf{b} \\ h \end{pmatrix} - \mathbf{r} \right] \left[\begin{pmatrix} \mathbf{c} \\ h \end{pmatrix} - \mathbf{r} \right] = 0 \quad (4)$$

\mathbf{a} , \mathbf{b} a \mathbf{c} jsou délky hran elementární buňky, h , k , l jsou Millerovy indexy příslušné strukturální roviny a objem V je objem elementární buňky:

$$V = [\mathbf{abc}] \quad (5)$$

Po úpravě dostaneme

$$\mathbf{r} [h(\mathbf{b} \times \mathbf{c}) + k(\mathbf{c} \times \mathbf{a}) + l(\mathbf{a} \times \mathbf{b})] = V \quad (6)$$

kde

$$\mathbf{n} = [h(\mathbf{b} \times \mathbf{c}) + k(\mathbf{c} \times \mathbf{a}) + l(\mathbf{a} \times \mathbf{b})] \quad (7)$$

je hledaný normálový vektor. Přepočtení na struktury s vyšší symetrií je elementární. Jedním z polohových vektorů je také vektor mezirovinné vzdálenosti \mathbf{d} , který je kolmý na strukturální rovinu, takže platí také

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{d} = nd \quad (8)$$

a pro výpočet mezirovinné vzdálenosti, který je vhodný pro všechny krystalografické soustavy máme

$$d = \frac{V}{n} \quad (9)$$

Absolutní hodnota vektoru \mathbf{n} je dána skalárním součinem $n^2 = \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}$. Nyní lze rovnici (3) upravit dále

$$\cos \zeta = \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}}{nr} \quad (10)$$

Polohový vektor \mathbf{r} má v obecné poloze atomu uvnitř elementární buňky rovnici

$$\mathbf{r} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c} \quad (11)$$

kde u , v a w jsou zlomkové (relativní) souřadnice v souřadném systému tvořeném hranami elementární buňky \mathbf{a} , \mathbf{b} a \mathbf{c} , které svírají úhly α , β a γ . Další úpravou dostaneme z (10), že

$$\cos \zeta = \frac{d(hu + kv + lw)}{r} \quad (12)$$

a

$$(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) \cdot \mathbf{r} = 2d(hu + kv + lw) \sin \vartheta \quad (13)$$

Strukturální faktor roviny hkl pro rozptyl ve směru daném vektorem \mathbf{s} závisí tedy na úhlu rozptylu takto:

$$F(\mathbf{s}) = \sum_{n=1}^N f_n \exp \left[\frac{4\pi i}{\lambda} (hu + kv + lw) \sin \vartheta \right] \quad (14)$$

V maximu $F_m(\mathbf{s})$ je splněna Braggova podmínka

$$2d \sin \vartheta = \lambda$$

a strukturální faktor má v místě maxima pikovou hodnotu

$$F_m(\mathbf{s}) = \sum_{n=1}^N f_n \exp [2\pi i (hu + kv + lw)] \quad (15)$$

Intensita difraktovaného záření do libovolného směru \mathbf{s} je pak dána součinem strukturálního faktoru a jeho komplexně sdružené hodnoty. Atomový rozptylový faktor udávaný v tabulkách musí být aproximován spojitou funkcí.

