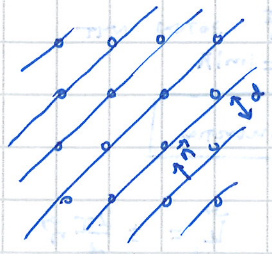
1. KÄÄNTEISHILA

TARKASTELLAAN MIELIVALTAISTA HILATASOPERHETTÄ, JONKA VIEREKKÄISTEN HILATASOJEN VÄLINEN ETÄISYYS ON d JA TASOJEN YKSIKKÖNORMAALI ON $\vec{n}$

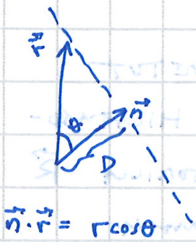


ETSITÄÄN NORMAALIN $\vec{n}$ SUUNTAISIA TASOALTOJA $\propto e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ $(\vec{k}\cdot\vec{n} = \pm k)$.

TÄLLAISEN TASOALLON VAIHE SIIS JOKAISESSA NORMAALIN $\vec{n}$ MUKAISESSA TASOSSA ON SAMA, JOTEN MERKITÄÄN $\vec{k} = \alpha\vec{n}$

VÄLINÄYTES

YKSIKKÖNORMAALI JA JOKIN TASON PISTEESEEN OSOITTAVA VEKTORI $\vec{r}$ ANTAVAT TASON MUODOSSA



$\vec{n}\cdot\vec{r} = D$, JOSSA D ON TASON KOHTISUORA ETÄISYYS ORIGOSTA.

$\vec{n}\cdot\vec{r} = r\cos\theta$

KAHDELLE SAMANSUUNTAISELLE TASOLLE 1, 2 SIIS

$\vec{n}\cdot\vec{r}_1 = D_1$ JA TASOJEN VÄLINEN ETÄISYYS

$\vec{n}\cdot\vec{r}_2 = D_2$

$$d = D_2 - D_1 = \vec{n}\cdot(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$$

KAHDELLE HILATASOPERHEEN VIEREKKÄISELLE TASOLLE SIIS

$$\left.\begin{aligned} \vec{k}\cdot\vec{r}_1 &= \alpha\vec{n}\cdot\vec{r}_1 = \alpha D_1 \\ \vec{k}\cdot\vec{r}_2 &= \alpha D_2 \end{aligned}\right\} \quad \vec{k}\cdot(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = \alpha(D_2 - D_1) = \underline{\underline{\alpha d}}$$

ESITETÄÄN SITTEN LISÄEHTO, ETTÄ TASOALTOMME ANTAVAT <u>SAMAN</u> VAIHEEN <u>KAIKISSA</u> HILATASOPERHEEN TASOISSA.

ELI MILLE TAHANSA VEKTORILLE $\vec{r}_i$ JA $\vec{r}_j$, JOTKA OVAT HILATASOPERHEEN TASOISSA:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j}$$

VALITAAN SITTEN VIEREKKÄISISSÄ HILATASOISSA OLEVAT $\vec{r}_1$ JA $\vec{r}_2$

$$\Rightarrow e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_1} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_2} \Leftrightarrow e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_2-\vec{r}_1)} = 1$$

$$\Leftrightarrow e^{i\alpha d} = 1 \Rightarrow \alpha d = 2\pi m \quad m \in \mathbb{Z}$$

JOSTA SIIS $\vec{k} = \alpha\vec{n} = \frac{2\pi}{d} m \,\vec{n}$ $\Big|$ $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ JOTEN NYT $d = |m|\lambda$

TULKINTA: $\boxed{\text{$d$ ON SIIS $\vec{k}$:N AALLONPITUUDEN MONINKERTA}}$

JA LYHYIN EHDON TOTEUTTAVA AALTOVEKTORI ON $\vec{k}_1 = \pm \frac{2\pi}{d}\vec{n}$
(SUURIN λ!)

SUUNNALLA EI TÄSSÄ TARKASTELUSSA OLE OIKEASTI VÄLIÄ.

MERKITÄÄN LUOMIAMME TASOAALTOJA $\vec{k} = \vec{G}$

PALATAAN SITTEN HILAN PARIIN. KOSKA ÄSKEN RAKENNETUT TASOAALLOT ANTAVAT SAMAN VAIHEEN JOKAISESSA HILATASO-PERHEEN TASOSSA, SIIRTO MILLÄ TAHANSA HILAVEKTORILLA $\vec{R}$ EI MUUTA TASOAALLON VAIHETTA. TÄLLÖIN ON VOIMASSA

$$e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} = e^{i\vec{G}\cdot(\vec{r}+\vec{R})} \Leftrightarrow \boxed{e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}} = 1} \quad (*)$$

TOISTAMALLA SAMA TASOAALTOJEN LUOMINEN KAIKILLE HILATASOPERHEILLE SAAMME (ÄÄRETTÖMÄN) JOUKON $\{\vec{G}\}$, JONKA KAIKILLE $\vec{G}$ PÄTEE YHTÄLÖ (*) YLLÄ.

NYT KAHDELLE MIELIVALTAISELLE $\vec{G}_1$, $\vec{G}_2$

$$e^{i(\vec{G}_1\pm\vec{G}_2)\cdot\vec{R}} = \underbrace{e^{i\vec{G}_1\cdot\vec{R}}}_{1}\,\underbrace{e^{i\vec{G}_2\cdot\vec{R}}}_{1} = 1$$

VEKTORI $\vec{G}_1 \pm \vec{G}_2$ KUULUU MYÖS SIIS JOUKKOON $\{\vec{G}\}$, JOKA TÄLLÖIN ON SULJETTU YHTEEN- JA VÄHENNYSLASKUISSA.

$\Rightarrow$ $\boxed{\text{AALTOVEKTORIT $\vec{G}$ MUODOSTAVAT HILAN K-AVARUUDESSA, KÄÄNTEISHILAN.}}$

2. KÄÄNTEISHILAN ALKEISVEKTORIT

SUORAN HILAN ALKEISVEKTORIT $\vec{a}_i$ $(i=1,2,3)$

VÄITE: KÄÄNTEISHILAN VIRITTÄÄ TÄLLÖIN VEKTORIKOLMIKKO $\vec{b}_i$ $(i=1,2,3)$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \longleftarrow$$

HUOM! $\vec{a}_i$ VIRITTÄMÄN SÄRMIÖN TILAVUUS. KUUTIOLLISELLE HILALLE ($\vec{a}_i$ ORTOGONAALISET, $|\vec{a}_i| = a$) TÄMÄ ON a^3.

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$$

HUOMATAAN ENSIN, ETTÄ $\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$.

KÄÄNTEISHILAN VEKTORI $\vec{G}$ VOIDAAN KIRJOITTAA $\vec{b}_i$ KOKONAISLUKUKERTOIMIEN AVULLA

$$\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \quad ; \quad h,k,l \in \mathbb{Z}$$

TÄLLÖIN $(\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \; ; \; n_i \in \mathbb{Z})$

$$\vec{G}\cdot\vec{R} = 2\pi \underbrace{(hn_1 + kn_2 + ln_3)}_{\in \mathbb{Z}}$$

JA $e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}} = 1$,

JOTEN VEKTORIT $\vec{b}_i$ TODELLA VIRITTÄVÄT KÄÄNTEISHILAN.

ESIM YKSINKERTAINEN KUUTIOLLINEN HILA (SIMPLE CUBIC, SC)

$$\vec{a}_1 = a\vec{e}_x, \quad \vec{a}_2 = a\vec{e}_y, \quad \vec{a}_3 = a\vec{e}_z$$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{a^2 \vec{e}_x}{a^3} = \frac{2\pi}{a}\vec{e}_x$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\vec{e}_y, \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\vec{e}_z$$

JOTEN (SUORAN) SC-HILAN KÄÄNTEISHILA ON MYÖS SC-HILA, JONKA HILAVAKIO ON $\frac{2\pi}{a}$.

ESIM PINTAKESKINEN KUUTIOLLINEN HILA (FACE-CENTERED CUBIC, FCC)

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{e}_y + \vec{e}_z), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{e}_z + \vec{e}_x), \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{e}_x + \vec{e}_y)$$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \cdot \frac{a^2}{4} \frac{(\vec{e}_z + \vec{e}_x) \times (\vec{e}_x + \vec{e}_y)}{a^3/4} = \frac{2\pi}{a}(\vec{e}_y - \vec{e}_x + \vec{e}_z)$$

$$= \frac{4\pi}{a}\left[\frac{1}{2}(\vec{e}_y + \vec{e}_z - \vec{e}_x)\right]$$

JA

$$\vec{b}_2 = \frac{4\pi}{a}\left[\frac{1}{2}(\vec{e}_z + \vec{e}_x - \vec{e}_y)\right]$$

$$\vec{b}_3 = \frac{4\pi}{a}\left[\frac{1}{2}(\vec{e}_x + \vec{e}_y - \vec{e}_z)\right]$$

VRT. VIIKON 4 LUENTOPIAT!

FCC:N KÄÄNTEISHILA ON SIIS TILAKESKINEN KUUTIOLLINEN HILA (BODY-CENTERED CUBIC, BCC), JONKA HILAVAKIO ON $\frac{4\pi}{a}$.

HUOMIOITA KÄÄNTEISHILASTA

- BRILLOUININ VYÖHYKE ON KÄÄNTEISHILAN ALKEISKOPPI.
- 1. BRILLOUININ VYÖHYKE ON KÄÄNTEISHILAN WIGNER-SEITZ-ALKEISKOPPI.
- KAIKKIEN BRILLOUININ VYÖHYKKEIDEN TILAVUUS ON SAMA.

3. MILLERIN INDEKSIT

KOSKA HILATASOJEN JA KÄÄNTEISHILAN VEKTOREIDEN VÄLILLÄ ON KIINTEÄ YHTEYS, VOIDAAN HILATASOJEN SUUNTAUTUMINEN ILMAISTA KYSEISSÄ OLEVIEN $\vec{G}$ AVULLA.

OLKOON $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ LYHYIN VALITUN HILATASOPERHEEN NORMAALIN SUUNTAINEN KÄÄNTEISHILAN VEKTORI (PISIN AALLONPITUUS).

HILATASOJEN SUUNTAUTUMINEN VOIDAAN TÄLLÖIN KIRJOITTAA NOTAATIOLLA (hkl), JOSSA KOKONAISLUKUJA h, k, l KUTSUTAAN MILLERIN INDEKSEIKSI.

(<u>HUOM!</u> h, k, l RIIPPUVAT VALITUISTA $\vec{b}_i$!)

KUUTIOLLISET HILAT KUVATAAN MILLERIN INDEKSIEN MÄÄRITTÄMISESSÄ MUODOSSA: SC + KANTA. (SC, BCC, FCC, TIMANTTI YMS.)

TÄLLÖIN SIIS $\vec{a}_i$ JA $\vec{b}_i$ OVAT KESKENÄÄN ORTOGONAALISET JA X-, Y- JA Z-AKSELIEN SUUNTAISET (KÄTEVÄÄ!)

<u>CAVEAT</u>: SEURAAVA KÄSITTELY <u>EI</u> SIIS PÄDE EI-KUUTIOLLISILLE HILOILLE.

MILLERIN INDEKSIEN MÄÄRITTÄMINEN TASON KAUTTA.

HILATASO KUULUU JATKUVAAN TASOON $\vec{G} \cdot \vec{r} = A$ SOPIVALLA A. TÄMÄ TASO LEIKKAA ALKEISVEKTORIEN $\vec{a}_i$ SUUNTAISET AKSELIT PISTEISSÄ $x_1\vec{a}_1$, $x_2\vec{a}_2$, $x_3\vec{a}_3$, JOSSA x_i MÄÄRÄYTYVÄT EHDOSTA

$$\vec{G} \cdot (x_i \vec{a}_i) = A$$

KOSKA

$$\left.\begin{aligned} \vec{G}\cdot\vec{a}_1 &= 2\pi h \\ \vec{G}\cdot\vec{a}_2 &= 2\pi k \\ \vec{G}\cdot\vec{a}_3 &= 2\pi l \end{aligned}\right\} \quad x_1 = \frac{A}{2\pi h} \quad x_2 = \frac{A}{2\pi k} \quad x_3 = \frac{A}{2\pi l}$$

TÄLLÖIN SIIS h, k, l SUHTEET SAADAAN x_i AVULLA

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

HUOMAA VIELÄ, ETTÄ TULEE OLLA $h, k, l \in \mathbb{Z}$

MERKINTÄTAVOISTA

- TASO : (hkl)
- TASOA VASTAAN KOHTISUORA SUUNTA : $[hkl]$

LISÄKSI

- HILATASOPERHEET, JOTKA OVAT SYMMETRIAN PERUSTEELLA EKVIVALENTIT : $\{hkl\}$

  ESIM KUUTIOLLISESSA HILASSA

  $\{100\} = (001), (010), (100), (\bar{1}00)$ JNE.

- SAMA EKVIVALENTEILLE SUUNNILLE $\langle hkl \rangle$

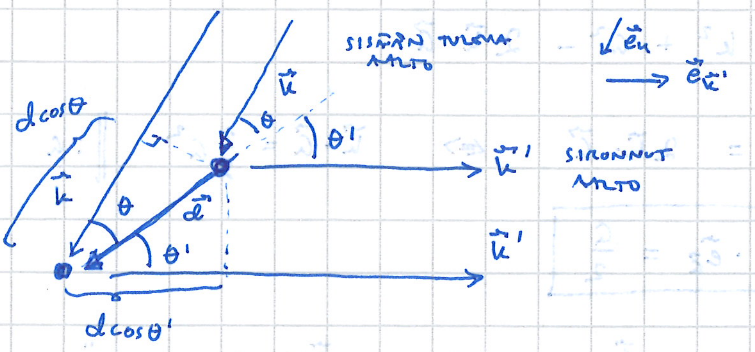
  ESIM

  $[100], [010], [00\bar{1}]$ JNE. $\rightarrow \langle 100 \rangle$.

---

4. VON LAUEN SIRONTAEHTO

- ATOMIT TÄYDELLISILLÄ HILAPAIKOILLAAN, SIROTTAVAT SÄTEILYÄ KAIKKIIN SUUNTIIN
- SIRONTAHUIPUT (INTENSITEETTI) HAVAITAAN VAIN SUUNNISSA, JOISSA KAIKKI INTERFERENSSI ON KONSTRUKTIIVISTA.



$$\boxed{\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{e}_k}$$
ELASTINEN SIRONTA, JOTEN $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$

SIRONTA ON TÄYSIN KONSTRUKTIIVISTA VAIN JOS AALLON KULKEMA YLIMÄÄRÄINEN MATKA $(d\cos\theta + d\cos\theta')$ ON SÄTEILYN AALLONPITUUDEN MONINKERTA. ELI:

$$d\cos\theta + d\cos\theta' = \vec{d}\cdot\vec{e}_k - \vec{d}\cdot\vec{e}_{k'} = \vec{d}\cdot(\vec{e}_k - \vec{e}_{k'}) = m\lambda \quad ; m \in \mathbb{Z}$$

KERROTAAN YHTÄLÖN KAKSI OIKEANPUOLEISINTA TERMIÄ $\frac{2\pi}{\lambda}$:LLA ($|\vec{k}| = |\vec{k}'|$)

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

EHDON TULEE OLLA VOIMASSA KAIKILLE ATOMIPAREILLE. MIKÄ ON $\vec{d}$? JOKIN HILAVEKTORI $\vec{R}$!

$$\Rightarrow \quad \vec{R}\cdot(\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi m \quad \forall \vec{R}$$

TÄMÄ VOIDAAN KIRJOITTAA MYÖS

$$\boxed{e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}} = 1}$$

(NÄYTTÄÄKÖ TUTULTA?)

SIRONNEIDEN AALTOJEN INTERFERENSSI ON SIIS TÄYSIN KONSTRUKTIIVISTA VAIN JOS

$$\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G} \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}}$$

VON LAUEN SIRONTAEHTO

TOINEN NÄKÖKULMA

$$\vec{k}' - \vec{k} = \vec{G} \iff \vec{k} - \vec{k}' = -\vec{G} = \vec{G}'$$

($\vec{G}$:N ETUMERKILLÄ EI TÄSSÄ OIKEASTI VÄLIÄ!)

NYT SIIS $|\vec{k}'| = k = |\vec{k} - \vec{G}'|$

NELIÖIDÄÄN TÄMÄ PUOLITTAIN

$$k^2 = k^2 + G^2 - 2\vec{k}\cdot\vec{G}$$

$$\iff G^2 = 2\vec{k}\cdot\vec{G} \iff \vec{k}\cdot\vec{G} = \frac{1}{2}G^2 \quad \| : G$$

$$\iff \boxed{\vec{k}\cdot\vec{e}_G = \frac{G}{2}}$$

" $\vec{k}$:N PROJEKTIO $\vec{G}$:LLE ON PUOLET $\vec{G}$:N PITUUDESTA "

MITÄ TÄMÄ TARKOITTAA?

LAUEN EHTO ON VOIMASSA VAIN JOS $\vec{k}$:N PÄÄTEPISTE ON TASOSSA, JOKA ON KOHTISUORA PUOLITTAJA $\vec{G}$:LLE. (TÄLLAISTA TASOA KUTSUTAAN <u>BRAGGIN TASOKSI</u>.)

[KATSO LUENTODIAT]

NYT ON SAATU EHTO SILLE, MISSÄ SUUNNASSA SIRONTAA HAVAITAAN. ENTÄ SIRONNAN INTENSITEETTI?

5. SIRONNAN INTENSITEETTI

MITÄ OIKEASTAAN ILMAISIMILLA NÄKYY, MIHIN HAVAITTU INTENSITEETTI ON VERRANNOLLINEN?

ESIM.

SÄHKÖMAGNEETTINEN SÄTEILY $\quad I \propto |\vec{E}|^2$

NEUTRONIT $\quad I \propto |A|^2$ (TODENNÄKÖISYYS HAVAITA NEUTRONI)

VÄLINÄYTÖS: FERMIN KULTAINEN SÄÄNTÖ ANTAA VAKIOTAHDIN (TS. TRANSITIOILLE YKSIKKÖAJASSA) MUUTOKSELLE ENERGIAN OMINAISTILASTA TOISEEN JONKIN HÄIRIÖN VAIKUTUKSESTA

ALKUTILA $|1\rangle$, JOKA ON ALKUPERÄISEN HAMILTONIN OPERAATTORIN OMINAISTILA.

AJASTA RIIPPUMATON HÄIRIÖ $\hat{H}'$, MUUTOS TILAAN $|2\rangle$

TRANSITIOTODENNÄKÖISYYS YKSIKKÖAJASSA $|1\rangle \to |2\rangle$

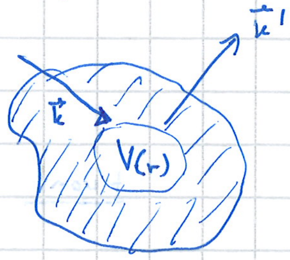
$$T_{1\to 2} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle 2|\hat{H}'|1\rangle|^2 \rho_E$$

$\uparrow$ TILATIHEYS $\left(\frac{dn_E}{dE}\right)$

NYT ELASTISEN SIRONNAN TAPAUKSESSA $\left(E(\vec{k}) = E(\vec{k}')\right)$

$$T_{\vec{k}\to\vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \vec{k}' | V(\vec{r}) | \vec{k} \rangle \right|^2 \delta\left(E(\vec{k}) - E(\vec{k}')\right)$$

HÄIRIÖ; POTENTIAALI, JOKA SIROTTAA AALLON TILASTA TOISEEN



JA

$$\langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle = \underbrace{\int d^3\vec{r}\, e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}}\, V(\vec{r})}$$

$\sim$ SIRONTAPOTENTIAALIN FOURIER-MUUNNOS

KITEISELLE MATERIAALILLE VOIMME KIRJOITTAA

$$\vec{r} = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{HILAVEKTORI}}}{\vec{R}} + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{KANTA}}}{\vec{x}}$$

$$\Rightarrow \quad \langle \vec{k}' | V | \vec{k} \rangle = \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{R}} \int_{\text{ALKEIS-KOPPI}} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot(\vec{R}+\vec{x})} V(\vec{R}+\vec{x})\, d^3\vec{x}$$

PERIODINEN, $V(\vec{R}+\vec{x}) = V(\vec{x})$

$$= \frac{1}{L^3} \left[\sum_{\vec{R}} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{R}} \right] \underbrace{\left[\int_{\text{ALKEIS-KOPPI}} e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{x}} V(\vec{x})\, d^3\vec{x} \right]}_{\text{RAKENNETEKIJÄ } S(\vec{k}'-\vec{k})}$$

POIMII VAIN TERMIT $\vec{k}'-\vec{k} = \vec{G}$

$\vec{k}'-\vec{k} = \vec{q}$ (YLEISESTI)
NK. SIRONTAVEKTORI.
NYT TULEE OLLA $\vec{q} = \vec{G}$.

NYT SIIS TRANSITIOTAAJUUS / YKSIKKÖAIKA $\Gamma_{\vec{G}} \propto |S(\vec{G})|^2$,
JOTEN MYÖS MITATULLE INTENSITEETILLE

$$\boxed{I_{\vec{G}} \propto |S(\vec{G})|^2}$$

VOIDAAN MERKITÄ MYÖS $I_{(hkl)} \propto |S(hkl)|^2$

JOTEN ERI SUUNTIEN INTENSITEETTIEN SUHTEET

$$\frac{I(hkl)}{I(h'k'l')} = \frac{|S(hkl)|^2}{|S(h'k'l')|^2}$$

<u>HUOM!</u> TÄMÄ PÄTEE VAIN YKSIKITEISELLE MATERIAALILLE.
JOS NÄYTE ON MONIKITEINEN (TYYPILLISEMPÄÄ) TAI
PULVERIA, TILANNE ON HIEMAN MONIMUTKAISEMPI.
KTS. $\boxed{\text{SIMON } 4.3.2}$

6. RÖNTGENSIRONNASTA

SIRONTA TAPAHTUU ENSISIJAISESTI ELEKTRONEISTA JA TÄLLÖIN SIRONTAPOTENTIAALI ON VERRANNOLLINEN ELEKTRONITIHEYTEEN.

APPROKSIMAATIO: $$V(\vec{x}) = \sum_j V_j(\vec{x}-\vec{x}_j)$$

V_j: SIRONTAPOTENTIAALI ATOMILLE j

LISÄKSI $$V_j(\vec{x}-\vec{x}_j) \propto Z_j \, g(\vec{x}-\vec{x}_j)$$

Z_j: ATOMIN j ELEKTRONIEN LUKUMÄÄRÄ

g: LYHYEN KANTAMAN ($\sim$ Å) FUNKTIO; "LIHAVA DELTAFUNKTIO"

$$\Rightarrow S(\vec{k}) = \sum_j \int_{\text{ALKEISKOPPI}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} V_j(\vec{x}-\vec{x}_j)\, d^3\vec{x}$$

MERKITÄÄN $\vec{x}' = \vec{x}-\vec{x}_j$

$$\Rightarrow S(\vec{k}) = \sum_j f_j(\vec{k})\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_j}$$

f_j: MUOTOTEKIJÄ, $\int_{\text{ALKEISKOPPI}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}'} V_j(\vec{x}')\, d^3\vec{x}'$

KUVAA SITÄ, MITEN TIETTY ATOMI SIROTTAA SÄTEILYÄ.

HUOMIOITA

- $f_j \sim Z_j$ JOTEN SIRONTA ON VOIMAKKAAMPAA RASKAAMMISTA ALKUAINEISTA, HEIKKOA KEVYISTÄ.
- JOS $Z_i \approx Z_j$ ATOMEITA ON VAIKEA EROTTAA TOISISTAAN.
- $f_j(\vec{k})$ ON YLEISESTI KULMARIIPPUVA.

JOS HILAVEKTORIT OVAT ORTOGONAALISET (ESIM. KUUTIOLLISET HILAT)

$$S(hkl) = \sum_j f_j \, e^{i2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)}$$

ESIM

BCC = SC + KANTA $(0,0,0)$, $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ [YKSIKÖISSÄ HILAVAKIO a]

$$\Rightarrow S(hkl) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{ATOMITYYPPI}}}{f_\alpha} + f_\alpha \underbrace{\left(e^{i\pi h} e^{i\pi k} e^{i\pi l}\right)}_{(-1)^{h+k+l}}$$

$$f_\alpha \left(1 + (-1)^{h+k+l}\right) = \begin{cases} 0 & \text{JOS } h+k+l \text{ PARITON} \\ 2f_\alpha & \text{— " — PARILLINEN} \end{cases}$$

ESIMERKKI VALINTASÄÄNNÖISTÄ / "PUUTTUVISTA HEIJASTUKSISTA".

[KTS. LUENTODIAT]

MUTTA ESIMERKIKSI $CsCl$

$$S(hkl) = f_{Cs} + f_{Cl} (-1)^{h+k+l}$$

ERI SUURET!

YLEISESTI

SAMAN HILATYYPIN RAKENTEILLA ON SAMAT PUUTTUVAT HEIJASTUKSET KANNAN ATOMIEN LUKUMÄÄRÄSTÄ HUOLIMATTA.

MUTTA KANTA VOI JOHTAA MYÖS MUIHIN PUUTTUVIIN HEIJASTUKSIIN.

$$S(hkl) = S^{HILA}_{(hkl)} \cdot S^{KANTA}_{(hkl)}$$

TÄMÄ ILMAN MUOTOTEKIJÖITÄ, VAIN VAIHETEKIJÄT!
(KTS. SIMON 14.2.2)

ESIM. ZnS

$$S(hkl) = \underbrace{\left[1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(l+k)}\right]}_{\text{HILA}} \cdot \underbrace{\left[f_{Zn} + f_S \, e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}\right]}_{\text{KANTA}}$$

7. NEUTRONISIRONNASTA

SIRONTA PÄÄOSIN YTIMISTÄ, $V(\vec{x}) = \sum_j b_j \, \delta(\vec{x}-\vec{x}_j)$

"YDINSIRONTAPITUUS"

$$\Rightarrow \quad S(\vec{q}) = \int_{\text{ALKEIS-KOPPI}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} V(\vec{x})\, d^3\vec{x} = \sum_j b_j \, e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}_j}$$

b_j VAIHTELEE YTIMESTÄ TOISEEN (ISOTOOPIT!), MUTTA KAIKILLA ALKUAINEILLA ~ YHDEN KERTALUOKAN SISÄLLÄ (VRT. RÖNTGENSIRONTA).

[KATSO LUENTODIAT]

ELASTINEN SIRONTA → RAKENTEET
EPÄELASTINEN SIRONTA → DYNAMIIKKA (KTS. SIMON 14.4.2)