

PHYS-C0240 Materiaalifysiikka (5op), Kevät 2019

Emppu Salonen
Martti Puska
Kristoffer Simula

Luento 5, torstai 16.5.2019
OSA 2: Sirona kidehilasta

Aiheet tällä viikolla

- Hilatasot ja hilatasoperheet
- Käänteishila ja Brillouin'n vyöhykkeet
- Millerin indeksit
- Sirontateoria (esitetään pohjautuen Röntgen-sirontaan):
 - Braggin ja Lauen sirontaehdot
 - Puuttuvat heijastukset, valintasäännöt
- Sirontakokeet: Röntgen-säteet, elektronit, neutronit, atomit



Aalto University
School of Science

Sironta kidehilasta

Osaamistavoitteet

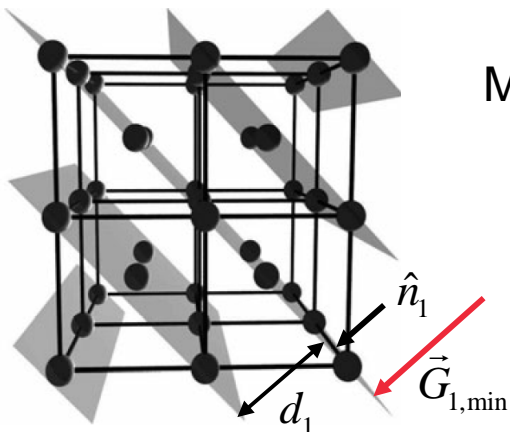
- Osaat selittää ja johtaa kiteiselle materiaalille aaltojen sironnan konstruktivisen interferenssin ehdot (Braggin ja Lauen muotoilut).
- Osaat määrittää rakennetekijän $S(hkl)$ ja sironnan valintasäännöt (puuttuvat heijastukset) kuutiollisille kiderakenteille.
- Osaat soveltaa oppimaasi pulverinäytteiden spektrien tulkintaan.
- Osaat selittää mitä perustavanlaatuisia (= fysikaalisia) ja käytännön mittauksiin liittyviä eroja ja samankaltaisuuksia on röntgen-, neutroni-, elektroni- ja atomisironnalla.

Sironta kiderakenteista

- Aiemmin: Fononit ja elektronitilat kiteissä ovat aaltoja ja niille on käytetty 1D malleja.
- Seuraavaksi tarkastellaan 3D kiteeseen tulevia ja siellä siroavia aaltoja: röntgensäteily, hiukkassäteily (elektronit, neutronit, atomit).
- Paljon yhteistä fysiikkaa kiteiden fononi- ja elektronitilojen kanssa. Kaikissa tapauksissa tarkastellaan hilarakenteita ja sovelletaan käännteishilan käsitettä liikemäärävaruudessa.

Mitä tarvitsemme tänään käänteishiloista?

Hilatasot ja hilatasoperheet



KH:n vektorit \mathbf{G} toteuttavat

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

Mielivaltainen hilavektori

Lyhin tasoperhettä vastaava KH:n vektori

$$\vec{G}_{1,\min} = \pm \frac{2\pi}{d_1} \hat{n}_1$$

Hilan alkeisvektorit

$$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$$

Suunnat hilasta!

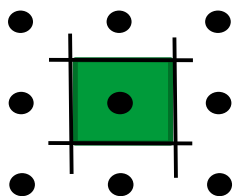
KH:n alkeisvektorit

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

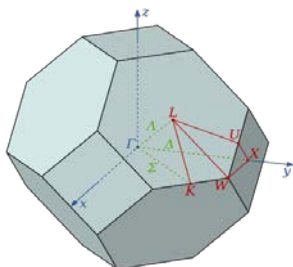
KH:n vektorit

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

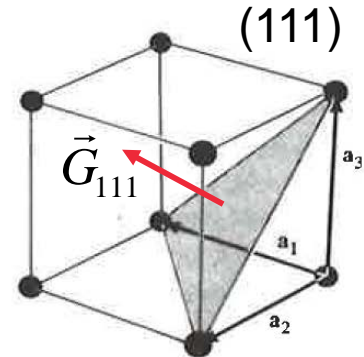
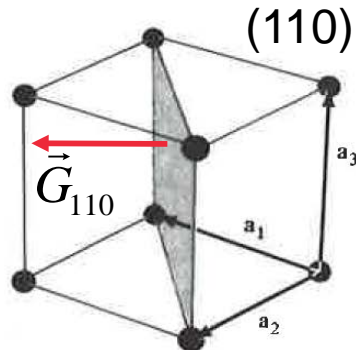
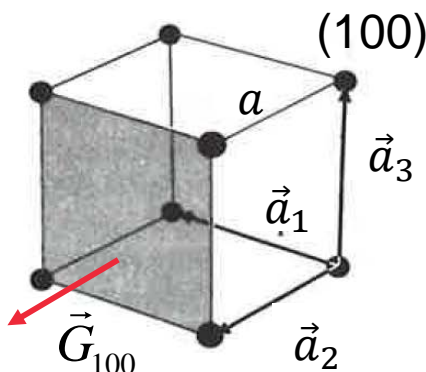
1. Brillouin'n vyöhyke = KH:n Wigner-Seitz -koppi



FCC

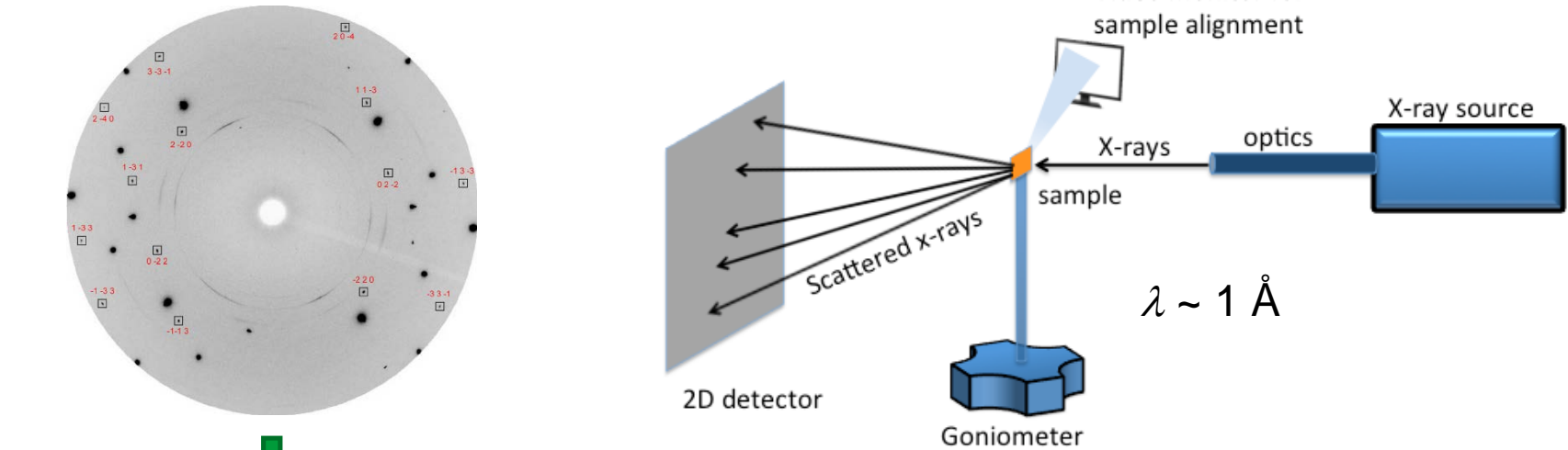


Kuutiollisten kiteiden tasojen Millerin indeksit (hkl)

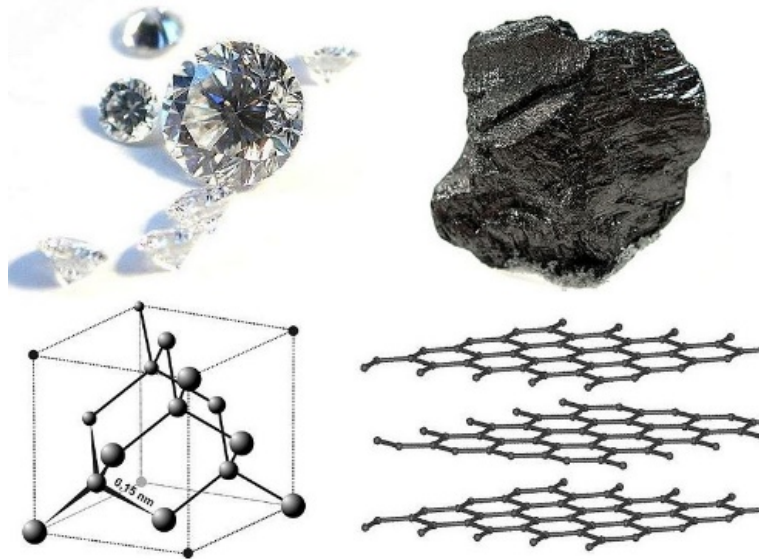


Sirontateoria

Johdanto: Röntgensironta



Mittaukset tuottavat sironnan intensiteetti-*piikit* tietyissä suunnissa.

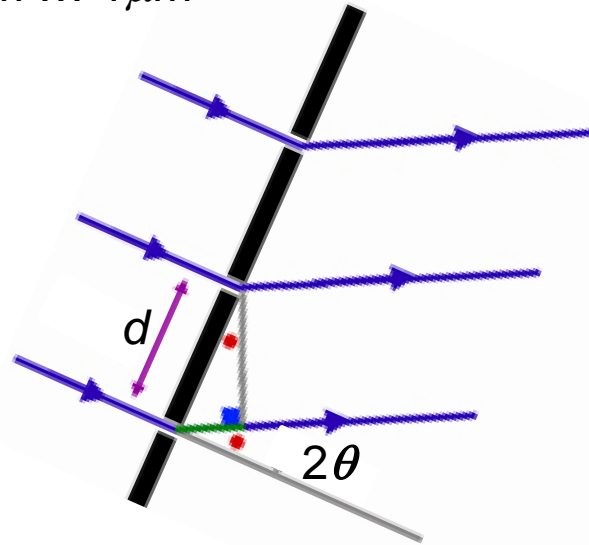


Vertaamalla teoreettisiin ennusteisiin piikien paikoista saadaan materiaalin kidehila ja hilavakio tarkasti määritettyä.

Näkyvän valon sironta viivahilasta

Valon aallonpituus λ
Hilavakio d
Taitekulma 2θ

$\lambda \sim 100 \text{ nm} \dots 1 \mu\text{m}$



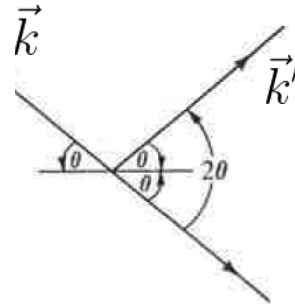
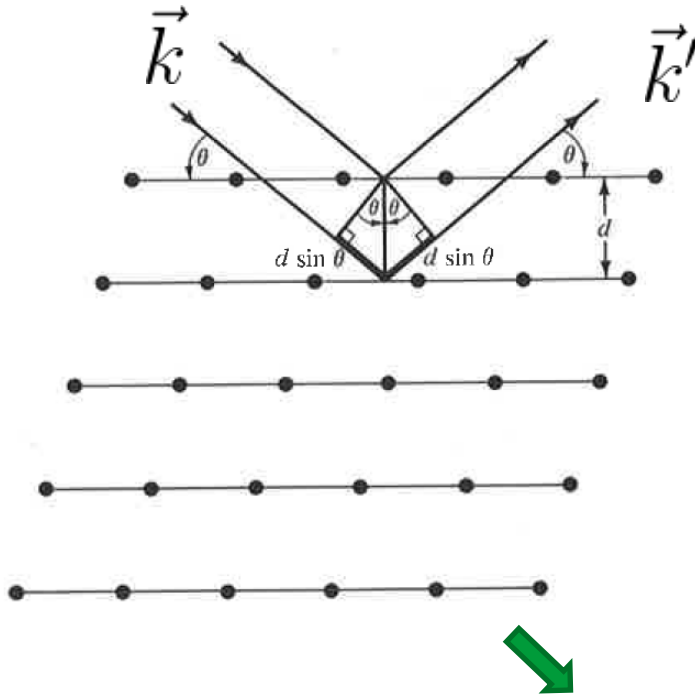
Vierekkäisten säteiden
matkaero $d \sin 2\theta$

Intensiteettimaksimit näkyvät kun

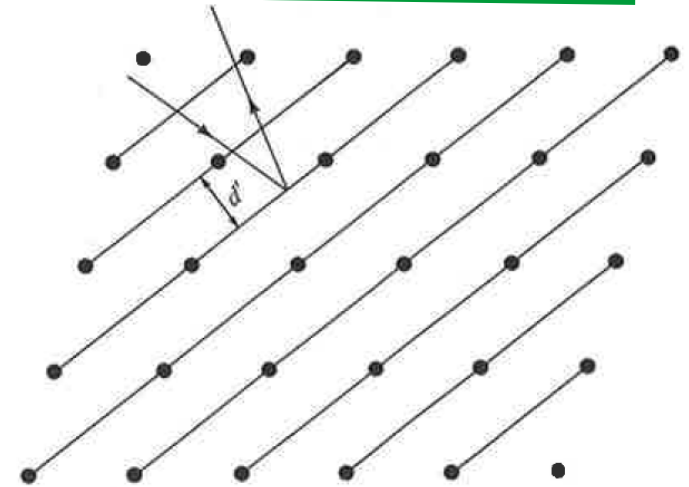
$$d \sin 2\theta = m\lambda \quad , \quad m \in \mathbb{Z}$$

Braggin sironta kidetasoista

Aallon sironta kahdesta tasosta



Useita hilatasoperheitä



Useita d-arvoja ja heijastussarjoja

Intensiteettimaksimit näkyvät kun

$$\underline{2d \sin \theta = m\lambda}, \quad m \in \mathbb{Z}$$

Bragg: Interferenssin oltava konstruktivista!

Sironnan Laue-ehto

Kaksi sirottajaa,
väli = vektori \vec{r}

Tuleva tasoaalto, aaltov. \vec{k}
Heijastunut \vec{k}'

Elastinen sironna
 $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$

Matkaero aallon osien välillä:

$$\Delta r = \Delta r_1 - \Delta r_2 = r(\cos \theta_1 - \cos \theta_2)$$

Intensiteettimaksimi kun

$$r(\cos \theta_1 - \cos \theta_2) = m\lambda$$

$$k(\cos \theta_1 - \cos \theta_2)r = 2\pi m$$

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

Kidehila

$$\vec{r} = \vec{R}$$

Konstruktivinen interferenssi
sironnoille kaikista hilapisteistä

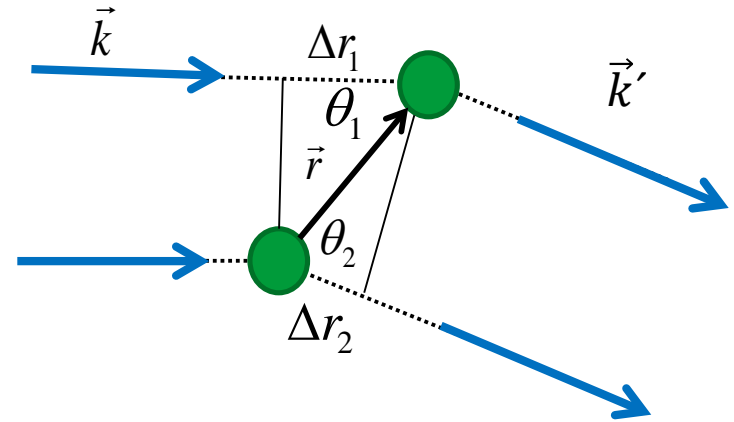
$$(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R} = 2\pi m \Leftrightarrow e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}} = 1$$

Voimassa kaikille
hilavektoreille

Laue-ehto

$$\vec{k} - \vec{k}' = \vec{G} \in \text{KH}$$

Laue: Kideliikemäärä säilyy!



Sironnan Laue-ehto, toinen näkökulma

→ Bragg & Laue & Miller relaatio

KH:n vektori

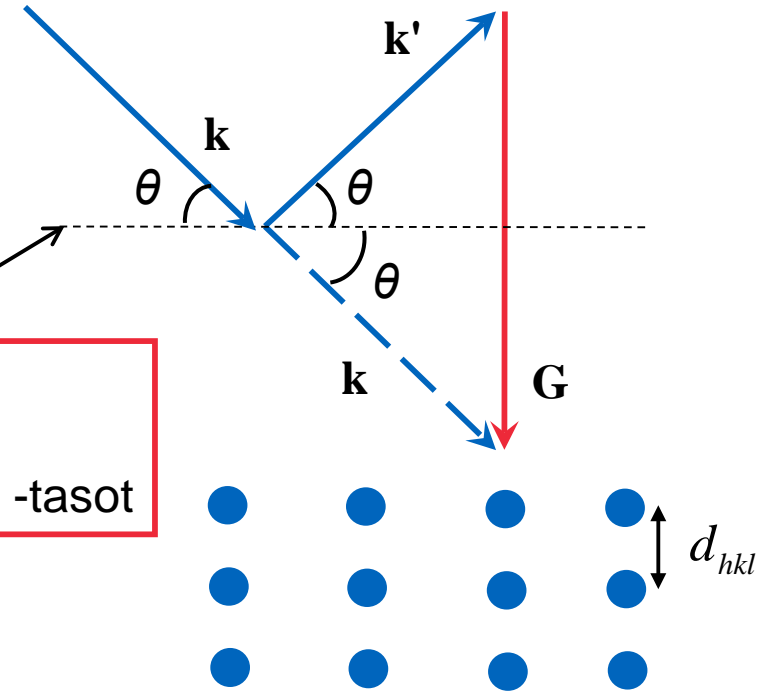
$$\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3, \quad h, k, l \in \mathbb{Z}$$

→ $\vec{G} \perp (h, k, l)$ -tasot

$$|\vec{G}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

Vektorin \mathbf{G} puolittaa \mathbf{k} -avaruudessa Braggin taso $\parallel (h, k, l)$ -tasot

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



Laue

$$|\vec{k} - \vec{k}'| = 2k \sin \theta = |\vec{G}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$$

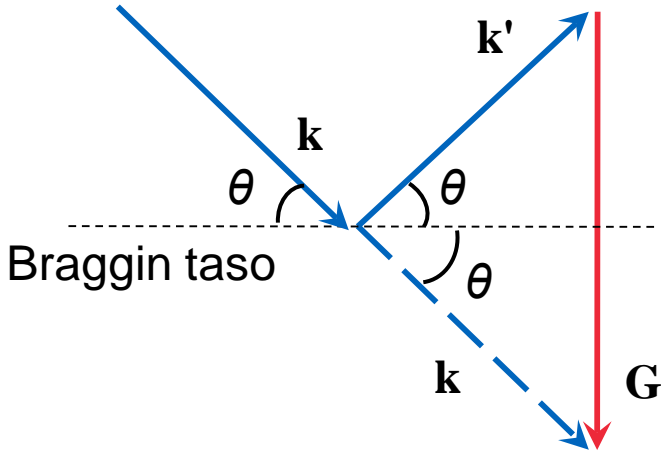
$$m\lambda = 2d \sin \theta$$

$m\mathbf{G}$ on myös KH:n vektori

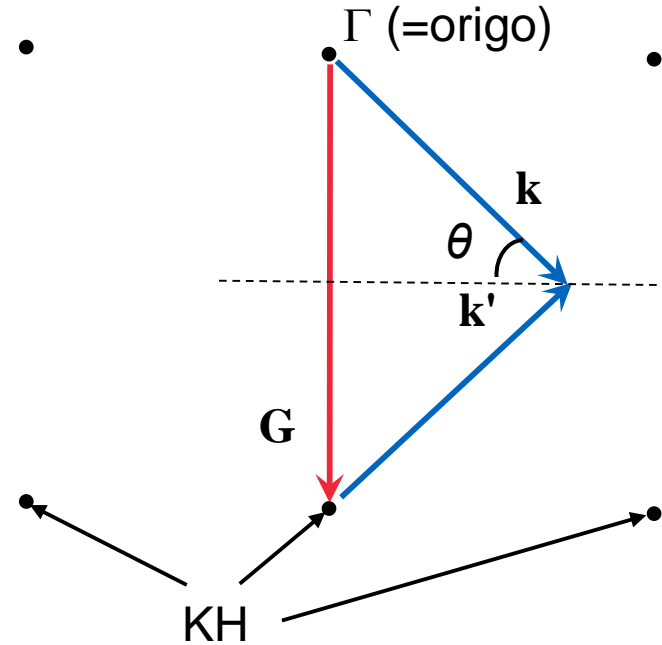
Sironnan Laue-ehto, toinen näkökulma

Laue

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



Tulevan ja sironneen aallon \mathbf{k} -vektorit ovat jollain Braggin tasolla



Braggin tasot puolittavat KH:n vektorit ja ovat kohtisuorassa niitä vastaan. Ne muodostavat Brillouin'in vyöhykkeiden reunat.

Pohdintaa sironnasta

- 1) Mitä oikeastaan siroaa?
- 2) Mistä sironta tapahtuu? Kuinka laajasta tilavuudesta? Mitä eri paikoista siroaa? Kuinka näytteen koko vaikuttaa?
- 3) Miksi sironta voi olla elastista?
- 4) Mitä sironnassa välittömästi ja myöhemmin sen jälkeen tapahtuu?
- 5) Mikä määrää sironneen aallon intensiteetin?
- 6) Mitä fysiikan ilmiöitä tai lakeja Braggin ja Lauen formuloinnit korostavat?
- 7) Mitä muita ilmiöitä havaitaan röntgensäteiden ja materian vuorovaikutuksessa?

Pohdintaa sironnasta kiteestä

Q: Mitä oikeastaan siroaa?

A: Tasoaalto, joka liittyy röntgensäteilyyn tai hiukkasiin (de Broglie -aallonpituus) kuten neutronit, elektronit ja atomit. Myös kenttien ajamat kidehilan fononit ja johtavuuselektronit siroavat.

Q: Mistä sironta tapahtuu? Kuinka laajasta tilavuudesta? Mitä eri paikoista siroaa?
Kuinka näytteen koko vaikuttaa?

A: Tulevan aallon osien sironta tapahtuu teoriassa koko Bravais-hilasta. Mutta varsinkin hiukkassäteily ei tunkeudu syvälle aineeseen. Ääreellinen hila aiheuttaa sirontapiikkien avaruuskulman leviämisen. Fysikaalisesti sironta tapahtuu kannan atomeista aallon vuorovaikuttaessa elektronien (Röntgen), ytimien (neutronit) tai molempien (atomit, neutronit) kanssa. Neutronit vuorovaikuttavat spininsä kautta myös elektroniverhon mahdollisen magneettisen momentin kanssa.

Q: Miksi sironta voi olla elastista?

A: Sironnassa hila saa rekyylienergiaa, mutta suuren massan takia vain äärimmäisen vähän.

Pohdintaa sironnasta kiteestä

Q: Mitä sironnassa välittömästi ja myöhemmin sen jälkeen tapahtuu?

A: Voidaan ajatella: Jokainen sirottaja on palloaallon lähde. Kaukana näytteestä palloaallot muodostavat tasoaaltoja jotka interferoivat keskenään, joskus konstruktivisestikin.

Q: Mikä määrää sironneen aallon intensiteetin?

A: Intensiteetin määrää vuorovaikutus aallon ja sirottajan välillä. Röntgen: sähkökentän ja atomin värähtelevien (virittyneiden) elektronien dipolimomentin vuorovaikutus, kulmariippuva, saadaan elektronitiheydestä, nollakulmalla verrannollinen ionin elektronien lukumäärään. Neutronit: lyhyen kantaman vahva vuorovaikutus, kuvataan sirontapituuden avulla.

Q: Mitä fysiikan ilmiöitä tai lakeja Braggin ja Lauen formuloinnit korostavat?

A: Bragg: konstruktivinen interferenssi, Laue: kideliikemäärän säilyminen

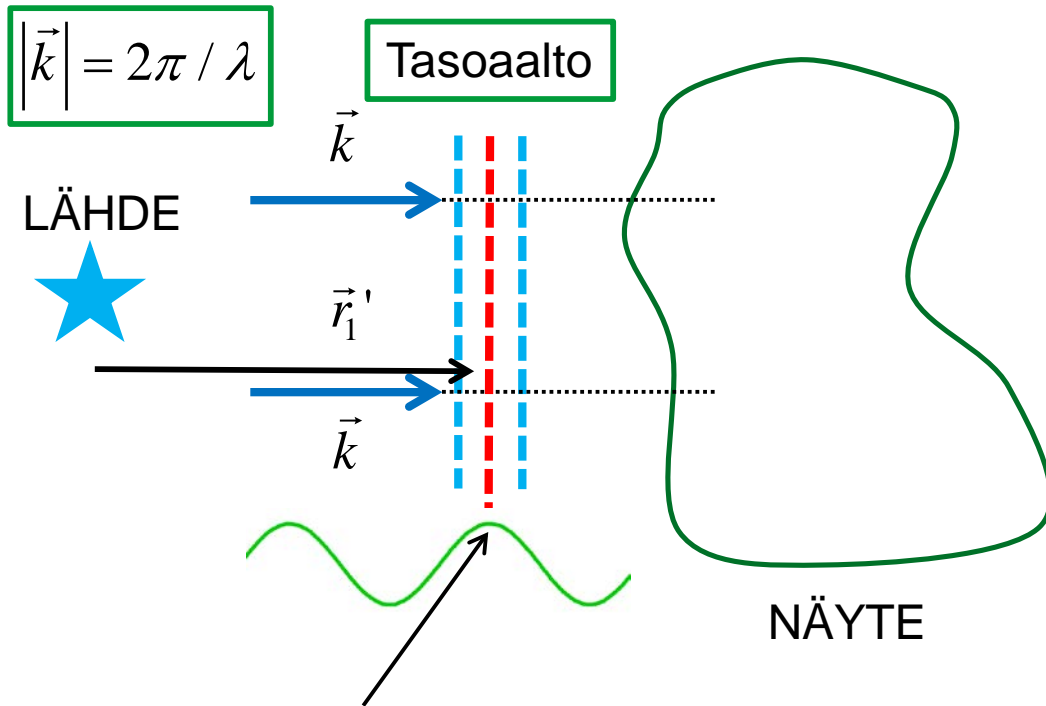
Q: Mitä muita ilmiöitä havaitaan röntgensäteiden ja materian vuorovaikutuksessa?

A: Röntgenfluoresenssi: Elektroni tippuu aukkoon sisäkuorella ja pehmeämpää röntgensäteilyä emittoituu. Röntgenabsorptio: Irrotetaan elektroni sisäkuorelta ja a) se päättyy tyhjälle elektronikuorelle (mitataan prosessin intensiteettiä röntgenenergian funktiona). b) Elektroni irtoaa ja mitataan sen energiaa (XPS).

Sirontateoriaa (Röntgensäteille)

Aikariippuva kuvaus

- Hilapisteessä usean atomin kanta (ja atomeilla elektroniverho)
- Sironnan intensiteetti



Säteilyn sähkökenttä

Reaaliosa

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r}_1' - \omega t_1')}$$

Poikittainen aaltoliike

Seurataan tietyn aallonharjan siirtymistä ajan funktiona

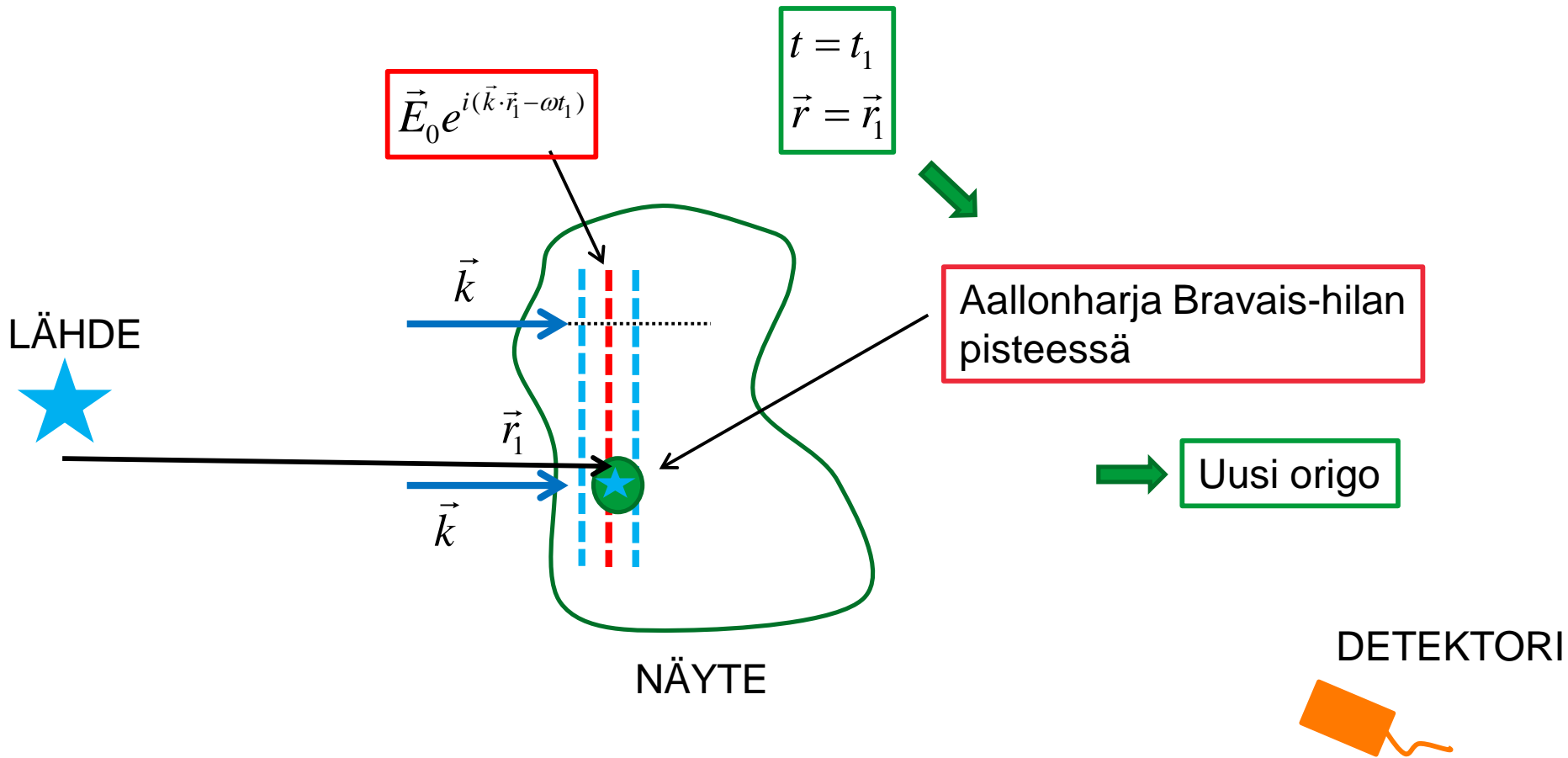
$$t = t_1'$$
$$\vec{r} = \vec{r}_1'$$

Aallonharja matkalla näytteeseen

DETEKTORI



Sirontateoriaa



Sirontateoriaa

$$t = t_2'$$

$$\vec{r} = \vec{r}_2'$$

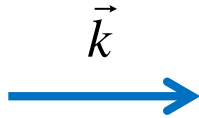


Tapahtunut sironta origossa ja hilapisteessä **R**

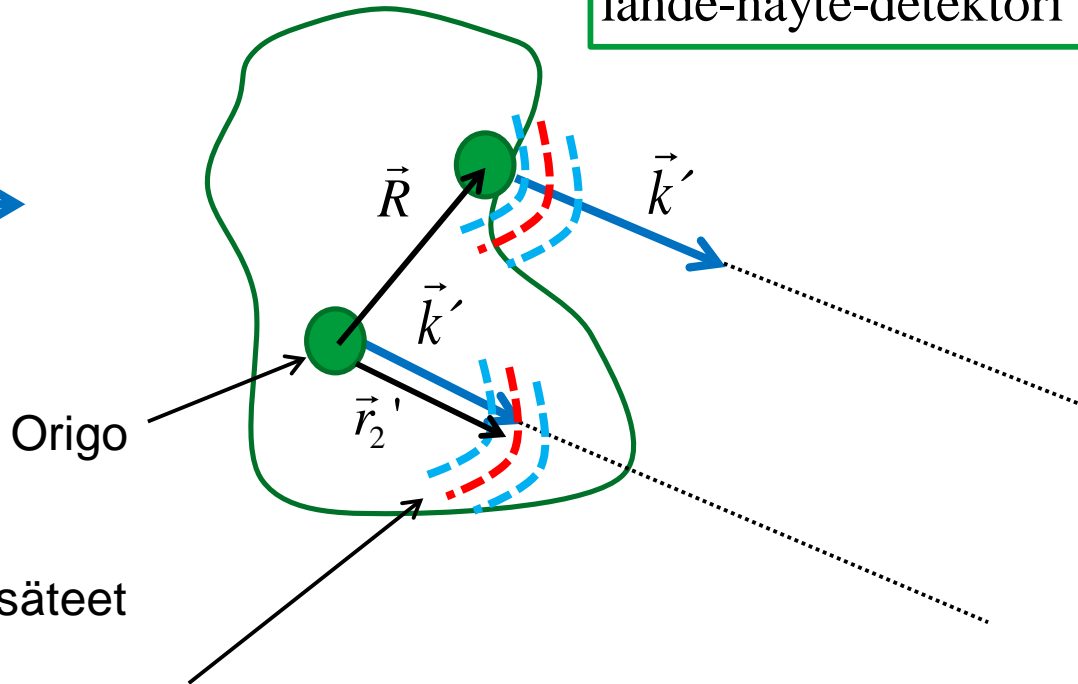
Pituusskaalat

$$R \sim \text{hilavakio} \ll \text{Näyte} \sim 1 \text{ cm} \ll \text{lähde-näyte-detektori -välimatkat} \sim 1 \text{ m}$$

LÄHDE
★



NÄYTE



Aallon osat eli säteet palloaaltoja

$$E_S(\vec{r}_2', t_2') \propto E_0 \frac{e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r}_2' - \omega t_2')}}{r_2'}$$

Elastinen sironta

$$\omega = \text{vakio}$$

$$|\vec{k}'| = |\vec{k}|$$

DETEKTORI



Sirontateoriaa

NÄYTE

LÄHDE



$r_2 \gg$
näytteen dimensio

Origo

\vec{R}

$$t = t_2$$

$$\vec{r} = \vec{r}_2$$

Aalto on saapunut
detektoriin

$\vec{E}_s^{\vec{R}}(\vec{r}_2, t_2)$

Matkaero

Δr

DETEKTORI

Tasoaalto

$$\vec{E}_s^{\vec{R}=0}(\vec{r}_2, t_2) \propto \vec{E}_s e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r}_2 - \omega t_2)}$$

$E_s \propto E_0 / r_2$ ~ sama joka
pisteessä sironneelle aallolle.

$\Delta r \sim R \sim$ hilavakio $\sim \lambda$

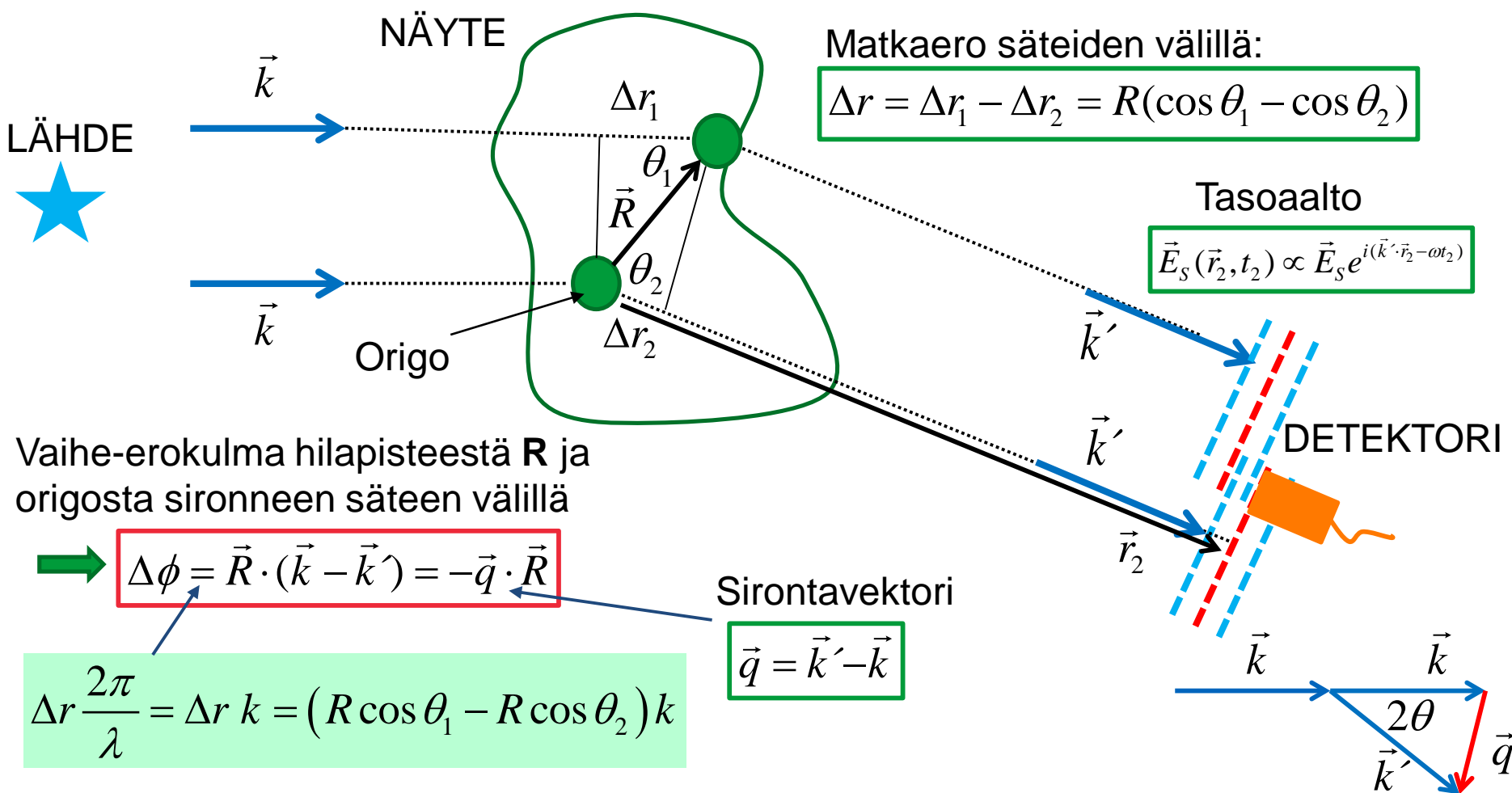
Detektorissa säteet eri vaiheessa.

Vaihe-erokulma $\Delta\phi$ eksponenttiin $e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r}_2 - \omega t_2)}$.

Interferenssi

Sirontateoriaa

→ Interferenssi detektorissa



Sironneiden säteiden kokonaiskenttä

$$\sum_{\vec{R}} \vec{E}_S^{\vec{R}}(\vec{r}_2, t_2) = \vec{E}_S e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r}_2 - \omega t_2)} \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}}$$

Summa $\neq 0$

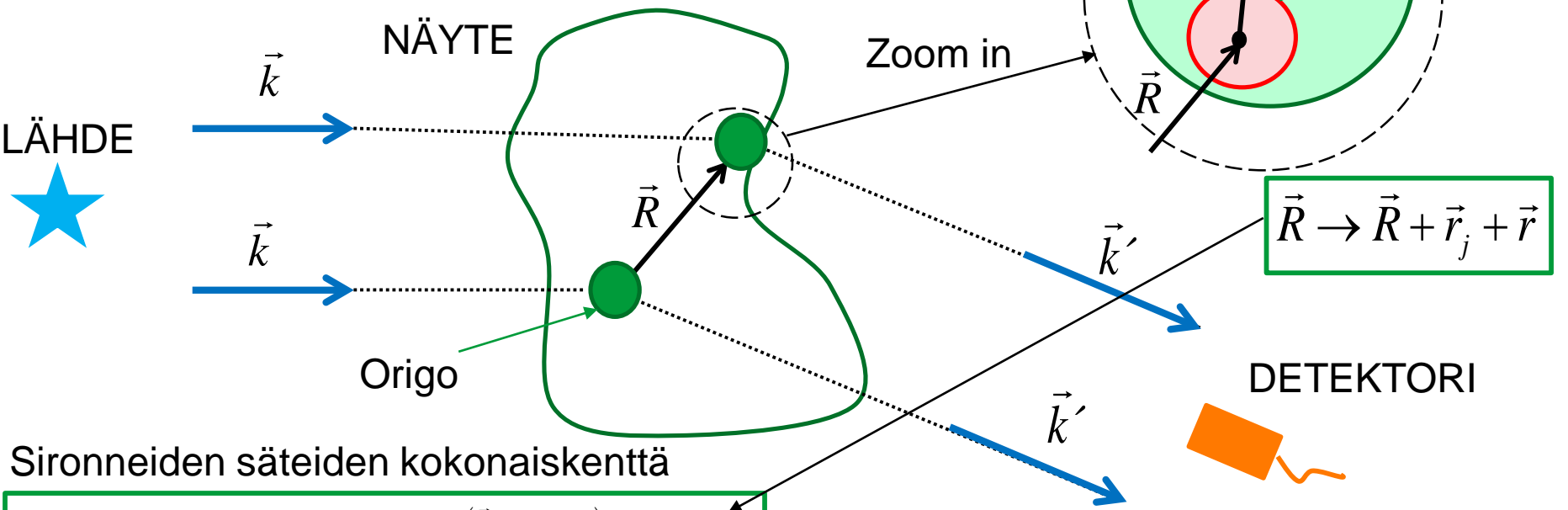
[ks. S(14.1)]

$$\vec{q} = \vec{G} \in \text{KH} \quad \text{Laue-ehto}$$

→ kanta, elektronitiheys

Sirontateoriaa

Sironta tapahtuu kaikkien atomien elektroniverhoista!



Sironneiden säteiden kokonaiskenttä

$$\vec{E}_S^{tot} = \sum_{\vec{R}} \vec{E}_S^{\vec{R}}(\vec{r}_2, t_2) = \vec{E}_S e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r}_2 - \omega t_2)} \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}}$$

Elektronitiheyden Fourier-muunnos = Atomin muototekijä $f_j(\vec{q})$

$$\vec{E}_S^{tot} \propto \sum_{\vec{R}} \sum_j \int_{\text{atomi } j} n_{e,j}(|\vec{r}|) e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R} + \vec{r}_j + \vec{r})} d^3\vec{r} = \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \sum_j \left[\int_{\text{atomi } j} n_{e,j}(|\vec{r}|) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d^3\vec{r} \right] e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_j}$$

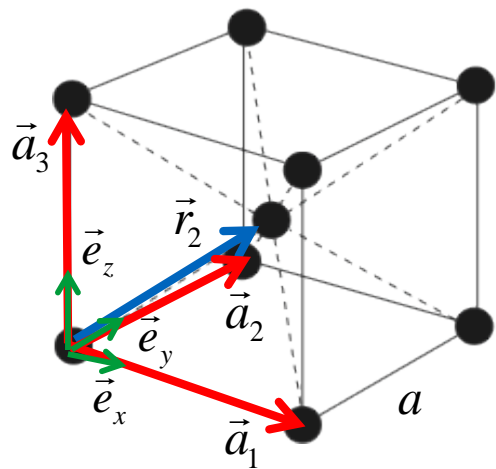
Elektronitiheys atomissa

Laue-ehto $\vec{q} = \vec{G}$

Rakennetekijä

Esimerkki: BCC = SC + kanta, CsCl-rakenne

→ Rakennetekijän merkitys (ja käyttö)



SC:n käänteishila

$$\vec{G} = (h, k, l)2\pi / a$$

x,y,z komponentit

SC:ssa kanta

$$\vec{r}_j = (x_j, y_j, z_j)a$$

Rakennetekijä

$$S_{\vec{G}} = \sum_j^{\text{atomit kannassa}} f_j e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j}$$

Rakennetekijä: SC + Kanta

$$S_{(hkl)} = \sum_j^{\text{atomit kannassa}} f_j e^{-2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)}$$

BCC = SC + Kanta

$$\vec{r}_1 = (0, 0, 0)a \quad \vec{r}_2 = (1/2, 1/2, 1/2)a$$

Rakennetekijä

$$S_{hkl} = f_1 + f_2 e^{-i\pi(h+k+l)}$$

BCC ja CsCl rakenteet

Identtiset atomit

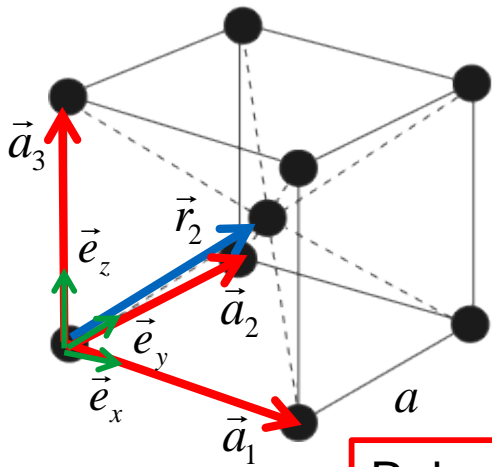
$$f_1 = f_2 = f$$

BCC

$$S_{hkl} = \begin{cases} 0 & , \text{ kun } h+k+l = \text{pariton} \\ 2f & , \text{ kun } h+k+l = \text{parillinen} \end{cases}$$

Sironta tapahtuu

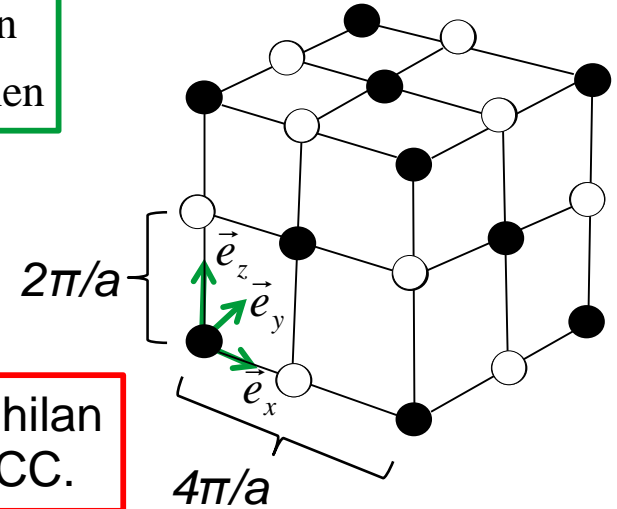
BCC = SC + kanta, rakennetekijän tulkinta



BCC

$$S_{hkl} = \begin{cases} 0 & , \text{ kun } h+k+l = \text{pariton} \\ 2f & , \text{ kun } h+k+l = \text{parillinen} \end{cases}$$

BCC:n käänteishila



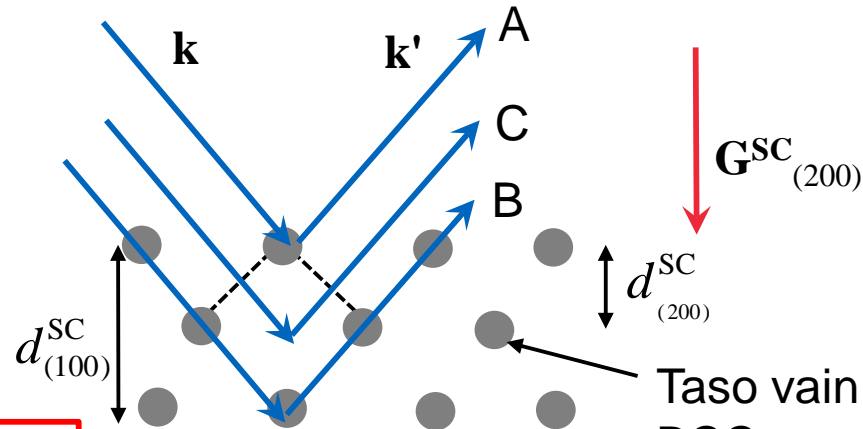
Rakennetekijä sammuttaa SC:n käänteishilan pisteitä, jäljelle jää BCC:n käänteishila FCC.

SC (100) –sironnan häviäminen
BCC:ssa, Braggin kuva

$$\begin{aligned} \text{A-B -matkaero} &= \lambda \\ \text{A-C -matkaero} &= \lambda/2 \end{aligned}$$

$\mathbf{G}_{(100)}^{\text{SC}}$

Destruktiivinen interferenssi



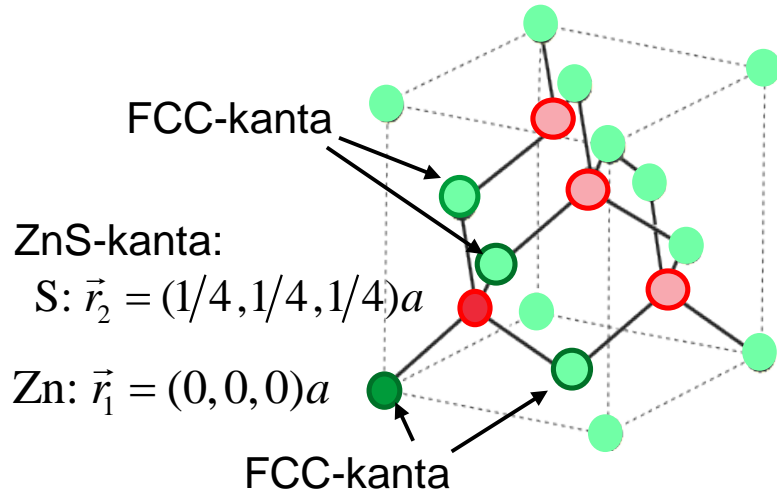
Taso vain BCC:ssa

Kaikki Millerin indeksit eivät vastaa tasoperheitä. $\mathbf{G}_{(100)}^{\text{SC}}$ ei ole BCC:n hilaperhe. $\mathbf{G}_{(200)}^{\text{SC}}$ on.

Miksi (110) säilyy, mutta (111) häviää?

Bravaishila + kanta, sironnan "valintasäännöt"

Esim. ZnS-rakenne: FCC + 2-atomikanta, FCC: SC + 4-atomikanta



FCC = SC + 4-atomikanta, rakennetekijä

$$S_{(hkl)} = \sum_{\vec{r}_j=1}^4 f_j e^{i\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}_j} = f_j (1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)})$$

$$= \begin{cases} 4f_j & \text{kun } h, k, l \text{ kaikki parittomia tai parillisia} \\ 0 & \text{muulloin} \end{cases}$$

[Simon, s. 148-9]

ZnS = SC + 8-atomikanta = FCC + 2-atomikanta

$$S_{(hkl)} = \sum_{\vec{r}_j=1}^8 f_j e^{i\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{r}_j} \dots = (1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}) \times (f_{Zn} + f_S e^{i\pi/2(h+k+l)})$$

[S(14.13)]

"Tyhjän" FCC-4-atomikannan rakennetekijä, vastaa FCC:n Laue-ehtoa

ZnS-2-atomikannan rakennetekijä

➔ Lisäehto

Yleistettävissä muihin kiderakenteisiin

➔ timantti

$$f_{Zn}, f_S \rightarrow f_C$$

Sirontaa, jos $(h+k+l)/2$ ei ole pariton kok. luku

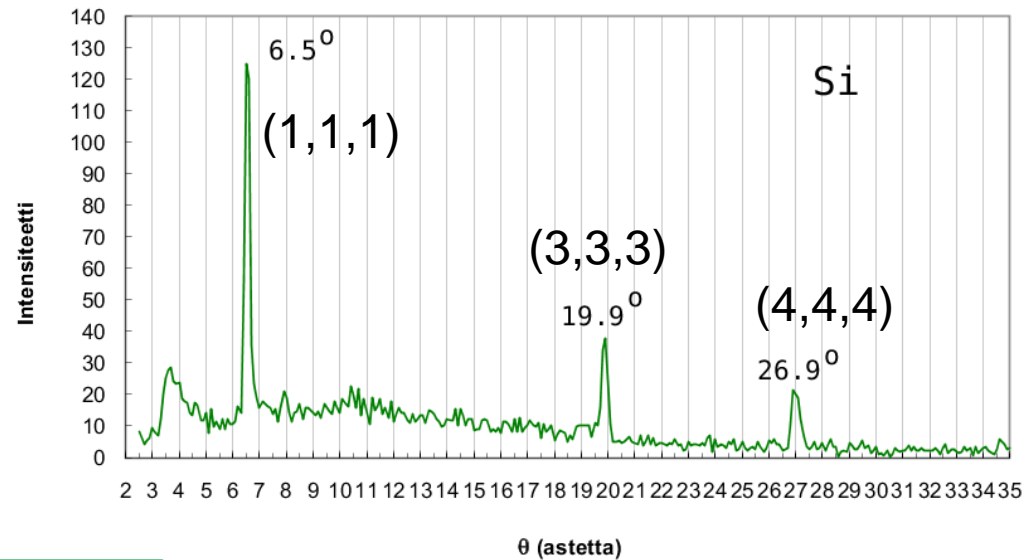
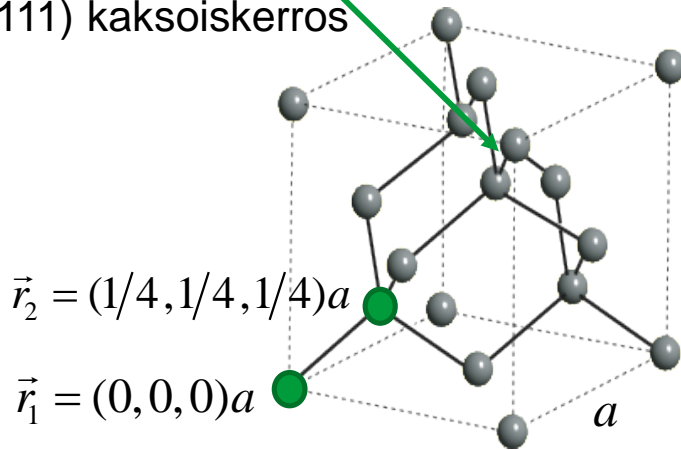
Esimerkki: Röntgendiffraktio Si-kiteestä

Kiteen pinta on (111)-taso

Heijastukset (n,n,n) KH:n vektoreista

$n = ?$

(111) kaksoiskerros



Timanttihila = FCC + kahden atomin kanta

h, k, l kaikki parittomia tai parillisia
 $(h+k+l)/2$ ei ole pariton kok. luku

(Ks. Simon (14.12) ja s. 265)

Heijastukset KH:n vektoreista:
 $(1, 1, 1), (3, 3, 3), (4, 4, 4) \dots$

Sirontamittaukset, käytännön ongelma ja sen ratkaisuja

Laue-ehto

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

Sirontaa mutta vain, kun ehto on voimassa.

\vec{k} :n kärki KH:n origossa.
Osuuko \vec{k}' KH:n pisteeseen?

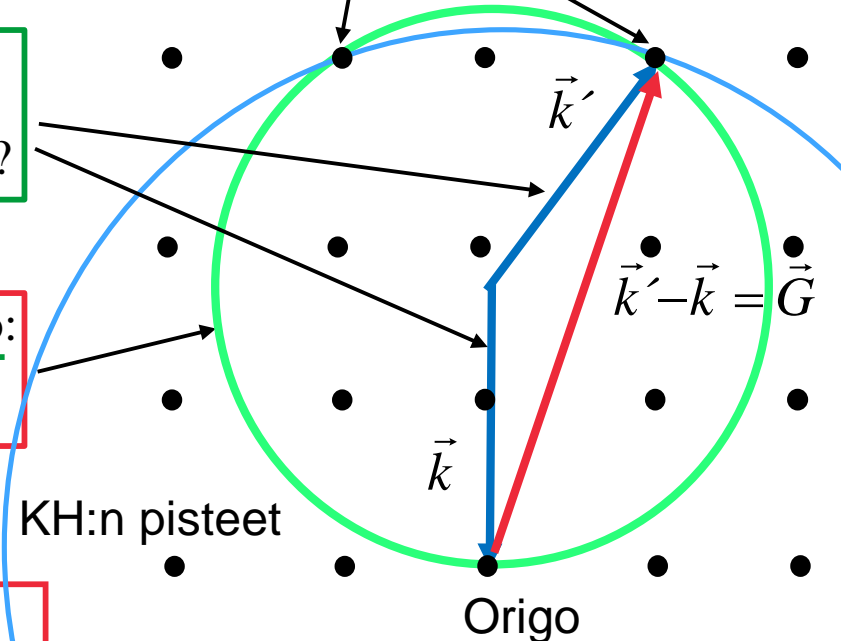
Piirretään testipinta, Ewaldin pallo:
keskipiste = \vec{k} :n kanta, säde = k .

Sirontaa nähdään, kun

1) Pyöritetään näytettä (käänteishila pyörii origon ympäri, Ewaldin pallo paikallaan).

2) Käytetään useita säteilyn aallonpituuksia, Laue-menetelmä (Ewaldin pallon kuori paisuu) \rightarrow mm. erilliskiteiden suuntaaminen.

Perin harvassa suunnassa!

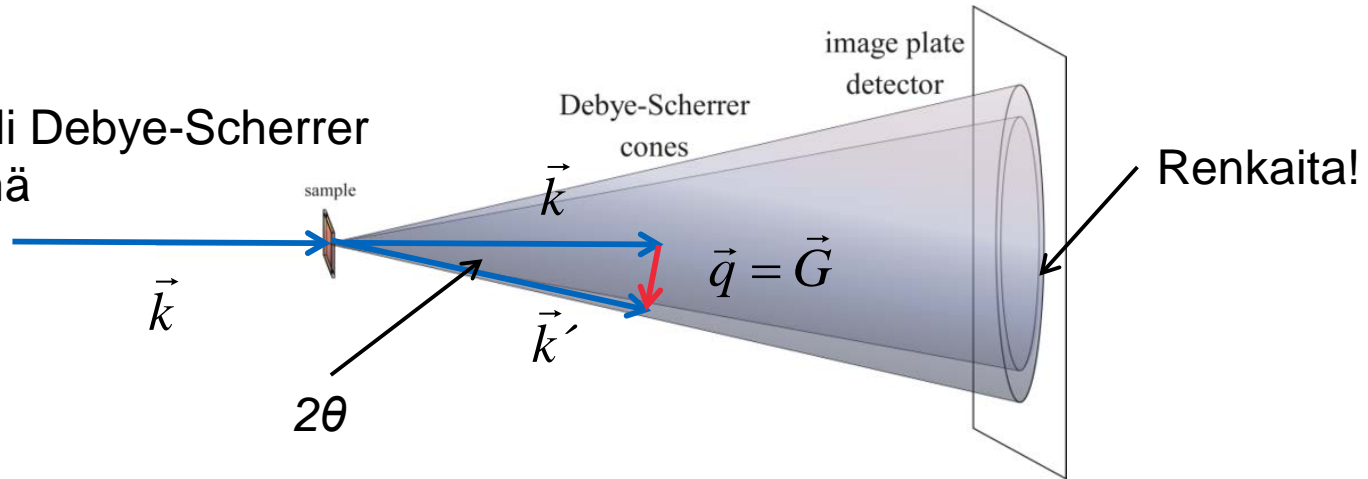


3) Pulverinäyte (jokainen KH:n piste \rightarrow pallon pinta)
Heijastukset pallojen leikkauksen suuntaan

Hilarakenteiden ja hilavakioiden tarkka määrittäminen

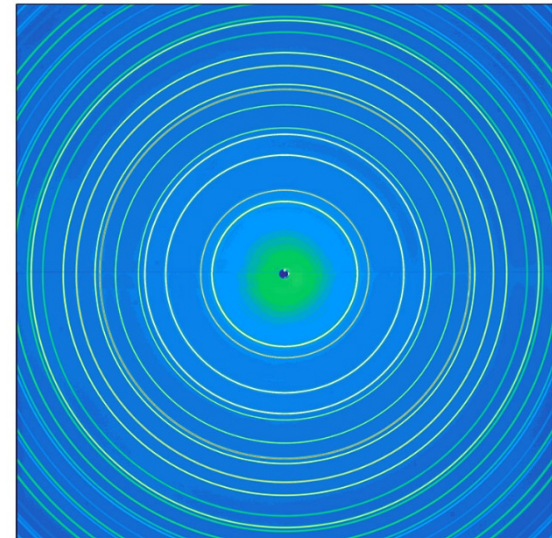
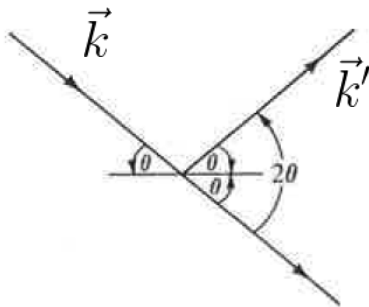
Pulverimenetelmä eli Debye-Scherrer menetelmä

Pulveri- eli Debye-Scherrer menetelmä



Näyttöpinnalla renkaita kulmissa 2θ

Bragg-geometria



Esimerkki: Röntgendiffraktio Si-pulverinäytteestä

Timanttihila

h, k, l kaikki parittomia tai parillisia
 $(h+k+l)/2$ ei ole pariton kok. luku

Heijastukset KH:n vektoreista:
 $(1,1,1), (2,2,0), (3,1,1), (4,0,0) \dots$

$|\mathbf{G}_{hkl}|$ kasvaa

Hilavakio $a = ?$

Laue-ehto

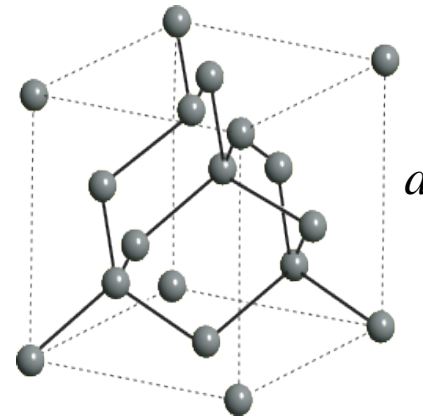
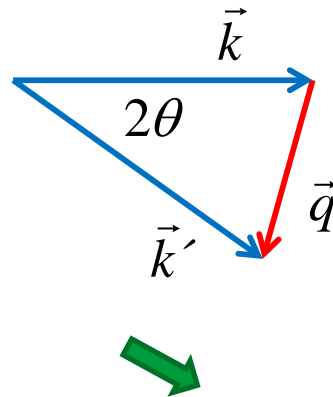
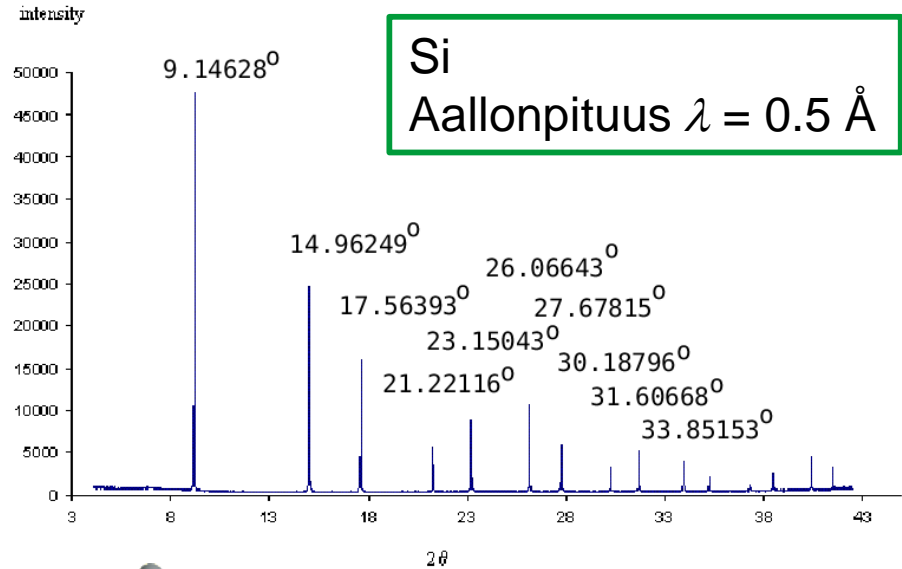
$$q = 2k \sin \theta = G_{hkl}$$

$$G_{hkl} = 2\pi / d_{hkl}$$

$$d_{hkl} = a / \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

$$a = \frac{\lambda \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2 \sin \theta}$$

Si
 Aallonpituus $\lambda = 0.5 \text{ \AA}$



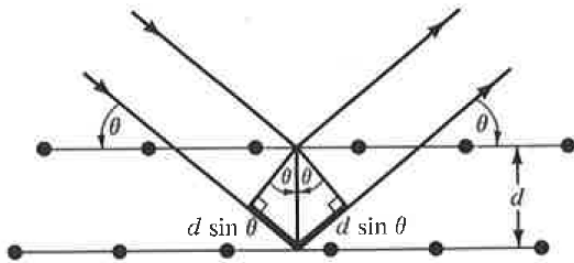
$$\theta = 9.14628^\circ / 2$$

$$(hkl) = (111)$$

$$a = 5.43 \text{ \AA}$$

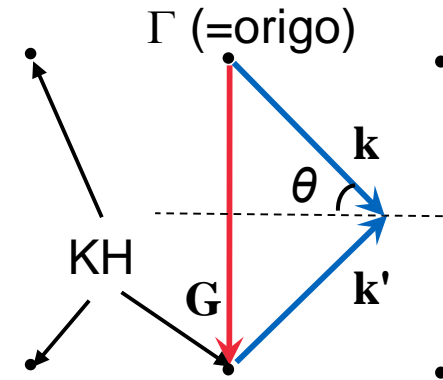
Mitä opimme sironnasta kidehilasta

Braggin formalismi



Laue-ehto

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



Intensiteettimaksimit näkyvät kun

$$2d \sin \theta = m\lambda, \quad m \in \mathbb{Z}$$

Elektronitiheyden Fourier-muunnos = Atomin muototekijä

Sironta tapahtuu kaikkien atomien elektroniverhoista!

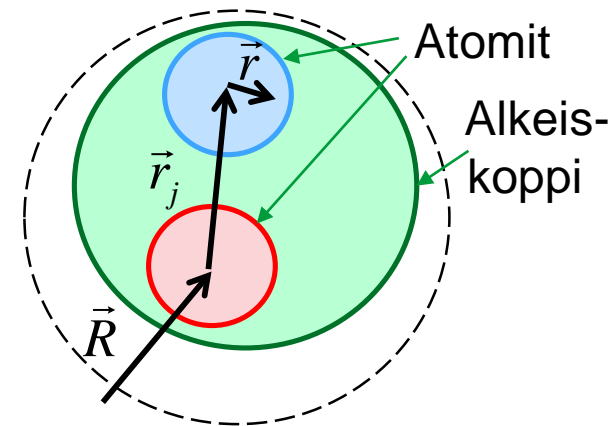
$$\vec{E}_S^{tot} = \sum_{\vec{R}} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \sum_j \left[\int_{\text{atomi } j} n_{e,j}(|\vec{r}|) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d^3\vec{r} \right] e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_j}$$

Laue-ehto $\vec{q} = \vec{G}$

Valintasäännöt sironnalle

Rakennetekijä

$$S_{\vec{G}} = \sum_j n_{e,j} e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j}$$



Diffraktiokokeet: Röntgen säteet, neutronit, elektronit, atomit

← Hiukkasilla de Broglie -aallonpituus

Braggin sirontaa, jos

Aallonpituus (0.1-10Å) ~ hilavakio (1Å)

Röntgen: 1-100 keV

Neutronit: 10 meV-1 eV ~ termiset neutronit

Elektronit: 10 eV-1 keV

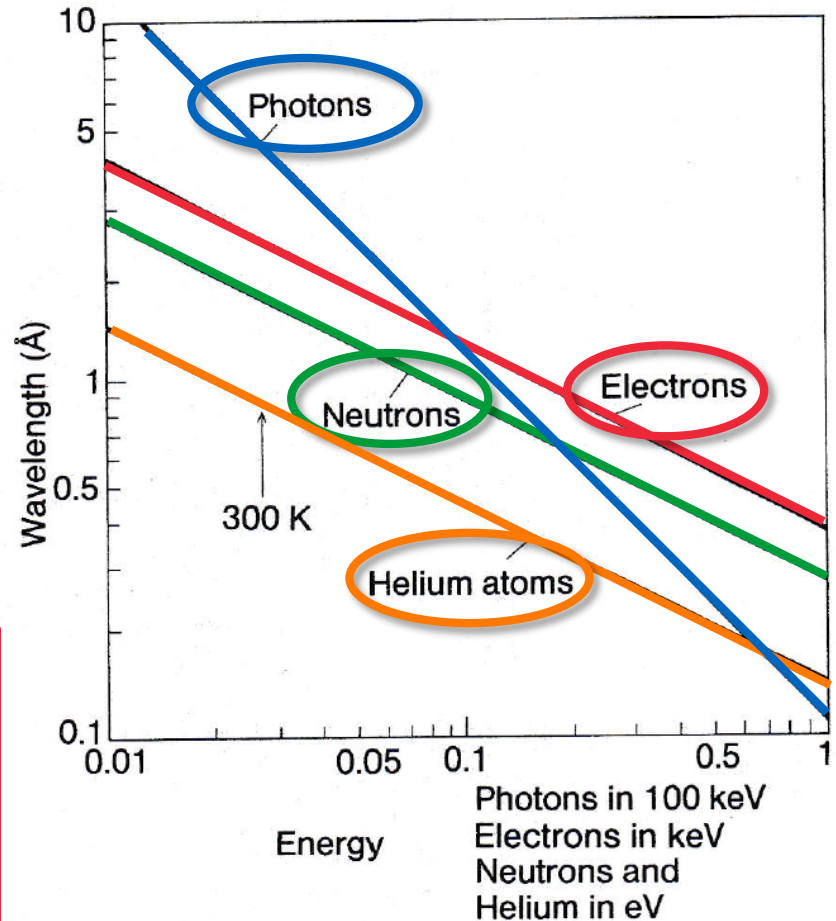
He-atomit: 10 meV-1 eV ~ termiset atomit

Röntgen: bulk-kiderakenne

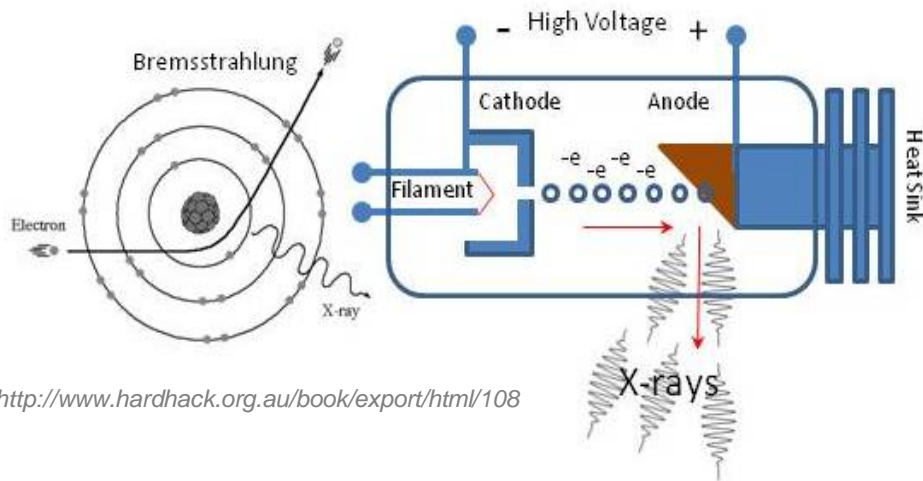
Neutronit: bulk-kiderakenne, fononien dispersiorelaatiot, magneettiset rakenteet

Elektronit: pintatutkimus

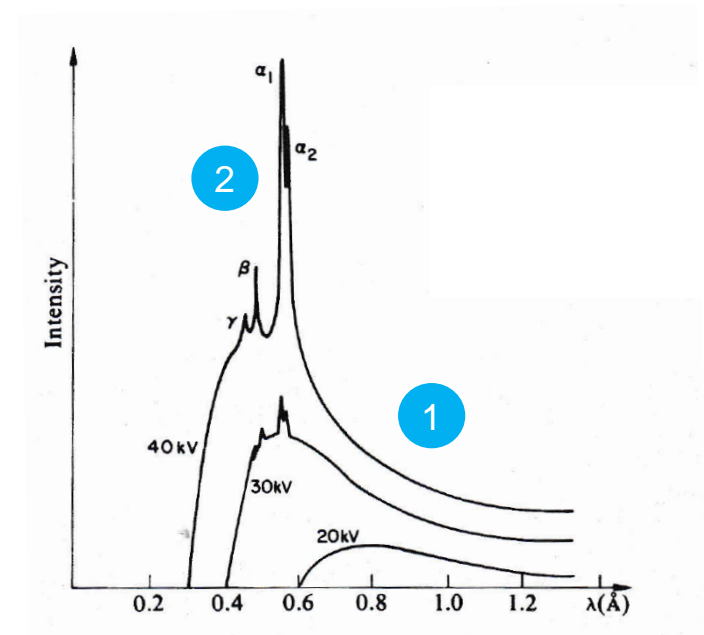
He-atomit: pintatutkimus



Röntgensäteiden tuottaminen



<http://www.hardhack.org.au/book/export/html/108>



Suurjännitelähde, jossa katodilta anodille iskeytyvät elektronit tuottavat röntgensäteilyä:
1) jarrutussäteilyn (*Bremstrahlung*) jatkumo eri aallonpituuksia ja 2) selkeitä intensiteetti-
peikkoja transiioista, joissa säteily irrottaa sisempien tilojen elektroneja atomeista (ionisaatio) ja elektronien siirtyessä ("pudotessa") näille tiloille emittoituu tiettyjä aallonpituuksia vastaavia fotoneita

Synkrotronit

How a Synchrotron Works

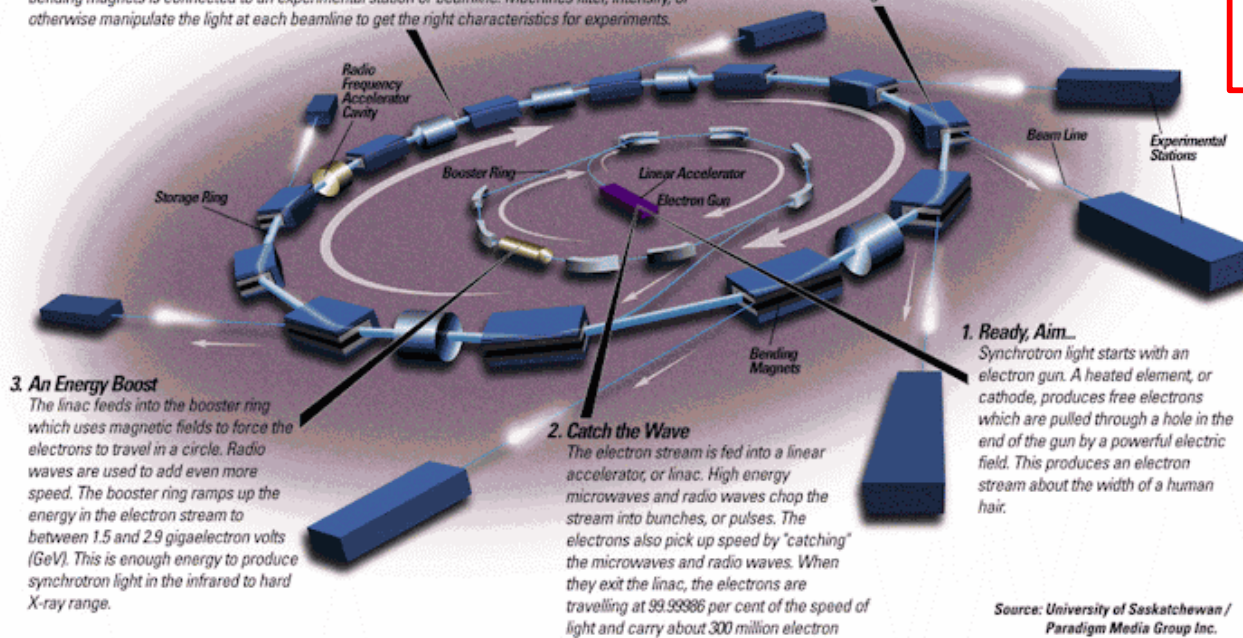
4. Storage Ring

The booster ring feeds electrons into the storage ring, a many-sided donut-shaped tube. The tube is maintained under vacuum, as free as possible of air or other stray atoms that could deflect the electron beam. Computer-controlled magnets keep the beam absolutely true.

Synchrotron light is produced when the bending magnets deflect the electron beam; each set of bending magnets is connected to an experimental station or beamline. Machines filter, intensify, or otherwise manipulate the light at each beamline to get the right characteristics for experiments.

5. Focusing the Beam

Keeping the electron beam absolutely true is vital when the material you're studying is measured in billionths of a metre. This precise control is accomplished with computer-controlled quadrupole (four pole) and sextupole (six pole) magnets. Small adjustments with these magnets act to focus the electron beam.



3. An Energy Boost

The linac feeds into the booster ring which uses magnetic fields to force the electrons to travel in a circle. Radio waves are used to add even more speed. The booster ring ramps up the energy in the electron stream to between 1.5 and 2.9 gigaelectron volts (GeV). This is enough energy to produce synchrotron light in the infrared to hard X-ray range.

2. Catch the Wave

The electron stream is fed into a linear accelerator, or linac. High energy microwaves and radio waves chop the stream into bunches, or pulses. The electrons also pick up speed by "catching" the microwaves and radio waves. When they exit the linac, the electrons are travelling at 99.99986 per cent of the speed of light and carry about 300 million electron

1. Ready, Aim...

Synchrotron light starts with an electron gun. A heated element, or cathode, produces free electrons which are pulled through a hole in the end of the gun by a powerful electric field. This produces an electron stream about the width of a human hair.

Source: University of Saskatchewan / Paradigm Media Group Inc.

Elektronit kiihdytetään lähes valon nopeuteen ja pakotetaan muuttamaan kulkusuuntaa magneeteissa.



Intensiivinen ja fokusoitunut Röntgen suihku, jonka jatkuvasta spekristä voidaan monokromatisoida halutun energian suihku.

<http://geographyfieldwork.com/SynchrotronWorks.htm>

<http://www.esrf.eu/about/synchrotron-science/synchrotron>

Röntgensironta, atomin muototekijä

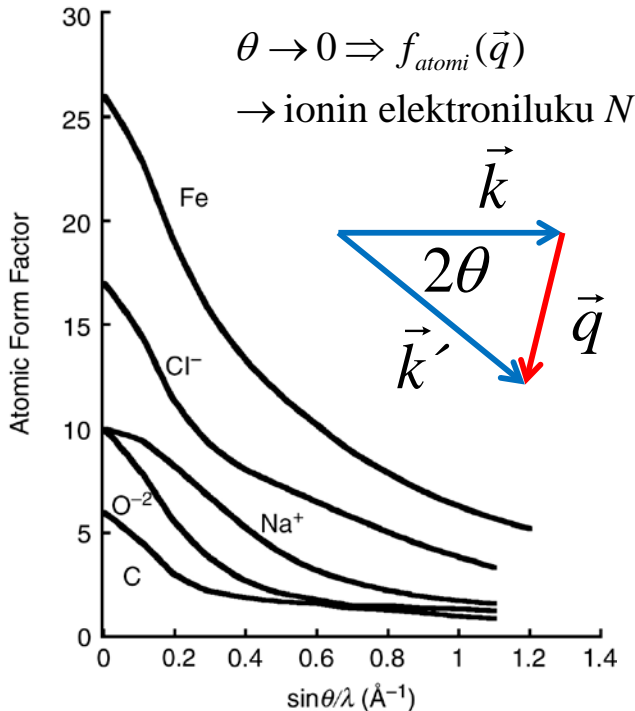
Aallon amplitudi detektorissa

Elektronitiheyden Fourier-muunnos
= Atomin muototekijä

$$\vec{E}_S^{tot} = \underbrace{\sum_{\vec{R}}}_{\text{alkeiskopit}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}} \underbrace{\sum_j}_{\text{atomit kopissa}} \left[\int_{\text{atomi } j} f_j(\vec{q}) n_{e,j}(|\vec{r}|) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3\vec{r} \right] e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_j}$$

Laue-ehto $\vec{q} = \vec{G}$

Rakennetekijä



$$f_j(\vec{q}) \propto N$$

$$I \propto |\vec{E}_S^{tot}| \propto N^2$$

Sironta raskaista atomeista peittää sironnan kevyistä atomeista. Vaikea havaita vetyä. Vaikea erottaa periodisen taulun vierekkäisiä atomeita toisistaan.

Neutronisironta

Vuorovaikutus ensisijaisesti ytimien kanssa

- Laitteet suuria & kalliita (neutronilähde!)
- Energiahajonta suuri, matala intensiteetti
- Ytimen neutronisieppaus mahdollinen (^3He , vanadium...)

Vaikutusalan vaihtelu ~dekadi
→ Vierekkäisen varausluvun
atomit erottuvat

Neutronien sirontavaikutusalat
kevyille atomeille suuria.



Vedyn havaitseminen kiinteissä
ja biologisissa aineissa



Triga Mark II tutkimusreaktori, toimi myös Otaniemessä



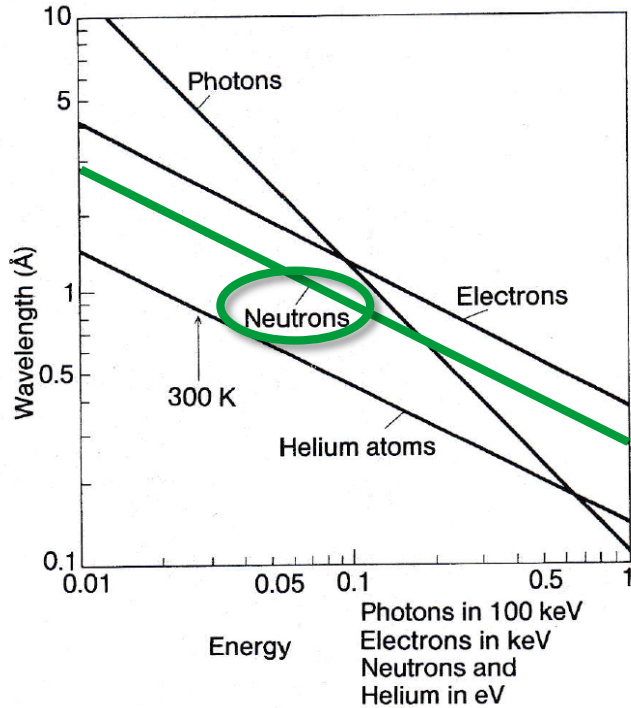
European Spallation Source (ESS), Lund, rakenteilla

Neutronisironnan sovelluksia: fononien dispersiorelaatioiden mittaaminen

Fononien energiat $\sim 10\text{-}100\text{ meV}$
 k -vektorit $\sim 1/a \sim 1/\text{\AA}$

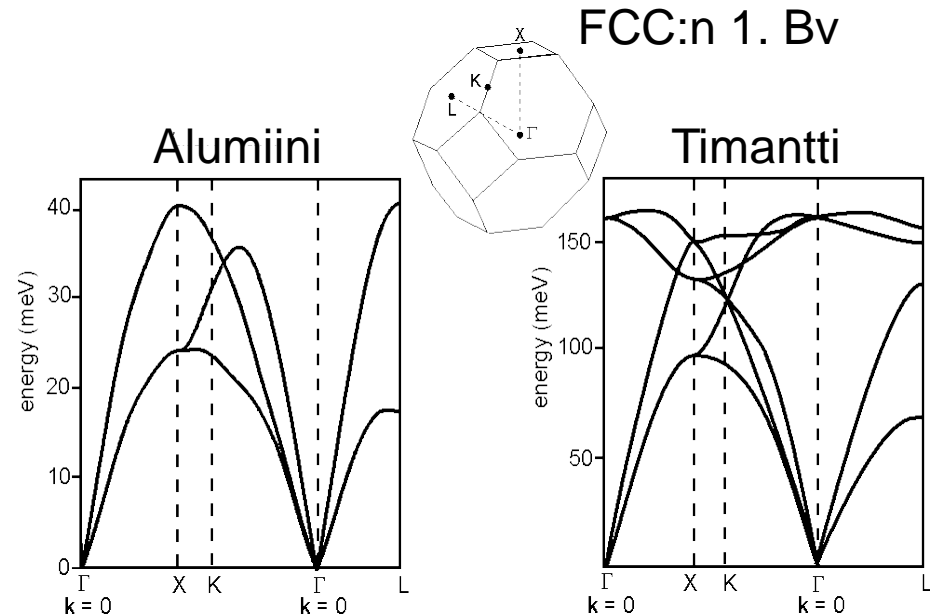


Neutroneilla samaa suuruusluokkaa



Alumiini: FCC \rightarrow vain akustiset moodit
 Timantti: FCC+kanta \rightarrow myös optisia moodeja

Vahvemmat sidokset \rightarrow korkeammat fononien energiat



Neutronisironnan sovelluksia: magneettiset rakenteet

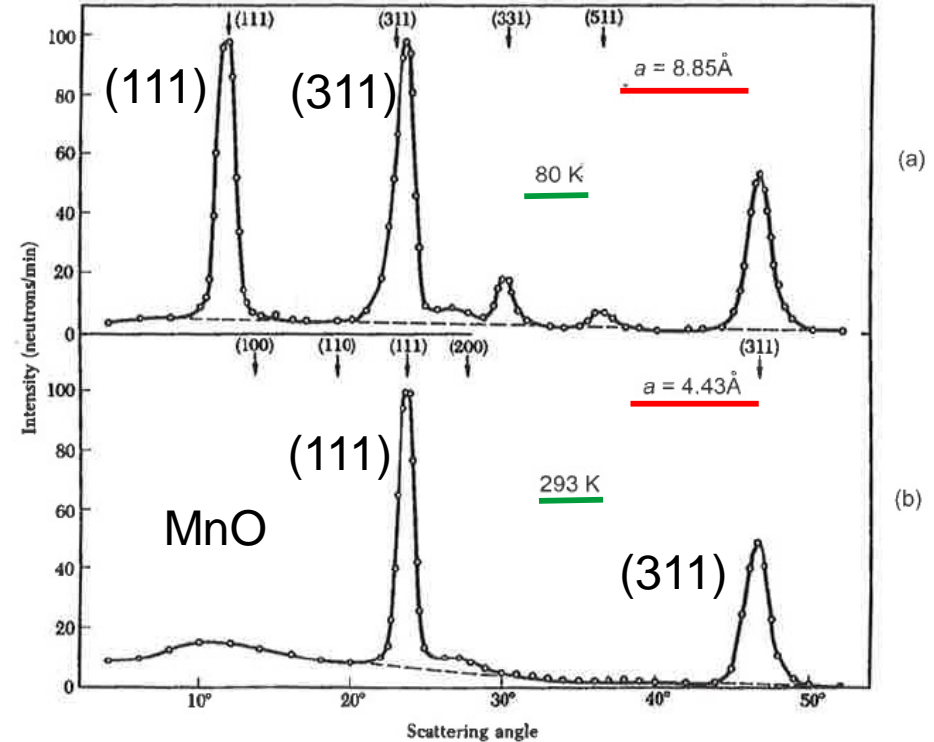
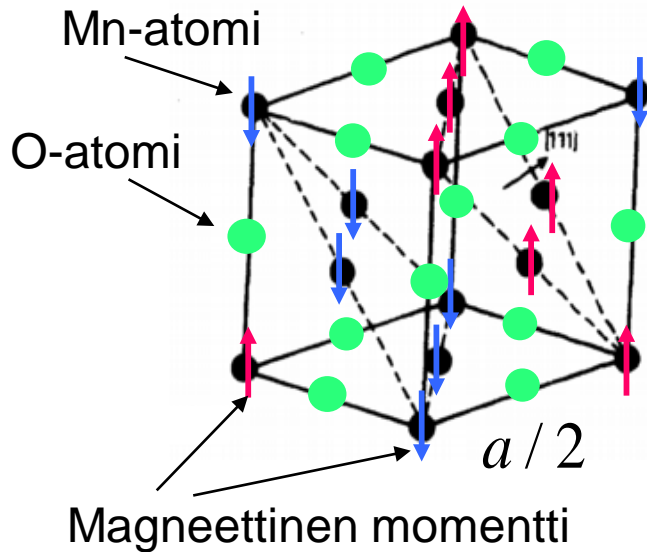
Neutronilla on magneettinen momentti



Vuorovaikutus ionien magneettisten momenttien kanssa

Antiferromagneettinen MnO

NaCl kiderakenne



Lämpötila nousee



Magneettinen järjestys häviää



Hilavakio puolittuu



Piikkien välimatkat kasvaa