

czynnik atomowy

Dyfrakcja na kryształach wieloatomowych. Jony bazy nie są identyczne

$$S = \sum_{j=1}^N f_j e^{(i \mathbf{G} \cdot \mathbf{R}_j^i)}$$

$$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{G}$$

$f_j(\Delta \mathbf{k})$ jest czynnikiem atomowym określającym całkowitą wewnętrzną strukturą jonu zajmującego położenie $\mathbf{R}_j^i$; f_j zależy od zmiany wektora falowego ($\Delta \mathbf{k}$) i od szczegółów rozkładu ładunku elektronowego jonu.

Czynnik S - Li

bcc $\equiv$ prostą sieć regularną z dwóch centrów rozpraszania;
z bazą składającą się z dwóch atomów Li (0,0,0), (1/2,1/2,1/2)

$$S = \sum_{j=1}^N f_j e^{(i \mathbf{G} \cdot \mathbf{R}_j^{Li})}$$

$$S = f_{Li} [1 + (-1)^{(h+k+l)}] = \begin{cases} 2f_{Li} & \text{dla } (h+k+l) = \text{parzystą liczbą} \\ 0 & \text{dla } (h+k+l) = \text{nieparzystą liczbą} \end{cases}$$

Widmo dyfrakcyjne obejmuje refleksy:

(110)
(200), (211), (220), (222)
(310), (321), (330), (332)
(400), (411), (422), (431), (433), (442),
(444)...



Obserwowane refleksy!

Punkty w płaszczyznach które nie dają odbicia:

(100), (111)
(210)
(311), (322), (331), (333)
(410), (421), (432)
...

Czynnik S - CsCl

Cl⁻ (0,0,0)
Cs⁺ (1/2,1/2,1/2)

$$S = \sum_{j=1}^N f_{Cs} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}_j^{Cs}} + \sum_{j=1}^N f_{Cl} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}_j^{Cl}}$$

$$S = f_{Cl} + f_{Cs}(-1)^{(h+k+l)} = \begin{cases} f_{Cl} + f_{Cs} & \text{gdy } (h+k+l) \text{ jest liczbą parzystą} \\ f_{Cl} - f_{Cs} & \text{gdy } (h+k+l) \text{ jest liczbą nieparzystą} \end{cases}$$

CsCl $f_{Cl} \neq f_{Cs}$

$$S = f_{Cl} - f_{Cs} \neq 0$$

słabe refleksy

(100), (111)

(210)

(311), (322), (331), (333)

(410), (421), (432)

...

TlBr $f_{Tl} \neq f_{Br}$

$$S = f_{Tl} - f_{Br} \neq 0$$

CsI $f_{Cs} \approx f_I$

$$S = f_{Cs} - f_I = 0$$

Warunki znikania S $S = 0$

gdy $(h+k+l)$ jest liczbą nieparzystą

Czynnik S - NaCl

Cl⁻ (0,0,0) (1/2,1/2,0) (1/2,0,1/2) (0,1/2,1/2).
 Na⁺ (1/2,0,0) (0,1/2,0) (0,0,1/2) (1/2,1/2,1/2)

$$S = \sum_{j=1}^N f_{\text{Na}} e^{i \mathbf{G} \cdot \mathbf{R}_j^{\text{Na}}} + \sum_{j=1}^N f_{\text{Cl}} e^{i \mathbf{G} \cdot \mathbf{R}_j^{\text{Cl}}}$$

$$S = f_{\text{Na}} [(-1)^h + (-1)^k + (-1)^l + (-1)^{(h+k+l)}] + f_{\text{Cl}} [1 + (-1)^{(h+k)} + (-1)^{(k+l)} + (-1)^{(h+l)}]$$

NaCl Na⁺ $\equiv$ (Ne¹⁰); Cl⁻ $\equiv$ (Ar¹⁸) $f_{\text{Na}} \neq f_{\text{Cl}}$

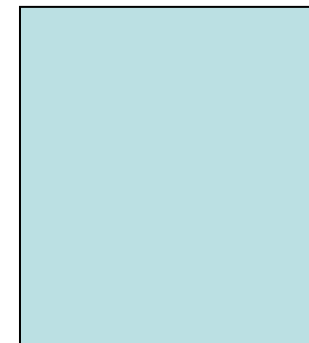
Obserwowane refleksy

(111)	$S = -4f_{\text{Na}} + 4f_{\text{Cl}} \neq 0$	słaby
(200) (220)	$S = 4f_{\text{Na}} + 4f_{\text{Cl}}$	silny
(311), (331)	$S = -4f_{\text{Na}} + 4f_{\text{Cl}} \neq 0$	słaby
(400), (420)	$S = 4f_{\text{Na}} + 4f_{\text{Cl}}$	silny

Warunki znikania S

(2m-1,0,0)
 (2m-1,2n,0)
 (2m-1,2n-1,0)
 (2m,2n,2p-1)
 (2m-1,2n-1,2p)

S=0



Czynnik S – KCl i KBr

KCl

$K^+ \equiv (Ar^{18})$

$Cl^- \equiv (Ar^{18})$

$f_K \approx f_{Cl}$

~~(111)~~ ~~$S = -4f_K + 4f_{Cl}$~~ **Nie!**

(220) (222) $S = 4f_K + 4f_{Cl}$

~~(311), (331)~~ ~~$S = -4f_K + 4f_{Cl}$~~ **Nie!**

(400) $S = 4f_K + 4f_{Cl}$

KBr

$K^+ \equiv (Ar^{18})$

$Br^- \equiv (Kr^{36})$

$f_K \neq f_{Br}$

(111) $S = -4f_K + 4f_{Br} \neq 0$

(220) (222) $S = 4f_K + 4f_{Br}$

(311), (331) $S = -4f_K + 4f_{Br} \neq 0$

(400) $S = 4f_K + 4f_{Br}$

Czynnik S - ZnS

S^{2-} 0,0,0; 1/2,1/2,0; 1/2,0,1/2; 0,1/2,1/2.

Zn^{2+} 1/4,1/4,1/4; 1/4,3/4,3/4; 3/4,1/4,3/4; 3/4,3/4,1/4.

$$S = f_{Zn} [1 + (-1)^{(h+k)} + (-1)^{(k+l)} + (-1)^{(h+l)}] + f_S (-1)^{(1/2)(h+k+l)} [1 + (-1)^{(h+k)} + (-1)^{(k+l)} + (-1)^{(h+l)}]$$

$$= \begin{array}{lll} 4(f_{Zn} + f_S) & \text{dla } (h+k+l) = 4m & h, k, l - \text{parzyste} \\ 4(f_{Zn} - f_S) & \text{dla } (h+k+l) = 2(2m \pm 1) & h, k, l - \text{parzyste} \\ 4(f_{Zn} + i f_S) & \text{dla } (h+k+l) = 4m+1 & h, k, l - \text{nieparzyste} \\ 4(f_{Zn} - i f_S) & \text{dla } (h+k+l) = 4m-1 & h, k, l - \text{nieparzyste} \\ 0 & \text{pozostałych} & \end{array}$$

Czynnik S - CdF_2 i CaF_2

Atomy Cd/Ca

 $R_1 (0,0,0)$ $R_2 (1/2, 1/2, 0)$ $R_3 (1/2, 0, 1/2)$ $R_4 (0, 1/2, 1/2)$

Atomy F

 $R_5 (1/4, 1/4, 1/4)$ $R_6 (3/4, 3/4, 1/4)$ $R_7 (1/4, 3/4, 3/4)$ $R_8 (3/4, 1/4, 3/4)$ $R_9 (3/4, 3/4, 3/4)$ $R_{10} (3/4, 1/4, 1/4)$ $R_{11} (1/4, 3/4, 1/4)$ $R_{12} (1/4, 1/4, 3/4)$

$$S = f_{\text{Cd}} [1 + (-1)^{(h+k)} + (-1)^{(k+l)} + (-1)^{(h+l)}] + f_{\text{F}} (-1)^{(1/2)(h+k+l)} [1 + (-1)^{(h+k)} + (-1)^{(k+l)} + (-1)^{(h+l)} + (-1)^{(h+k+l)} + (-1)^h + (-1)^k + (-1)^l]$$

$$S = \begin{cases} 4f_{\text{Cd}} & \text{dla } h, k, l - \text{nieparzystych} \\ 4f_{\text{Cd}} - 8f_{\text{F}} & \text{dla } (h+k+l) = 2(2m \pm 1) \quad h, k, l - \text{parzyste} \\ 4f_{\text{Cd}} + 8f_{\text{F}} & \text{dla } (h+k+l) = 4m \quad h, k, l - \text{parzyste} \\ 0 & \text{pozostałych} \end{cases}$$

 CdF_2

(111), (200), (220), (222)

(311), (331), (333), (400), (420)

...

$$f_{\text{Cd}}^{2+} \neq 2f_{\text{F}} \quad S = 4f_{\text{Cd}} - 8f_{\text{F}} \neq 0$$

 CaF_2 (111), ~~(200)~~, (220), ~~(222)~~,(311), (331), (333), (400), ~~(420)~~

...

$$f_{\text{Ca}}^{2+} \approx 2f_{\text{F}} \quad S = 4f_{\text{Ca}} - 8f_{\text{F}} \approx 0$$