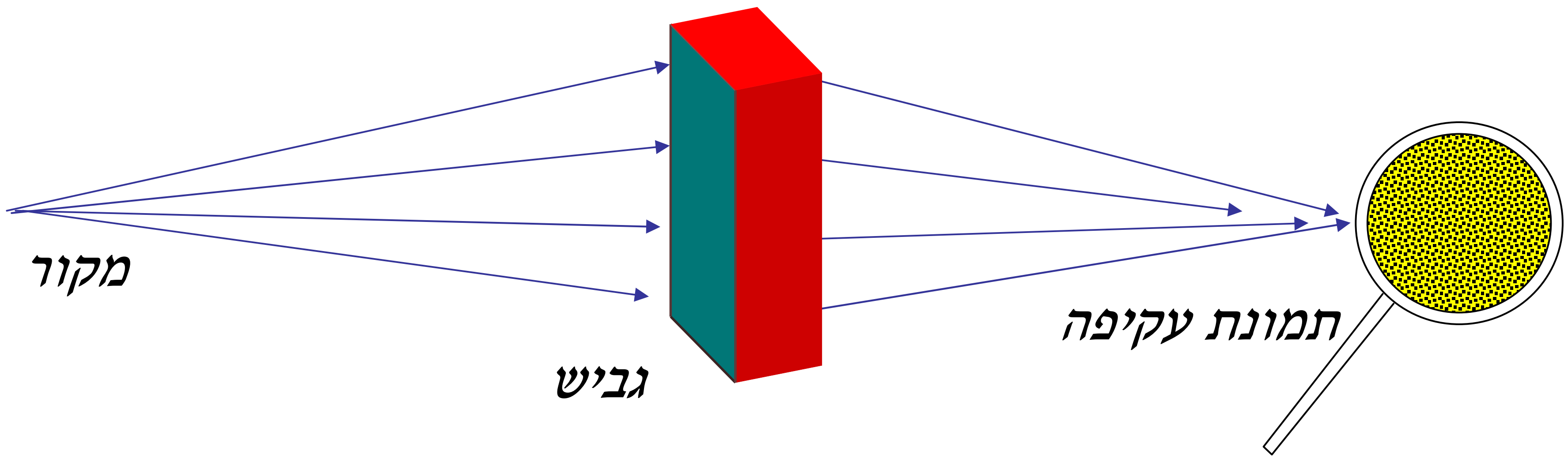
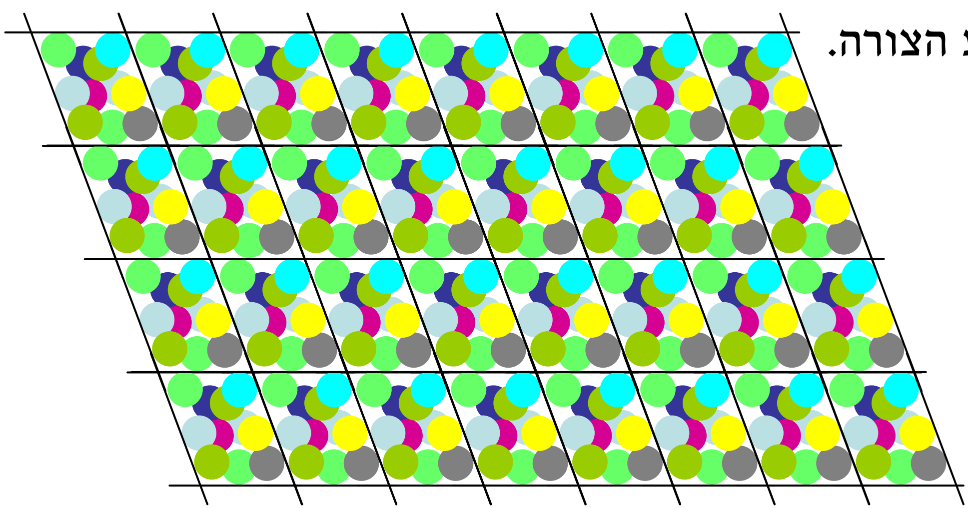
עקיפה תלת מימדית



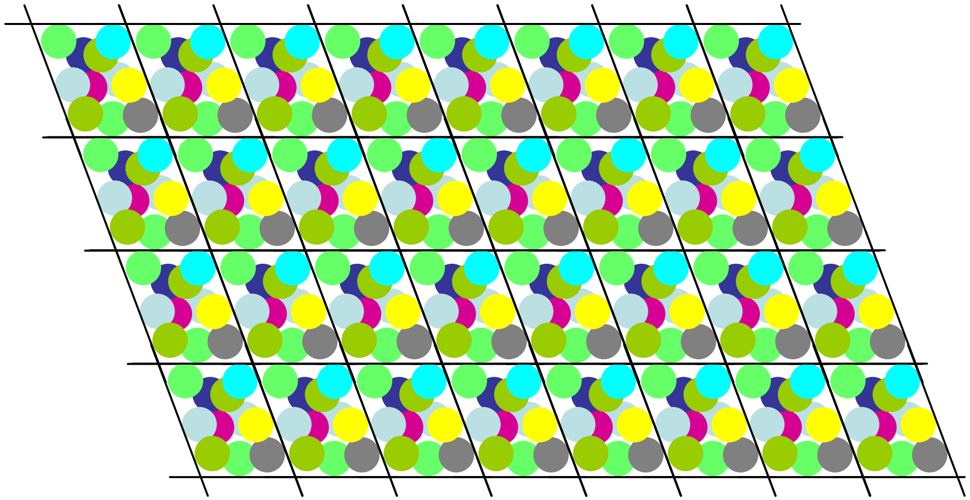
- החשיבות העיקרית של עקיפה תלת-מימדית של עצמים היא בעקיפה מגבישים.
- הפיתוחים שעשינו היו תקפים רק למקרה הדו-מימדי, בגלל הפתרון שהשתמש בתנאי שפה.
- כעת התפתחות הגלים (לפי הויגנס או לפי קירכהוף) היא מתווך תלת מימדי.
- תנאי השפה מוגדרים ביתירות ויכול שלא להתקיים פתרון עקיפה.
- נזדקק לתנאים נוספים כדי שיתממשו חלקים מפתרון פוריה.

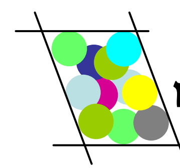
גבישים

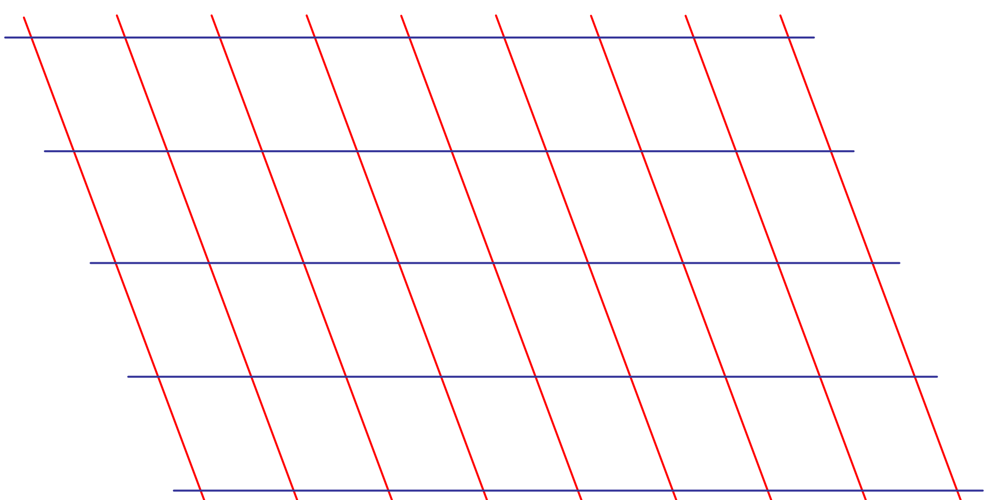
- גבישים הם סריגים תלת-מימדיים ומפזרים גלים באורך גל המתאים.
- גלים אלו יכולים להיות אור או חומר: ניטרונים, אלקטרונים, אטומים וקרני רנטגן (x rays).
- נשתמש בחישובים של מקס פון לַאוּאֶה (von Laue) לקרני רנטגן.
- אנו מניחים שאין פיזורים כפולים: הנחת הפיזור החלש. כל קרן מתפזרת רק פעם אחת בגביש.
- נניח לשם הפשטות סוג אטומים אחד בגביש. קרני הרנטגן מתפזרות רק על האלקטרונים שלהם.
- נוכל להסתכל על הגביש כקונבולוציה של מיקומי האטומים עם פונקצית פילוג האלקטרונים שלהם.
- מיקומי האטומים חוזרים ברמה של סריג (lattice), קבוצה קטנה של אטומים הקרויה תא היחידה.
- הסריג - תא היחידה התלת-מימדי - חוזר בסדירות בשלושה מימדים.
- לכן ניתן לראות את הגביש כולו כקונבולוציה של תא היחידה עם מיקומי הסריגים.
- הגביש הוא סופי, והקונבולוציה מוכפלת בפונקצית הצורה.



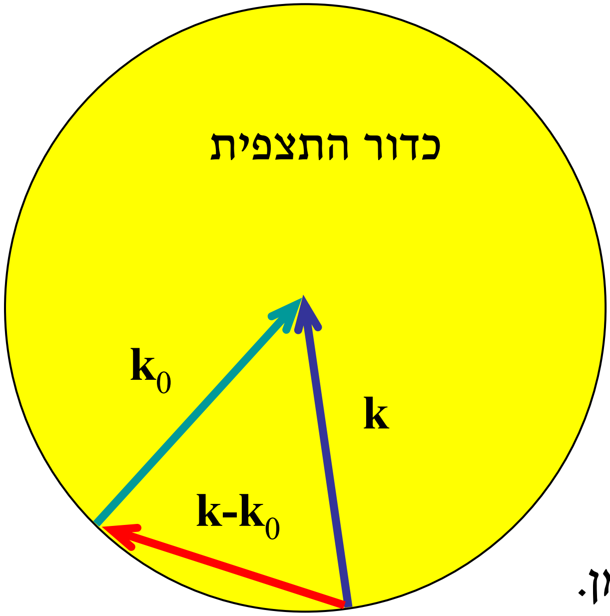
חישוב בגבישים



- ראינו שהגבישים מפזרים מענן האלקטרונים שלהם.
- ההתמרה של ענן זה ניתנת להיכתב כהתמרה של פונקצית צורת הגביש מקופלת עם מכפלה שלוש התמרות:
  - התמרת האטום. 
  - התמרת אוסף פונקציות ה-δ המיצגות את מיקומי האטומים בתא היחידה. 
  - התמרת סריג הגביש.
- כאן נחשב רק את החלק האחרון, העקיפה מהסריג של הגביש.



עקיפה מגבישים



- נחשב את העקיפה מהסריג תלת מימדי של פונקציות δ.
- גל פוגע בסריג ומפוזר לכוון אחר.
- יהיו וקטורי הגל לפני ואחרי הפיזור $\mathbf{k}_0$ ו-$\mathbf{k}$ בהתאמה.
- מניחים שהאנרגיה נשמרת בתהליך הפיזור.
- לכן גם תדר הגל נשמר, $\omega_0 = c\,k$.
- לכן גם אורכי וקטורי הגל נשמרים, $|\mathbf{k}_0| = |\mathbf{k}|$.
- לחלופין, הסריג יציב ולכן לגלים חייבת להיות אותה התנהגות בכל זמן.
- מכאן שהחלק התלוי בזמן בגל לא משתנה, $\exp(-i\,\omega_0\,t) = \exp(-i\,\omega\,t)$.

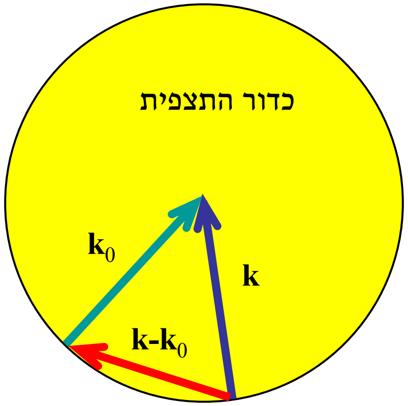
- בגלל שויון האורכים, הוקטורים $\mathbf{k}_0$ ו-$\mathbf{k}$ הם וקטורי רדיוס של כדור.
- כדור זה קרוי כדור אוואלד (Ewald), כדור ההחזרה או כדור התצפית.
- רק לוקטורים על פני כדור זה תיתכן עקיפה, הנקראת עקיפת בראג (Bragg).

גל מפוזר מגביש

- תהי נקודת הסריג המפזר $\mathbf{r}'$. זוהי פונקצית δ המשמשת כמקור משני.
- הגל המתפזר יהיה $\exp[i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}')]$.
- הגל המפוזר יהיה $\psi(\mathbf{k}) = \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \varphi]$. המופע φ לא ידוע.
- גל זה הוא גם הגל המתפזר מהנקודה $\mathbf{r}'$. לכן הם חייבים להיות שווים:

$$\exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \varphi] = \exp[i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}')].$$

- מכאן שזוית המופע היא $\varphi = (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}'$.
- סך הכל, הגל הוא



$$\psi(\mathbf{k}) = \exp\left\{i\left[(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + (\mathbf{k}_0 - k) \cdot \mathbf{r}'\right]\right\}$$

- כדי לקבל את כל הקרן שוקטור הגל שלה הוא $\mathbf{k}$, יש לסכם על פני כל נקודות הפיזור $\mathbf{r}'$.
- נניח שתא היחידה שבתוכו נמצאות נקודות הפיזור הוא בעל וקטורים $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ ו-$\mathbf{c}$.
- מסכת הפיזור תהיה

$$f(\mathbf{r}') = \sum_{h,k,l=-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{r} - h\mathbf{a} - k\mathbf{b} - l\mathbf{c}); \qquad h,k,l \text{ integers}$$

וקטורי הסריג ההפכי

- מסכת הפיזור היא

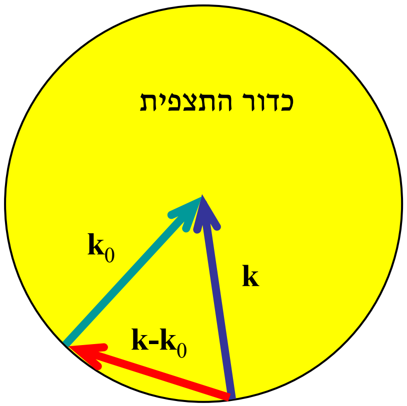
$$f\left(\mathbf{r}'\right)=\sum_{h,k,l=-\infty}^{\infty}\delta\left(\mathbf{r}-h\mathbf{a}-k\mathbf{b}-l\mathbf{c}\right);\qquad h,k,l \text{ integers}$$

- מציבים בנוסחת הגל המפוזר ומקבלים

$$\psi\left(\mathbf{k}\right)=\exp\left(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right)\sum_{h,k,l=-\infty}^{\infty}\exp\left\{i\left[\left(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0\right)\cdot\left(h\mathbf{a}+k\mathbf{b}+l\mathbf{c}\right)\right]\right\}$$

- רק כאשר כל מופעי כל האברים הם כפולות של 2π הסכום אינו מתאפס

$$\left(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0\right)\cdot\left(h\mathbf{a}+k\mathbf{b}+l\mathbf{c}\right)=2\pi s;\qquad s \text{ integer}$$



- מחפשים פתרונות פרט לפתרון הטריביאלי $s=0$ (שני הוקטורים זהים).
- כבר חישבנו את הסריג ההפכי הדו-מימדי, ונרחיב אותו לשלושה מימדים.
- וקטורי הסריג ההפכי הם **a***, **b*** , ו- **c*** . מחשבים אותם לפי

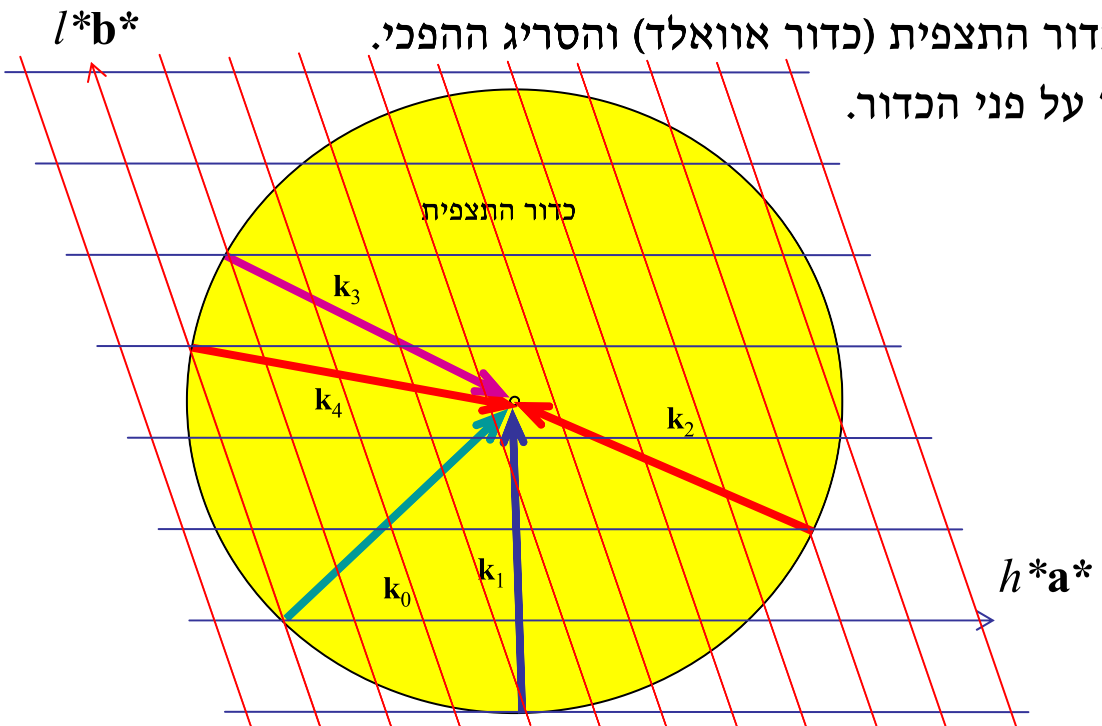
$$\mathbf{a}^*=\mathbf{b}\times\mathbf{c}/V;\quad \mathbf{b}^*=\mathbf{c}\times\mathbf{a}/V;\quad \mathbf{c}^*=\mathbf{a}\times\mathbf{b}/V;\quad V=\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}$$

וקטורי הסריג ההפכי

- גם כאן מקבלים שהוקטור $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) / \pi$ תלוי בוקטורי הסריג ההפכי $\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$, ו- $\mathbf{c}^*$:

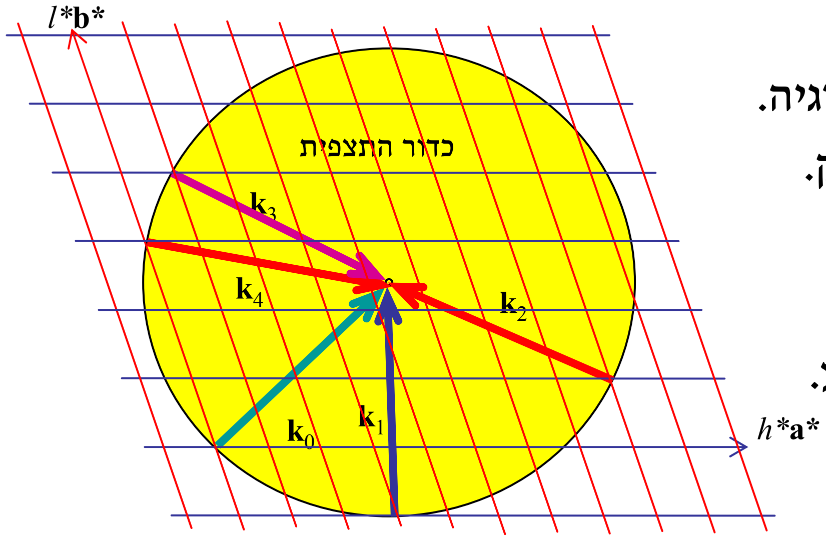
$$\left(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0\right)/2\pi = h^*\mathbf{a}^* + k^*\mathbf{b}^* + l^*\mathbf{c}^*; \quad h^*, k^*, l^* \text{ integers}$$

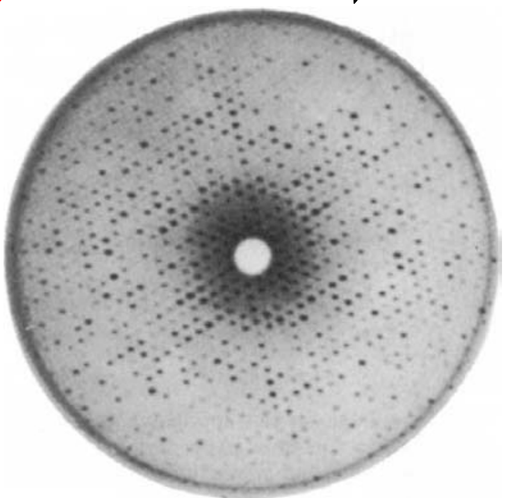
- בכל שאר המקרים הסכום מתאפס. זוהי הגדרת הסריג ההפכי של פונקציות δ.
- רק הקרנים המקיימות את התנאי לעיל ואת התנאי $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0|$ מופיעות.
- שני התנאים ניתנים לייצוג גרפי על ידי כדור התצפית (כדור אוואלד) והסריג ההפכי.
- מחפשים נקודות הנמצאות גם בסריג וגם על פני הכדור.
- הראשית היא הנקודה $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$.
- המרכז הוא $\mathbf{k}_0$.



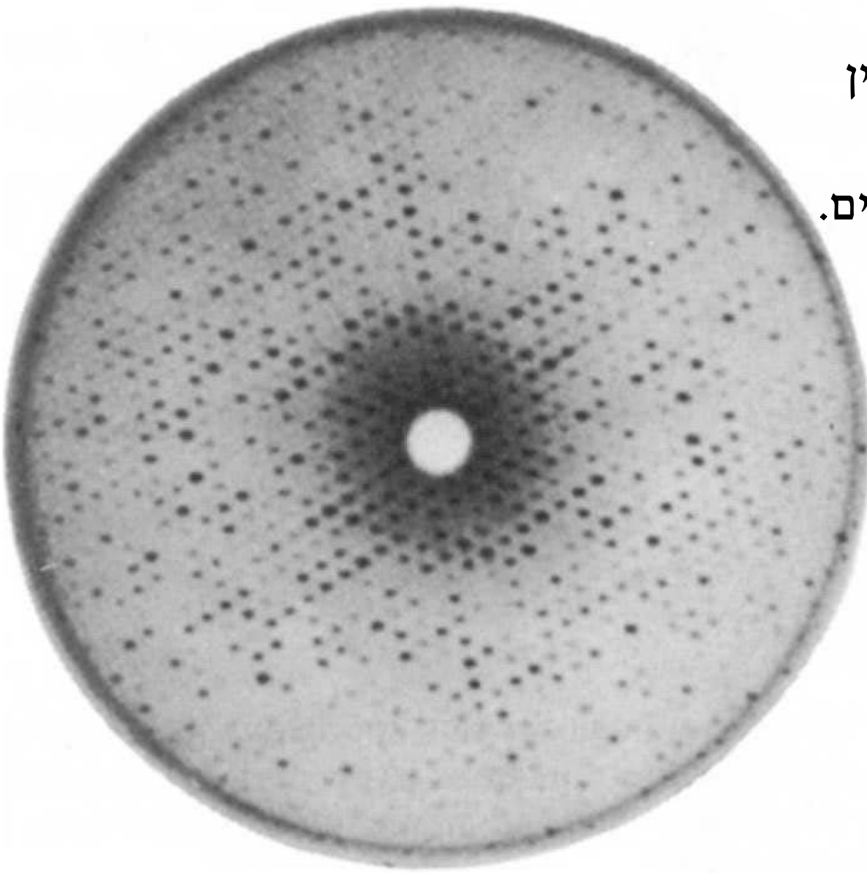
תנאי קיום

- נקודות הסריג: $(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)/2\pi = h^*\mathbf{a}^* + k^*\mathbf{b}^* + l^*\mathbf{c}^*;\quad h^*, k^*, l^*$ integers
- רדיוס הכדור $|\mathbf{k}_0| = |\mathbf{k}|$.
- במקרה הקיצוני אין חפיפה וסדר האפס מקבל את כל האנרגיה.
- קרן הרנטגן אינה מונוכרומטית בדיוק, ואינה מקבילה בדיוק.
- לכן כיוון ואורך וקטור הגל אינם מוגדרים.
- הדבר מאפשר פתרון פיסיקלי לבעית חפיפת הכדור והסריג.
- בוחרים את כוון הקרן, הסריג, והמצלמה ומוצאים h^* קבוע.
- מסתירים את סדר האפס.
- זוהי תמונה של המוגלובין בבחירת אינדכס קבוע כזה.





עקיפה מסריג מלא

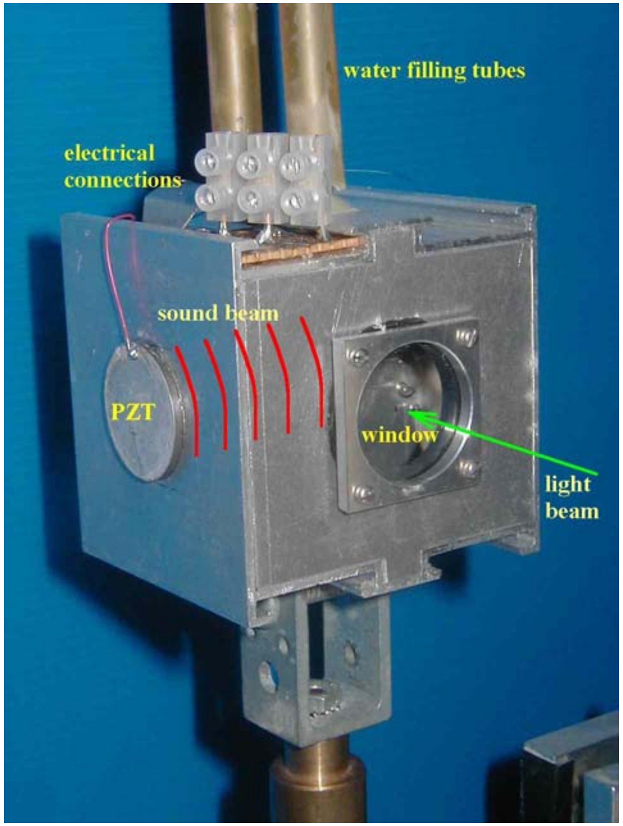


- אנו רואים כי העוצמות אינן משתנות בצורה סדירה.
- הדבר נובע מכפל הסריג ההפכי בהתמרת מיקומי האטומים בתא היחידה.
- בקריסטלוגרפיה מושקע מאמץ רב בהבנת שינויים אלו.
- בעקיפת קרני רנטגן וניטרונים לרוב הפיזור הוא חלש, ואין פגיעות כפולות.
- בעקיפת אלקטרונים קורים לעתים קרובות פיזורים מרובים.
- בעקבות כך גם משתנה גודל הנקודות בתמונת העקיפה.
- בין השאר, הדבר נובע מרוחב הפס או אי-מקבילות הקרן.
- פונקצית הצורה של הגביש מגדילה בצורה זניחה ובלתי מדידה את הנקודות.

האפקט האקוסטו-אופטי

- ניתן להשתמש בחשבון העקיפה התלת מימדית במקרים של פיזור חלש. לדוגמה, באפקט האקוסטו אופטי קיים סריג הפכי וכדור תצפית.
- בתא האקוסטו-אופטי יש סריג חד-מימדי של אפנון של מקדם השבירה. האפנון מושג של ידי גל אולטרה-סוני המתקדם במים (שמגיבים היטב יחסית לגבישים לקול). המים נדחסים מעט מאוד ומשנים את צפיפותם – ואת מקדם השבירה – בגלל הלחץ המחזורי. נוצר גל מתקדם (או עומד) במקדם השבירה שמשרעתו A ותידרו Ω הנע בוקטור גל **q**:

$$\mu(\mathbf{r}) = \mu_W + A\cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \Omega t)$$



- מהירות הקול במים v = 1500 m/sec. ניקח תדר אופייני $\Omega = 2\pi \times 10$ MHz. אורך הגל של גל הקול הוא $\Lambda = 2\pi / q = 1500 / 10^7 = 150\ \mu$m.
- אורך גל האור בנראה $\Lambda >> \lambda \approx 0.55\ \mu$m.
- המים משמשים כסריג מופע תלת-מימדי במחזור של חלקי מילימטר.
- השתנות הסריג איטית יחסית, $v << c$, והוא נראה קפוא לאור.
- הבעיה מסובכת בגלל ששינויי הצפיפות גם שוברים את הקרן וגם יוצרים עקיפה. נתיחס לעקיפה בלבד.

שינוי צפיפות המים

- הסריג מיוצג על ידי פונקציית העברה מרוכבת

$$f(\mathbf{r}) = \exp\left\{ i\int^{\mathbf{r}} \left[\mu(\mathbf{r}') - 1 \right] k_0 \cdot \mathrm{d}\mathbf{r}' \right\}$$

- האינטגרציה מתחילה מנקודת כניסת האור לתא ועד לנקודת הפיזור **r**.
- נניח שעובי הדגם הוא d בניצב לאור ונחליף את האינטגרל בערך הממוצע על פני מקדם השבירה. נקבל

$$f(\mathbf{r}) = \exp\left\{ i\left[\mu(\mathbf{r}) - 1 \right] k_0 d \right\}$$

- כיון שהשינוי במקדם השבירה בגלל הצפיפות הוא פחות מ-10^{-6}, נפתח בטור ונקבל

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}) &= \exp\left\{ ik_0 d\left[\mu_W - 1 + A\cos\left(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \Omega t \right) \right] \right\} \\ &\approx \exp\left[ik_0 d\left(\mu_W - 1 \right) \right]\left[1 + iAk_0 d\cos\left(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \Omega t \right) \right] \end{aligned}$$

התמרת פוריה

$$f(\mathbf{r}) \approx \exp\left[ik_0 d\left(\mu_W - 1\right)\right]\left[1 + iAk_0 d\cos\left(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \Omega t\right)\right]$$

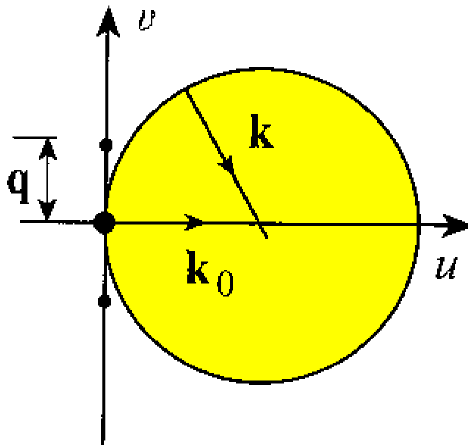
- נבצע התמרת פוריה ונקבל

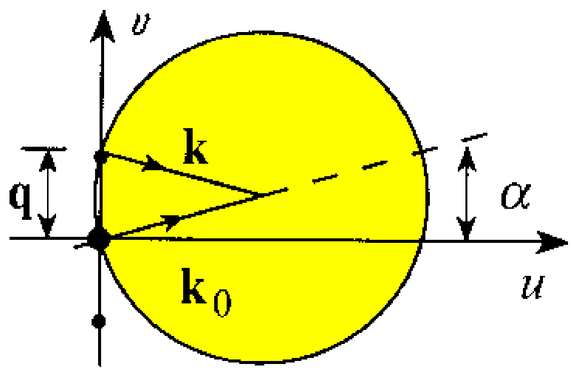
$$F(u) = \exp\left[ik_0 d\left(\mu_W - 1\right)\right]\cdot$$
$$\cdot\left[\delta(\mathbf{u}) + \tfrac{1}{2}iAk_0 d\exp\left(-i\Omega t\right)\delta\left(\mathbf{u}-\mathbf{q}\right) + \tfrac{1}{2}iAk_0 d\exp\left(i\Omega t\right)\delta\left(\mathbf{u}+\mathbf{q}\right)\right]$$

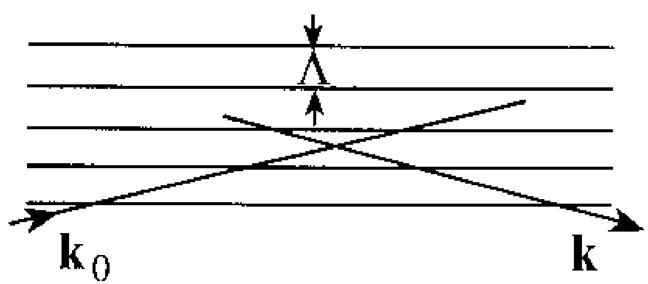
- קיבלנו שלוש פונקציות δ, אחת חזקה בראשית וחלשות משני צדדיה במרחק $\pm\mathbf{q}$.
- כעת יש לצרף את מעגל התצפית להתמרת פוריה זו .

עקיפה בתא אקוסטו-אופטי

$$F(u)=\mathrm{e}^{ik_0 d(\mu_W-1)}\left[\delta(\mathbf{u})+\tfrac{1}{2}iAk_0 d\,\mathrm{e}^{-i\Omega t}\,\delta(\mathbf{u}-\mathbf{q})+\tfrac{1}{2}iAk_0 d\,\mathrm{e}^{i\Omega t}\,\delta(\mathbf{u}+\mathbf{q})\right]$$







- פגיעה ניצבת ל-**q**. אין קרן מפוזרת.
- פגיעה בזוית α (או $-\alpha$) הנתונה על ידי

$$q=\pm 2\,\mathrm{k}_0 \sin\alpha$$

- נציב את ערכי אורכי הגל ונקבל

$$\lambda = 2\,\Lambda\,\sin\alpha$$

- זוהי נוסחת בראג לפיזור בסריג במרחק מישורים Λ.
- שתי הקרנים היוצאות $A\,k_0\,d\,\mathrm{e}^{\pm i\Omega t}$ יכולות להתאבך.
- אם הן מוזזות בתדר בגלל גל הקול, יראה הדבר כהזזת דופלר בגלל סריג מתקדם.

פיזור ראמאן-נאת'

- אם גודל התא או הגביש אינו אינסופי ביחס לאורך הגל האקוסטי, יש להתחשב שוב בפונקצית הצורה.
- פונקצית הצורה תהיה 1 בתוך הדגם, 0 בחוץ. התמרת פונקצית הצורה עוברת קונבולוציה עם פונקציות ה-δ של הקרנים היוצאות.
- לכן תנאי בראג יהיה עכשו

$$\lambda \approx 2\,\Lambda\,\sin\alpha$$

- במקרה קיצוני התא כל כך דק בניצב ל-**q** שאז נקודות ההתמרה מרוחות בכיוונו.
- במקרה כזה נקבל עקיפה בכל כיוון פגיעה.
- מתקיים אז התנאי

$$m\lambda = d\,(\sin\theta - \sin\theta_0)$$

- זהו פיזור Raman-Nath.