

# Chimie Anorganica Moderna: Cuanto-chimie si cristalografie

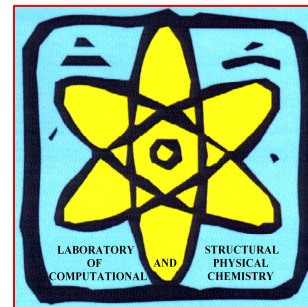
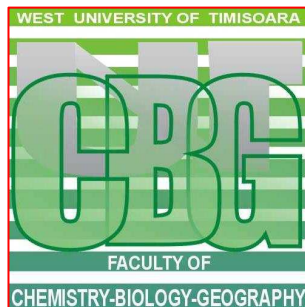
## L2: INTRODUCERE ÎN DIFRACTIA CU RAZE X

### Conf. Dr. Mihai V. PUTZ

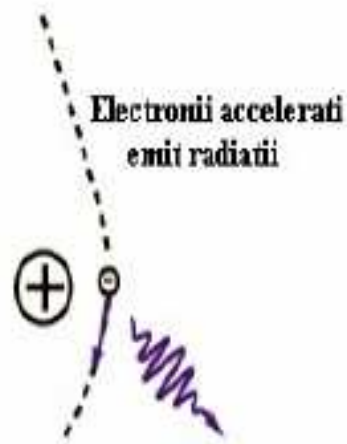
*Chemistry Department, West University of Timisoara,  
Pestalozzi Street No.16, Timisoara, RO-300115, Romania;  
E-mails: [mvputz@cbg.uvt.ro](mailto:mvputz@cbg.uvt.ro) or [mv\\_putz@yahoo.com](mailto:mv_putz@yahoo.com) ;  
Web: <http://www.mvputz.iqstorm.ro>*

*Member of American Chemical Society  
Member of European Society of Mathematical Chemistry*

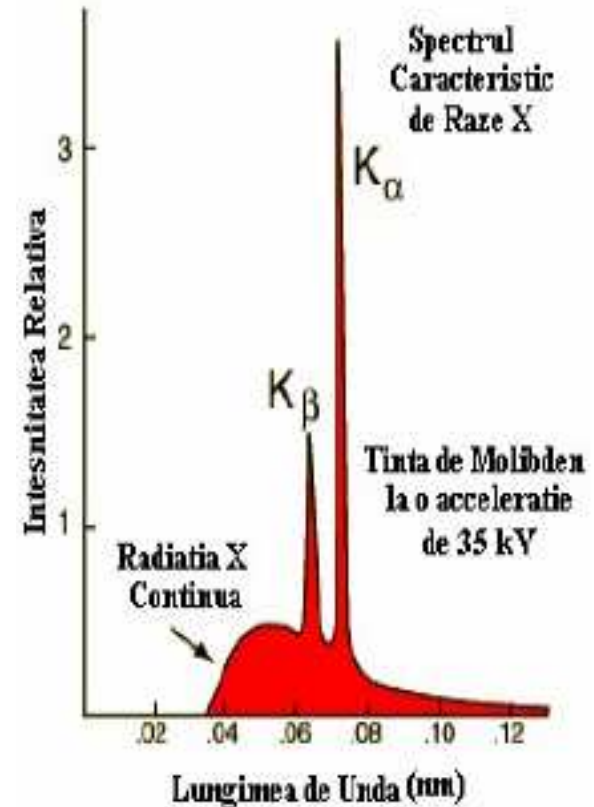
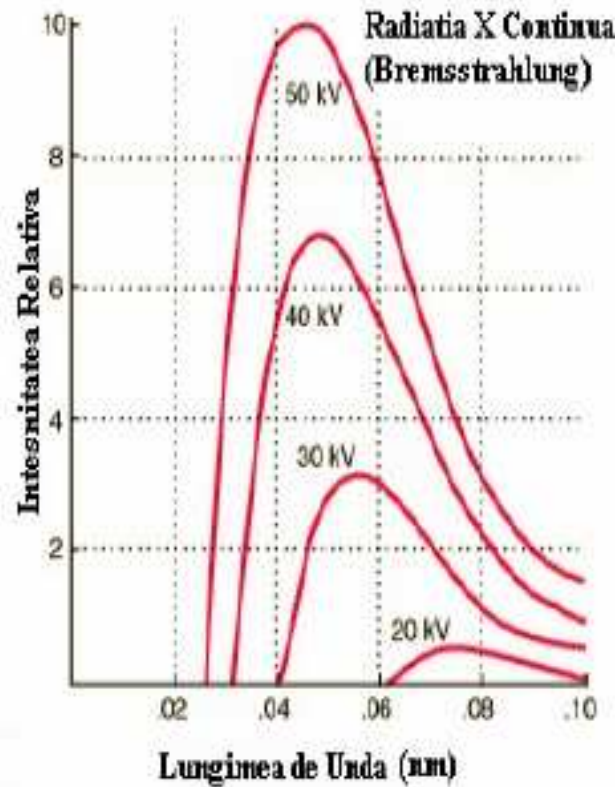
*Editor in-Chief of Int. J. Chem. Model. (at NOVA Publishers)  
Editor in-Chief of Int. J. Environ. Sci. (at SERIALS Publishers)  
Guest Editor & Editor of Int. J. Mol. Sci. (at MDPI Organization)*



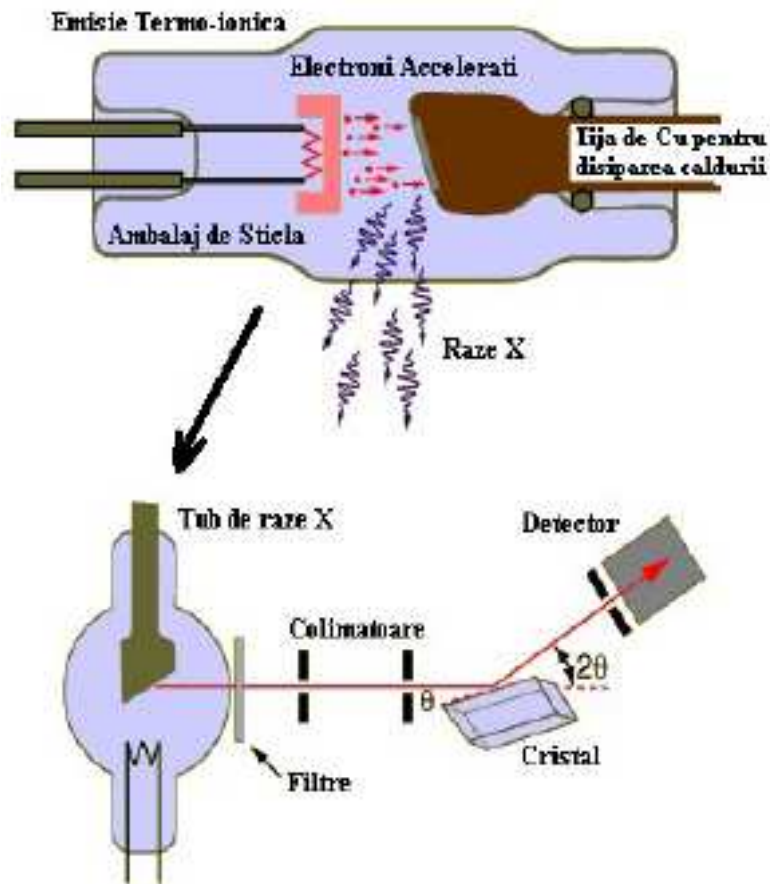
Cu (producând linia  $K\alpha$  cu  $\lambda=1.54\text{\AA}$ )  
 Mo (producând linia  $K\alpha$  cu  $\lambda=0.71\text{\AA}$ )



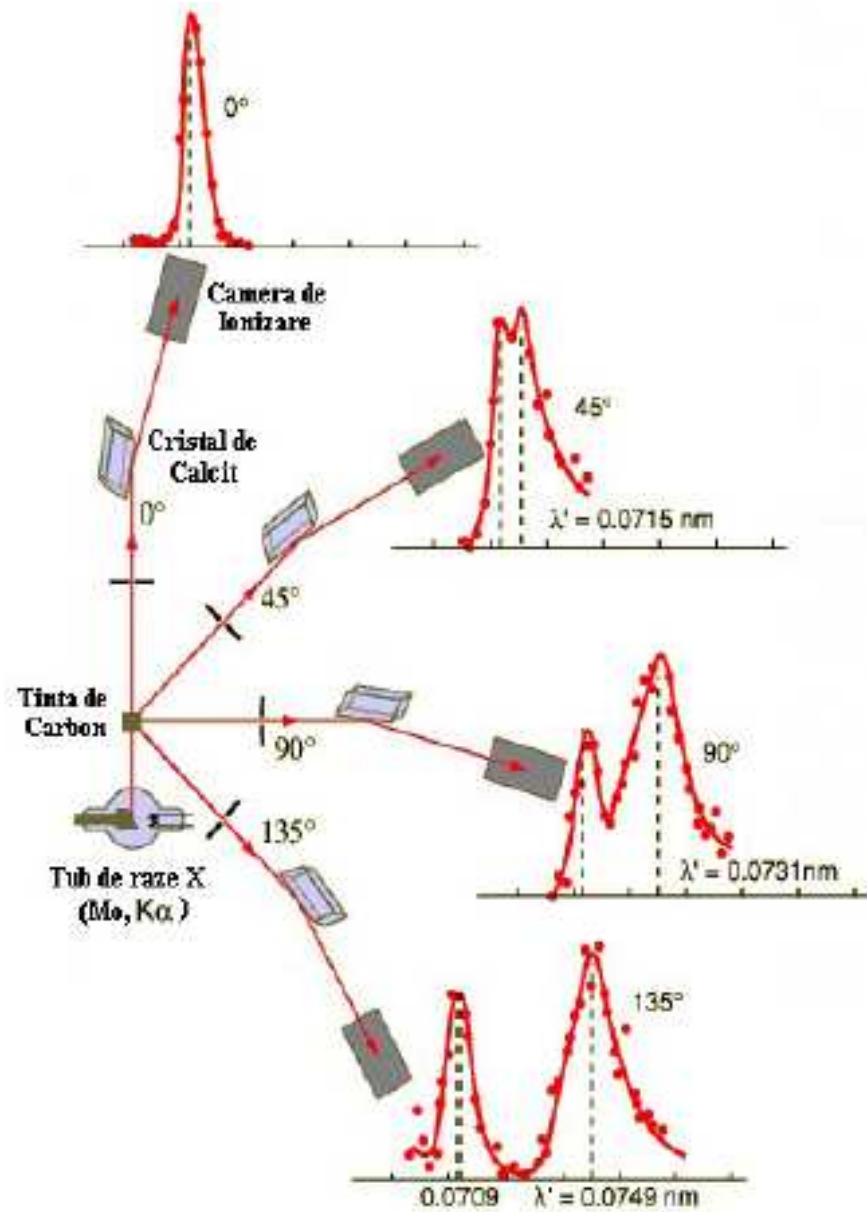
cca. 10 nm  
 cca.  $3 \times 10^{16}$  Hz  
 de cca. 124 eV



# Arthur H. Compton



*tub (sau tun) de raze X.*



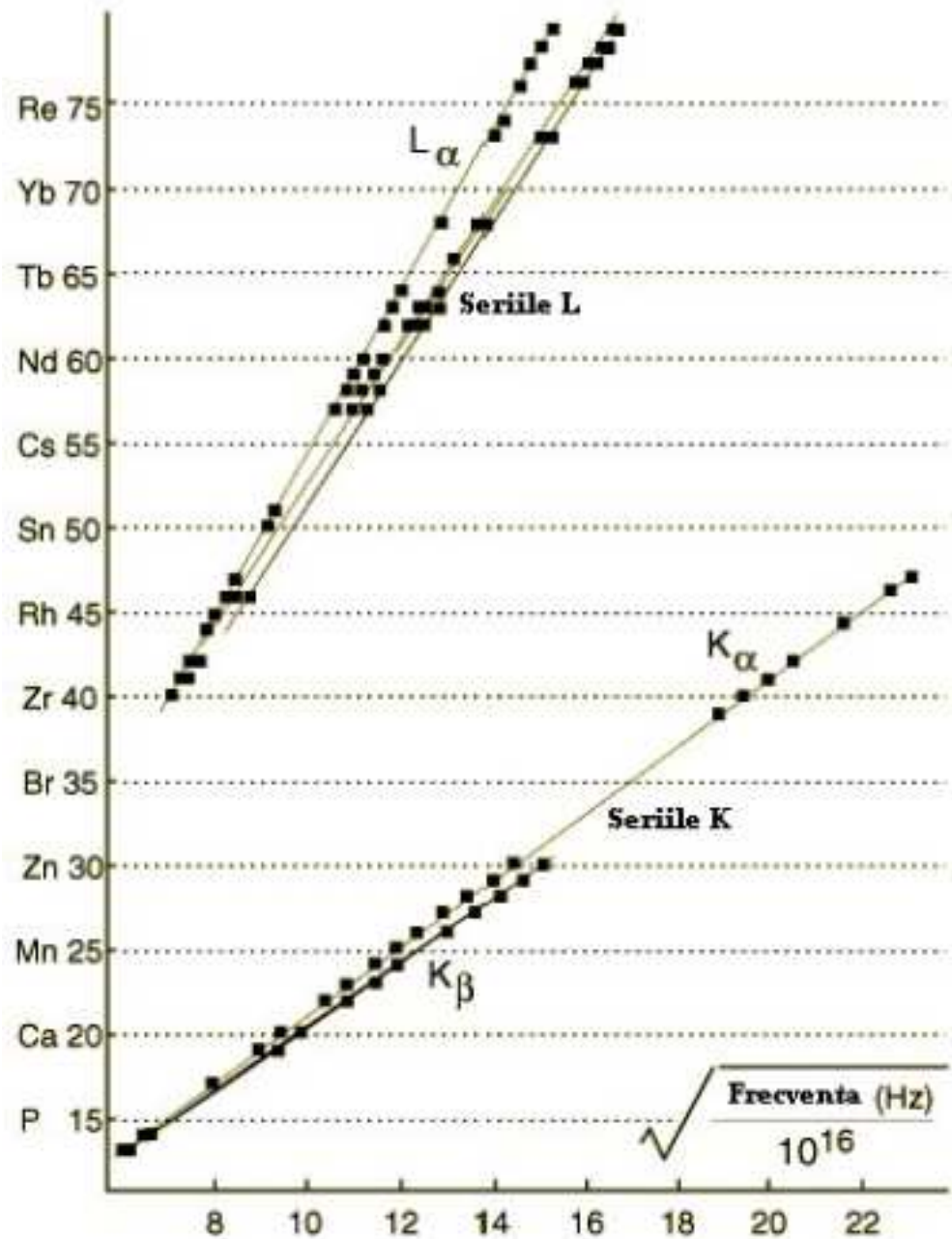
Henry G. Mosely (1887-1915)

$Z_{\text{efectiv}}$

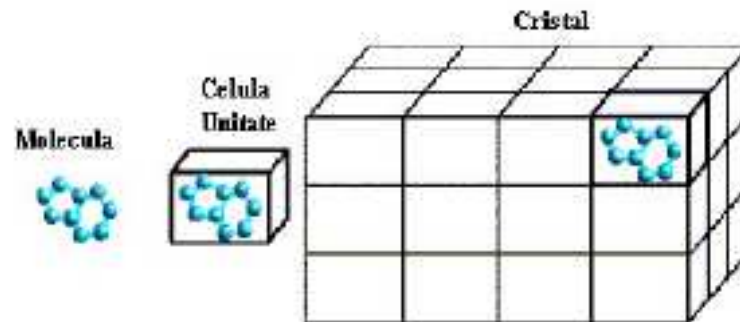
$$h\nu_{K\alpha} = 13.6[eV](Z - 1)^2 \left[ \frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right]$$

$$h\nu_{L\alpha} = 13.6[eV](Z - 7.4)^2 \left[ \frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2} \right]$$

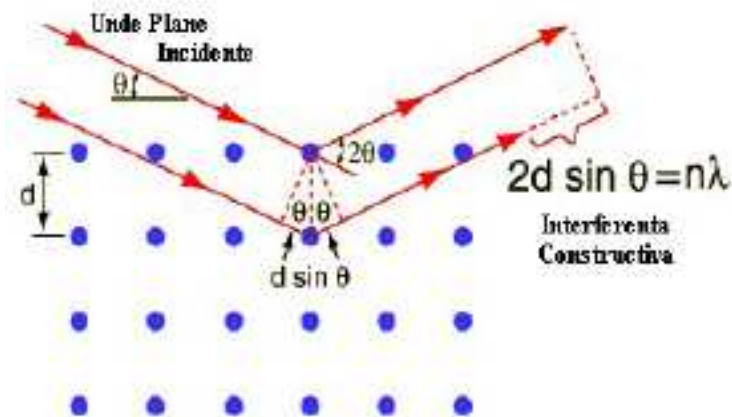
*Graficul Mosely.*



Revenindu-se la spectrometrul cu raze X: *de ce cristalele?*

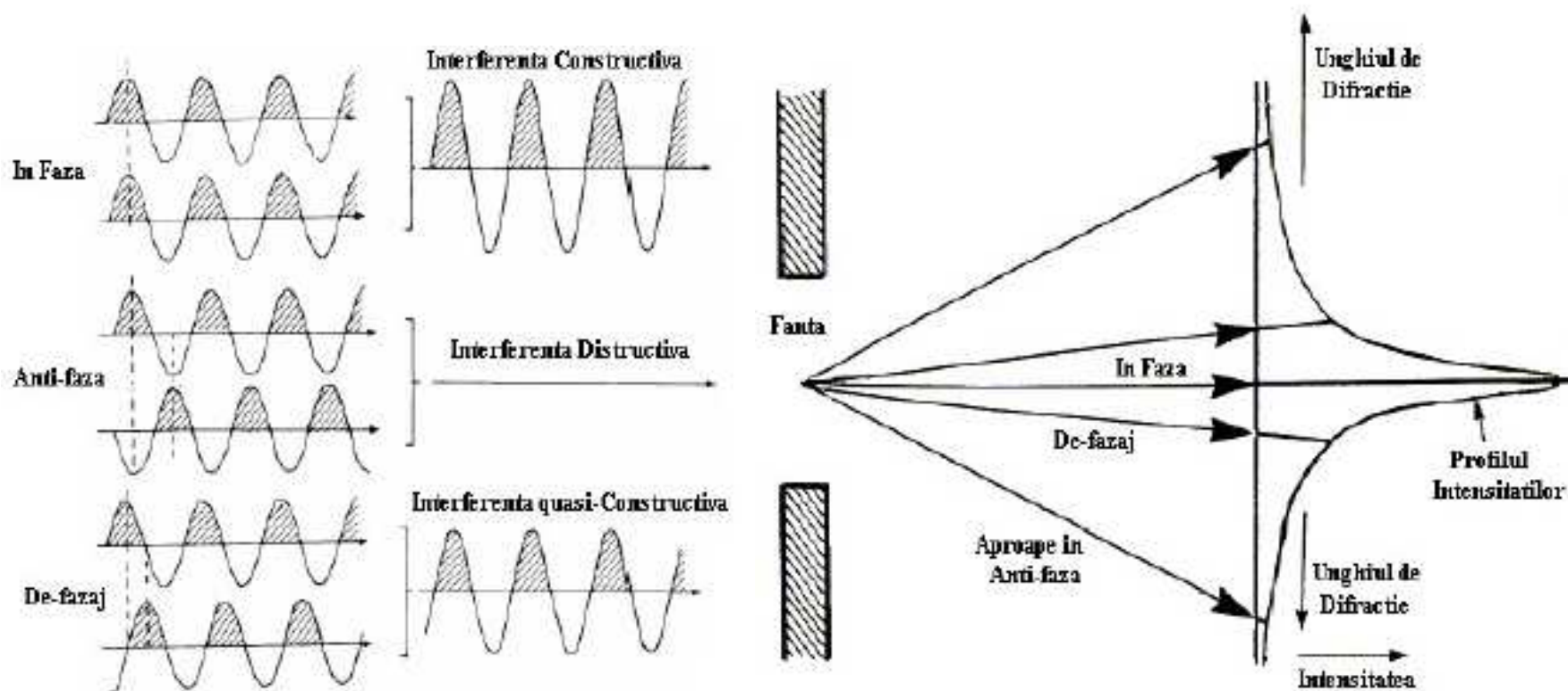


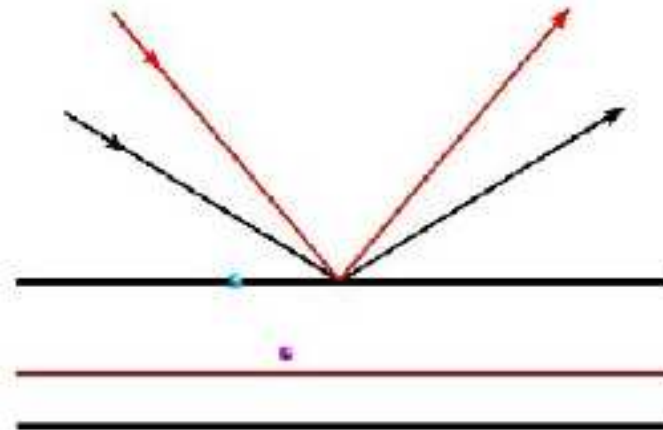
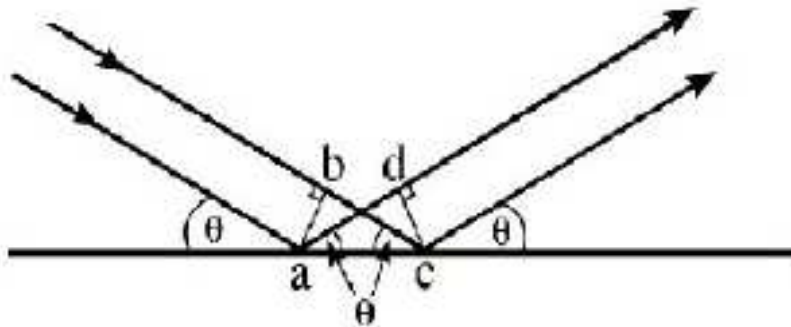
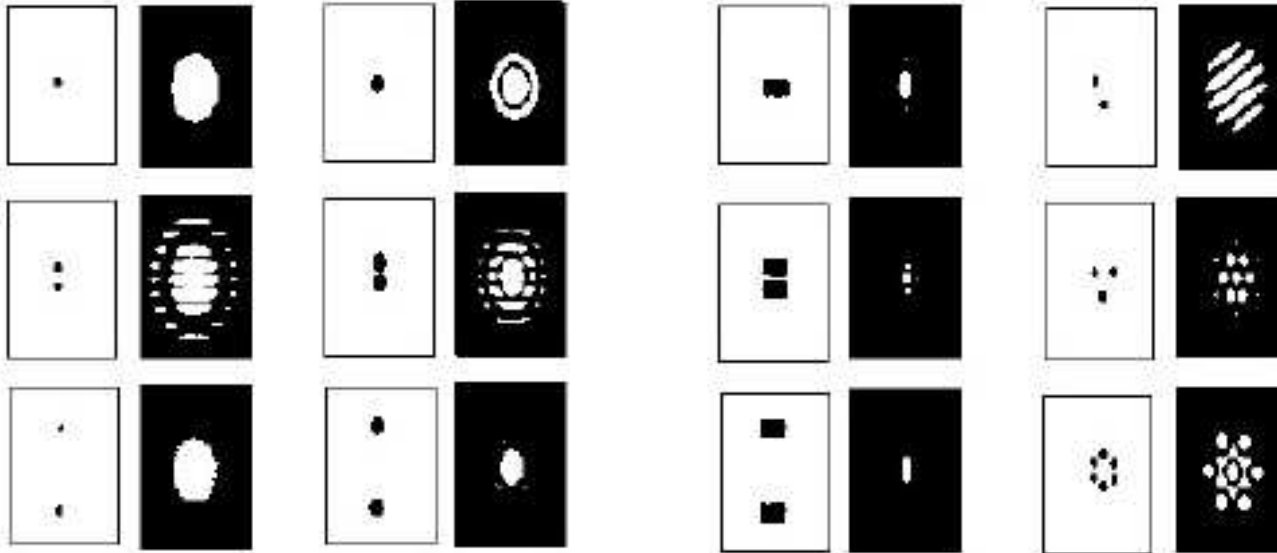
*starea cristalină are rol de amplificator!*



*legea Bragg*

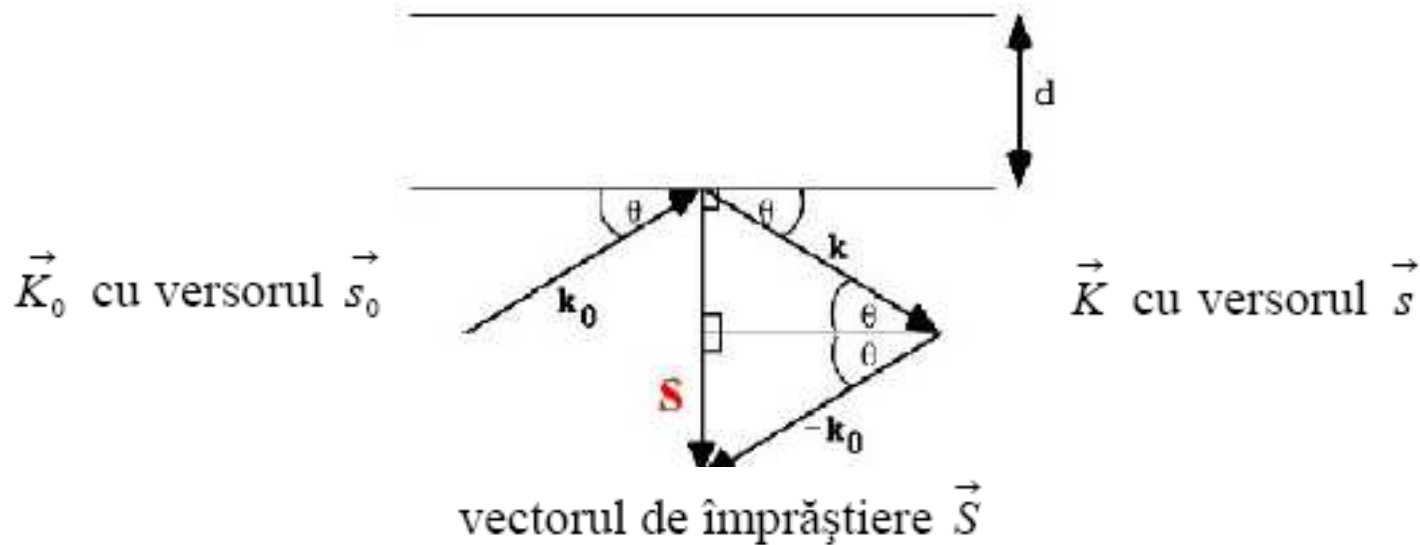
De ce este necesar ca radiația X să fie *reflectată* de planele cristaline, pentru a se putea înregistra structura acestora? Motivul este extrem de simplu: când unghiul de reflexie este egal cu unghiul de incidență razele X care sunt în fază “la intrare”, vor fi în fază și “la ieșire”, indiferent de locul în care are loc difracția-reflexia.





$$d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}$$

Descrierea difracției cu raze X în termenii vectorilor de undă.



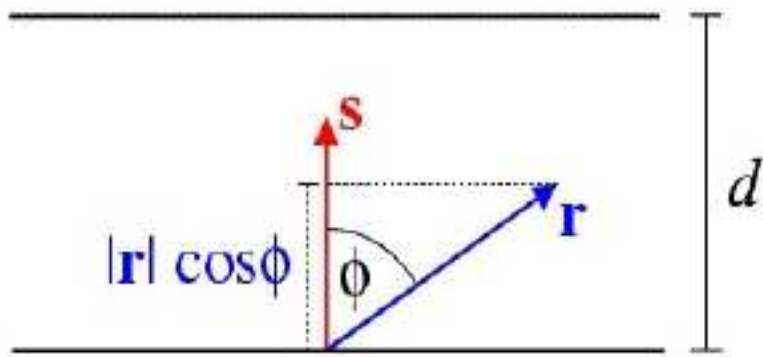
$$\vec{S} = \vec{K} - \vec{K}_0 = \frac{\vec{s}}{\lambda} - \frac{\vec{s}_0}{\lambda}$$

$$\vec{S} \cdot \vec{S} = \frac{1}{\lambda^2} \left( s^2 + s_0^2 - 2\vec{s} \cdot \vec{s}_0 \right) = \frac{2(1 - \cos 2\theta)}{\lambda^2} = \frac{4 \sin^2 \theta}{\lambda^2}$$

$$S = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}$$



*localizarea electronilor*



$$2\pi \left[ \left( \vec{K} - \vec{K}_0 \right) \cdot \vec{r} \right] = 2\pi \left( \vec{S} \cdot \vec{r} \right)$$

planele adiacente (la distanța  $r = d$ )

o fază corespunzătoare la  $2\pi$

$$\vec{S} \cdot \vec{r} = 1$$

echivalentă cu rezoluția:

$$S = \frac{1}{d}$$

*spațiul reciproc* (spațiul vectorilor de undă)

*corespunde*

*spațiului de difracție!*

$$\vec{S} \cdot \vec{r} = S r \cos \phi = \frac{r}{d} \cos \phi$$

Se concluzionează că, deși în spațiul reciproc, difracția în raze X este cu atât mai sensibilă cu cât obiectele supuse difracției (centrii de împrăștiere) sunt mai apropiați în spațiul real! Această legătură intimă între spațiul real investigat și spațiul reciproc, spațiul de difracție, permite în cele din urmă exprimarea mărimilor reale de localizare, în special densitatea electronică, în funcție de mărimile de difracție, legătură ce va fi expusă în continuare.