

Methods of Modern X-ray Physics: Scattering and Imaging

G. Grübel, O. Seeck, A. Kobs, V. Markmann, F. Lehmkuhler

1. DIFFUSION VON NANOPARTIKELN

- a) Bestimmen Sie die Relaxationszeit von kolloidalen Teilchen bei Raumtemperatur ($T=293$ K) mit Radius $r = 100$ nm für ein relevantes q (welches und warum?), die Brown'scher Bewegung folgen (Diffusion) in
 - i. Wasser
 - ii. Glyzerin
- b) Wie groß darf ein Nanopartikel sein, damit man seine Diffusion am European XFEL mit sequentiellen Röntgenpulsen messen kann ($\tau_0 \approx t_{rep}$)?
- c) Wie verändert sich die gemessene g_2 Funktion wenn die Teilchen nicht monodispers sind?

2. GERICHTETE BEWEGUNG

Neben der Diffusion von Partikeln können in einigen Fällen externe Kräfte die gemessene g_2 Funktion in XPCS Experimenten beeinflussen.

- a) Nennen (und ggf. skizzieren) Sie Beispiele für solche Fälle.

In solchen Fällen kann die sog. Intermediate scattering function $f(Q, t)$ (siehe Vorlesung 8, Folie 16f) als Produkt von zwei Beiträgen geschrieben werden: $f(Q, t) =$

$f_{diffusive}(Q, t) \cdot f_{advective}(Q, t)$, wobei $f_{diffusive}$ den normalen Diffusionsbeitrag

beschreibt und $f_{advective}$ eine richtungsabhängige Größe ist. Für eine Bewegung in eine Richtung parallel zu Q_z , ist diese gegeben durch

$$f_{advective}(Q_z, t) = \frac{1}{v \cdot Q_z \cdot t} \sin(v \cdot Q_z \cdot t), \text{ mit einer effektiven Geschwindigkeit } v.$$

- b) Berechnen und skizzieren sie die g_2 Funktion $g_2(Q, t) = |f_{diffusive}(Q, t) \cdot f_{advective}(Q, t)|^2$ für Nanopartikel mit Radius 100 nm in Wasser bei Raumtemperatur (293 K) und $Q = 0.1 \text{ nm}^{-1}$ für folgende Fälle:
 - a. Messung in Bewegungsrichtung ($Q_z = Q$), $v = 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4} \text{ m/s}$
 - b. Messung senkrecht zur Bewegungsrichtung ($Q_z = 0$), $v = 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4} \text{ m/s}$
 - c. Messung 45° zur Bewegungsrichtung ($Q_z = \frac{Q}{\sqrt{2}}$), $v = 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4} \text{ m/s}$
 - d. Interpretieren sie die Unterschiede der Fälle a und b hinsichtlich der gemessenen Beiträge der Dynamik.

Methods of Modern X-ray Physics: Scattering and Imaging

G. Grübel, O. Seeck, A. Kobs, V. Markmann, F. Lehmkuhler

1. DIFFUSION OF NANOPARTICLES

- a) Calculate the time of relaxation for the diffusion of colloidal particles of radius 100 nm at room temperature. Choose a relevant q (which? why?) for particles dispersed in
 - i) Water
 - ii) Glycerol
- b) What is the maximum particle size for which we can see diffusion at the European XFEL? (assume sequential x-ray pulses $\tau_0 \approx t_{rep}$)
- c) In which way does the g_2 function change for non-monodisperse particles?

2. DIRECTION-DEPENDENT MOVEMENT

In XPCS experiments not only diffusion plays an important role. Sometimes external forces influence the results of the g_2 function

- a) Discuss possible external forces and their influence on the g_2 function

In these cases, the intermediate scattering function $f(Q, t)$ becomes a product:

$f(Q, t) = f_{diffusive}(Q, t) \cdot f_{advective}(Q, t)$, where $f_{diffusive}$ is the normal diffusion contribution and $f_{advective}$ is a direction-dependent movement. For a movement parallel to Q_z we assume $f_{advective}(Q_z, t) = \frac{1}{v \cdot Q_z \cdot t} \sin(v \cdot Q_z \cdot t)$, with an effective velocity v .

- b) Sketch $g_2(Q, t) = |f_{diffusive}(Q, t) \cdot f_{advective}(Q, t)|^2$ for nanoparticles of a radius 100 nm in water at roomtemperature (293 K) at $Q = 0.1 \text{ nm}^{-1}$ for measurements:
 - i) in the direction of movement ($Q_z = Q$), $v = 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4} \text{ m/s}$
 - ii) perpendicular to the direction of movement ($Q_z = 0$), $v = 10^{-2} \text{ m/s}$
 - iii) at an 45° angle to the direction of movement ($Q_z = \frac{Q}{\sqrt{2}}$), $v = 10^{-2} \text{ m/s}$
 - iv) Discuss differences between i) and ii)