

Methoden moderner Röntgenphysik: Streuung und Abbildung

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

1. KONTRASTBESTIMMUNG MIT VERTEILUNGSFUNKTIONEN

Bei geringen Streu-Intensitäten kann der Speckle-Kontrast mittels der Verteilung von 0-, 1-, 2- etc. Photonevents bestimmt werden. Diese wird dann durch eine negative Binomialverteilung

$P_{nb}(i) = \frac{\Gamma(i+M)}{\Gamma(M)\Gamma(i+1)} \left(1 + \frac{M}{\langle i \rangle}\right)^{-i} \left(1 + \frac{\langle i \rangle}{M}\right)^{-M}$ beschrieben. Dabei ist $i=0, 1, 2, 3, \dots$ die Anzahl von Photonen in einem Pixel, $\langle i \rangle$ die mittlere Zählrate des Detektors und $M=1/\beta$.

- Bestimmen Sie den Kontrast β mittels des Verhältnisses aus 1 und 2 Photonen-Events.
- Schätzen Sie den Fehler der Kontrastbestimmung ab, wenn die mittlere Zählrate $5 \cdot 10^{-3}$ Photonen pro Pixel bei einem Megapixel Chip beträgt. Nehmen Sie einen Kontrast von 50 % an.

2. XCCA AN FLÜSSIGEN WASSER

Zur Bestimmung der lokalen Ordnung im Bereich nächster Nachbarn in einem amorphen Eis soll ein XCCA Experiment an einem XFEL durchgeführt werden. Hierbei wird das Wasser als Mikrotropfen in die Probenumgebung injiziert. Der Abstand nächster Nachbarn (O-O Distanz) beträgt etwa 2.75 Å.

- Welcher q -Bereich sollte in dem Experiment mindestens abgedeckt werden?
- Da es sich um ein kohärentes Experiment handelt, sollen auch Speckles aufgelöst werden. Die Energie der Röntgenpulse ist 9 keV, als Detektor wird ein AGIPD 1M (1024 x 1024 Pixel mit 200 μm x 200 μm Größe) verwendet.
 - Können damit Speckles im Bereich des in a) ermittelten q -Wertes gemessen werden, wenn die Strahlgröße auf 500 nm fokussiert wird?
 - Wie groß müsste ein Detektor des Typs AGIPD sein und wo muss er platziert werden, um ein Speckle-Signal mit 1:1 Speckle- zu Pixelgröße zu messen?
- Es stellt sich heraus, dass das Wasser während des Experiments zu hexagonalen Eis kristallisiert. Die ersten vier Bragg peaks ($\{100\}$, $\{002\}$, $\{101\}$ und $\{102\}$) werden bei den q -Werten 1.608 Å⁻¹, 1.711 Å⁻¹, 1.822 Å⁻¹, und 2.348 Å⁻¹ gemessen. Es handelt sich um die Raumgruppe P6₃/mmc, d.h. ein hexagonales Gitter mit $a=b < c$ und $\alpha=\beta=90^\circ$ und $\gamma=120^\circ$.
 - Bestimmen sie die Werte der Gitterkonstanten a und c aus den gemessenen Peak-Positionen.
 - Welche Symmetrien würde in einem XCCA Experiment gemessen werden, wenn man die ersten drei Peaks betrachtet? Hinweis: Korrelationen können nur zwischen äquivalenten Bragg-Reflexen gemessen werden, die von demselben Kristallit erzeugt wurden (siehe z.B. <http://journals.iucr.org/j/issues/2016/06/00/zg5001/index.html>). Dieses äußert sich in Maxima der Korrelationsfunktion $C(\Delta)$ für bestimmte Korrelationswinkel Δ bei dem entsprechenden Wellenvektorübertrag der Bragg-Reflexion.

Methoden moderner Röntgenphysik: Streuung und Abbildung

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

1. SPECKLE CONTRAST WITH DISTRIBUTION FUNCTIONS

The speckle contrast can be obtained from the distribution of 0-, 1-, 2- etc. photon events at low intensities. This distribution is modeled by a negative binomial distribution $P_{nb}(i) = \frac{\Gamma(i+M)}{\Gamma(M)\Gamma(i+1)} \left(1 + \frac{M}{\langle i \rangle}\right)^{-i} \left(1 + \frac{\langle i \rangle}{M}\right)^{-M}$. Here, $i = 0, 1, 2, 3, \dots$ denotes the number of photon in a pixel, $\langle i \rangle$ the average count rate in the detector and $M=1/\beta$.

- a) Determine the speckle contrast β from the ratio of 1 and 2 photon events.
- c) Estimate the error of the contrast determination using an average count rate of $5 \cdot 10^{-3}$ photons per pixel and a megapixel detector chip. Consider a speckle contrast of 50 %.

2. XCCA ON LIQUID WATER

To determine the local order in the vicinity of the next-neighbour distance in amorphous Ice, an XCCA experiment should be performed at an XFEL source. Water microdroplets will be injected into the sample chamber by a liquid jet. The next-neighbour distance (O-O distance) is approximately 2.75 Å.

1. Which q-range needs to be covered in the experiment?
2. As a coherent scattering experiment is performed, speckles should be resolved. The X-ray energy is 9 keV, an AGIPD 1M is used as detector (1024 x 1024 pixels with 200 μm x 200 μm size each).
 - i. Can speckles be resolved in the q-range found in a)? Consider using a focused beam of 500 nm size.
 - ii. What size is needed for an AGIPD-type detector and where should it be placed to measure a speckle signal with 1:1: speckle-to-pixel size?
3. The water freezes during the experiment and forms hexagonal ice. The first four Bragg peak ($\{100\}$, $\{002\}$, $\{101\}$, and $\{102\}$) are found at q-values of 1.608 Å⁻¹, 1.711 Å⁻¹, 1.822 Å⁻¹, und 2.348 Å⁻¹. Hexagonal ice has the space group P6₃/mmc, i.e. a hexagonal lattice with $a=b < c$ and $\alpha=\beta=90^\circ$ and $\gamma=120^\circ$.
 - i. Determine the lattice constant a and c from the measured peak positions.
 - ii. Which symmetries would be measured in an XCCA experiment for the first three peaks? Hint: Correlations can only be found between equivalent Bragg reflections, that originate from the same crystallite (see e.g. <http://journals.iucr.org/j/issues/2016/06/00/zg5001/index.html>). Maxima of the correlation function $C(\Delta)$ can only be found for particular correlation angles Δ at q-values of the Bragg peaks.