

## Methoden moderner Röntgenphysik: Streuung und Abbildung

G. Grübel, O. Seeck, L. Müller, L. Frenzel, F. Lehmkuhler

---

### 1. XCCA AN KOLLOIDALEN KRISTALLEN

Im Vergleich mit atomaren und molekularen Kristallen (z.B. Metalle, Salze, ...) bilden kolloidale Systeme qualitativ schlechte Kristalle, insbesondere mit vielen Fehlstellen, und unterschiedlichen Strukturen (z.B. fcc, hcp, ...).

- a) Was könnte ein Grund dafür sein?

Da die Auflösung von SAXS Experimenten an kolloidalen Kristallen limitiert ist, können Kristallstrukturen oftmals nicht mit Standardmethoden (z.B. Indizierung von Bragg-Reflexen) bestimmt werden. Ein Beispiel ist die Unterscheidung zwischen fcc und hcp Gittern, bei denen die starken  $\{111\}$  (fcc) und  $\{002\}$  (hcp) Bragg-Reflexe bei gleichen Wellenvektorüberträgen erwartet werden. Röntgenkreuzkorrelation (X-ray Cross Correlation Analysis, XCCA) kann hier weitere Informationen liefern, indem man Korrelationen zwischen äquivalenten Bragg-Reflexen bestimmt, 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  $\Delta$  bei dem entsprechenden Wellenvektorübertrag der Bragg-Reflexion.

- b) Welche Voraussetzung muss erfüllt sein, dass man eine Kreuzkorrelationsanalyse von Röntgenstreuendaten von Kristalliten durchführen kann?

Hinweis: Überlegen Sie, ob man XCCA an Debye-Scherrer-Aufnahmen durchführen kann.

- c) Bei welchen Korrelationswinkeln zeigt die Korrelationsfunktion  $C(\Delta)$  Maxima im Fall der
- $\{111\}$  Reflexion für fcc und
  - $\{100\}$  Reflexion für hcp?

Hinweis: Betrachten Sie die Lage äquivalenter Gitterebenen.

### 2. DOPPELSCHUSS XPCS

Um Probendynamik im Bereich von fs bis ns mit XPCS/XSVS an Freien-Elektronenlasern zu messen, werden sogenannte Doppelschüsse, z.B. mit einer Split-and-Delay-Line, erzeugt. Der Detektor nimmt dann die Summe beider Streubilder auf. Ähnlich wie bei XSVS Experimenten, ist der Speckle-Kontrast geringer, wenn sich die Struktur der Probe zwischen den beiden Schüssen verändert hat, z.B. durch Diffusion. Eine Korrelationsfunktion kann dann stückweise mithilfe des gemessenen Speckle-Kontrasts bei Veränderung der Zeitdifferenz zwischen den Pulsen gemessen werden. Anders als bei XPCS wird der Kontrast jedoch nicht auf 0 abfallen.

Nehmen Sie an, dass jeder Einzelschuß einen Speckle-Kontrast von  $\beta^2$  erzeugt.

- Bestimmen Sie den Maximal- (d.h. keine Dekorrelation der Struktur zwischen den beiden Schüssen) und Minimalkontrast (d.h. vollständige Dekorrelation zwischen den Schüssen) in Doppel-Schuß XPCS Experimenten.
- Was ändert sich, wenn die Intensität der beiden Schüsse unterschiedlich ist?