Kleinwinkelstreuung

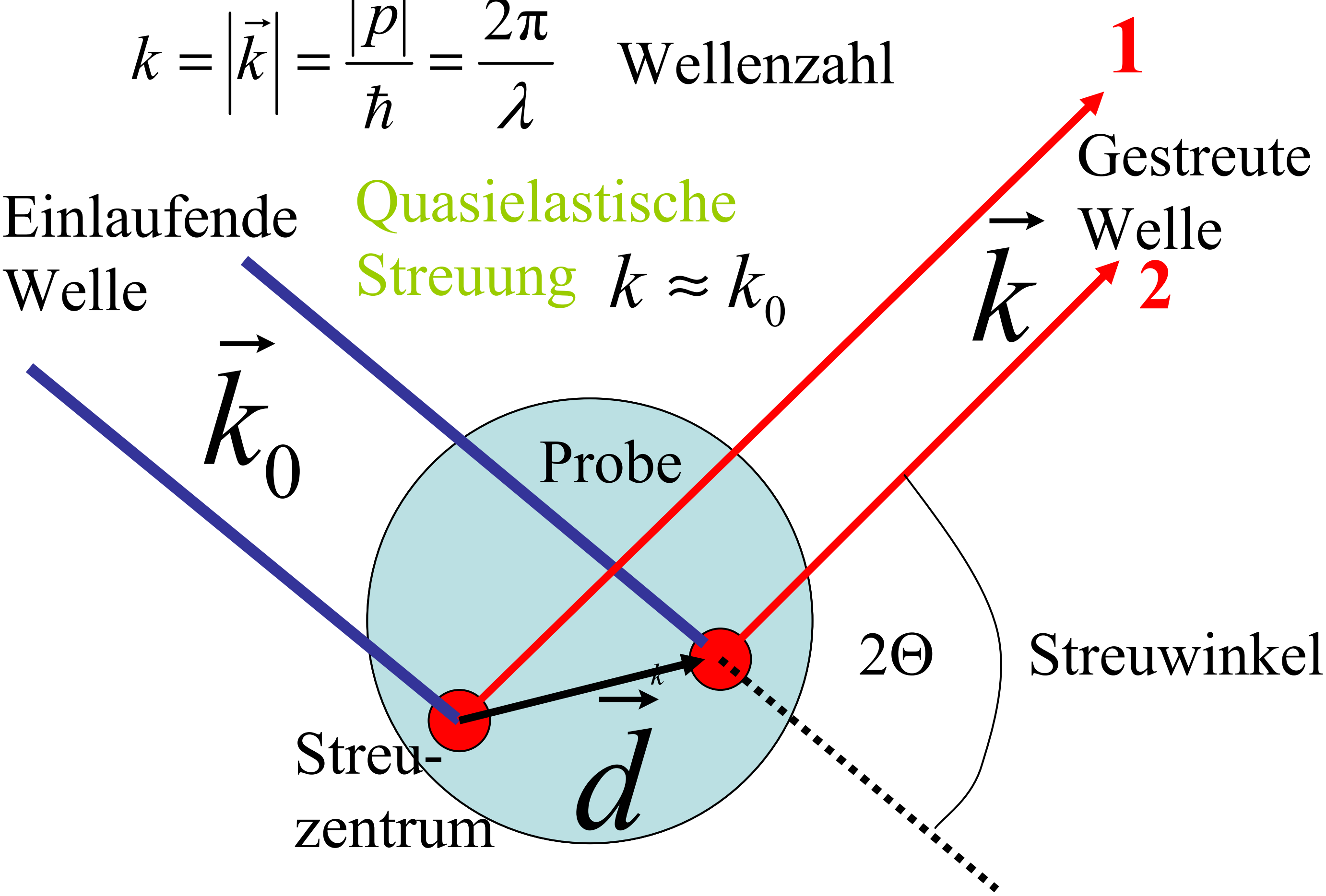
Small A ngle X -Ray S cattering,

S mall A ngle N eutron S cattering

- Streuexperiment
- Differentieller Streuquerschnitt
- Streulängendichten
- Makromoleküle in Lösung Kleinwinkelstreuung
- Kontrastvariation
- Guinier-Plot und Gyrationsradius
- Anwendungen

Prinzip eines Streuexperiments

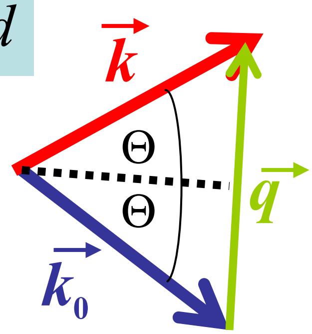
$$k = \left|\vec{k}\right| = \frac{\left|\vec{p}\right|}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda}$$ Wellenzahl



Phasenunterschied der beiden gestreuten Teilwellen

$$\Delta\varphi \equiv \varphi_1 - \varphi_2 = \vec{k}\vec{d} - \vec{k}_0\vec{d} = \vec{q}\vec{d}$$

Streuvektor $$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_0$$



$$q = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\Theta$$

Betrag des Streuvektors

Kleinwinkelstreuung

Interferenzeffekte dominant bei
$q\, d \approx \pi$,
d. h. zur Auflösung von Strukturen mit
charakteristischem Abstand z. B.
$d = 3{,}14$ nm
sollte man bis zum Betrag
$q_{max} = 1\ \text{nm}^{-1}$
des Streuvektors messen.
Je größer d, desto kleiner q_{max}.

Sei $\lambda = 1$ nm. Dann gilt für die Energie der im Streuexperiment verwendeten Teilchen:

$$\varepsilon_\gamma = \hbar\omega = \frac{hc}{\lambda} \approx 1{,}2\ \text{keV}$$

Röntgenstrahlung

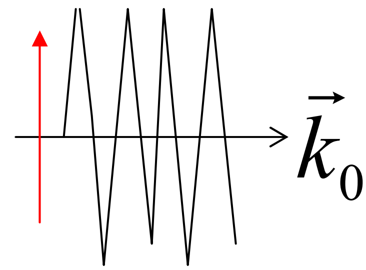
$$\varepsilon_\text{n} = \frac{(\hbar k)^2}{2m_\text{n}} = \frac{h^2}{2m_\text{n}\lambda^2} \approx 1\ \text{meV}$$

Thermische Neutronen

Streumechanismus für Röntgenstrahlung

Einlaufende elektromagnetische Welle

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{\mathrm{e}}_{\mathrm{P}} E_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\omega \cdot t - \vec{k}_0 \vec{r}\right)}$$



Polarisationsvektor $\vec{e}_{\mathrm{P}}$

Ein quasifreies Elektron (e, m_{e}) am Ort $\vec{r}$

wird zum Mitschwingen angeregt $m_{\mathrm{e}} \ddot{\vec{r}} = e\vec{E}$

Dabei entsteht ein oszillierender elektrischer Dipol

$$\ddot{\vec{p}} = e\ddot{\vec{r}} = \frac{e^2}{m_{\mathrm{e}}} \vec{E}$$

Im Streuvolumenelement dV befinden sich ρdV Elektronen und man hat dort einen emittierenden Hertz‘schen Dipol der Stärke

$$\mathrm{d}\ddot{\vec{p}}(\vec{r},t) = \vec{\mathrm{e}}_{\mathrm{P}} E_0 e^{-\mathrm{i}(\omega \cdot t - \vec{k}_0 \vec{r})} \frac{e^2}{m_{\mathrm{e}}} \rho(\vec{r}) \mathrm{d}V \cdot$$

$\rho(\vec{r})$ ist die Anzahldichte der Elektronen am Ort $\vec{r}$

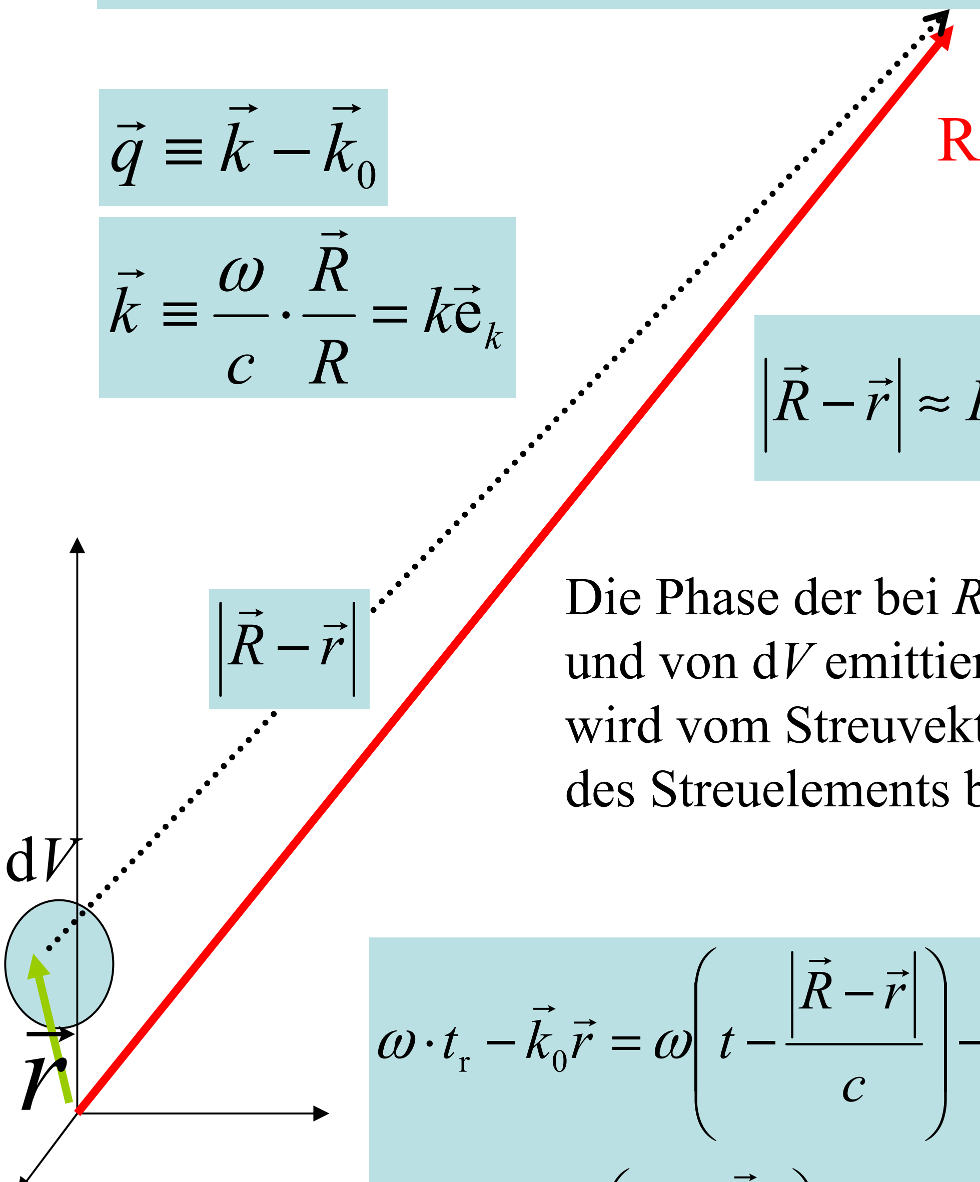
Retardierung

$$\mathrm{d}\ddot{\vec{p}}(\vec{r},t_\mathrm{r}) = \vec{\mathrm{e}}_\mathrm{P} E_0 e^{-\mathrm{i}(\omega \cdot t_\mathrm{r} - \vec{k}_0 \vec{r})} \frac{e^2}{m_\mathrm{e}} \rho(\vec{r}) \mathrm{d}V \cdot$$

$$\mathrm{d}\ddot{\vec{p}}(\vec{r},t_\mathrm{r}) = \vec{e}_\mathrm{P} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}} \rho(\vec{r}) \mathrm{d}V \cdot \frac{e^2}{m_\mathrm{e}} E_0 \mathrm{e}^{-i(\omega \cdot t - kR)}$$

$$\vec{q} \equiv \vec{k} - \vec{k}_0$$

$$\vec{k} \equiv \frac{\omega}{c} \cdot \frac{\vec{R}}{R} = k \vec{\mathrm{e}}_k$$



$$\left|\vec{R}-\vec{r}\right| \approx R - \frac{\vec{r}\vec{R}}{R}$$

Die Phase der bei R ankommenden und von dV emittierten Wellen wird vom Streuvektor und dem Ort des Streuelements bestimmt:

$$\omega \cdot t_\mathrm{r} - \vec{k}_0 \vec{r} = \omega \left(t - \frac{\left|\vec{R}-\vec{r}\right|}{c} \right) - \vec{k}_0 \vec{r} \approx$$

$$\approx \omega \cdot t - \frac{\omega}{c} \left(R - \frac{\vec{R}\vec{r}}{R} \right) - \vec{k}_0 \vec{r} = \omega \cdot t - kR + \vec{q}\vec{r}$$

Hertz'scher Dipol, Fernfeld

Die von der Probe gestreute Röntgenstrahlung besitzt am Ort des Detektors die magnetische Feldstärke

$$\vec{H}_{\mathrm{s}}(\vec{R},t)=\int\frac{\mathrm{d}\ddot{\vec{p}}(\vec{r},t_{\mathrm{r}})\times\vec{\mathrm{e}}_k}{4\pi Rc}=F(\vec{q})\cdot\frac{1}{\mu_0 c}\cdot\frac{E_0}{R}e^{-\mathrm{i}(\omega\cdot t-kR)}\cdot\left(\vec{\mathrm{e}}_{\mathrm{P}}\times\vec{\mathrm{e}}_k\right)$$

mit

$$F(\vec{q})\equiv\int\tilde{\rho}(\vec{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}}\,\mathrm{d}V$$

Streuamplitude

$$\tilde{\rho}(\vec{r})=r_{\mathrm{e}}\cdot\rho(\vec{r})$$

Streulängendichte

$$r_{\mathrm{e}}=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_{\mathrm{e}}c^2}\approx 2{,}818\cdot 10^{-15}\ \mathrm{m}$$

Klassischer Elektronenradius

Die dazu gehörende elektrische Feldstärke ist

$$\vec{E}_{\mathrm{s}}(\vec{R},t)=\frac{1}{\varepsilon_0 c}\vec{H}_{\mathrm{s}}(\vec{R},t)\times\vec{\mathrm{e}}_k$$

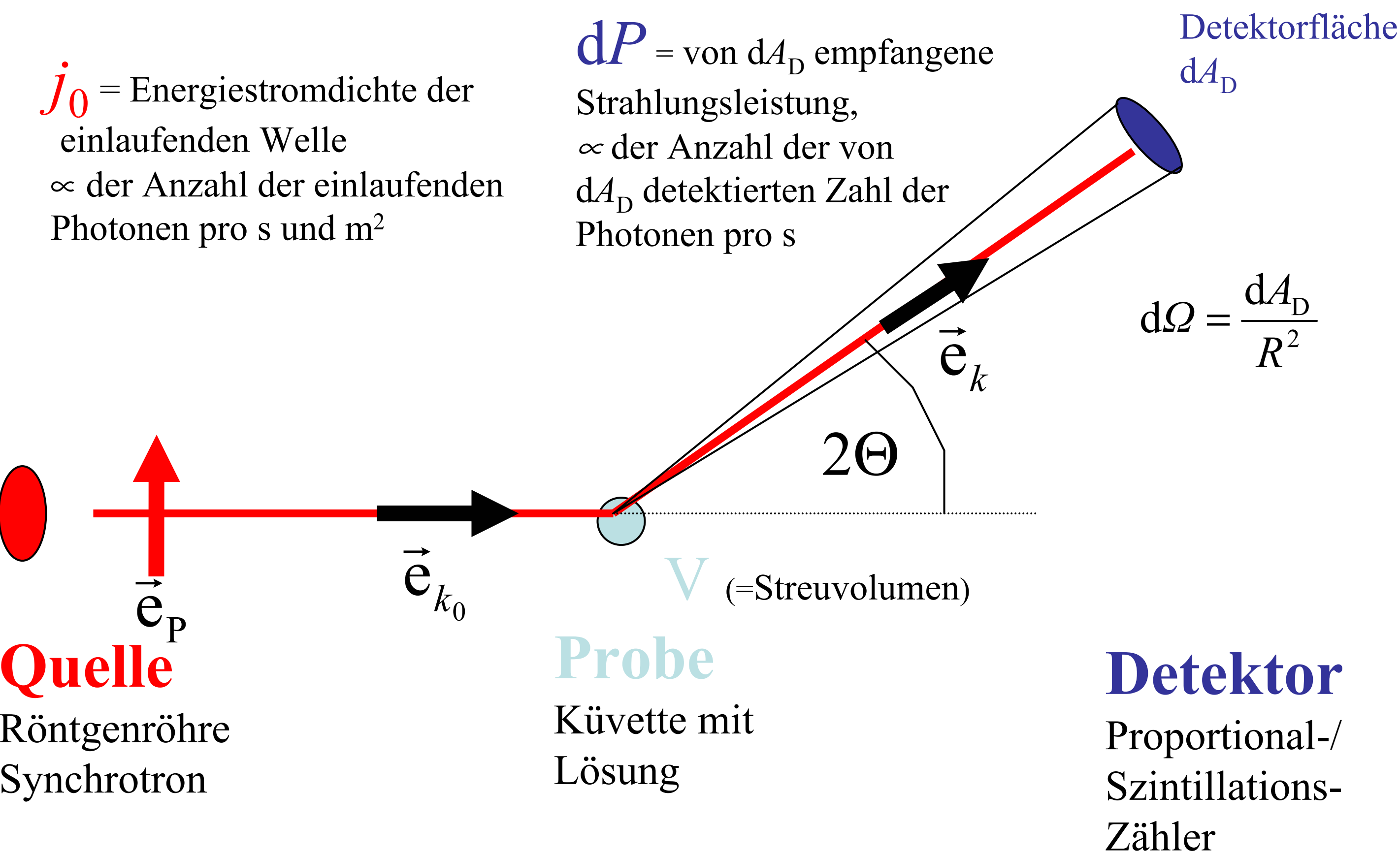
Die in Richtung zum Detektor in den Raumwinkel $\mathrm{d}\Omega$ gestreute Leistung ist gegeben durch

$$\mathrm{d}P=\left\langle\vec{E}_{\mathrm{s}}\times\vec{H}_{\mathrm{s}}\right\rangle R^2\mathrm{d}\Omega=j_0\left|F(\vec{q})\right|^2\left(\vec{\mathrm{e}}_{\mathrm{P}}\times\vec{\mathrm{e}}_{\mathrm{s}}\right)^2\cdot\mathrm{d}\Omega$$

mit j_0 als Energiestromdichte der einlaufenden Welle:

$$j_0=\left(\frac{1}{2}\varepsilon_0 E_0^{\ 2}\right)\cdot c$$

Differentieller Streuquerschnitt (Röntgenstreuung)



$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \equiv \frac{1}{j_0}\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\Omega}$$

Differentieller Streuquerschnitt [m^2]

$$\frac{\mathrm{d}\Sigma}{\mathrm{d}\Omega} \equiv \frac{1}{V}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}$$

Differentieller Streuquerschnitt pro Volumeneinheit der Probe [m^{-1}]

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left|F(\vec{q})\right|^2 \cdot f_\mathrm{P}$$

$$f_\mathrm{P} = \left(\vec{\mathrm{e}}_\mathrm{P} \times \vec{\mathrm{e}}_k\right)^2$$

$$F(\vec{q}) \equiv \int \tilde{\rho}(\vec{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}}\,\mathrm{d}V$$

$$\tilde{\rho}(\vec{r}) = r_\mathrm{e} \cdot \rho(\vec{r})$$

Einfachste **Anwendungen der Röntgenstreuformel**

Einzelnes Elektron in Koordinatenursprung

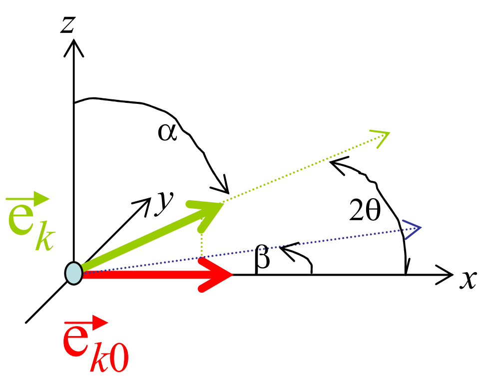
$$\tilde{\rho}(\vec{r}) = r_\mathrm{e}\delta(\vec{r})$$

$$F(\vec{q}) = \int \tilde{\rho}(\vec{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}}dV = r_\mathrm{e}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left|F(\vec{q})\right|^2 \cdot f_\mathrm{P} = r_\mathrm{e}^2 \cdot \left(\vec{\mathrm{e}}_\mathrm{P} \times \vec{\mathrm{e}}_k\right)^2$$

Unpolarisierte Röntgenstrahlung:

$$\left(\vec{\mathrm{e}}_\mathrm{P} \times \vec{\mathrm{e}}_k\right)^2 \rightarrow \frac{1}{2}\left\{\left(\vec{\mathrm{e}}_y \times \vec{\mathrm{e}}_k\right)^2 + \left(\vec{\mathrm{e}}_z \times \vec{\mathrm{e}}_k\right)^2\right\} = \frac{1}{2}\left\{\left(1 - \sin^2\alpha + \cos^2(2\theta)\right) + \left(\sin^2\alpha\right)\right\} = \frac{1+\cos^2(2\theta)}{2}$$



$$\sin^2(\vec{\mathrm{e}}_y, \vec{\mathrm{e}}_k) = 1 - \cos^2(\vec{\mathrm{e}}_y, \vec{\mathrm{e}}_k) = \cos^2(\vec{\mathrm{e}}_z, \vec{\mathrm{e}}_k) + \cos^2(\vec{\mathrm{e}}_x, \vec{\mathrm{e}}_k)$$

$$\cos^2(\vec{\mathrm{e}}_z, \vec{\mathrm{e}}_k) = 1 - \sin^2\alpha$$

$$\cos^2(\vec{\mathrm{e}}_x, \vec{\mathrm{e}}_k) = \cos^2(2\Theta)$$

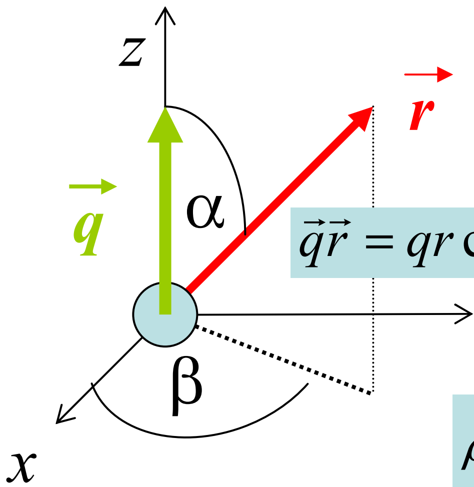
Thomson-Streuung

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = r_\mathrm{e}^{\,2}\,\frac{1+\cos^2(2\Theta)}{2}$$

$$\sigma = \int \mathrm{d}\sigma = r_\mathrm{e}^{\,2}\,\frac{4\pi + \frac{4\pi}{3}}{2} = \frac{8\pi}{3}\cdot r_\mathrm{e}^{\,2} \approx 0{,}6653\ \mathrm{b}$$

$1\ \mathrm{b} = 10^{-28}\ \mathrm{m}^2$

Atom im Koordinatenursprung, Atomformfaktor



$$\vec{q}\vec{r} = qr\cos\alpha$$

Atom oder Ion mit N_e Elektronen in einer Hülle mit der kugelsymmetrischen Einelektronendichte

$$\rho(r_1) = \int dV_2 \int dV_3 \ldots \int dV_{N_\mathrm{e}} \left| \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \ldots, \vec{r}_{N_\mathrm{e}}) \right|^2$$

$$\widetilde{\rho}(\vec{r}) = N_\mathrm{e} r_\mathrm{e} \rho(r)$$

$$F(\vec{q}) = N_\mathrm{e} r_\mathrm{e} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\beta \int_0^{\pi} \sin\alpha \cdot \mathrm{d}\alpha \int_0^{\infty} \rho(r) r^2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}qr\cos\alpha} \mathrm{d}r$$

Die Winkelintegration kann allgemein ausgeführt werden und ergibt

$$F(q) = r_\mathrm{e} \cdot f_\mathrm{a}(q)$$

$$f_\mathrm{a}(q) = N_\mathrm{e} \cdot 4\pi \cdot \int_0^{\infty} r^2 \left(\frac{\sin(qr)}{qr} \right) \rho(r) \mathrm{d}r$$

Atomformfaktor $f_\mathrm{a}(q)$

Der Atomformfaktor $f_\mathrm{a}(q)$ besitzt bei $q = 0$ den größten Wert, $f_\mathrm{a}(0) = N_\mathrm{e}$, und geht mit wachsendem q gegen null. Für das H-Atom ergibt sich $f_\mathrm{a}(q) = (1+(qa_0/2)^2)^{-2}$ d. h. bei $q_{1/2} = 24{,}3\ \mathrm{nm}^{-1}$ ist der Formfaktor auf die Hälfte seines Anfangswertes gesunken. Für schwerere Atome wird $q_{1/2}$ kleiner.

In Kleinwinkelstreuexperimenten ist der $q_{\max}$ gewöhnlich kleiner als $4\ \mathrm{nm}^{-1}$, so dass mit konstanten Atomformfaktoren $f_\mathrm{a}(q) = N_\mathrm{e}$ gerechnet werden kann.

Streumechanismus für Neutronen

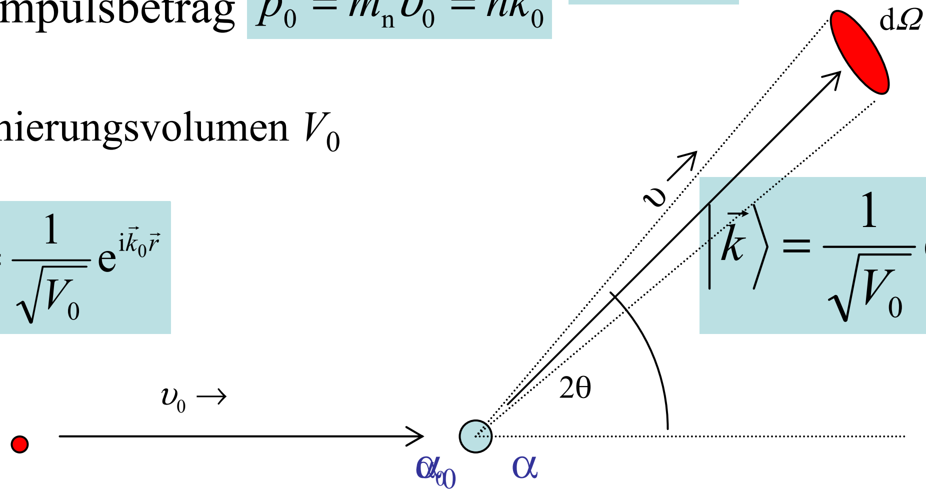
Einlaufendes Neutron mit Energie $E = \frac{\hbar^2 k_0{}^2}{2m_\mathrm{n}}$

und Impulsbetrag $p_0 = m_\mathrm{n} \upsilon_0 = \hbar k_0$

Normierungsvolumen V_0

$$\left|\vec{k}_0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{V_0}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}_0 \vec{r}}$$

$$\left|\vec{k}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{V_0}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\vec{r}}$$



Zustand der Probe durch Quantenzahlen α beschrieben

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t} = \frac{2\pi}{\hbar} \left\langle \left| \left\langle \vec{k}, \alpha \middle| \hat{H}_1 \middle| \vec{k}_0, \alpha_0 \right\rangle \right|^2 \right\rangle_\alpha \Delta N \cdot \delta\left(E_{k\alpha} - E_{k_0 \alpha_0}\right)}$$

Fermi‘s Goldene Regel

$$\Delta N = \left(\frac{V_0}{8\pi^3}\right) k^2 \mathrm{d}k \cdot \mathrm{d}\Omega = \left(\frac{V_0}{8\pi^3}\right) \frac{m_\mathrm{n}}{\hbar^2} \mathrm{d}E \cdot \frac{m_\mathrm{n} \upsilon}{\hbar} \mathrm{d}\Omega$$

Anzahl der Endzustände

$$k \mathrm{d}k = \frac{m_\mathrm{n}}{\hbar^2} \mathrm{d}E \qquad k = \frac{m_\mathrm{n} \cdot \upsilon}{\hbar}$$

$$\boxed{\hat{H}_1 = \frac{2\pi\hbar^2}{m_\mathrm{n}} \sum_\ell a_{\ell\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r}_\ell)}$$

Fermi-Kontaktwechselwirkung
Kern-Streulänge $a_{\ell\alpha}$

$$\left| \left\langle \vec{k}, \alpha \middle| \hat{H}_1 \middle| \vec{k}_0, \alpha_0 \right\rangle \right|^2 = \frac{4\pi^2 \hbar^4}{m_\mathrm{n}{}^2 V_0{}^2} \left| \sum_\ell a_{\ell\alpha} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}} \right|^2$$

Differentieller Streuquerschnitt

$$\mathrm{d}\sigma = \frac{\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t}}{\frac{1}{V_0}\upsilon_0} = \frac{\frac{2\pi}{\hbar}\frac{4\pi^2\hbar^4}{m_\mathrm{n}{}^2V_0{}^2}\left\langle\left|\sum_\ell a_{\ell\alpha}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}_\ell}\right|^2\right\rangle_\alpha\left(\frac{V_0 m_\mathrm{n}{}^2\upsilon}{8\pi^3\hbar^3}\mathrm{d}E\mathrm{d}\Omega\right)\delta(E_{k\alpha}-E_{k_0\alpha_0})}{\frac{\upsilon_0}{V_0}}$$

Differentieller Streuquerschnitt pro Raumwinkel- und Energieintervall

$$\frac{\mathrm{d}^2\sigma}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}E} = \frac{\upsilon}{\upsilon_0}\left\langle\left|\sum_\ell a_{\ell\alpha}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}_\ell}\right|^2\right\rangle_\alpha \delta\left(\hbar\omega + E_\alpha - E_{\alpha_0}\right)$$

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m_\mathrm{n}}\left(k^2 - k_0{}^2\right)$$

Energieübertrag von Probe auf Neutron

Quasielastische Streuung

$$\hbar\omega \approx 0 \qquad \upsilon \approx \upsilon_0 \qquad \int \mathrm{d}E\ldots$$

Differentieller Streuquerschnitt pro Raumwinkelelement

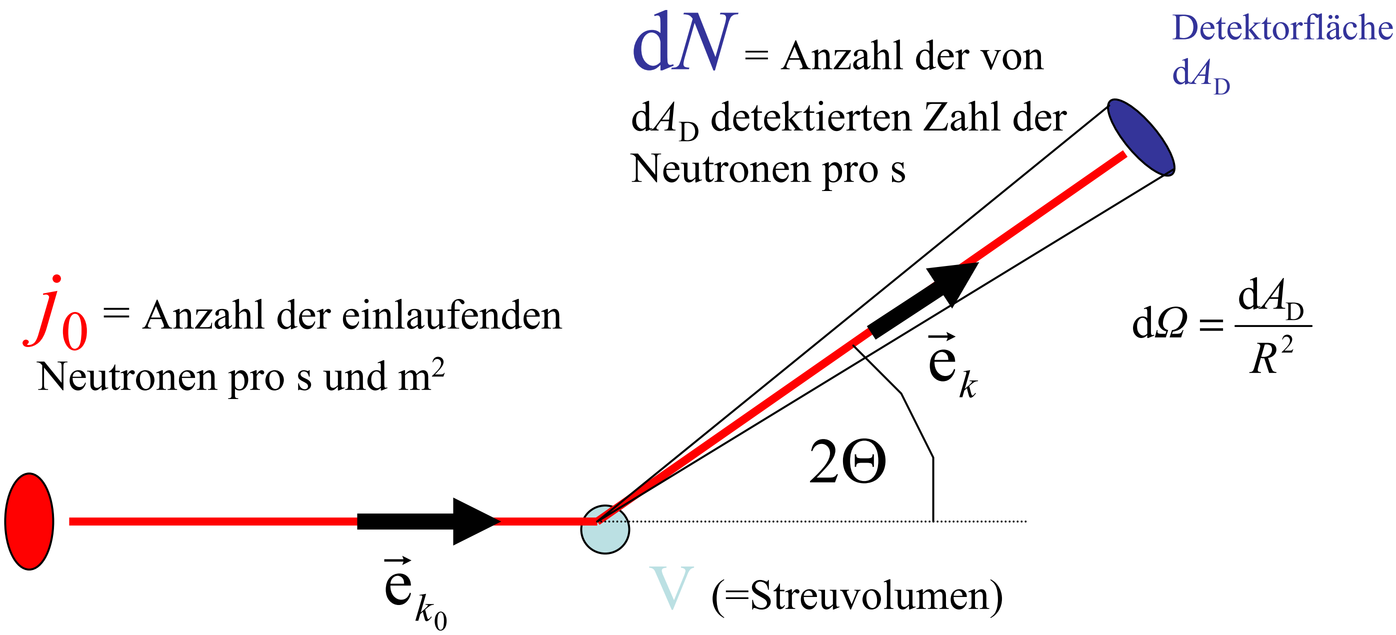
$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left\langle\left|\sum_\ell a_{\ell\alpha}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}_\ell}\right|^2\right\rangle_\alpha = \sum_{\ell,\ell'}\left\langle a_{\ell\alpha}a_{\ell'\alpha'}\right\rangle_\alpha \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}_{\ell\ell'}} = \sum_\ell\left(b_\ell{}^{\mathrm{inc}}\right)^2 + \left|\sum_\ell b_\ell\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}_\ell}\right|^2}$$

Mittelung über (die unkorrelierten) Spinzustände α der Kerne

$$\left\langle a_{\ell\alpha}a_{\ell'\alpha'}\right\rangle_\alpha = \left\langle a_{\ell\alpha}{}^2\right\rangle_\alpha \delta_{\ell\ell'} + \left\langle a_{\ell\alpha}\right\rangle_\alpha\left\langle a_{\ell'\alpha'}\right\rangle_{\alpha'}\left(1-\delta_{\ell\ell'}\right) = b_\ell{}^{\mathrm{inc}}\delta_{\ell\ell'} + b_\ell b_{\ell'}$$

$$\left(b_\ell{}^{\mathrm{inc}}\right) \equiv \sqrt{\left\langle a_{\ell\alpha}{}^2\right\rangle_\alpha - \left(\left\langle a_{\ell\alpha}\right\rangle_\alpha\right)^2} \qquad b_\ell \equiv \left\langle a_{\ell\alpha}\right\rangle_\alpha$$

Differentieller Streuquerschnitt (Neutronenstreuung)



Quelle
Kernspaltungsreaktor
Spallationsquelle

Probe
Küvette mit
Lösung

Detektor
BF_3-/^{3}He-
Zählrohr

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} \equiv \frac{1}{j_0}\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{coh}} + \left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{inc}}$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{coh}} = \left|F(\vec{q})\right|^2$$

$$F(\vec{q}) \equiv \int \widetilde{\rho}(\vec{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\vec{r}}\,\mathrm{d}V$$

$$\widetilde{\rho}(\vec{r}) = \sum_{\ell} b_{\ell}\,\delta(\vec{r}-\vec{r}_{\ell})$$

b_ℓ = kohärente Streulänge des Atomkerns ℓ

Der kohärente Streuquerschnitt in SANS ist völlig analog zum Streuquerschnitt in SAXS und enthält Information über die Streulängendichte der Probe.

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{\mathrm{inc}} = \sum_{\ell}\left(b_{\ell}^{\mathrm{inc}}\right)^2$$

b_ℓ^{inc} = inkohärente Streulänge des Atomkerns ℓ

Der inkohärente Streuquerschnitt verursacht einen isotropen (diffusen) Untergrund der Streuintensität.

Streulängen für kohärente Neutronenstreuung und Röntgenstreuung

Element Kern	n b/fm	γ $r_e f_a(0)$/fm
^{1}H	-3,74	2,82
^{2}H	6,67	2,82
C	6,65	16,9
N	9,36	19,7
O	5,80	22,5
^{31}P	5,13	42,3
S	2,85	45,1
Cl	9,58	47,9
Ca	4,7	56,4
Fe	9,45	73,3
Zn	5,68	84,5
Pt	9,6	220

n-Streuquerschnitte

$$\sigma_{\mathrm{coh}} = 4\pi b^2$$

$$\sigma_{\mathrm{inc}} = 4\pi\left(b_{\mathrm{inc}}\right)^2$$

σ/b	^{1}H	^{2}H	e
σ_{coh}	1,76	5,592	0,665
σ_{inc}	80,3	2,05	

Streulängendichten von H_2O/D_2O-Mischungen

n-Streulänge und Streulängendichte von H_2O

$$b(\mathrm{H_2O}) = \left[2\cdot(-3{,}74)+5{,}80\right]\,\mathrm{fm} = -1{,}68\ \mathrm{fm}$$

$$\tilde{\rho}(\mathrm{H_2O}) = \frac{b(\mathrm{H_2O})}{V_\mathrm{m}(\mathrm{H_2O})} = \frac{b(\mathrm{H_2O})}{\dfrac{M(\mathrm{H_2O})}{\rho(\mathrm{H_2O})\cdot N_\mathrm{A}}} = \frac{-1{,}68\ \mathrm{fm}}{\dfrac{18{,}0\,\dfrac{\mathrm{g}}{\mathrm{mol}}}{0{,}997\,\dfrac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm}^3}\cdot\dfrac{6{,}02\cdot 10^{23}}{\mathrm{mol}}}} = -0{,}559\cdot 10^{14}\ \mathrm{m}^{-2}$$

n-Streulänge und Streulängendichte von D_2O

$$b(\mathrm{D_2O}) = \left[2\cdot(6{,}67)+5{,}80\right]\,\mathrm{fm} = 19{,}1\ \mathrm{fm}$$

$$\tilde{\rho}(\mathrm{D_2O}) = \frac{b(\mathrm{D_2O})}{V_\mathrm{m}(\mathrm{D_2O})} = \frac{b(\mathrm{D_2O})}{\dfrac{M(\mathrm{D_2O})}{\rho(\mathrm{D_2O})\cdot N_\mathrm{A}}} = \frac{19{,}1\ \mathrm{fm}}{\dfrac{20{,}0\,\dfrac{\mathrm{g}}{\mathrm{mol}}}{1{,}10\,\dfrac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm}^3}\cdot\dfrac{6{,}02\cdot 10^{23}}{\mathrm{mol}}}} = 6{,}35\cdot 10^{14}\ \mathrm{m}^{-2}$$

Streulängendichte einer H2O/D2O Mischung mit Molenbruch x von D_2O

$$x \equiv \frac{N(\mathrm{D_2O})}{N(\mathrm{H_2O})+N(\mathrm{D_2O})}$$

$$\tilde{\rho}(x) = x\cdot\tilde{\rho}(\mathrm{D_2O}) + (1-x)\cdot\tilde{\rho}(\mathrm{H_2O}) = (-0{,}559+6{,}91x)\cdot 10^{14}\ \mathrm{m}^{-2}$$

Streulängendichten von H_2O/Glycerol-Mischungen

γ-Streulänge und Streulängendichte von H_2O

$$b_\gamma(\mathrm{H_2O}) = \left[2\cdot r_\mathrm{e} + 8\cdot r_\mathrm{e}\right] = 28{,}2\ \mathrm{fm}$$

$$\tilde{\rho}_\gamma(\mathrm{H_2O}) = \frac{b_\gamma(\mathrm{H_2O})}{V_\mathrm{m}(\mathrm{H_2O})} = \frac{b_\gamma(\mathrm{H_2O})}{\dfrac{M(\mathrm{H_2O})}{\rho(\mathrm{H_2O})\cdot N_\mathrm{A}}} = \frac{28{,}2\ \mathrm{fm}}{\dfrac{18{,}0\,\dfrac{\mathrm{g}}{\mathrm{mol}}}{0{,}997\,\dfrac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm^3}}\cdot\dfrac{6{,}02\cdot 10^{23}}{\mathrm{mol}}}} = 9{,}40\cdot 10^{14}\ \mathrm{m^{-2}}$$

γ-Streulänge und Streulängendichte von Glycerol, $C_3O_3H_8$

$$b_\gamma(\mathrm{C_3O_3H_8}) = r_\mathrm{e}\left[3\cdot 6 + 3\cdot 8 + 8\right] = 141\ \mathrm{fm}$$

$$\tilde{\rho}_\gamma(\mathrm{C_3O_3H_8}) = \frac{b_\gamma(\mathrm{C_3O_3H_8})}{V_\mathrm{m}(\mathrm{C_3O_3H_8})} = \frac{b_\gamma(\mathrm{C_3O_3H_8})}{\dfrac{M(\mathrm{C_3O_3H_8})}{\rho(\mathrm{C_3O_3H_8})\cdot N_\mathrm{A}}} = \frac{141\ \mathrm{fm}}{\dfrac{92{,}1\,\dfrac{\mathrm{g}}{\mathrm{mol}}}{1{,}26\,\dfrac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm^3}}\cdot\dfrac{6{,}02\cdot 10^{23}}{\mathrm{mol}}}} = 11{,}6\cdot 10^{14}\ \mathrm{m^{-2}}$$

Streulängendichte einer H_2O/$C_3O_3H_8$ Mischung mit Molenbruch x von $C_3O_3H_8$

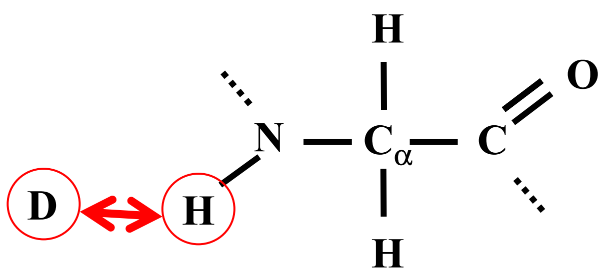
$$x \equiv \frac{N(\mathrm{C_3O_3H_8})}{N(\mathrm{H_2O}) + N(\mathrm{C_3O_3H_8})}$$

$$\tilde{\rho}_\gamma(x) = x\cdot\tilde{\rho}_\gamma(\mathrm{C_3O_3H_8}) + (1-x)\cdot\tilde{\rho}_\gamma(\mathrm{H_2O}) = (9{,}40 + 132x)\cdot 10^{14}\ \mathrm{m^{-2}}$$

Streulängendichte von Proteinen

Beispiel Glycinrest

$$V_\mathrm{m}(\mathrm{G}) \approx 0{,}664\ \mathrm{nm}^3$$



$$b(\mathrm{C_2NOH_3}) = 1{,}72 \cdot 10^{-14}\ \mathrm{m}$$
$$b(\mathrm{C_2NOH_2D}) = 2{,}76 \cdot 10^{-14}\ \mathrm{m}$$

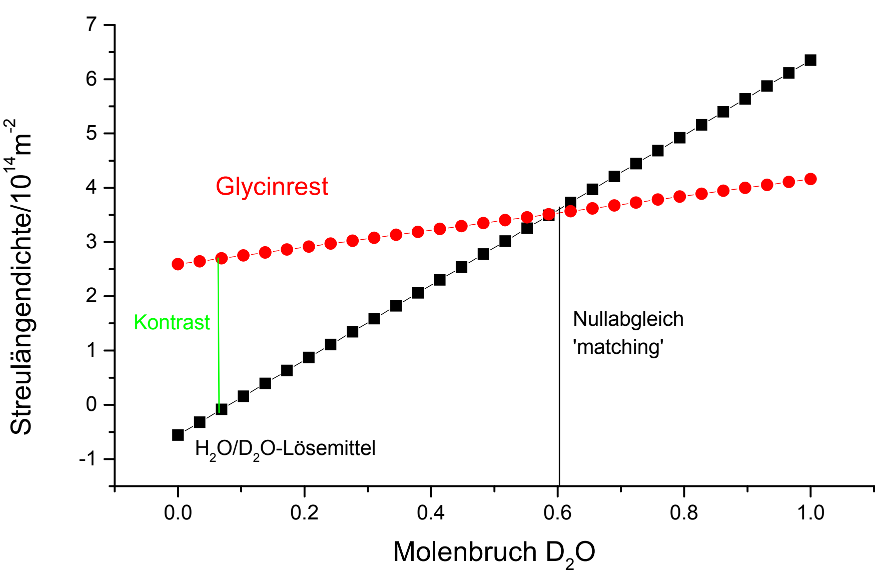
$$\tilde{\rho}(\mathrm{C_2NOH_3}) = 2{,}59 \cdot 10^{14}\ \mathrm{m}^{-2}$$
$$\tilde{\rho}(\mathrm{C_2NOH_2D}) = 4{,}16 \cdot 10^{14}\ \mathrm{m}^{-2}$$

austauschend

$$\mathrm{C_2NOH_2D} \longleftrightarrow \mathrm{C_2NOH_3}$$

Streulängendichte des Glycinrests in einer H_2O/D_2O-Mischung mit Molenbruch $x(D_2O)$

$$\tilde{\rho}(\mathrm{G}, x) = x \cdot \tilde{\rho}(\mathrm{C_2NOH_2D}) + (1-x) \cdot \tilde{\rho}(\mathrm{C_2NOH_3}) = (2{,}59 + 1{,}57x) \cdot 10^{14}\ \mathrm{m}^{-2}$$



Mittlere Streulängendichten verschiedener biologischer Makromoleküle beim matching in wässriger Lösung. Man beachte die starke Markierungsmöglichkeit bei Volldeuterierung von Proteinen