1. 1D의 diffraction을 수업시간에 많이 다루었었는데, 그런 계산을 통해서 알 수 있는 점들이 어떤 것들인가... 하는 점을 생각해보는 문제입니다.

(a)는 교수님이 많이 강조를 하셨던 것인데, scattering center가 많을 수록 (즉 slit이 많을 수록) subsidary peak이 많아지는 동시에 약해지며, 결국 lim으로 가면 main peak에 비해 negligible한 수준이 된다는 것이었고, 이는 delta function의 개수를 차츰 늘려감에 따라 확인할 수 있습니다. 몇몇 학생의 질문은, slit은 빛이 지나갈 수 있게 해주는 것이고, atom은 빛을 막는 역할을 하는데 반대의 경우가 아니냐는 것이었데, diffraction 현상에서 atom이 "scattering center"라는 것은 결국 그 지점이 scattering factor에 의해 modify된 wave가 다시 propagation하는 source가 됨을 의미하기 때문에, 새롭게 describe되는 wave의 기점이 된다는 측면에서 오히려 open slit과 analogy가 있는 것입니다.

(b)는 회절 현상의 reciprocal한 성질을 알 수 있는 부분으로서, real space에서의 feature size가 작아지면, 그에 해당하는 diffraction 현상은 size가 오히려 커진다는 점을 확인하는 문제입니다. 1D에서 finite size의 slit을 두가지 맥락에서 다루었었는데 (2번 문제의 첫번째와 세번째 section을 보시면 되겠습니다), 두가지 모두 수학적으로는 동일한 경우이며 단지 scale의 차이만 나는 경우입니다. 단순히 1D slit의 폭을 넓혀보면, 해당하는 peak의 broadening이 줄어드는 것을 볼 수 있습니다.

2. Shape function을 diffraction 시키는 obstacle의 shape을 알 수 있다고 배웠는데, 실제로 대체 어떻게 shape을 알 수 있는 건지 설명을 해보는 문제입니다. 앞선 문제의 (b)에서 얻었던 결론을 적용시키면 간단히 알 수 있습니다.

예를 들어, rod와 같은 형태의 grain이 있어서, 옆에서 봤을 때 한쪽 dimension으로는 길고 다른 쪽으로는 짧은 모양이라고 한다면, 긴 dimension 상으로는 diffraction peak이 sharp하게 나타날 것이고, 짧은 dimension상으로는 broad하게 나타날 것입니다. 따라서, 결과적인 peak은 rod와 수직한 방향으로 길쭉하게 나타나게 되겠지요. (주의할 것은, 이는 모두 individual peak에 대한 논의라는 것입니다.)

3. 수업시간에 배운 걸 다시 요약하면 되는 문제입니다. shape에 관해서는 2번 문제를 참고하시면 되고, lattice의 정보는 결국 scattering center의 position이 어디에 있느냐 하는 문제이므로, 1D 문제에서 slit의 position(혹은 주기)이 diffraction peak의 position(혹은 주기)을 결정함을 보여주면 되겠습니다.

마지막으로, motif에 대한 정보는, 2번 문제 그림의 첫번째 section이 될텐데, motif가 가지는 scattering factor의 symmetry가 복잡해지면 결국 그에 해당하는 복잡한 모양의 (특수한 모양의) peak(혹은 peak들)을 나타내게 될 것입니다. 이는 shape function에서 표현하는 grain과 같은 요소들에 비해 굉장히 작은 scale이고 따라서 reciprocal space에서는 individual peak 보다 훨씬 넓은 영역에 걸쳐있는 function이 되게 됩니다. 이를 lattice 배열에 의한 diffraction pattern에 곱하게 되면, 여러 개의 individual peak들의 intensity를 modify하게 될 것이고 (2번 문제의 마지막 그림에서 전선으로 표시된 부분이 이를 표현함) 이를 통해 motif의 정보를 얻을 수 있습니다.

지난 수업 시간에 structure factor의 계산을 통해 hkl의 plane의 상대적인 intensity를 구했었는데, 여기에 position별로 다른 atom들을 배열할 경우 각각 hkl plane의 intensity가 modify되는 경우를 통해 이해를 하면 빠를 것 같습니다. 실제로는 이 atomic scattering factor도 상수가 아니라 각도나 파장 등에 따라서 달라지는 함수이기 때문에, 각 peak들의 상대적인 intensity는 물질과, 결정성, 그리고 orientation에 따라 unique하게 나타나게 됩니다. (fingerprint와 같은 역할을 하는 것이죠..)