Herleitung der Patterson-Funktion

von M.U. Schmidt und D. Hempler

in Anlehnung an: Woelfel: „Struktur und Praxis der Röntgenstrukturanalyse", Vieweg Verlag 1987, S. 187-189.

Normale Fouriertransformation zur Berechnung der Elektronendichte:

$$\rho(x,y,z) = \frac{1}{V}\sum_{hkl} F_{hkl} e^{-2\pi i(hx+ky+lz)} \qquad (1)$$

Zur Vereinfachung betrachten wir den eindimensionalen Fall:

$$\rho(x) = \frac{1}{a}\sum_{h} F_h e^{-2\pi i hx} \qquad (2)$$

<u>Patterson-Funktion (Patterson, 1935):</u>

$$P(u) = a \int_{x=0}^{1} \rho(x)\cdot\rho(x+u)\,dx \qquad (3)$$

mit $\rho(x)$: e-Dichte am Ort x, d.h. das 1. Atom

und $\rho(x+u)$: e-Dichte am Ort x+u, d.h. ein 2. Atom im Abstand u.

Die Patterson-Funktion summiert über alle Atom-Atom-Paare.

(2) in (3)

$$P(u) = a \int_{x=0}^{1} \left(\frac{1}{a}\sum_{h} F_h e^{-2\pi i hx}\right)\cdot\left(\frac{1}{a}\sum_{h'} F_{h'} e^{-2\pi i h'(x+u)}\right) dx \qquad (4)$$

h' ist unabhängig von h.

Alle Terme ohne x kann man aus dem Integral ziehen.

$$P(u) = \frac{1}{a}\sum_{h}\sum_{h'}\left[F_h F_{h'}\cdot e^{-2\pi i h' u}\cdot \int_{x=0}^{1}\left(e^{-2\pi i(h+h')x}\right)\right] \qquad (5)$$

Ausführungen zum Integral (A)

$$A = \int_{x=0}^{1} \left(e^{-2\pi i(h+h')x}\right) dx \tag{6}$$

Mit $e^{i\varphi} = cos\varphi + isin\varphi$:

$$A = \int_{x=0}^{1} (\cos(-2\pi i(h+h')x) + i\, sin(-2\pi i(h+h')x))\, dx \tag{7}$$

Das Integral $\int_{x=0}^{1} (\cos(-2\pi i(h+h')x))\, dx$ ist gleich null, außer wenn $h = -h'$ ist.

Dann gilt:

$$\int_{x=0}^{1} (\cos(0))\, dx = 1$$

Das Integral $\int_{x=0}^{1} (\sin(2\pi(\mathrm{h}+\mathrm{h}')\mathrm{x})\, dx$ ist immer gleich null.

Für $h = -h'$ ist also A = 1, sonst A = 0.

Mit $h = -h'$ und anschließendem Umbenennen von h' zu h wird *P(u)* zu:

$$P(u) = \frac{1}{a} \sum_h F_h \cdot F_{-h} \cdot e^{-2\pi i h u} \tag{8}$$

Es ist $F_{-h} = F_h^*$

Beweis:

$$F_h^* = \sum_n f_n \cdot (cos\varphi - i\, sin\varphi) \tag{9}$$

$$F_h^* = \sum_n f_n \cdot (\cos(2\pi i h x) - i \sin(2\pi i h x)) \tag{10}$$

Mit $cos\varphi = \cos(-\varphi)$ und $-sin\varphi = \sin(-\varphi)$

$$F_h^* = \sum_n f_n \cdot (\cos(2\pi i(-h)x) + i \sin(2\pi i(-h)x)) \tag{11}$$

$$F_h^* = F_{-h} \tag{12}$$

Daraus folgt:

$$P(u) = \frac{1}{a} \sum_{h} F_h \cdot \; F_h^* \cdot \; e^{-2\pi i h u} \tag{13}$$

$$P(u) = \frac{1}{a} \sum_{h} |F_h|^2 \cdot \; e^{-2\pi i h u} \tag{14}$$

Analog im 3-dimensionalen Fall:

$$P(u, v, w) = \frac{1}{V} \sum_{h} |F_{hkl}|^2 \cdot \; e^{-2\pi i (hu + kv + lw)} \tag{15}$$