

Wstęp do Optyki i Fizyki Materii Skondensowanej

1100-3003



Ciało stałe 2

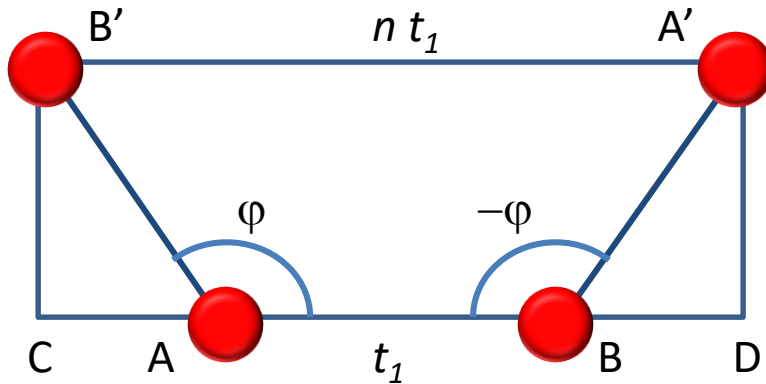
Wydział Fizyki UW

Jacek.Szczytko@fuw.edu.pl

Piotr.Fita@fuw.edu.pl

Struktura krystaliczna

Crystals



$$B'A' = CD = nt_1 = t_1(1 - 2 \cos \varphi)$$

$$\cos \varphi = \frac{1}{2} (1 - n)$$

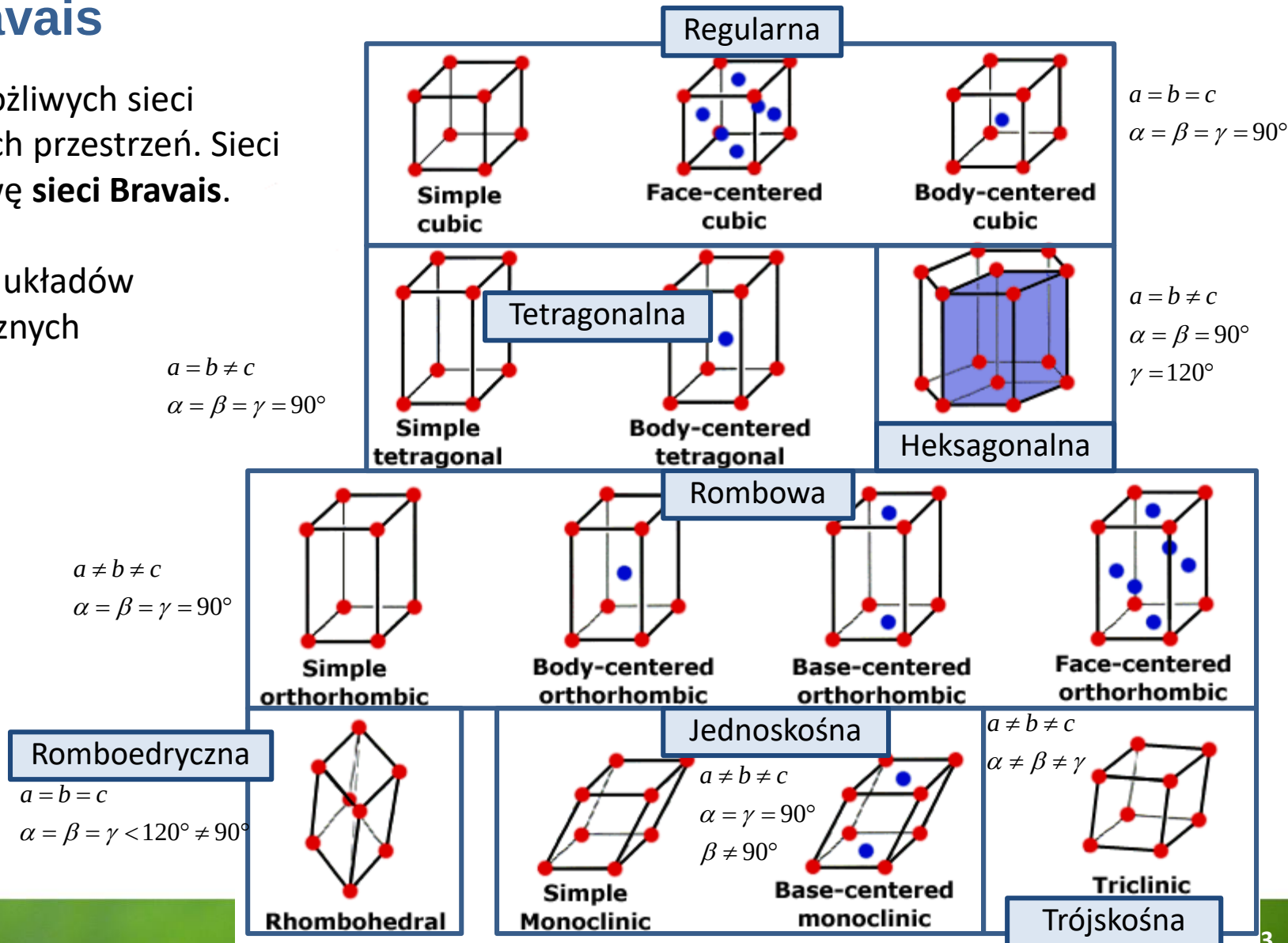
n	$\cos \varphi$	φ	Obrót
-1	1	0°	ε
0	$1/2$	60°	C_6
+1	0	90°	C_4
+2	$-1/2$	120°	C_3
+3	-1	180°	C_2

Struktura krystaliczna

Sieci Bravais

Istnieje 14 możliwych sieci wypełniających przestrzeń. Sieci te noszą nazwę **sieci Bravais**.

Tworzą one 7 układów krystalograficznych



Struktura krystaliczna

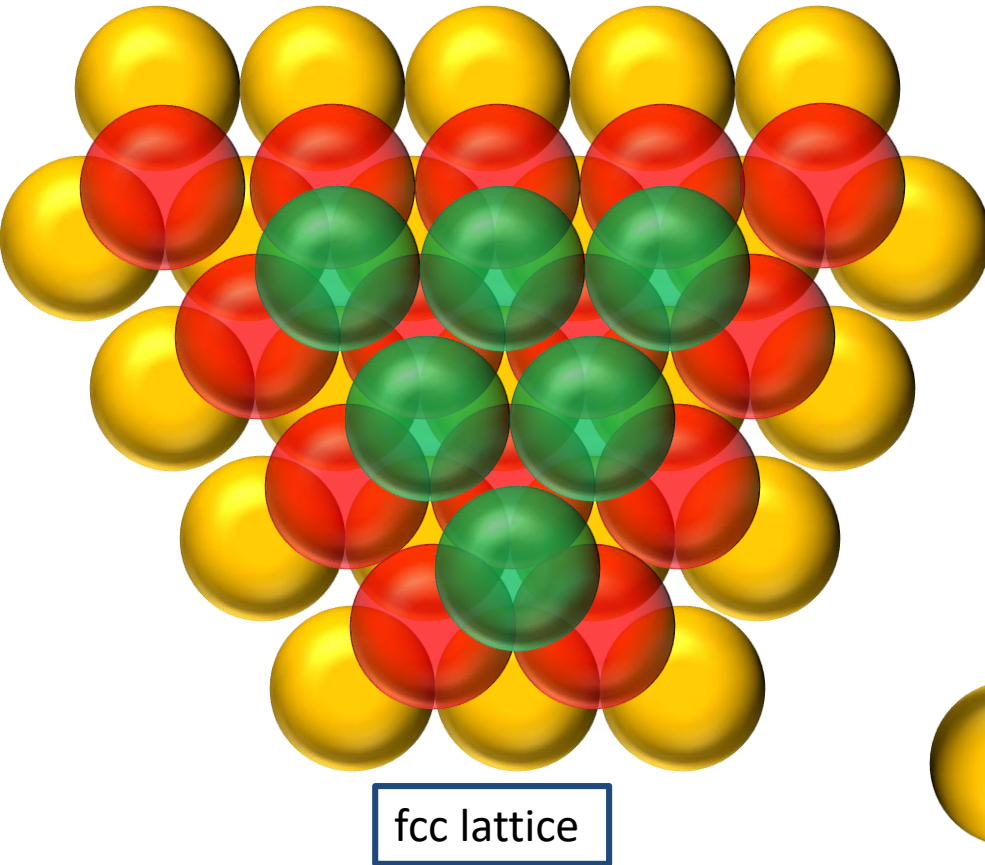
Sieć Bravais (Bravais lattice)



Struktura krystaliczna

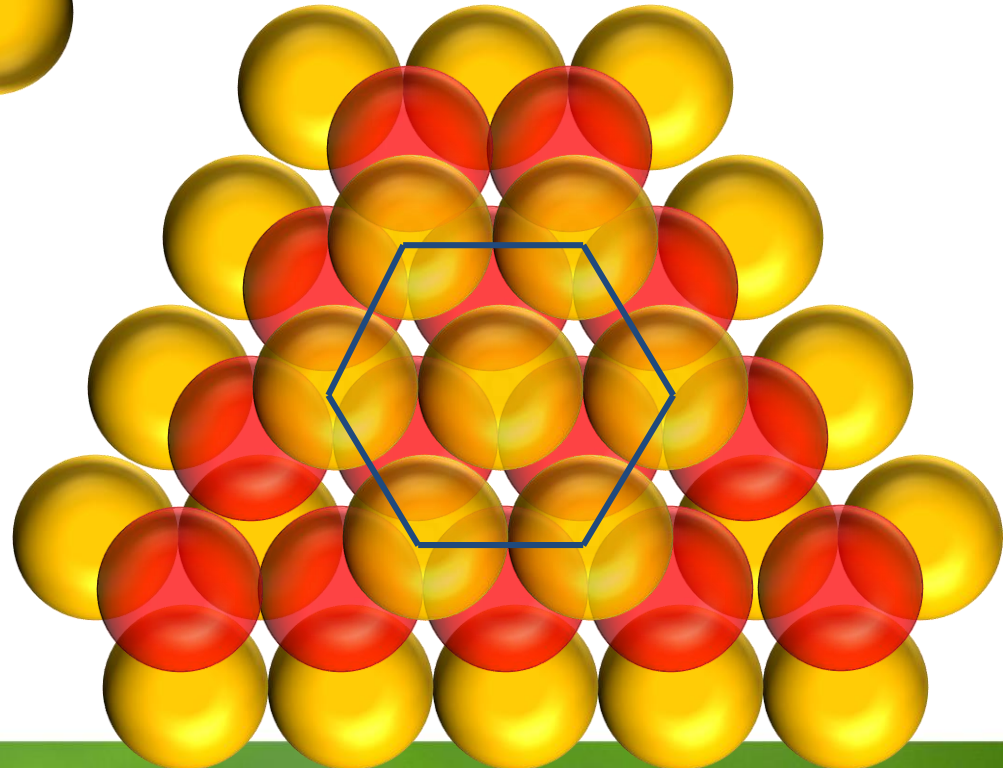
Bravais lattice

Example: close packed structure



hexagonal close-packed (HCP)

Hexagonal lattice with basis



Funkcja korelacji

Operator gęstości (*number density operator*) – czyli ilości cząstek w jednostkowej objętości w miejscu $\mathbf{x} = (x, y, z)$:

$$n(\mathbf{x}) \equiv \sum_{\alpha} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha})$$

Gęstość średnia to $\langle n(\mathbf{x}) \rangle$. W przypadku cieczy izotropowych i jednorodnych $\langle n(\mathbf{x}) \rangle$ nie zależy od $\mathbf{x}$.

$$\langle n(\mathbf{x}) \rangle \equiv \left\langle \sum_{\alpha} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha}) \right\rangle$$

Jednak sam operator średniej gęstości nie odróżni np. cieczy i ciała stałego, potrzebna jest inna wielkość

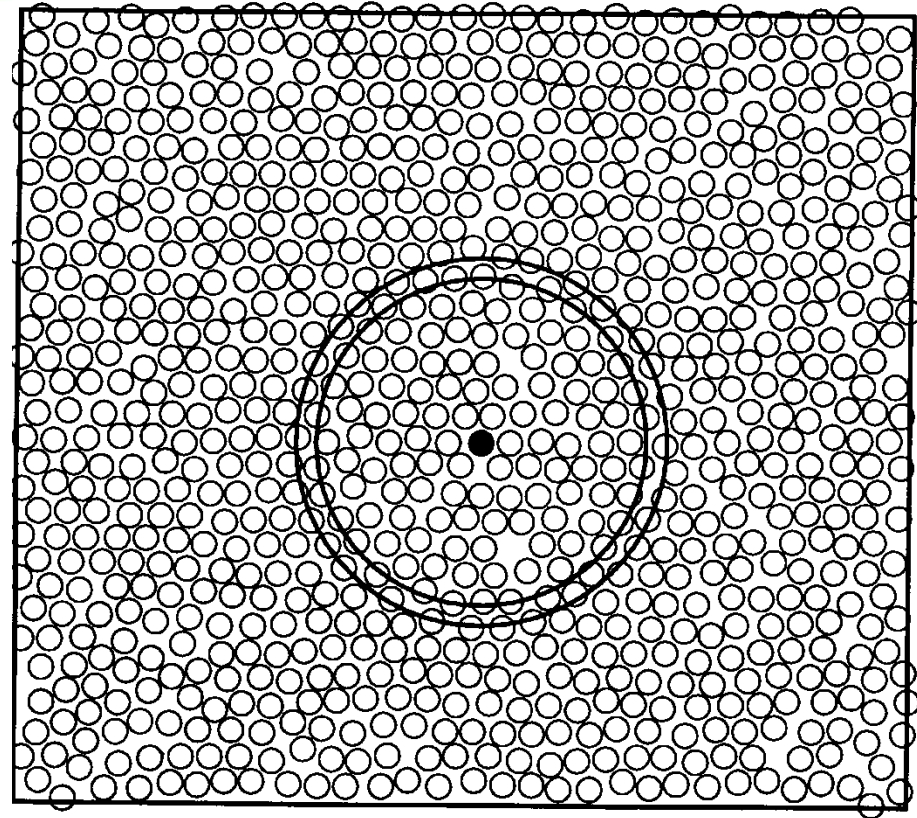


Fig. 2.3.1. Typical atomic configuration in a hard-sphere fluid. The pair distribution function can be obtained by choosing an arbitrary particle as the origin and counting the number of atoms whose centers lie within a distance dr of a circle of radius r of the origin.

Funkcja korelacji

Funkcja korelacji gęstości (*correlation function of the density*) – można spotkać wiele definicji. Najszybsza jest korelacja dwucząstkowa gęstości:

$$C_{nn}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle n(\mathbf{x}_1)n(\mathbf{x}_2) \rangle \\ = \left\langle \sum_{\alpha, \alpha'} \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_\alpha) \delta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_{\alpha'}) \right\rangle$$

(suma po wszystkich parach)

funkcja dystrybucji par (*pair distribution function*) $g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$

$$g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = C_{nn}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) - \langle n(\mathbf{x}_1) \rangle \langle n(\mathbf{x}_2) \rangle = \\ = \left\langle \sum_{\alpha \neq \alpha'} \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_\alpha) \delta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_{\alpha'}) \right\rangle$$

(suma po parach rozłącznych)

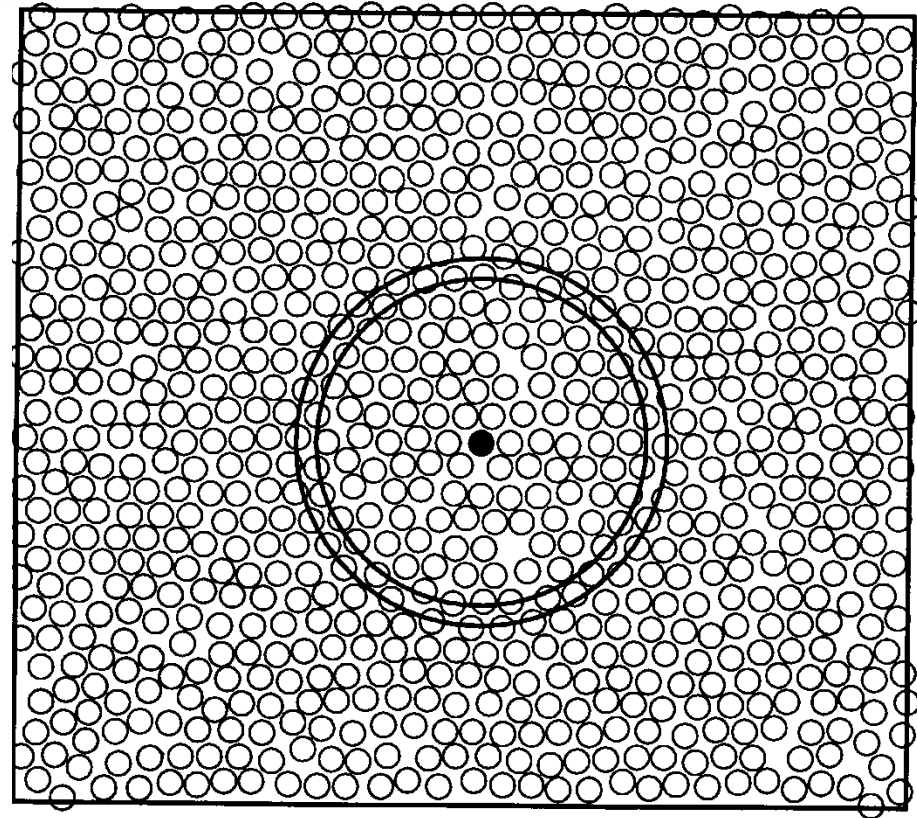
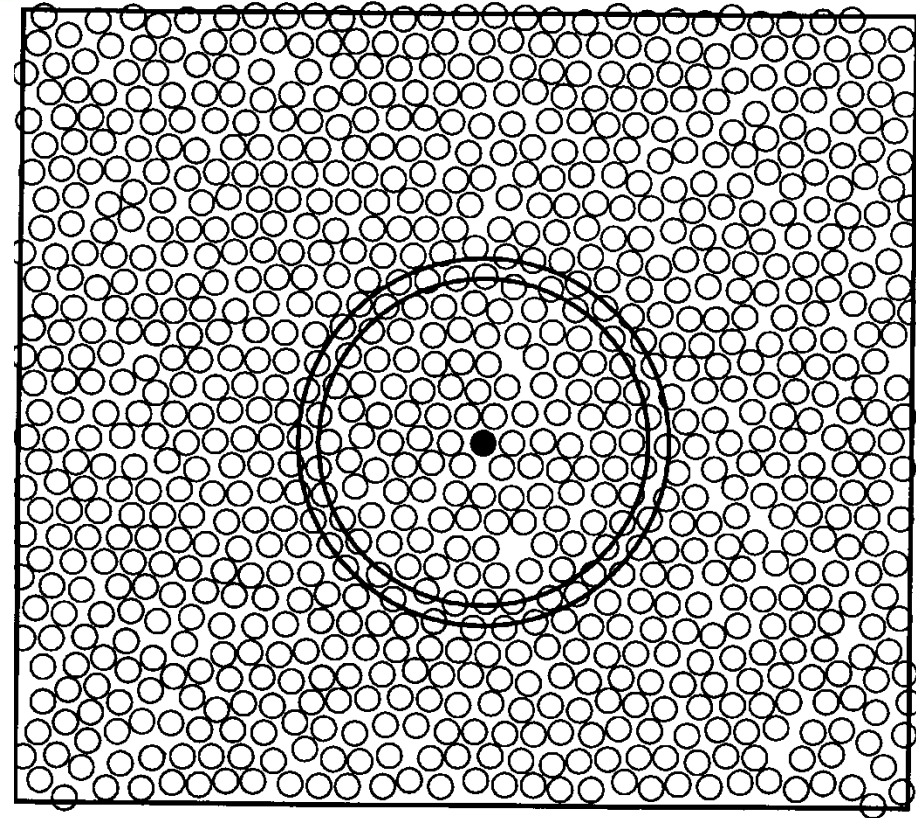


Fig. 2.3.1. Typical atomic configuration in a hard-sphere fluid. The pair distribution function can be obtained by choosing an arbitrary particle as the origin and counting the number of atoms whose centers lie within a distance dr of a circle of radius r of the origin.

Funkcja korelacji

- Należy wybrać zadaną konfigurację cząsteczek (rys. obok).
- Wybieramy środek osi $(0,0,0)$
- Całka $\langle n \rangle g(x)$ po elemencie objętości $d^n x$ w odległości x od środka układu współrzędnych jest ilością cząsteczek w tym elemencie objętości.
- Stąd $g(x)$ można wyznaczyć licząc ilość cząsteczek w odległości x .
- Średnia tej ilości po (wielu) cząsteczkach umieszczonych w środku (przesuwamy środek!) podzielona przez $\langle n \rangle d^n x$ daje $g(x)$

$$g(\mathbf{x}) = \frac{1}{\langle n \rangle} \left\langle \sum_{\alpha \neq 0} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_\alpha + \mathbf{x}_0) \right\rangle$$



Dla układów nieskorelowanych $g(x)$ nie zależy od x , czyli : $g(\mathbf{x}) = (1 - N^{-1}) \rightarrow 1$

$$\text{bo } \int \langle n \rangle g(\mathbf{x}) d^d x = (N - 1).$$

Funkcja korelacji

W przypadku cieczy i gazów dla każdego $\mathbf{R}$

$$\langle n(\mathbf{x}) \rangle = \langle n(\mathbf{x} + \mathbf{R}) \rangle.$$

$$C_{nn}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = C_{nn}(\mathbf{x}_1 + \mathbf{R}, \mathbf{x}_2 + \mathbf{R}).$$

Model gazu doskonałego twardych rdzeni

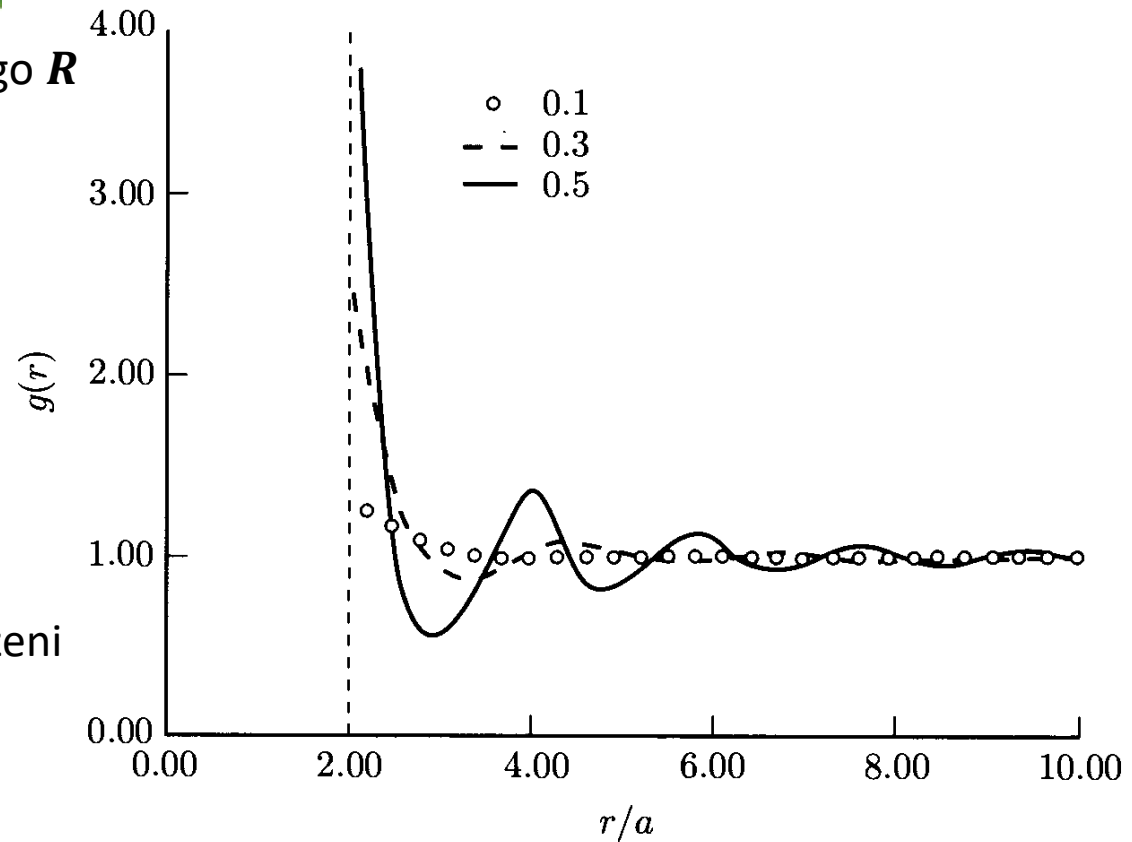


Fig. 2.4.1. The radial distribution function for a hard-sphere fluid for three different volume fractions (i.e., ratio of volume occupied by hard spheres to total volume). These curves were generated numerically using the Percus-Yevick equation.

Funkcja korelacji

W przypadku cieczy i gazów dla każdego $\mathbf{R}$

$$\langle n(\mathbf{x}) \rangle = \langle n(\mathbf{x} + \mathbf{R}) \rangle.$$

$$C_{nn}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = C_{nn}(\mathbf{x}_1 + \mathbf{R}, \mathbf{x}_2 + \mathbf{R}).$$

Argon i model gazu doskonałego
twardych rdzeni:

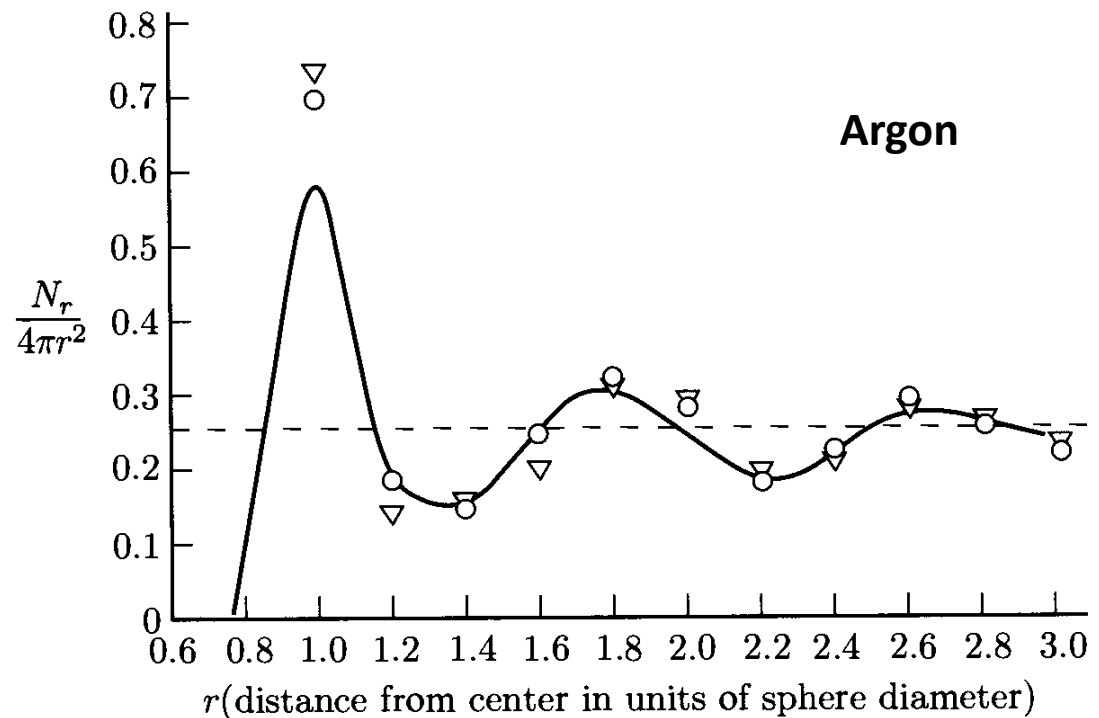
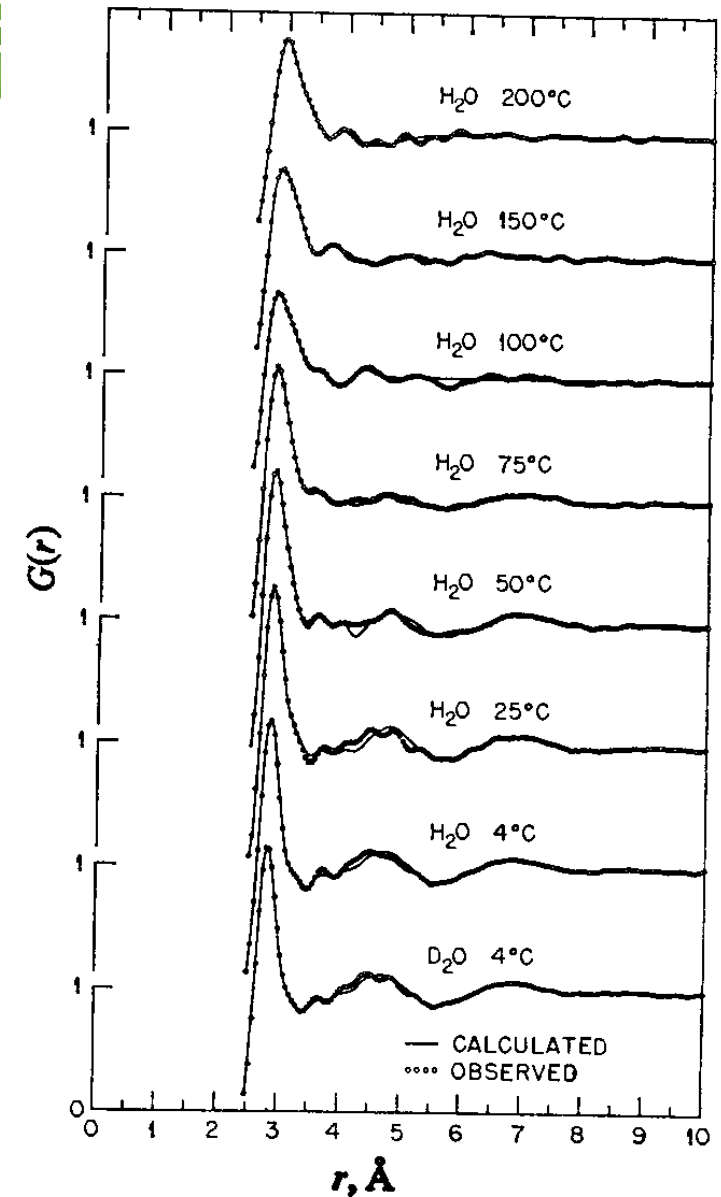
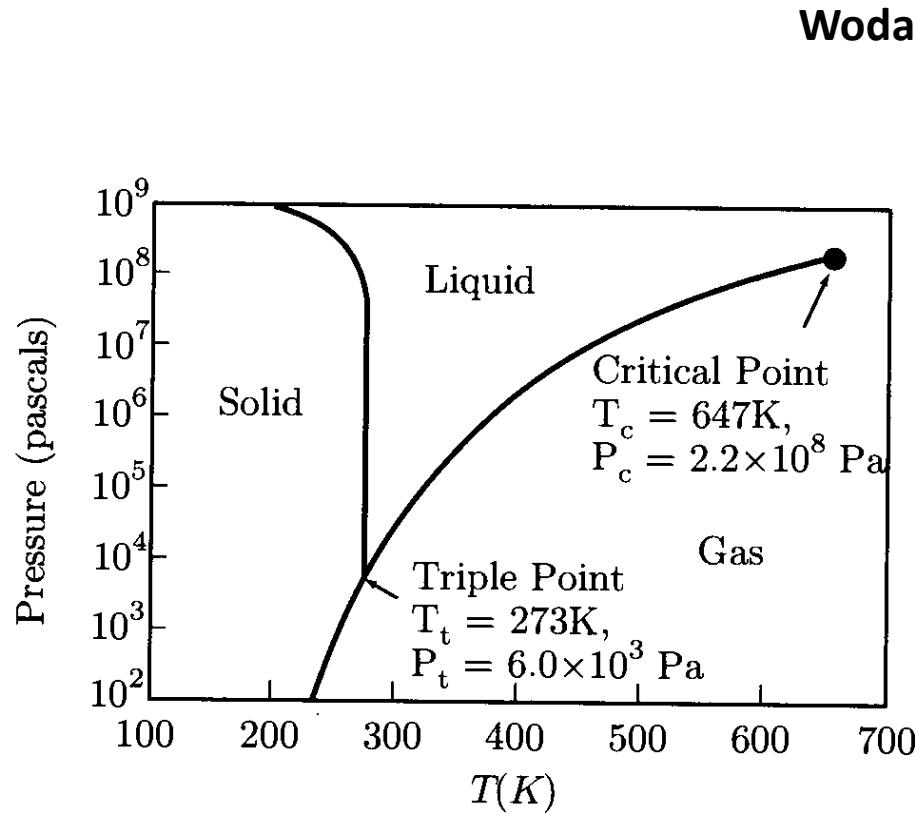


Fig. 2.4.2. The radial distribution function for the Bernal model and the experimentally observed radial distribution function for liquid argon. [J.M. Ziman, *Models of Disorder* (Cambridge University Press, 1979), p. 79.]

Materia skondensowana



P.M. Chaikin, T.C. Lubensky - *Principles of condensed matter physics*

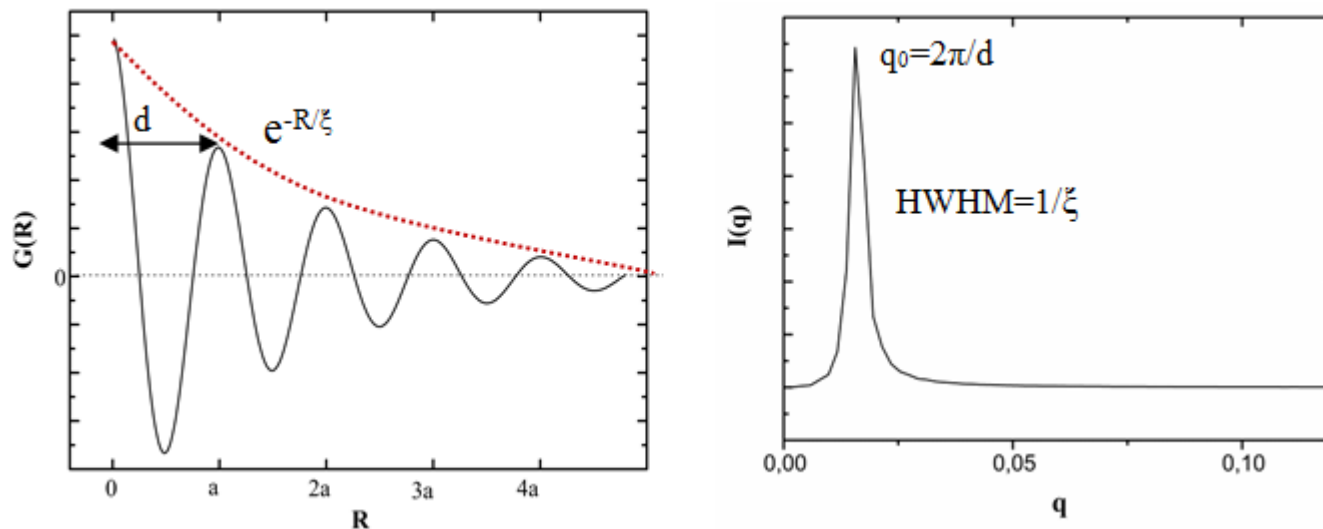
Materia skondensowana

Aby jednoznacznie odpowiedzieć na pytanie, czy materia jest kryształem czy cieczą należy wprowadzić funkcję strukturalną, która reprezentowałaby średnią pozycję cząsteczek w przestrzeni - funkcję korelacji gęstości elektronowej $G(R)$.

$$G(R) = \langle \rho(x_0) \cdot \rho(x_0 + R) \rangle - \rho_0^2 \quad \text{gdzie } \rho_0 \text{ jest średnią gęstością elektronową materii}$$

W cieczy (jednowymiarowej), w której występuje tylko krótkozasięgowe uporządkowanie pozycyjne cząsteczek, wartość funkcji korelacji gęstości elektronowej zanika w przestrzeni wykładniczo:

$$G(R) \sim \cos(q_0 R) e^{-R/\xi}$$

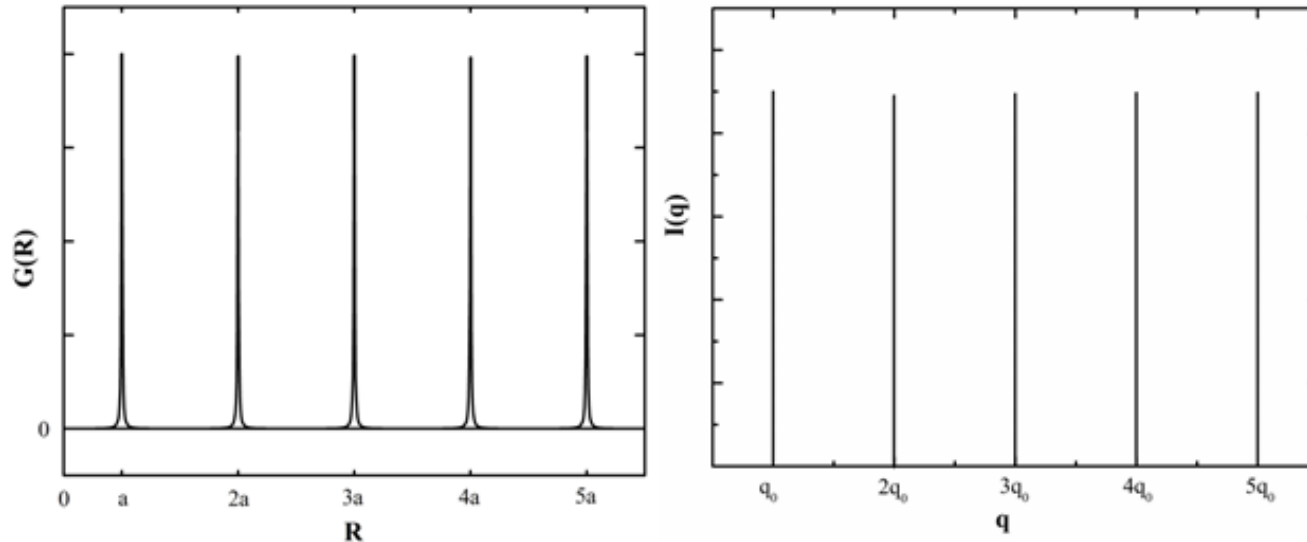


Materia skondensowana

W kryształach funkcję korelacji gęstości elektronowej można przedstawić jako sumę funkcji typu delta, odpowiadających odległościom obiektów w strukturze krystalicznej:

$$G(R) = \sum_i z_i(R) \delta(R - R_i)$$

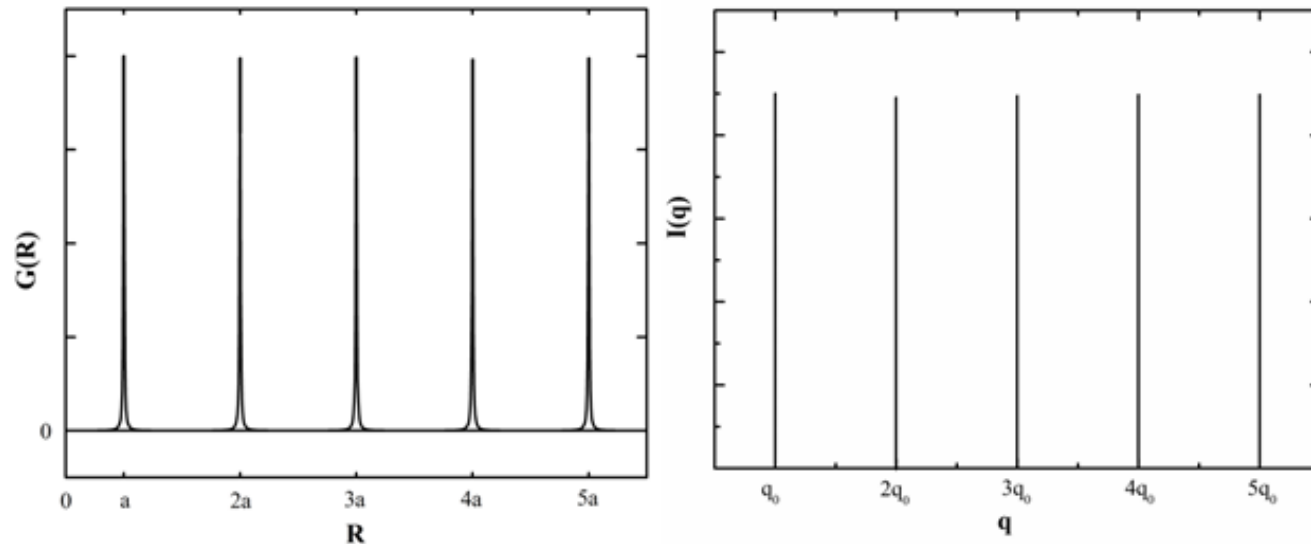
$G(R)$ jest funkcją o stałej amplitudzie ($z_i(R)$)



Materia skondensowana

Dyfraktogram jest transformatą Fouriera funkcji $G(R)$ i obrazuje on zależność intensywności sygnału od częstości przestrzennych q . Transformatą Fouriera funkcji korelacji krótkozasięgowej jest funkcja Lorentza:

$$I(q) \sim \frac{1}{1 + (\xi(q - q_0))^2}$$



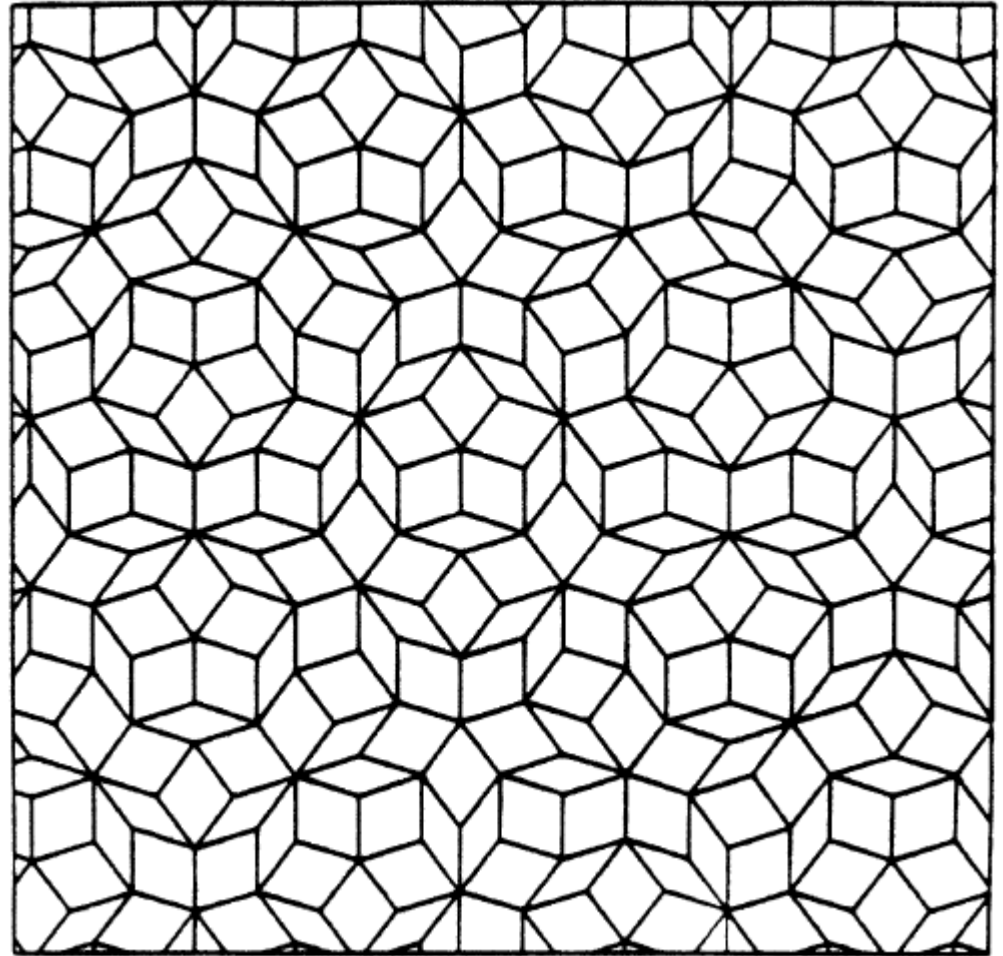
Szerokość sygnału Lorentza jest zależna od szybkości tłumienia x . Im mniejszy zakres korelacji x , tym szersze są uzyskiwane refleksy dyfrakcyjne. Ze względu na swą szerokość, obserwowane dla cieczy sygnały rentgenowskie, określane są jako 'dyfuzyjne'.

Quasicrystals and non-crystalline mater

Theoretical description of liquids, amorphous solids, glasses, quasicrystals - very complicated - no translational symmetry.

Condensation:

- Short-range order (liquid, solid amorphous, glass)
- Long-range order (crystalline matter)



Penrose tiling – five-fold symmetry

<http://www.fuw.edu.pl/~baj>

Quasicrystals and non-crystalline mater

Theoretical description of liquids, amorphous solids, glasses, quasicrystals - very complicated - no translational symmetry.

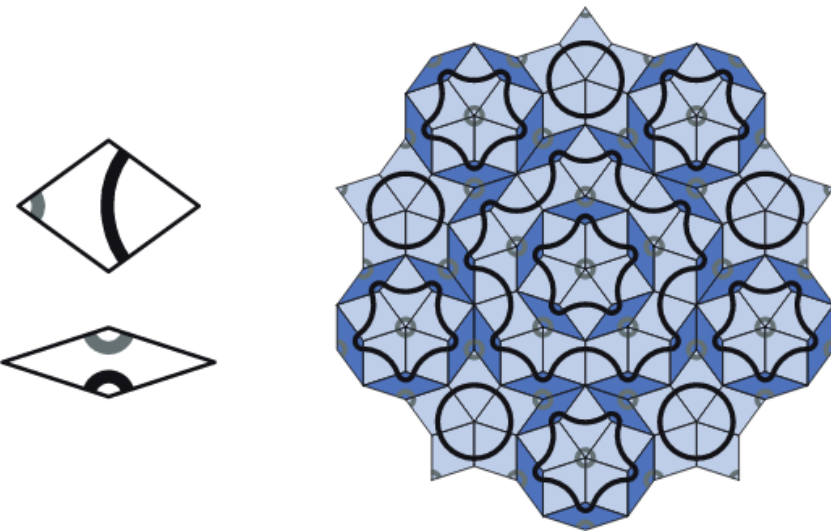
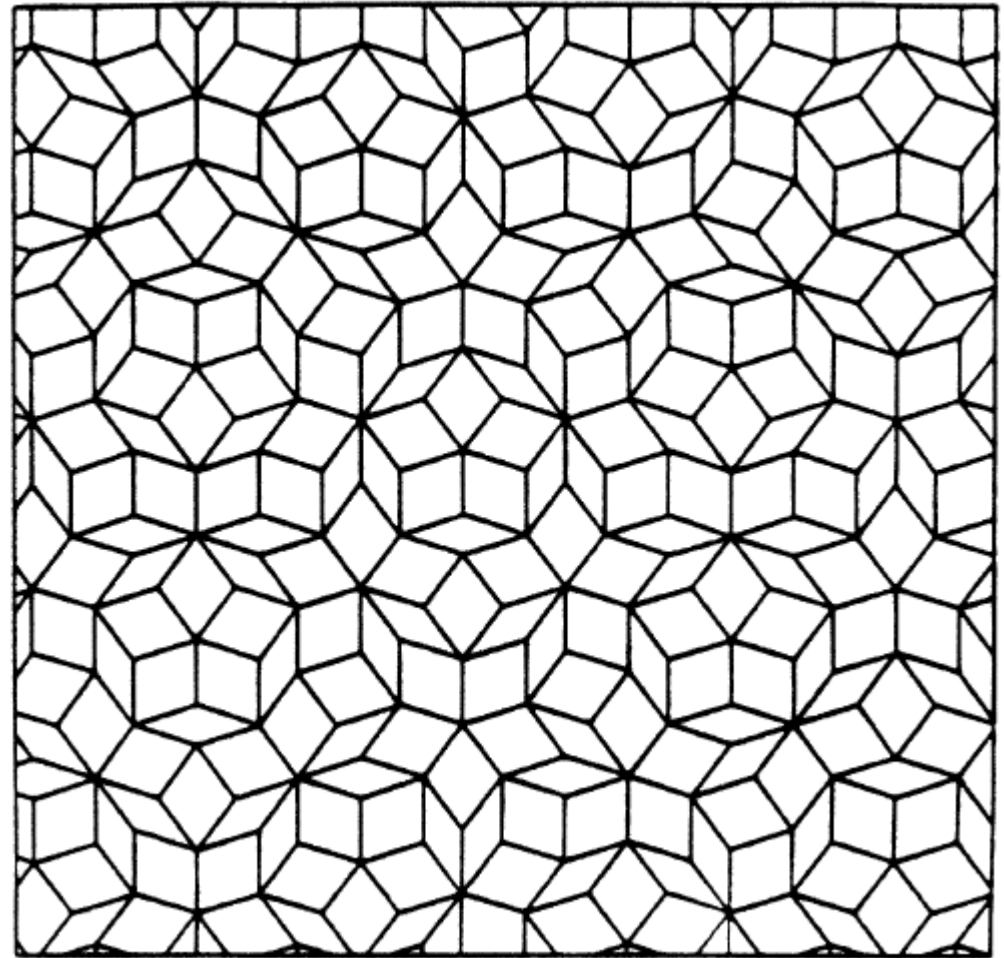


Figure 9. To generate a nonperiodic Penrose tiling it is necessary to join Penrose tiles so that the bold curves of the same color meet.

Then we may even get a mosaic that possesses the five-fold symmetry globally with respect to one point.



Penrose tiling – five-fold symmetry

Michal Krížek, Jakub Šolc, and Alena Šolcová

<http://www.ams.org/notices/201201/rtx120100022p.pdf>

crystalline mater

sses, quasicrystals - very complicated -

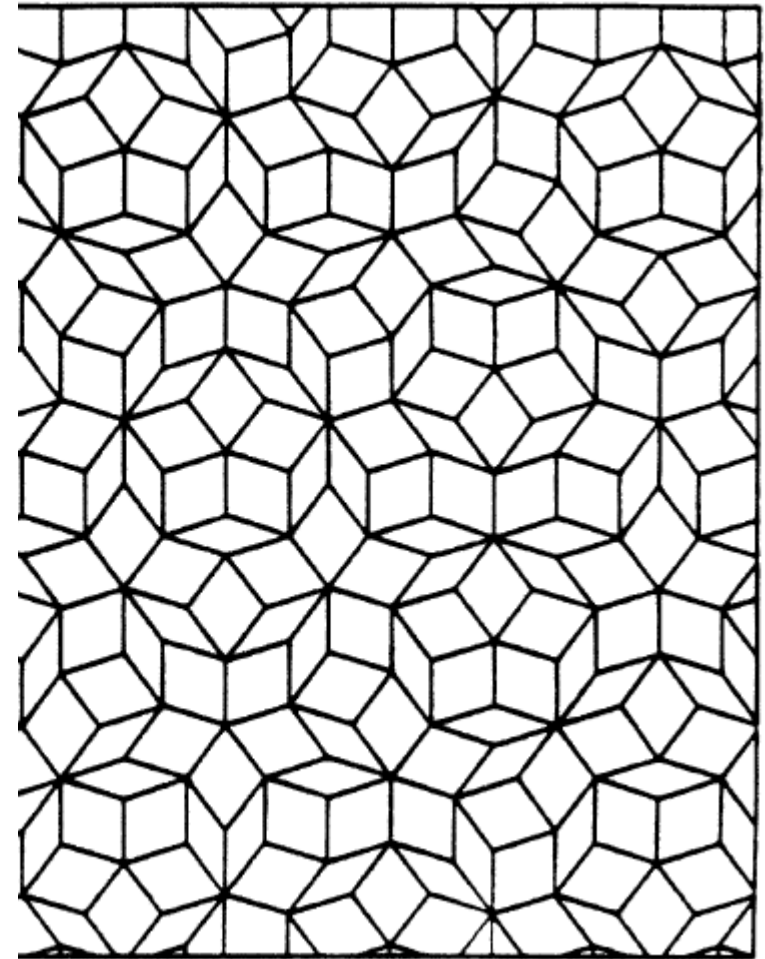
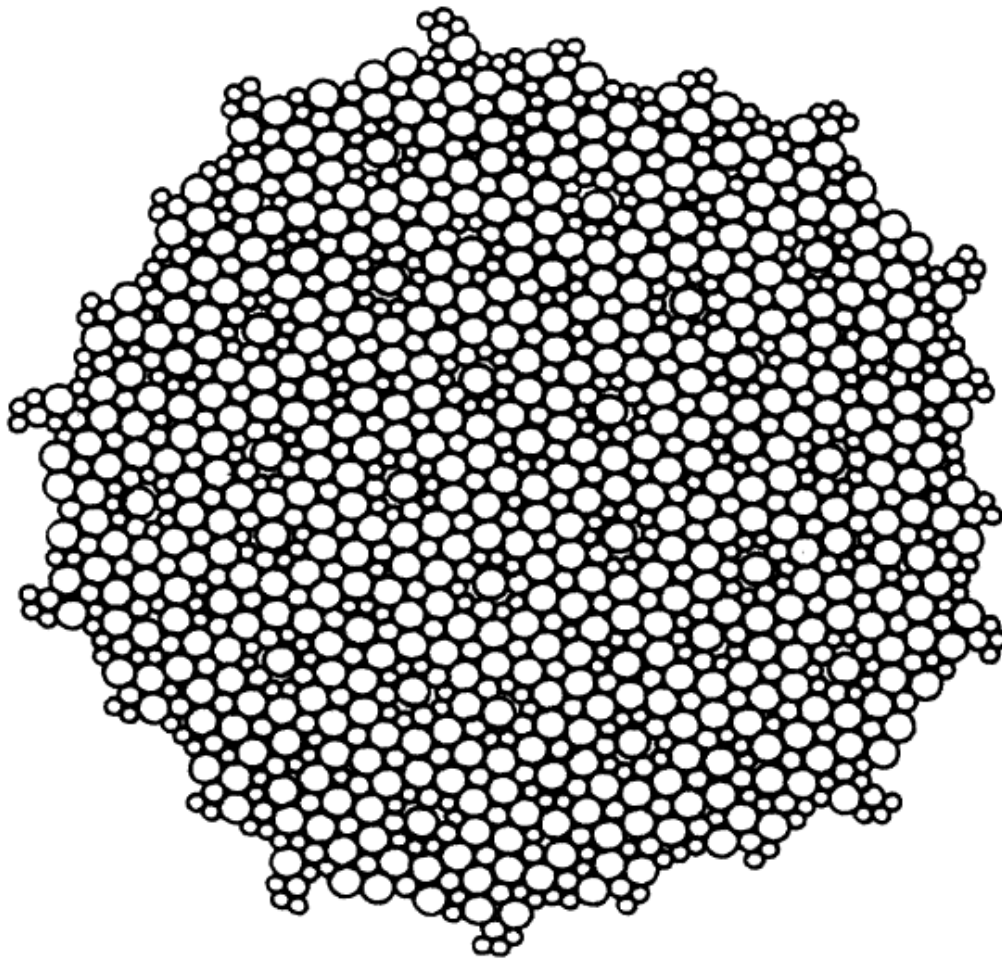


FIG. 11. Two-dimensional sphere packing using three different size spheres (a ternary alloy) which has been statically relaxed under a Lennard-Jones potential. This packing displays long-range pentagonal bond-orientational order, and, as may be seen by viewing at a grazing angle, sequences of parallel lines separated by 1 or τ (in suitable units) which indicate long-range quasiperiodic translational order. The initial (unrelaxed) configuration of atoms was a decoration of a Penrose tiling.

<http://www.fuw.edu.pl/~baj>

Quasicrystals and non-crystalline mater

Theoretical description of liquids, amorphous solids, glasses, quasicrystals - very complicated - no translational symmetry.

Condensation:

- Short-range order (liquid, solid amorphous, glass)
- Long-range order (crystalline matter)

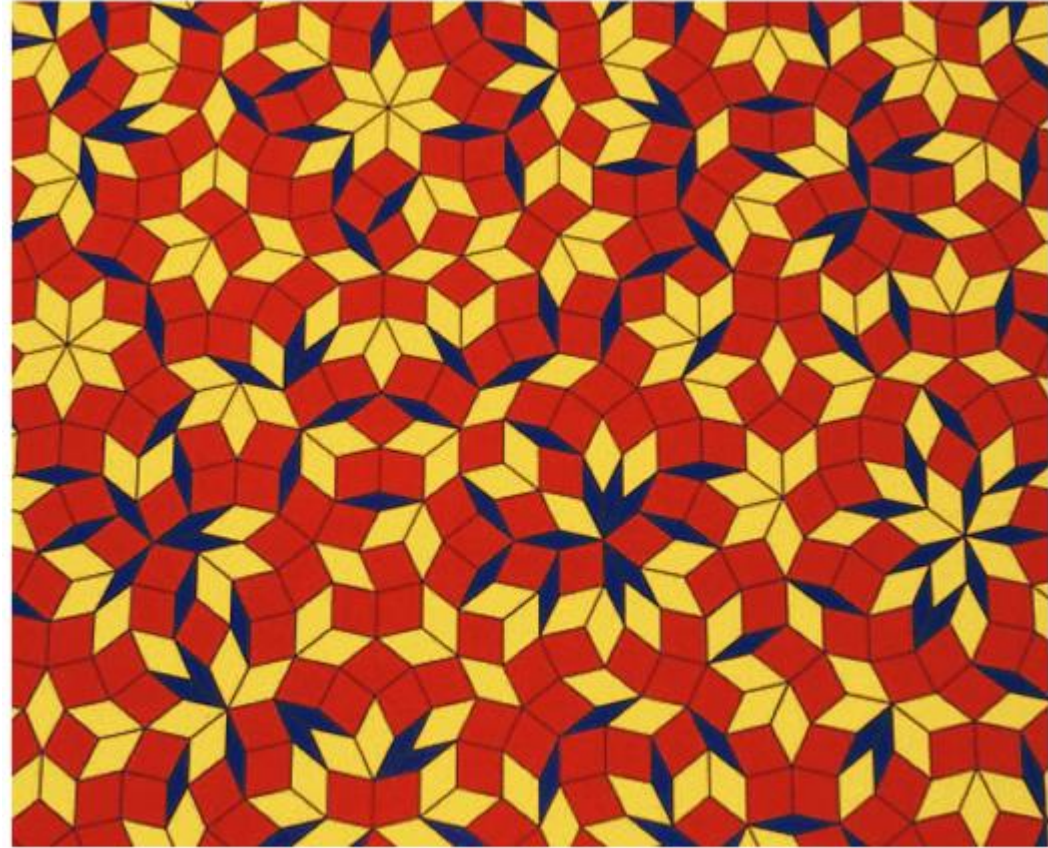


Figure 10. Katz nonperiodic tiling.
seven-fold symmetry

Michal Krížek, Jakub Šolc, and Alena Šolcová

<http://www.ams.org/notices/201201/rtx120100022p.pdf>

Quasicrystals and non-crystalline mater

Theore
no tran



The Nobel Prize in Chemistry 2011
Dan Shechtman

ery complicated -

The Nobel Prize in Chemistry 2011

Nobel Prize Award Ceremony

Dan Shechtman



Photo: U. Montan

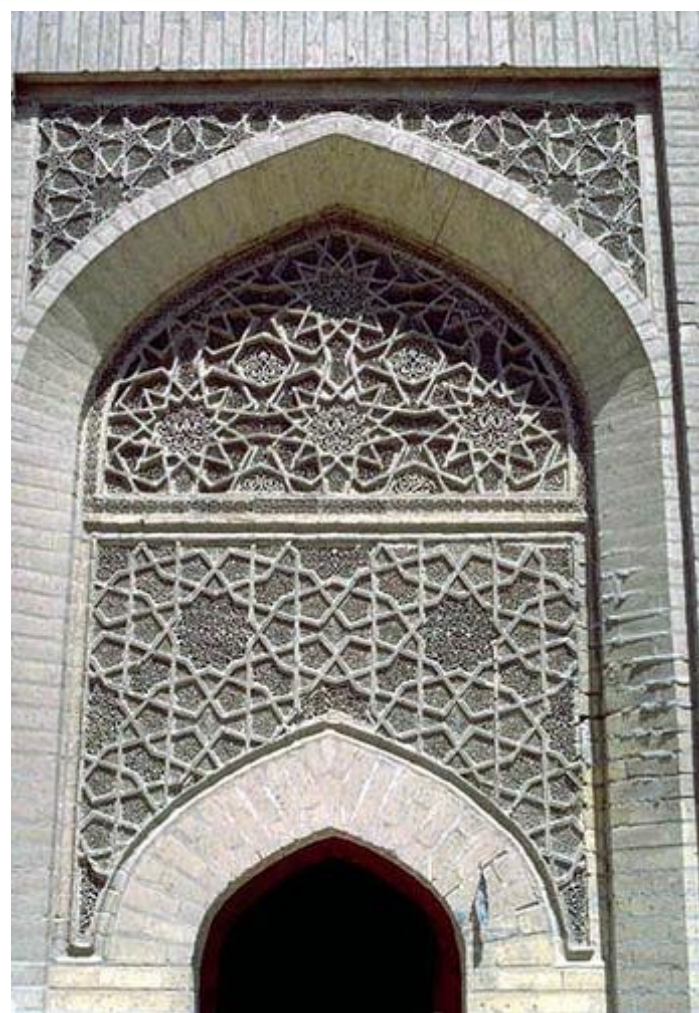
Dan Shechtman

The Nobel Prize in Chemistry 2011 was awarded to Dan Shechtman *"for the discovery of quasicrystals"*.

molten mixture of aluminium and manganese
under an electron microscope

<http://www.fuw.edu.pl/~baj>

Quasicrystal



**The Madrasa al-Mustansi
Baghdad, Iraq (1233)**

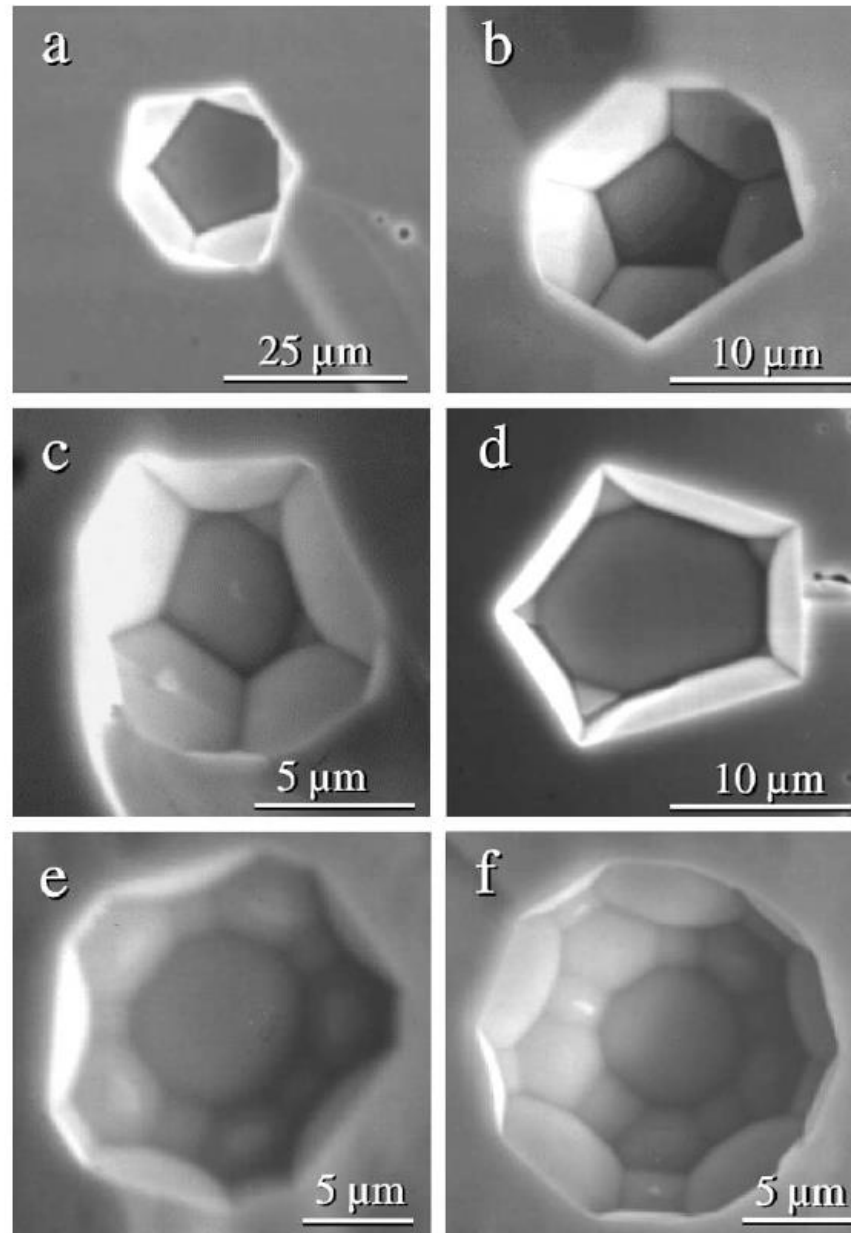
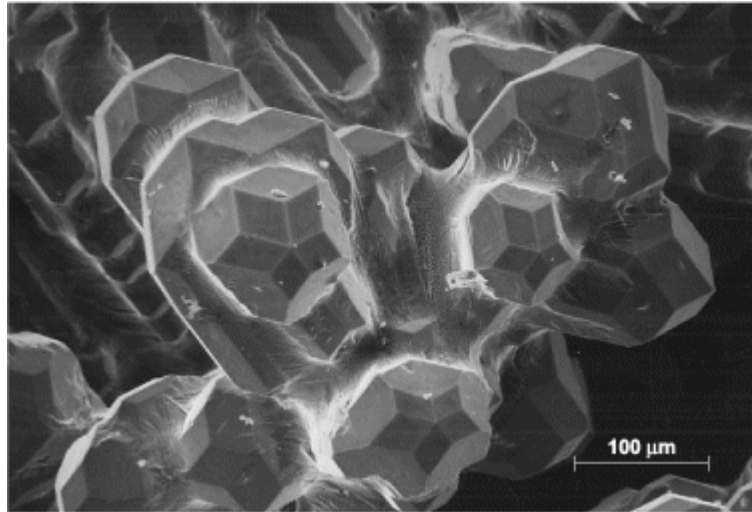


Fig. 1. Scanning electron microscopy images of different types of faceted grown-in voids in as-grown icosahedral Al-Pd-Mn quasicrystals: (a, b) voids with only fivefold facets, (c, d) voids with five- and minor threefold facets, (e, f) voids with additional twofold facets and decreasing size of fivefold facets. All voids are shown along the fivefold sample direction.

Quasicrystals and Inter

Theoretical description of liquids, amorphous, and quasicrystals: no translational symmetry.

<http://progressivehumanity.tumblr.com/post/15250013045/quasicrystals-although-chemists-initially>



An alloy of aluminum, copper, and iron showed clear evidence of naturally occurring quasicrystals.

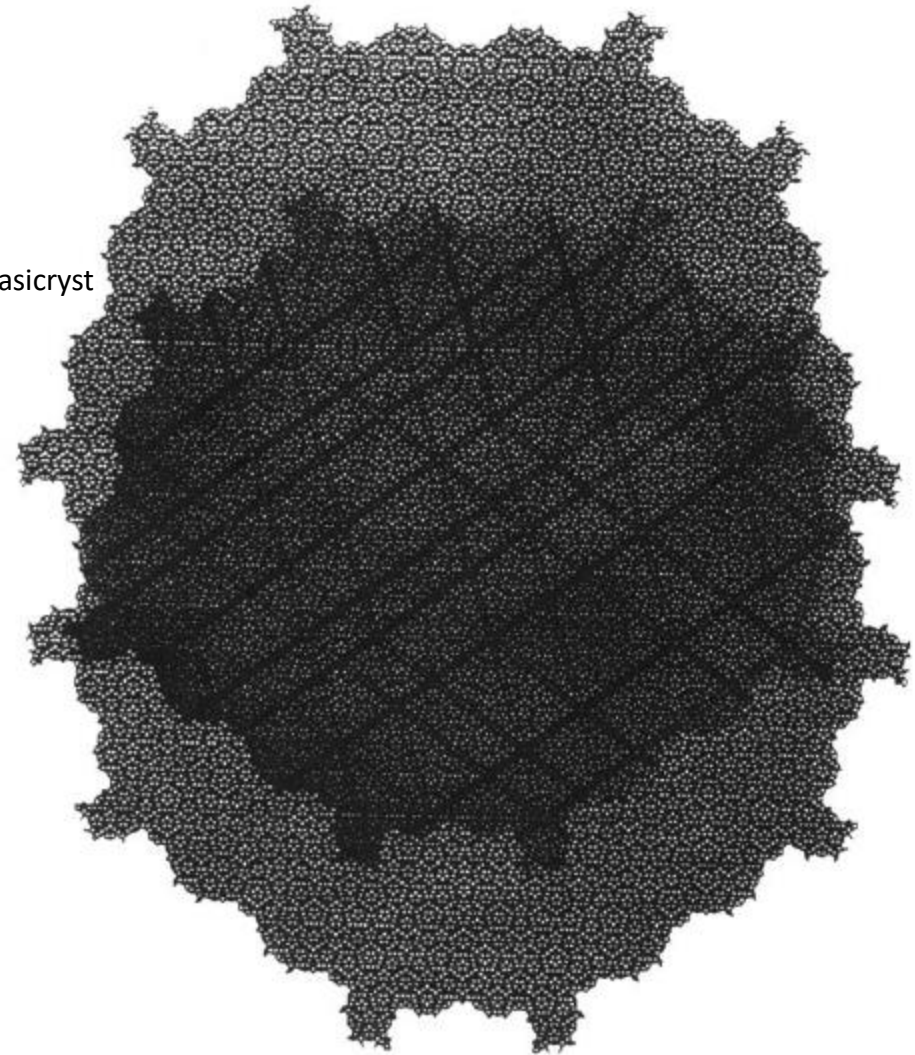


FIG. 3. Two identical Penrose tilings, one translated with respect to the other, are overlaid to form a moiré pattern. Where the two patterns interfere constructively or destructively, light or dark lines appear.

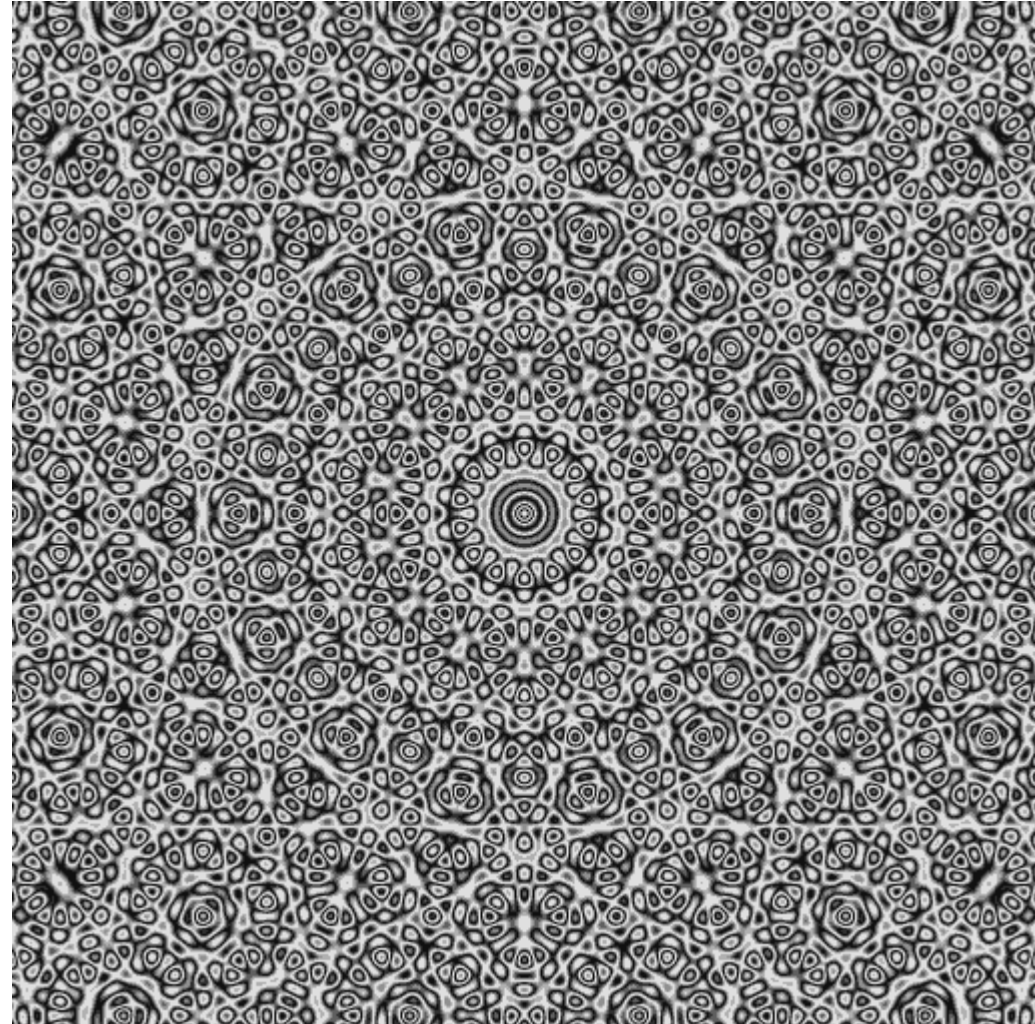
Dov Levine, J. Steinhardt PRB **34**, 596 (1986)

Kondensacija

Theoretical description of liquids, amorphous solids, glasses, quasicrystals - very complicated - no translational symmetry.

Condensation:

- Short-range order (liquid, solid amorphous, glass)
- Long-range order (crystalline matter)

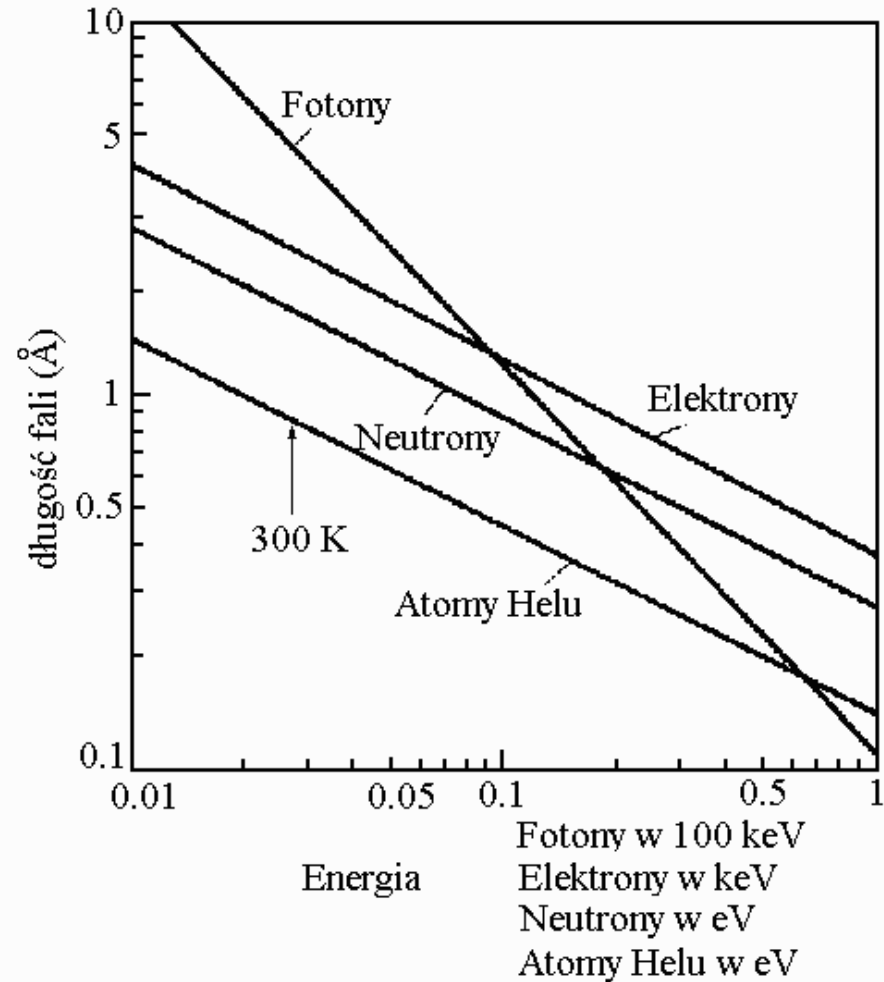


<http://thesummerofmark.tumblr.com/post/11943716894/quasicrystals-ftw>

Krystalografia

Wskaźniki płaszczyzn

The crystalline structure is studied by means of the diffraction of photons, neutrons, electrons or other light particles



Krystalografia

Dyfrakcja

1912 – Max von Laue zauważył, że długości fali promieniowania X są porównywalne z odległościami międzyatomowymi w kryształach. Sugestia ta została szybko potwierdzona przez Waltera Friedricha i Paula Knippinga



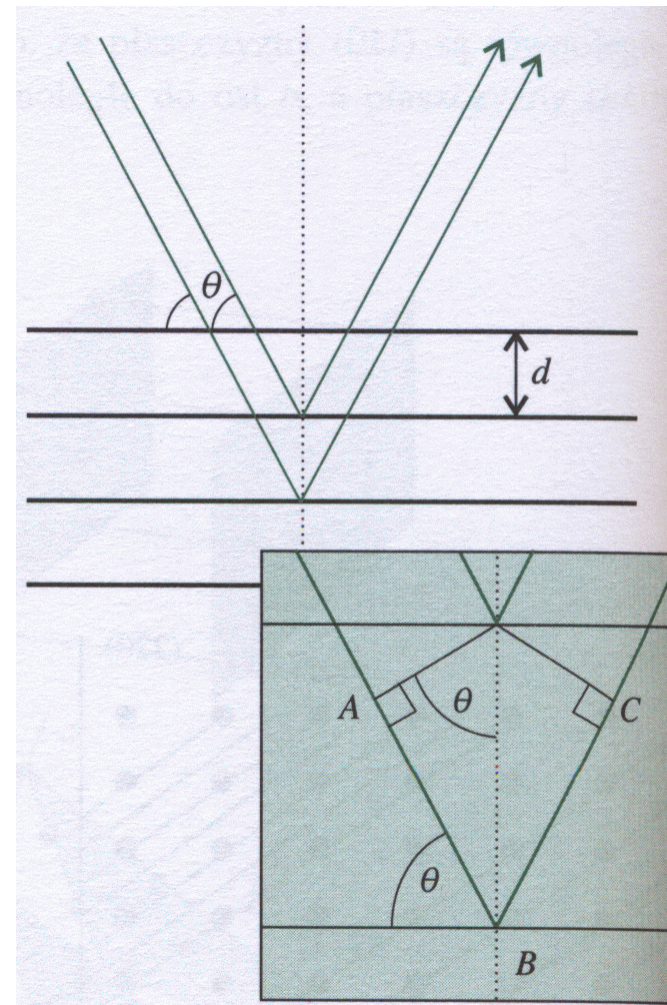
Max von Laue
1879 - 1960

Model kryształu. Zbiór odbijających równoległych płaszczyzn o odległościach między płaszczyznowych d

$$2d\sin\theta = n\lambda$$

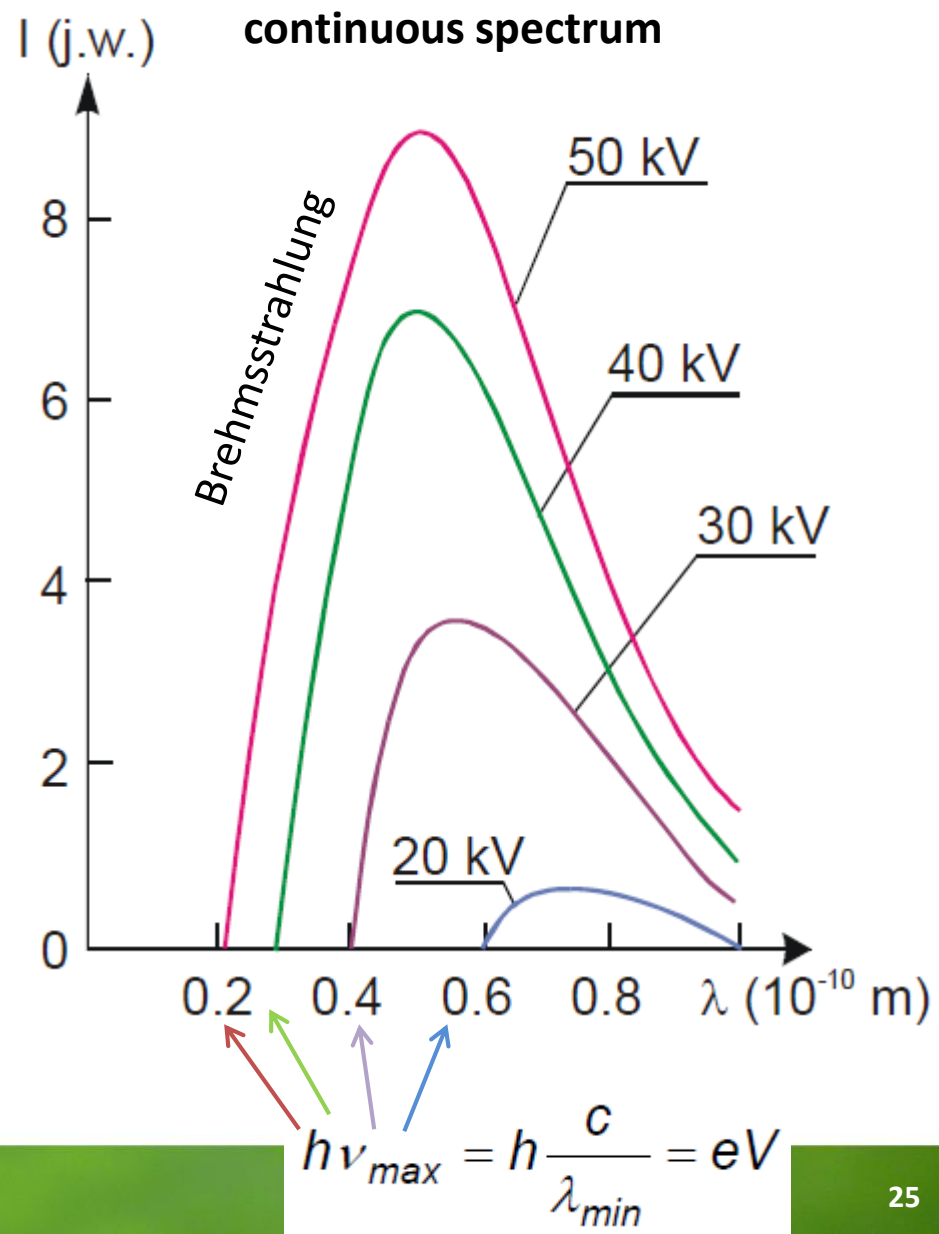
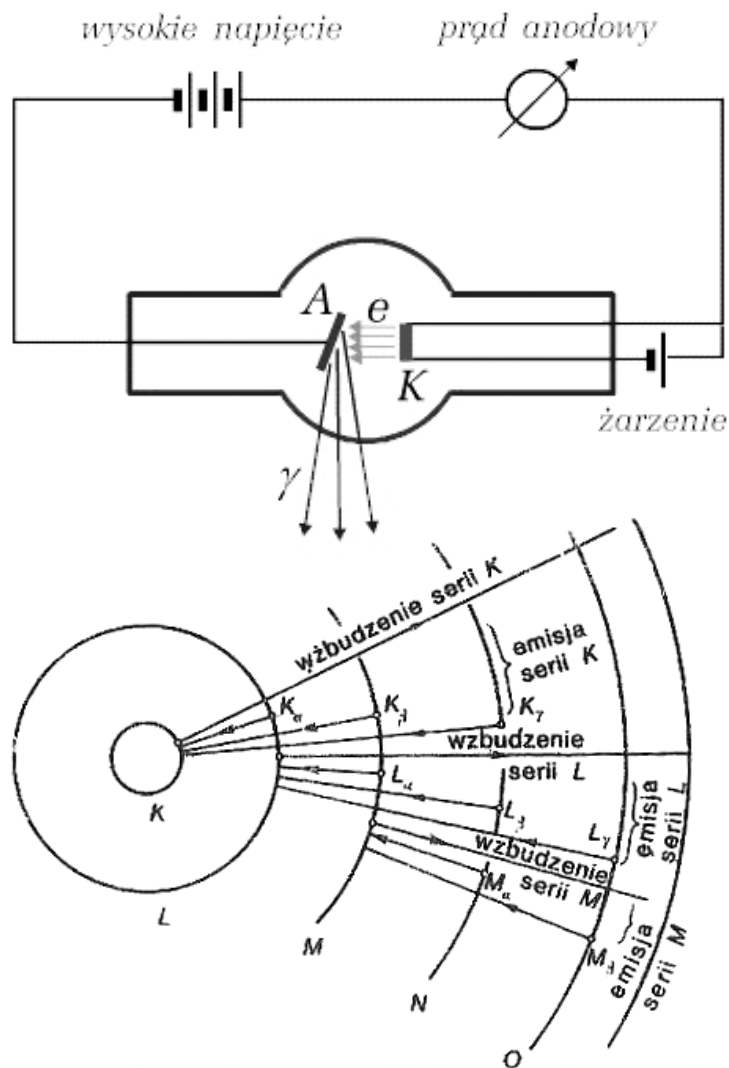
William Lawrence Bragg (son) and William Henry Bragg (father), 1913

e.g. $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$, $d = 4 \text{ \AA}$, kryształ o symetrii regularnej, pierwszy refleks $\theta = 11^\circ$



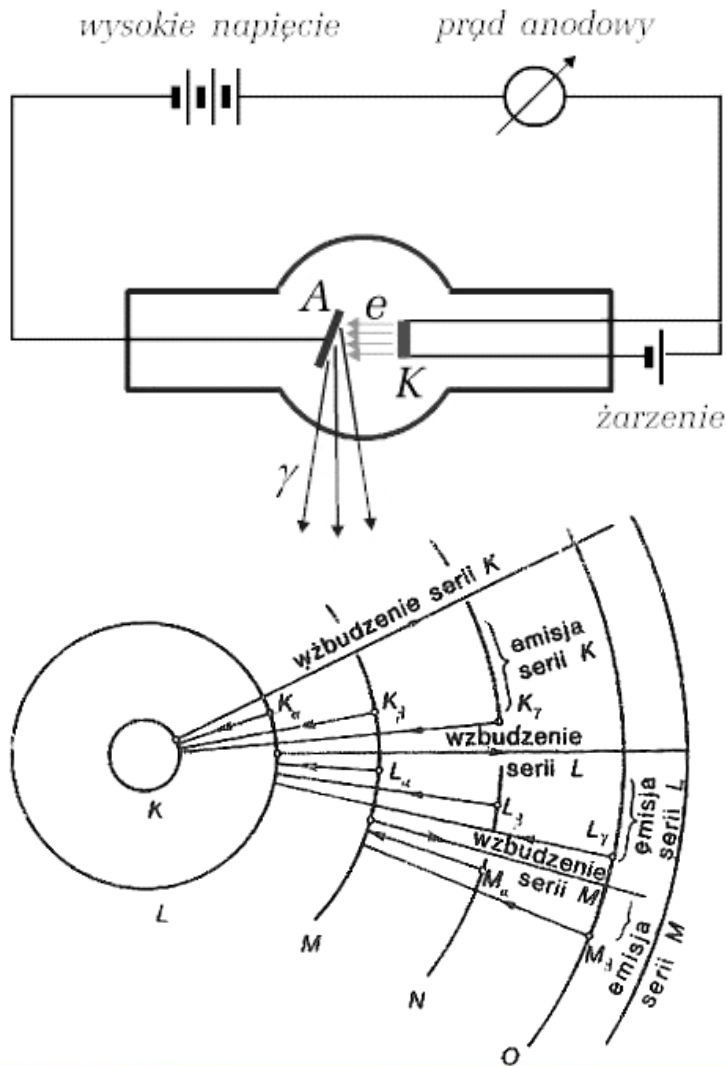
P. Atkins

Dyfrakcja

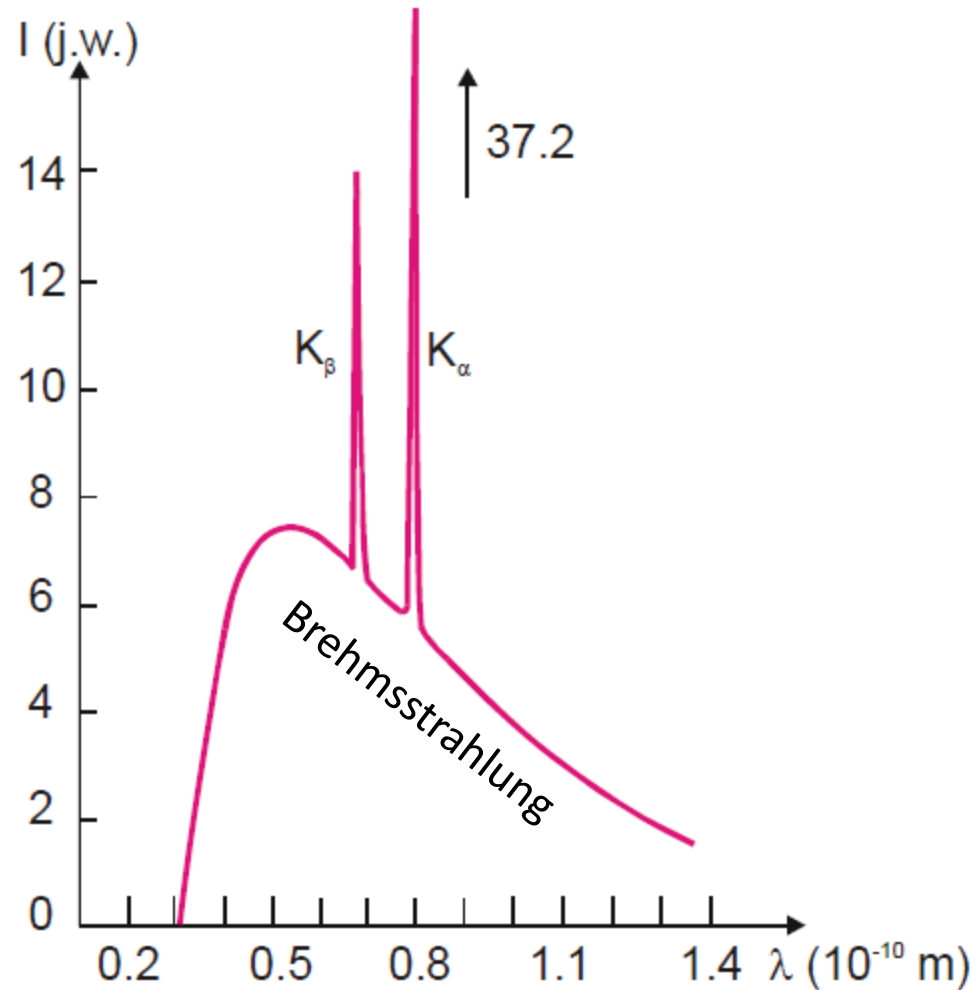


Krystalografia

Dyfrakcja



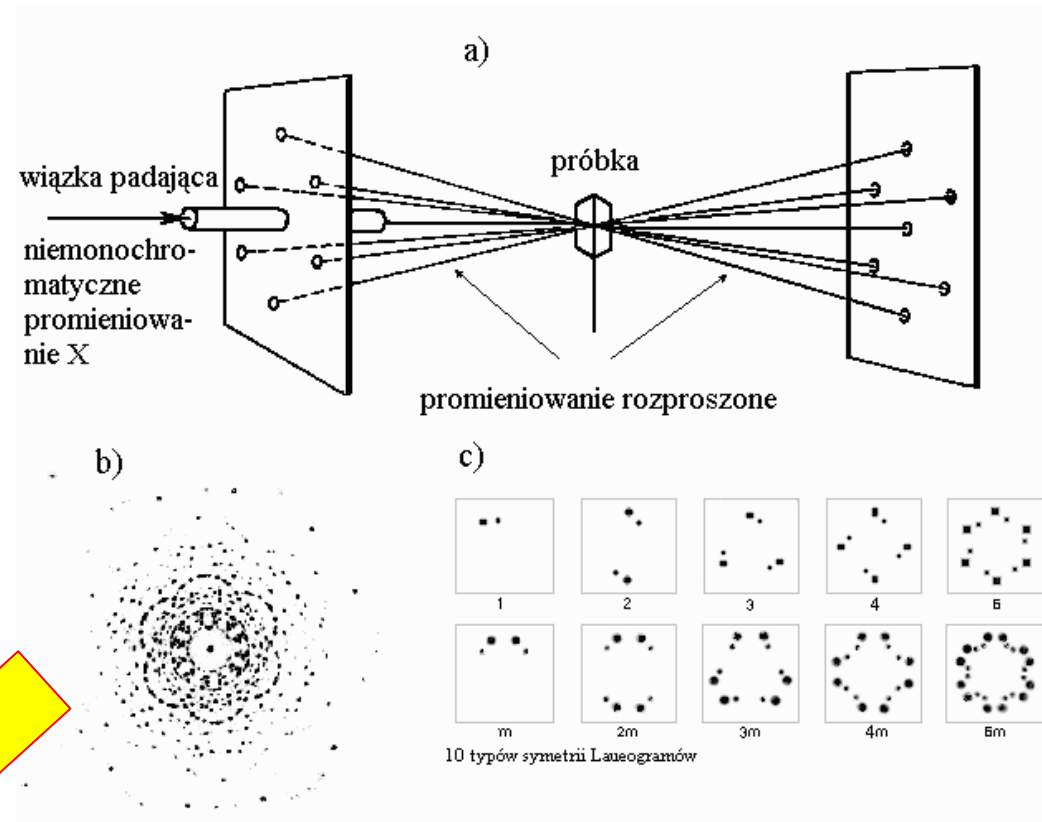
characteristic spectrum



Krystalografia

metoda Lauego

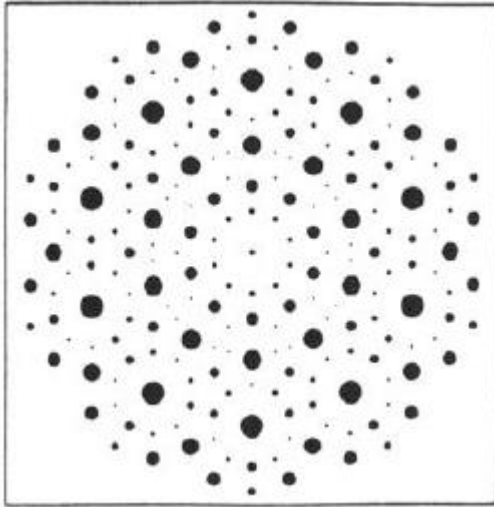
- Kryształ oświetlony jest światłem białym.
- W wyniku rozproszenia fale o różnych długościach zostają rozproszone w różnych kierunkach. Otrzymujemy na kliszy różne punkty dla różnych kolorów (długości fali).
- Układ plamek ma symetrię taką jak kierunek w kryształach, wzdłuż którego pada fala



TU 20171215

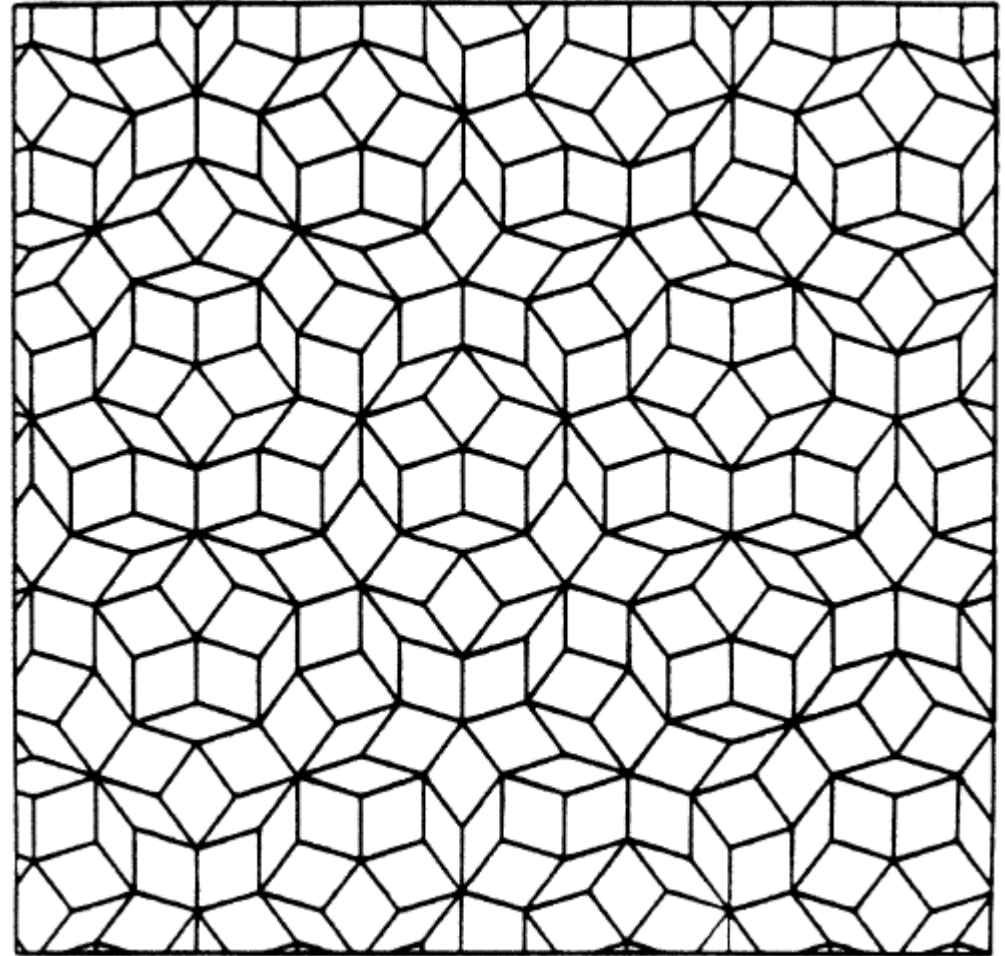
Quasicrystals and non-crystalline mater

Theoretical description of liquids, amorphous solids, glasses, quasicrystals - very complicated - no translational symmetry.



Condensation:

- Short-range order (liquid, solid amorphous, glass)
- Long-range order (crystalline matter)



Penrose tiling

<http://www.fuw.edu.pl/~baj>

Krystalografia

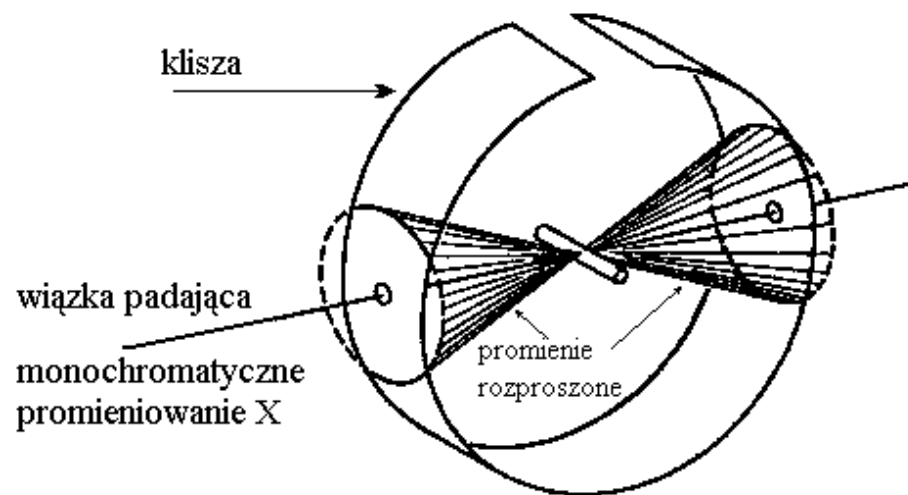
metoda Debaye-Scherera



Peter Joseph Debye
1884 – 1966



Paul Scherrer
1890 - 1969

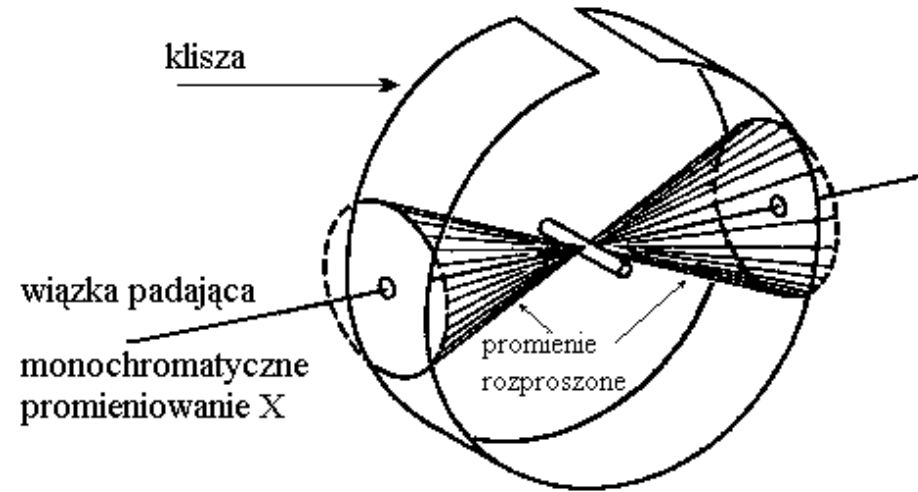


Typowy debajogram

Krystalografia

metoda Debaye-Scherera

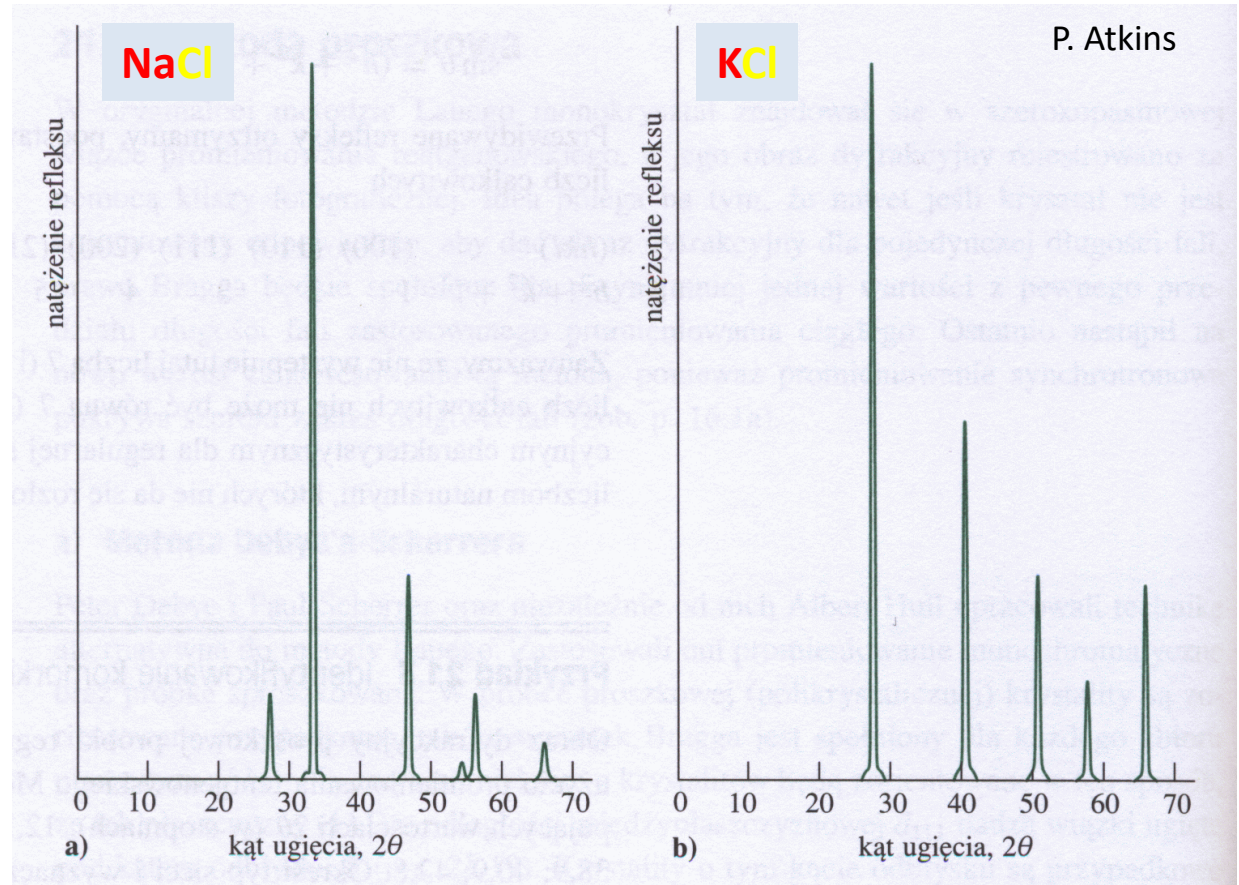
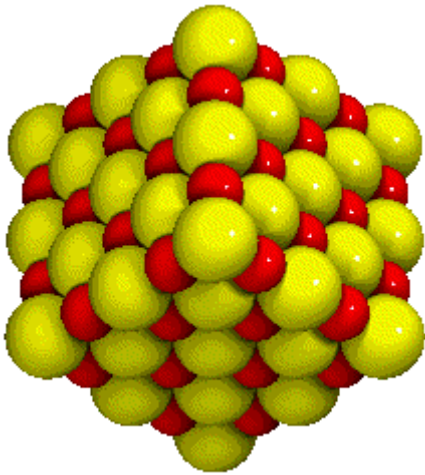
Badanym ośrodkiem jest proszek z chaotyczną orientacją kryształów w przestrzeni. Oświetla się go falą monochromatyczną. Rozproszenie na różnie zorientowanych kryształach powoduje powstanie na kliszy łuków odpowiadających płaszczyznom, na których możliwe było ugięcie promienia



Typowy debajogram

Krystalografia

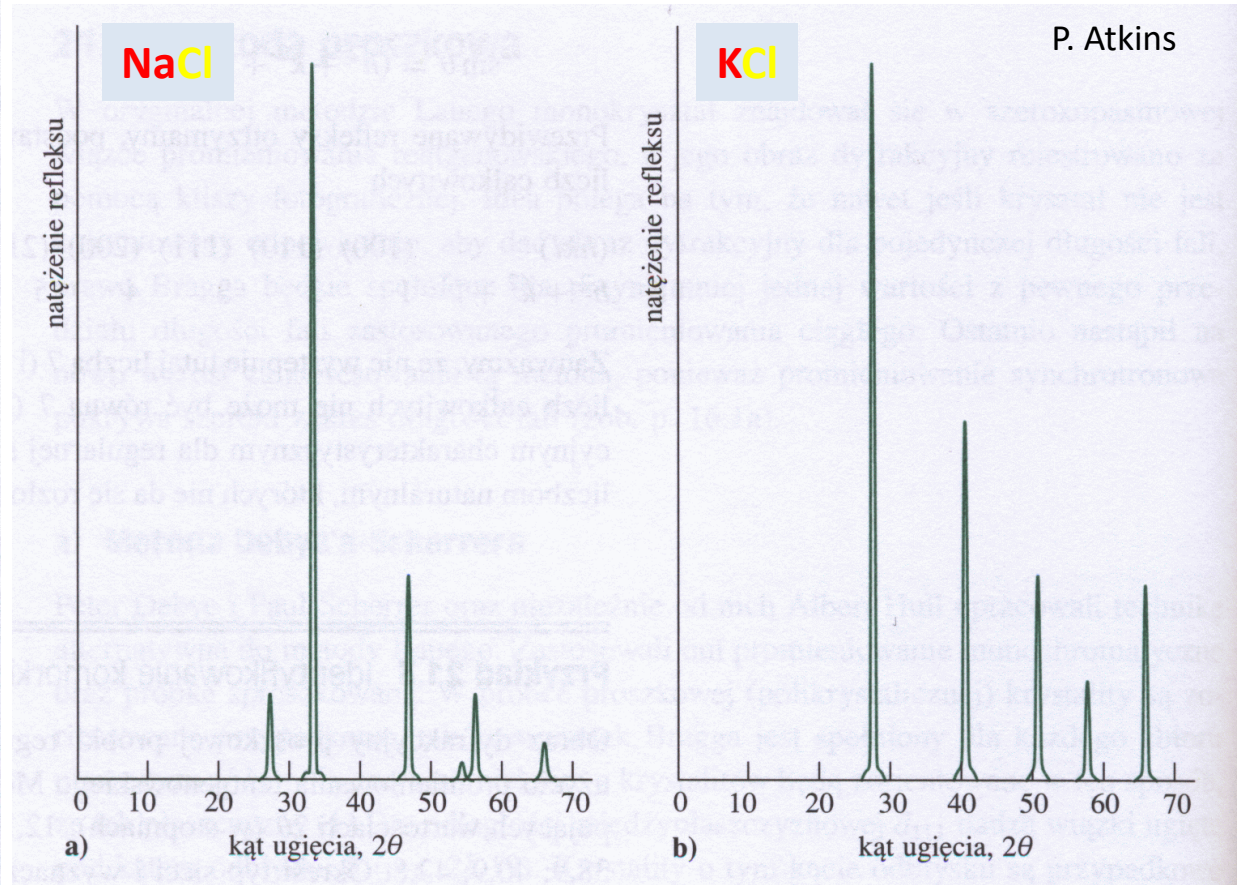
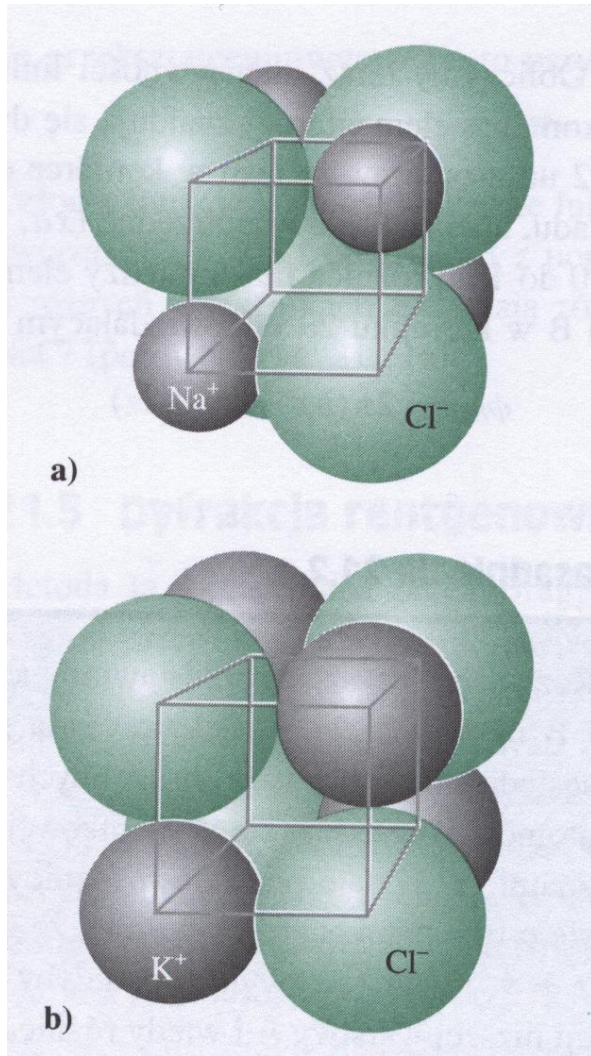
Atomic form factor (*czynniki atomowy*)



Both salts have the same crystal structure, but different diffraction, why?

Krystalografia

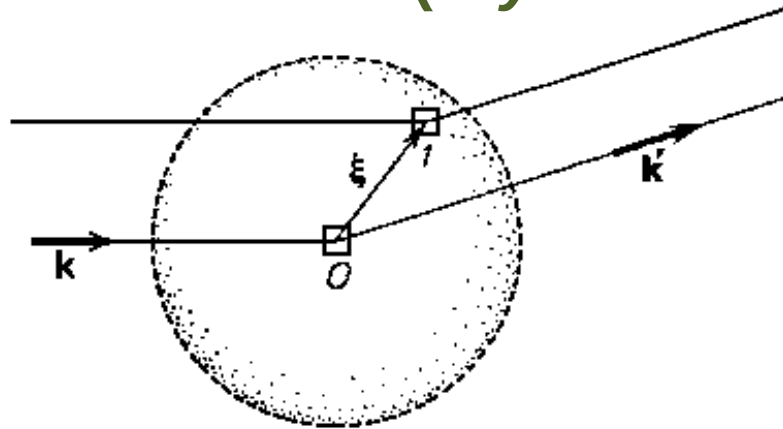
Atomic form factor (*czynniki atomowy*)



Both salts have the same crystal structure, but different diffraction, why?

Krystalografia

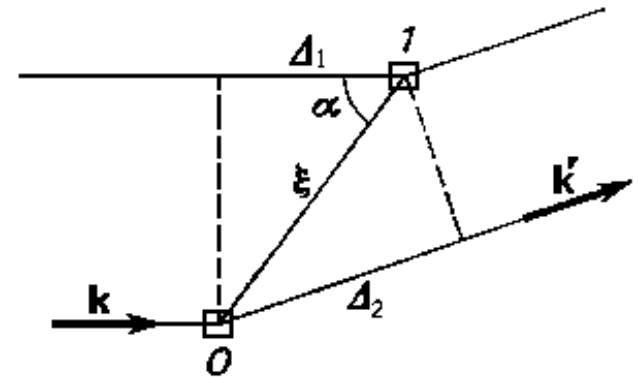
Atomic form factor (czynniki atomowy)



Rys. 8.2. Dyfrakcja fali elektromagnetycznej przez chmurę gęstości ładunku elektronów w atomie

Rozpraszanie elastyczne na gazie atomowym.
Rozprasza chmura elektronowa: i.e. lokalna gęstość elektronów $\rho(\vec{\xi})$

$$|\vec{k}| = |\vec{k}'| = k$$



Rys. 8.3. Oznaczenia używane w obliczeniach

$$\Delta_1 = \xi \cos \alpha = \xi \frac{\vec{k} \vec{\xi}}{k \xi} = \frac{\vec{k} \vec{\xi}}{k}$$

$$\Delta_2 = \xi \cos \alpha' = \xi \frac{\vec{k}' \vec{\xi}}{k \xi} = \frac{\vec{k}' \vec{\xi}}{k}$$

$$\Delta = (\Delta_2 - \Delta_1) = \frac{(\vec{k}' - \vec{k}) \vec{\xi}}{k} = \frac{\Delta \vec{k} \vec{\xi}}{k}$$

$$\varphi = \frac{2\pi\Delta}{\lambda} = k\Delta = \Delta \vec{k} \vec{\xi}$$

Krystalografia

Atomic form factor (czynniki atomowy)

$$\Delta = (\Delta_2 - \Delta_1) = \frac{(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{\xi}}{k} = \frac{\Delta \vec{k} \cdot \vec{\xi}}{k}$$

$$\varphi = \frac{2\pi\Delta}{\lambda} = k\Delta = \Delta \vec{k} \cdot \vec{\xi}$$

Gęstość ładunku w $\vec{\xi} = 0$

$$\Psi(0) = \frac{A}{r} \exp[i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)] \rho_e(\vec{\xi} = 0)$$

$$\Psi(\vec{\xi}) = \frac{A}{r} \exp[i(\vec{k}\vec{r} - \omega t - \Delta \vec{k} \cdot \vec{\xi})] \rho_e(\vec{\xi})$$

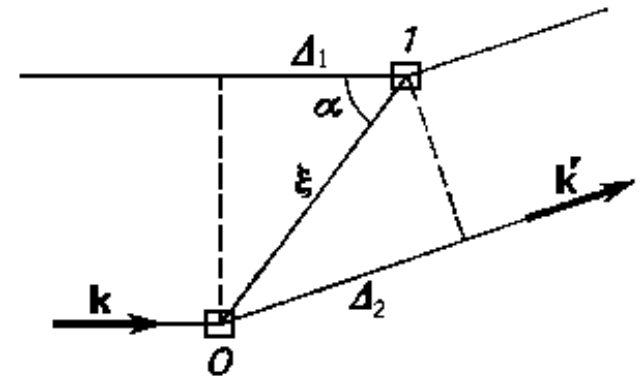
Fala rozproszona

$$\Psi(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = \frac{A}{r} \exp[i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)] \rho_e(\vec{\xi}) \exp[-i\Delta \vec{k} \cdot \vec{\xi}] d\vec{\xi}$$

Atomic form factor

$$f = -\frac{1}{e} \int \rho_e(\vec{\xi}) \exp[-i\Delta \vec{k} \cdot \vec{\xi}] d\vec{\xi}$$

Gęstość ładunku



Rys. 8.3. Oznaczenia używane w obliczeniach

Krystalografia

Atomic form factor (*czynniki atomowy*)

Np. rozkład elektronów o symetrii kulistej

$$\begin{aligned} f &= -\frac{1}{e} \int \rho_e(\vec{\xi}) \exp[-i\Delta\vec{k}\vec{\xi}] d\vec{\xi} = -\frac{1}{e} 2\pi \int \rho_e(\vec{\xi}) \exp[-i\Delta\vec{k}\vec{\xi}] \xi^2 d(\cos\theta) d\xi \\ &= -\frac{2\pi}{e} \int \xi^2 \rho_e(\vec{\xi}) \frac{\exp[\Delta k\xi] - \exp[-\Delta k\xi]}{i\Delta k\xi} d\xi = -\frac{4\pi}{e} \int \xi^2 \rho_e(\vec{\xi}) \frac{\sin \Delta k\xi}{\Delta k\xi} d\xi \end{aligned}$$

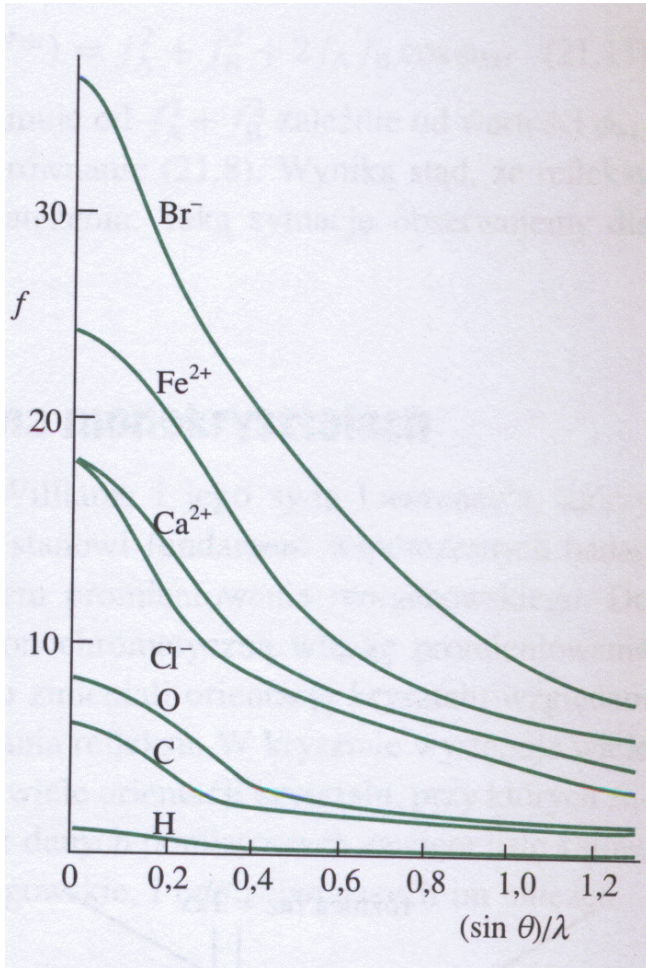
Dla małych kątów rozproszeń $\Delta k\xi \rightarrow 0$ oraz $f = -Z$

Atomowy czynnik rozpraszania f oznacza stosunek amplitudy promieniowania rozproszonego przez **rzeczywisty rozkład elektronów** w atomie do amplitudy promieniowania rozproszonego przez **jeden elektron punktowy**.

Atomic form factor $f = -\frac{1}{e} \int \rho_e(\vec{\xi}) \exp[-i\Delta\vec{k}\vec{\xi}] d^3\xi$

Krystalografia

Atomic form factor (czynniki atomowe)



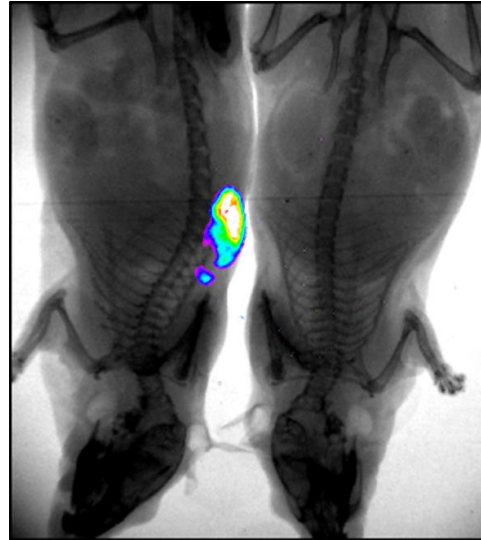
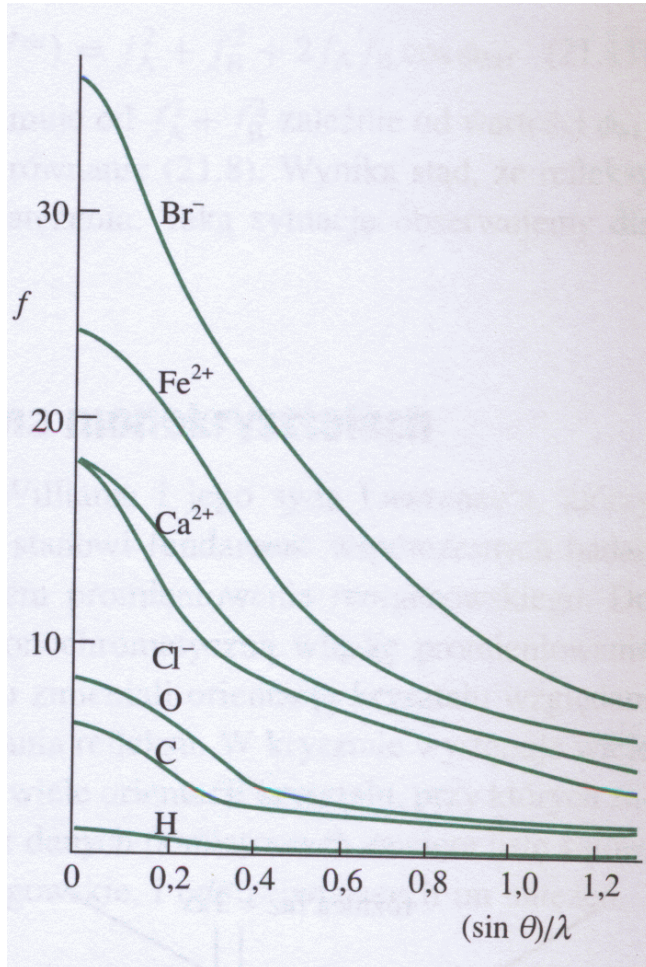
For small angles of scattering
 $ef = Q$ (total charge)

1A (1)	2A (2)	Key:										3A (13)	4A (14)	5A (15)	6A (16)	7A (17)	8A (18)
		Metals Nonmetals Metalloids														H	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	3B (3)	4B (4)	5B (5)	6B (6)	7B (7)	8B (8) (9) (10)			1B (11)	2B (12)	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	112	113	114	115	116		
Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu																	
Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No Lr																	

$$f = -\frac{1}{e} \int \rho_e(\vec{\xi}) \exp[-i\Delta\vec{k}\vec{\xi}] d^3\xi$$

Krystalografia

Atomic form factor (*czynnik atomowy*)



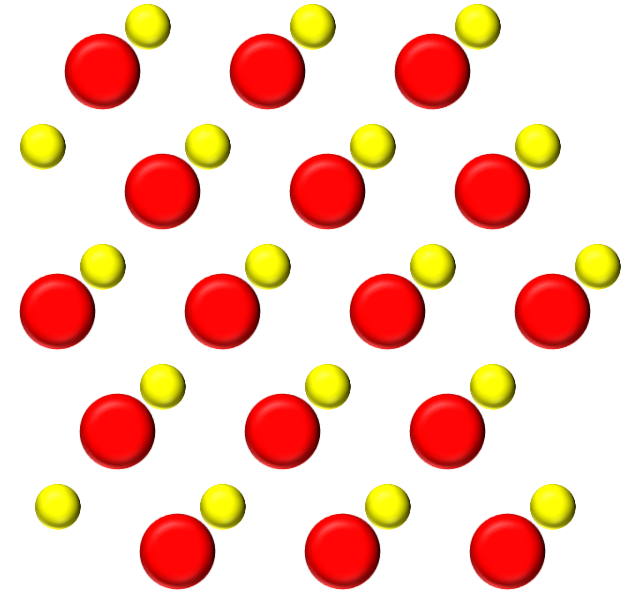
$$f = -\frac{1}{e} \int \rho_e(\vec{\xi}) \exp[-i\Delta\vec{k}\vec{\xi}] d^3\xi$$

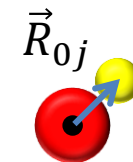
Krystalografia

Fala rozproszona na jednym atomie: (j)

$$\Psi = A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j$$

Fala rozproszona na wszystkich atomach (w kierunku $\vec{k}'$):




$$\vec{R}_{nj} = \vec{R}_{0j} + \vec{T}$$

Baza

Krystalografia

Fala rozproszona na jednym atomie: (j)

$$\Psi = A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j$$

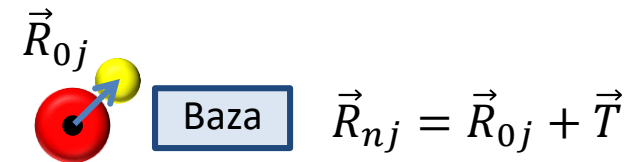
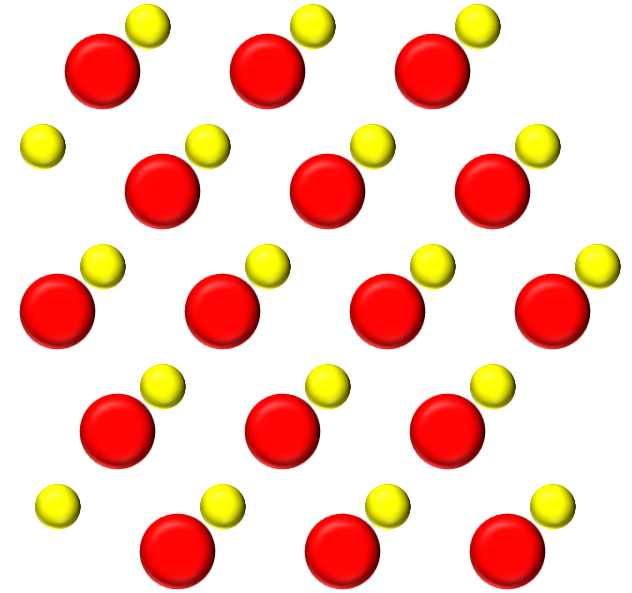
Fala rozproszona na wszystkich atomach (w kierunku $\vec{k}'$):

$$\Psi = A \sum_n \sum_j e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j e^{-i\Delta\vec{k}\vec{R}_{nj}}$$

$$\Delta\vec{k} = (\vec{k}' - \vec{k})$$

Atoms in basis

Period of the lattice



Krystalografia

Fala rozproszona na jednym atomie: (j)

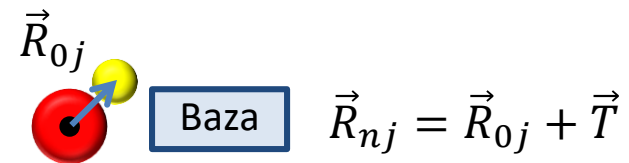
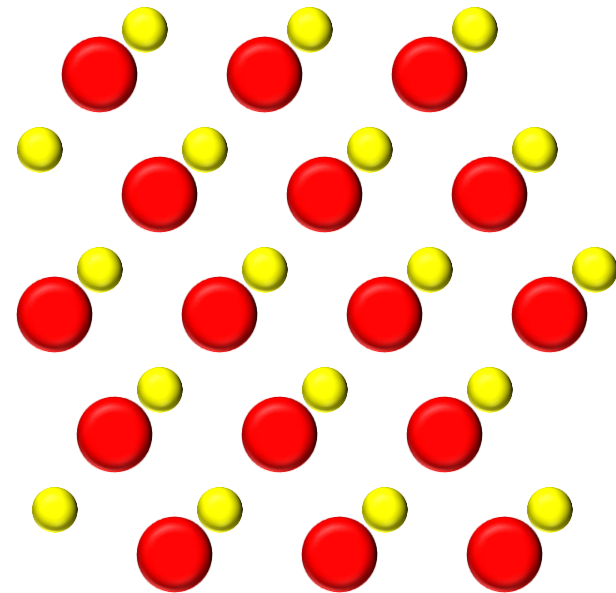
$$\Psi = A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j$$

Fala rozproszona na wszystkich atomach (w kierunku $\vec{k}'$):

$$\Psi = A \sum_n \sum_j e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j e^{-i\Delta\vec{k}\vec{R}_{nj}}$$

Atomy w bazie

$\Delta\vec{k} = (\vec{k}' - \vec{k})$



Krystalografia

Fala rozproszona na jednym atomie: (j)

$$\Psi = A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j$$

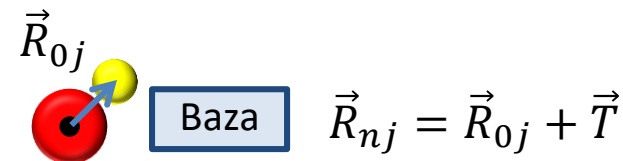
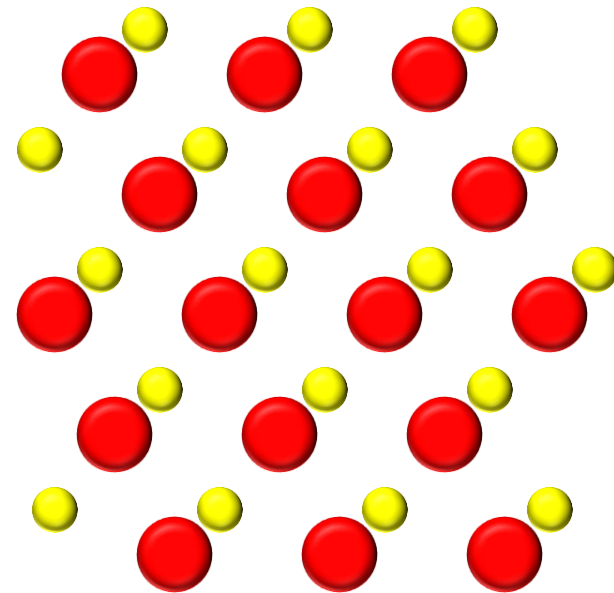
Fala rozproszona na wszystkich atomach (w kierunku $\vec{k}'$):

$$\Psi = A \sum_n \sum_j e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j e^{-i\Delta\vec{k}\vec{R}_{nj}}$$

Atomy w bazie

Period sieci

$\Delta\vec{k} = (\vec{k}' - \vec{k})$



Krystalografia

Fala rozproszona na jednym atomie: (j)

$$\Psi = A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j$$

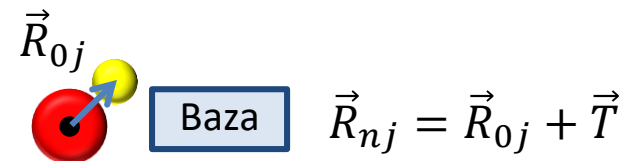
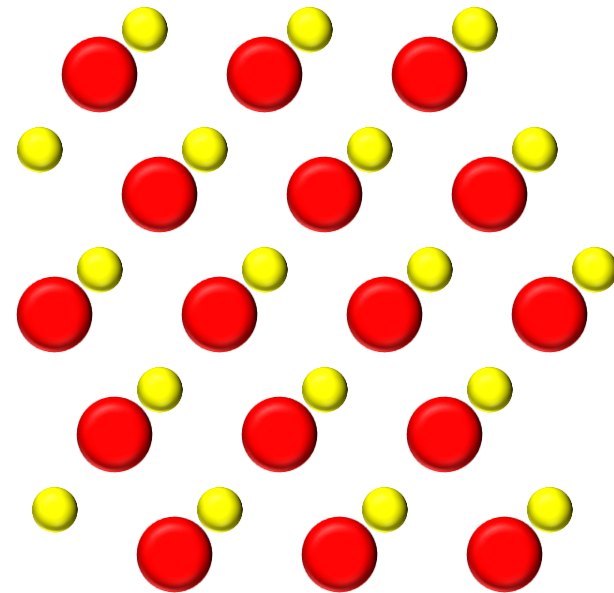
Fala rozproszona na wszystkich atomach (w kierunku $\vec{k}'$):

$$\Psi = A \sum_n \sum_j e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j}+\vec{T})}$$

Atomy w bazie

Period sieci

$\Delta\vec{k} = (\vec{k}' - \vec{k})$



Krystalografia

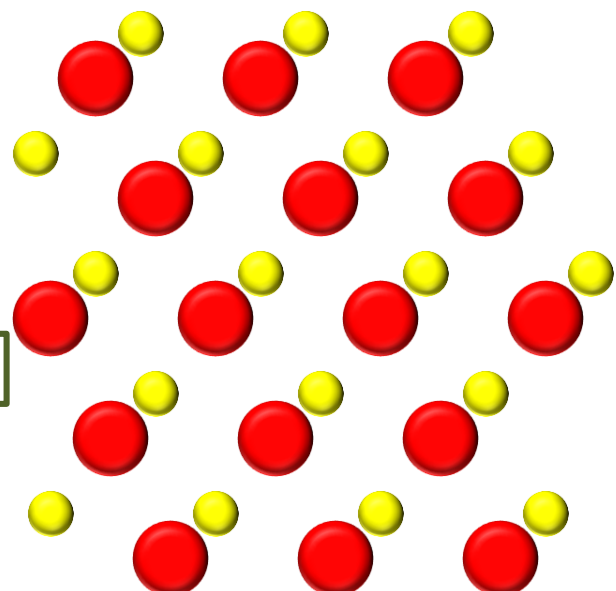
Fala rozproszona na jednym atomie: (j)

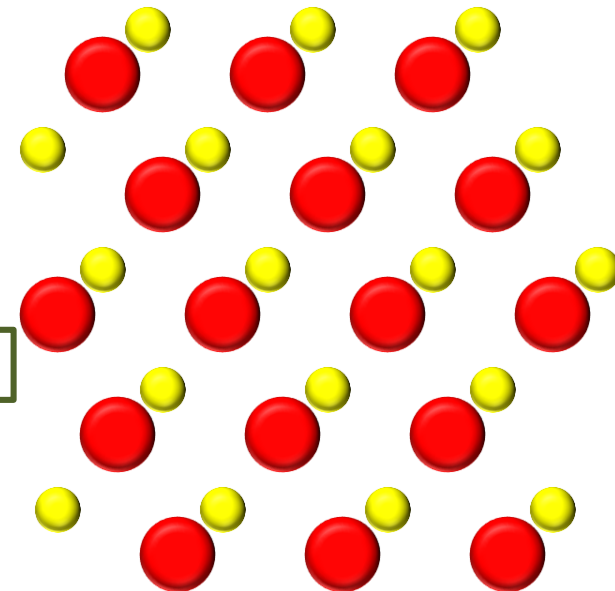
$$\Psi = A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j$$

Fala rozproszona na wszystkich atomach (w kierunku $\vec{k}'$):

$$\begin{aligned}\Psi &= A \sum_n \sum_j e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j}+\vec{T})} = \\ &= A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} \sum_n \sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j})} e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{T})} =\end{aligned}$$

$\vec{T} = n_1\vec{t}_1 + n_2\vec{t}_2 + n_3\vec{t}_3$





Krystalografia

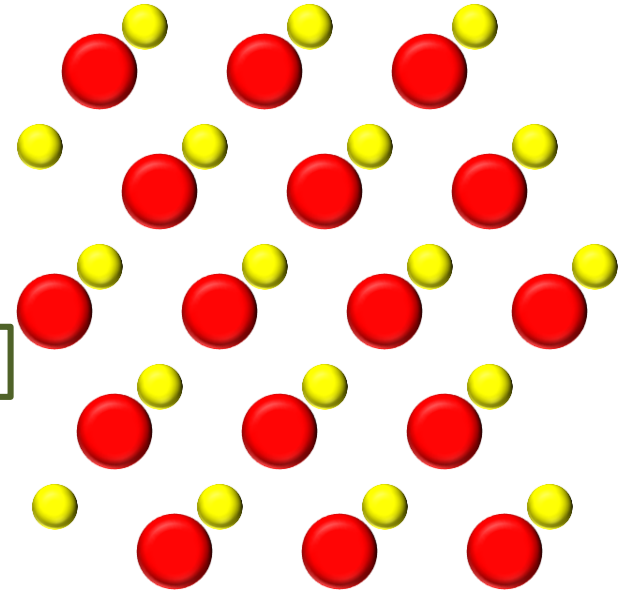
Fala rozproszona na jednym atomie: (j)

$$\Psi = A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j$$

Fala rozproszona na wszystkich atomach (w kierunku $\vec{k}'$):

$$\begin{aligned}\Psi &= A \sum_n \sum_j e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j}+\vec{T})} = \\ &= A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} \sum_n \sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j})} e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{T})} = \\ &= A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} \sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j})} \sum_n e^{-i\Delta\vec{k}(n_1\vec{t}_1+n_2\vec{t}_2+n_3\vec{t}_3)} =\end{aligned}$$

$\vec{T} = n_1\vec{t}_1 + n_2\vec{t}_2 + n_3\vec{t}_3$



Krystalografia

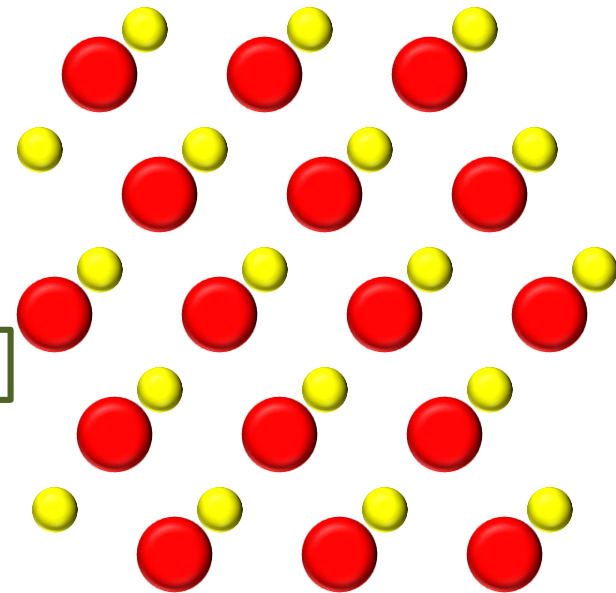
Fala rozproszona na jednym atomie: (j)

$$\Psi = A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j$$

Fala rozproszona na wszystkich atomach (w kierunku $\vec{k}'$):

$$\begin{aligned}\Psi &= A \sum_n \sum_j e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j}+\vec{T})} = \\ &= A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} \sum_n \sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j})} e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{T})} = \\ &= A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} \sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j})} \sum_n e^{-i\Delta\vec{k}(n_1\vec{t}_1+n_2\vec{t}_2+n_3\vec{t}_3)} = \\ &= A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} \left[\sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j})} \right] \left[\sum_{n_1} e^{-i\Delta\vec{k}(n_1\vec{t}_1)} \right] \left[\sum_{n_2} e^{-i\Delta\vec{k}(n_2\vec{t}_2)} \right] \left[\sum_{n_3} e^{-i\Delta\vec{k}(n_3\vec{t}_3)} \right]\end{aligned}$$

$\vec{T} = n_1\vec{t}_1 + n_2\vec{t}_2 + n_3\vec{t}_3$



Krystalografia

Fala rozproszona na jednym atomie: (j)

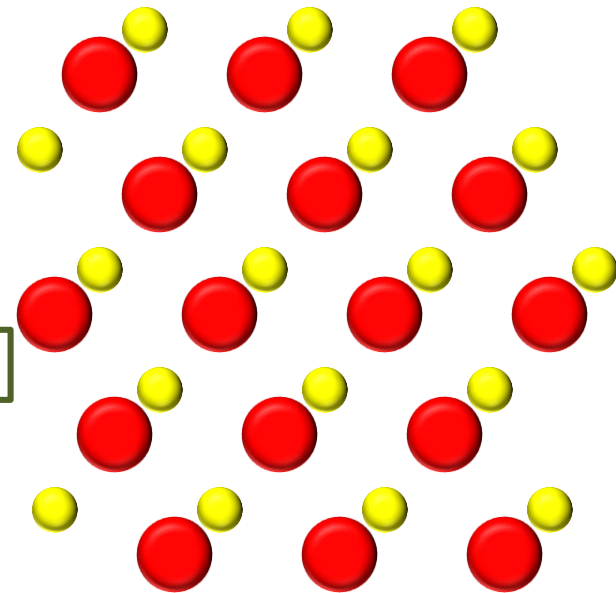
$$\Psi = A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j$$

Fala rozproszona na wszystkich atomach (w kierunku $\vec{k}'$):

$$\begin{aligned} \Psi &= A \sum_n \sum_j e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j}+\vec{T})} = \\ &= A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} \sum_n \sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j})} e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{T})} = \\ &= A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} \sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j})} \sum_n e^{-i\Delta\vec{k}(n_1\vec{t}_1+n_2\vec{t}_2+n_3\vec{t}_3)} = \\ &= A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} \left[\sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j})} \right] \left[\sum_{n_1} e^{-i\Delta\vec{k}(n_1\vec{t}_1)} \right] \left[\sum_{n_2} e^{-i\Delta\vec{k}(n_2\vec{t}_2)} \right] \left[\sum_{n_3} e^{-i\Delta\vec{k}(n_3\vec{t}_3)} \right] \end{aligned}$$

$\vec{T} = n_1\vec{t}_1 + n_2\vec{t}_2 + n_3\vec{t}_3$

Czynniki struktury S_G $S_G = \int_{cell} dV \rho(\vec{R}) e^{-i\Delta\vec{k}\vec{R}}$



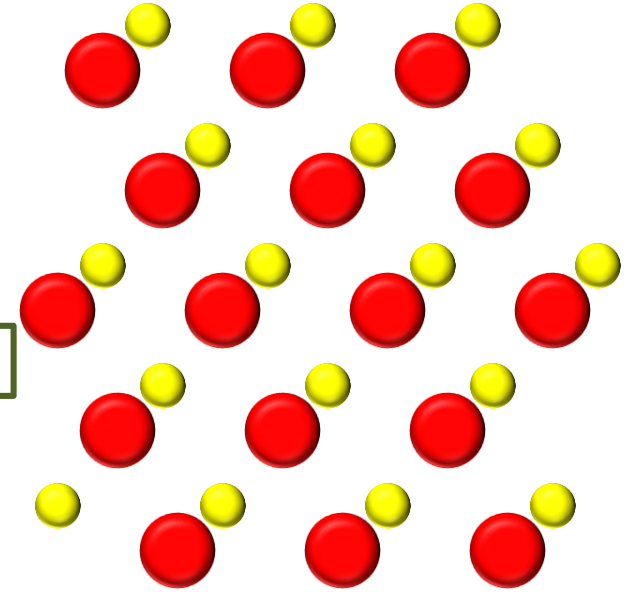
Krystalografia

Maksymalna intensywność

$$\left[\sum_{n_1} e^{-i\Delta\vec{k}(n_1\vec{t}_1)} \right] \left[\sum_{n_2} e^{-i\Delta\vec{k}(n_2\vec{t}_2)} \right] \left[\sum_{n_3} e^{-i\Delta\vec{k}(n_3\vec{t}_3)} \right]$$

Kiedy?

$$\vec{T} = n_1\vec{t}_1 + n_2\vec{t}_2 + n_3\vec{t}_3$$



Krystalografia

Maksymalna intensywność

$$\left[\sum_{n_1} e^{-i\Delta\vec{k}(n_1\vec{t}_1)} \right] \left[\sum_{n_2} e^{-i\Delta\vec{k}(n_2\vec{t}_2)} \right] \left[\sum_{n_3} e^{-i\Delta\vec{k}(n_3\vec{t}_3)} \right]$$

Kiedy $e^{-i\Delta\vec{k}(n_1\vec{t}_1)} = 1$

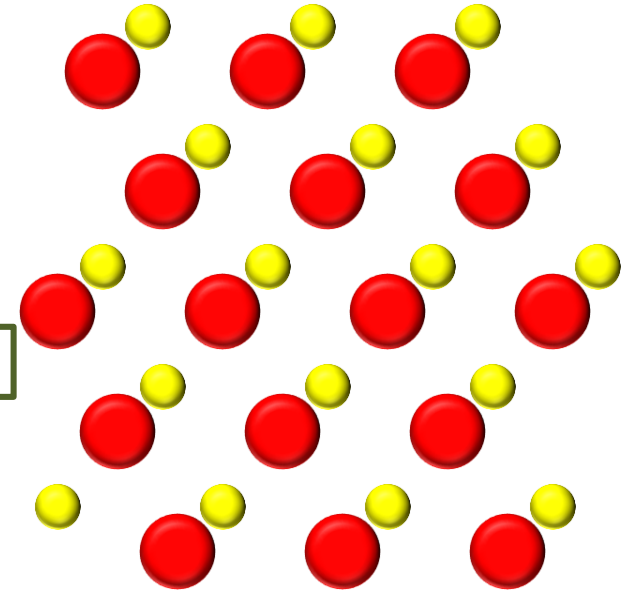
$$\Delta\vec{k}\vec{t}_1 = 2\pi h$$

$$\Delta\vec{k}\vec{t}_2 = 2\pi k$$

$$\Delta\vec{k}\vec{t}_3 = 2\pi l$$

Warunki Lauego

$$\vec{T} = n_1\vec{t}_1 + n_2\vec{t}_2 + n_3\vec{t}_3$$



Krystalografia

Maksymalna intensywność

$$\left[\sum_{n_1} e^{-i\Delta\vec{k}(n_1\vec{t}_1)} \right] \left[\sum_{n_2} e^{-i\Delta\vec{k}(n_2\vec{t}_2)} \right] \left[\sum_{n_3} e^{-i\Delta\vec{k}(n_3\vec{t}_3)} \right]$$

Kiedy $e^{-i\Delta\vec{k}(n_1\vec{t}_1)} = 1$

$$\begin{aligned} \Delta\vec{k}\vec{t}_1 &= 2\pi h \\ \Delta\vec{k}\vec{t}_2 &= 2\pi k \\ \Delta\vec{k}\vec{t}_3 &= 2\pi l \end{aligned}$$

Warunki Lauego

$$\vec{T} = n_1\vec{t}_1 + n_2\vec{t}_2 + n_3\vec{t}_3$$

$$\Delta\vec{k} \equiv G = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

$$\vec{g}_i\vec{t}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

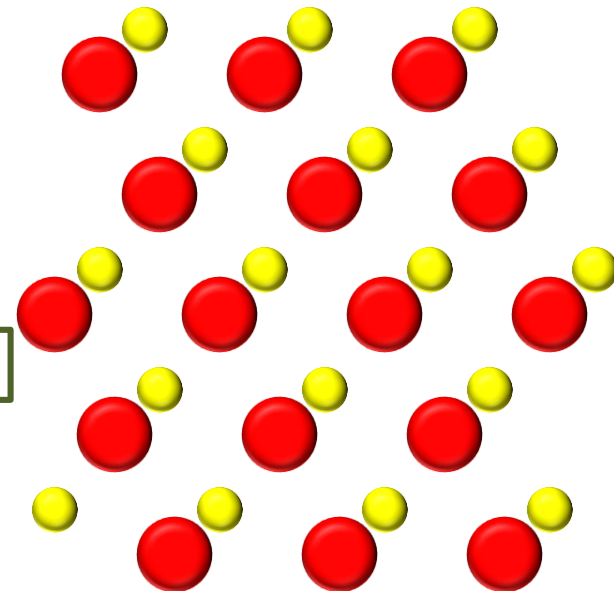
$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{a_i}$$

$$\vec{g}_i = 2\pi \frac{\vec{t}_j \times \vec{t}_k}{\vec{t}_i(\vec{t}_j \times \vec{t}_k)}$$

Sieć odwrotna

Structure factor S_G

$$S_G = \int_{cell} dV \rho(\vec{R}) e^{-i\vec{G}\vec{R}}$$



Krystalografia

$$\begin{aligned}\Delta\vec{k}\vec{t}_1 &= 2\pi h \\ \Delta\vec{k}\vec{t}_2 &= 2\pi k \\ \Delta\vec{k}\vec{t}_3 &= 2\pi l\end{aligned}$$

Warunki Lauego

$$\Delta\vec{k} \equiv G = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

sieć odwrotna

$$\vec{g}_i\vec{t}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

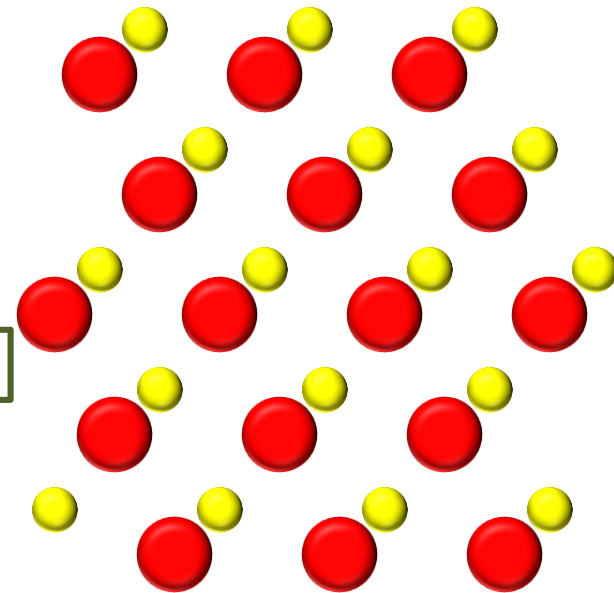
$$\vec{T} = n_1\vec{t}_1 + n_2\vec{t}_2 + n_3\vec{t}_3$$

Czynnik struktury S_G

$$S_G = \int_{cell} dV \rho(\vec{R}) e^{-i\vec{G}\vec{R}}$$

Geometryczny czynnik strukturalny S_G

$$\left[\sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}(\vec{R}_{0j})} \right] = \left[\sum_j f_j e^{-i\vec{G}(\vec{R}_{0j})} \right] = \sum_j f_j e^{-i2\pi(n_1h+n_2k+n_3l)}$$

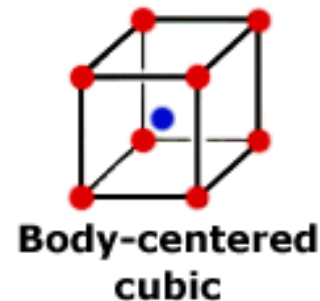


Krystalografia

Geometryczny czynnik strukturalny

$$F(h, k, l) = \sum_j f_j e^{-i2\pi(n_1h+n_2k+n_3l)}$$

Przykład: Dla kryształu Li i kryształu TlBr (sieci typu bcc – regularna przestrzennie centrowana) znaleźć możliwe wartości geometrycznego czynnika strukturalnego.



$$r_1 = (0,0,0) \quad r_2 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$F_{Li}(h, k, l) = \sum_j f_j e^{-i2\pi(n_1h+n_2k+n_3l)} = f_{Li}e^{-i2\pi(0+0+0)} + f_{Li}e^{-i2\pi\left(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}l\right)}$$

$$F_{Li}(h, k, l) = f_{Li}(1 + e^{-i\pi(h+k+l)})$$

odd
even

$$F_{TlBr}(h, k, l) = \sum_j f_j e^{-i2\pi(n_1h+n_2k+n_3l)} = f_{Tl}e^{-i2\pi(0+0+0)} + f_{Br}e^{-i2\pi\left(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}l\right)}$$

$$F_{TlBr}(h, k, l) = f_{Tl} + f_{Br}e^{-i\pi(h+k+l)}$$

odd
even

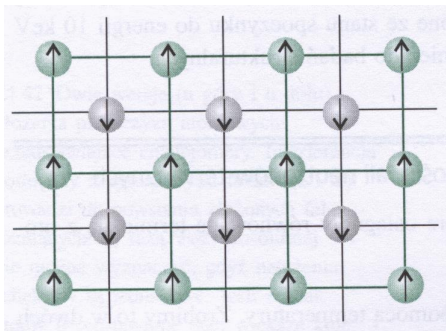
Krystalografia

Neutrons

Neutrony – generowane w reaktorze są spowalniane w wyniku zderzeń z moderatorem (grafitem) do $V = 4 \text{ km/s}$, co odpowiada energii $E = 0.08 \text{ eV}$ a energia ta odpowiada $\lambda = 1 \text{ \AA}$

Neutrony oddziałują z :

jądrami (można wyznaczyć gęstość prawdopodobieństwa znalezienia jąder), wyznaczyć krzywe dyspersyjne fononów momentami magnetycznymi jąder.

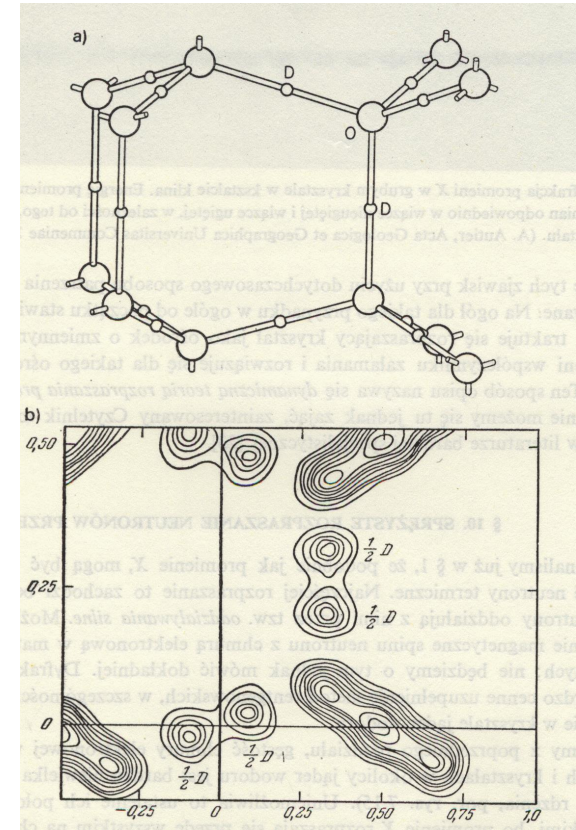


$$E = \frac{\eta^2}{2M\lambda^2}$$

$$M = 1,675 \times 10^{-24} \text{ g}$$

$$\lambda(\text{\AA}) = \frac{0,28}{\sqrt{E(\text{eV})}}$$

$$1 \text{ \AA} \text{ for } E = 0,08 \text{ eV}$$



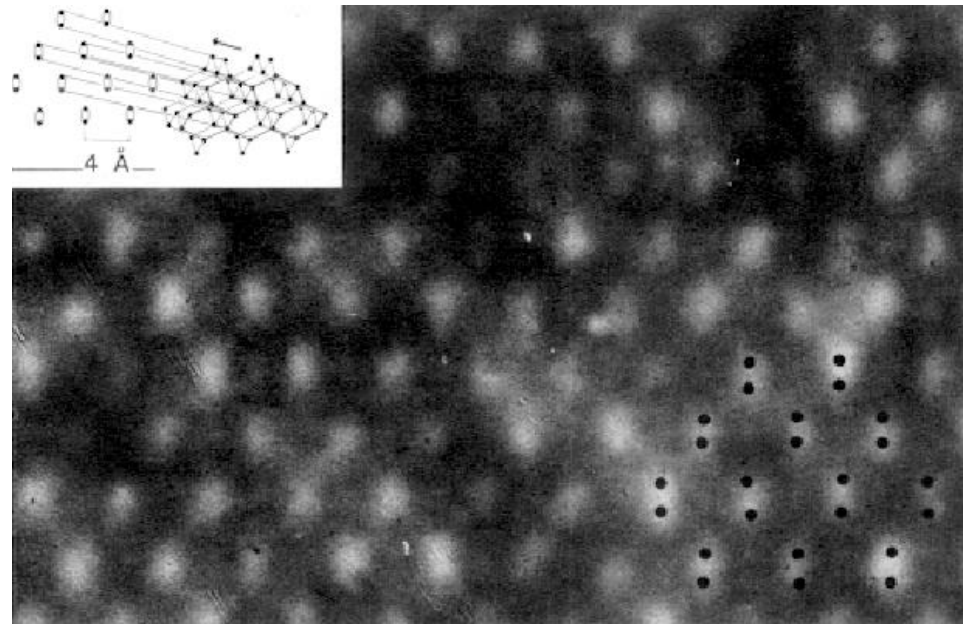
J. Ginter

Krystalografia

Elektrony

Elektrony mają ładunek elektryczny i oddziałują silnie z materią, wnikały bardzo płytko.

Zjawisko ugięcia elektronów pozwala na badania strukturalne powierzchni oraz bardzo cienkich warstw

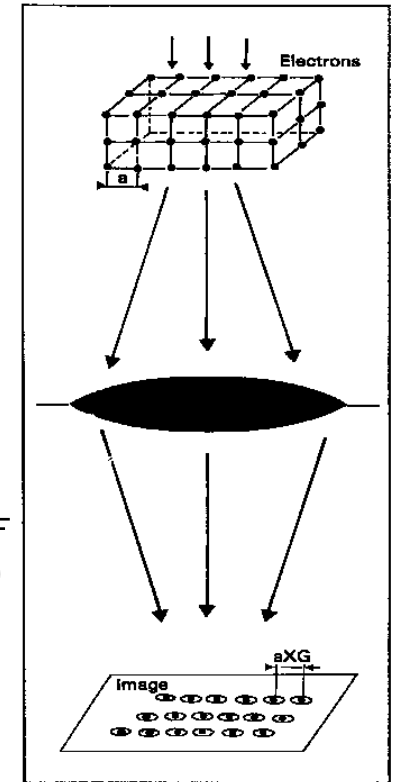


$$E = \frac{\eta^2}{2M\lambda^2}$$

$M = 0,911 \times 10^{-27} \text{ g}$

$$\lambda(\text{\AA}) = \frac{12}{\sqrt{E(\text{eV})}}$$

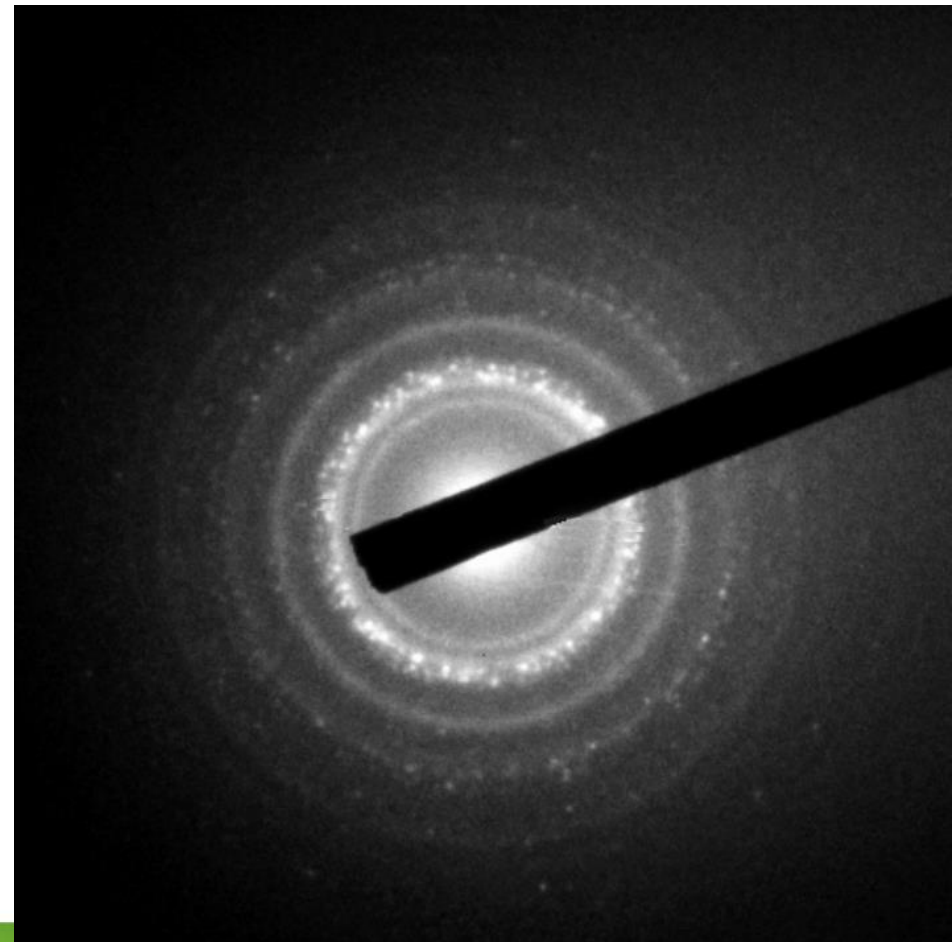
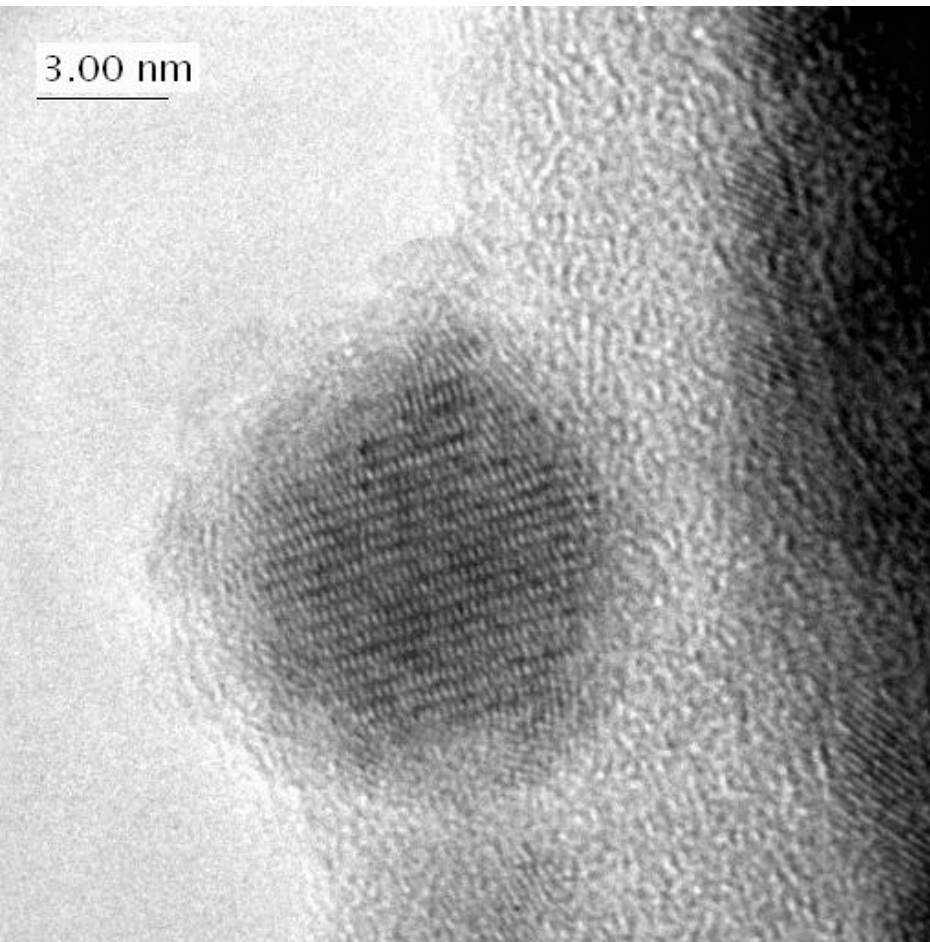
1 Å for $E = 144 \text{ eV}$



T. Stacewicz & A. Witowski

Krystalografia

Elektrony

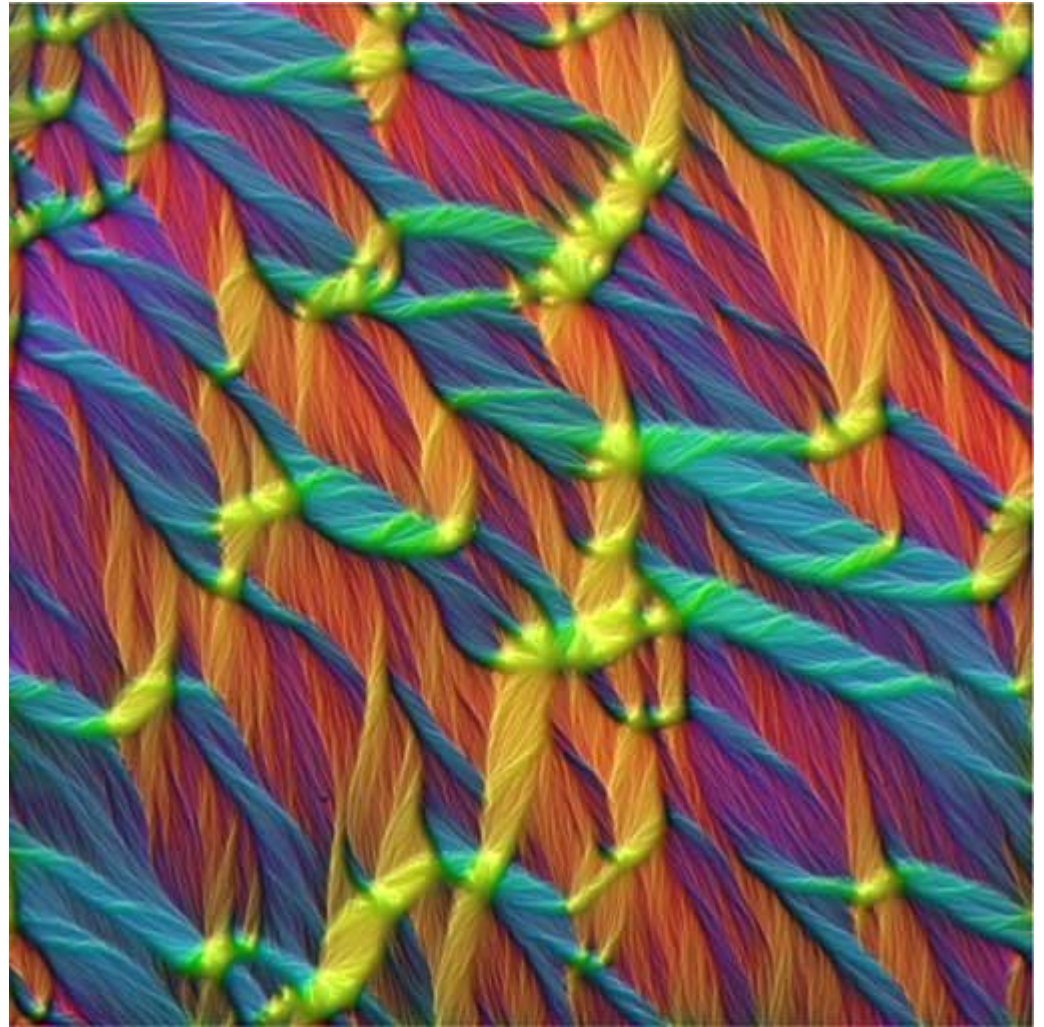


Crystallography

Electrons

Rafał Dunin-Borkowski

Magnetic domains in a thin cobalt film The colors in the image show the different directions of the magnetic field in a layer of polycrystalline cobalt that has a thickness of only 20 nm. The field of view is approximately 200 microns



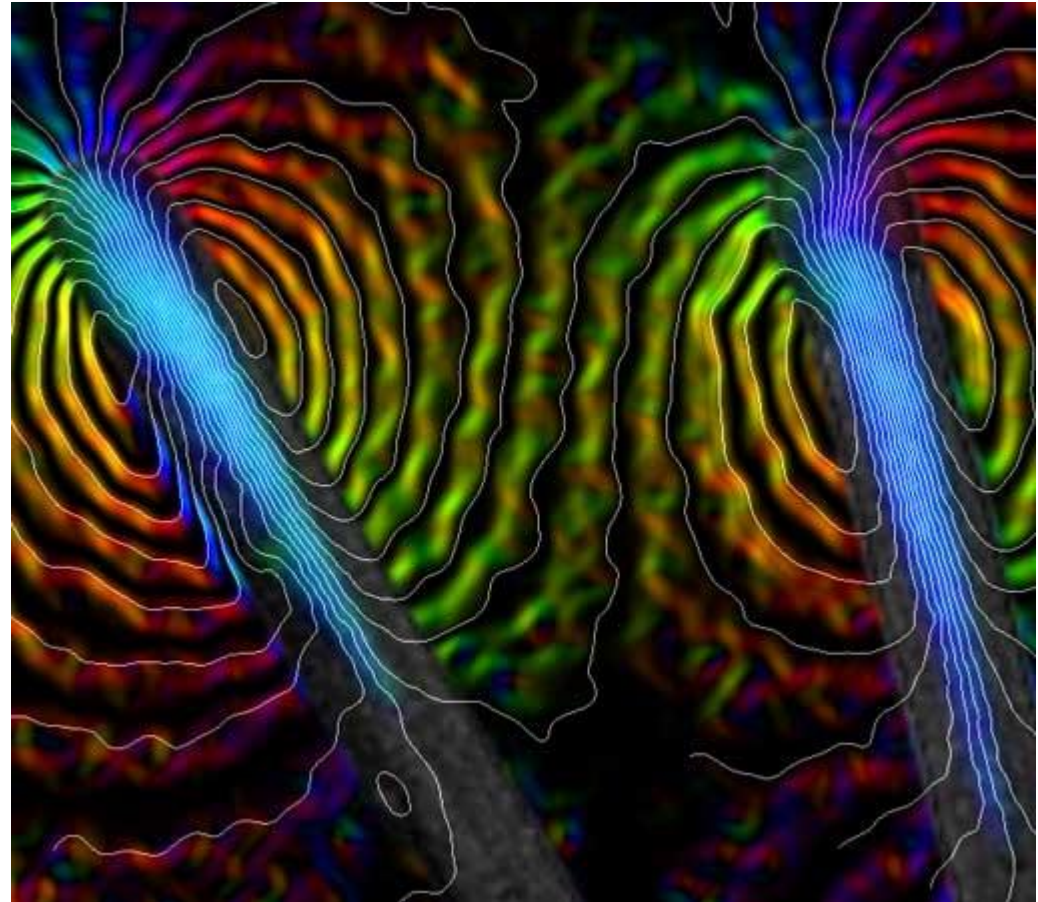
<http://www.rafaldb.com/pictures-micrographs/index.html>

Crystallography

Electrons

Rafał Dunin-Borkowski

Magnetic nanotubes. The nanotubes were fabricated in the University of Cambridge Engineering department by Yasuhiko Hayashi, who grew them using a Cobalt-Palladium catalyst. This alloy remains present in the ends of the nanotubes, and is magnetic. The nanotubes you see here have a 70-100 nm diameter.



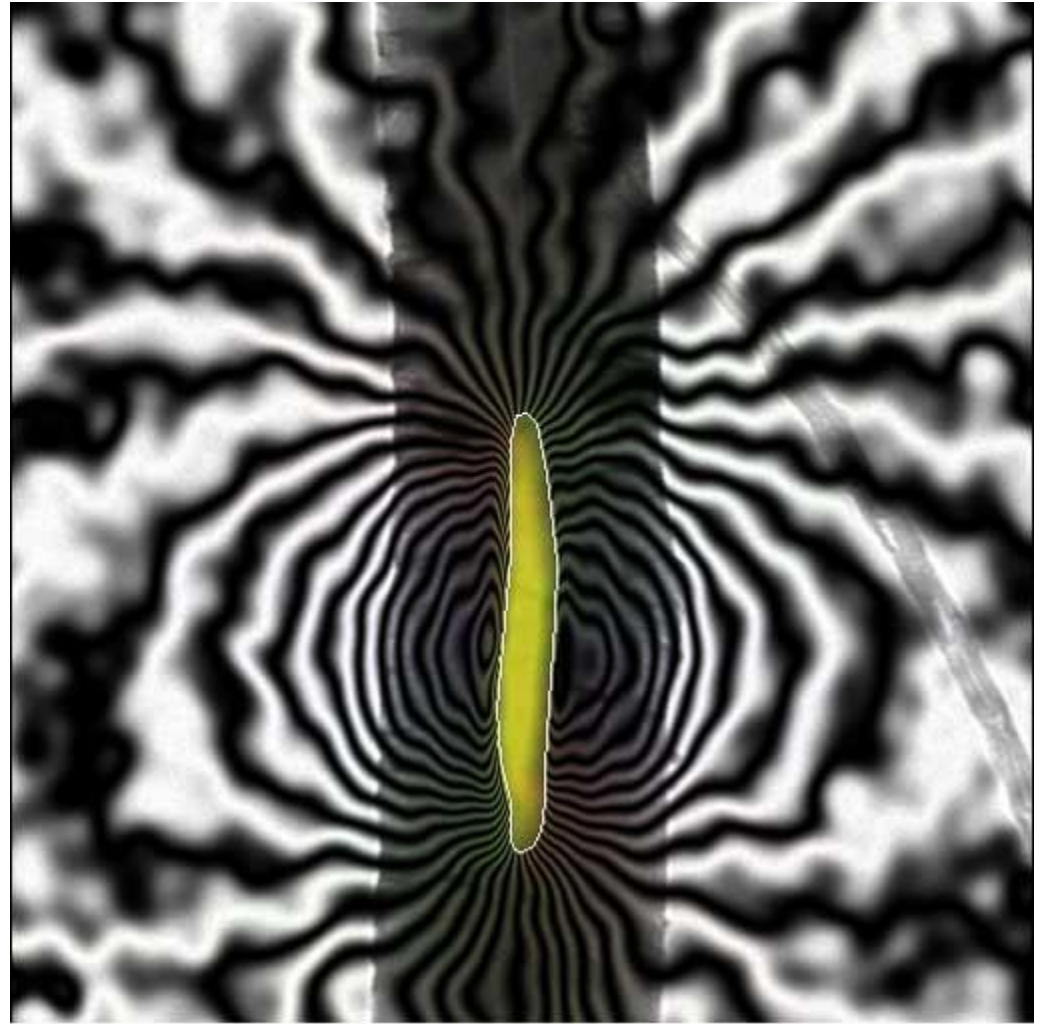
<http://www.rafaldb.com/pictures-micrographs/index.html>

Crystallography

Electrons

Rafał Dunin-Borkowski

This image won First Prize in the "Science Close-Up" category in the Daily Telegraph Visions of Science competition. The image shows a **multi-walled carbon nanotube**, approximately 190 nm in diameter, containing a 35-nm-diameter **iron crystal** encapsulated inside it. Electron holography has been used to obtain a map of the magnetic field surrounding the iron particle, at a spatial resolution of approximately 5 nm.



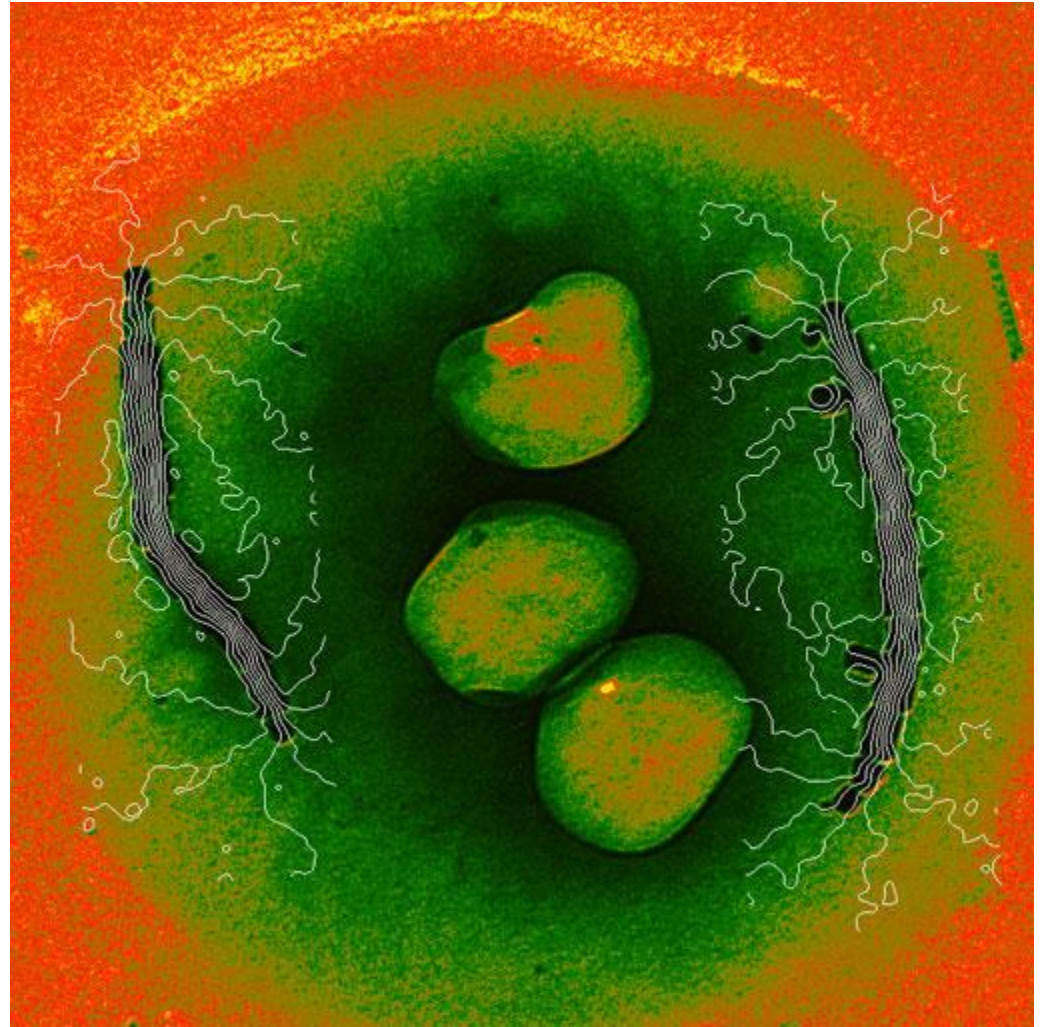
<http://www.rafaldb.com/pictures-micrographs/index.html>

Crystallography

Electrons

Rafał Dunin-Borkowski

The image shows the magnetic field lines in a single **magnetosome chains** in a **bacterial cell**. The fine white lines are the magnetic field lines in the cell, which were measured using off-axis electron holography.



<http://www.rafaldb.com/pictures-micrographs/index.html>