

# Wstęp do Optyki i Fizyki Materii Skondensowanej

1100-3003



## Ciało stałe 2

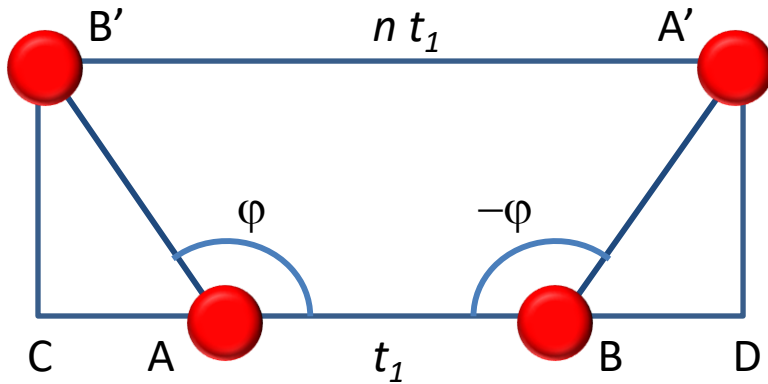
Wydział Fizyki UW

Jacek.Szczytko@fuw.edu.pl

Piotr.Fita@fuw.edu.pl

# Struktura krystaliczna

## Crystals



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

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

$n$	$\cos \varphi$	$\varphi$	Obrót
-1	1	$0^\circ$	$\varepsilon$
0	1/2	$60^\circ$	$C_6$
+1	0	$90^\circ$	$C_4$
+2	-1/2	$120^\circ$	$C_3$
+3	-1	$180^\circ$	$C_2$

# Struktura krystaliczna

## Sieci Bravais

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

Tworzą one 7 układów krystalograficznych

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

$$a \neq b \neq c$$

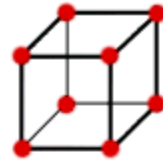
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Romboedryczna

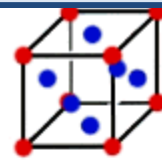
$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ \neq 90^\circ$$

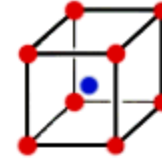
Regularna



Simple cubic



Face-centered cubic

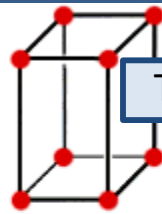


Body-centered cubic

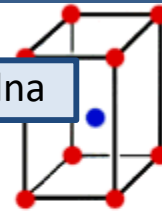
$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

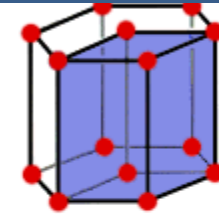
Tetragonalna



Simple tetragonal



Body-centered tetragonal



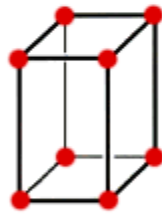
Heksagonalna

$$a = b \neq c$$

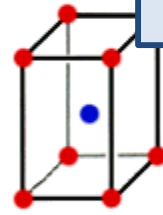
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

$$\gamma = 120^\circ$$

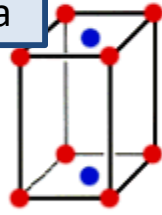
Rombowa



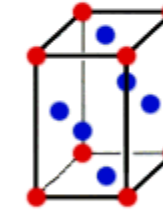
Simple orthorhombic



Body-centered orthorhombic

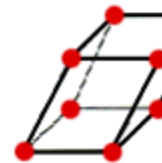


Base-centered orthorhombic

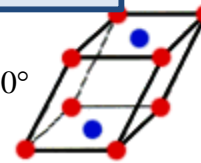


Face-centered orthorhombic

Jednoskośna



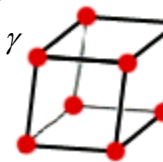
Simple Monoclinic



Base-centered monoclinic

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma$$



Triclinic

Rhombohedral

Trójskośna



# Struktura krystaliczna

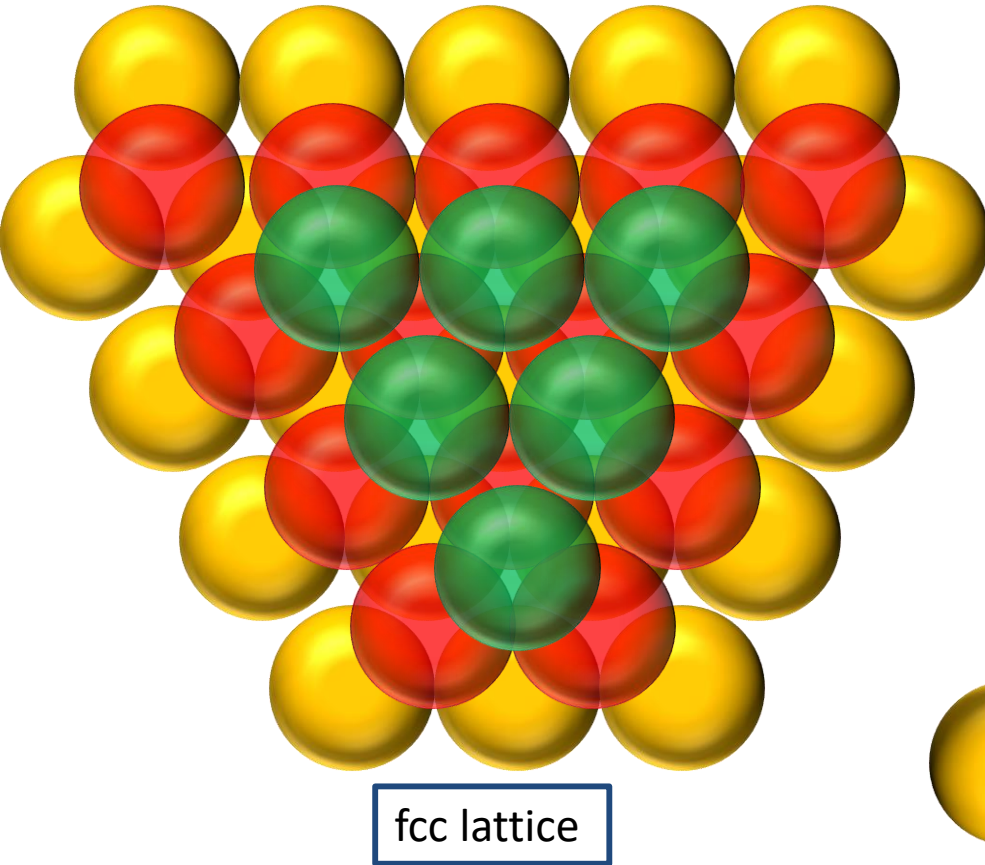
## Sieć Bravais (Bravais lattice)



# Struktura krystaliczna

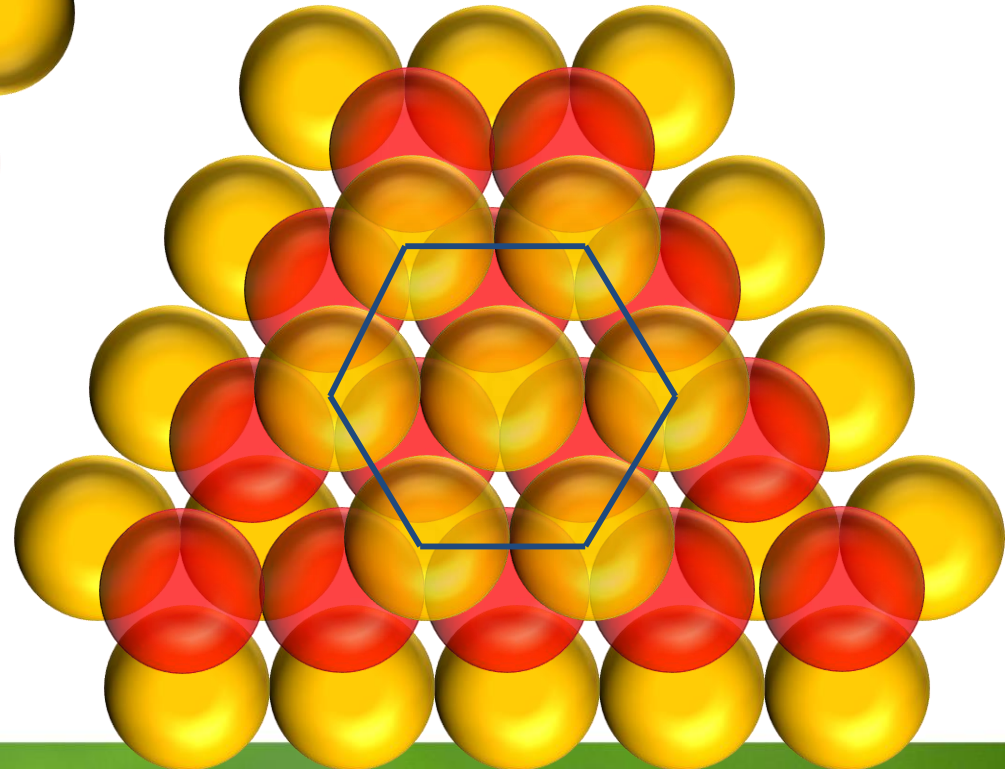
## Bravais lattice

**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

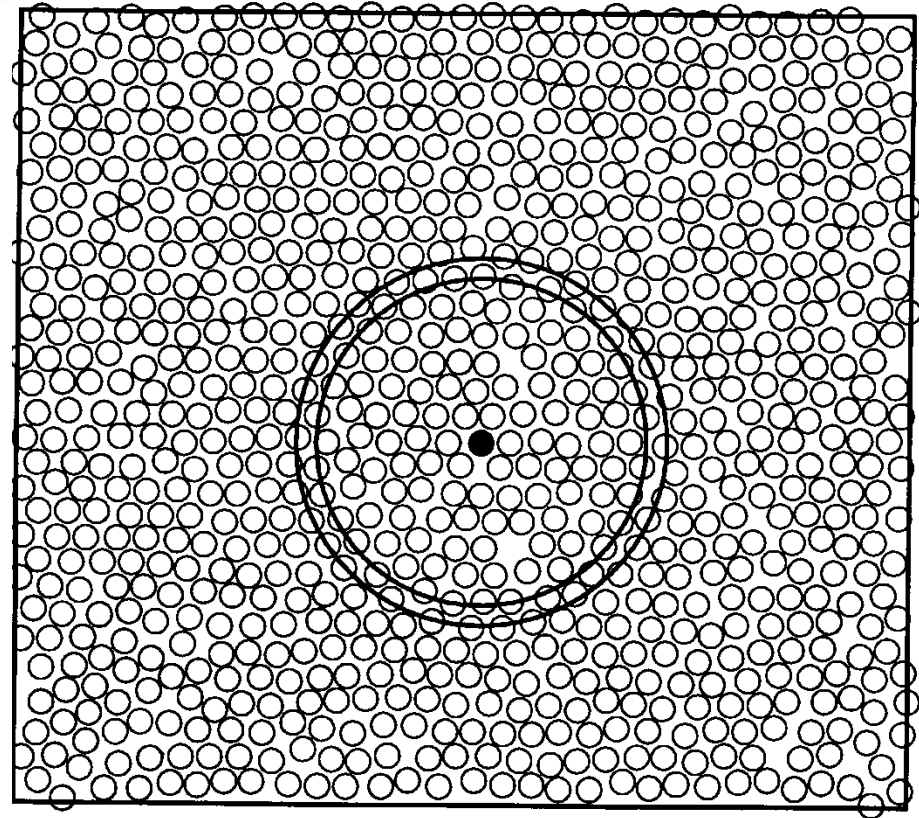


Fig. 2.3.1. Typical atomic configuration in a hard-sphere fluid. The pair distribution function can be obtained by choosing an arbitrary particle as the origin and counting the number of atoms whose centers lie within a distance  $dr$  of a circle of radius  $r$  of the origin.

# Funkcja korelacji

Funkcja korelacji gęstości (*correlation function of the density*) – można spotkać wiele definicji. Najważniejsza 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)

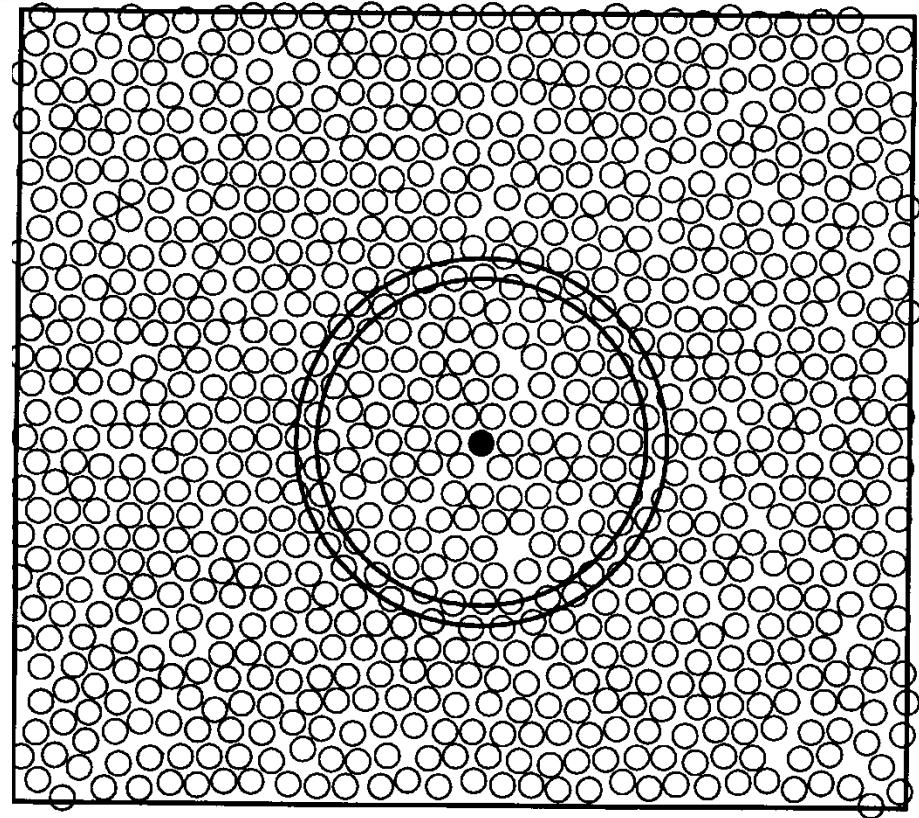
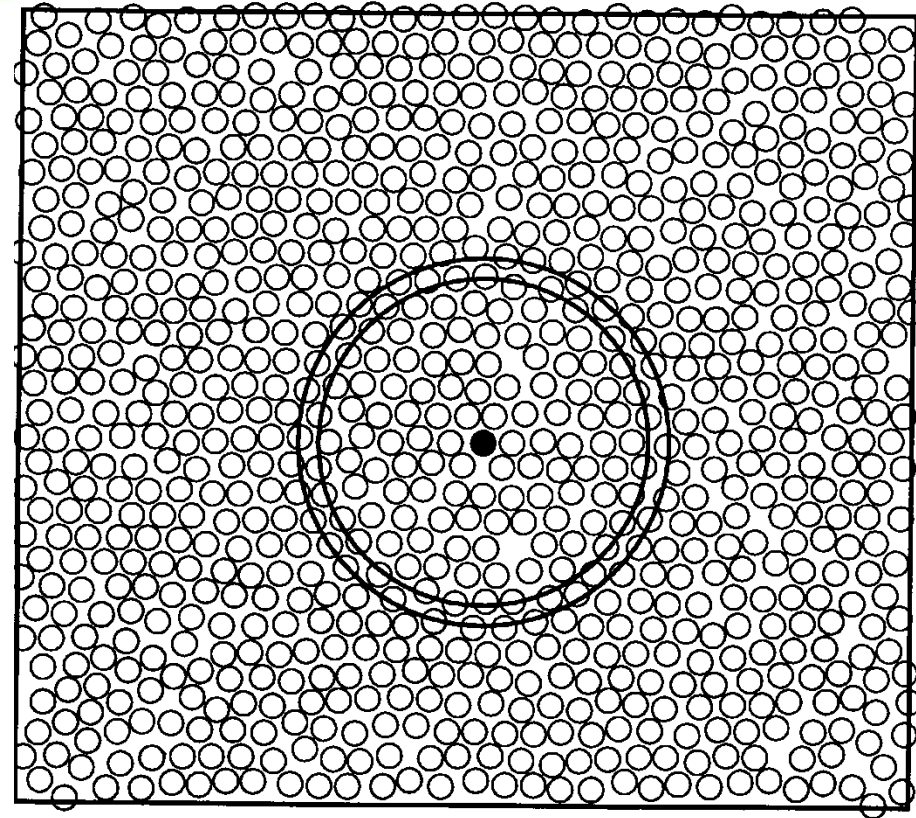


Fig. 2.3.1. Typical atomic configuration in a hard-sphere fluid. The pair distribution function can be obtained by choosing an arbitrary particle as the origin and counting the number of atoms whose centers lie within a distance  $dr$  of a circle of radius  $r$  of the origin.

# Funkcja korelacji

- Należy wybrać zadaną konfigurację cząsteczek (rys. obok).
- Wybieramy środek osi  $(0,0,0)$
- Całka  $\langle n \rangle g(\mathbf{x})$  po elemencie objętości  $d^n x$  w odległości  $x$  od środka układu współrzędnych jest ilością cząsteczek w tym elemencie objętości.
- Stąd  $g(\mathbf{x})$  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  $g(\mathbf{x})$

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



Dla układów nieskorelowanych  $g(\mathbf{x})$  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

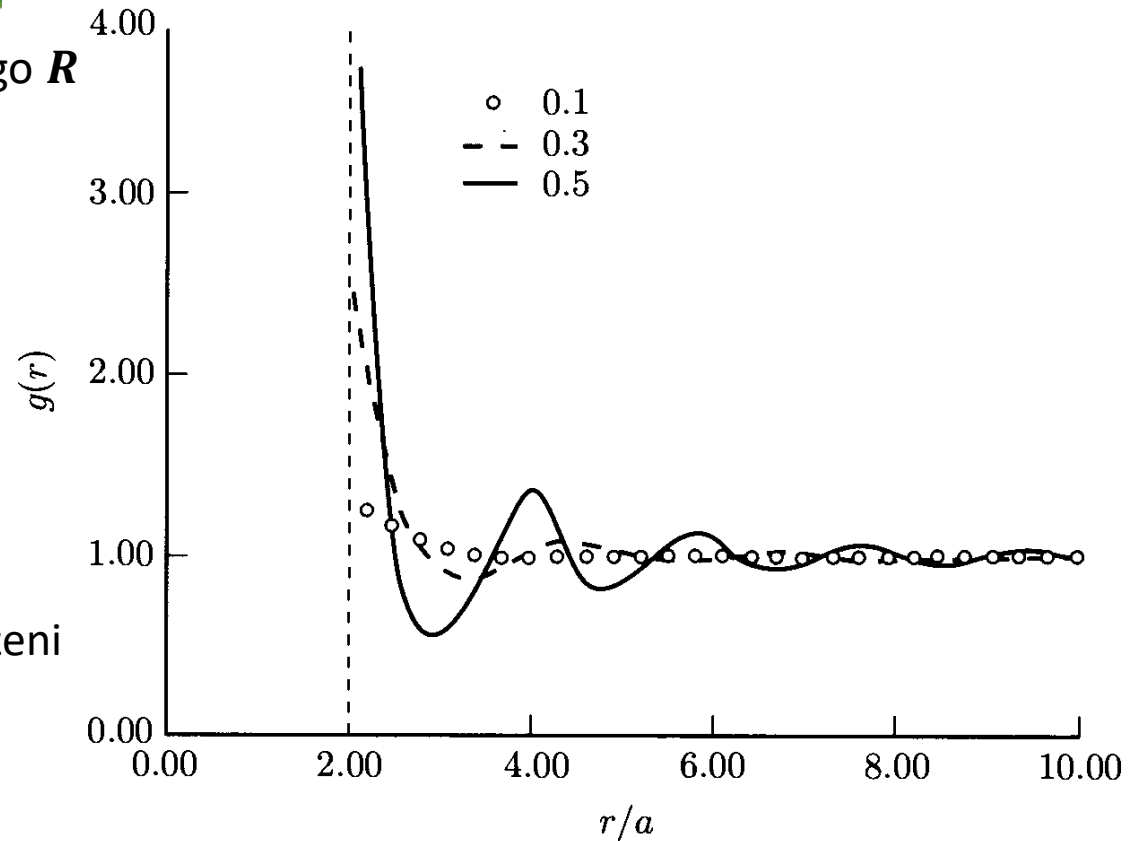


Fig. 2.4.1. The radial distribution function for a hard-sphere fluid for three different volume fractions (i.e., ratio of volume occupied by hard spheres to total volume). These curves were generated numerically using the Percus-Yevick equation.

# 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:

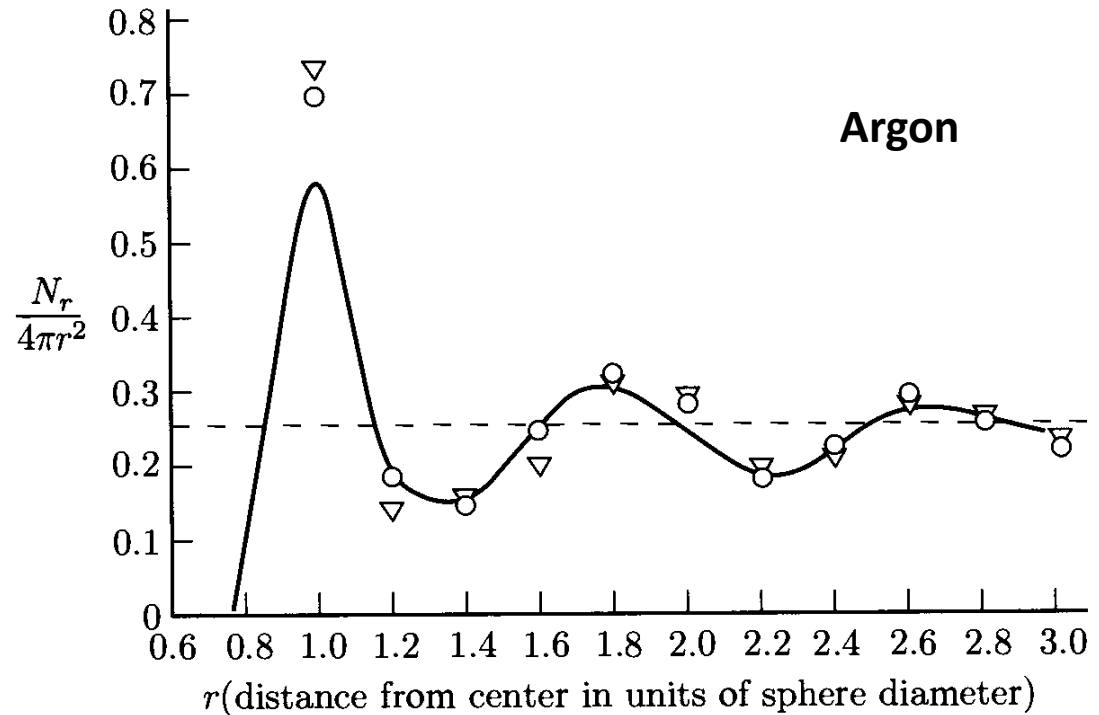
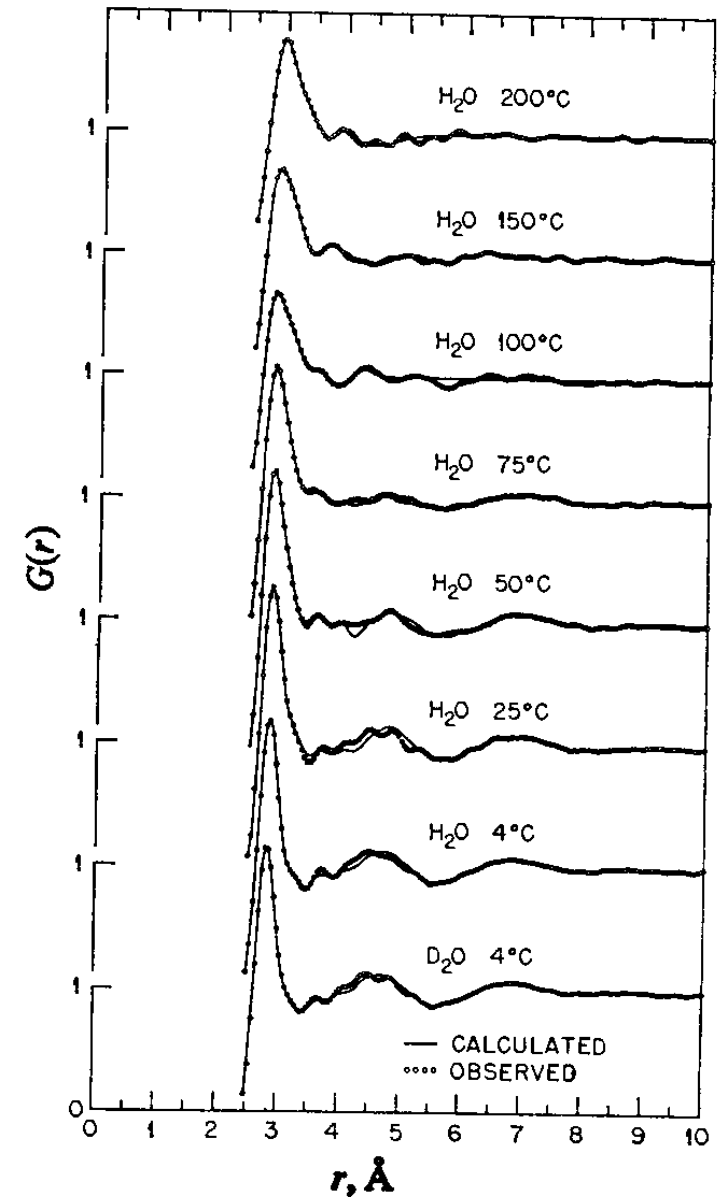
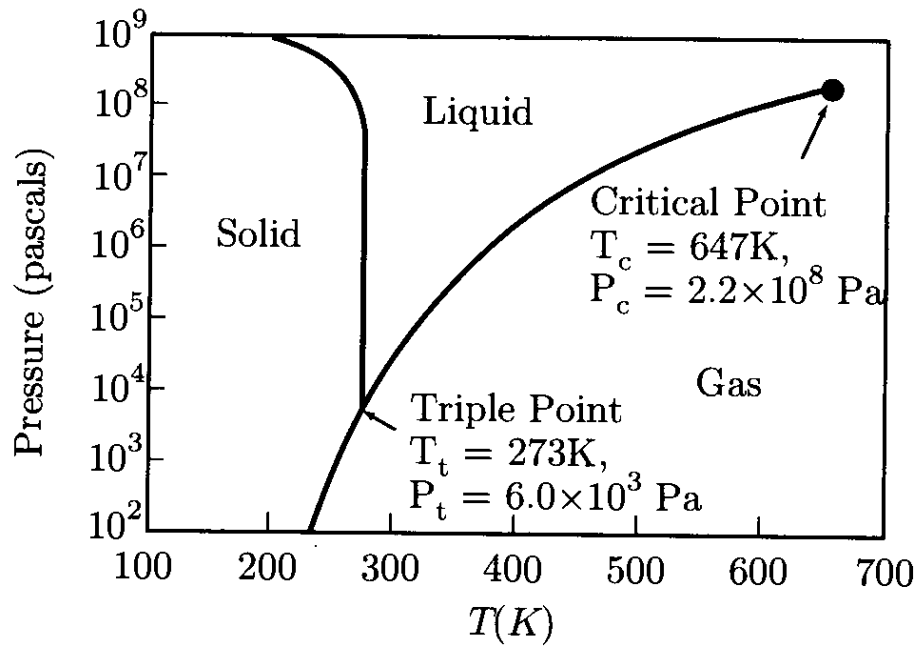


Fig. 2.4.2. The radial distribution function for the Bernal model and the experimentally observed radial distribution function for liquid argon. [J.M. Ziman, *Models of Disorder* (Cambridge University Press, 1979), p. 79.]

# Materia skondensowana

Woda



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



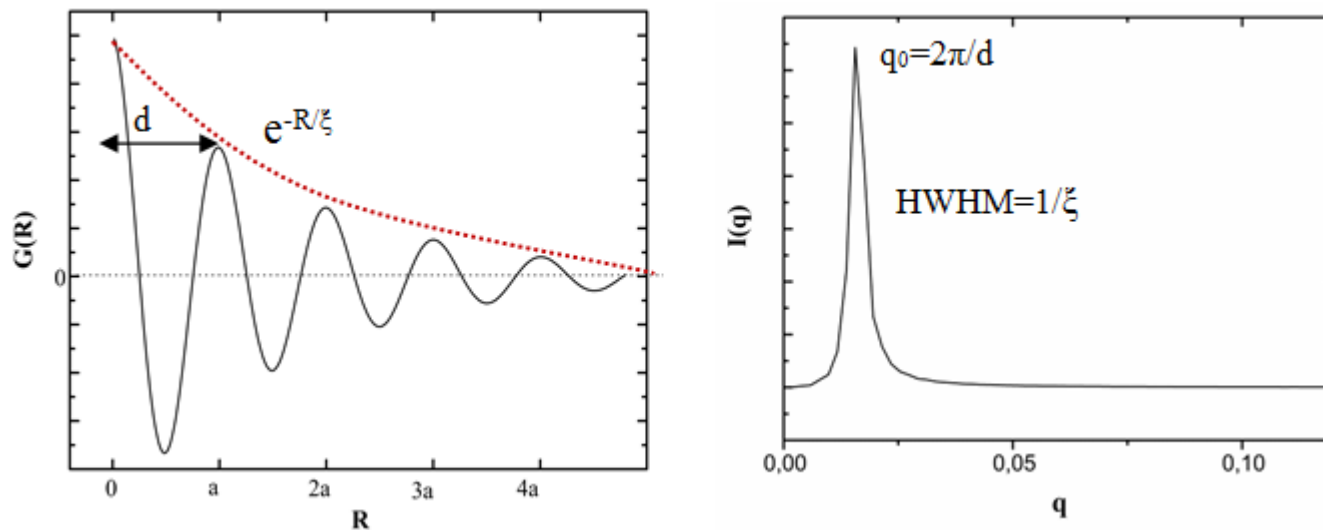
# Materia skondensowana

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:

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

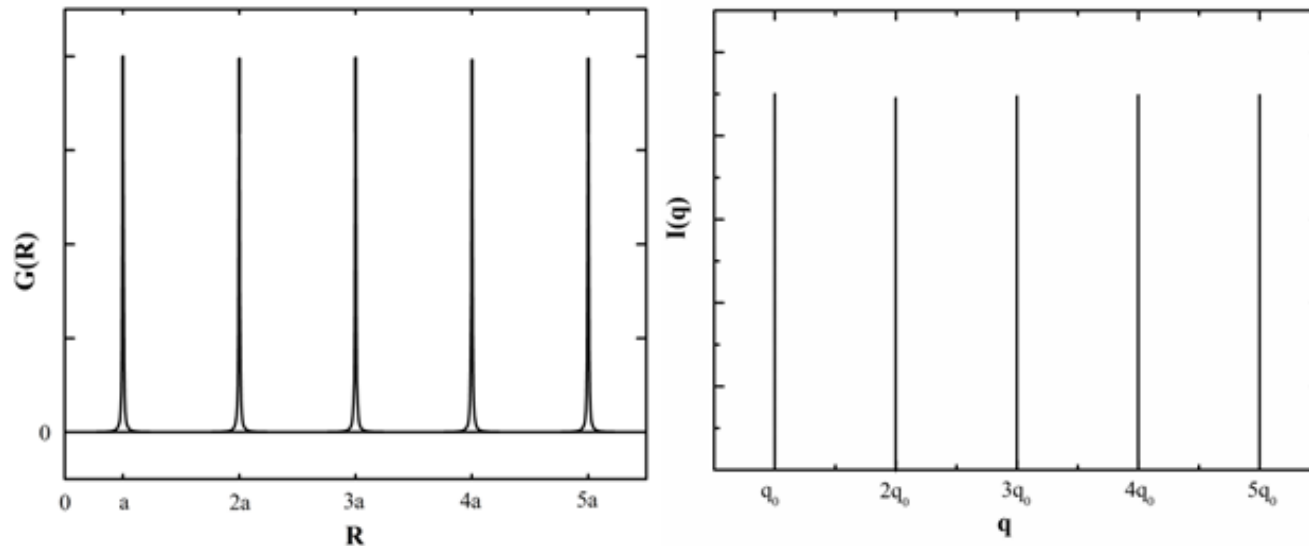


# Materia skondensowana

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

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

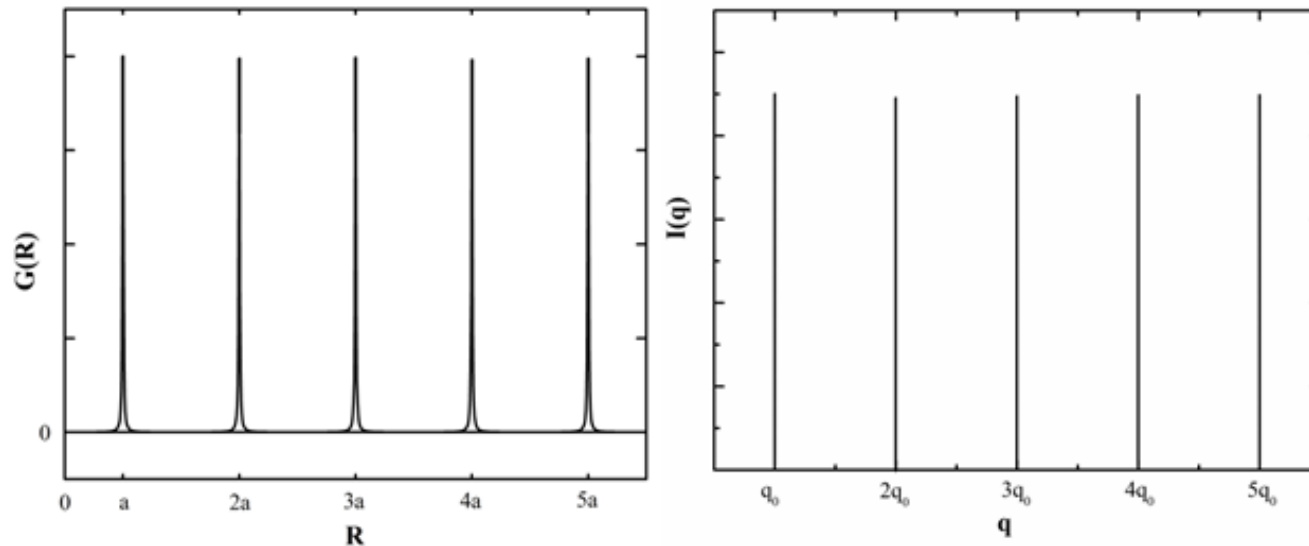
$G(R)$  jest funkcją o stałej amplitudzie ( $z_i(R)$ )



# 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:

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

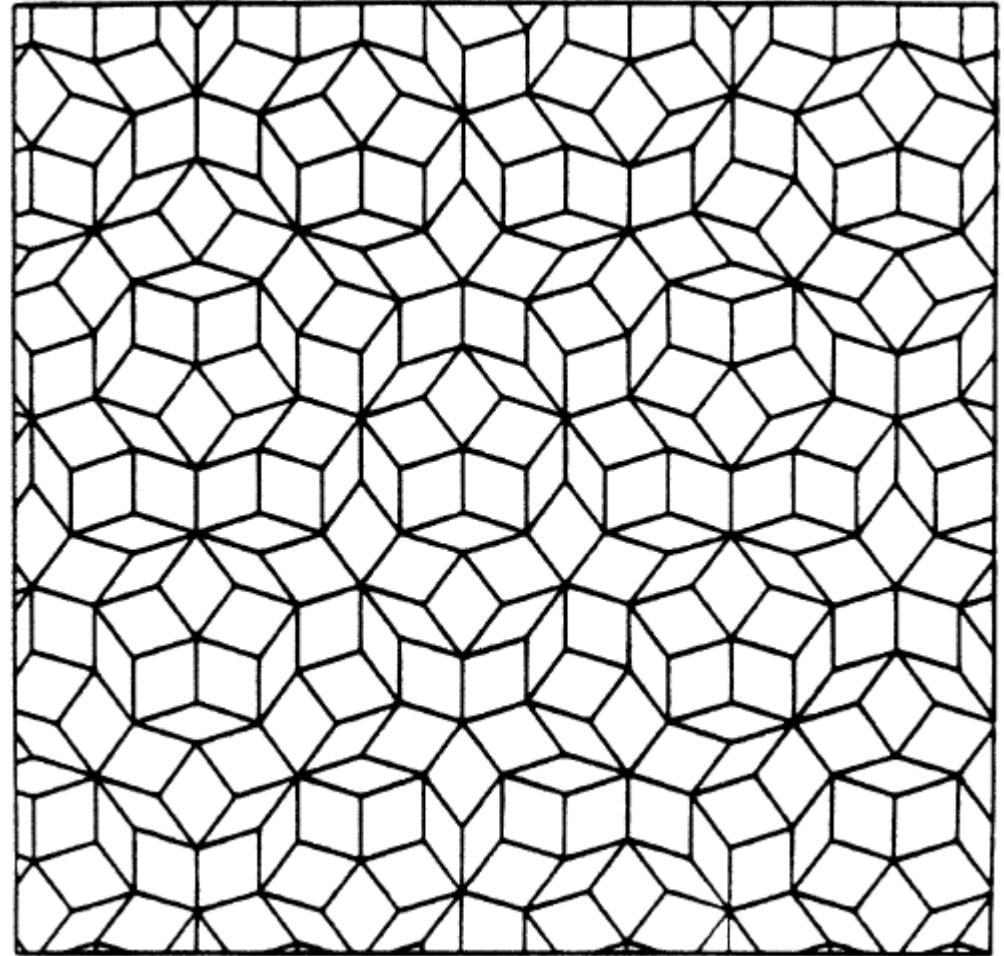


Szerokość sygnału Lorentza jest zależna od szybkości tłumienia  $x$ . Im mniejszy zakres korelacji  $x$ , tym szersze są uzyskiwane refleksy dyfrakcyjne. Ze względu na swą szerokość, obserwowane dla cieczy sygnały rentgenowskie, określane są jako 'dyfuzyjne'.



# Quasicrystals and non-crystalline mater

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



Penrose tiling – five-fold symmetry

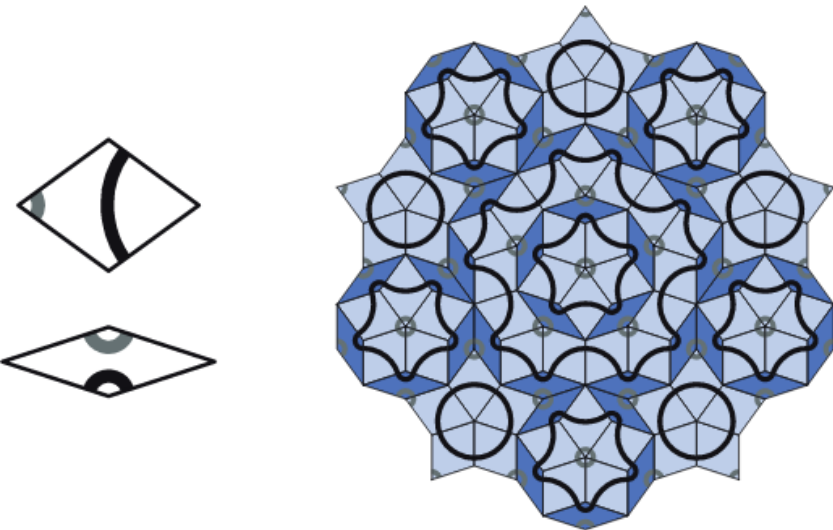
<http://www.fuw.edu.pl/~baj>

## **Condensation:**

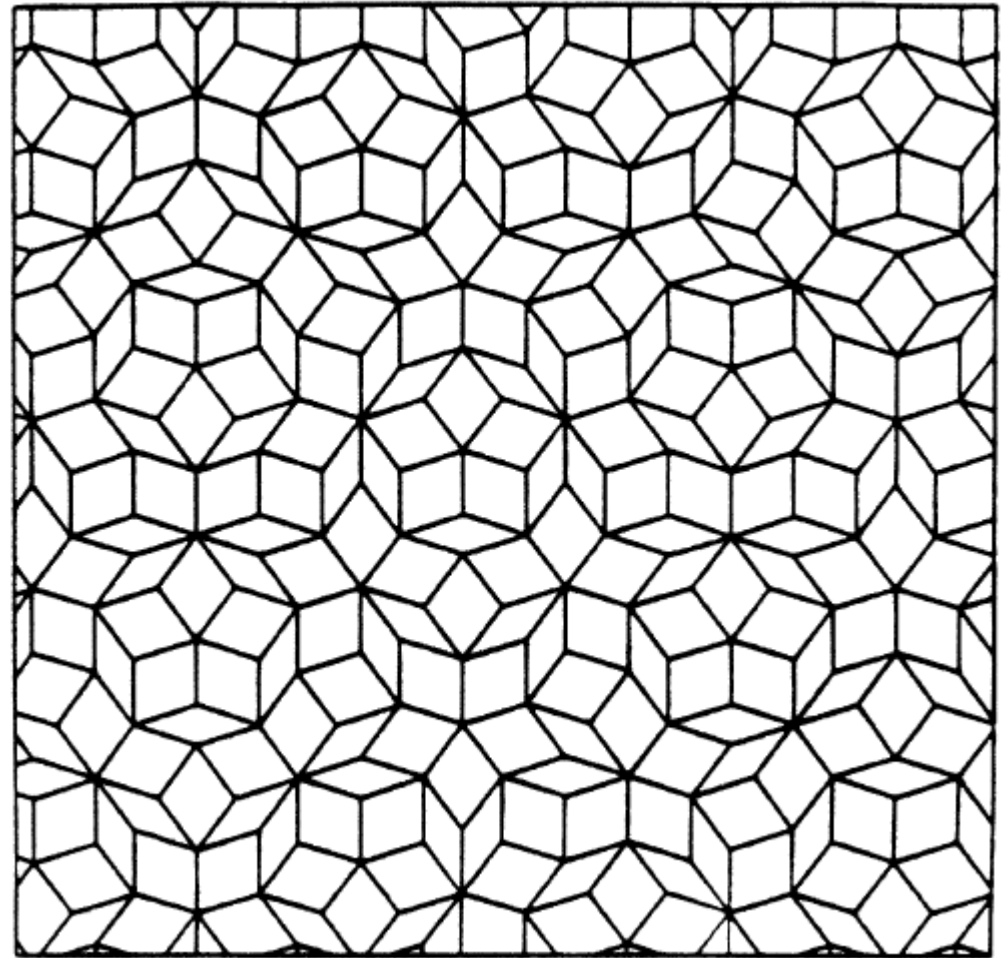
- Short-range order (liquid, solid amorphous, glass)
- Long-range order (crystalline matter)

# 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

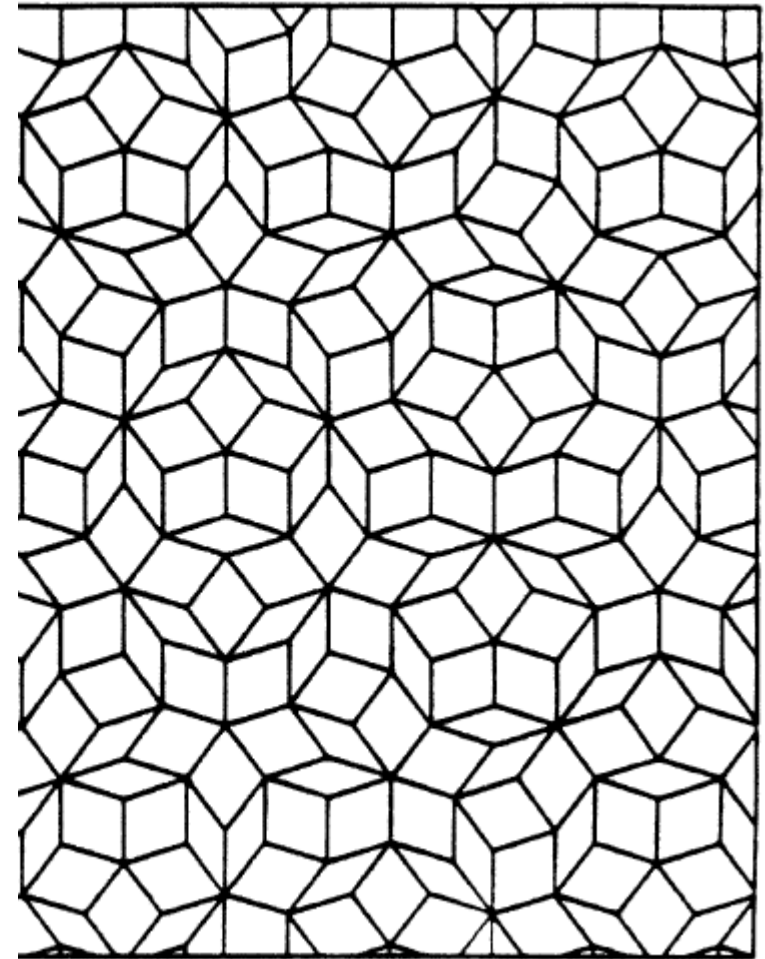
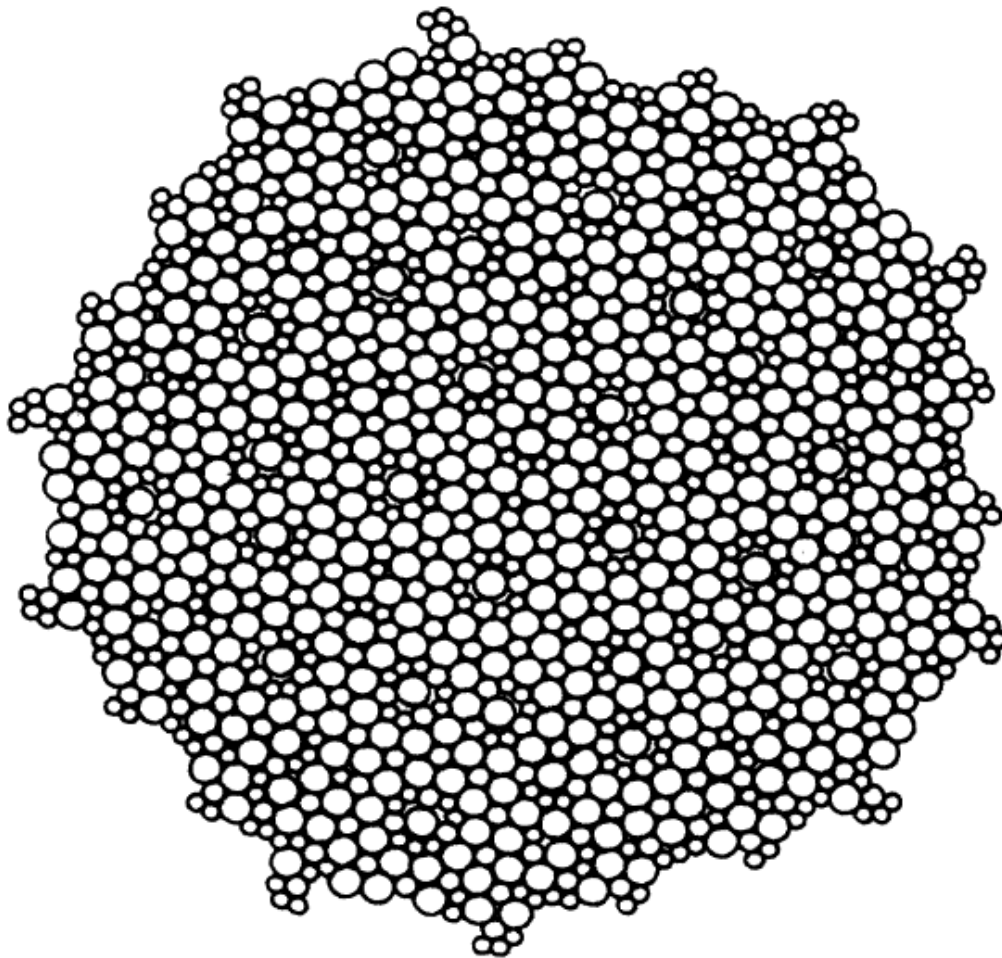
Michal Krížek, Jakub Šolc, and Alena Šolcová

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



# crystalline mater

sses, quasicrystals - very complicated -



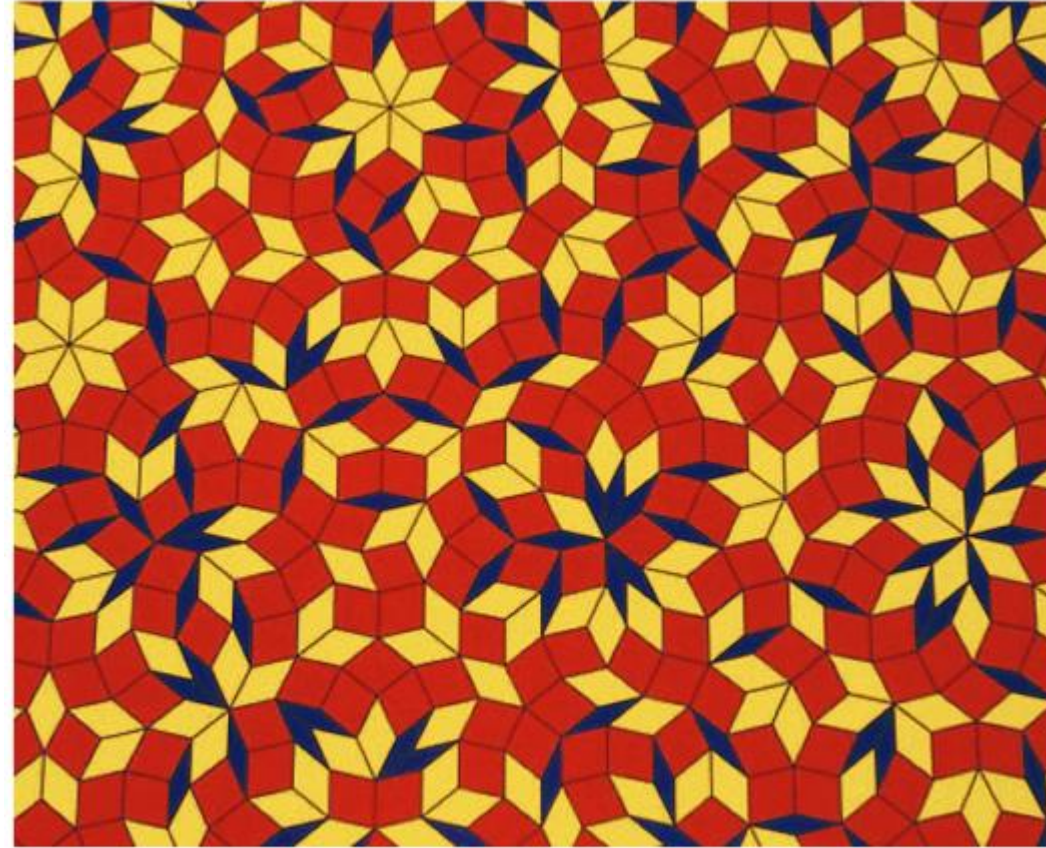
**FIG. 11.** Two-dimensional sphere packing using three different size spheres (a ternary alloy) which has been statically relaxed under a Lennard-Jones potential. This packing displays long-range pentagonal bond-orientational order, and, as may be seen by viewing at a grazing angle, sequences of parallel lines separated by 1 or  $\tau$  (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.



**Figure 10. Katz nonperiodic tiling.**  
seven-fold symmetry

## **Condensation:**

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

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**

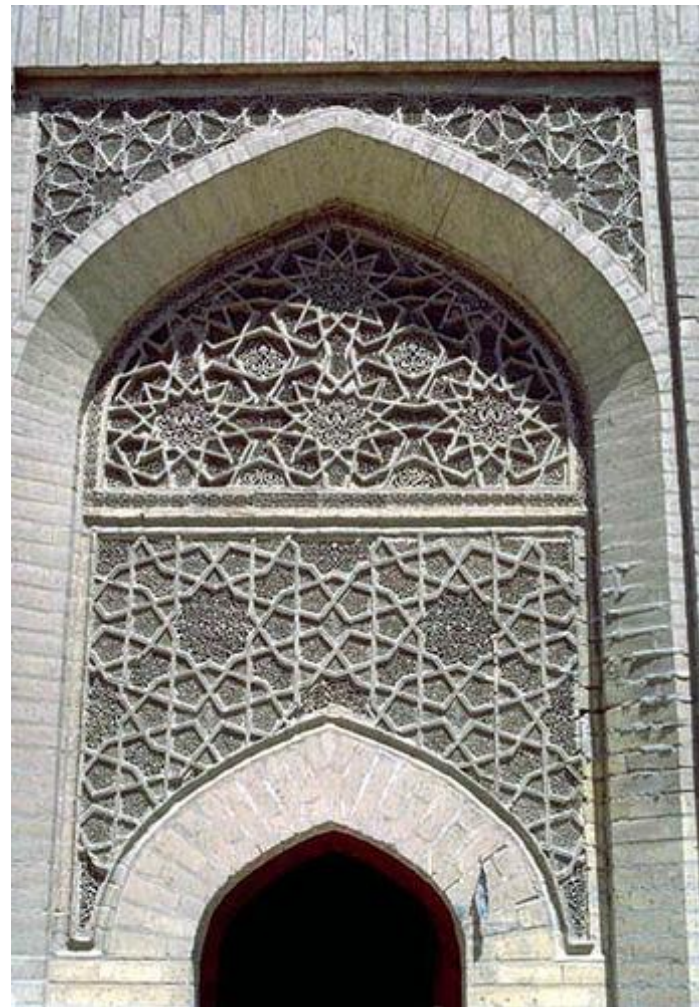
molten mixture of aluminium and manganese  
under an electron microscope

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

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



# Quasicrystals



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

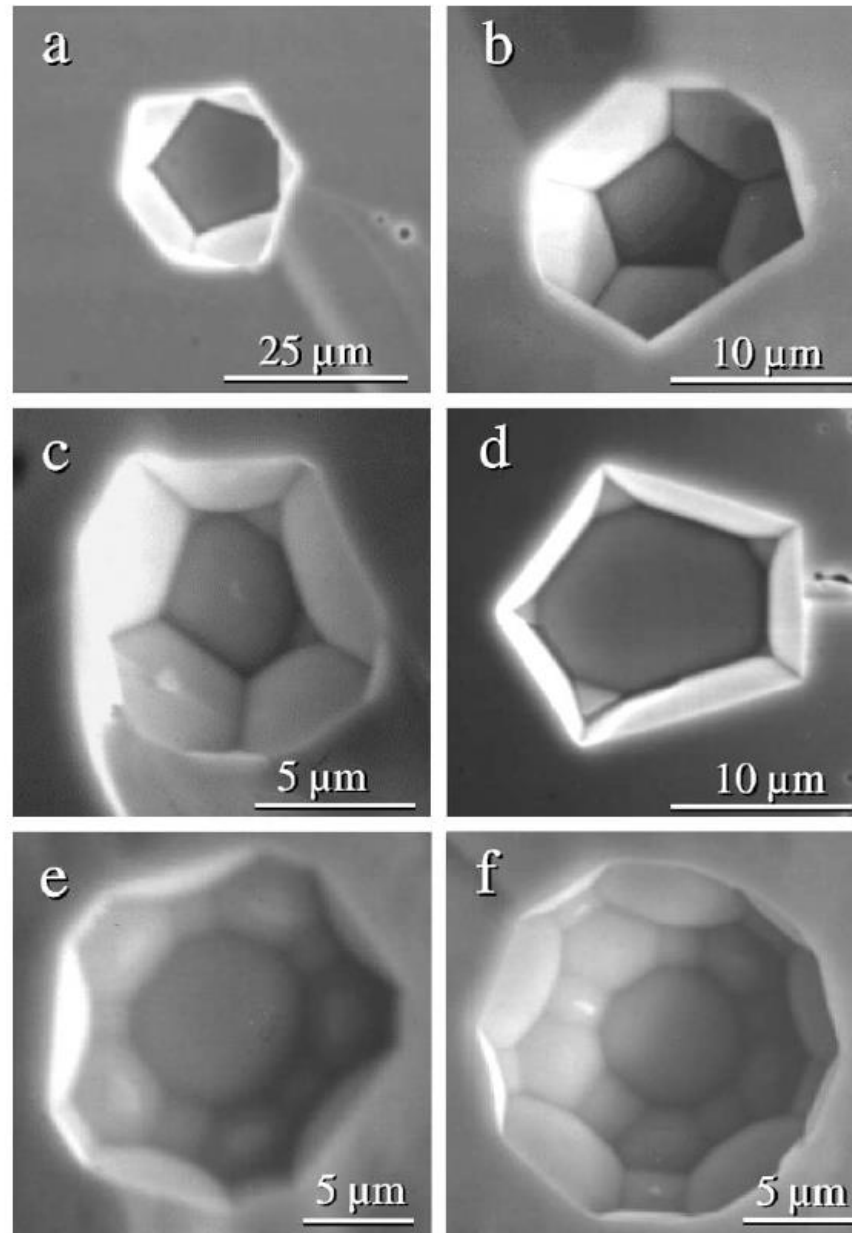


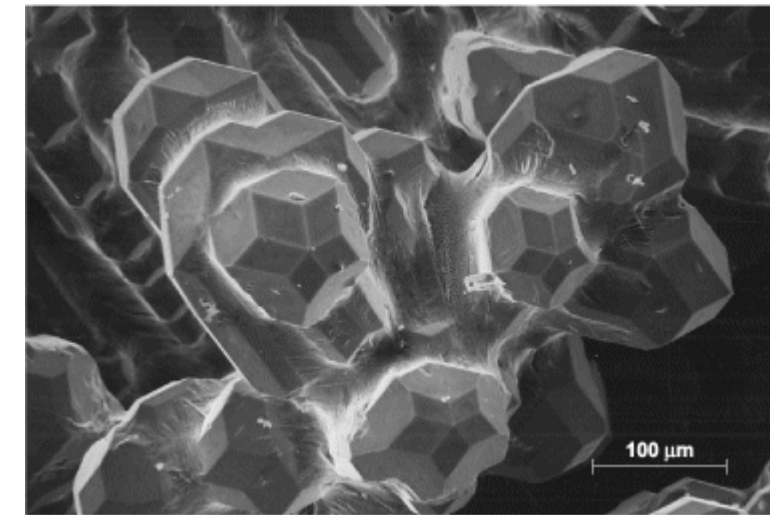
Fig. 1. Scanning electron microscopy images of different types of faceted grown-in voids in as-grown icosahedral Al-Pd-Mn quasicrystals: (a, b) voids with only fivefold facets, (c, d) voids with five- and minor threefold facets, (e, f) voids with additional twofold facets and decreasing size of fivefold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



# Quasicrystals and

**Theoretical description** of liquids, amorphous, 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.

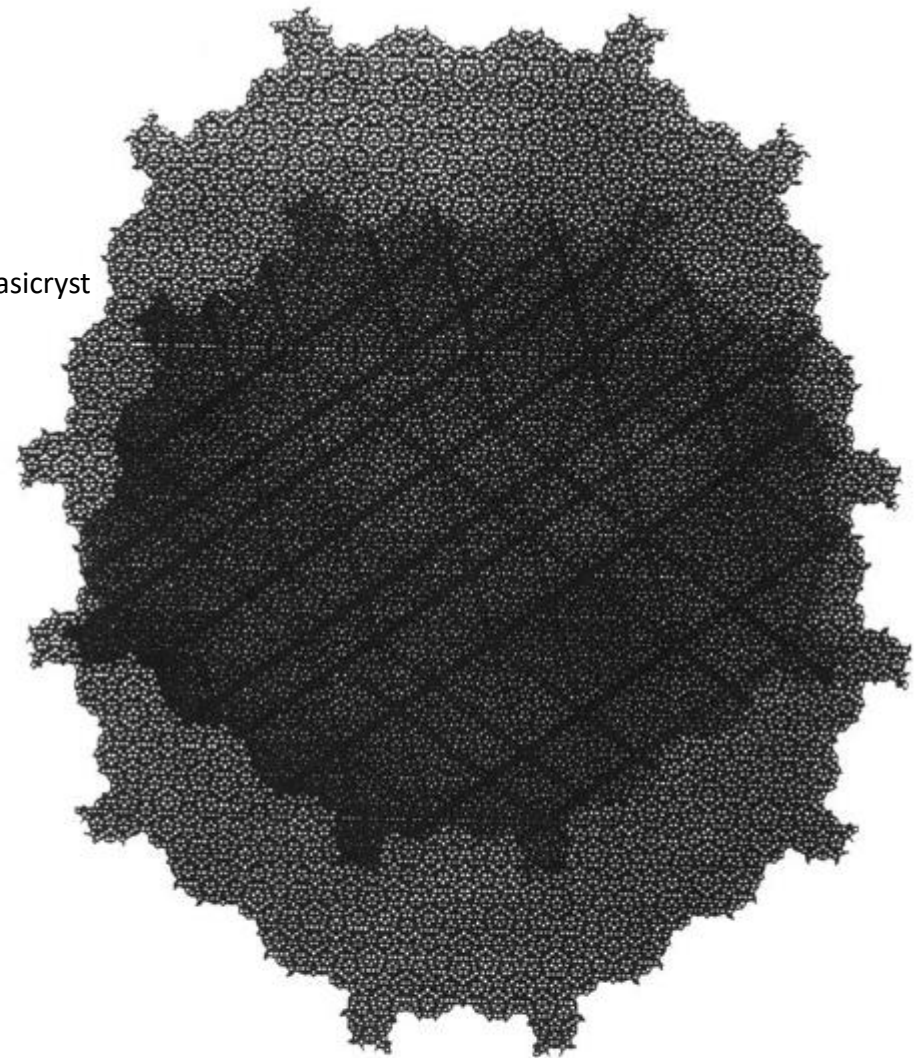
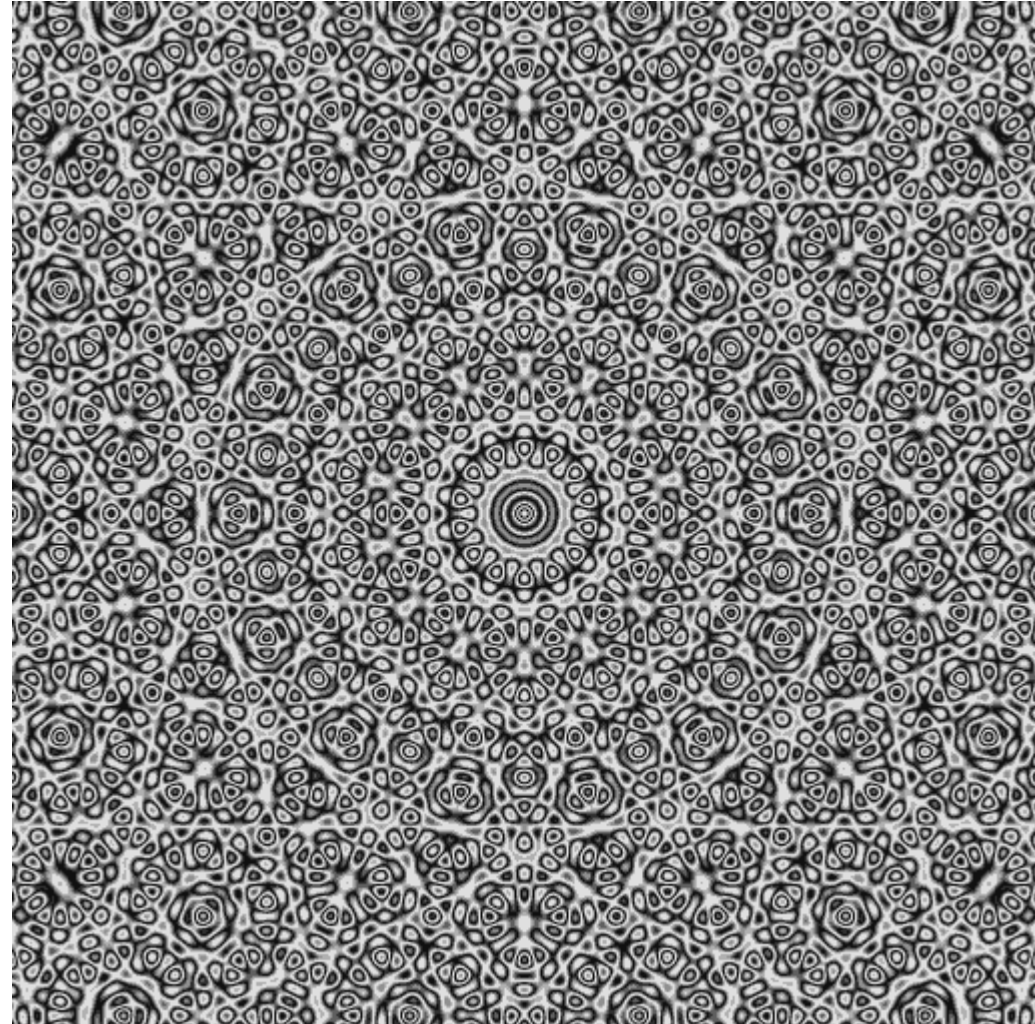


FIG. 3. Two identical Penrose tilings, one translated with respect to the other, are overlaid to form a moiré pattern. Where the two patterns interfere constructively or destructively, light or dark lines appear.

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)

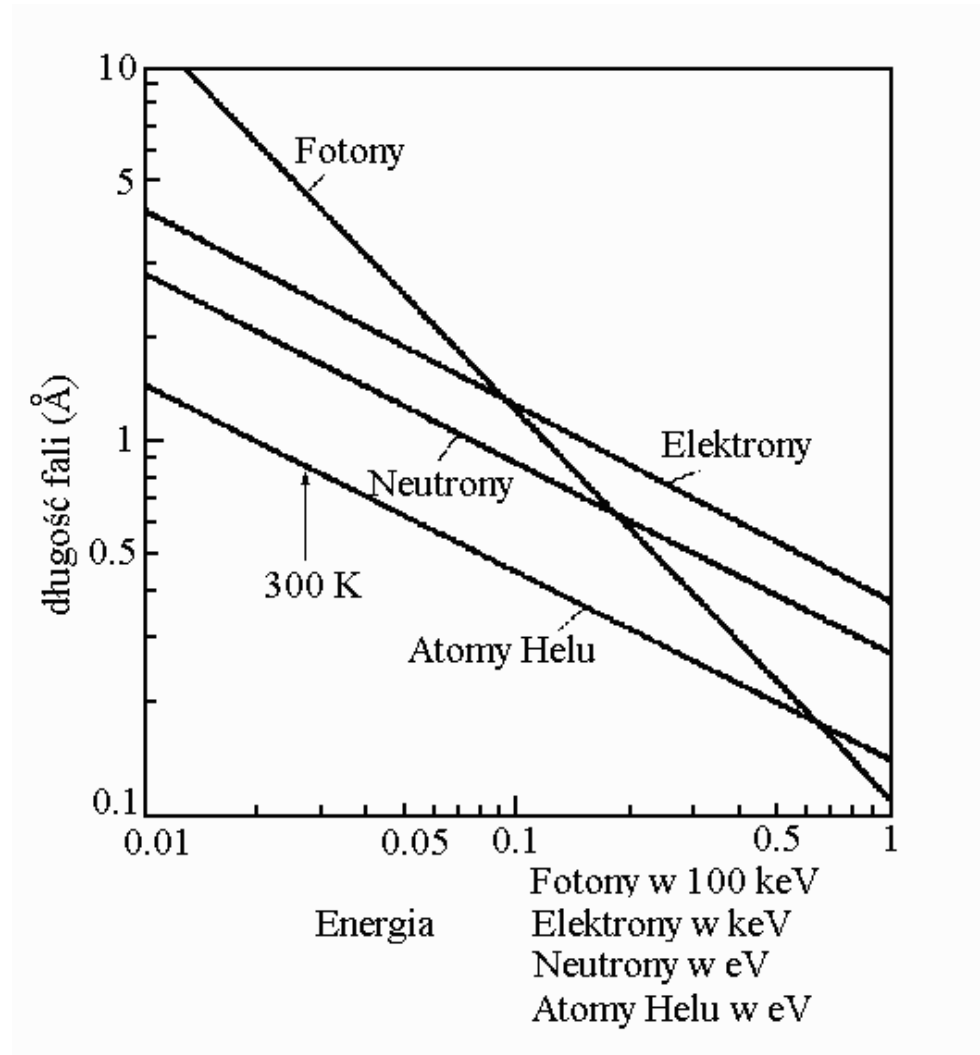
<http://thesummerofmark.tumblr.com/post/11943716894/quasicrystals-ftw>



# 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



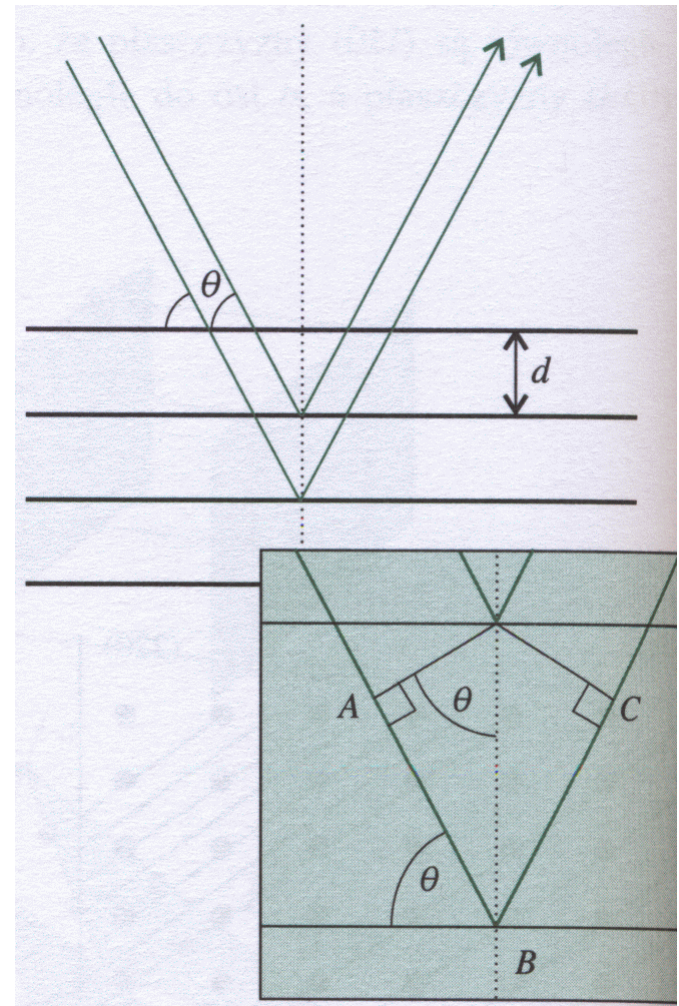
Max von Laue  
1879 - 1960

Model kryształu. Zbiór odbijających równoległych płaszczyzn o odległościach między płaszczyznami  $d$

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

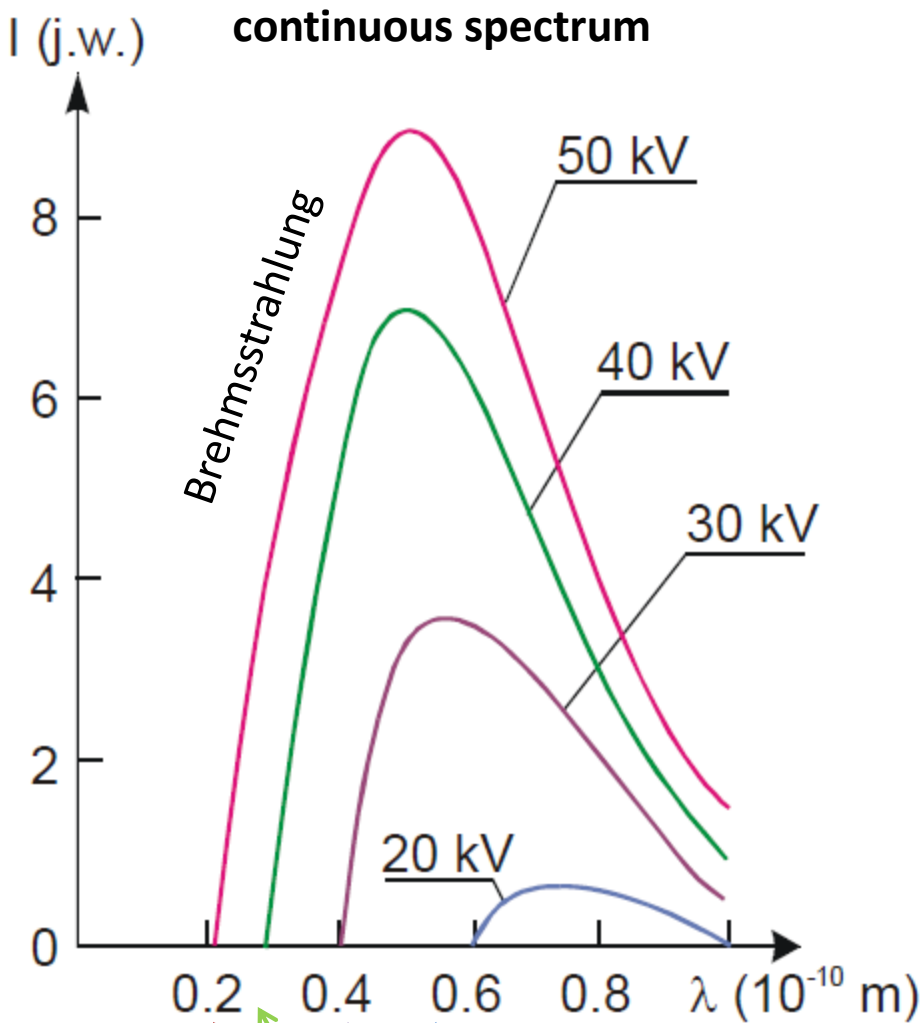
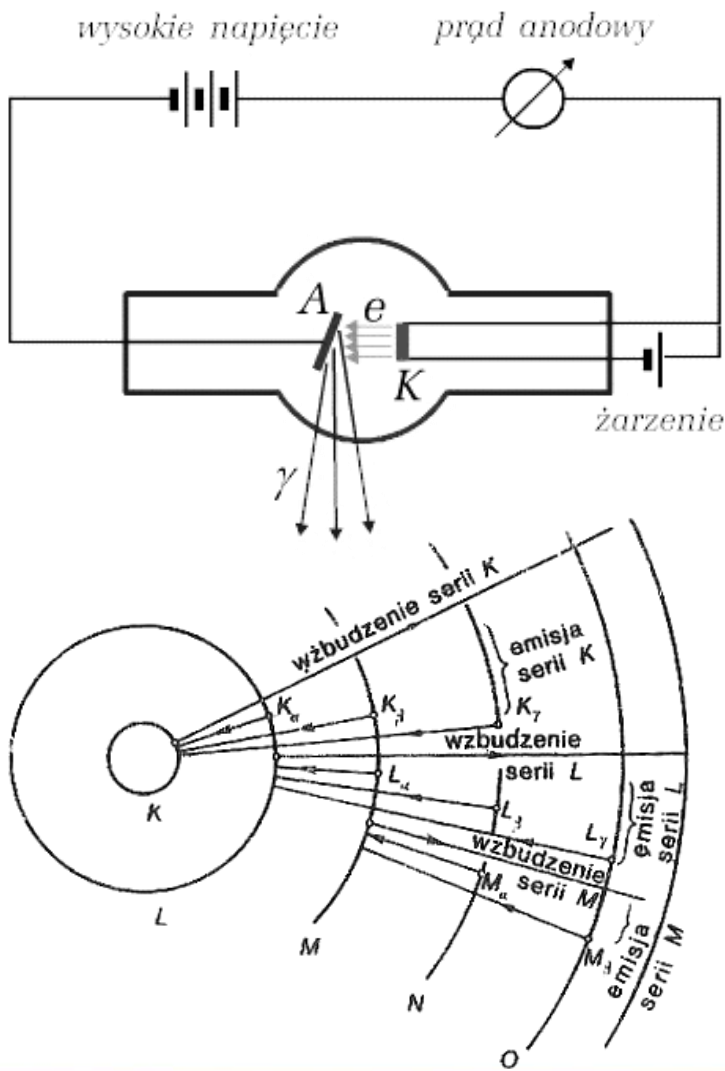
William Lawrence Bragg (son) and William Henry Bragg (father), 1913

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



P. Atkins

## Dyfrakcja

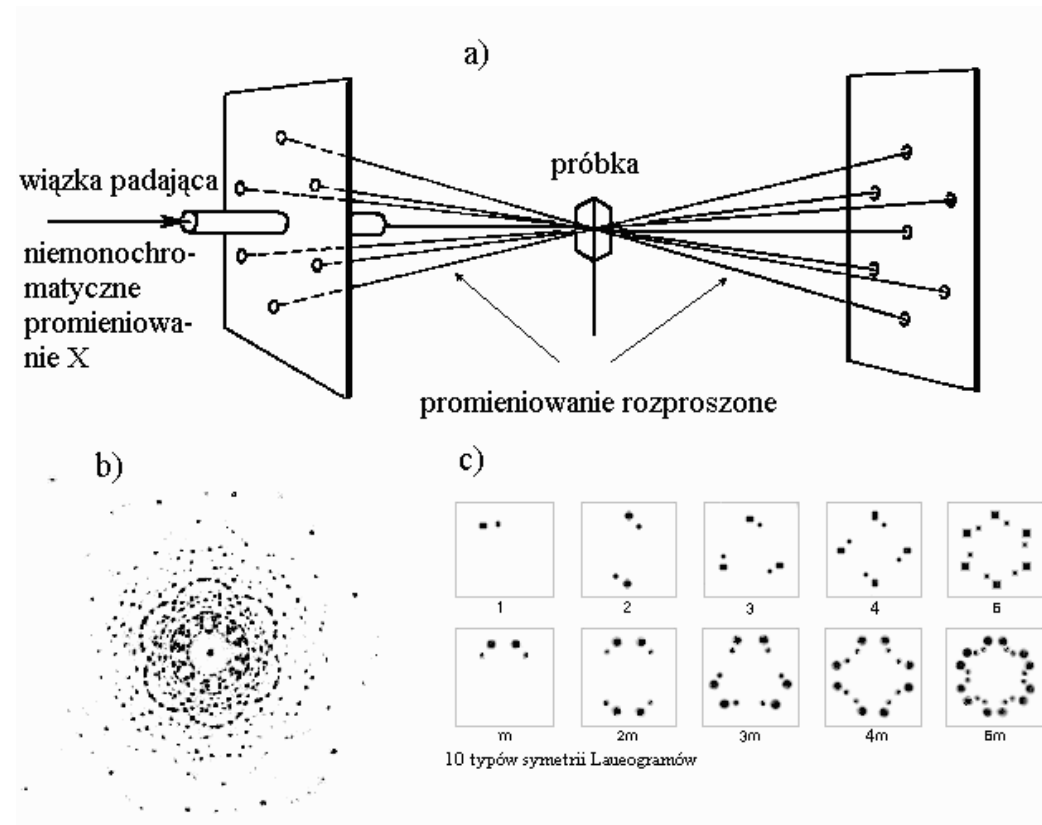


$$h\nu_{max} = h \frac{c}{\lambda_{min}} = eV$$

# Krystalografia

## metoda Lauego

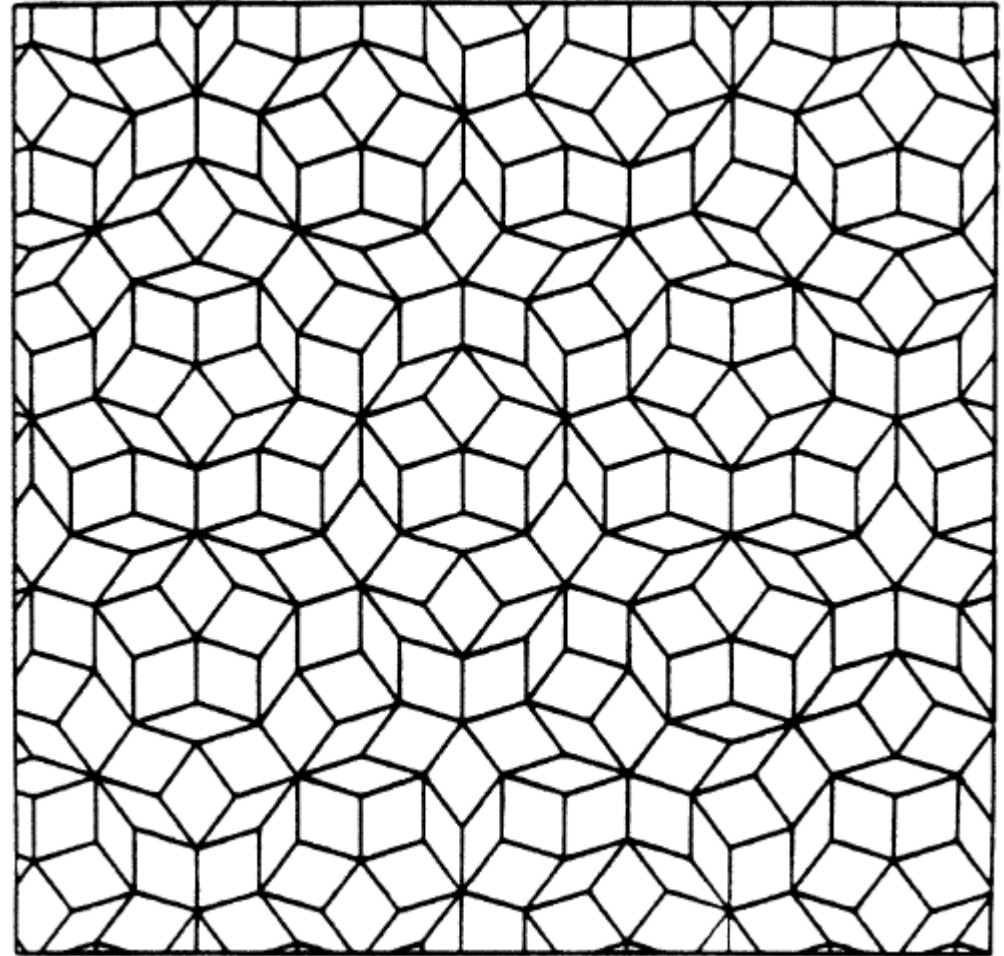
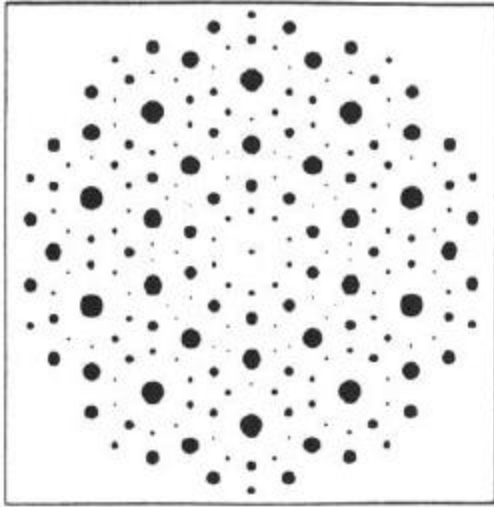
- Kryształ oświetlony jest światłem białym.
- W wyniku rozproszenia fale o różnych długościach zostają rozproszone w różnych kierunkach. Otrzymujemy na kliszy różne punkty dla różnych kolorów (długości fali).
- Układ plamek ma symetrię taką jak kierunek w kryształach, wzdłuż którego pada fala





# Quasicrystals and non-crystalline mater

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

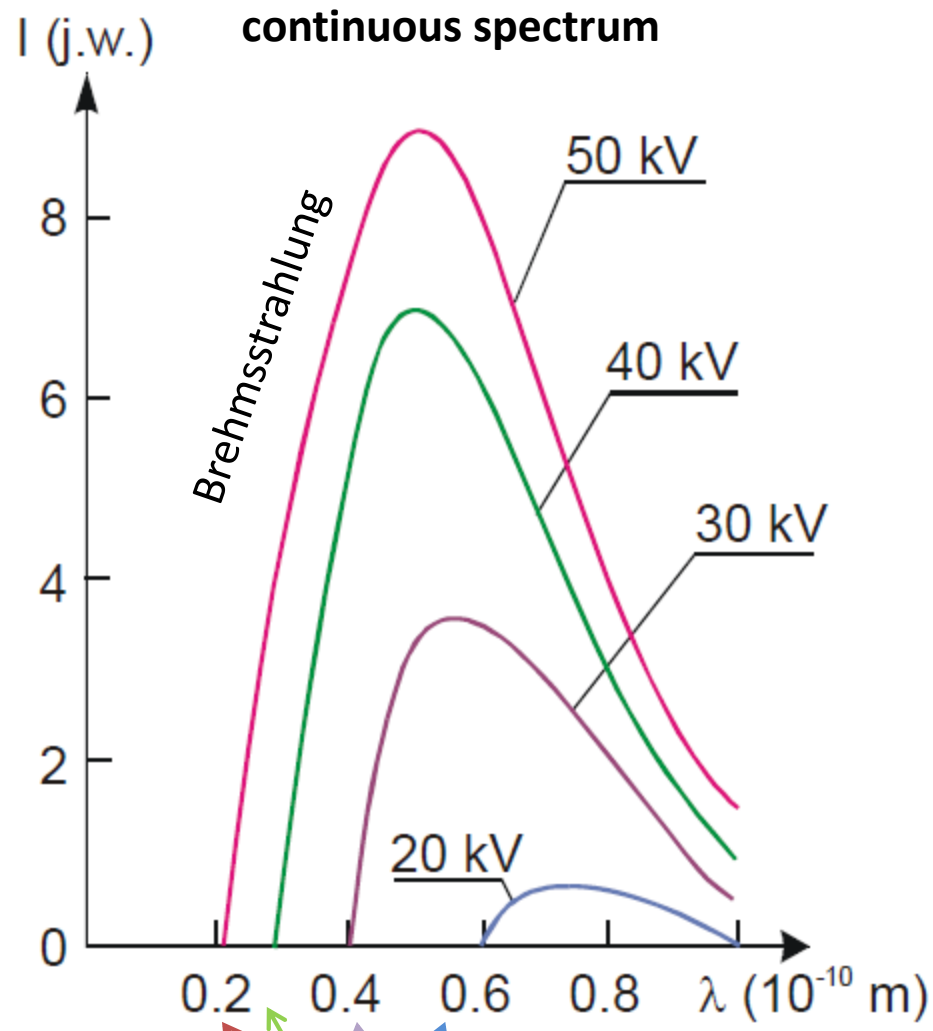
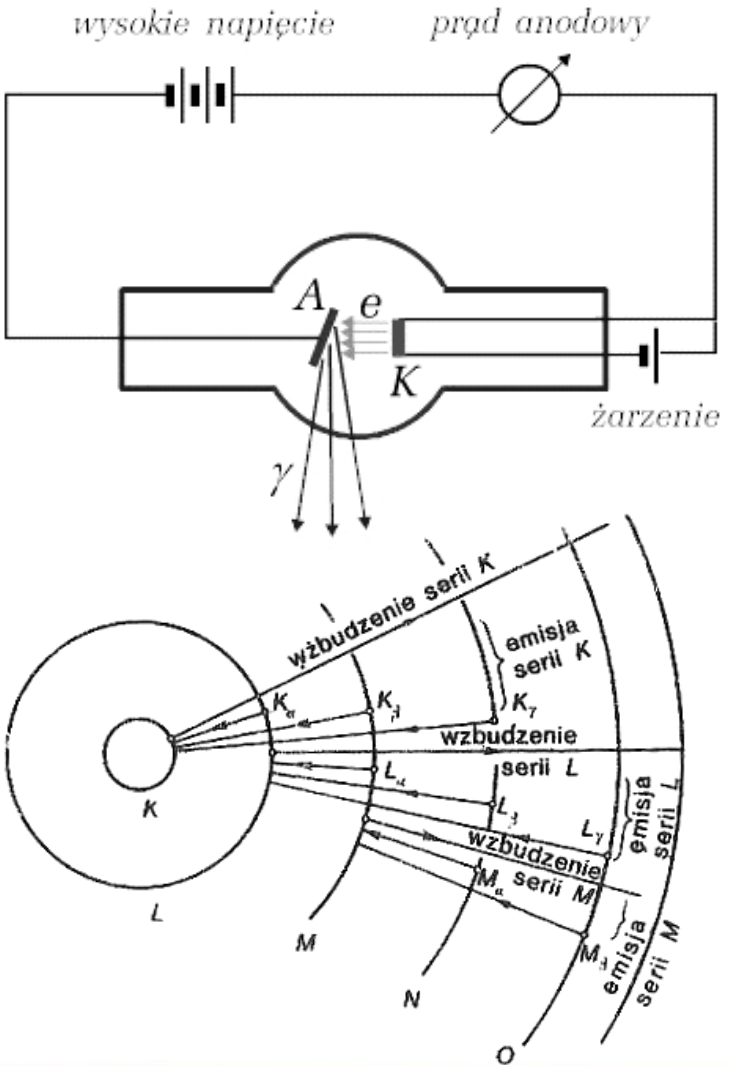


Penrose tiling

## Condensation:

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

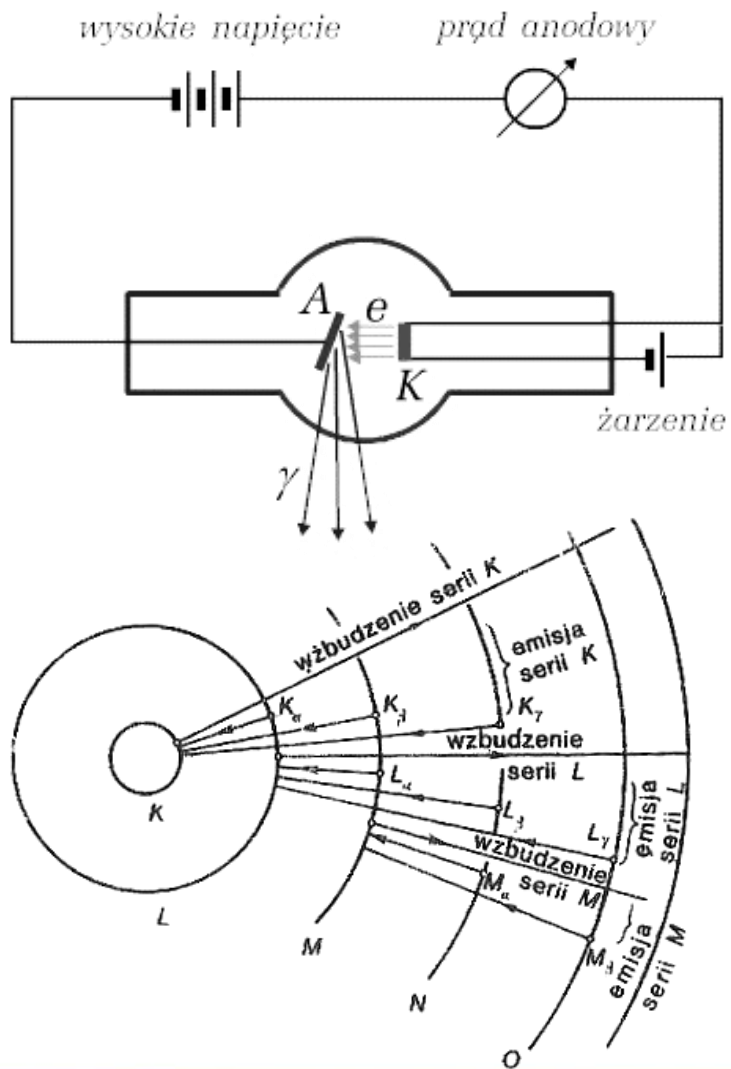
## Dyfrakcja



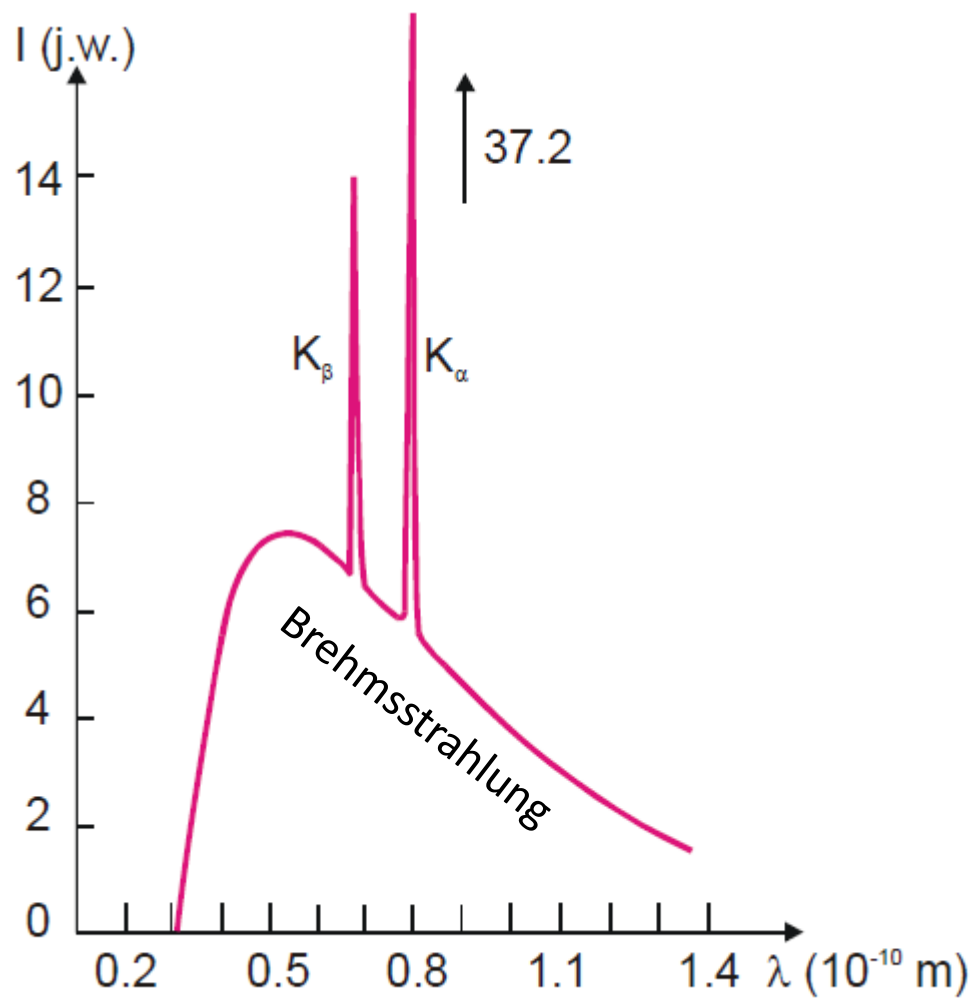
$$h\nu_{max} = h \frac{c}{\lambda_{min}} = eV$$

# Krystalografia

## Dyfrakcja



characteristic spectrum





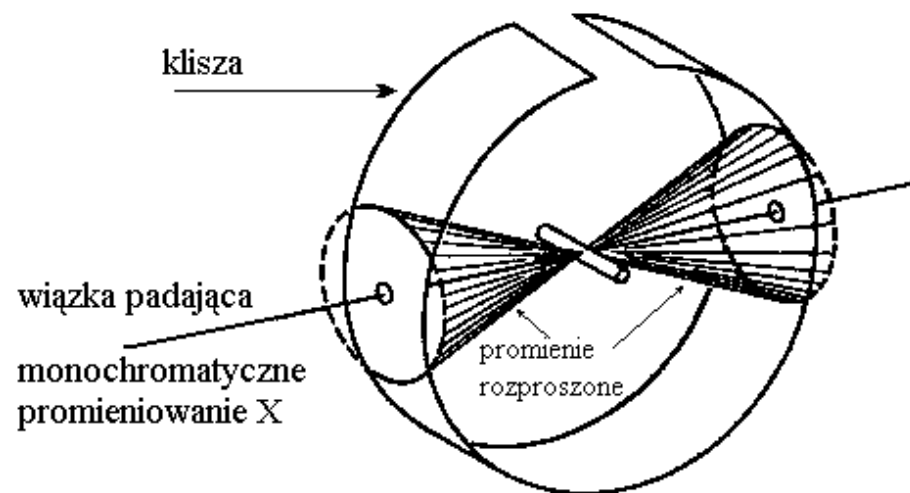
# Krystalografia

## metoda Debaye-Scherera



Peter Joseph Debye  
1884 – 1966

Paul Scherrer  
1890 - 1969

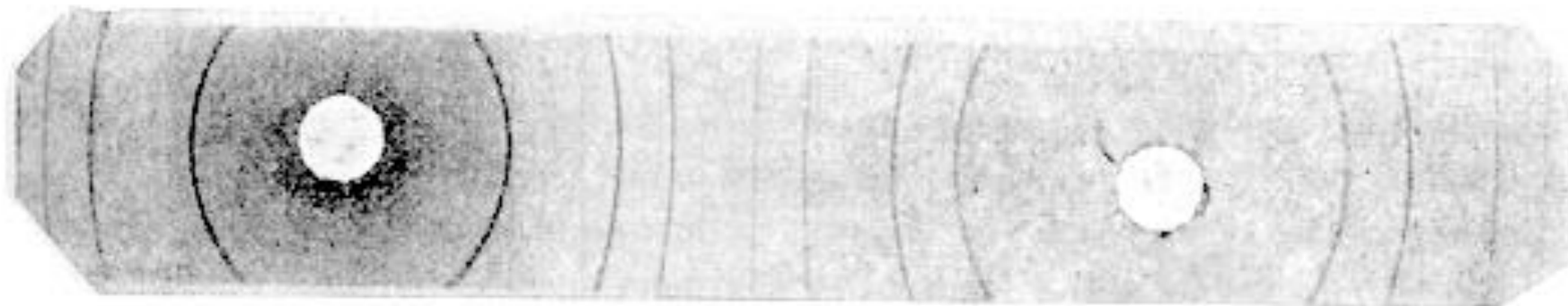
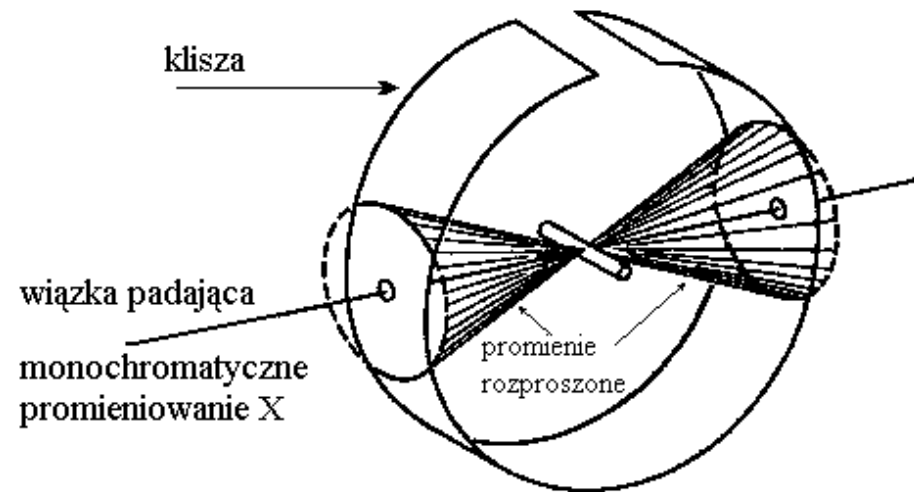


Typowy debajogram

# 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

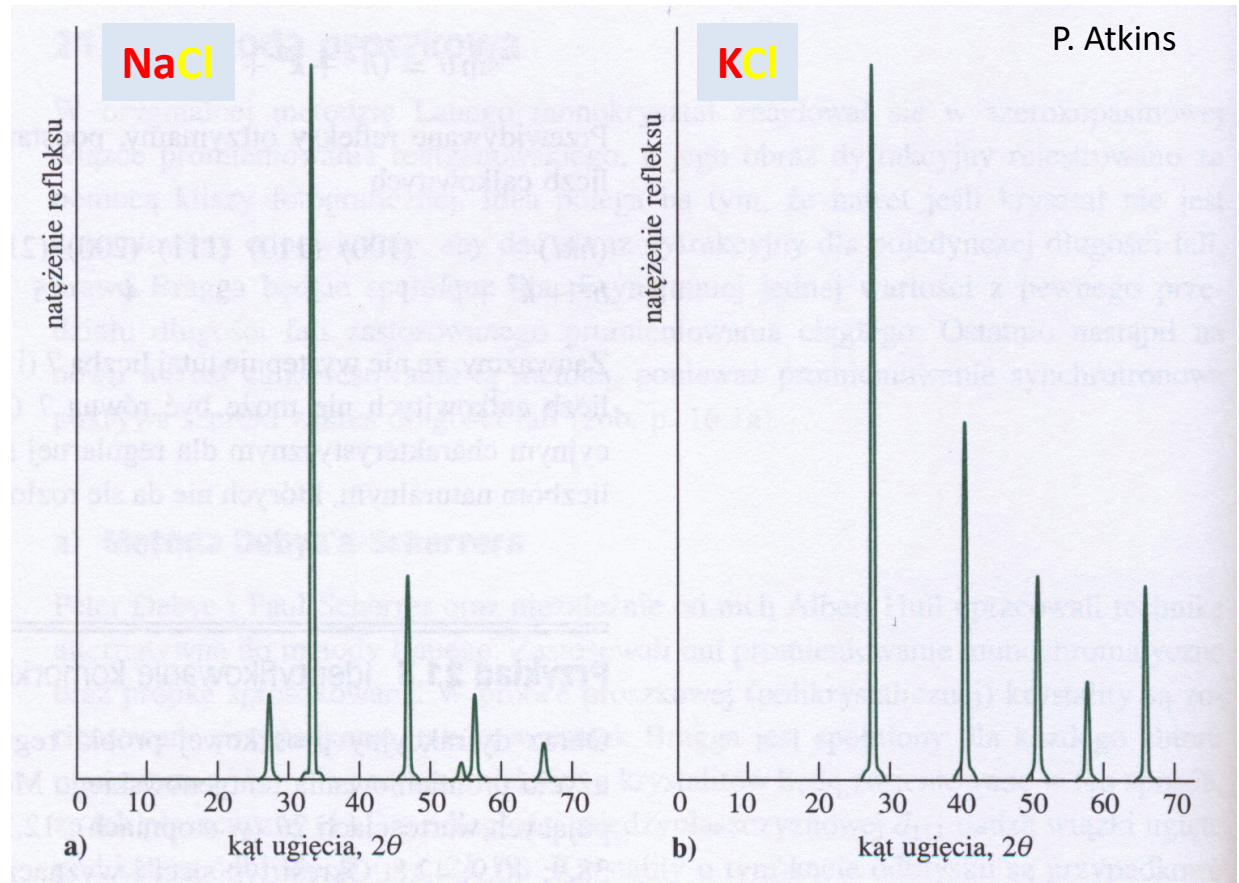
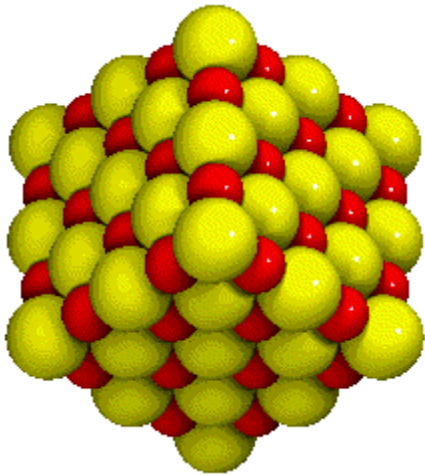


Typowy debajogram



# Krystalografia

## Atomic form factor (*czynnik atomowy*)

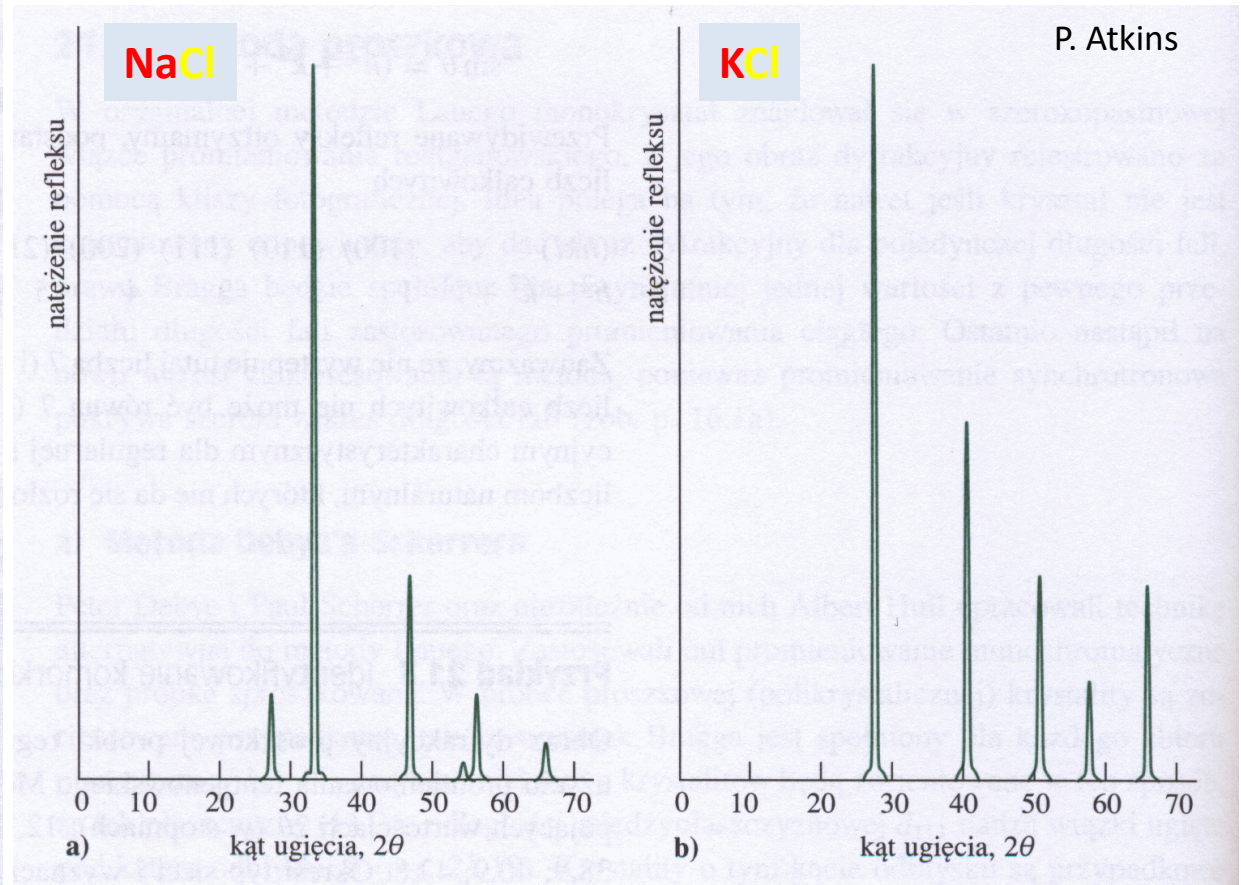
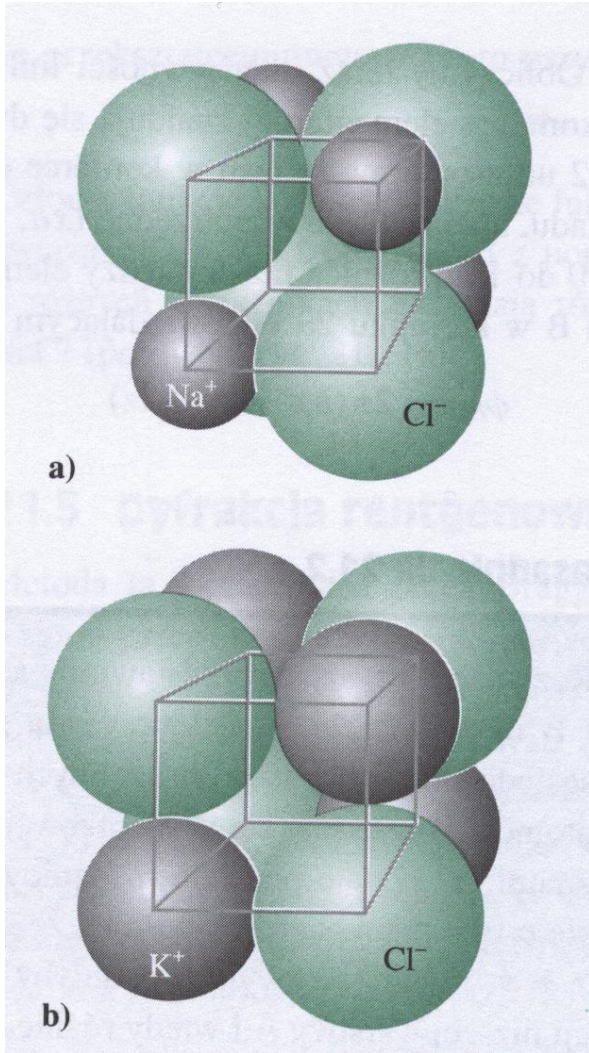


Both salts have the same crystal structure, but different diffraction, why?



# Krystalografia

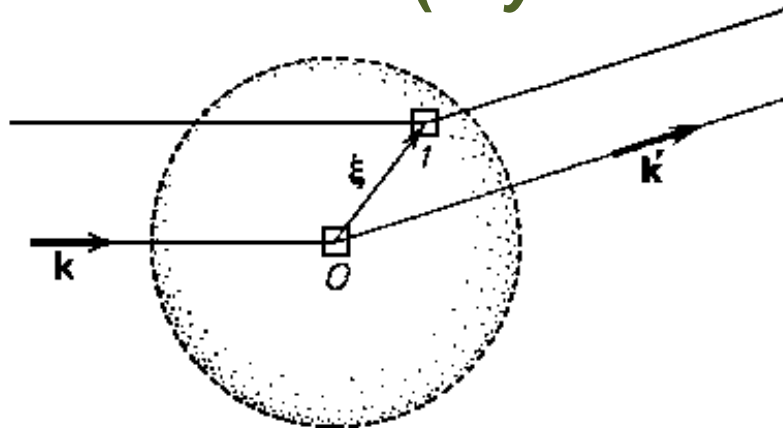
## Atomic form factor (*czynnik atomowy*)



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

# Krystalografia

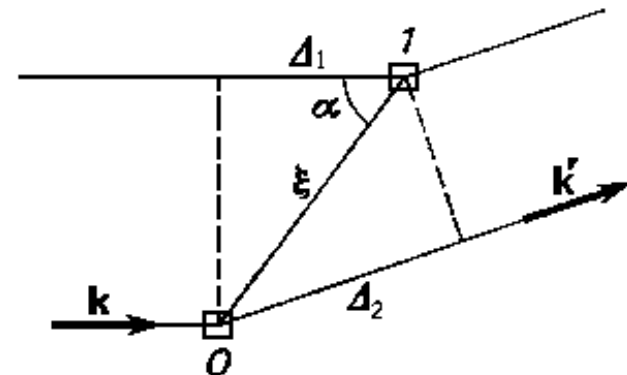
## Atomic form factor (czynniki atomowy)



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

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

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

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

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



# Krystalografia

## Atomic form factor (czynnik 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  $\vec{\xi} = 0$

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

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

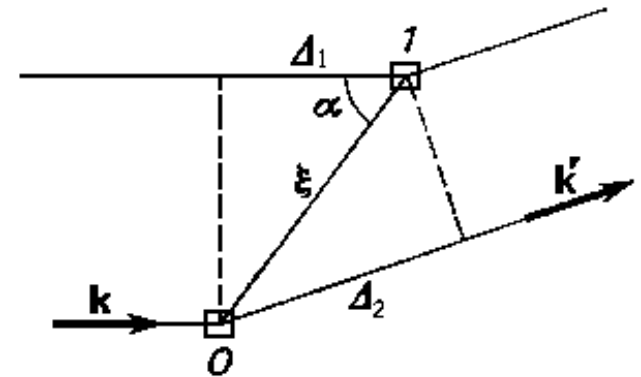
Fala rozproszona

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

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 (*czynnik atomowy*)

Np. rozkład elektronów o symetrii kulistej

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

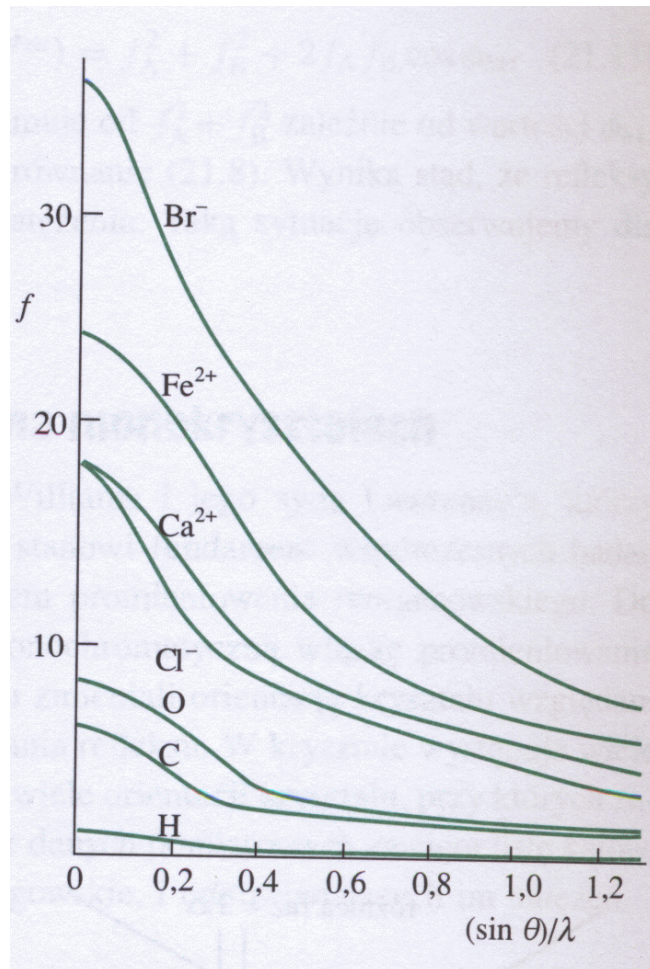
Dla małych kątów rozproszenia  $\Delta k\xi \rightarrow 0$  oraz  $f = -Z$

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

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

# Krystalografia

## Atomic form factor (*czynnik atomowy*)



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

Key:

- Metals
- Nonmetals
- Metalloids

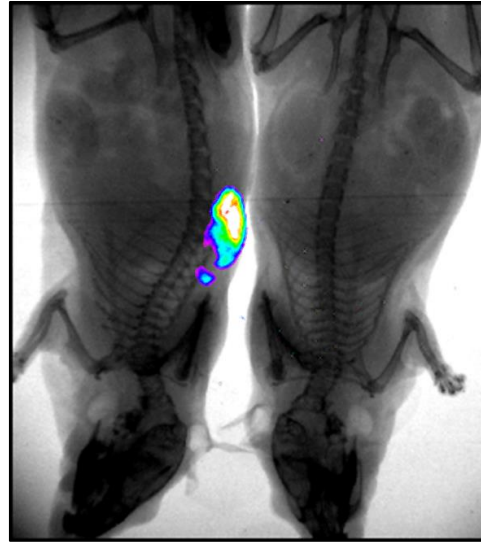
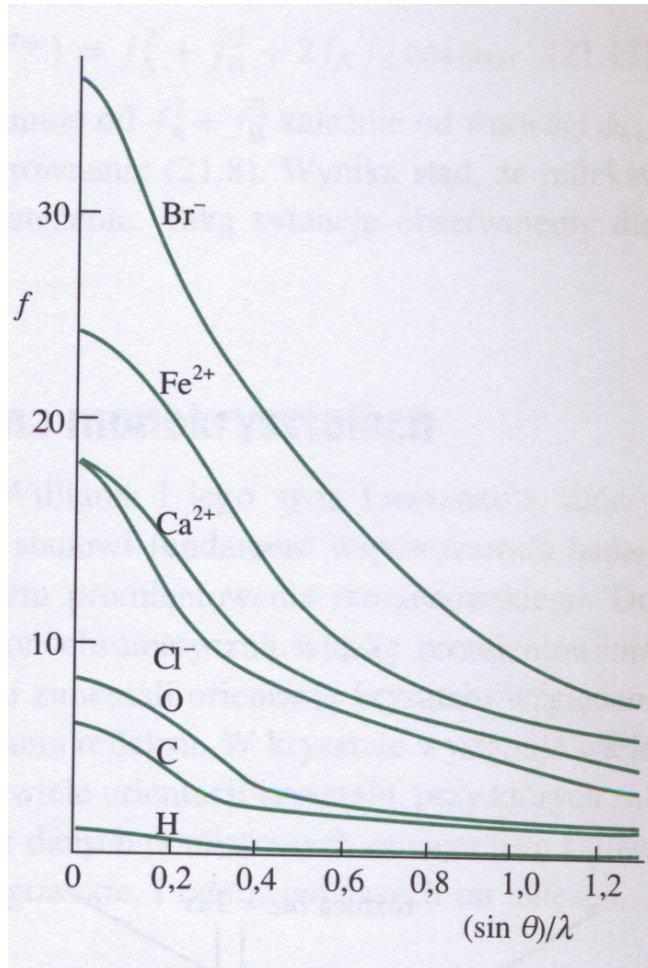
1A (1)	2A (2)															3A (13)	4A (14)	5A (15)	6A (16)	7A (17)	8A (18)																								
Li	Be															B	C	N	O	F	Ne																								
Na	Mg	3B (3)	4B (4)	5B (5)	6B (6)	7B (7)	8B (8) (9) (10)			1B (11)	2B (12)	Al	Si	P	S	Cl	Ar																												
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	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																														
		<table border="1"> <tr> <td>Ce</td><td>Pr</td><td>Nd</td><td>Pm</td><td>Sm</td><td>Eu</td><td>Gd</td><td>Tb</td><td>Dy</td><td>Ho</td><td>Er</td><td>Tm</td><td>Yb</td><td>Lu</td> </tr> <tr> <td>Th</td><td>Pa</td><td>U</td><td>Np</td><td>Pu</td><td>Am</td><td>Cm</td><td>Bk</td><td>Cf</td><td>Es</td><td>Fm</td><td>Md</td><td>No</td><td>Lr</td> </tr> </table>																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
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*)



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

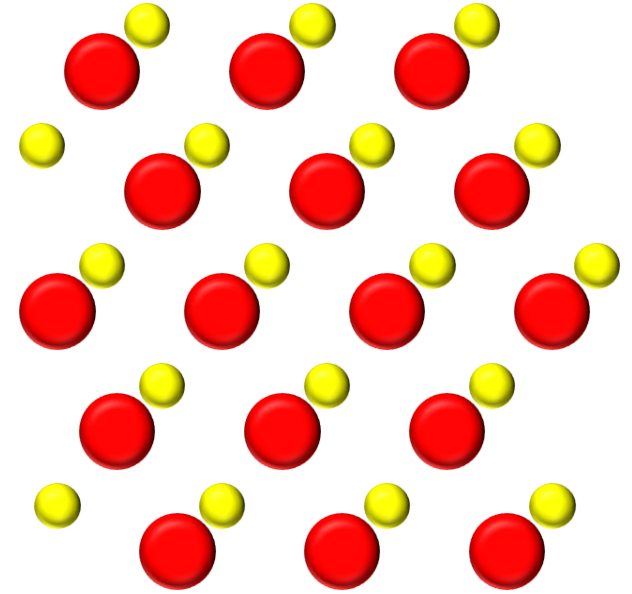



# Krystalografia

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  $\vec{k}'$ ):



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

# Krystalografia

Fala rozproszona na jednym atomie: ( $j$ )

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

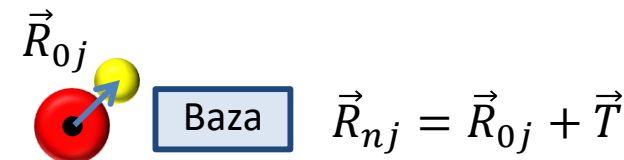
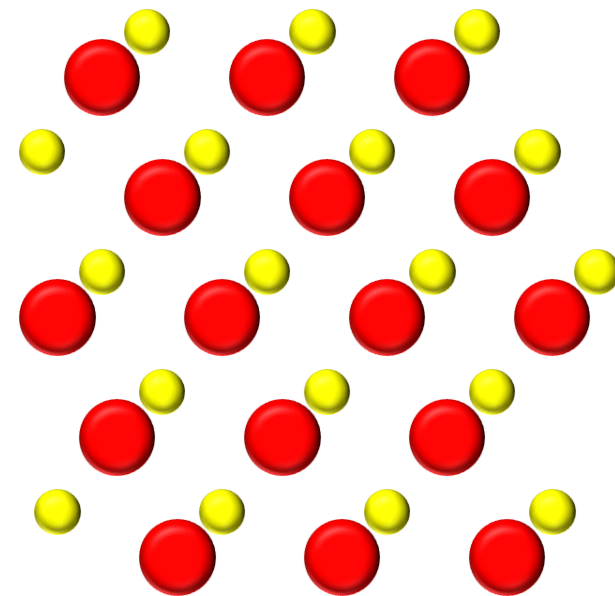
Fala rozproszona na wszystkich atomach (w kierunku  $\vec{k}'$ ):

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

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

Atoms in basis

Period of the lattice



# Krystalografia

Fala rozproszona na jednym atomie: ( $j$ )

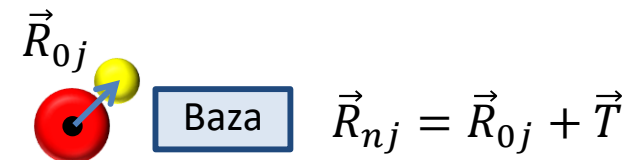
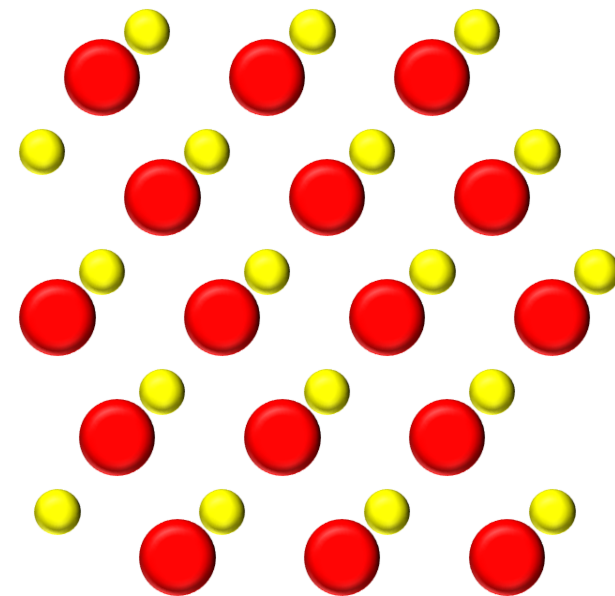
$$\Psi = A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j$$

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: ( $j$ )

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

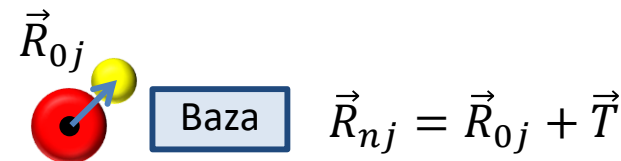
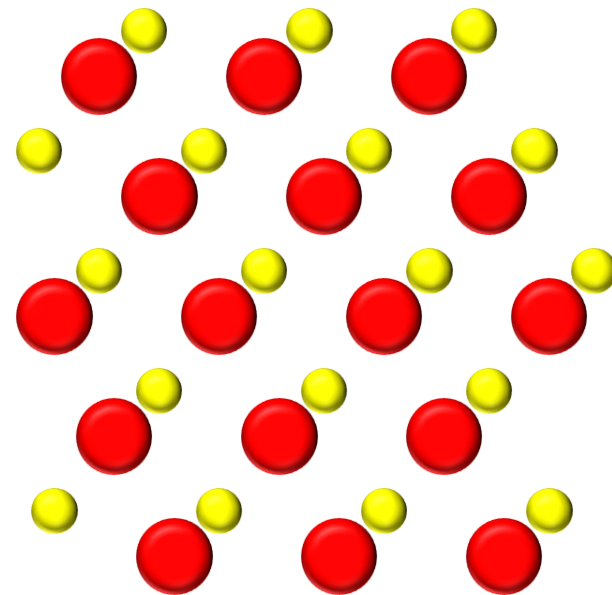
Fala rozproszona na wszystkich atomach (w kierunku  $\vec{k}'$ ):

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

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

Atomy w bazie

Period sieci



# Krystalografia

Fala rozproszona na jednym atomie: ( $j$ )

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

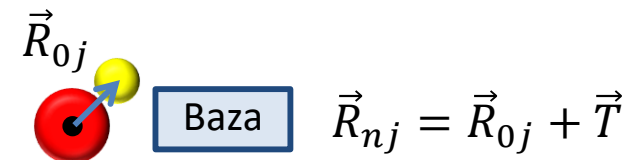
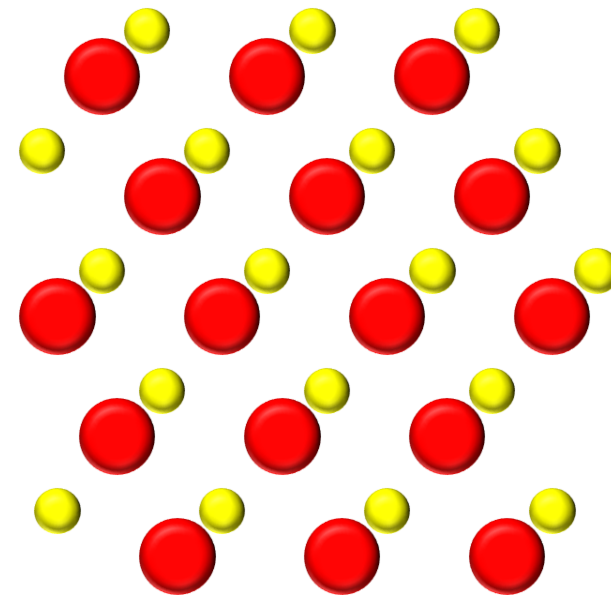
Fala rozproszona na wszystkich atomach (w kierunku  $\vec{k}'$ ):

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

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

Atomy w bazie

Period sieci



# Krystalografia

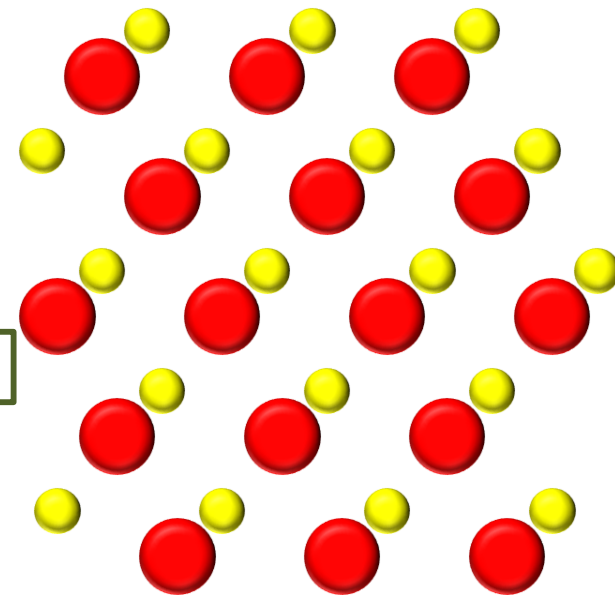
Fala rozproszona na jednym atomie: ( $j$ )

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

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

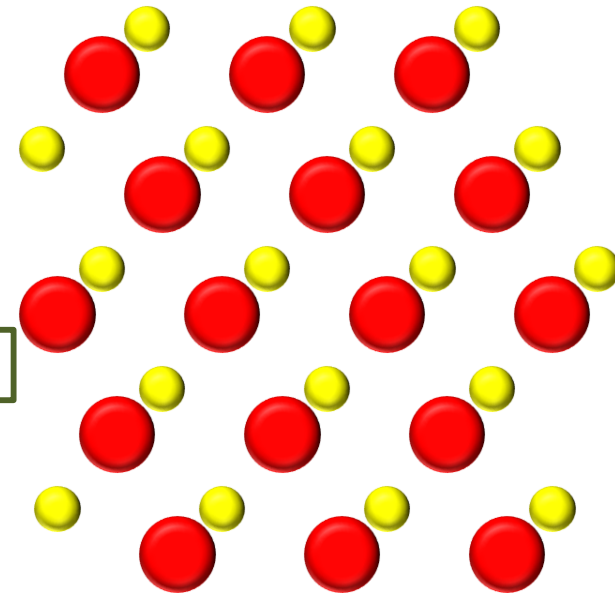
Fala rozproszona na jednym atomie: ( $j$ )

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

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

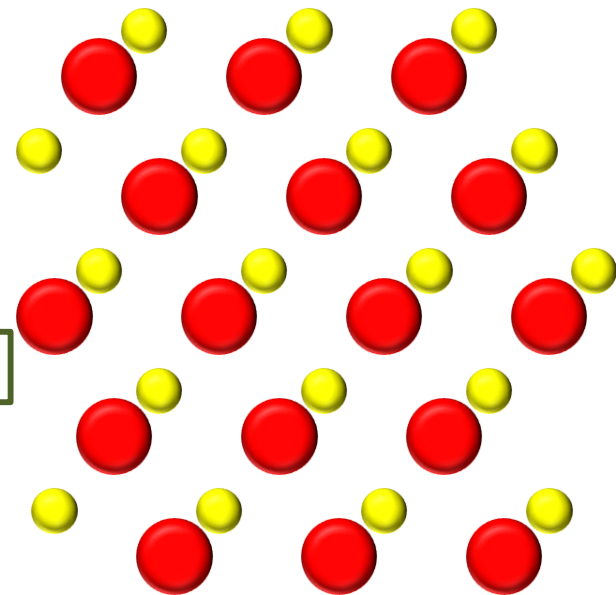
Fala rozproszona na jednym atomie: ( $j$ )

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

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: ( $j$ )

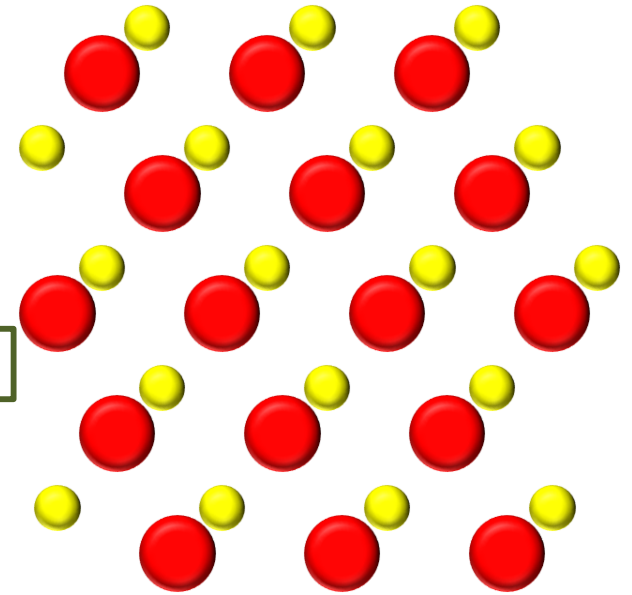
$$\Psi = A e^{i(\vec{k}'\vec{r}-\omega t)} f_j$$

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

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

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

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





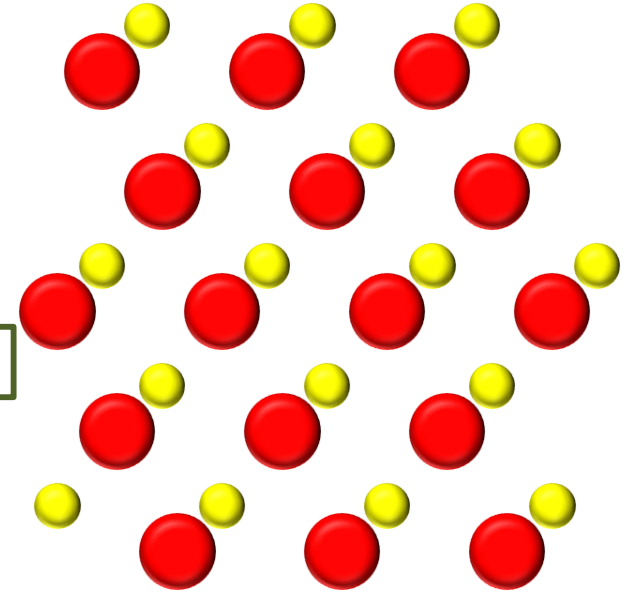
# Krystalografia

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

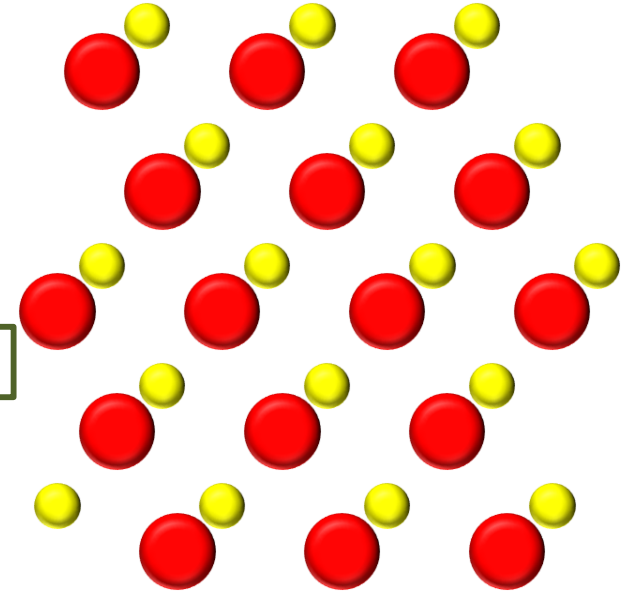
$$\Delta\vec{k}\vec{t}_1 = 2\pi h$$

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

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

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

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

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

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

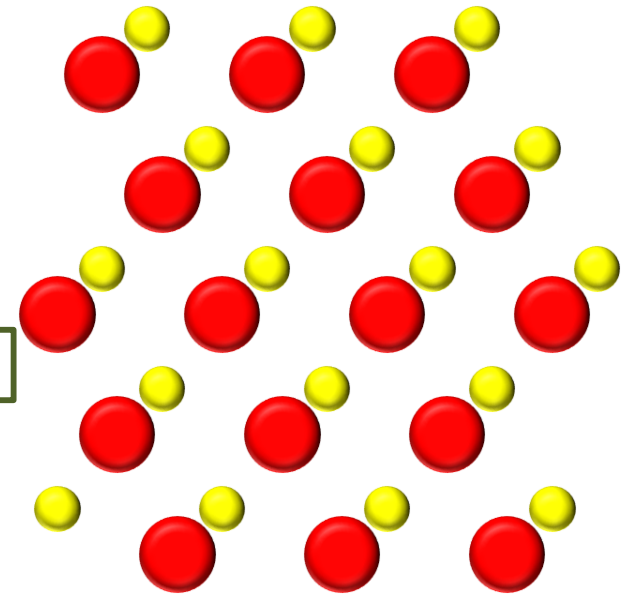
$$|\vec{g}_i| = \frac{2\pi}{a_i}$$

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

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

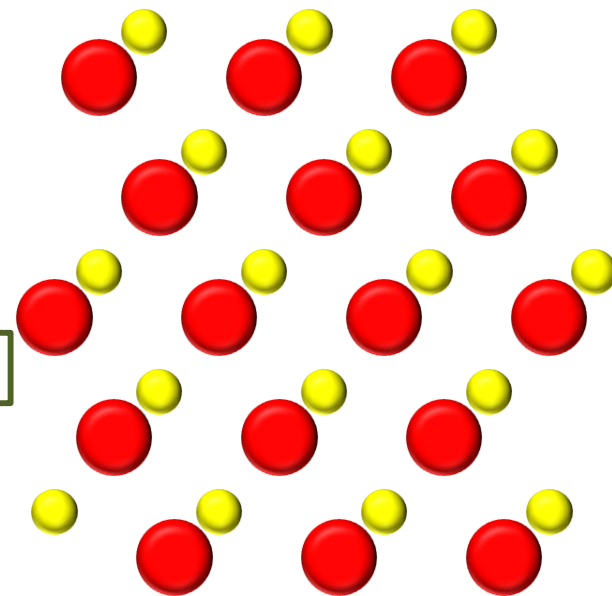
$$\vec{g}_i\vec{t}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

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

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

Geometryczny czynnik strukturalny  $S_G$

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

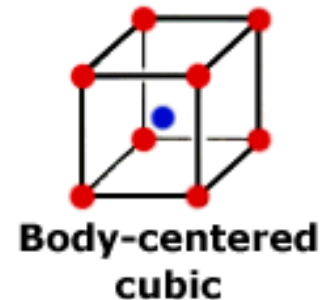


# Krystalografia

## Geometryczny czynnik strukturalny

$$F(h, k, l) = \sum_j f_j e^{-i2\pi(n_1 h + n_2 k + n_3 l)}$$

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



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

$$F_{Li}(h, k, l) = \sum_j f_j e^{-i2\pi(n_1 h + n_2 k + n_3 l)} = f_{Li} e^{-i2\pi(0+0+0)} + f_{Li} e^{-i2\pi\left(\frac{1}{2}h + \frac{1}{2}k + \frac{1}{2}l\right)}$$

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

odd

even

$$F_{TlBr}(h, k, l) = \sum_j f_j e^{-i2\pi(n_1 h + n_2 k + n_3 l)} = f_{Tl} e^{-i2\pi(0+0+0)} + f_{Br} e^{-i2\pi\left(\frac{1}{2}h + \frac{1}{2}k + \frac{1}{2}l\right)}$$

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

odd

even