

Materia skondensowana

Jacek.Szczytko@fuw.edu.pl

<http://www.fuw.edu.pl/~szczytko/NT>

inżynieria
nanostruktur



Podziękowania za pomoc w przygotowaniu zajęć:

Prof. dr hab. Paweł Kowalczyk

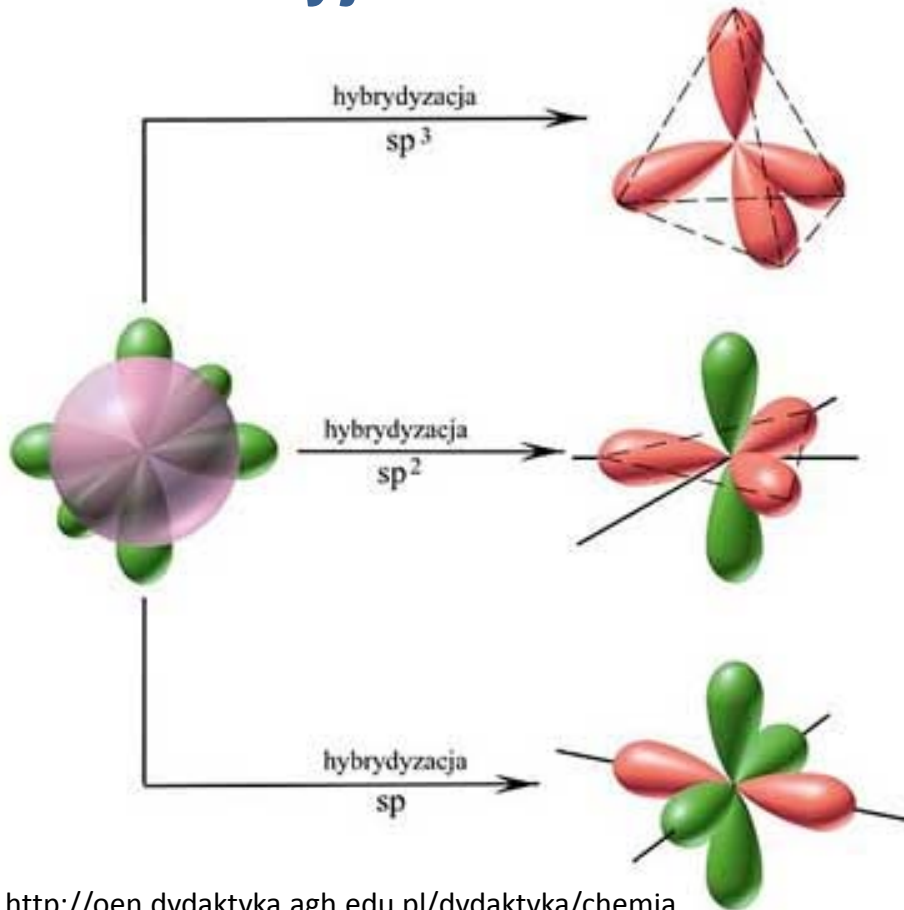
Prof. dr hab. Dariusz Wasik

Uniwersytet Warszawski

2011

Rodzaje wiązań

Kowalencyjne



<http://oen.dydaktyka.agh.edu.pl/dydaktyka/chemia>

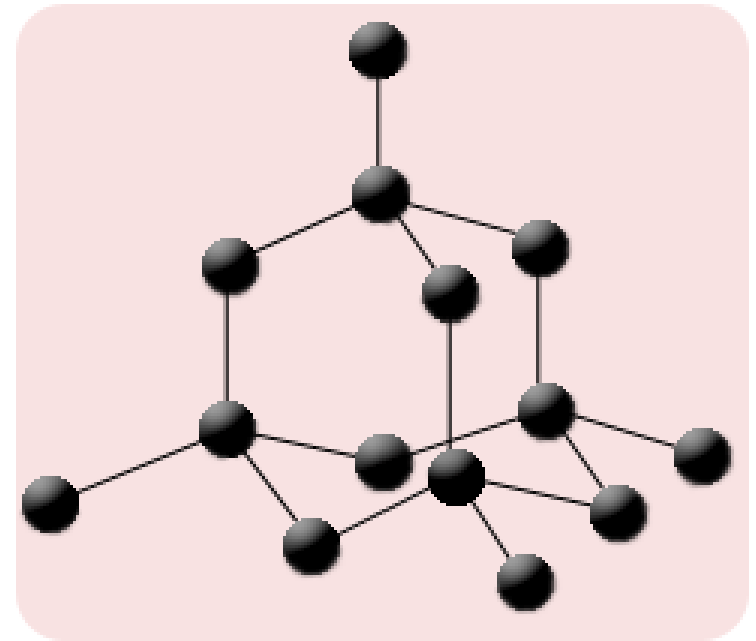
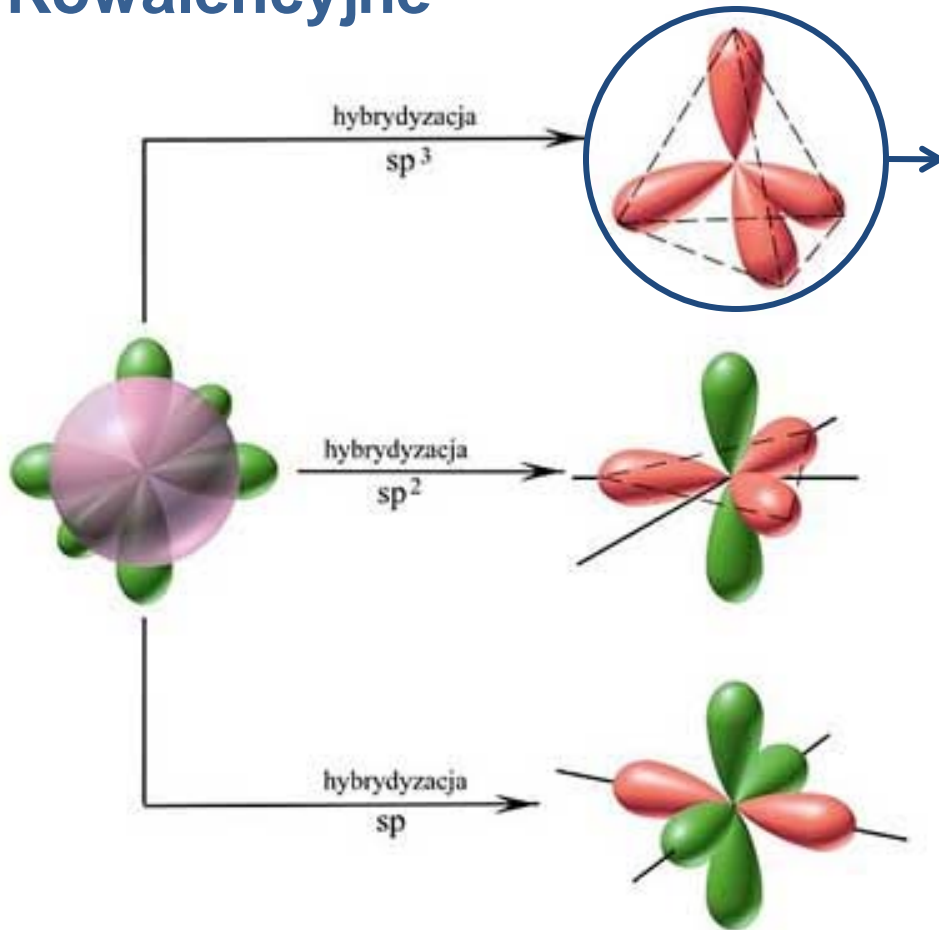
<http://sparkcharts.sparknotes.com/chemistry/organicchemistry1/section2.php>

Atomic orbitals combined	Hybrid orbitals formed	Bonding electron pairs and lone pairs around central atom	VSEPR geometry
1 s orbital & 1 p orbital	sp hybrid (2 orbitals)	2	linear
1 s orbital & 2 p orbitals	sp ² hybrid (3 orbitals)	3	trigonal planar
1 s orbital & 3 p orbitals	sp ³ hybrid (4 orbitals)	4	tetrahedral
1 s orbital & 3 p orbitals & 1 d orbital	dsp ³ hybrid (5 orbitals)	5	trigonal bipyramidal
1 s orbital & 3 p orbitals & 2 d orbitals	d ² sp ³ hybrid (6 orbitals)	6	octahedral

Rodzaje wiązań

Kowalencyjne

Półprzewodniki



Energia wiązania na atom:

C (diament) 7.30 eV

Si 4.64 eV

Ge 3.87 eV

Rodzaje wiązań

Kowalencyjne

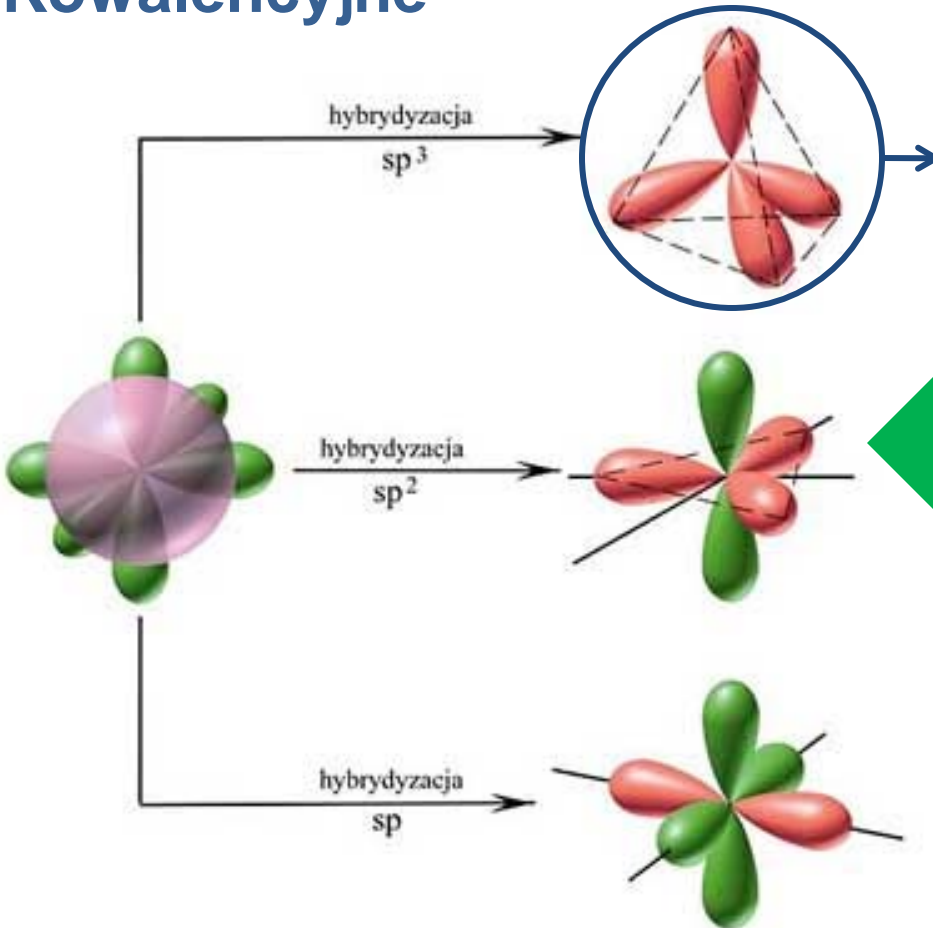
Półprzewodniki

II III IV V VI

Be	B	C	N	O
Mg	Al	Si	P	S
Zn	Ga	Ge	As	Se
Cd	In	Sn	Sb	Te

Jonowość

Jonowość



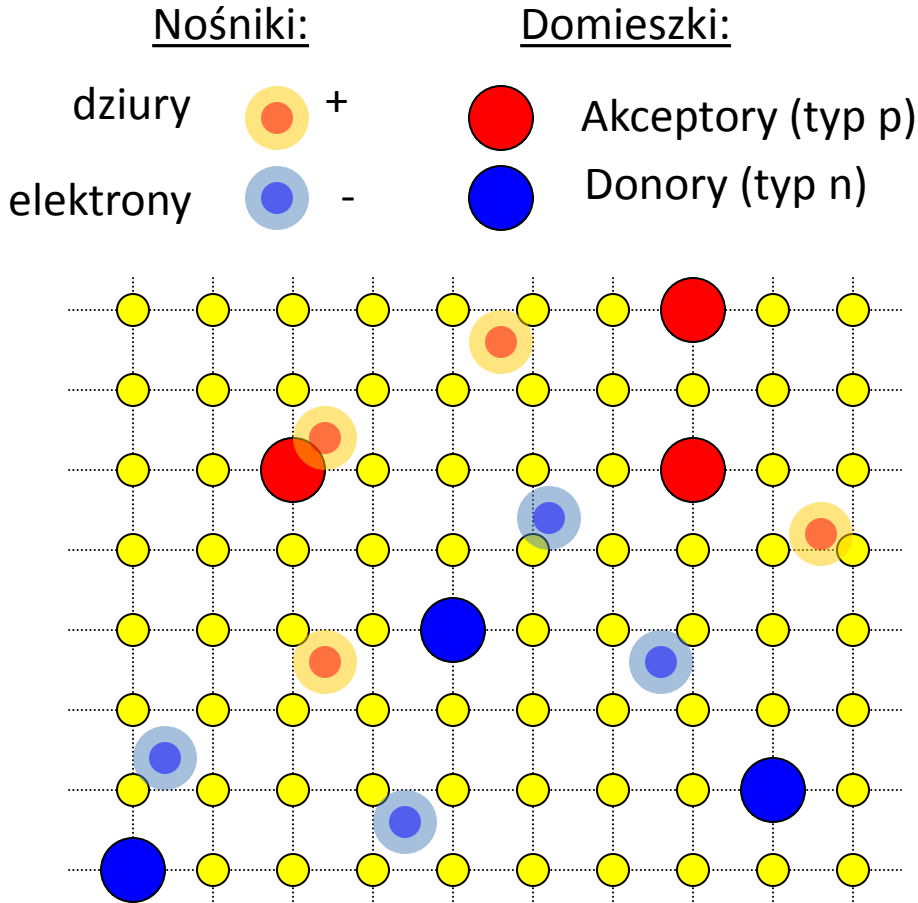
Grupa IV: diament, Si, Ge

Grupy III-V: GaAs, AlAs, InSb, InAs...

Grupy II-VI: ZnSe, CdTe, ZnO, SdS...

Rodzaje wiązań

Półprzewodniki



II	III	IV	V	VI
Be	B	C	N	O
Mg	Al	Si	P	S
Zn	Ga	Ge	As	Se
Cd	In	Sn	Sb	Te

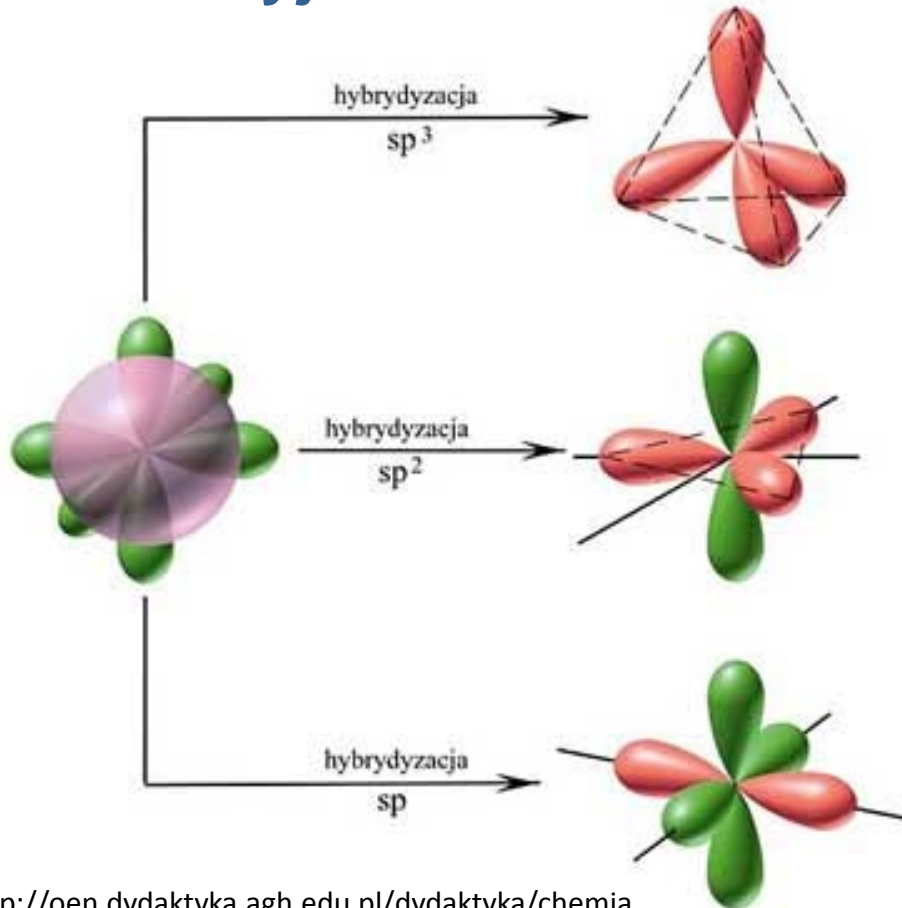
Grupa IV: diament, Si, Ge

Grupy III-V: GaAs, AlAs, InSb, InAs...

Grupy II-VI: ZnSe, CdTe, ZnO, SdS...

Rodzaje wiązań

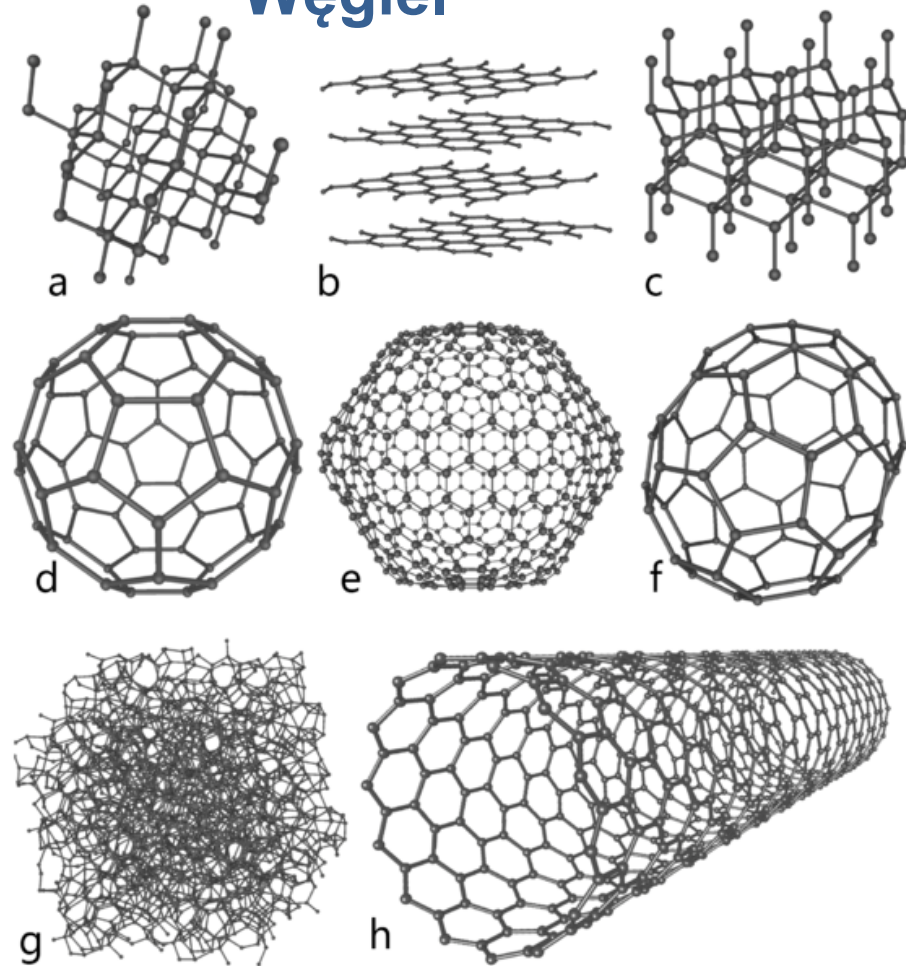
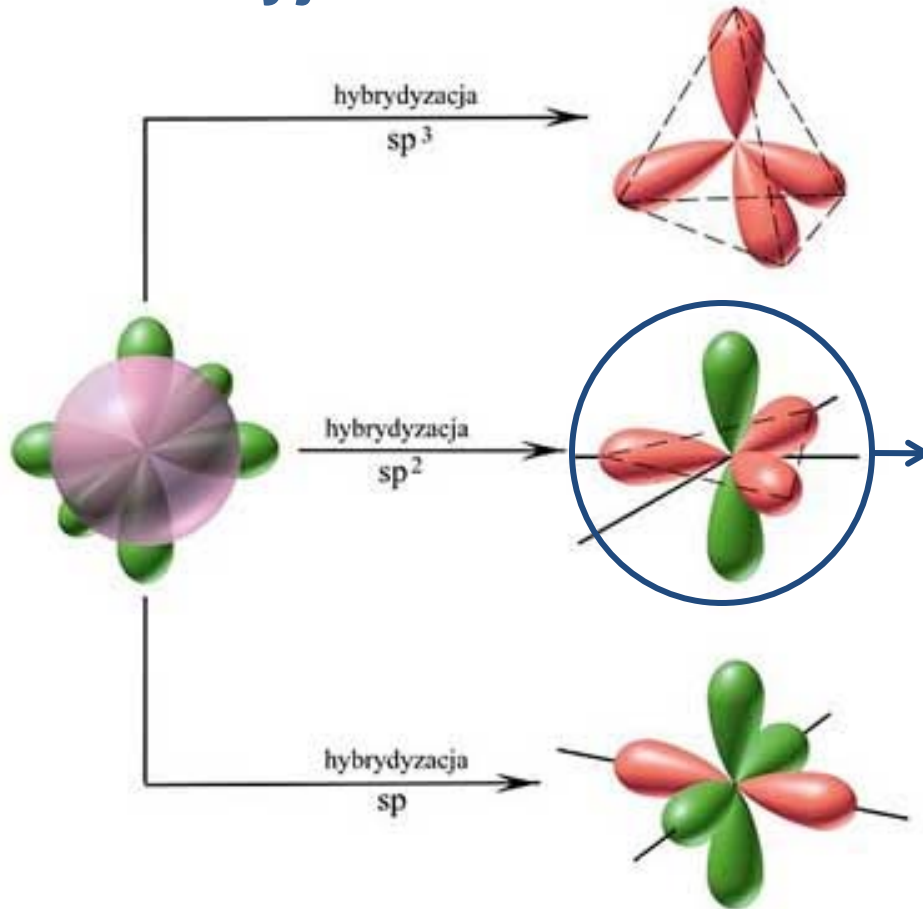
Kowalencyjne



Rodzaje wiązań

Kowalencyjne

Węgiel



Odmiany alotropowe węgla: (Wikipedia)

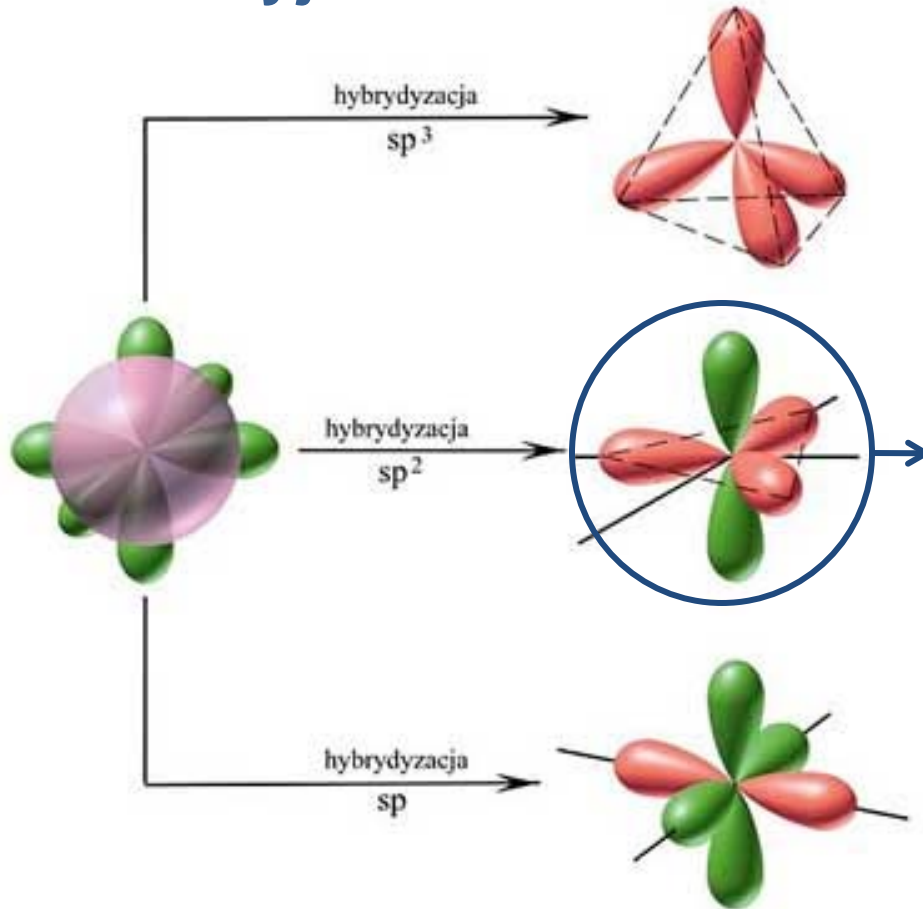
a) diament, b) grafit, c) lonsdaleit

d) fuleren C60 e) fuleren C540 f) fuleren C70

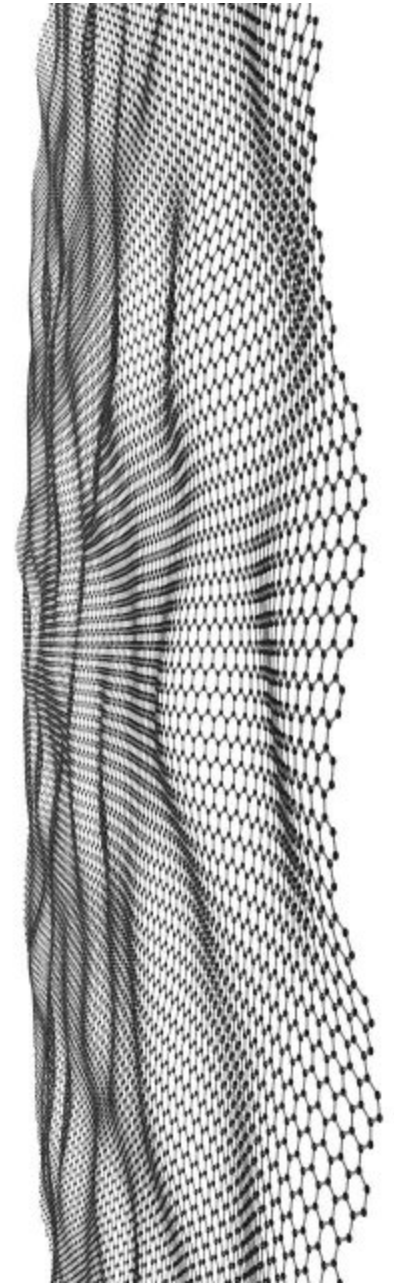
g) węgiel amorficzny, h) nanorurka

Rodzaje wiązań

Kowalencyjne



Grafen

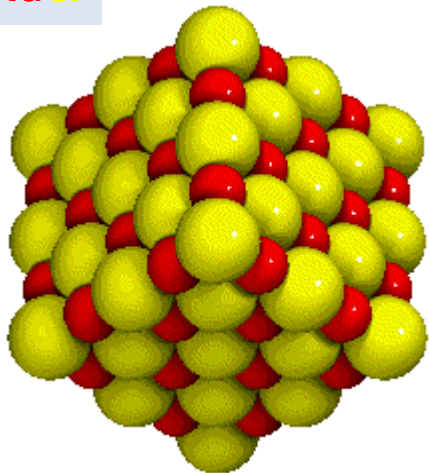


Rodzaje wiązań

Wiązanie jonowe

Elektroujemność (ozn. **C**) - zdolność atomu w cząsteczce do przyciągania (przyłączania) elektronu. W skrajnym przypadku, gdy elektroujemności obu pierwiastków bardzo się różnią (np. Li i F), dochodzi do pełnego przeskoiku elektronów na bardziej elektroujemny atom, co prowadzi do powstania wiązania jonowego ($\Delta C \geq 1,7$).

NaCl



Tablica 2.4. Wartości elektroujemności (wg Paulinga) dla kilku ważniejszych pierwiastków (dla H przyjęto 2,1)

I	II	III	IV	V	VI	VII
Li 1,0	Be 1,5	B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0
Na 0,9	Mg 1,2	Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0
K 0,8	Ca 1,0	Ga 1,6	Ge 1,7	As 2,0	Se 2,4	Br 2,8
Rb 0,8			Sn 1,7			J 2,4

Jonowość

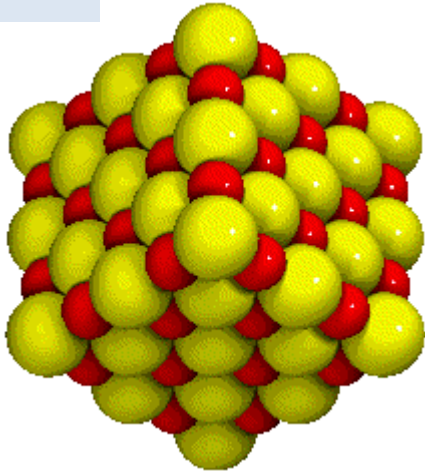
Jonowość

Rodzaje wiązań

Wiązanie jonowe

Elektroujemność (ozn. χ) - zdolność atomu w cząsteczce do przyciągania (przyłączenia) elektronu. W skrajnym przypadku, gdy elektroujemności obu pierwiastków bardzo się różnią (np. Li i F), dochodzi do pełnego przeskoju elektronów na bardziej elektroujemny atom, co prowadzi do powstania wiązania jonowego ($|\chi_1 - \chi_2| \geq 1,7$).

NaCl



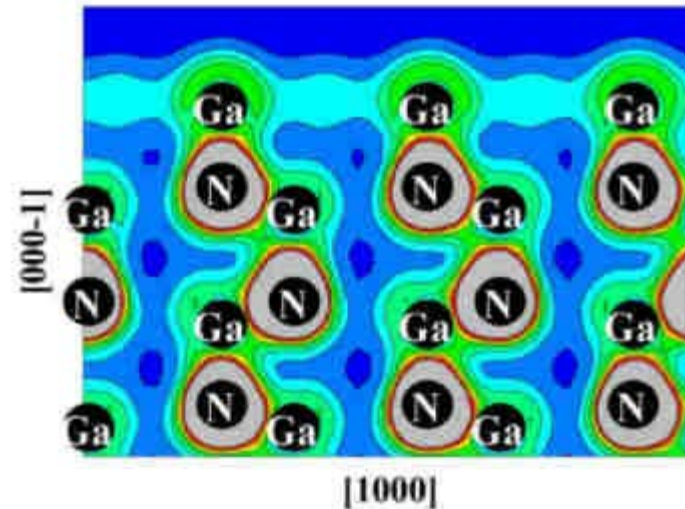
Umownie:

Wiązanie kowalencyjne $|\chi_1 - \chi_2| \leq 0,4$

Wiązanie polarne $0,4 \leq |\chi_1 - \chi_2| \leq 1,7$

Wiązanie jonowe $|\chi_1 - \chi_2| \geq 1,7$

GaN (000 $\bar{1}$)

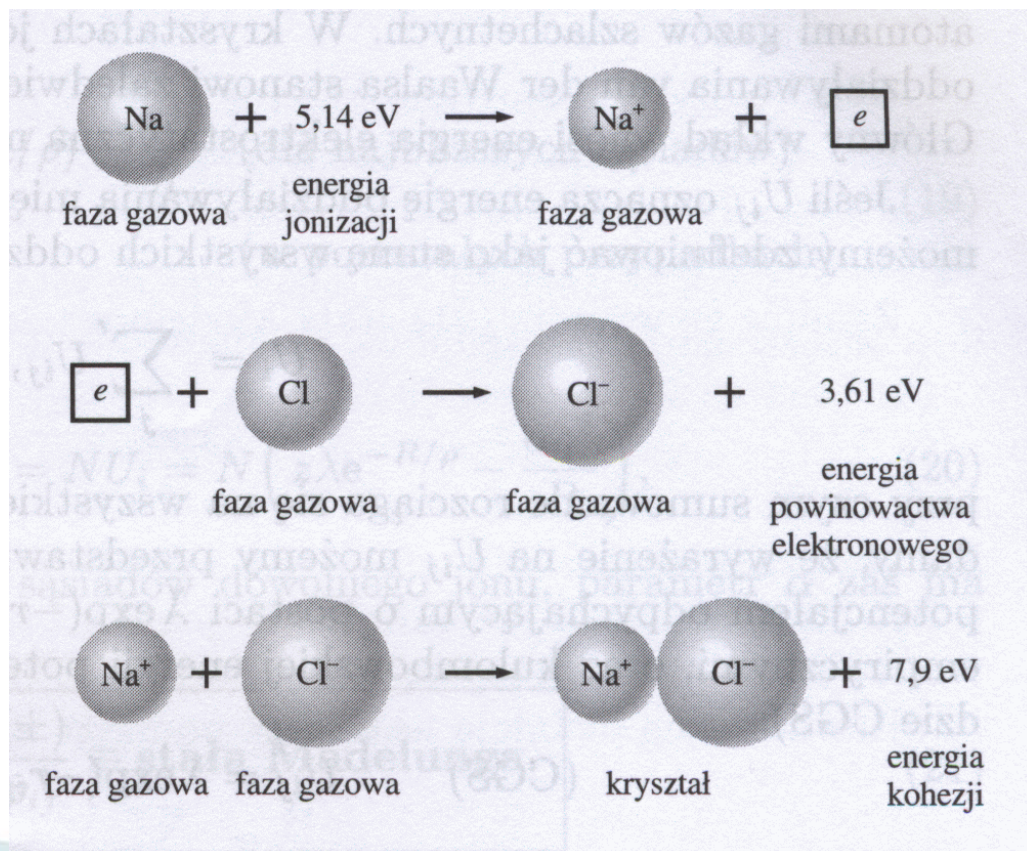
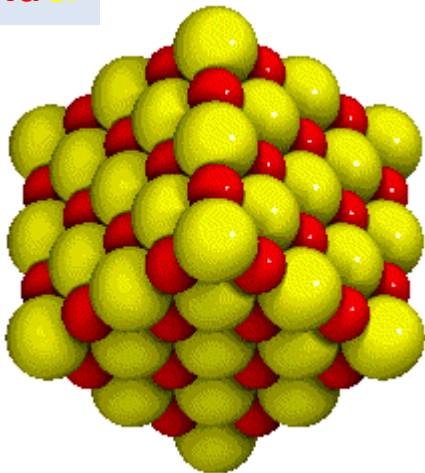


Rodzaje wiązań

Wiązanie jonowe

Elektroujemność (ozn. **C**) - zdolność atomu w cząsteczce do przyciągania (przyłączania) elektronu. W skrajnym przypadku, gdy elektroujemności obu pierwiastków bardzo się różnią (np. Li i F), dochodzi do pełnego przeskoiku elektronów na bardziej elektroujemny atom, co prowadzi do powstania wiązania jonowego ($\chi_1 \geq 1,7$).

NaCl



Rodzaje wiązań

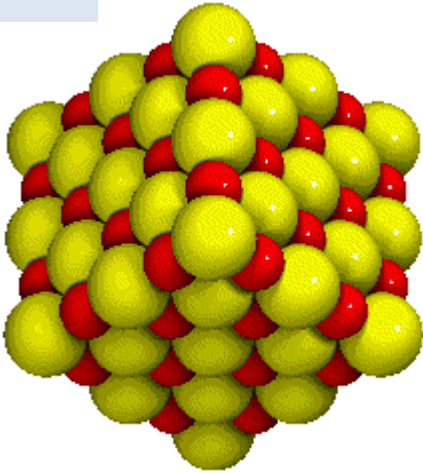
Wiązanie jonowe

W kryształach jonowych jest niemożliwe, żeby elektrony poruszały się prawie swobodnie pomiędzy jonami, chyba że dostarczymy dużą energię. Dlatego ciała stałe o wiązaniach jonowych są nieprzewodzące. W wysokich temperaturach – przewodnictwo jonowe.

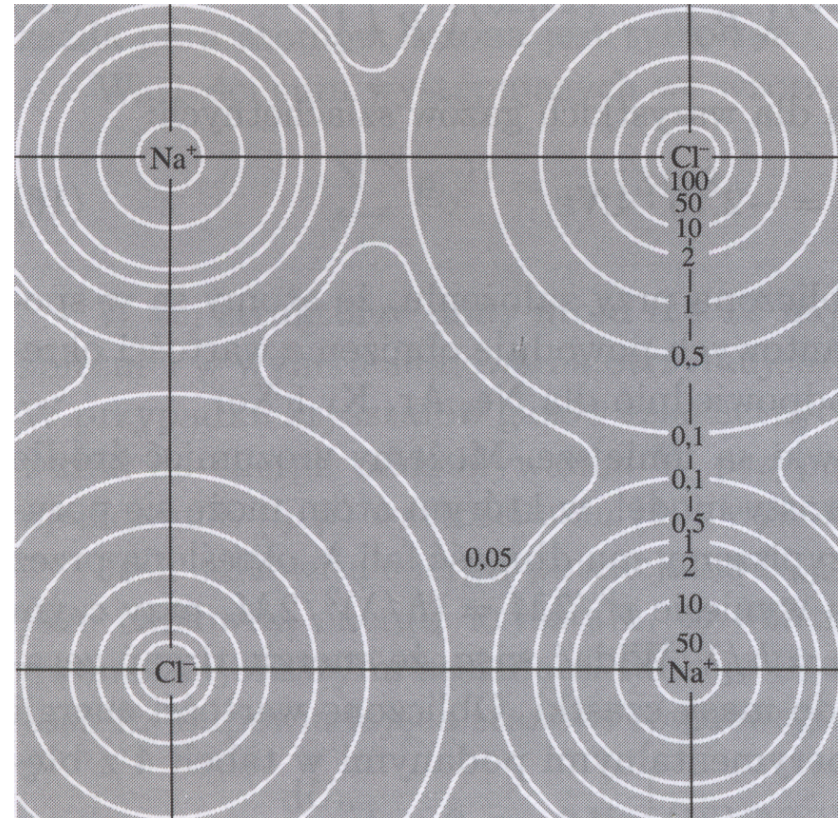
Energia wiązania na parę jonów:

NaCl	7.95 eV
NaI	7.10 eV
KBr	6.92 eV

NaCl



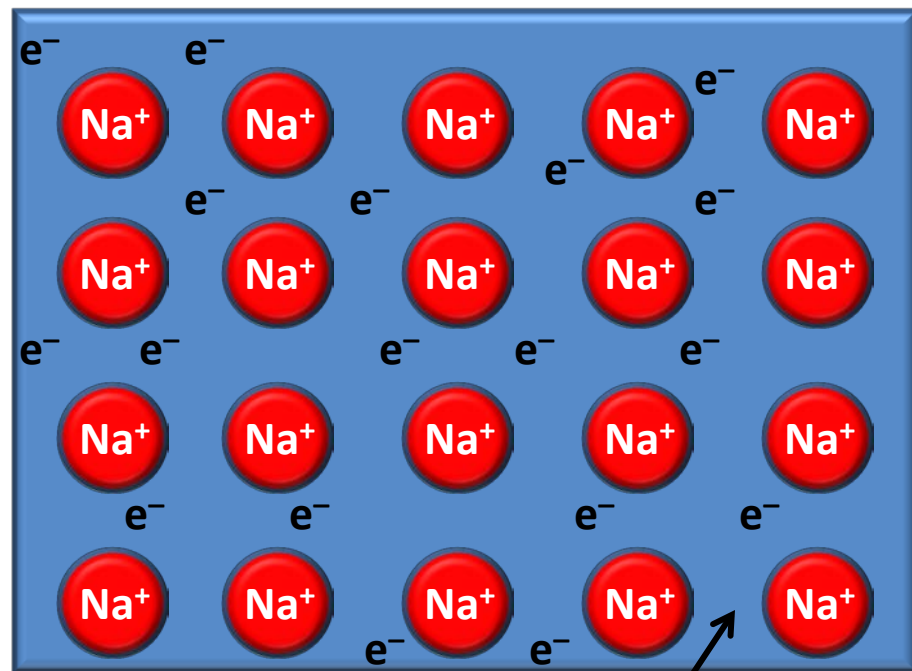
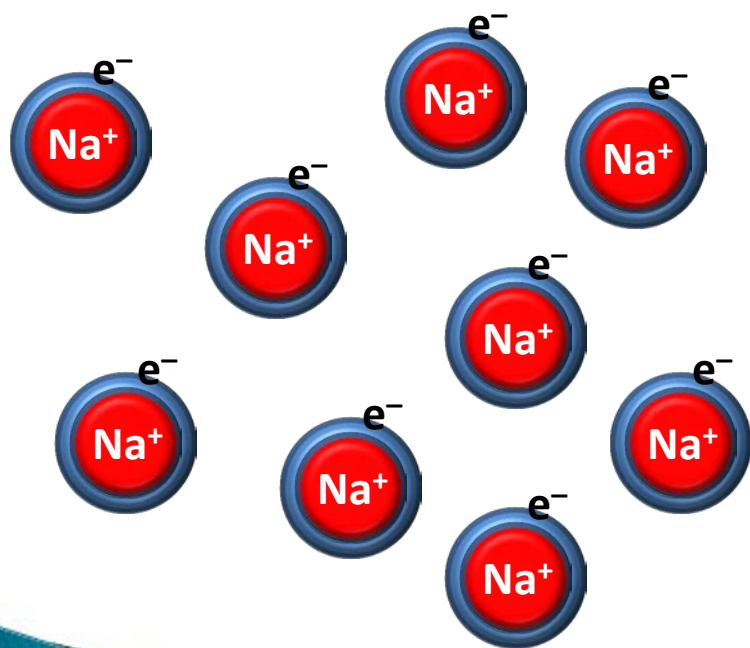
Rozkład gęstości ładunku w płaszczyźnie podstawowej NaCl na podst. badań rentgenowskich.



Rodzaje wiązań

Wiązanie metaliczne

Wiązanie chemiczne w metalach, utworzone w wyniku elektrodynamicznego oddziaływania między dodatnio naładowanymi rdzeniami atomowymi, które znajdują się w węzłach sieci krystalicznej, a ujemnie naładowaną **plazmą elektronową (elektronami zdelokalizowanymi, gazem elektronowym)**. Podobne do wiązania kowalencyjnego, ale elektrony tworzące wiązanie są wspólne dla wielkiej liczby atomów.



Gaz elektronowy

Rodzaje wiązań

Wiązanie metaliczne

Wiązanie chemiczne w metalach, utworzone w wyniku elektrodynamicznego oddziaływania między dodatnio naładowanymi rdzeniami atomowymi, które znajdują się w węzłach sieci krystalicznej, a ujemnie naładowaną **plazmą elektronową (elektronami zdelokalizowanymi, gazem elektronowym)**. Podobne do wiązania kowalencyjnego, ale elektrony tworzące wiązanie są wspólne dla wielkiej liczby atomów.

Key:

- Metals
- Nonmetals
- Metalloids

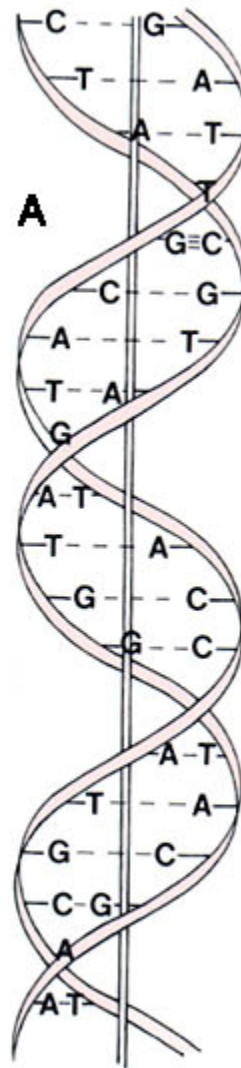
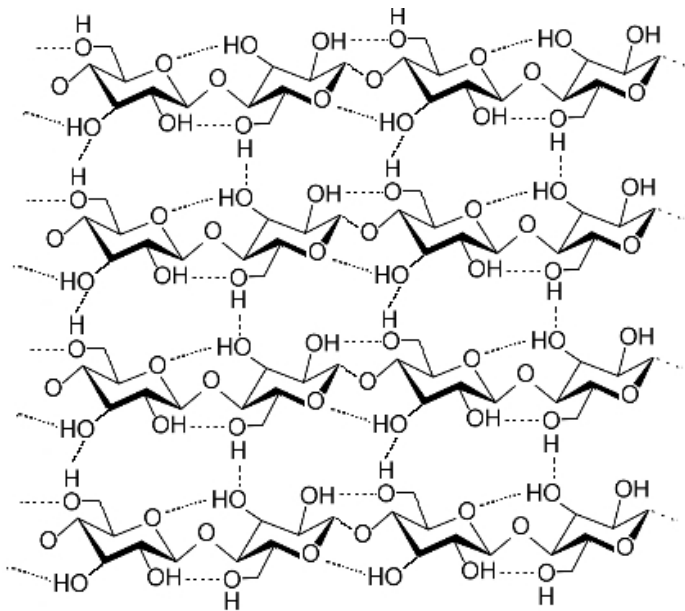
1A (1)	2A (2)																	7A (17)	8A (18)	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne			
Na	Mg	3B (3)	4B (4)	5B (5)	6B (6)	7B (7)	8B (8) (9) (10)			1B (11)	2B (12)	Al	Si	P	S	Cl	Ar			
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr			
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe			
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	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					
			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				

Rodzaje wiązań

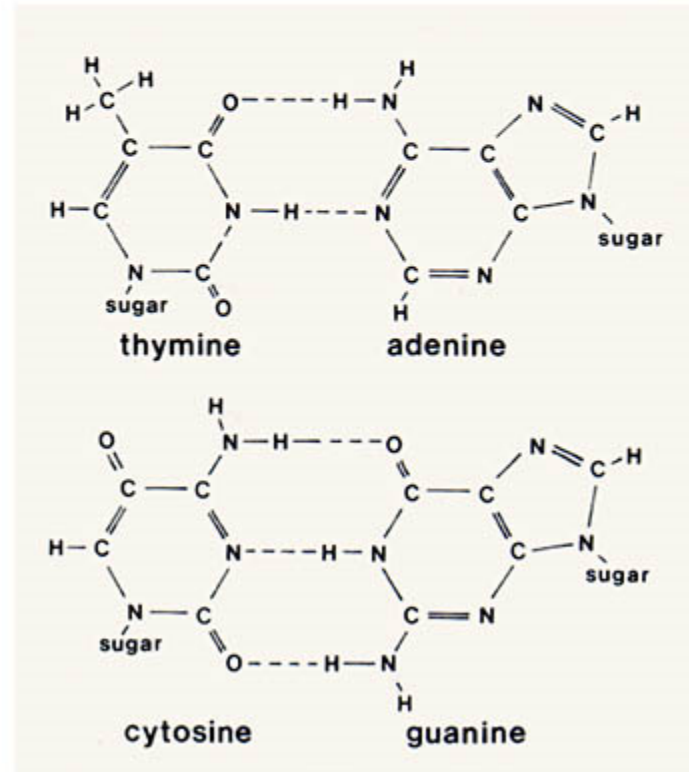
Wiązanie wodorowe

Uwspólnienie wodoru

Celuloza



B



C



Rodzaje wiązań

Wiązanie van der Waalsa

Ne, Ar, Kr, Xe – oddziaływanie wyindukowanych momentów dipolowych.



Struktura krystaliczna

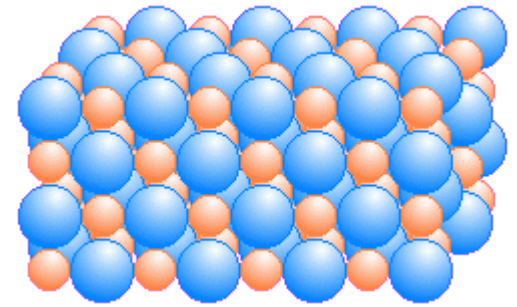
Kryształy

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

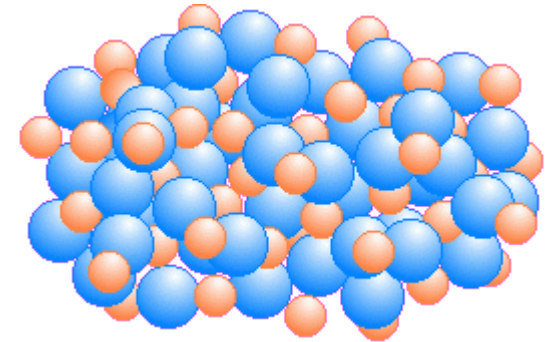
wektory translacji prymitywnych

$$V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{T})$$

- Sieć (węzły sieci) jest regularnym i periodycznym układem punktów w przestrzeni. Jest ona matematyczną abstrakcją; ze strukturą krystaliczną mamy do czynienia jedynie wtedy, gdy baza atomów jest przyporządkowana jednoznacznie do każdego węzła sieci.



Kryształ



Ciało amorficzne

Struktura krystaliczna

Kryształy

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

wektory translacji prymitywnych



Struktura krystaliczna

Kryształy

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

wektory translacji prymitywnych



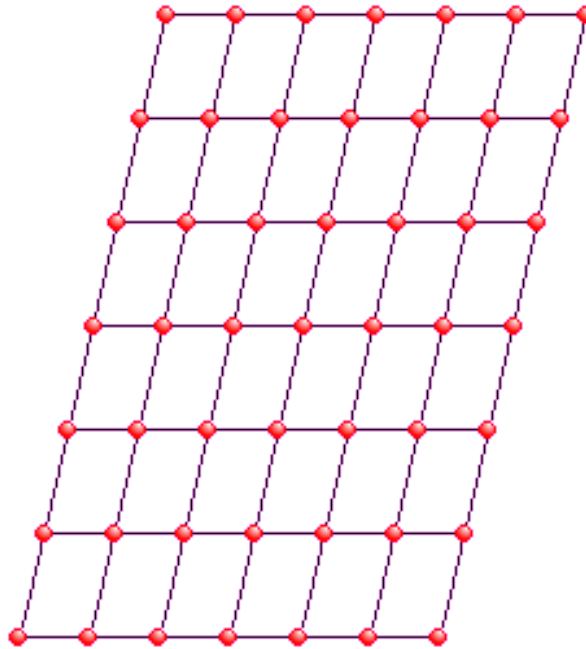
Struktura krystaliczna

Kryształy

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

wektory translacji prymitywnych

- Wektory translacji prymitywnych nie są wybrane jednoznacznie!



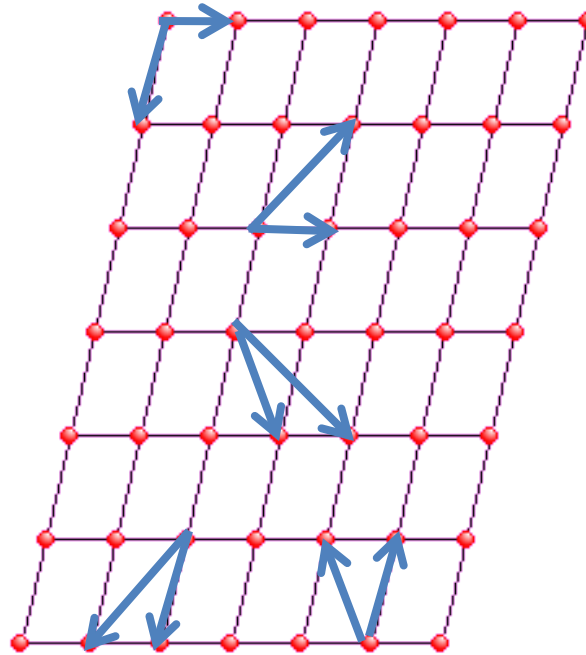
Struktura krystaliczna

Kryształy

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

wektory translacji prymitywnych

- Wektory translacji prymitywnych nie są wybrane jednoznacznie!



Struktura krystaliczna

Kryształy

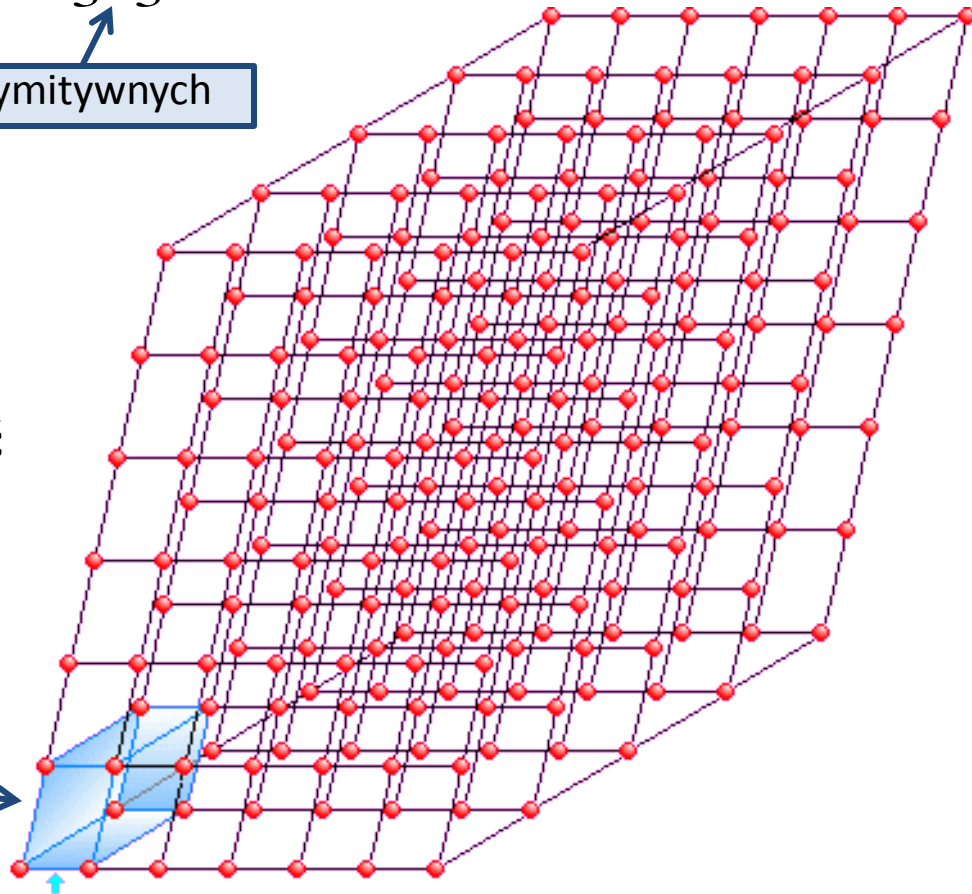
$$\vec{T} = n_1 \vec{t}_1 + n_2 \vec{t}_2 + n_3 \vec{t}_3$$

wektory translacji prymitywnych

- Można na wiele sposobów wybrać komórkę elementarną. Zwykle chcemy, żeby komórka taka: miała możliwie **najwyższą symetrię, najmniejszą objętość**

- **Komórka prosta:** komórka elementarna o najmniejszej objętości

Komórka prosta



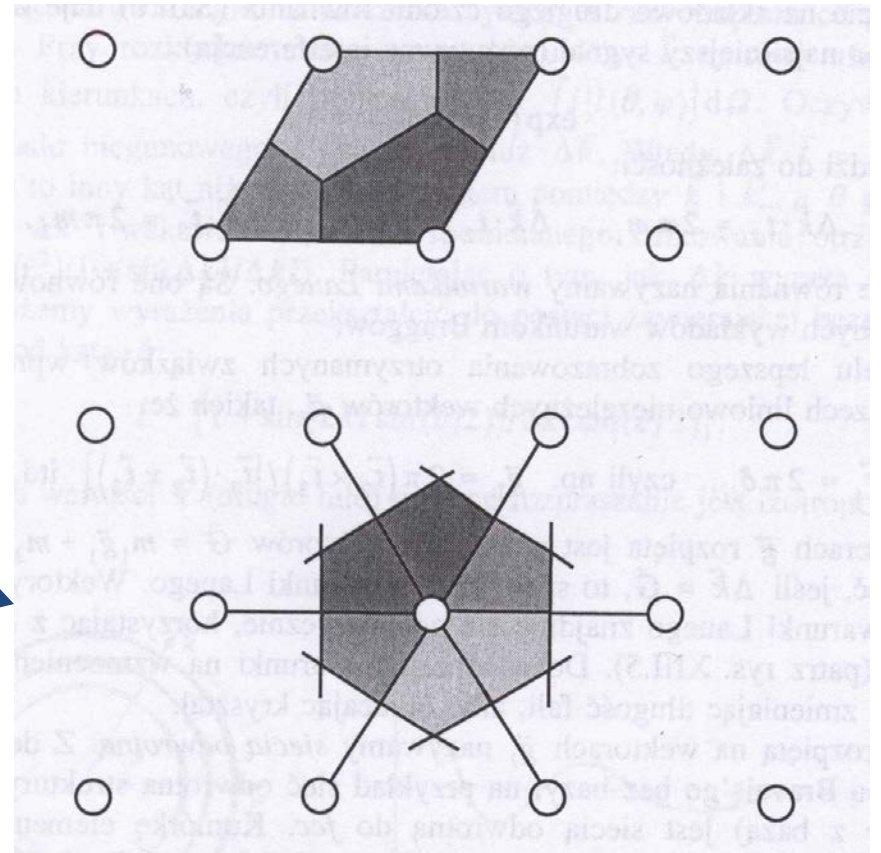
Struktura krystaliczna

Kryształy

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

wektory translacji prymitywnych

Komórka Wignera-Seitza

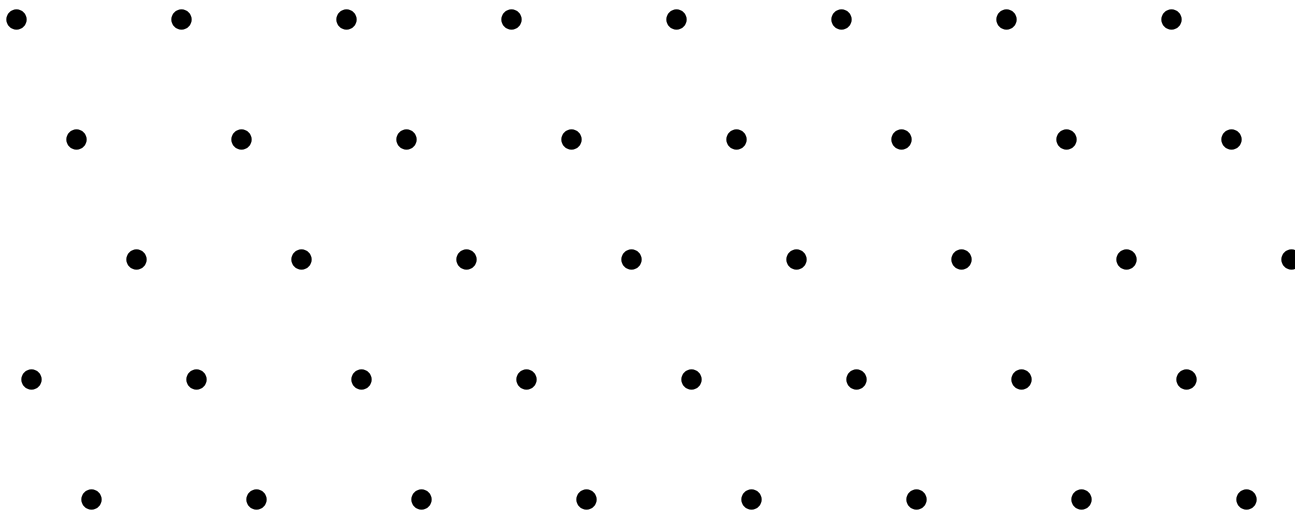


Struktura krystaliczna

Kryształy

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

wektory translacji prymitywnych



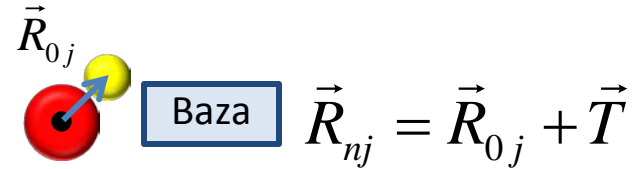
Bazą może być pojedynczy atom, jon, zbiór atomów, np. dla białek 10^5 .

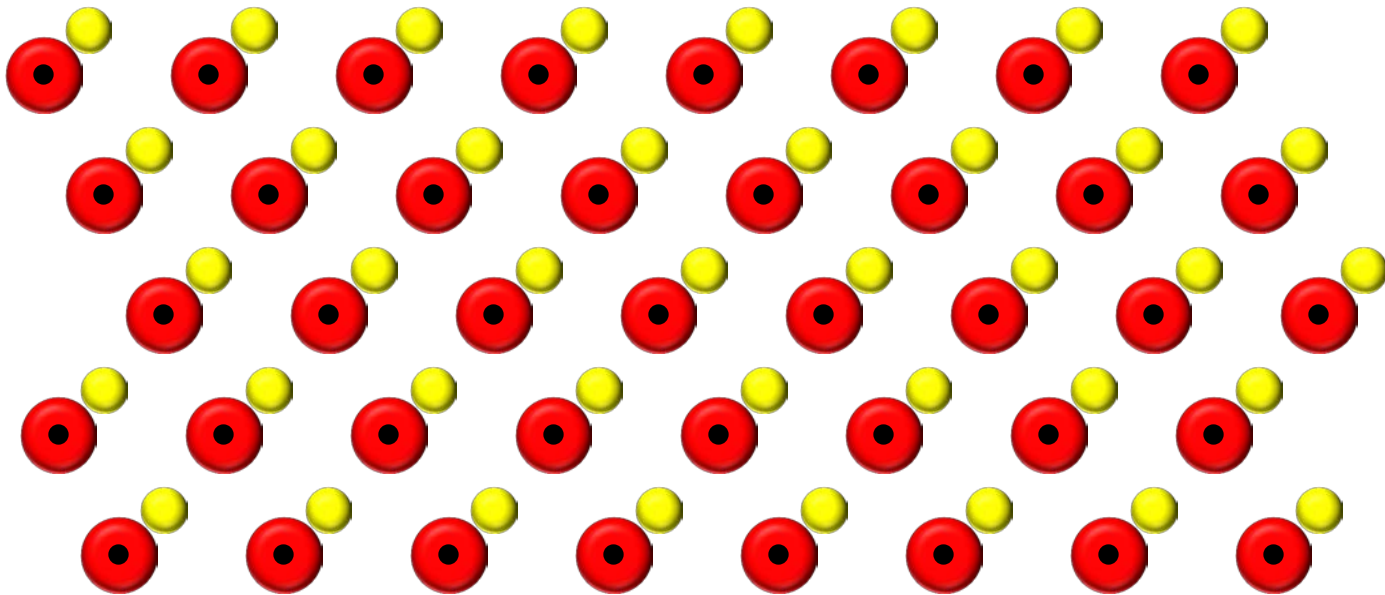
Struktura krystaliczna

Kryształy

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

wektory translacji prymitywnych

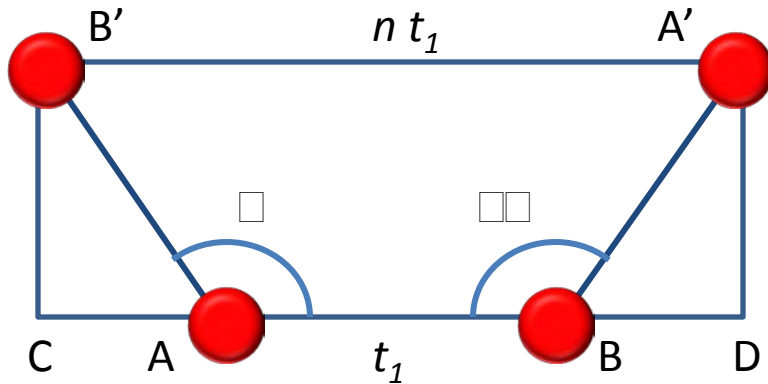

$$\vec{R}_{nj} = \vec{R}_{0j} + \vec{T}$$



Bazą może być pojedynczy atom, jon, zbiór atomów, np. dla białek 10^5 .

Struktura krystaliczna

Kryształy



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

$$\cos\varphi = (1 - n) / 2$$

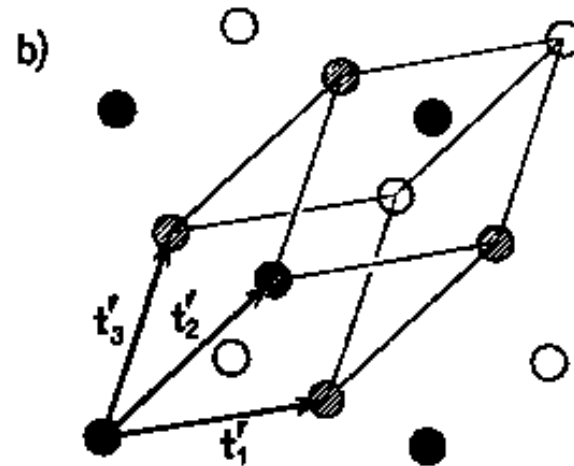
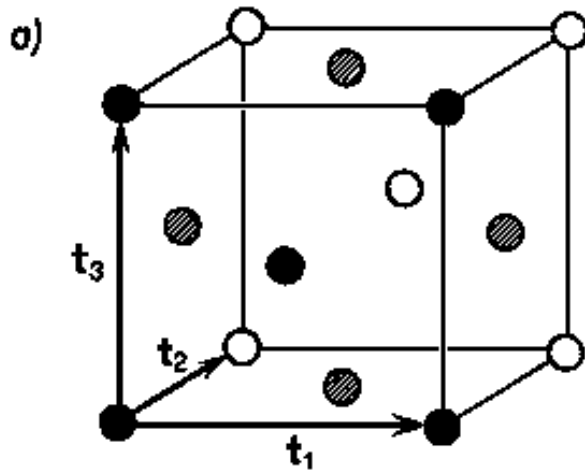
n	$\cos\varphi$	φ	Obrót
-1	1	0°	ε
0	1/2	60°	C_6
+1	0	90°	C_4
+2	-1/2	120°	C_3
+3	-1	180°	C_2

Struktura krystaliczna

Sieci Bravais

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

wektory translacji prymitywnych



Dwa sposoby wyboru komórki elementarnej w sieci kubicznej centrowanej na ścianach: a) komórka o wysokiej symetrii, b) komórka prosta

Struktura krystaliczna

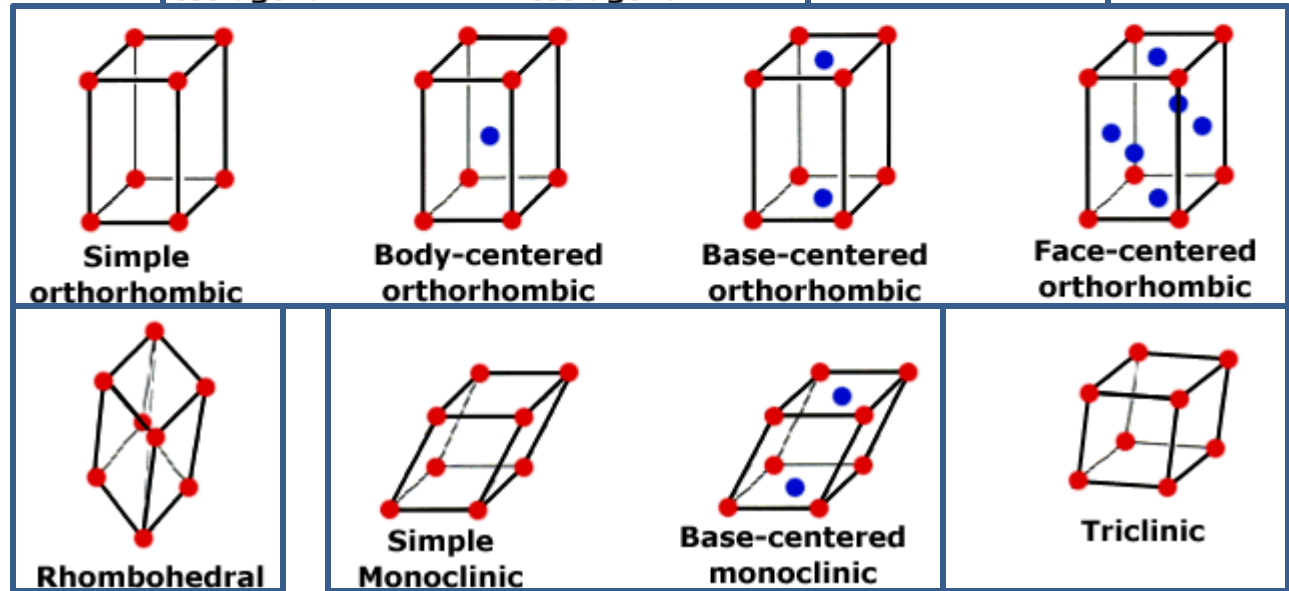
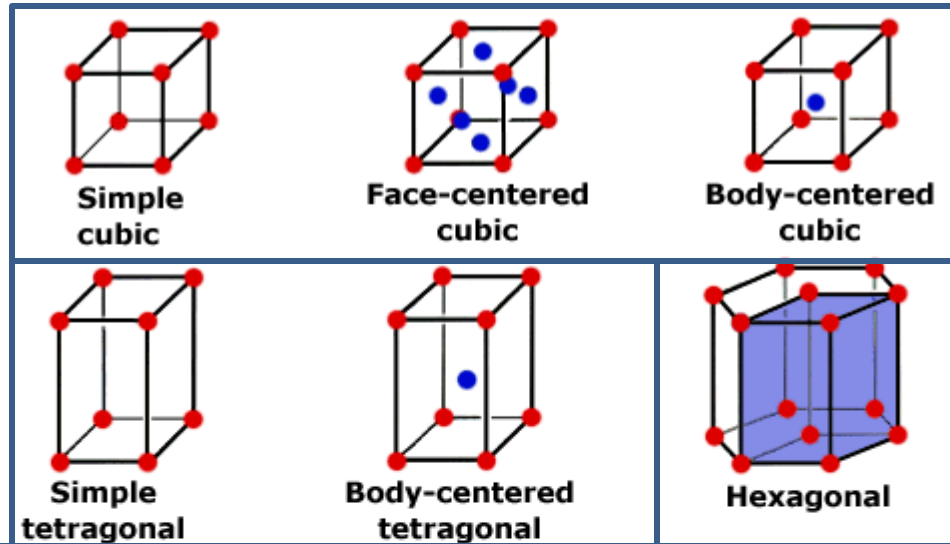
Sieci Bravais

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

Tworzą one 7 układów krystalograficznych



Auguste Bravais
1811-1863



Struktura krystaliczna

Sieci Bravais

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

Tworzą one 7 układów krystalograficznych

$$a = b \neq c$$

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

$$a \neq b \neq c$$

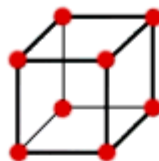
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Romboedryczna

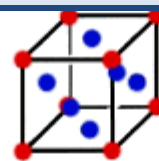
$$a = b = c$$

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

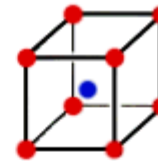
Regularna



Simple cubic



Face-centered cubic

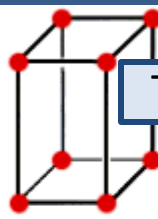


Body-centered cubic

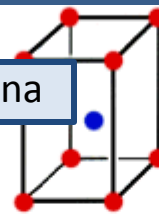
$$a = b = c$$

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

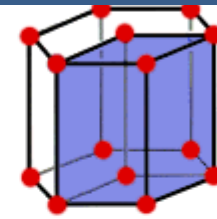
Tetragonalna



Simple tetragonal



Body-centered tetragonal



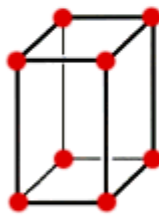
Heksagonalna

$$a = b \neq c$$

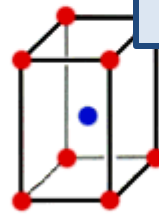
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

$$\gamma = 120^\circ$$

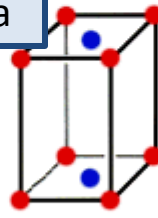
Rombowa



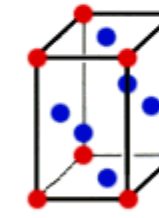
Simple orthorhombic



Body-centered orthorhombic

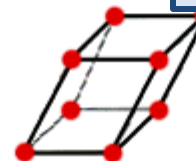


Base-centered orthorhombic

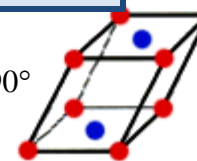


Face-centered orthorhombic

Jednoskośna



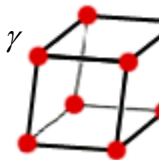
Simple Monoclinic



Base-centered monoclinic

$$a \neq b \neq c$$

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



Trójskośna

Rhombohedral

Struktura krystaliczna

Sieci Bravais

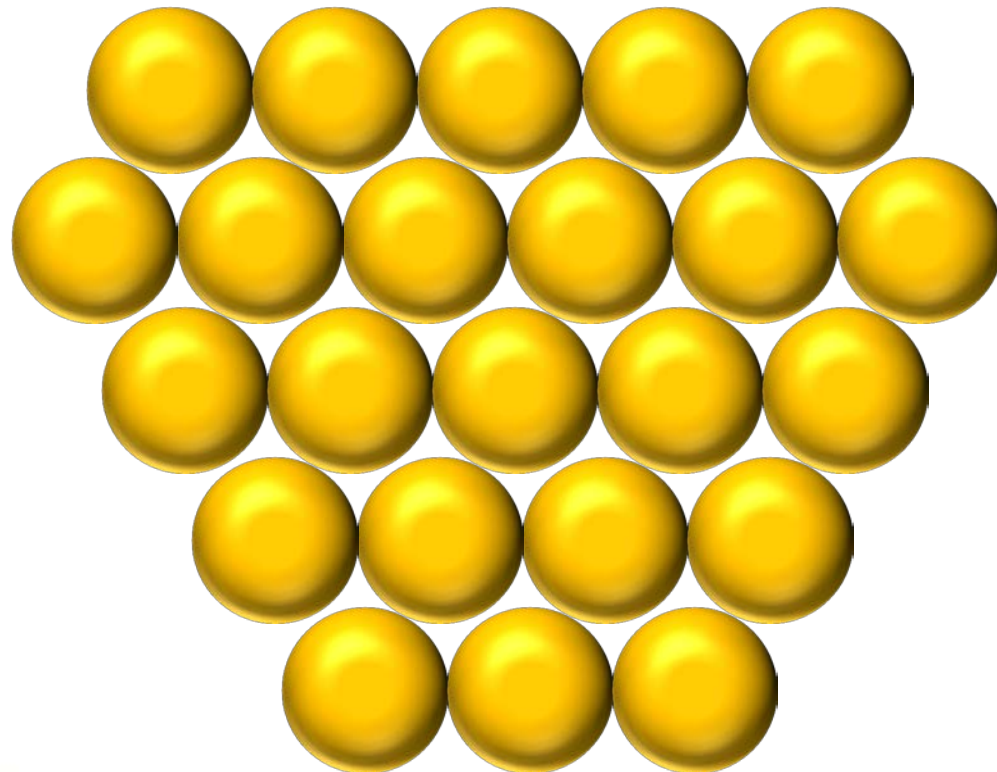
Przykład: struktura najgęstszego upakowania



Struktura krystaliczna

Sieci Bravais

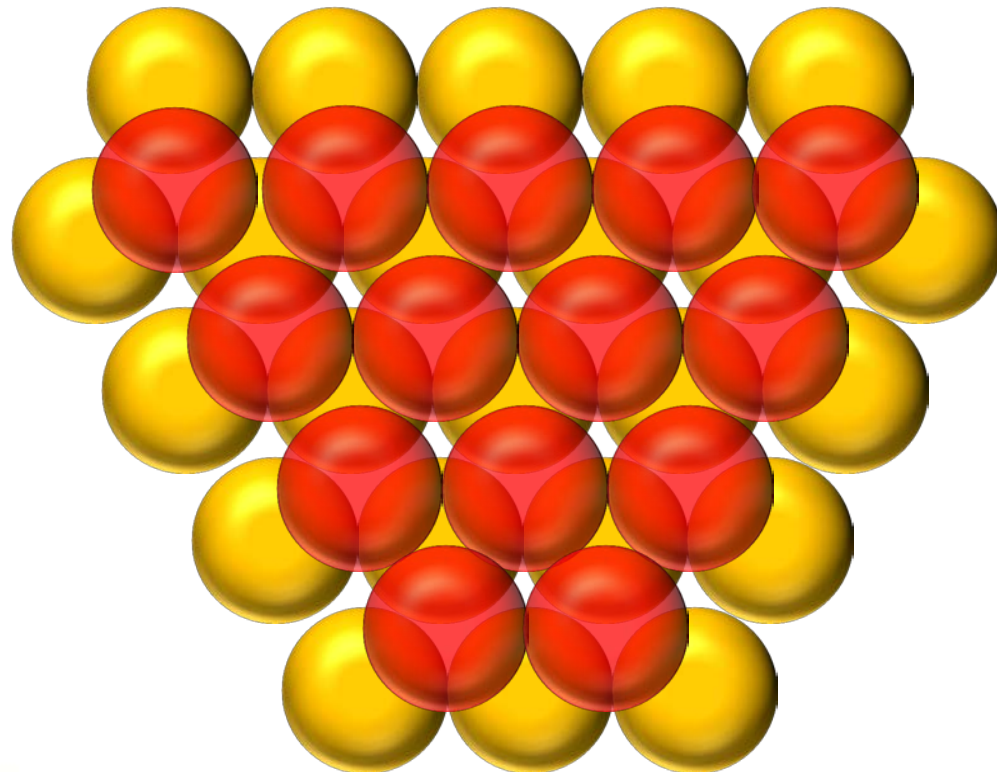
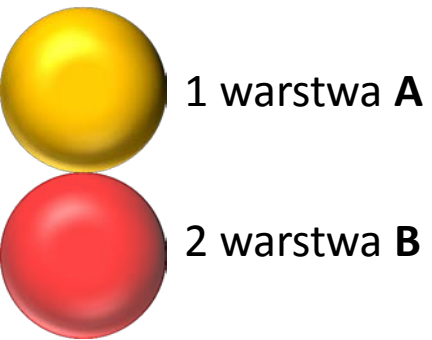
Przykład: struktura najgęstszego upakowania



Struktura krystaliczna

Sieci Bravais

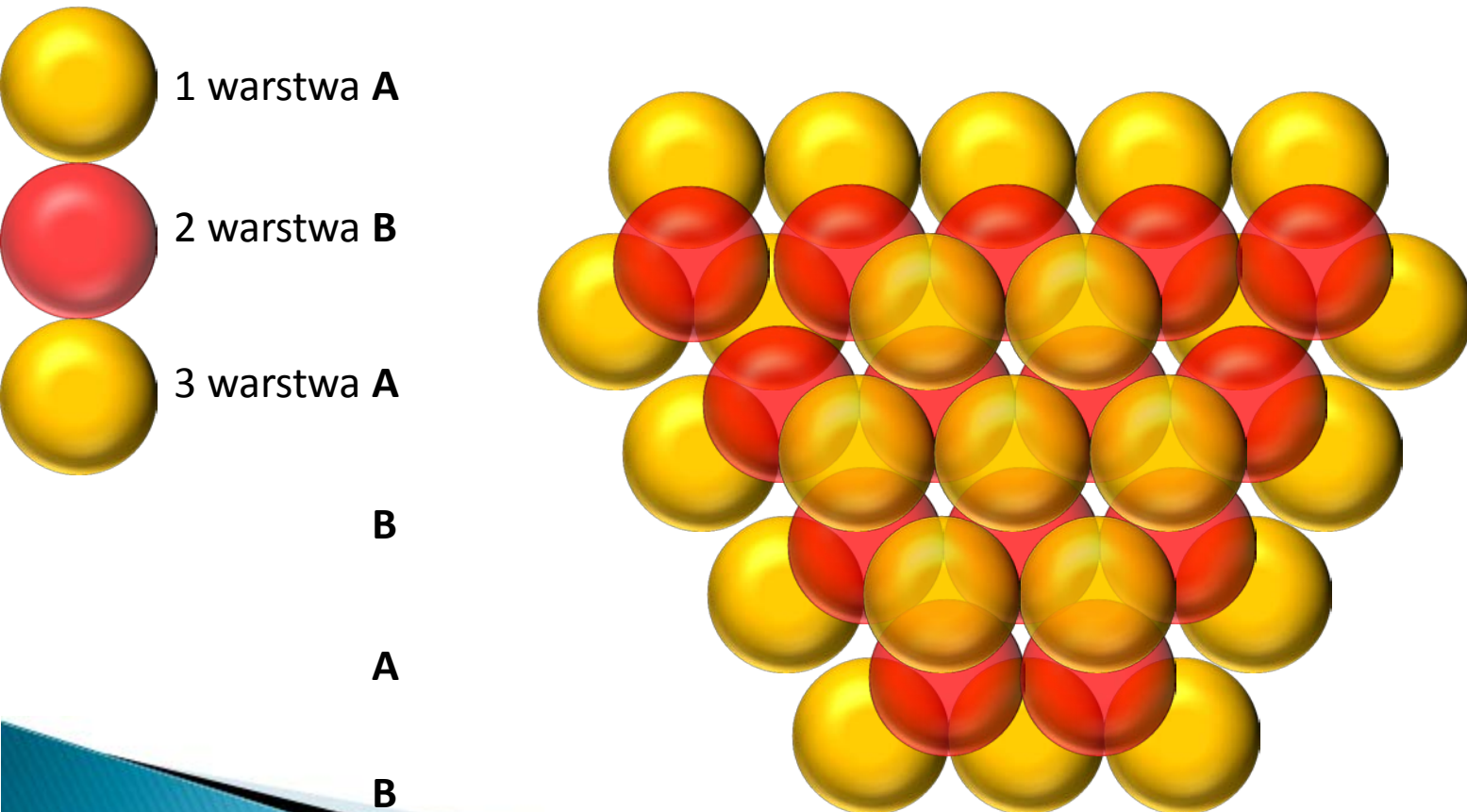
Przykład: struktura najgęstszego upakowania



Struktura krystaliczna

Sieci Bravais

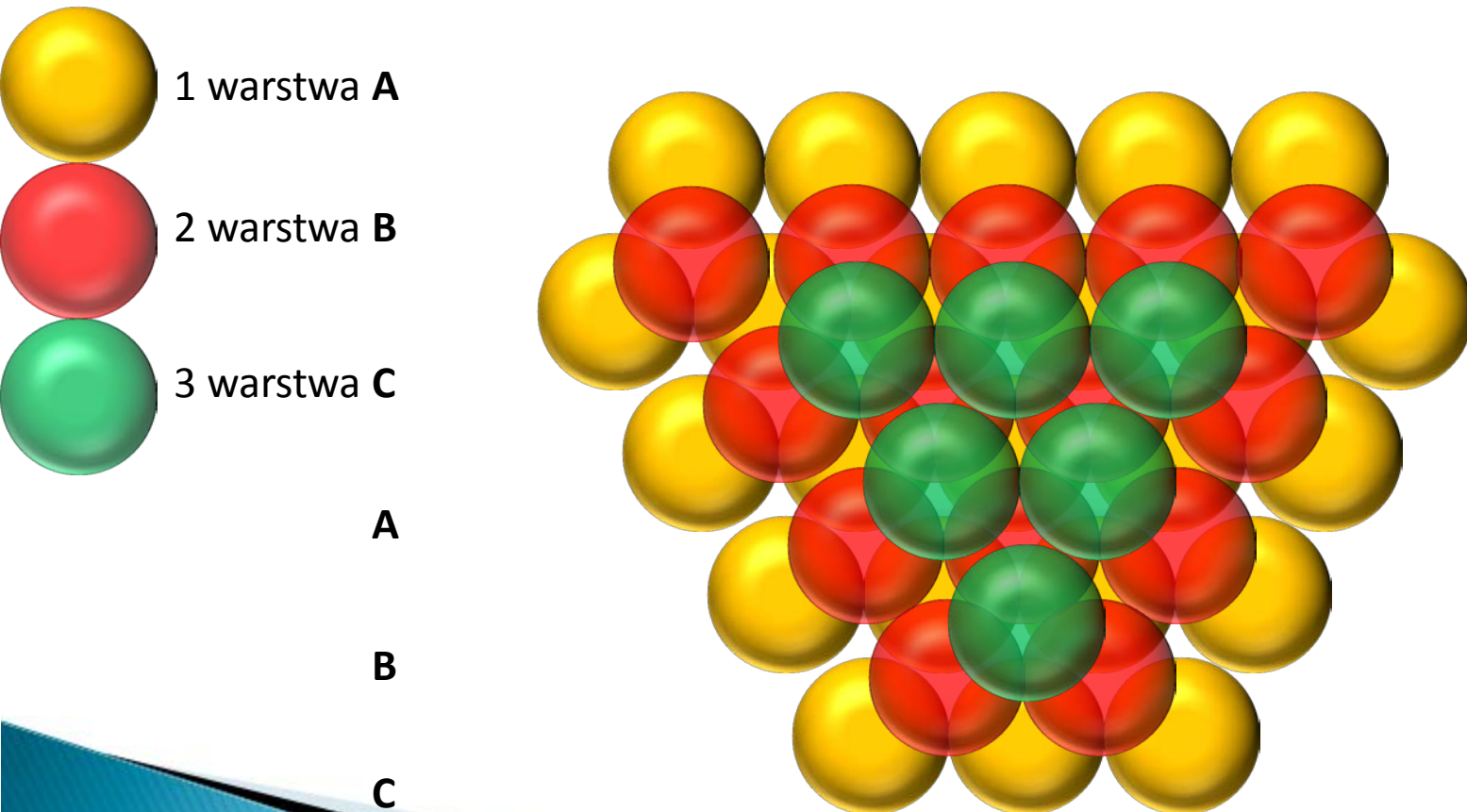
Przykład: struktura najgęstszego upakowania



Struktura krystaliczna

Sieci Bravais

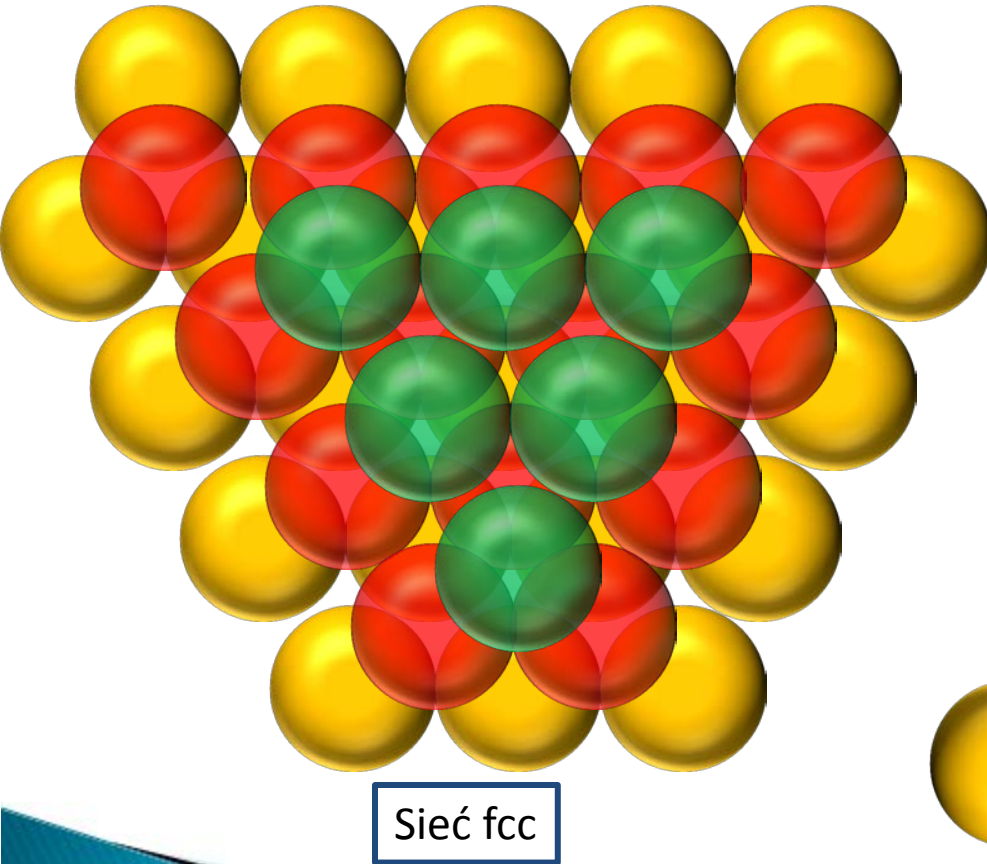
Przykład: struktura najgęstszego upakowania



Struktura krystaliczna

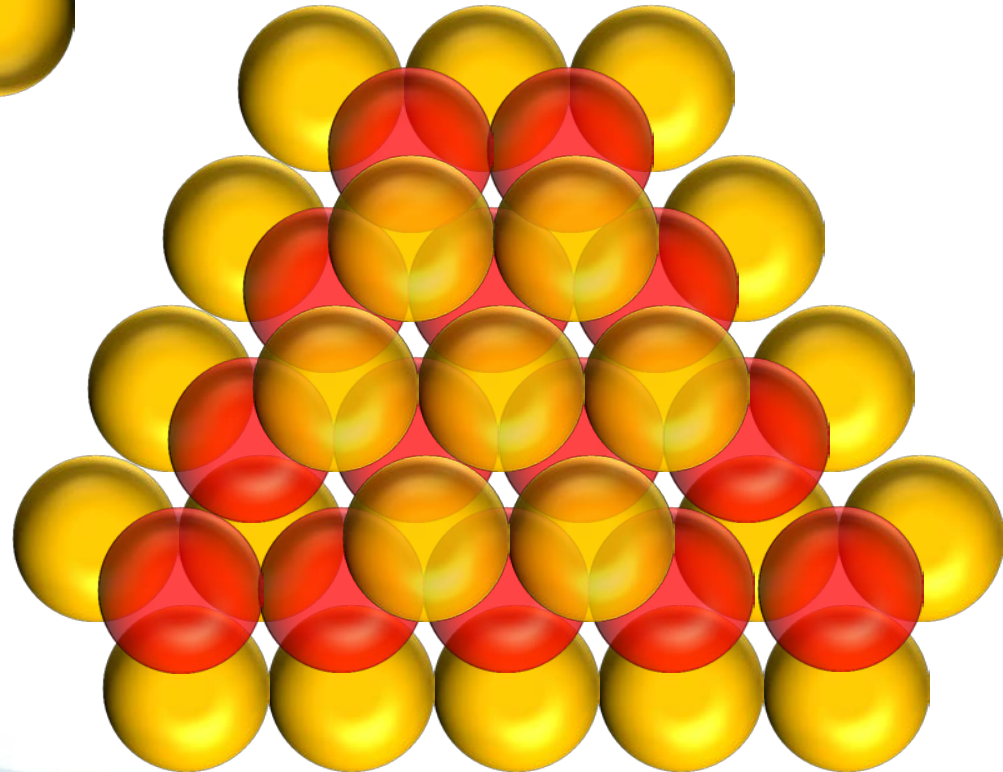
Sieci Bravais

Przykład: struktura najgęstszego upakowania



hexagonal close-packed (HCP)

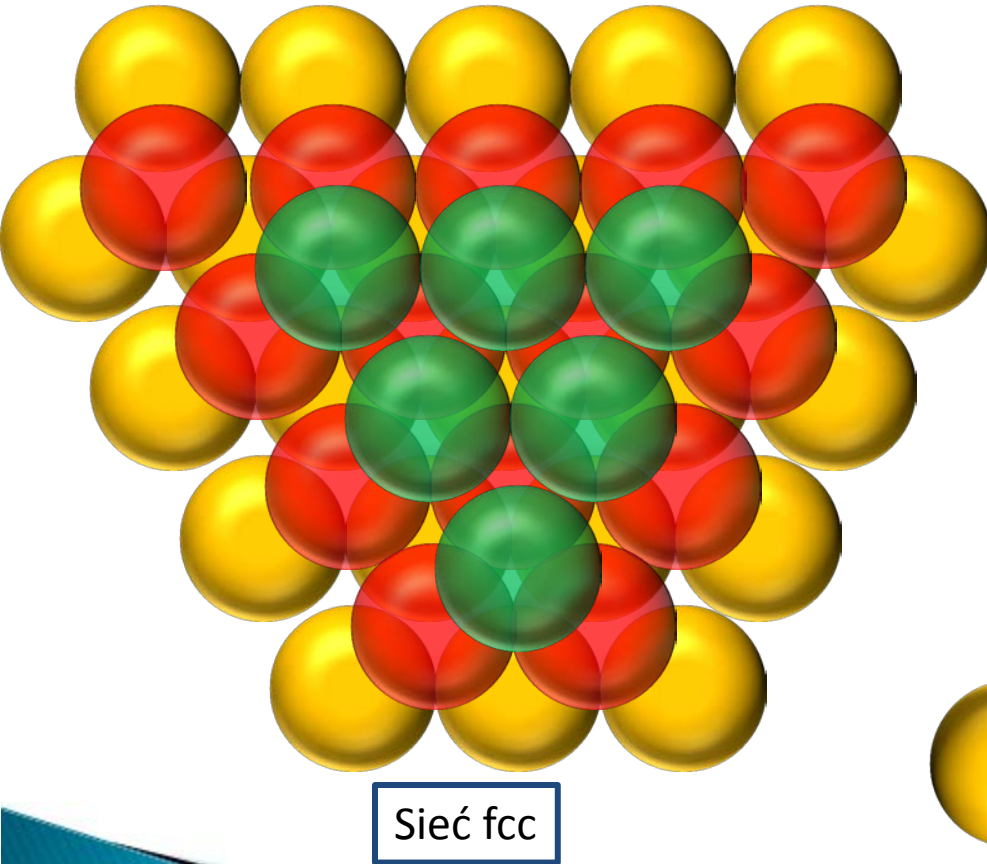
Sieć heksagonalna z bazą



Struktura krystaliczna

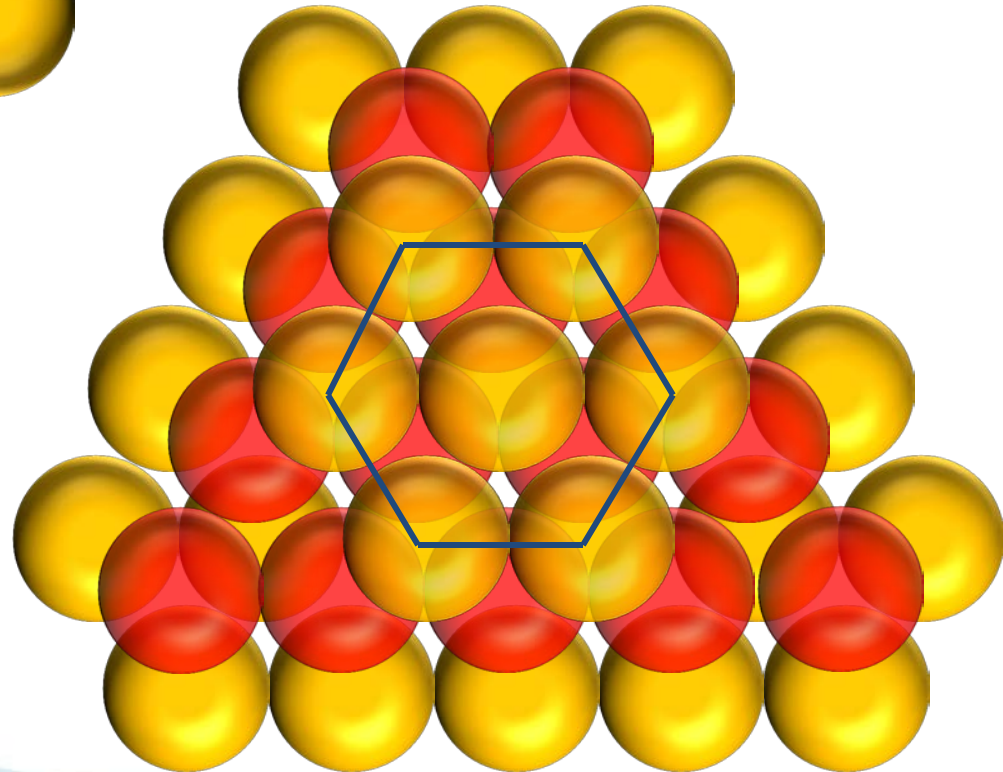
Sieci Bravais

Przykład: struktura najgęstszego upakowania



hexagonal close-packed (HCP)

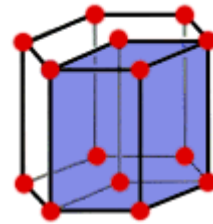
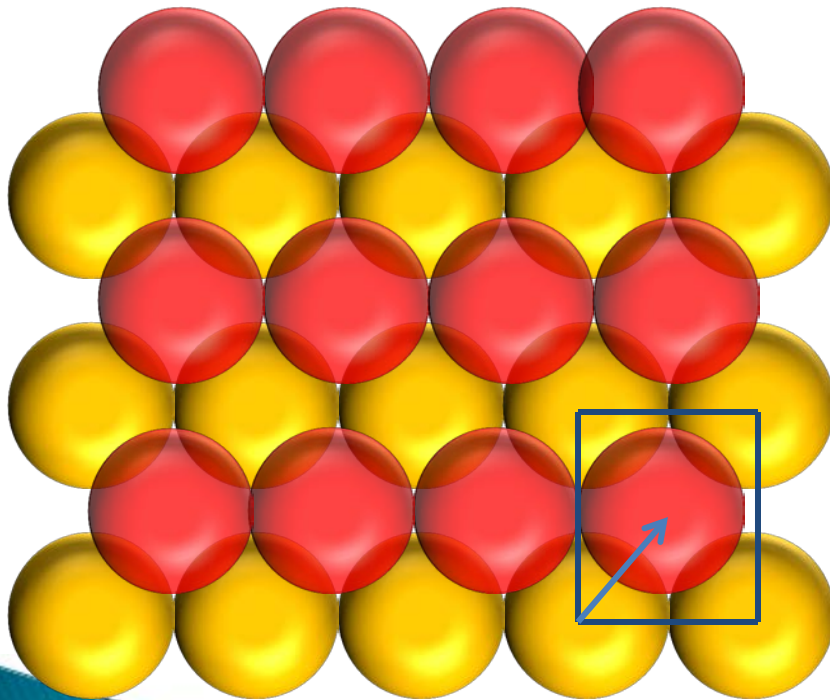
Sieć heksagonalna z bazą



Struktura krystaliczna

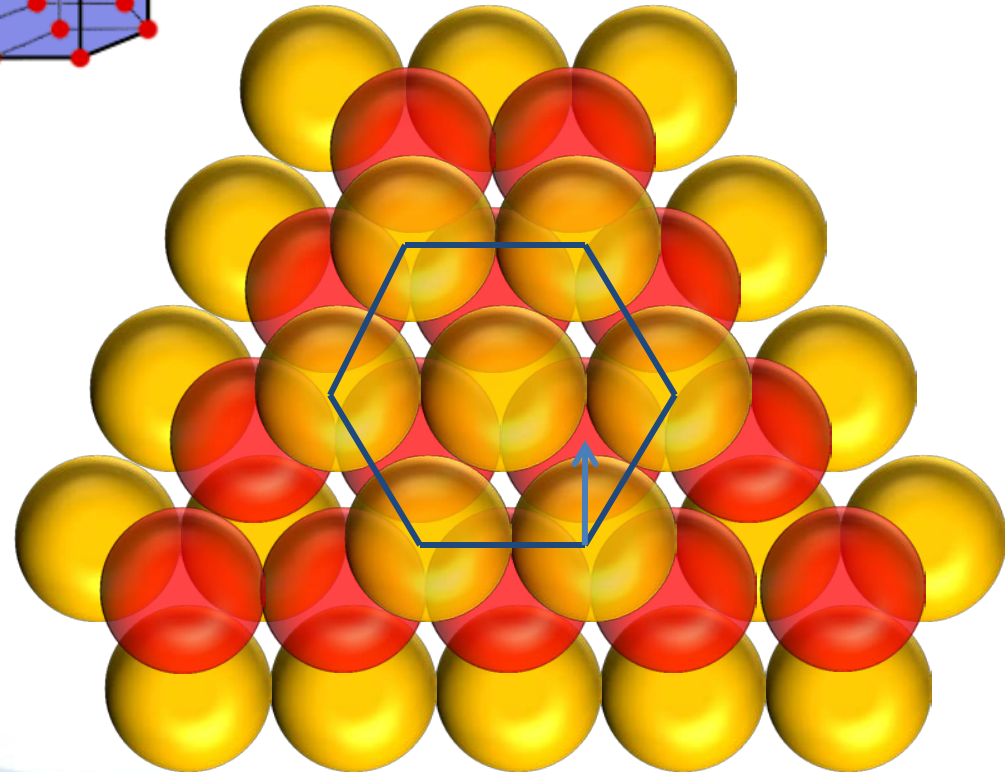
Sieci Bravais

Przykład: struktura najgęstszego upakowania



hexagonal close-packed (HCP)

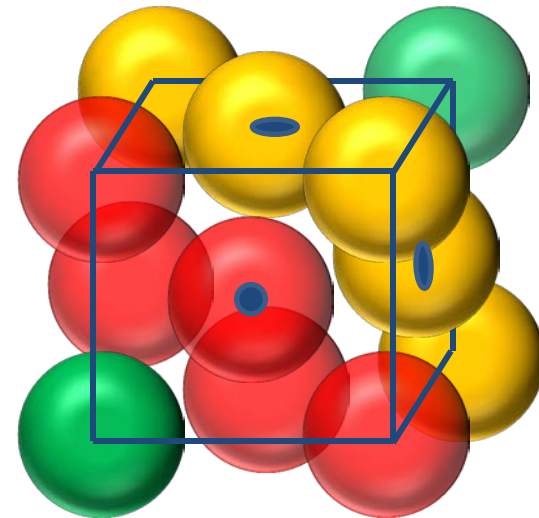
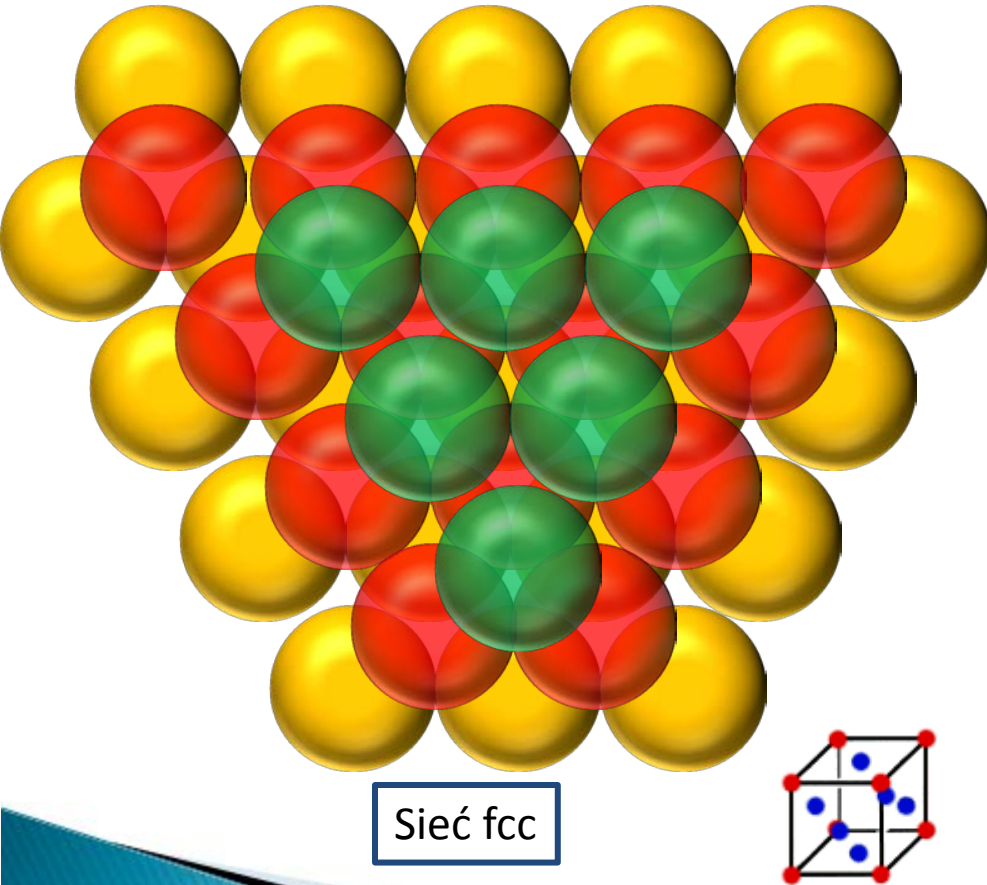
Sieć heksagonalna z bazą



Struktura krystaliczna

Sieci Bravais

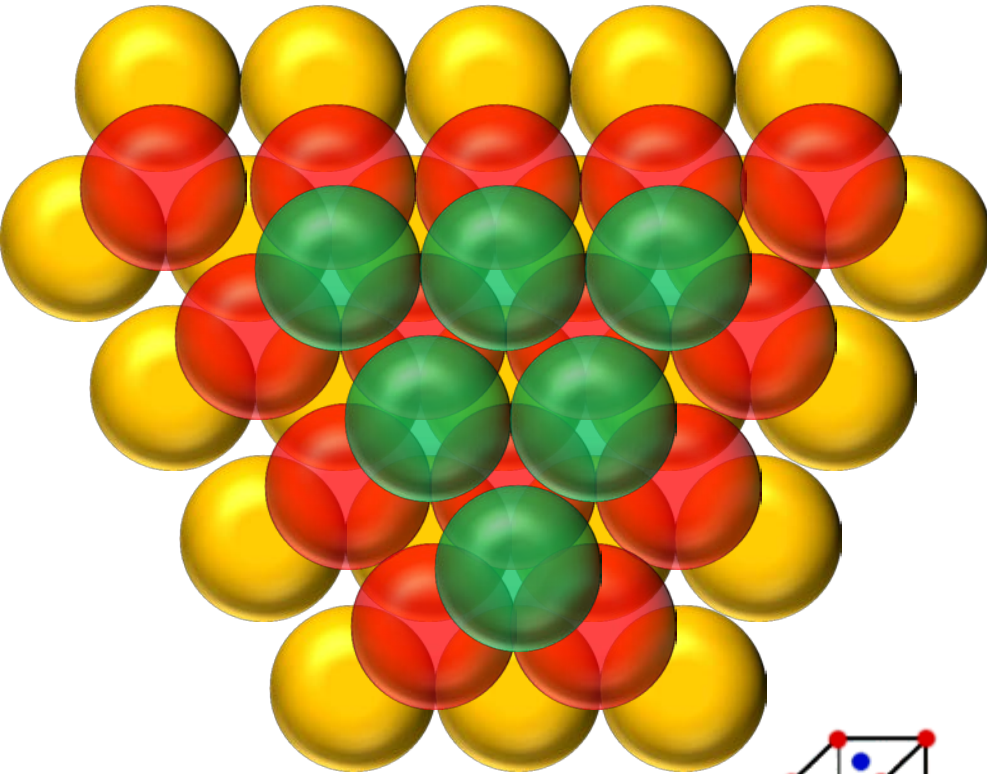
Przykład: struktura najgęstszego upakowania



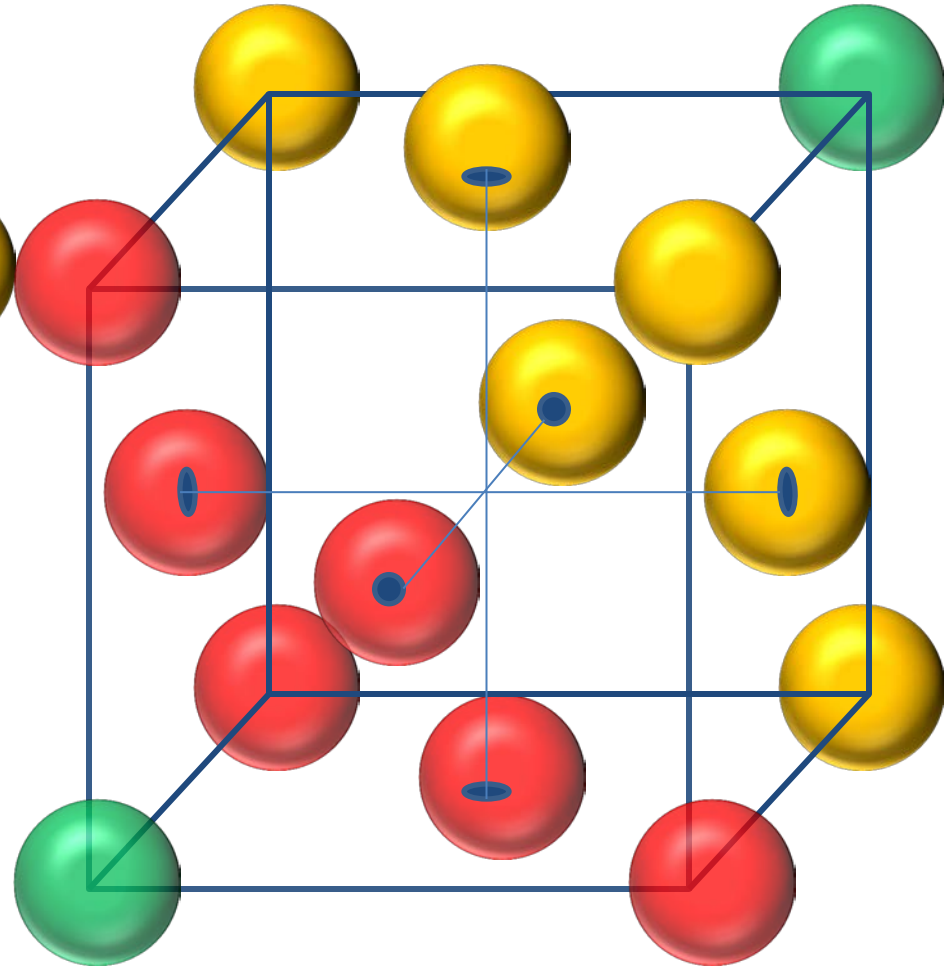
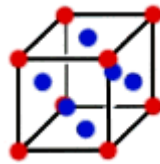
Struktura krystaliczna

Sieci Bravais

Przykład: struktura najgęstszego upakowania



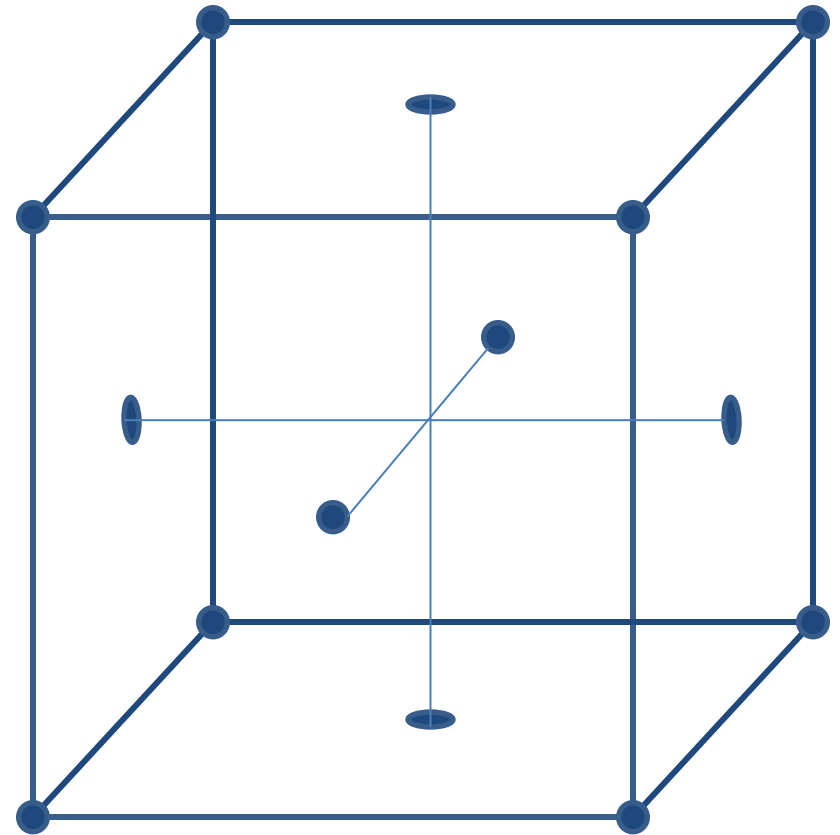
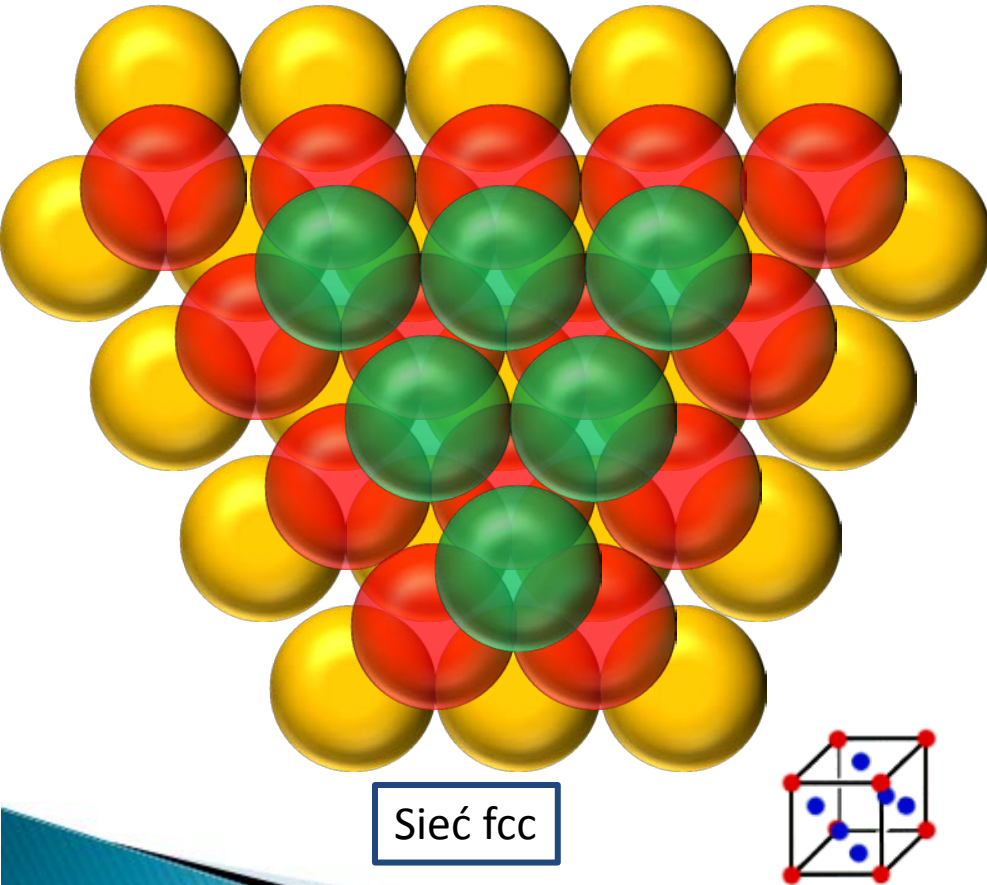
Sieć fcc



Struktura krystaliczna

Sieci Bravais

Przykład: struktura najgęstszego upakowania



Oznaczenie węzłów

Kryształy

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

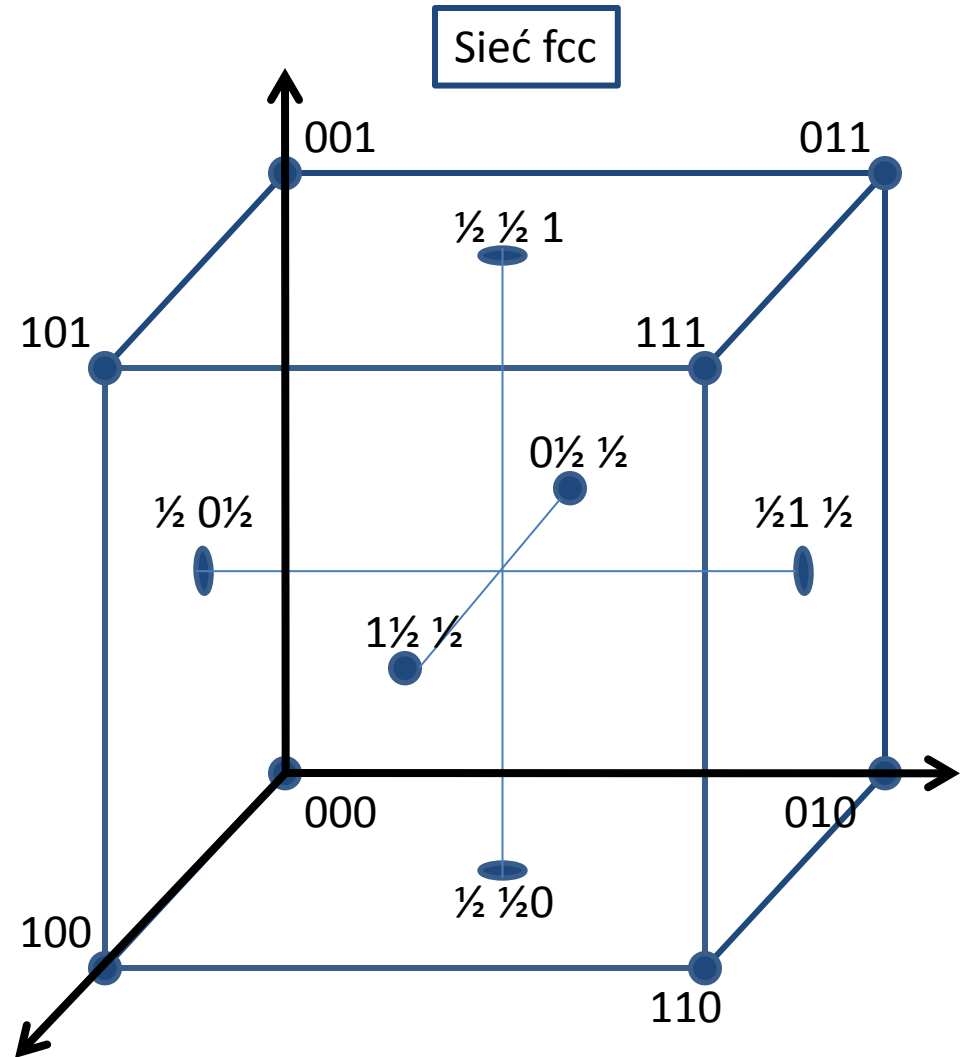
wektory translacji prymitywnych

Wskaźniki węzłów:

Krawędzie komórki elementarnej

$$[n_1 \vec{a}_1, n_2 \vec{a}_2, n_3 \vec{a}_3]$$

Wskaźniki węzła



Oznaczenie węzłów

Kryształy

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

wektory translacji prymitywnych

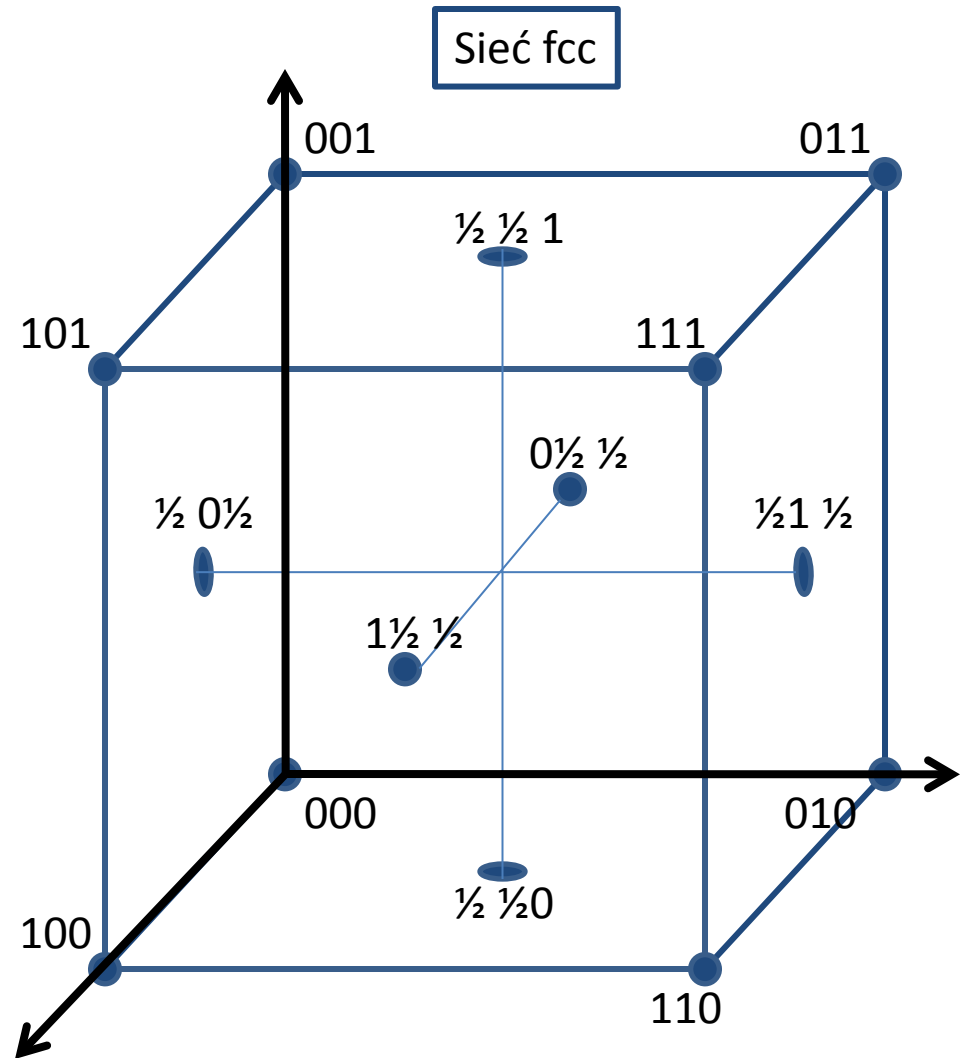
Wskaźniki węzłów:

Krawędzie komórki elementarnej

$$[n_1 \vec{a}_1, n_2 \vec{a}_2, n_3 \vec{a}_3]$$

Wskaźniki węzła

$$n_1 \ n_2 \ n_3$$

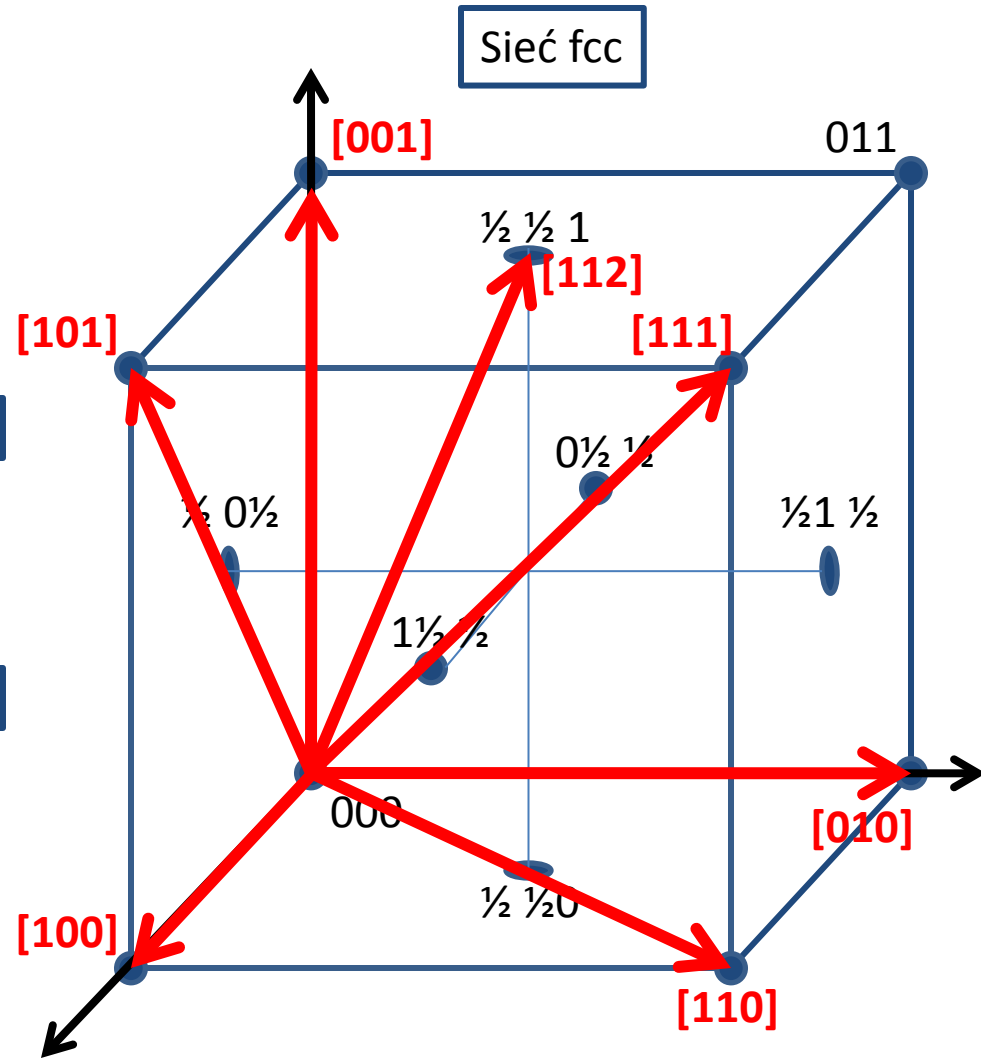
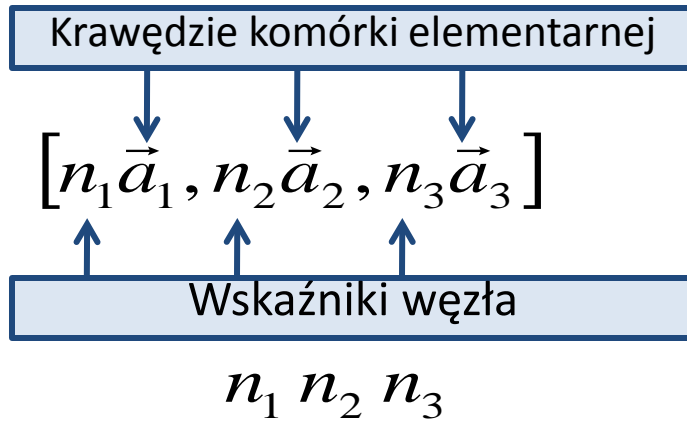


Oznaczenie kierunków

Kryształy

Wskaźniki kierunków: $[u \ v \ w]$

Zbiór najmniejszych liczb całkowitych względnie pierwszych u, v, w , które mają się do siebie tak, jak rzuty wektora równoległego do danego kierunku na osie krystaliczne.



Oznaczenie kierunków

Kryształy

Wskaźniki kierunków: $[u \ v \ w]$

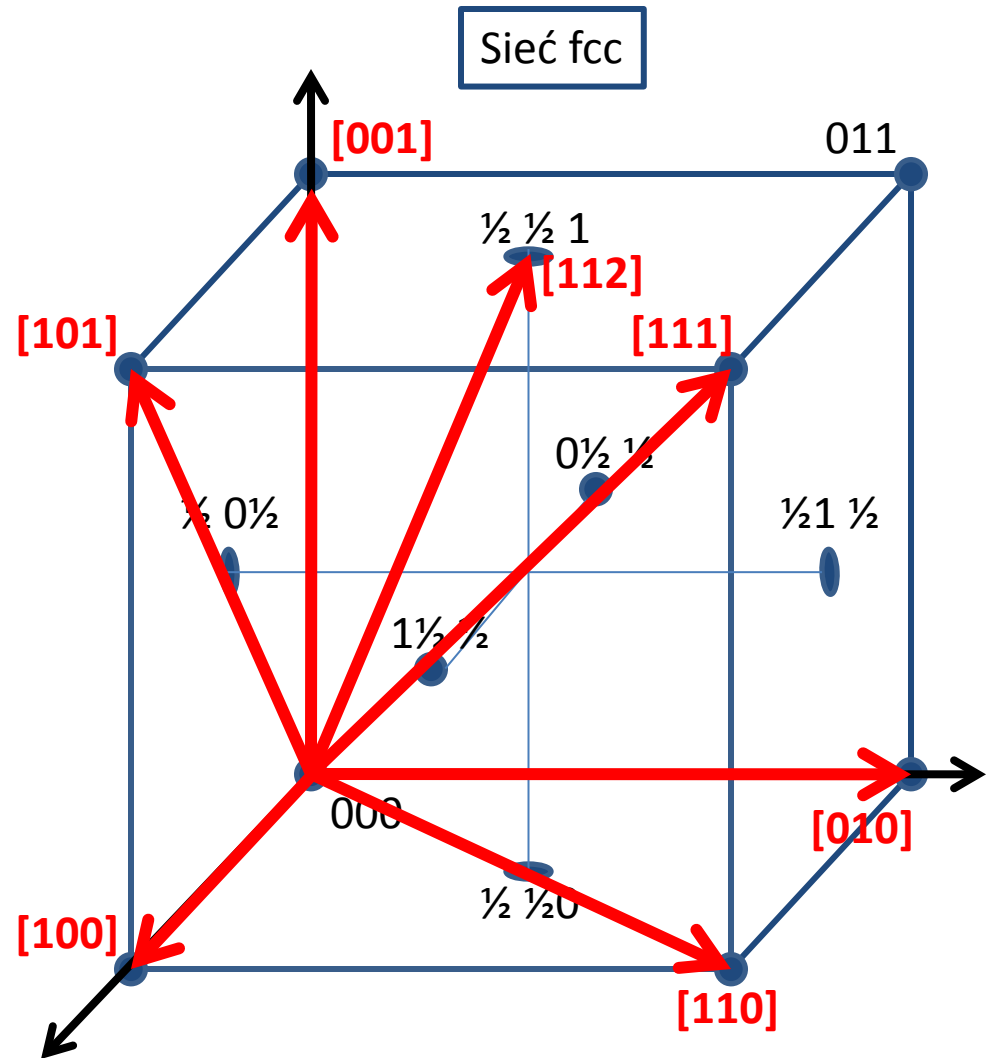
Zbiór najmniejszych liczb całkowitych względnie pierwszych u, v, w , które mają się do siebie tak, jak rzuty wektora równoległego do danego kierunku na osie krystaliczne.

$[u \ \bar{v} \ w]$

Liczbę ujemną zaznaczamy minusem nad wskaźnikiem

$[001]$

$[00\bar{1}]$



Oznaczenie płaszczyzn

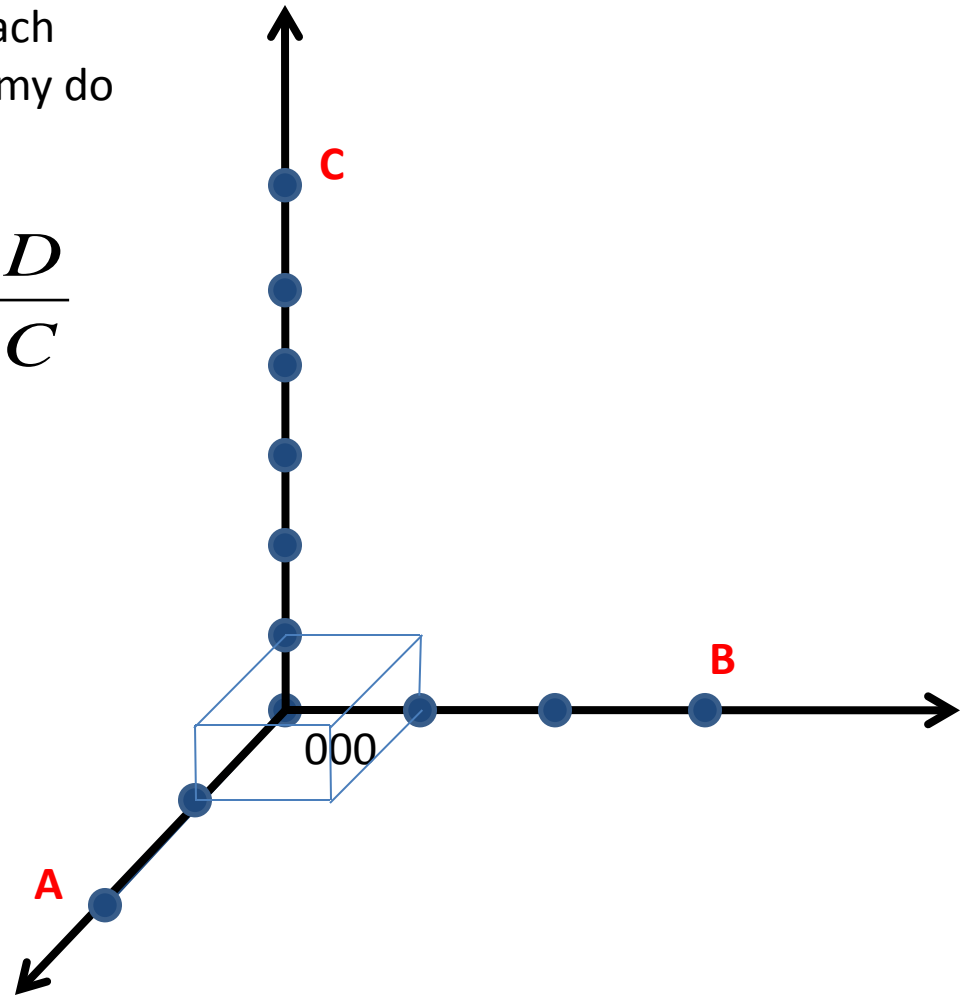
Kryształy

Należy podać trzy odcinki A , B , C , które płaszczyzna odcina na osiach sieci. Odcinki te wyrażamy w jednostkach osiowych i zapisujemy $1/A$, $1/B$, $1/C$ i sprowadzamy do najmniejszego wspólnego mianownika D .

$$(h k l) \quad h = \frac{D}{A}, k = \frac{D}{B}, l = \frac{D}{C}$$

Np.: $A=2$, $B=3$, $C=6$, płaszczyzna $(3,2,1)$

W domu: obliczyć odległości między kolejnymi płaszczyznami o symbolu (h,k,l) .



Oznaczenie płaszczyzn

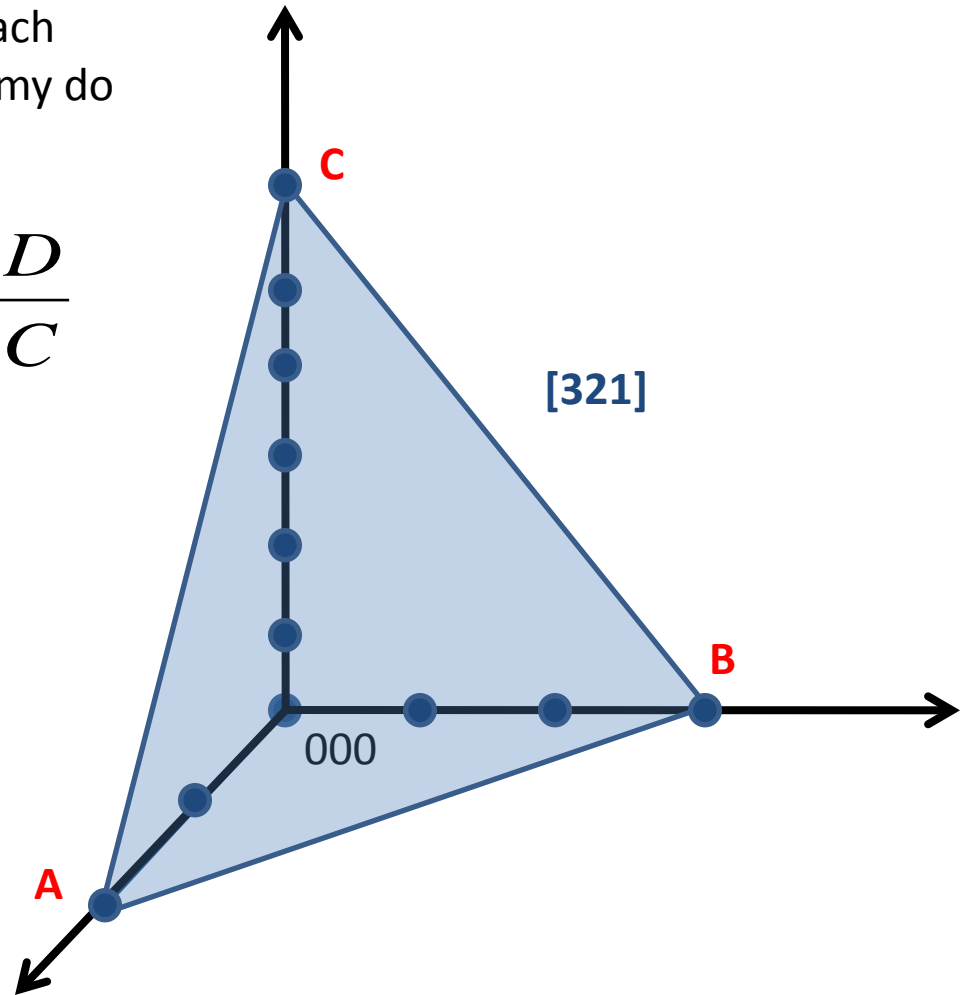
Kryształy

Należy podać trzy odcinki A , B , C , które płaszczyzna odcina na osiach sieci. Odcinki te wyrażamy w jednostkach osiowych i zapisujemy $1/A$, $1/B$, $1/C$ i sprowadzamy do najmniejszego wspólnego mianownika D .

$$(h k l) \quad h = \frac{D}{A}, k = \frac{D}{B}, l = \frac{D}{C}$$

Np.: $A=2$, $B=3$, $C=6$, płaszczyzna $(3,2,1)$

W domu: obliczyć odległości między kolejnymi płaszczyznami o symbolu (h,k,l) .



Oznaczenie płaszczyzn

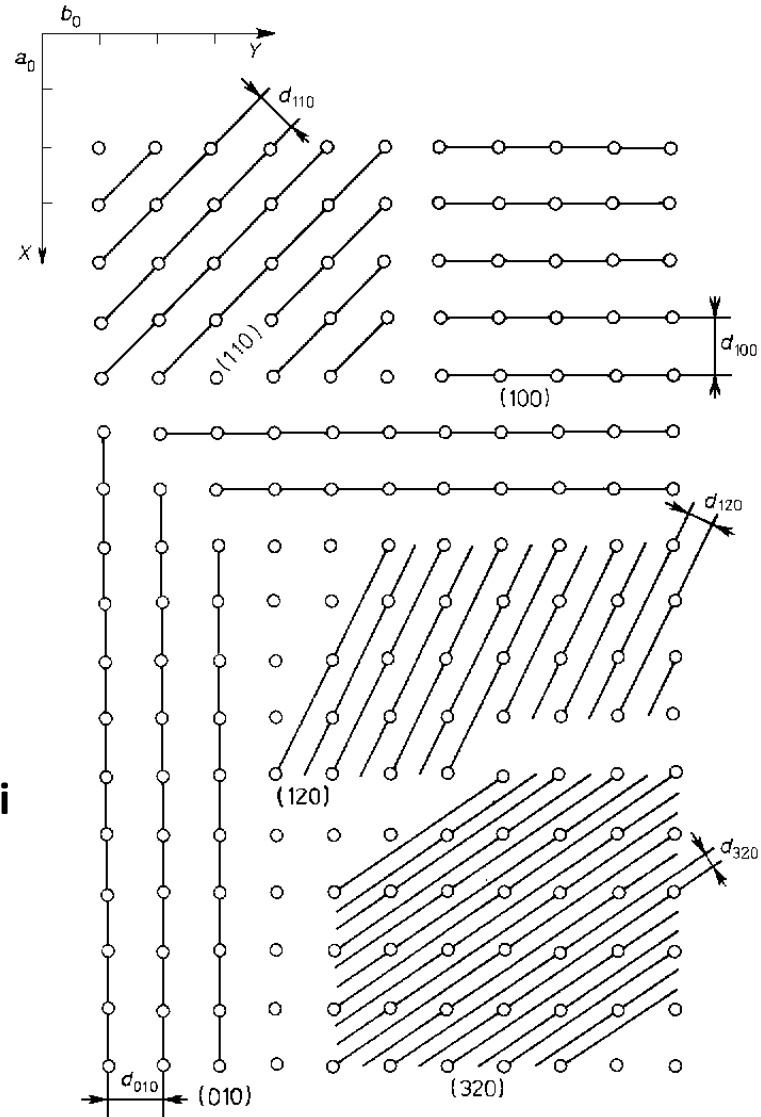
Kryształy

Należy podać trzy odcinki A , B ,
na osiach sieci. Odcinki te wyraża-
ją odległości między płaszczyznami
osiowych i zapisujemy $1/A$, $1/B$,
najmniejszego wspólnego mian

$$(h k l) \quad h = \frac{D}{A}, k = \frac{D}{B}, l = \frac{D}{C}$$

Np.: $A=2$, $B=3$, $C=6$, płaszczyzna $(3,2,1)$

**W domu: obliczyć odległości między kolejnymi
płaszczyznami o symbolu (h,k,l) .**



Rys. 1.27. Kilka rodzin płaszczyzn (hkl) i ich odległości międzypłaszczyznowe d_{hkl} w rzucie na płaszczyznę (001) prostokątnej sieci przestrzennej

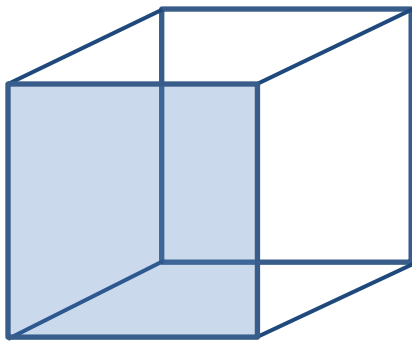
Oznaczenie płaszczyzn

Kryształy

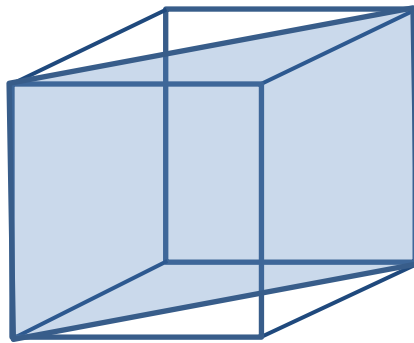
Należy podać trzy odcinki A , B , C , które płaszczyzna odcina na osiach sieci. Odcinki te wyrażamy w jednostkach osiowych i zapisujemy $1/A$, $1/B$, $1/C$ i sprowadzamy do najmniejszego wspólnego mianownika D .

$$(hkl) \quad h = \frac{D}{A}, k = \frac{D}{B}, l = \frac{D}{C}$$

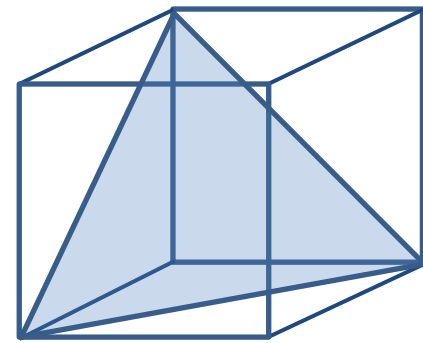
(100)



(110)



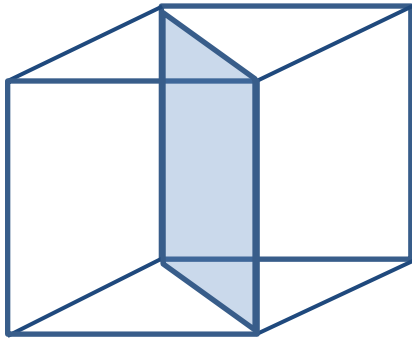
(111)



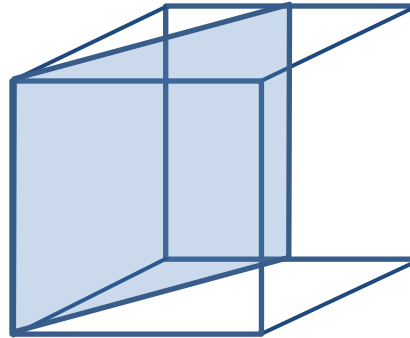
Oznaczenie płaszczyzn

Kryształy

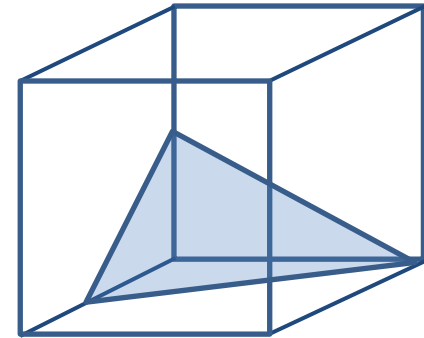
$(\bar{1}10)$



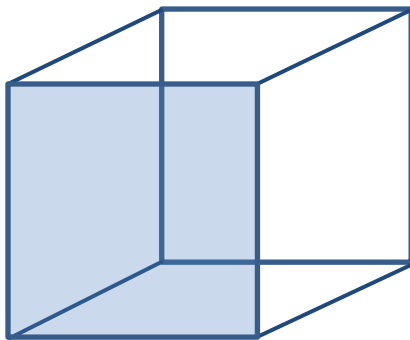
(120)



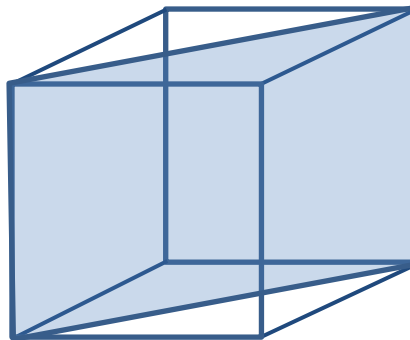
(212)



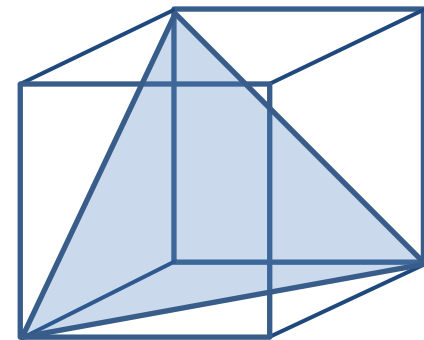
(100)



(110)

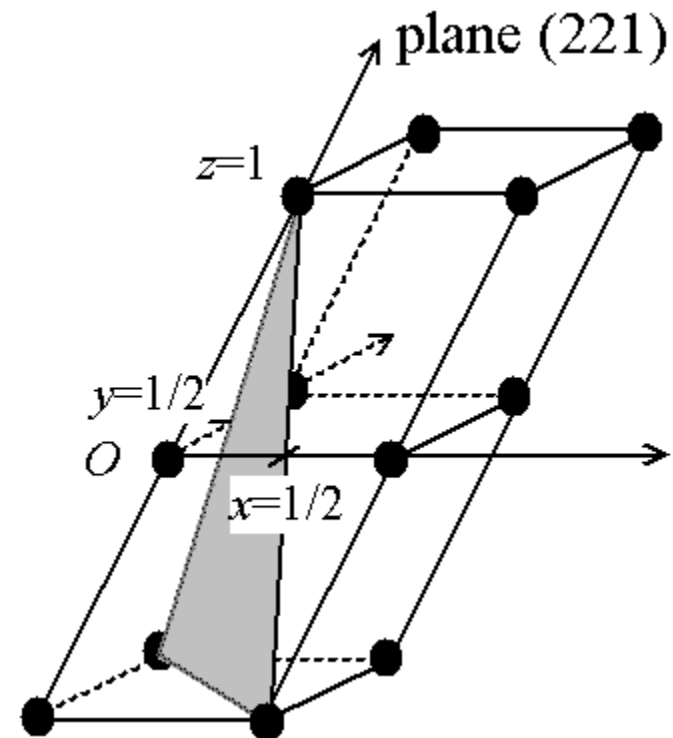
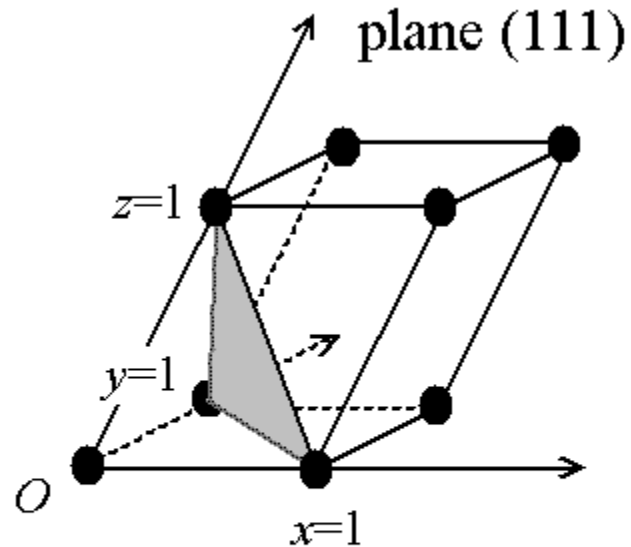
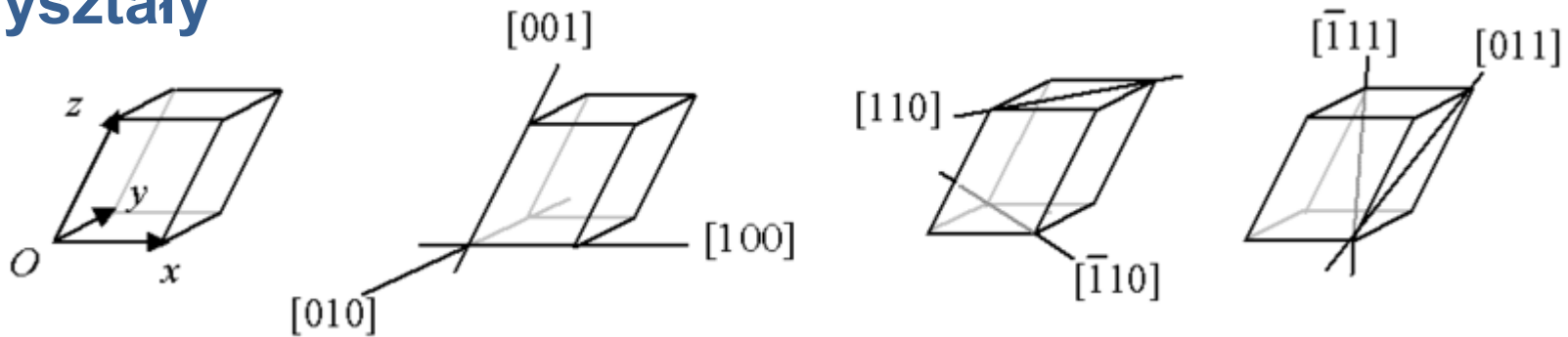


(111)



Oznaczenie płaszczyzn

Kryształy

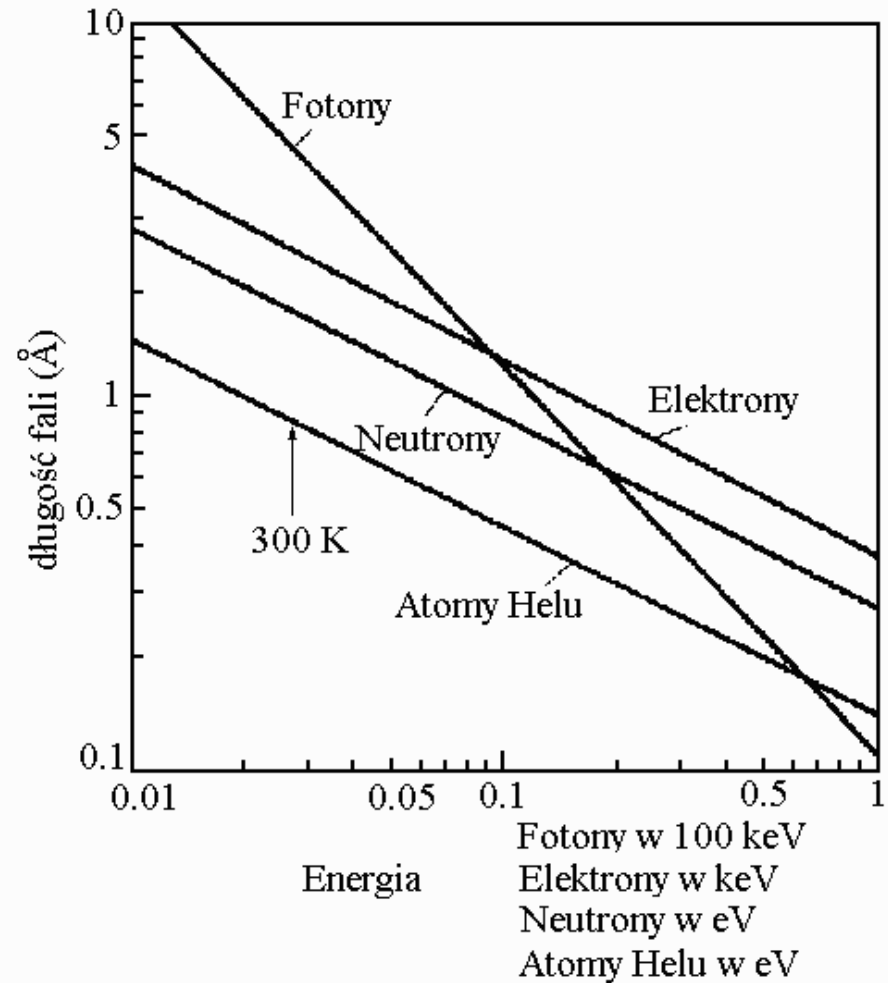


http://pl.wikipedia.org/wiki/Wskaźniki_Millera

Krystalografia

Kryształy

Strukturę krystaliczną badamy za pomocą dyfrakcji fotonów, neutronów, elektronów lub innych lekkich cząsteczek



Krystalografia

Kryształy

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

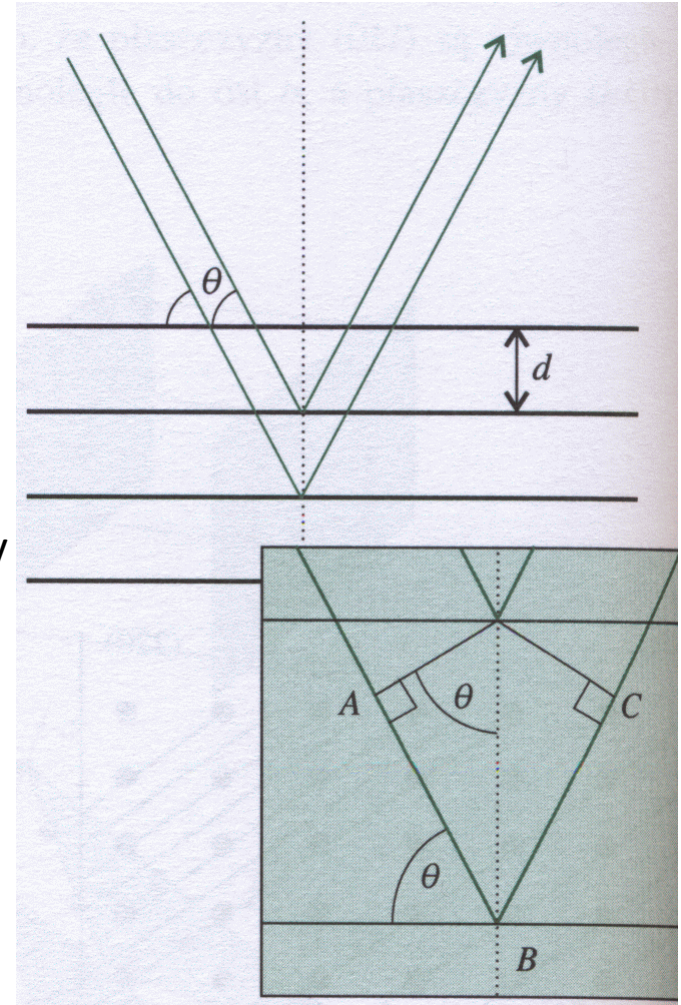


Max von Laue
1879 - 1960

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

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

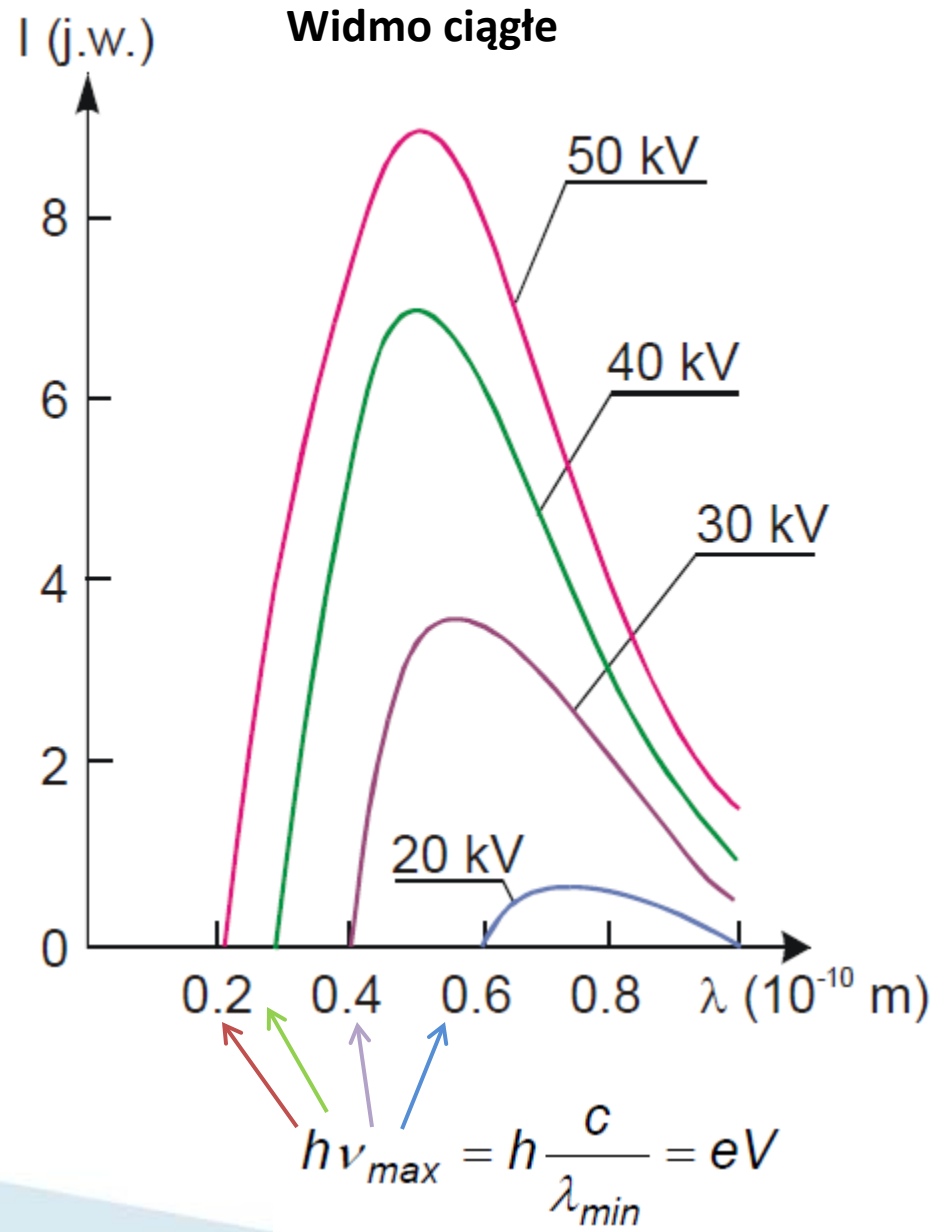
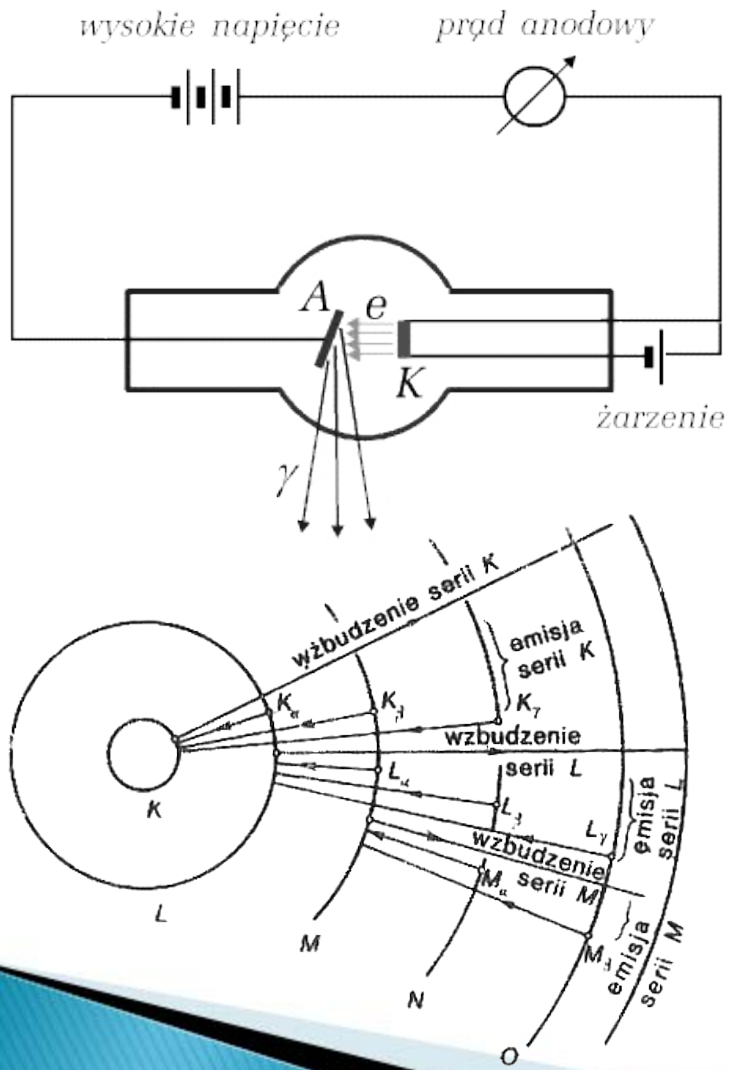
np. $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$, $a = 4 \text{ \AA}$,
kryształ o symetrii regularnej,
pierwszy refleks $\theta = 11^\circ$



P. Atkins

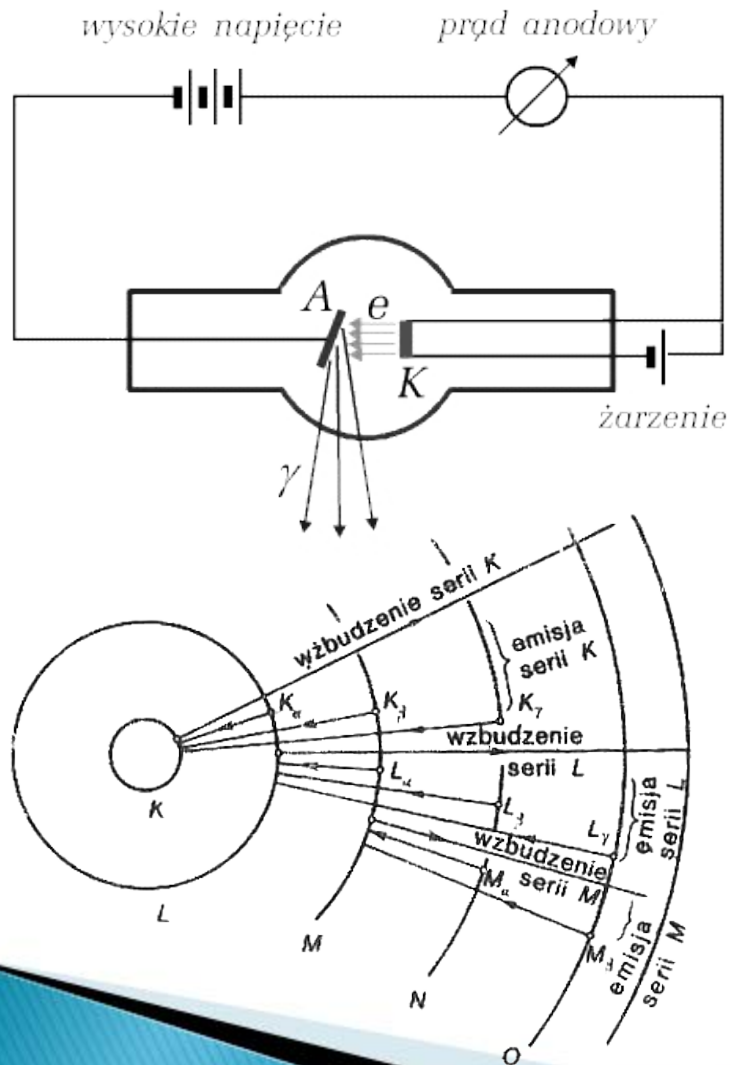
Krystalografia

Kryształy

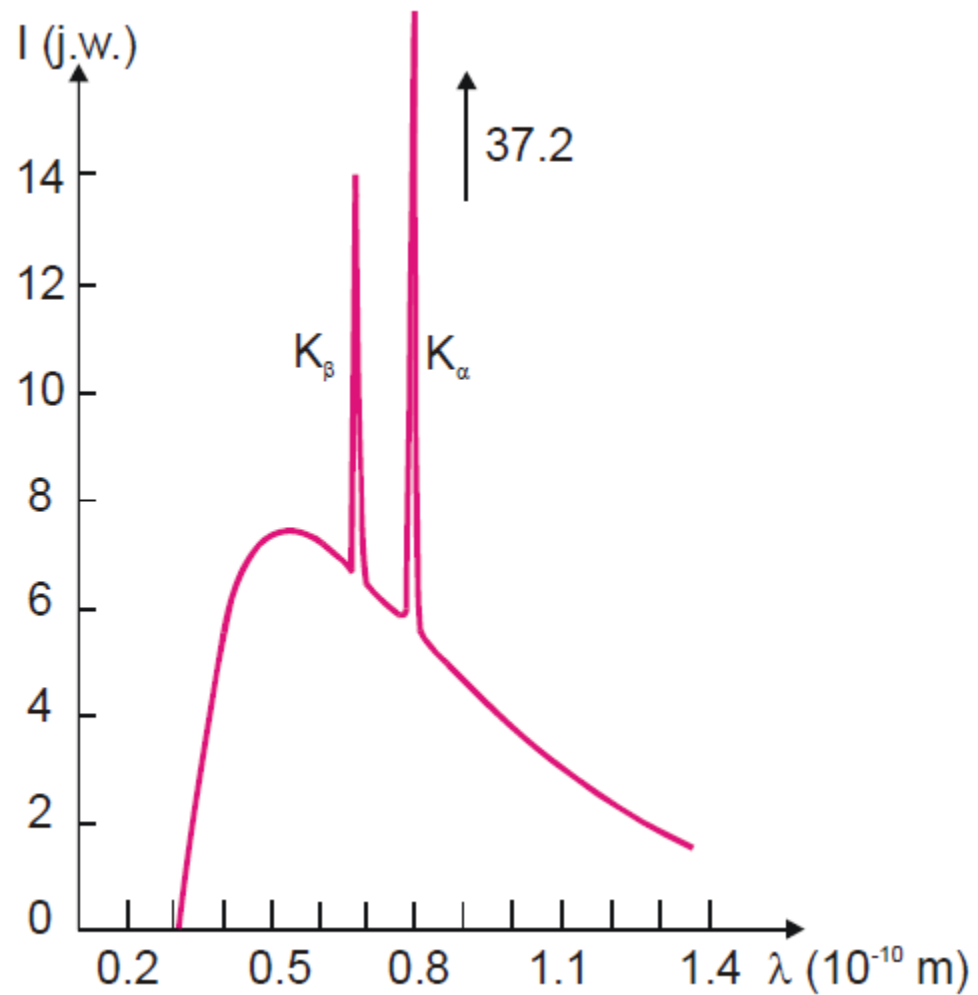


Krystalografia

Kryształy



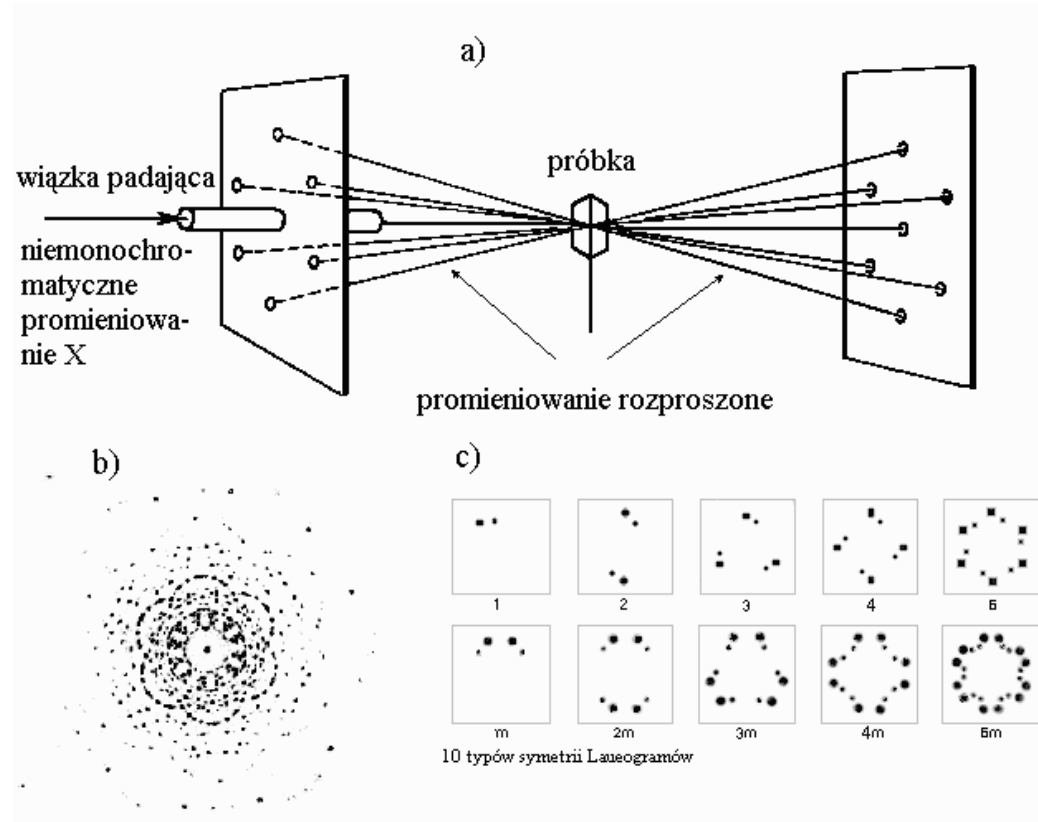
Widmo charakterystyczne



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



Krystalografia

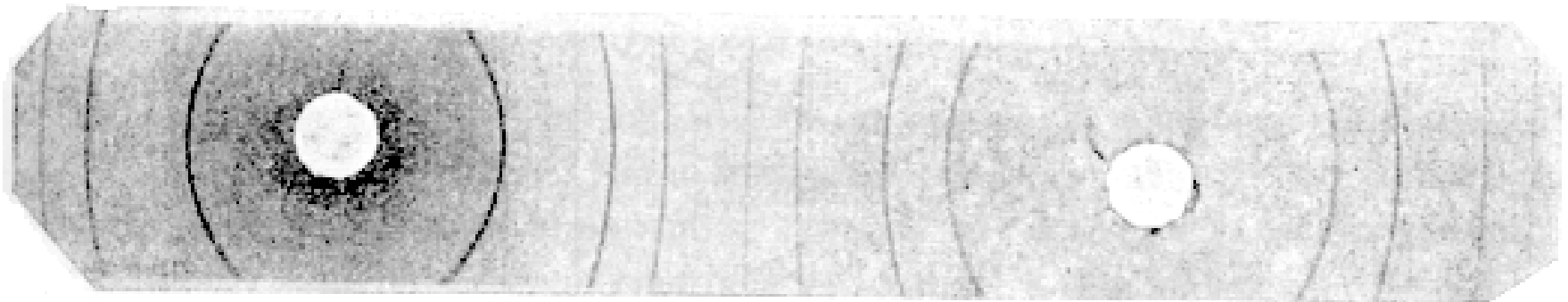
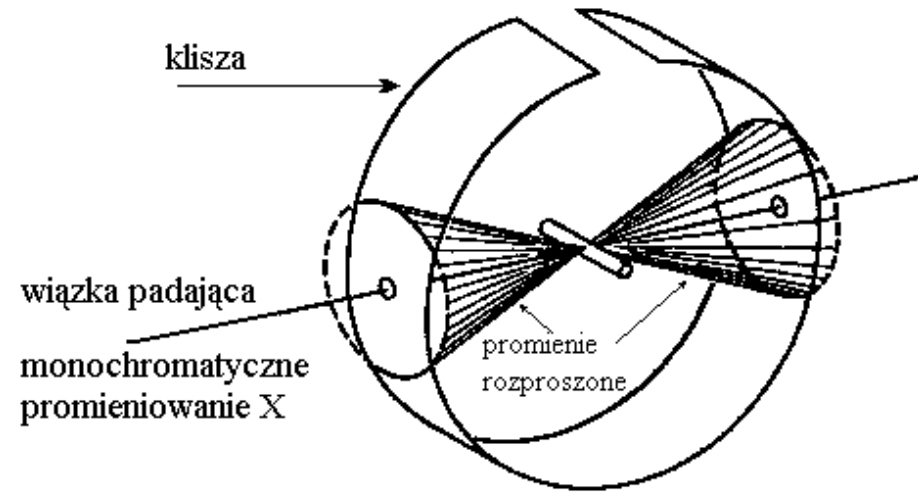
Metoda Debaye'a-Scherera



Peter Joseph Debye
1884 – 1966



Paul Scherrer
1890 - 1969

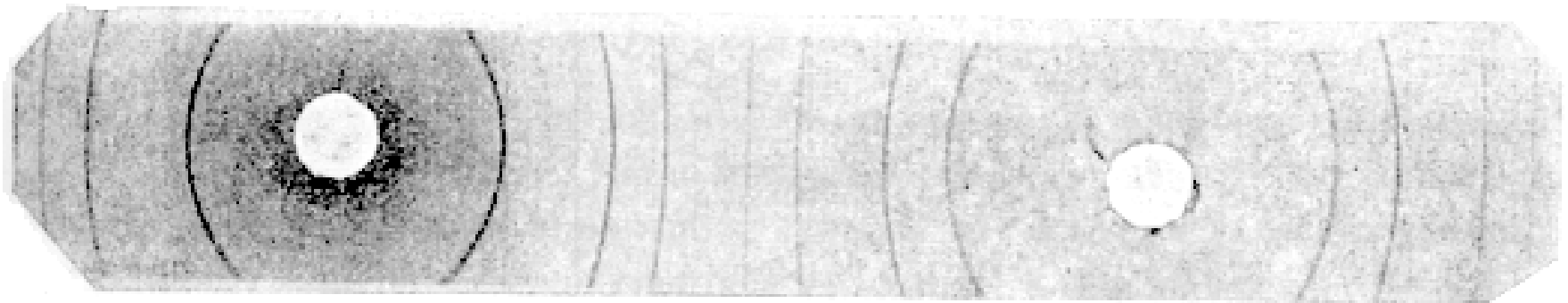
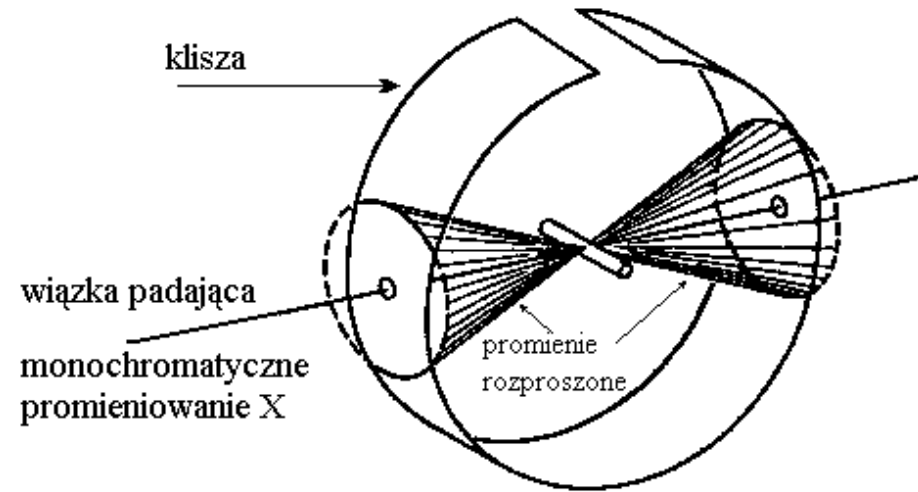


Typowy debajogram

Krystalografia

Metoda Debaye'a-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

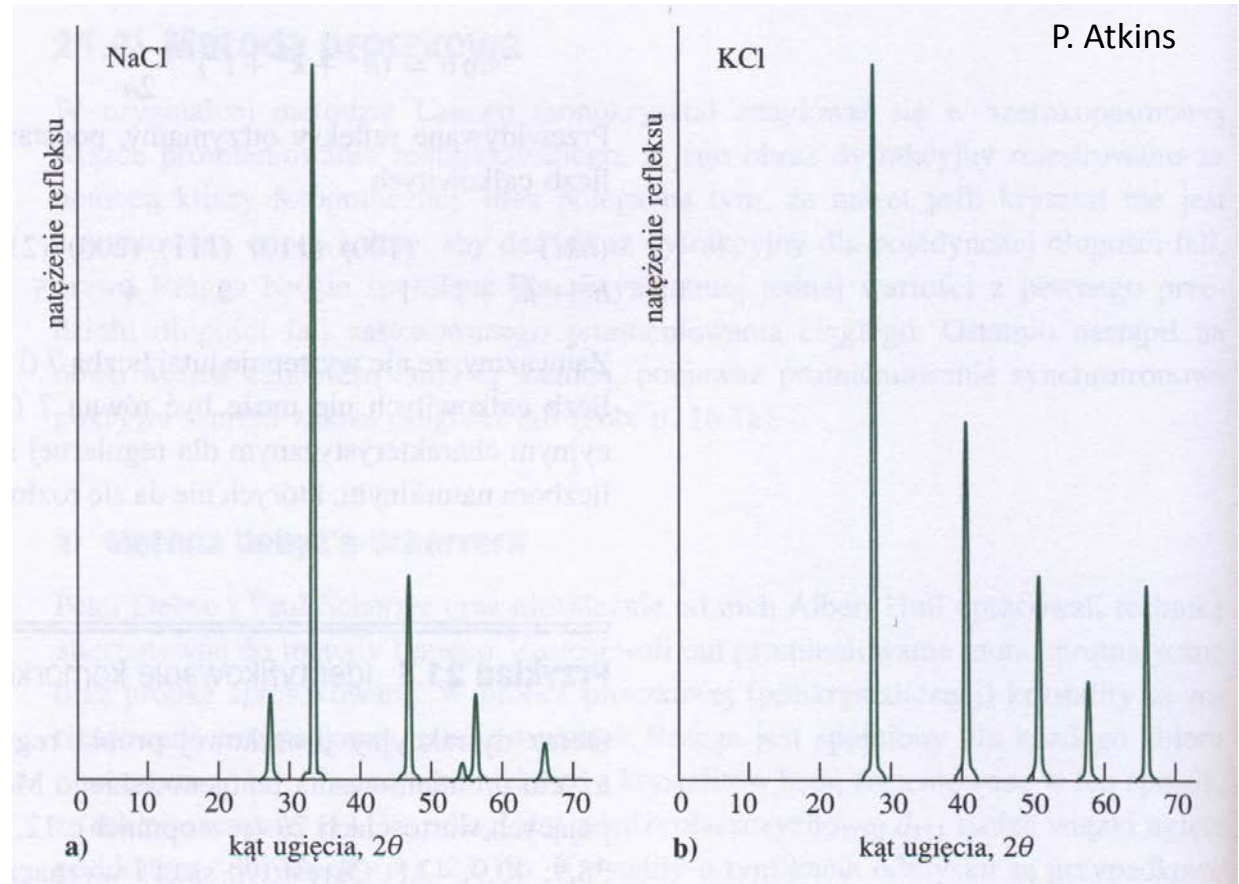
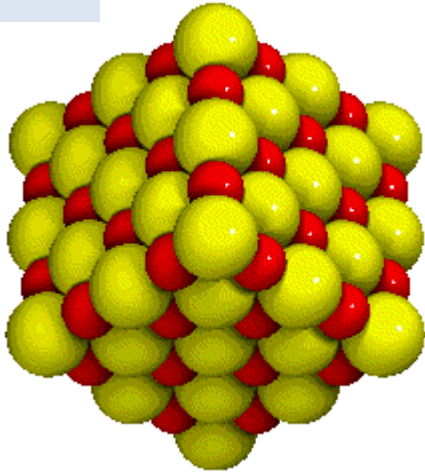


Typowy debajogram

Krystalografia

Czynnik atomowy

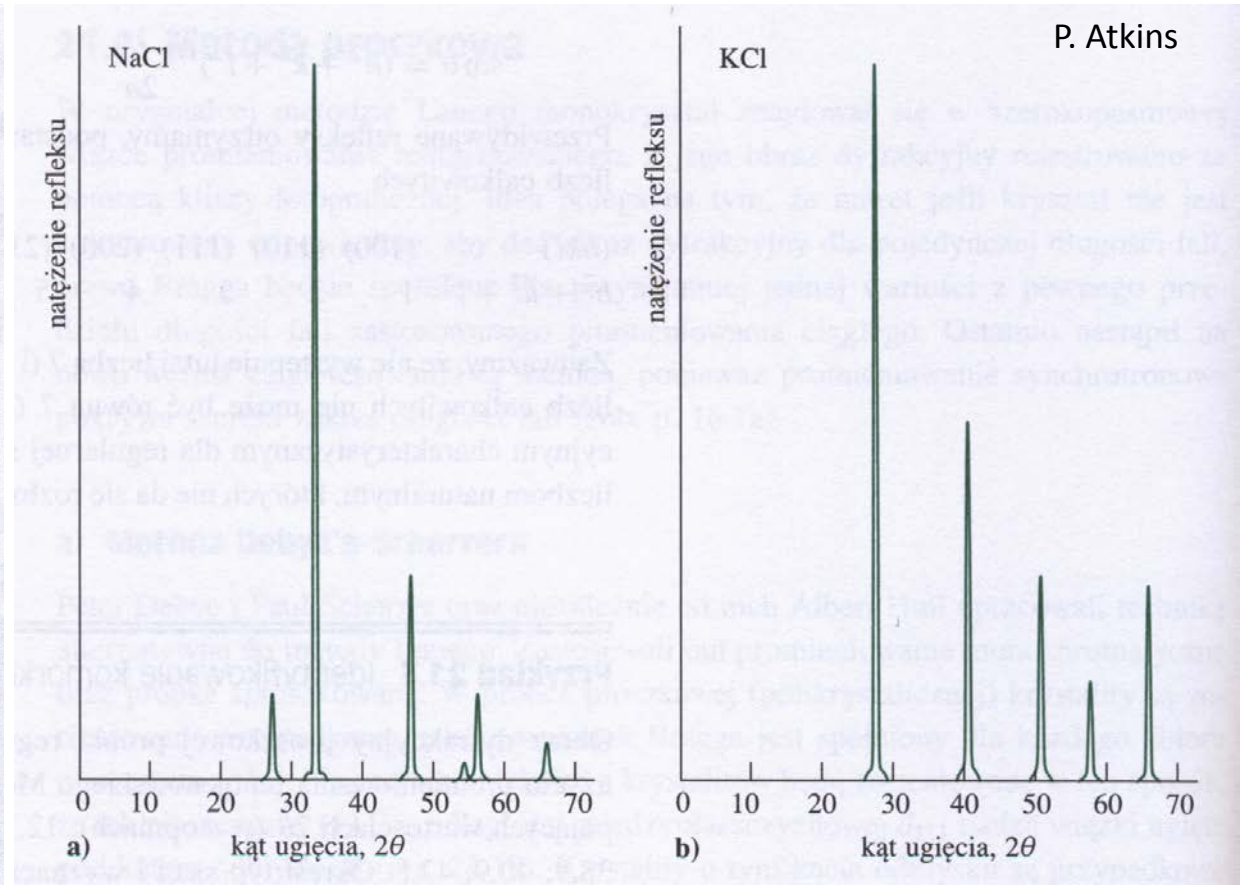
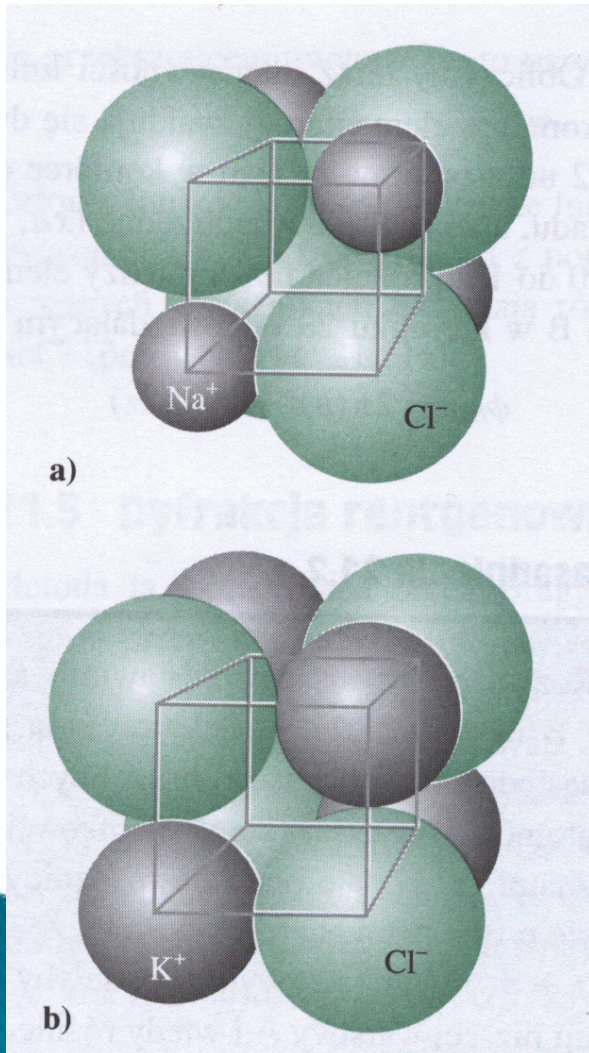
NaCl



Obie sole mają tę samą strukturę krystaliczną,
dlaczego dyfraktogramy różnią się?

Krystalografia

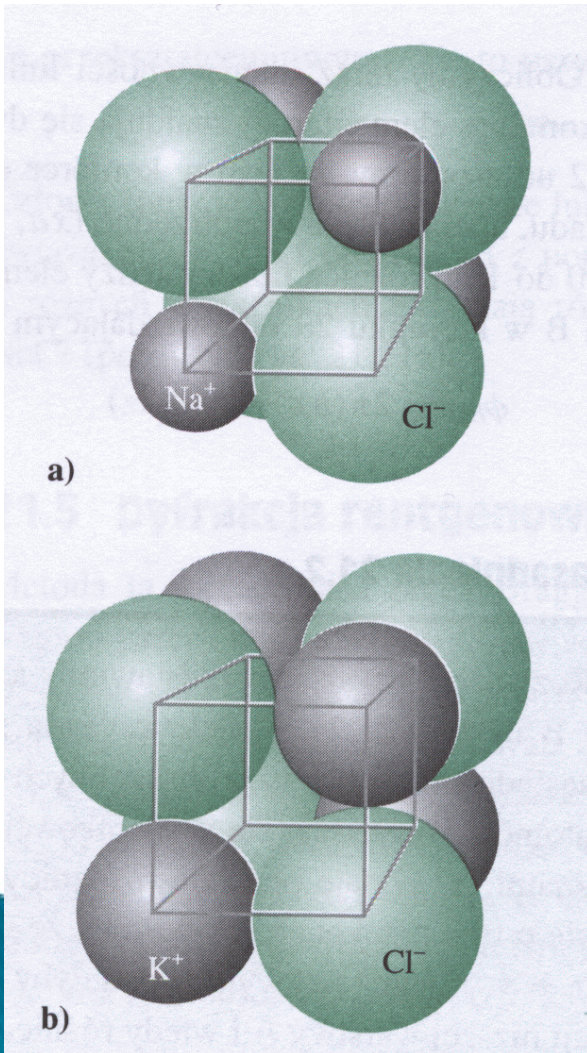
Czynnik atomowy



Obie sole mają tę samą strukturę krystaliczną,
dlaczego dyfraktogramy różnią się?

Krystalografia

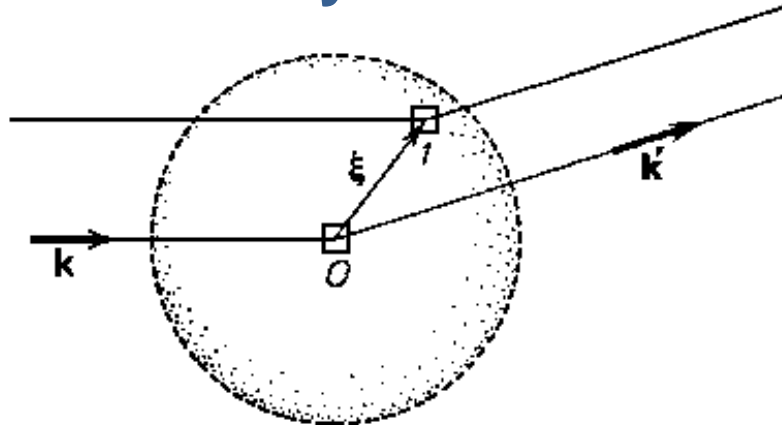
Czynnik atomowy



- K^+ i Cl^- mają taką samą liczbę elektronów. Podobnie rozpraszają.
- Dla pewnych kierunków występuje interferencja destruktywna (całkowite wygaszenie)
- Na^+ i Cl^- - ponieważ fale są różnie rozpraszane przez różne atomy, brak jest całkowitego wygaszania.
- Pojawia się więc czynnik atomowy

Krystalografia

Czynnik atomowy



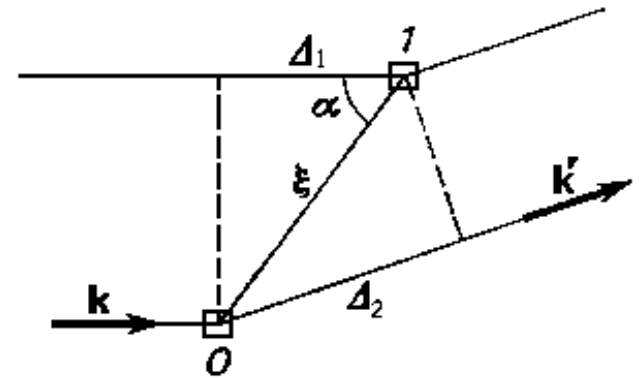
Rys. 8.2. Dyfrakcja fali elektromagnetycznej przez chmurę gęstości ładunku elektronów w atomie

Rozpraszanie na gazie atomowym.

Rozprasza chmura elektronowa.

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

T. Stacewicz & A. Witowski



Rys. 8.3. Oznaczenia używane w obliczeniach

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

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

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

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

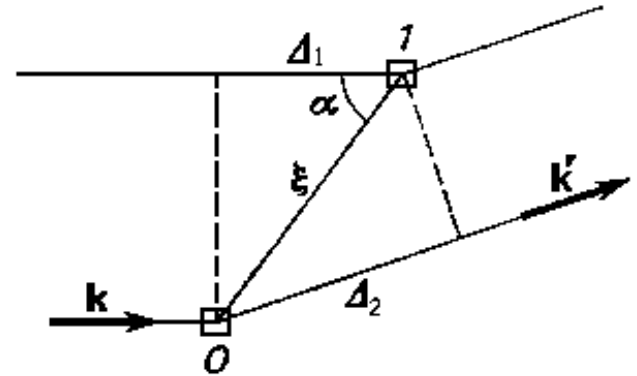
Krystalografia

Czynnik atomowy

gęstość ładunku

$$\Psi_0 = \frac{A}{r} \exp[i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)] \rho_e(\vec{\xi} = 0)$$

$$\Psi_1 = \frac{A}{r} \exp[i(\vec{k}\vec{r} - \omega t - \Delta\vec{k}\vec{\xi})] \rho_e(\vec{\xi})$$



Rys. 8.3. Oznaczenia używane w obliczeniach

Fala rozproszona

$$\Psi = \frac{A}{r} \exp[i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)] \int \rho_e(\vec{\xi}) \exp(-i\Delta\vec{k}\vec{\xi}) d^3\xi$$

Atomowy czynnik rozpraszania

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

Krystalografia

Czynnik atomowy

Np. rozkład elektronów o symetrii kulistej

gęstość ładunku

$$f = -\frac{1}{e} \int \rho_e(\vec{\xi}) \exp(-i\Delta\vec{k}\vec{\xi}) d^3\xi = -\frac{1}{e} 2\pi \int \xi^2 \rho_e(\xi) \exp(-i\Delta k \xi \cos\theta) d\xi d(\cos\theta) \\ = -\frac{2\pi}{e} \int \xi^2 \rho_e(\xi) \frac{\exp(i\Delta k \xi) - \exp(-i\Delta k \xi)}{i\Delta k \xi} d\xi = -\frac{4\pi}{e} \int \xi^2 \rho_e(\xi) \frac{\sin(\Delta k \xi)}{\Delta k \xi} d\xi$$

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

Atomowy czynnik rozpraszania

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

Krystalografia

Czynnik atomowy

Np. rozkład elektronów o symetrii kulistej

gęstość ładunku

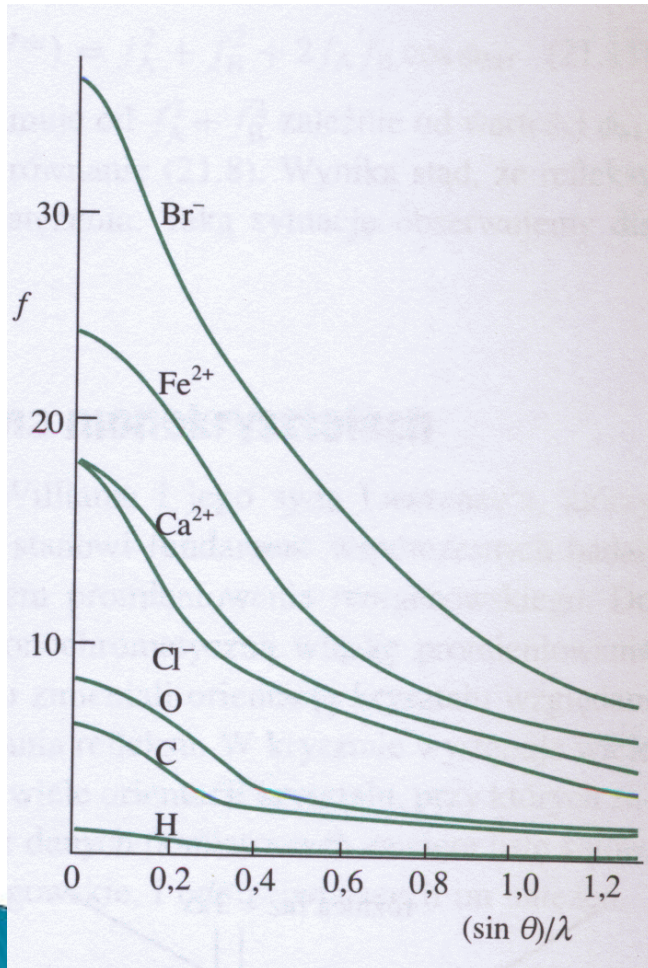
$$f = -\frac{1}{e} \int \rho_e(\vec{\xi}) \exp(-i\Delta\vec{k}\vec{\xi}) d^3\xi = -\frac{1}{e} 2\pi \int \xi^2 \rho_e(\xi) \exp(-i\Delta k \xi \cos\theta) d\xi d(\cos\theta) \\ = -\frac{2\pi}{e} \int \xi^2 \rho_e(\xi) \frac{\exp(i\Delta k \xi) - \exp(-i\Delta k \xi)}{i\Delta k \xi} d\xi = -\frac{4\pi}{e} \int \xi^2 \rho_e(\xi) \frac{\sin(\Delta k \xi)}{\Delta k \xi} d\xi$$

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

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

Krystalografia

Czynnik atomowy



Dla małych kątów rozpraszania
 $ef = Q$ (całkowity ładunek)

Atomowy czynnik rozpraszania

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

Krystalografia

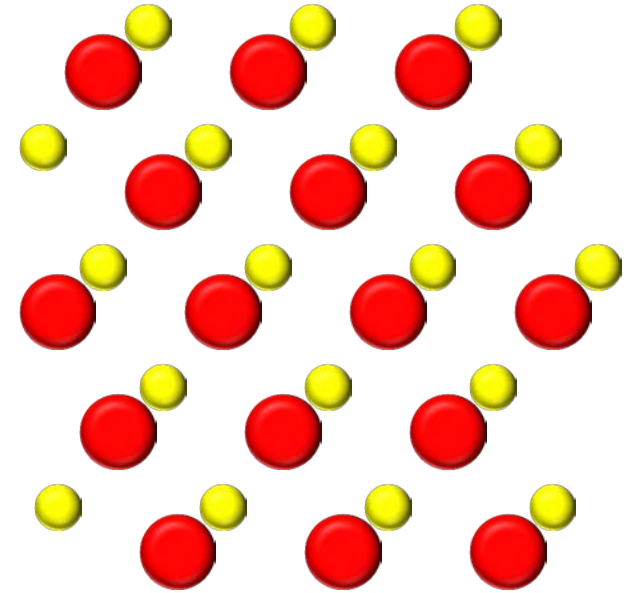
Geometryczny czynnik strukturalny

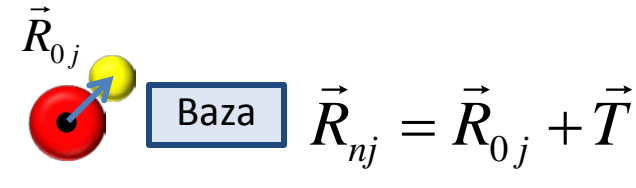
Fala rozproszona na jednym atomie:

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

Fala rozproszona na wszystkich atomach:

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



$$\sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}\vec{R}_{0j}}$$
A diagram showing a red sphere and a yellow sphere. A blue arrow points from the red sphere to the yellow sphere, labeled \vec{R}_{0j} . To the right, a blue box labeled "Baza" is followed by the equation $\vec{R}_{nj} = \vec{R}_{0j} + \vec{T}$, where \vec{T} represents a lattice translation vector.

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

Krystalografia

Geometryczny czynnik strukturalny

Fala rozproszona na jednym atomie:

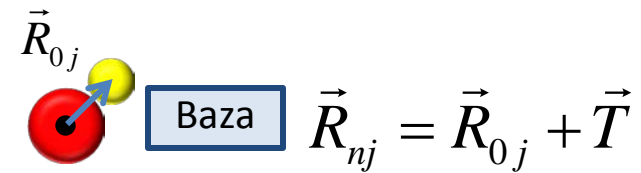
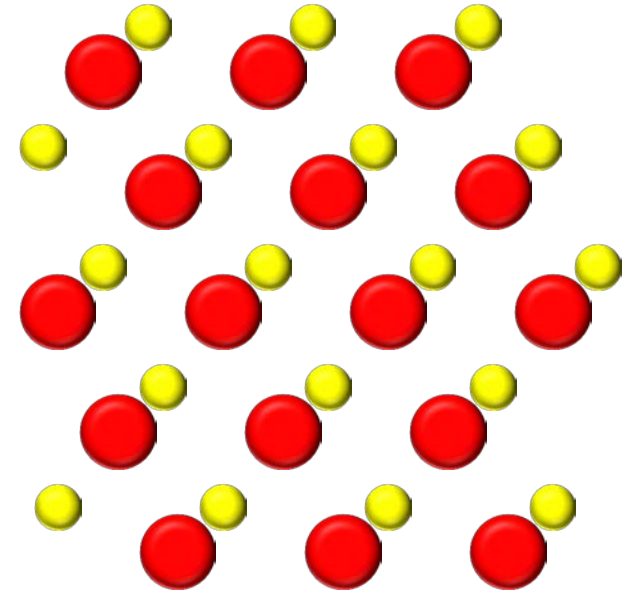
$$\Psi = A e^{i(\vec{k}'\vec{r} - \omega t)} f$$

Fala rozproszona na wszystkich atomach:

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

Atomy w bazie

$$\sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}\vec{R}_{0j}}$$



Krystalografia

Geometryczny czynnik strukturalny

Fala rozproszona na jednym atomie:

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

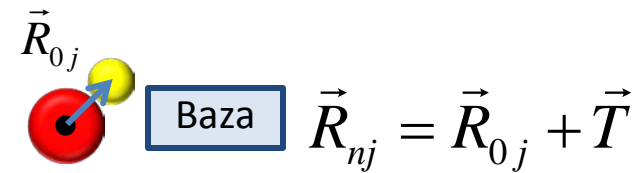
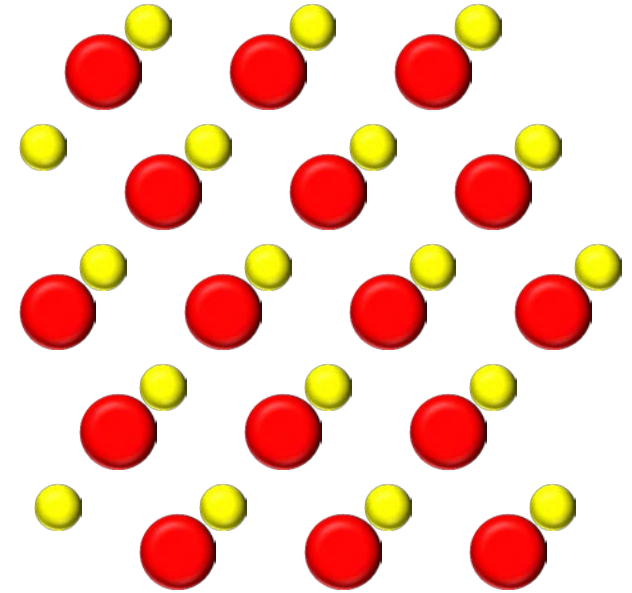
Fala rozproszona na wszystkich atomach:

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

Atomy w bazie

Period sieci

$$\sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}\vec{R}_{0j}}$$



Krystalografia

Geometryczny czynnik strukturalny

Fala rozproszona na jednym atomie:

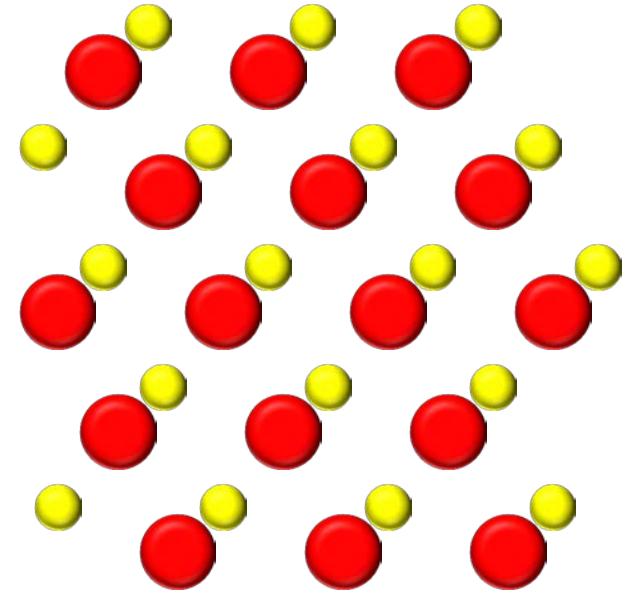
$$\Psi = A e^{i(\vec{k}'\vec{r} - \omega t)} f$$

Fala rozproszona na wszystkich atomach:

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

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

$$A e^{i(\vec{k}'\vec{r} - \omega t)} \left[\sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}\vec{R}_{0j}} \right] \left[\sum_{n_1} e^{-i\Delta\vec{k}n_1\vec{t}_1} \right] \left[\sum_{n_2} e^{-i\Delta\vec{k}n_2\vec{t}_2} \right] \left[\sum_{n_3} e^{-i\Delta\vec{k}n_3\vec{t}_3} \right]$$



Krystalografia

Geometryczny czynnik strukturalny

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

Czynnik ten osiąga maksymalną wartość gdy:

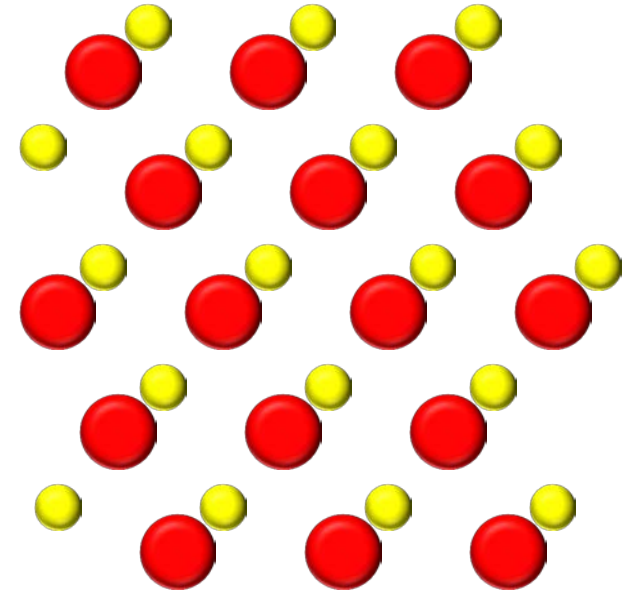
$$e^{-i\Delta\vec{k}\vec{t}_j} = 1$$

Są to warunki Lauego, równoważne warunkowi Bragga

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

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

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



Krystalografia

Geometryczny czynnik strukturalny

Wygodnie jest wprowadzić 3 wektory

niewspółpłaszczyznowe

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

$$\vec{g}_1 = 2\pi \frac{\vec{t}_2 \times \vec{t}_3}{\vec{t}_1 (\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}$$

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

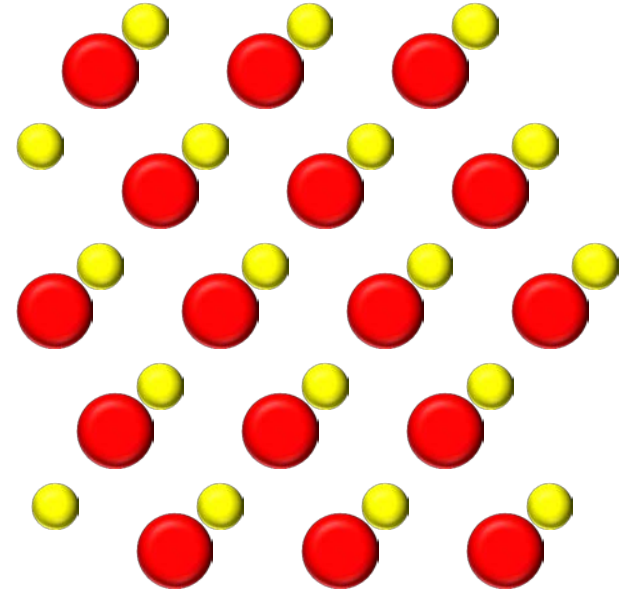
$$\Delta\vec{k}\vec{t}_1 = 2\pi h$$

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

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

Dowolny wektor: $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$
spełnia warunki Lauego, zatem, refleksy występują gdy:

$$\Delta\vec{k} = \vec{G}$$



Krystalografia

Geometryczny czynnik strukturalny

Wygodnie jest wprowadzić 3 wektory niewspółpłaszczyznowe

$$e^{-i\Delta\vec{k}\vec{t}_j} = e^{-i\vec{G}\vec{t}_j}$$

$$\vec{G}\vec{t} = (h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3)(n_1\vec{t}_1 + n_2\vec{t}_2 + n_3\vec{t}_3)$$

$$\vec{G}\vec{t} = 2\pi(n_1h + n_2k + n_3l)$$

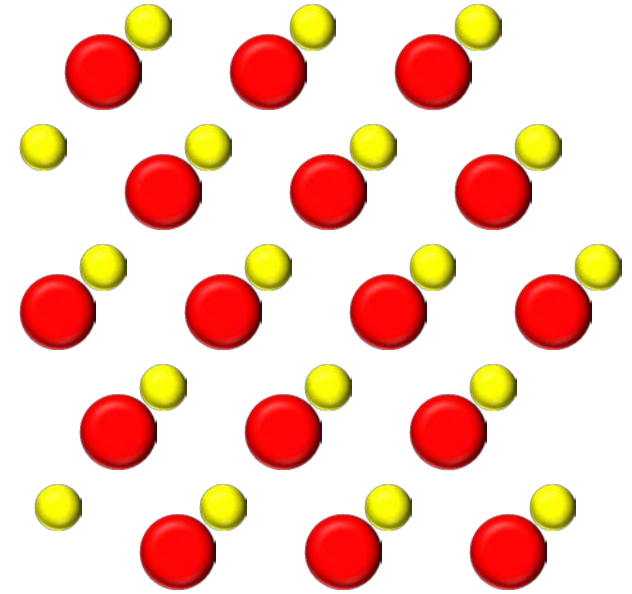
Geometryczny czynnik strukturalny

$$F(hkl) = \sum_j f_j \exp(-i2\pi(n_1h + n_1k + n_1l))$$

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

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

$$\vec{g}_1 = 2\pi \frac{\vec{t}_2 \times \vec{t}_3}{\vec{t}_1(\vec{t}_2 \times \vec{t}_3)}$$



Krystalografia

Geometryczny czynnik strukturalny

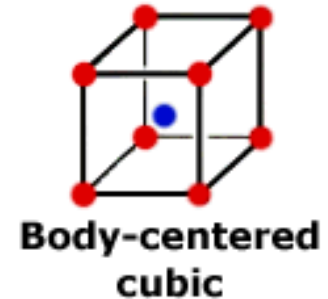
Przykład: Dla kryształu Li i kryształu TlBr (sieci typu bcc – regularna przestrzennie centrowana) znaleźć możliwe wartości geometrycznego czynnika strukturalnego.

$$r_1 = (0,0,0)$$

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

$$F(hkl) = \sum_j f_j \exp(-i2\pi(n_1h + n_2k + n_3l))$$

$$F_{Li}(hkl) = f_{Li} \exp(-i2\pi(0+0+0)) + f_{Li} \exp\left(-i2\pi\left(\frac{1}{2}h + \frac{1}{2}k + \frac{1}{2}l\right)\right)$$
$$F_{TlBr}(hkl) = f_{Tl} \exp(-i2\pi(0+0+0)) + f_{Br} \exp\left(-i2\pi\left(\frac{1}{2}h + \frac{1}{2}k + \frac{1}{2}l\right)\right)$$



Krystalografia

Geometryczny czynnik strukturalny

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

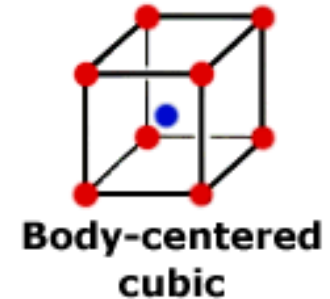
$$r_1 = (0,0,0)$$

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

$$F(hkl) = \sum_j f_j \exp(-i2\pi(n_1h + n_2k + n_3l))$$

$$F_{Li}(hkl) = f_{Li} \exp(-i2\pi(0+0+0)) + f_{Li} \exp\left(-i2\pi\left(\frac{1}{2}h + \frac{1}{2}k + \frac{1}{2}l\right)\right)$$

$$F_{Li}(hkl) = f_{Li} (1 + \exp i\pi(h+k+l))$$



nieparzyste

parzyste

Krystalografia

Geometryczny czynnik strukturalny

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

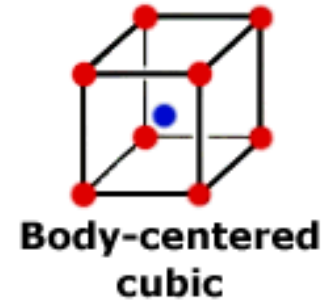
$$r_1 = (0,0,0)$$

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

$$F(hkl) = \sum_j f_j \exp(-i2\pi(n_1h + n_1k + n_1l))$$

$$F_{TlBr}(hkl) = f_{Tl} \exp(-i2\pi(0+0+0)) + f_{Br} \exp\left(-i2\pi\left(\frac{1}{2}h + \frac{1}{2}k + \frac{1}{2}l\right)\right)$$

$$F_{Li}(hkl) = f_{Tl} + f_{Br} \exp i\pi(h+k+l)$$



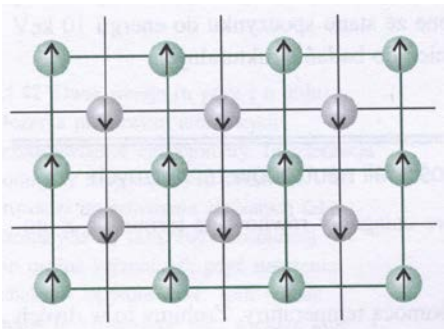
Krystalografia

Neutrony

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.

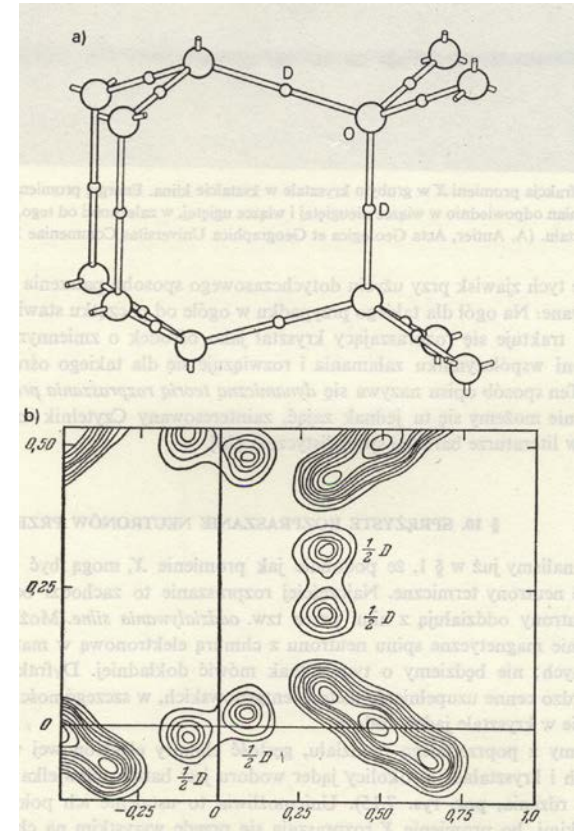


$$E = \frac{\hbar^2}{2M\lambda^2}$$

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

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

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



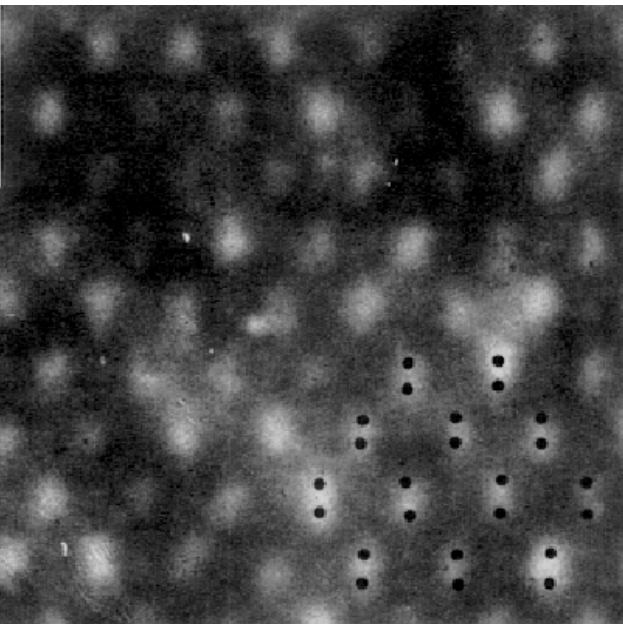
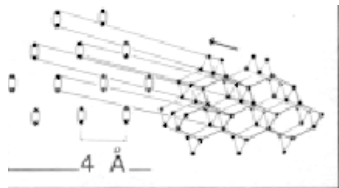
J. Ginter

Krystalografia

Elektrony

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

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

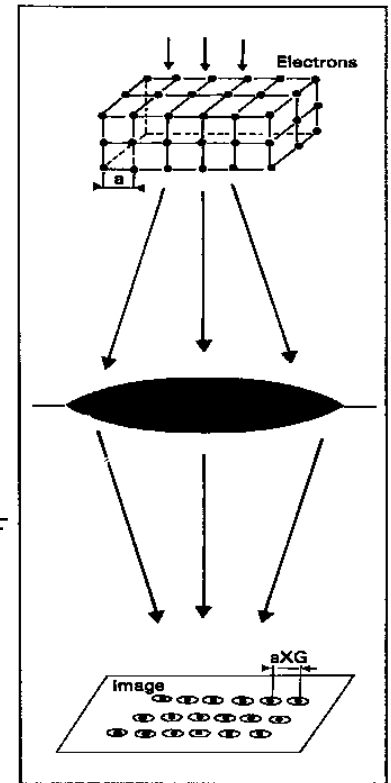


$$E = \frac{\hbar^2}{2M\lambda^2}$$

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

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

$$1 \text{ Å dla } E = 144 \text{ eV}$$

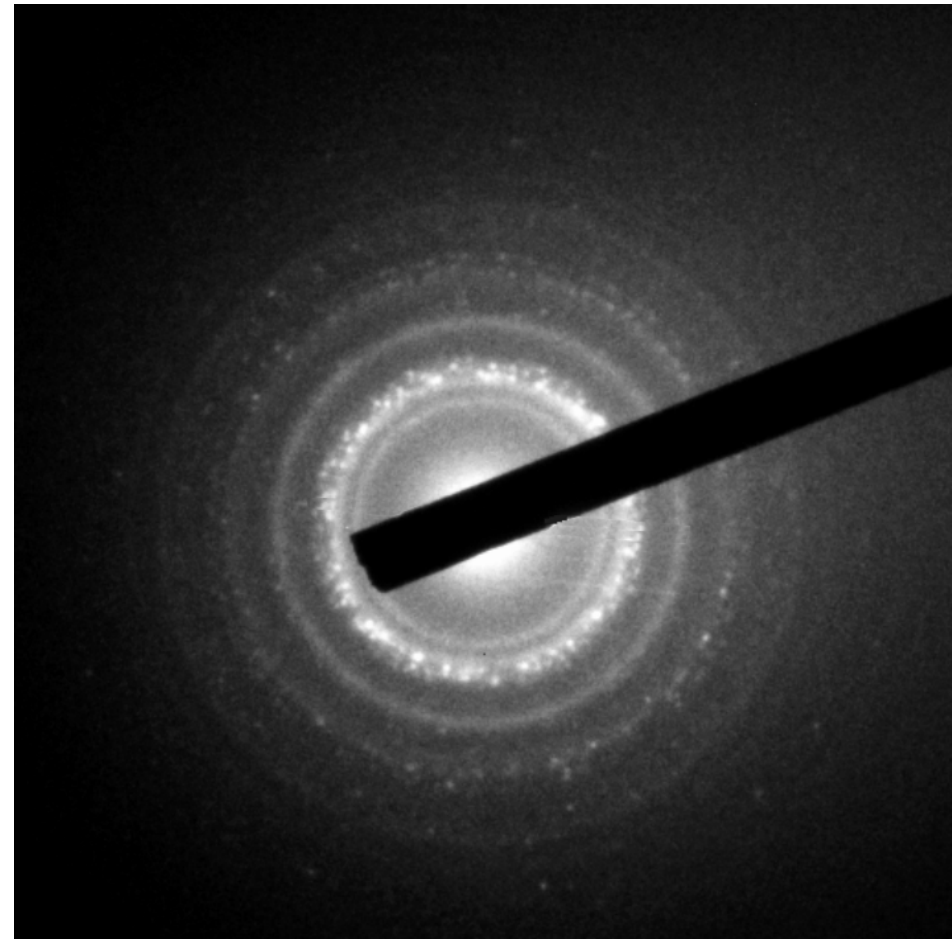
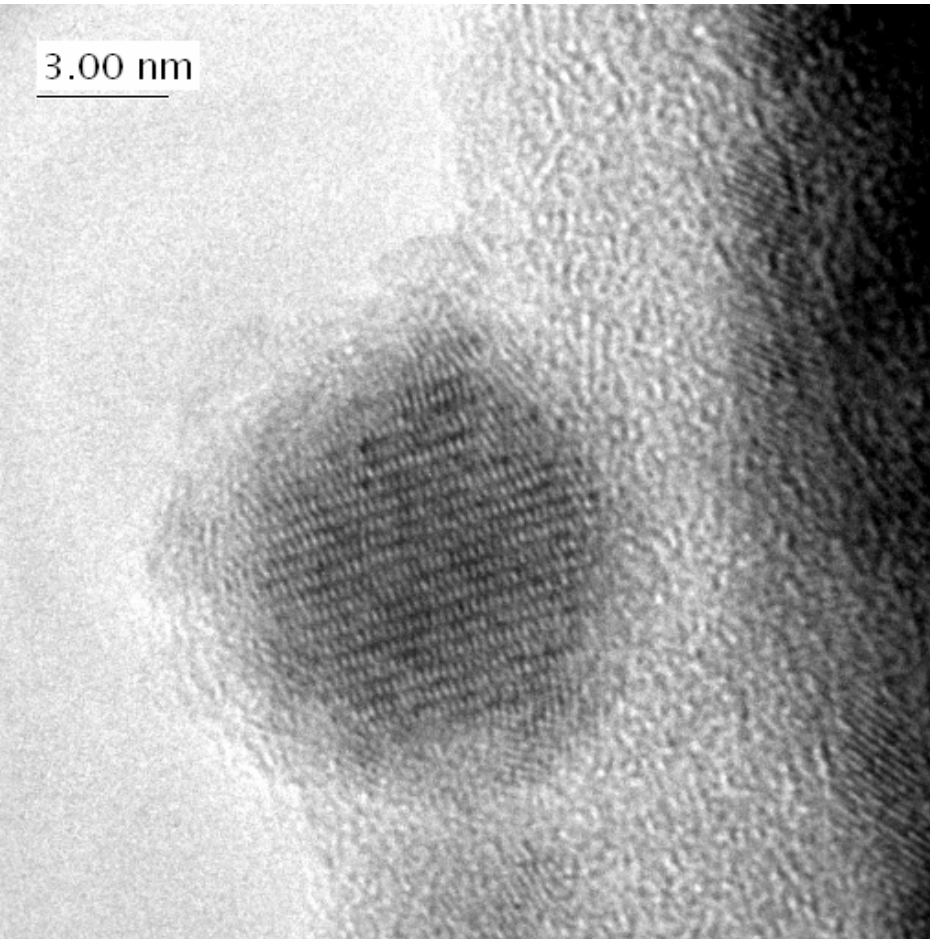


T. Stacewicz & A. Witowski

Krystalografia

Elektrony

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

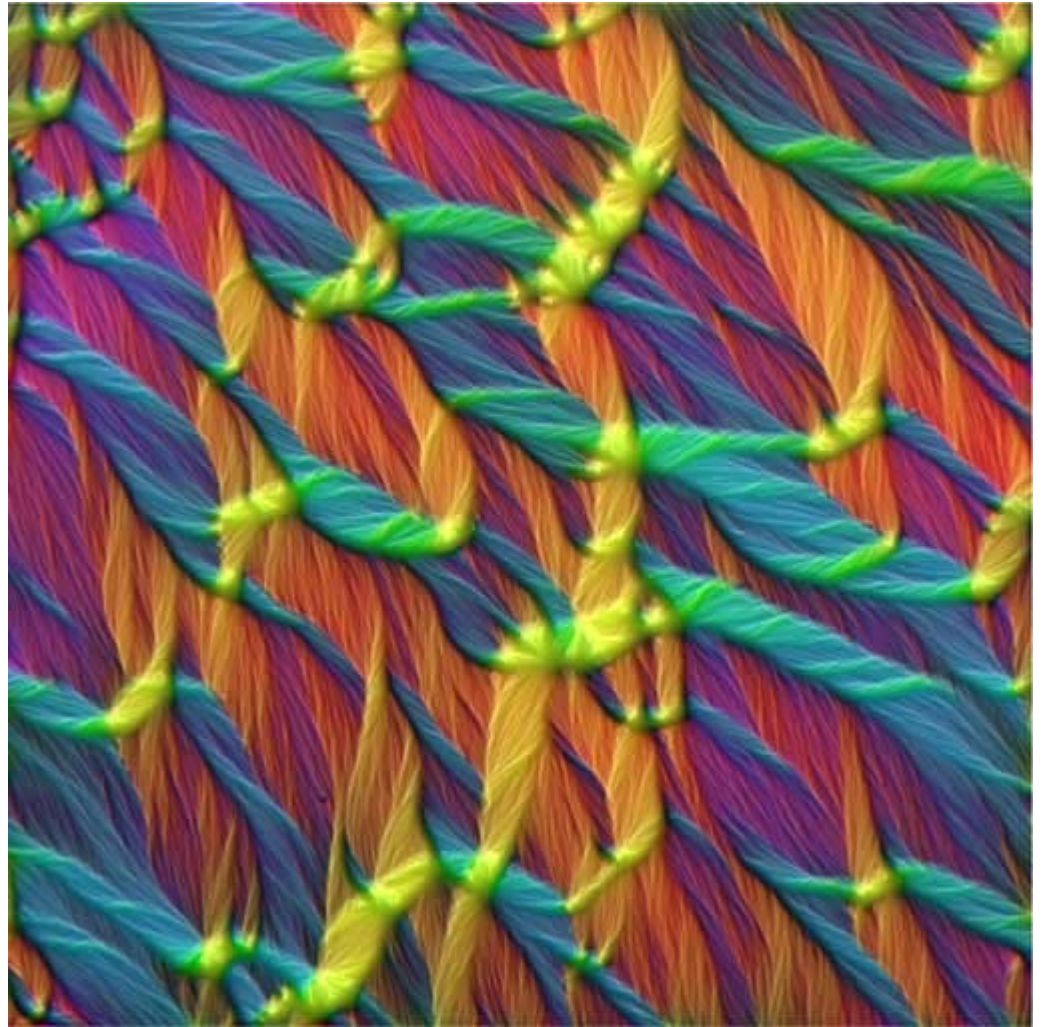


Krystalografia

Elektrony

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



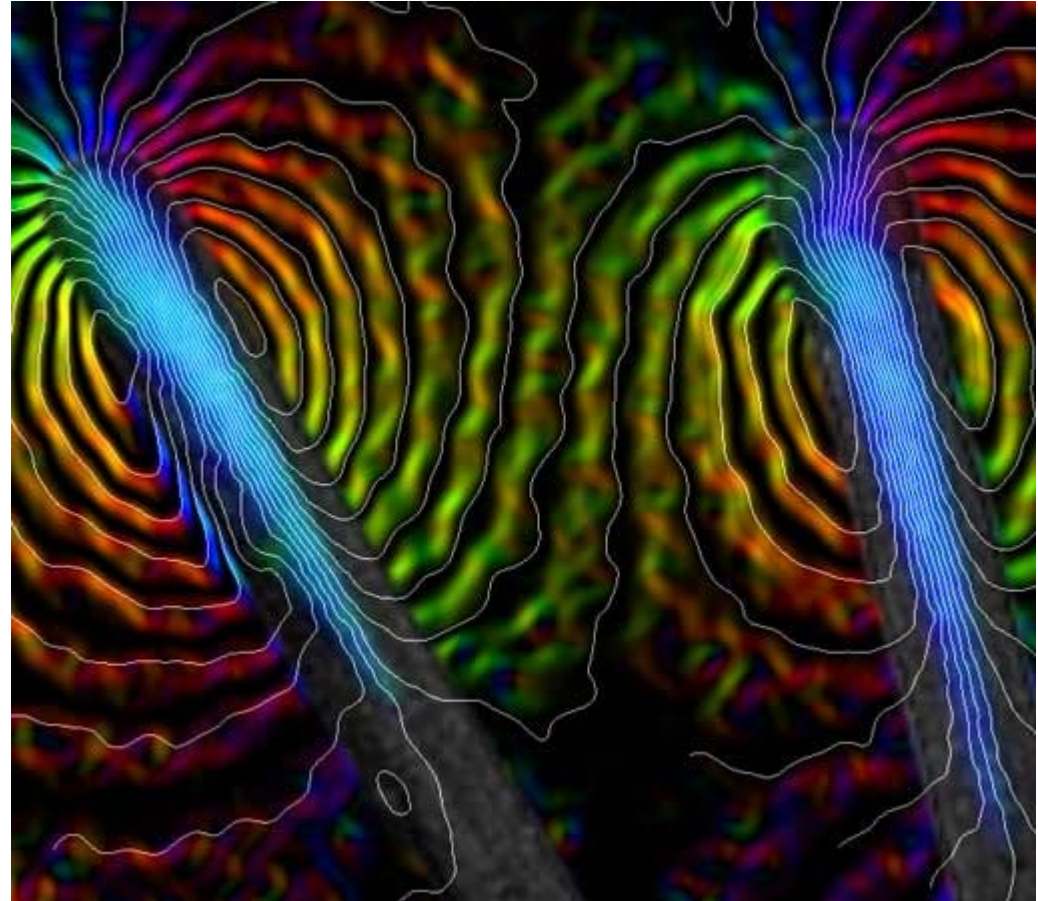
<http://www.rafaldb.com/pictures-micrographs/index.html>

Krystalografia

Elektrony

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.



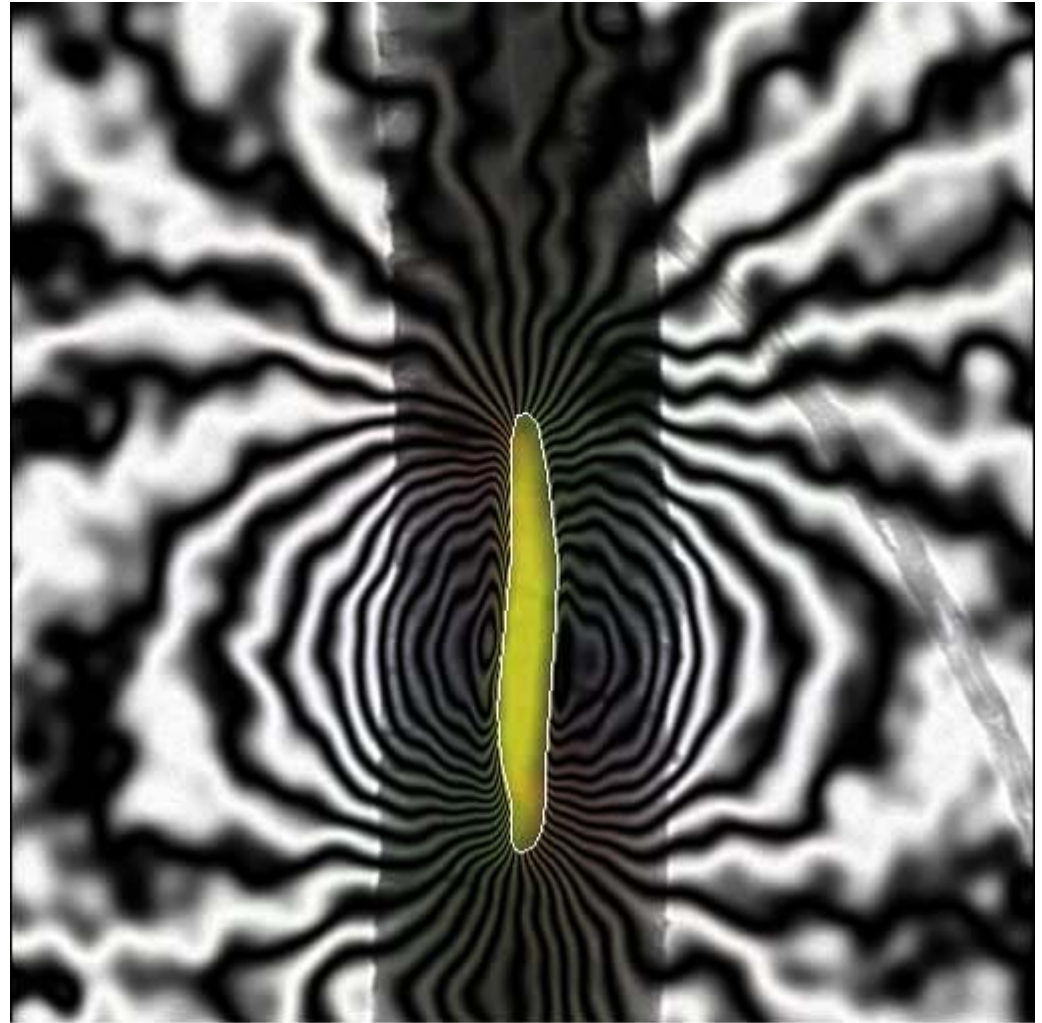
<http://www.rafaldb.com/pictures-micrographs/index.html>

Krystalografia

Elektrony

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.



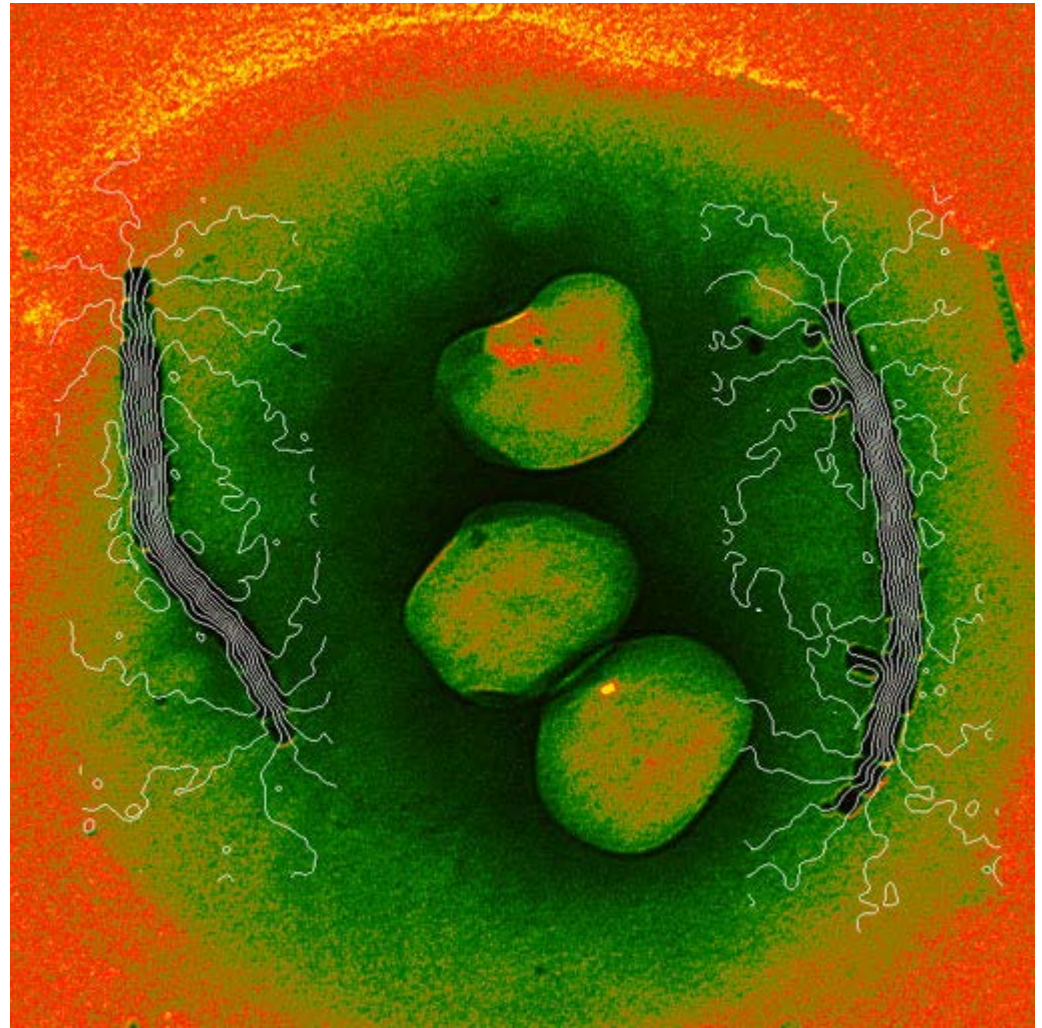
<http://www.rafaldb.com/pictures-micrographs/index.html>

Krystalografia

Elektrony

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>

Studia II stopnia IN

Studia II stopnia na makrokierunku „Inżynieria nanostruktur” odbywają się w ramach trzech ścieżek kształcenia:

- **Fotonika (Photonics),**
- **Modelowanie Nanostruktur i Nowych Materiałów (MONASTR) (Modeling of Nanostructures and Novel Materials), Nanotechnologie**
- **Charakteryzacja Nowych Materiałów (NiChNM) (Nanotechnologies and the Characterization of Novel Materials).**

Studenci mają do wyboru zajęcia profilowane na zdobycie specjalistycznego wykształcenia związanego z nanotechnologiami, zagadnieniami będącymi aktualnymi problemami naukowymi i realizacji programu studiów II stopnia we współpracy z grupami badawczymi.



Studia II stopnia IN



Po pierwszym semestrze II etapu studiów, studenci mogą wybrać ścieżkę kształcenia. W tym celu muszą udać się do opiekuna danej ścieżki, który przedstawi możliwości wykonywania prac magisterskich oraz ich opiekunów. Opiekun będzie ustalał z każdym studentem indywidualny program studiów w zakresie wybieranych przedmiotów



Nowe wyzwania - nowe kierunki. Rozwój kierunków interdyscyplinarnych dla potrzeb gospodarki opartej na wiedzy

- Stypendia – 1000 zł/mies
- Wyjazdy na dowolne konferencje w Europie
- Zajęcia doszkolające i warsztaty naukowe
- Pomoc w znalezieniu zatrudnienia