



**AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA  
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE**

# **Kwazikryształy - struktura atomowa, obraz dyfrakcyjny i modelowanie**

**Radosław Strzałka**

**Katedra Fizyki Materii Skondensowanej  
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH w Krakowie**

**Seminarium Wydziałowe, 18.03.2016**

# Plan prezentacji

1. Kwazikryształy ikozaedryczne. Metody opisu struktury.
2. Metoda statystyczna (średniej komórki elementarnej). Rozwój metody statystycznej w opisie struktury układów aperiodycznych.
- 3. Zastosowanie metody statystycznej do opisu struktury kwazikryształów ikozaedrycznych.**
4. Wpływ nieporządku na strukturę kwazikryształów (i innych układów aperiodycznych).
5. Analiza modeli wielowymiarowych kwazikryształów ikozaedrycznych w przestrzeni fizycznej.

# Rodziny kwazikryształów

Ikozaedryczne (Shechtman et al. 1984)

Klasa Lauego:  $m\bar{3}5$

- Trójskładnikowe:
  - Al: Al-Cu-(Ru, Os, Fe);  
Al-Pd-(Mn, Re, Tc, Ru, Os)
  - Zn: Zn-Mg-(Hf, Zr);  
Al-Mg-(Ga, Ho, Tb, Y, Ns, Dy);  
Zn-Sc-(Ni, Cu, Co, Fe, Mn, Mg,  
Pt, Pd, Au)
  - Cd: Cd-Mg-(Y, Er, Ho, Tb, Dy, Gd)
- Dwuskładnikowe:
  - Cd-Yb;  $Cd_{84}Ca_{16}$
  - Sc-Zn
  - Al-Mn

Dotychczas ilościowa analiza strukturalna jedynie dla Al-Pd-Mn i Cd-Yb

Dekagonalne (osiowe) Klasa Lauego:  $10/mmm$

- Bendersky 1986 (metastabilne)
- Tsai 1989 (stabilne, Al-Ni-Co; Al-Cu-Co)
- Periodycznie ułożone aperiodyczne warstwy 2D
- Od 2 do 6 warstw na period
- Stabilne jedynie trójskładnikowe
  - Al-Ni-(Co, Fe, Rh)
  - Al-Cu-(Co, Rh, Ir)
  - Zn-Mg-(Dy, Er, Ho, Lu, Tm, Y)

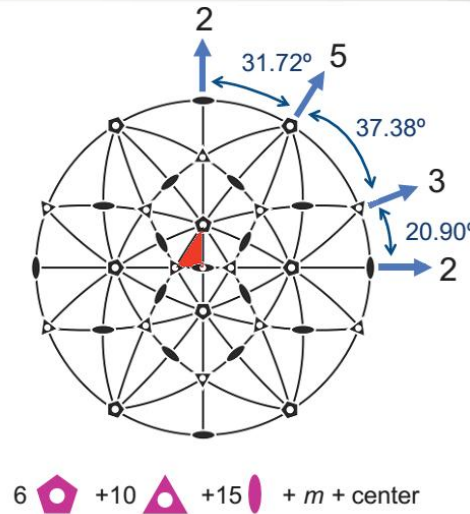
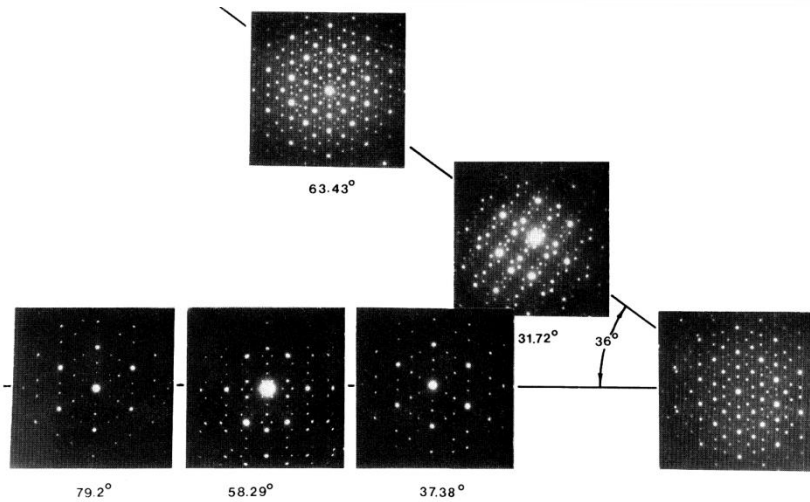
Dotychczas ilościowa analiza strukturalna jedynie dla Al-Ni-Co i Al-Co-Cu

Naturalne kwazikryształy:  $Al_{63}Cu_{24}Fe_{13}$

- odkrycie 2009 (Czukotka)
- Bindi *et al.* (2011)



# Kwazikryształy ikozaedryczne



Symetria ikozaedru

klasa Lauego

$$m\bar{3}5$$

grupy punktowe

$$235 \quad \frac{2}{m}\bar{3}5$$

grupy przestrzenne

$$Pm\bar{3}5 \quad Fm\bar{3}5$$

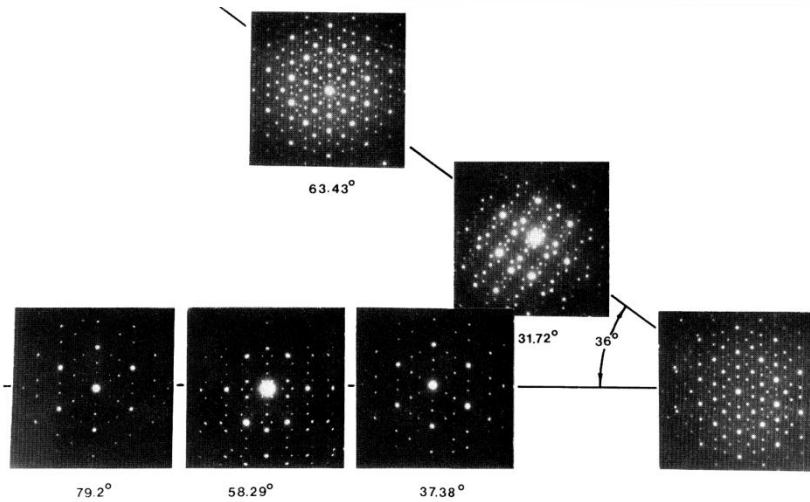
D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn,  
Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 1951-1953



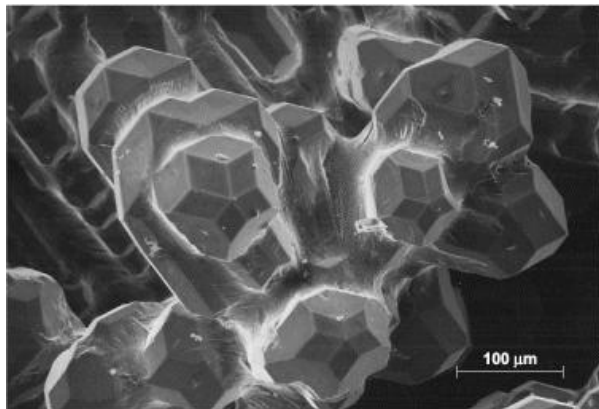
Odkrycie kwazikryształów:

Dan Shechtman, 8 kwietnia 1982 w NBS w Waszyngtonie.  
Doktor Honoris Causa AGH, 4 września 2013.

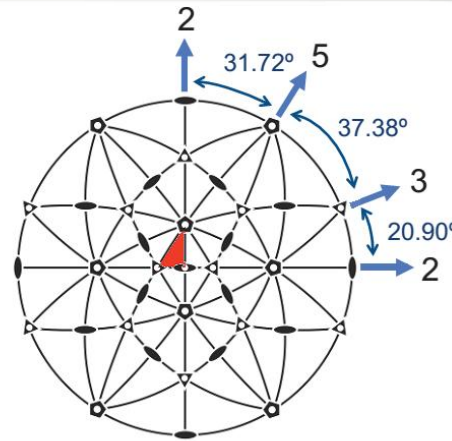
# Kwazikryształy ikozaedryczne



D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn,  
Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 1951-1953



An-Pang Tsai *et al.* Jpn. J. Appl. Phys. **26** (1987) L1505



Symetria ikozaedru

klasa Lauego

$$m\bar{3}5$$

grupy punktowe

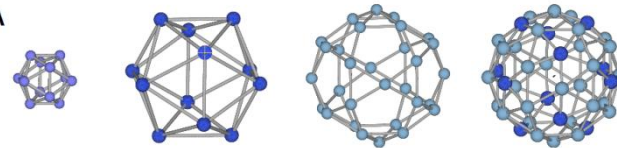
$$235 \quad \frac{2}{m}\bar{3}5$$

grupy przestrzenne

$$Pm\bar{3}5 \quad Fm\bar{3}5$$

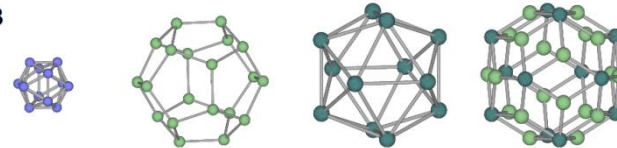
6  +10  +15  + m + center

A



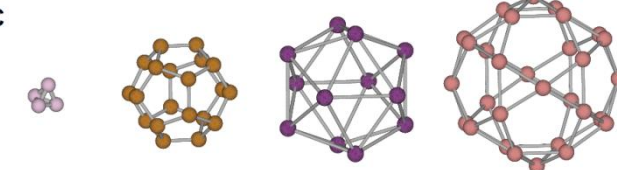
Al-Pd-Mn  
Al-Cu-Fe

B



Al-Cu-Li  
Zn-Mg-Sc  
Ti-Zr-Ni

C

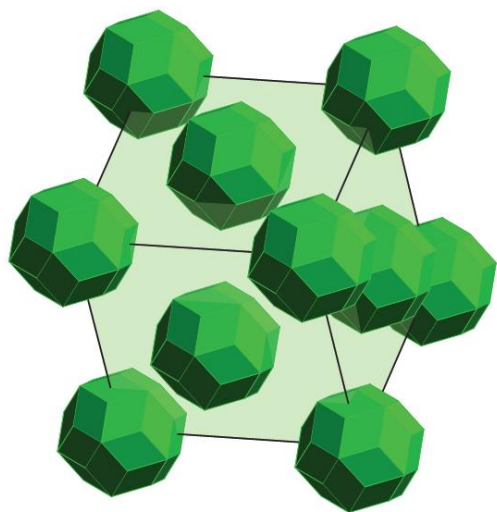


Cd-{Yb,Ca}  
Zn-Sc,  
Cd-Mg-RE  
Zn-Sc-Fe-RE

# Modelowanie wielowymiarowe

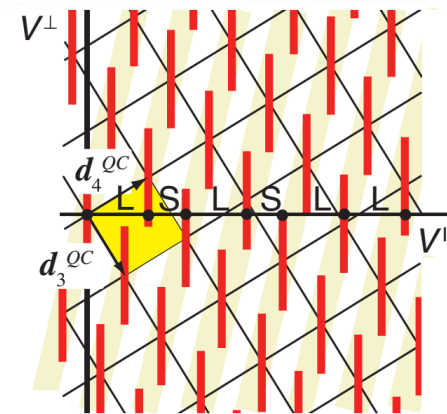
Polega na przywróceniu  
 okresowości struktury w  
 wyższej liczbie wymiarów

Modelowe pokrycie Ammanna  
 (3D Penrose tiling)



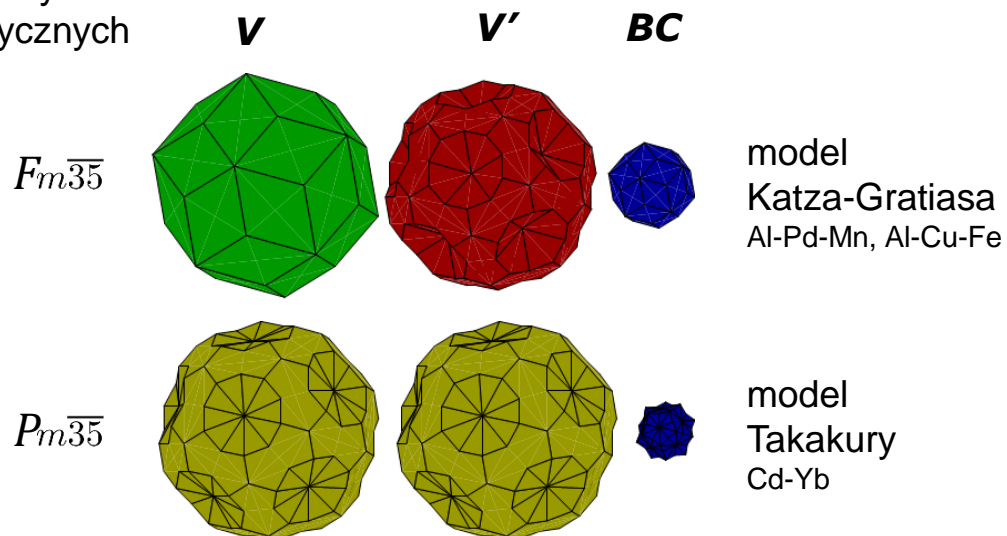
W. Steurer, S. Deloudi, *Crystallography of quasicrystals*,  
 (Heidelberg: Springer, 2009)

Struktura kwaziperiodyczna  
 powstała przez rzutowanie  
 z wielu wymiarów



W. Steurer, S. Deloudi, *Crystallography of quasicrystals*, (Heidelberg: Springer, 2009)

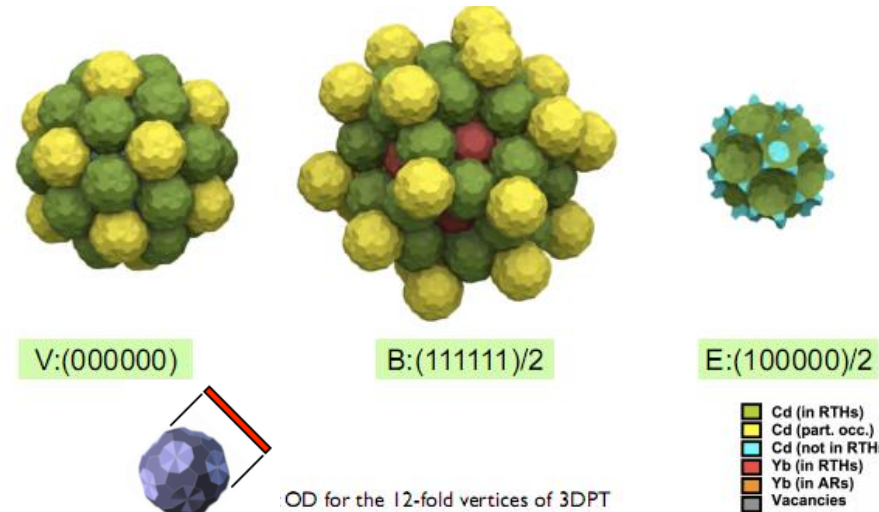
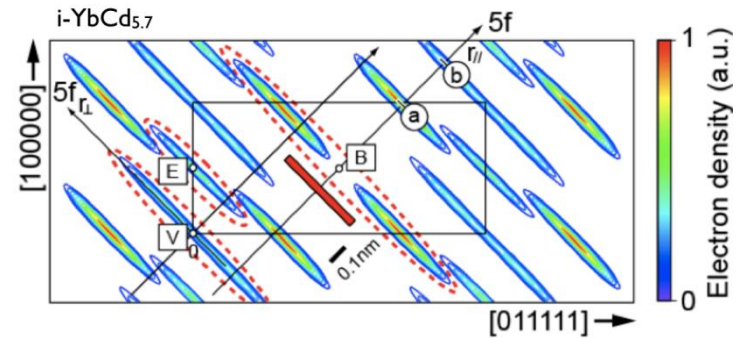
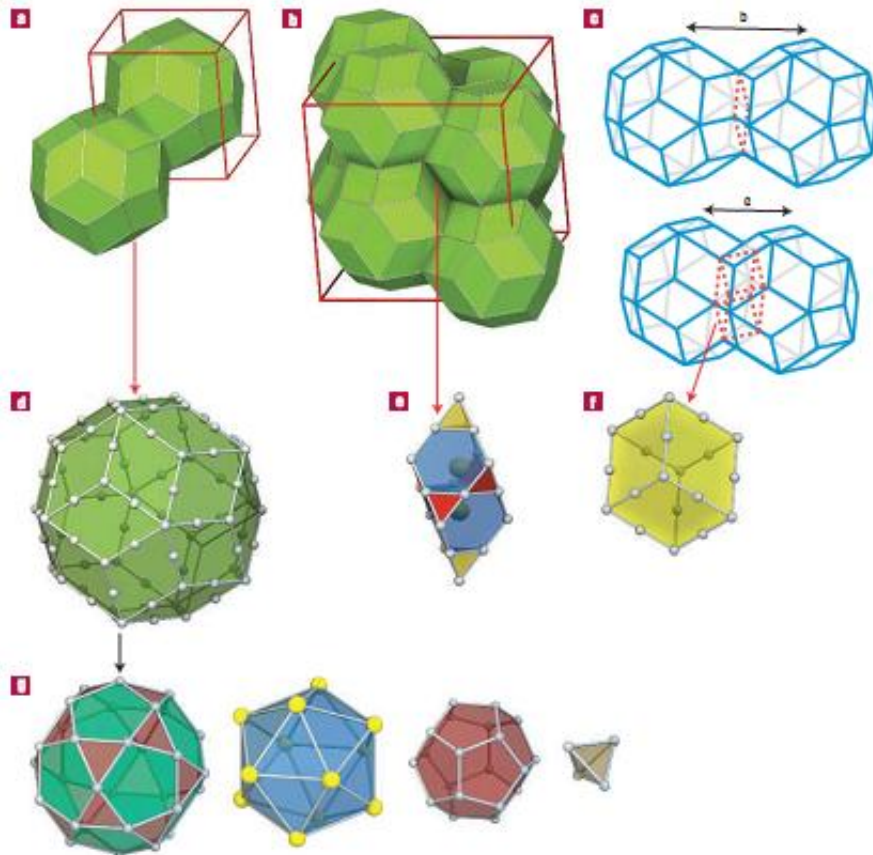
Powierzchnie atomowe  
 dla kwazikryształów  
 ikozaedrycznych



# Klastrowe modele wielowymiarowe

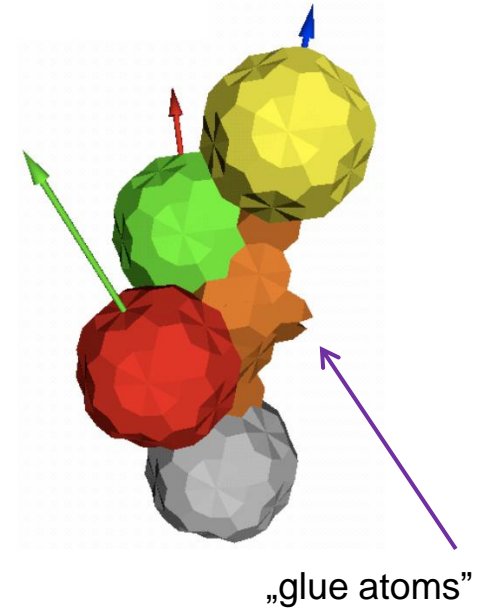
## *i*-YbCd<sub>5.7</sub>

Cluster-based model – structure refinement based on analysis of a structure of an approximant



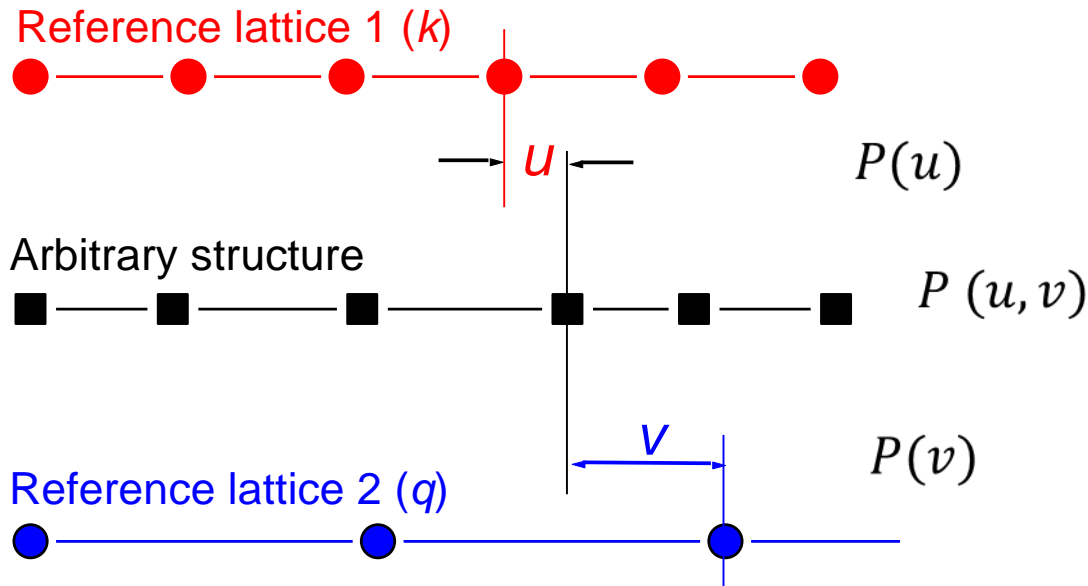
# Modelowanie wielowymiarowe - problemy

- brak informacji o ułożeniu klastrów (stopień wypełnienia przestrzeni, połączenia międzyklastrowe)
- znacząca część atomów nie jest dobrze opisana (problem brakującej gęstości atomowej, nawet rzędu kilku %) – tzw. „glue atoms”
- brakująca gęstość atomowa powoduje problemy w obliczeniach struktury elektronowej i fononowej, a także w modelowaniu *ab initio* (obliczenia energetyczne)
- modele nie odtwarzają poprawnie prostych parametrów: gęstość, dokładny skład chemiczny
- otrzymuje się „zamrożony” obraz struktury (defekty nie mogą być łatwo uwzględnione), z dużymi obsadzeniami częściowymi i elipsoidami ADP
- modele wielowymiarowe nie mogą być efektywnie wykorzystane w badaniu własności kwazikryształów (elektrycznych, mechanicznych,...)





# Konceptcja średniej komórki elementarnej (ŚKE) (average unit cell concept - AUC)



Rozkład  $P(u, v)$  jest ciągły i stały, niezerowy tylko wzdłuż pewnej relacji skalowania  $v(u)$

Każdą pozycję atomową można wyrazić w ŚKE:

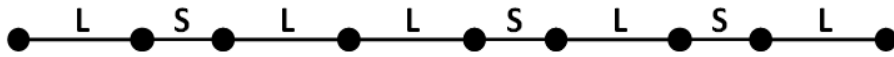
$$\begin{aligned} x &= a\lambda_k + u_x & \lambda_k &= 2\pi/k \\ x &= \beta\lambda_k + u_x & \lambda_k &= 2\pi/q \end{aligned}$$

Kształt ŚKE zależy od wyboru wektorów  $k$  i  $q$ .

$$F(k, q) = \iint_{AUC} P(u, v) \exp[i(nku + mqv)] du dv$$

ŚKE może być rozumiana jako rzut skośnokątny powierzchni atomowej na przestrzeń fizyczną

# Koncepcja średniej komórki elementarnej (ŚKE) przykład: ciąg Fibonacciego



$L \rightarrow L + S$

$S \rightarrow L$

***LSLLSLSLLSLLSLSLSL...***

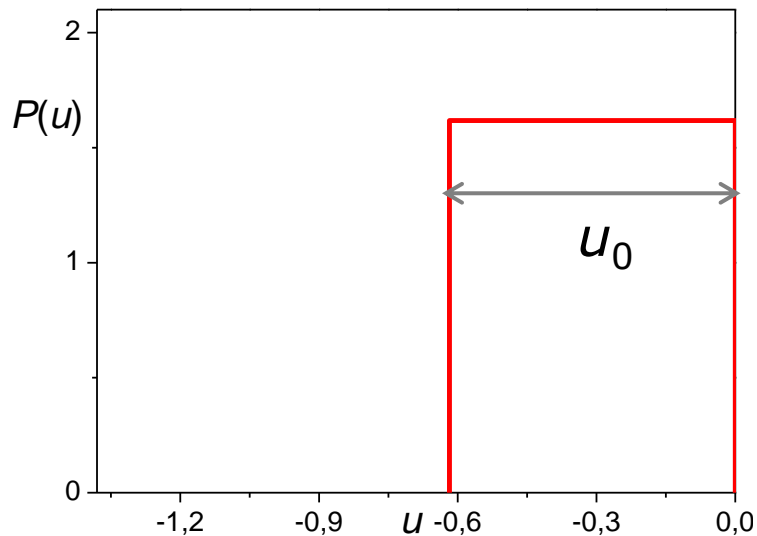
$$L = \tau S$$

$$\tau = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}$$

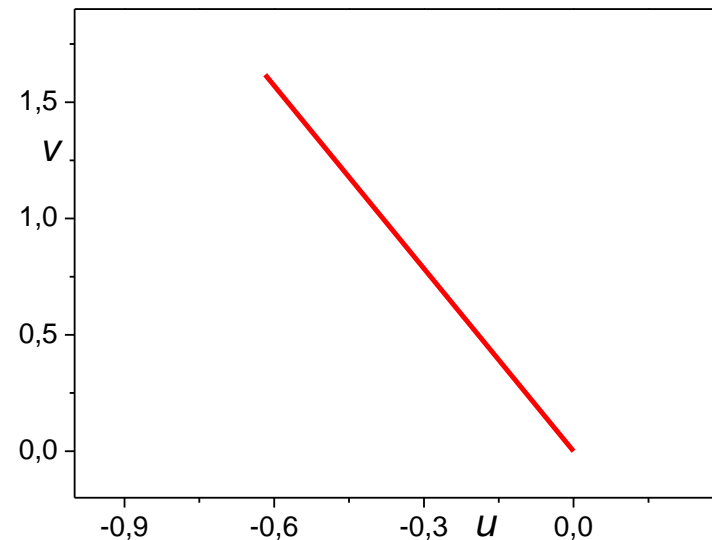
*średnia odległość między węzłami:*

$$1 + \frac{1}{\tau^2} \approx 1.38$$

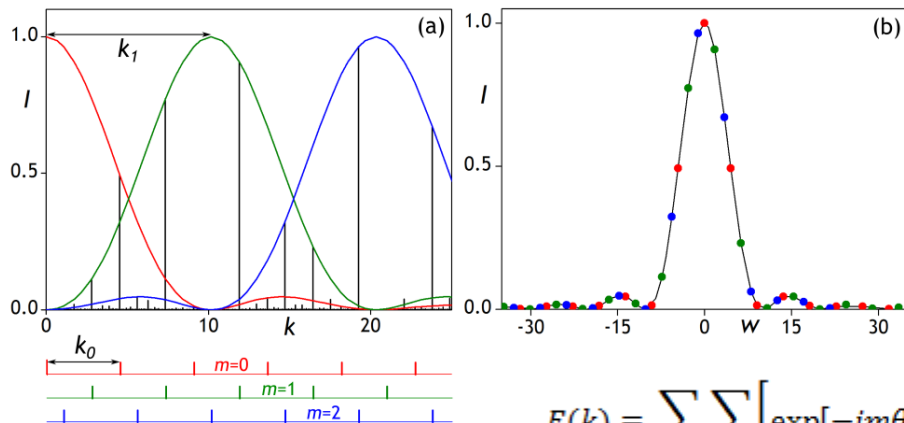
Rozkład  $P(u)$



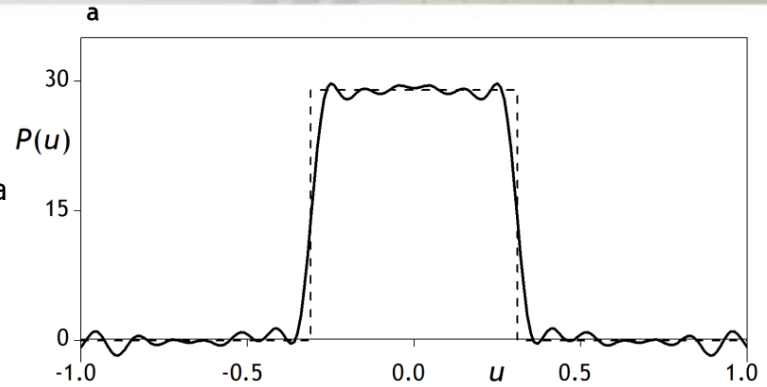
Rozkład  $P(u, v)$



# Periodyczne serie pików w obrazie dyfrakcyjnym kwazikryształów

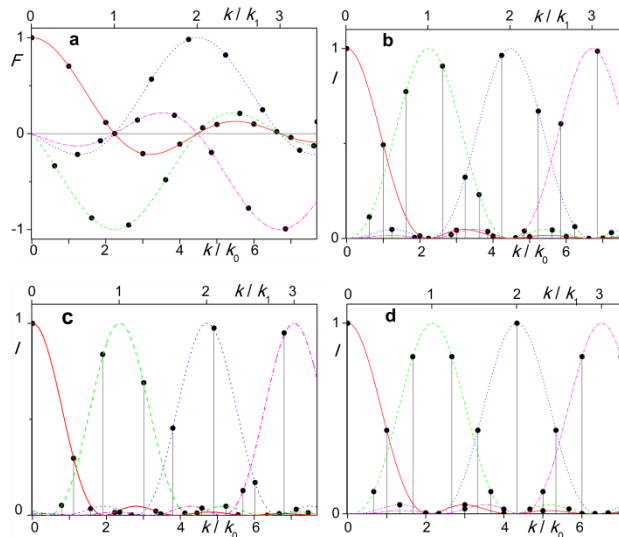
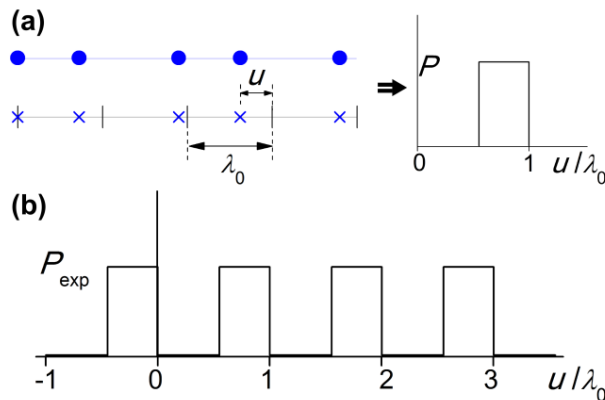


odwrotna  
transformata  
Fouriera



$$F(k) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \sum_{\alpha} \left[ \exp[-im\theta_{\alpha}] \int_{-\infty}^{\infty} P_{\text{exp}}(u) \exp[-i(k - m\kappa)u] du \right]$$

J. Wolny *et al.*,  
Acta Cryst. A70 (2014) 181-185.



Funkcje obwiednie dla kwazikryształu o czynniku skalowania  $\tau$  (**a**-czynnik strukturalny i **b**-obraz dyfrakcyjny) oraz  $\sqrt{2}$  (**c**) oraz periodycznej aproksymanty 3/2 (**d**).

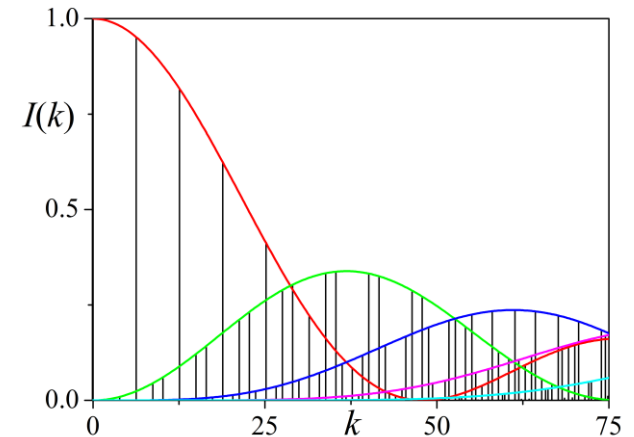
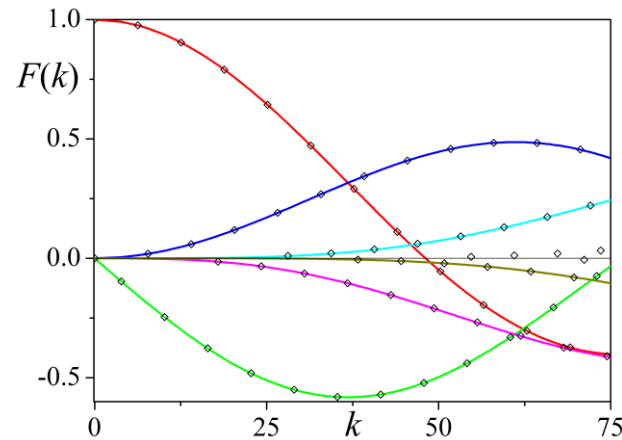
J. Wolny *et al.*,  
Appl. Phys. Lett. 106 (2015) 131905.

# Opis statystyczny struktur harmonicznie modulowanych

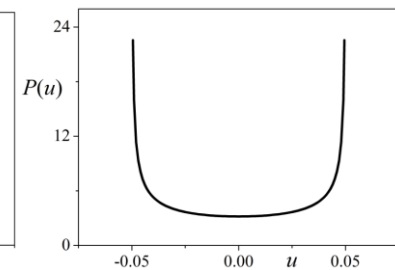
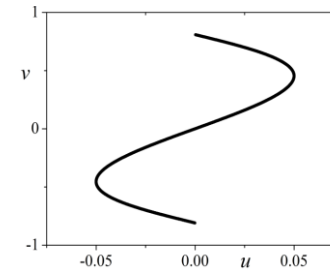
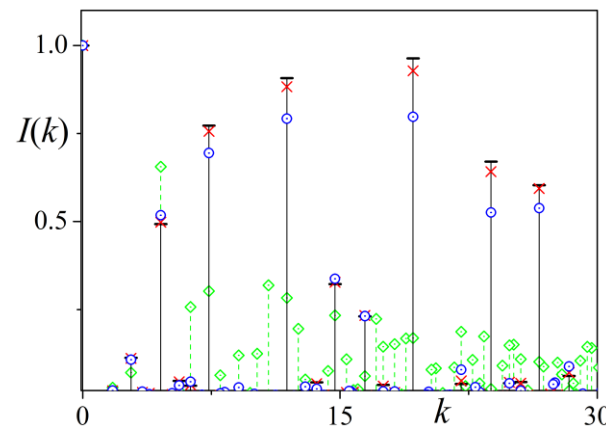
$$x_n = na + A \sin(q_0 na)$$

$$F_{n,m} = J_{-m}(kA)$$

Obwiednie czynnika strukturalnego (po lewej) i obrazu dyfrakcyjnego (po prawej) dla struktury harmonicznie modulowanej ( $A=0.05$ ,  $a=1.0$ ,  $q_0=2\pi/\tau a$ )



Przybliżenie 1D kwazikryształu za pomocą serii harmonicznych modulacji (podobieństwo w obrazie dyfrakcyjnym)

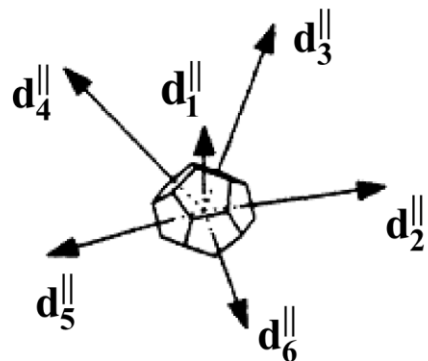
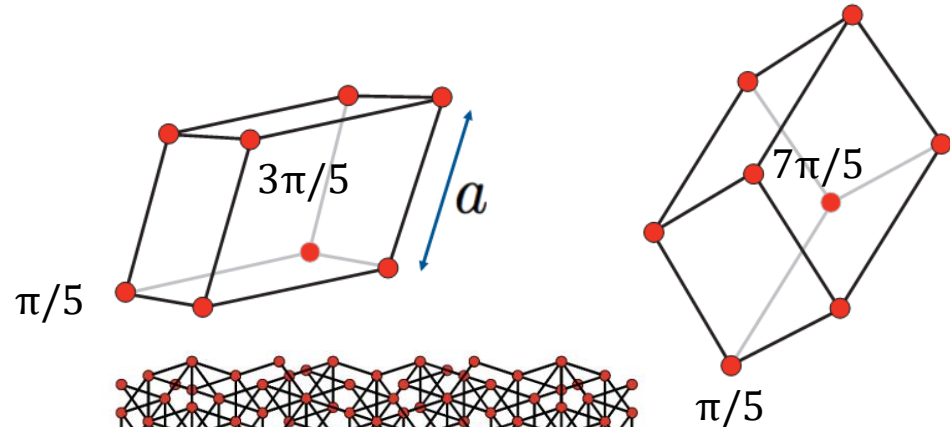
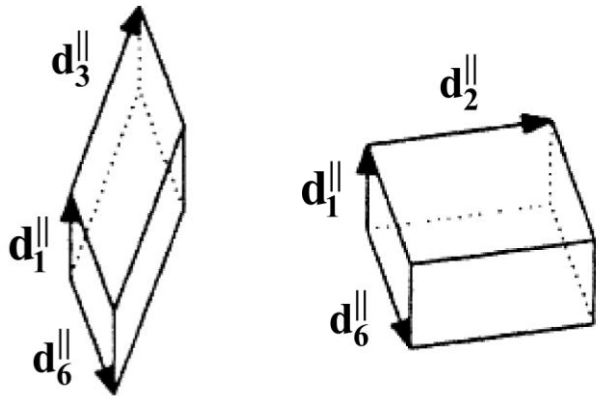


1/9/50 czynników modulujących

# Pokrycie Ammanna

Rozszerzenie pokrycia Penrose'a na 3D – użycie dwóch jednostek strukturalnych – **romboedrów**:

wydłużonego (AR) i spłaszczonego (OR)

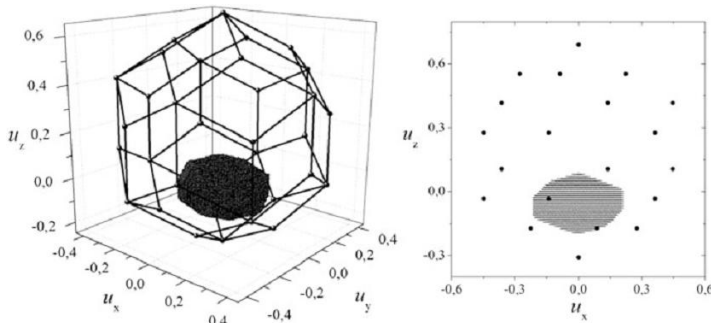


Rzut sieci Ammanna o jednoatomowej dekoracji w wierzchołkach romboedrów

# ŚKE dla pokrycia Ammanna

## -wybór bazy przestrzeni odwrotnej

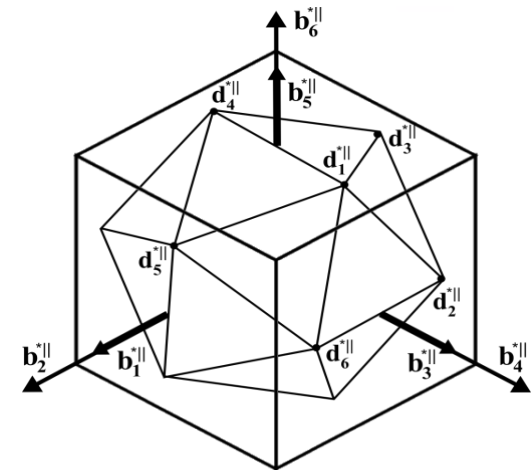
### Baza ikozaedryczna



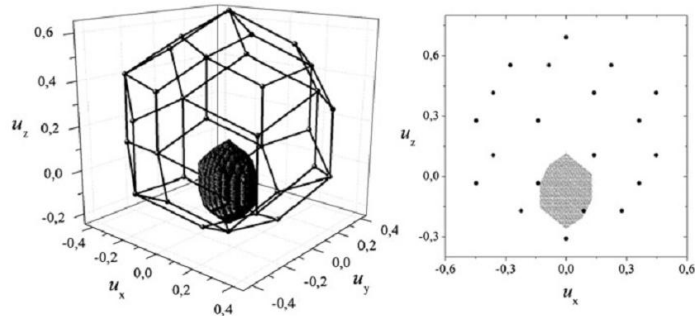
$$|k_x| = 13.7082 (0, -5, -5, 2, 6, 2);$$

$$|k_y| = 7.2068 (0, 2, -2, -3, 0, 3);$$

$$|k_z| = 17.9443 (9, 4, 4, 4, 4, 4)$$



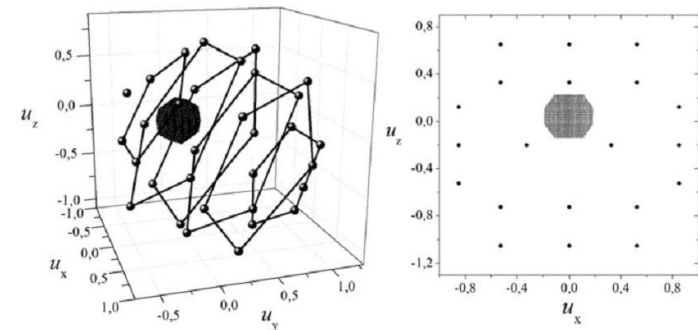
### Baza kartezjańska



$$|k_x| = 22.1803 (0, -8, -8, 3, 10, 3);$$

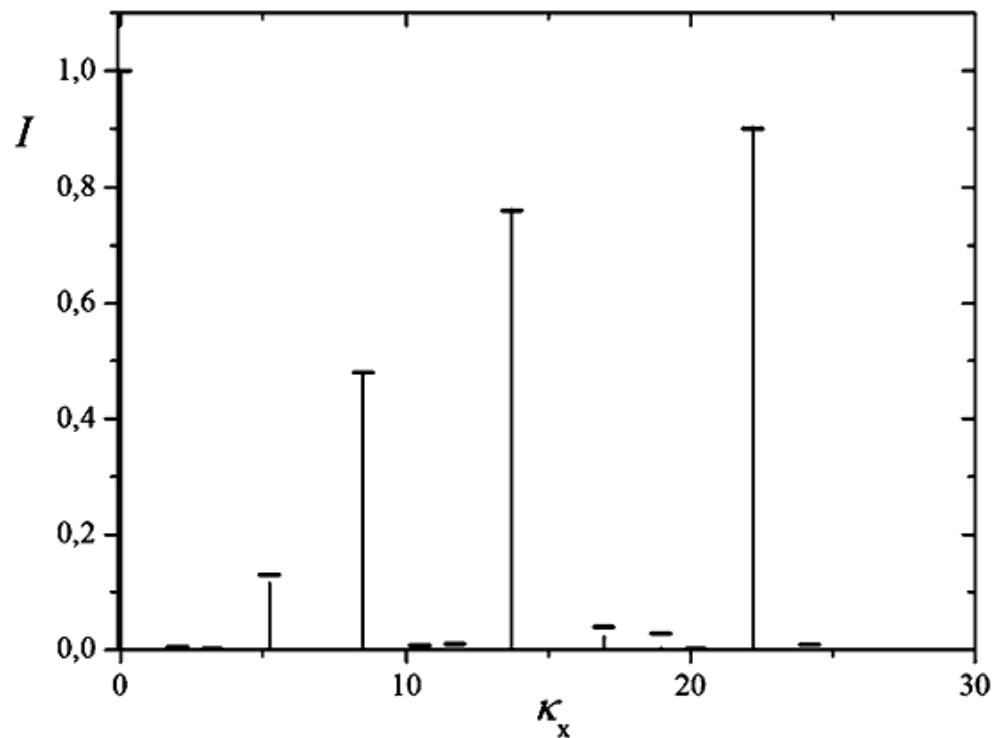
$$|k_y| = 11.6609 (0, -3, 3, 5, 0, -5);$$

$$|k_z| = 4.2361 (2, 1, 1, 1, 1, 1)$$



# ŚKE dla pokrycia Ammanna

## -wybór bazy przestrzeni odwrotnej



Obraz dyfrakcyjny otrzymany numerycznie:  
*pionowe linie* – baza ikozaedryczna  
*poziome kreski* – baza kartezjańska

# ŚKE dla pokrycia Ammanna

## -wybór bazy przestrzeni odwrotnej

Baza ikozaedryczna  $\longrightarrow$  Baza kartezjańska

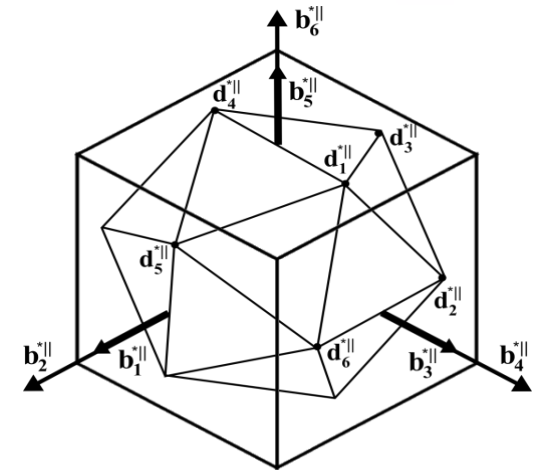
Wektor falowy (pozycja refleksu):

$$\mathbf{k} = h \mathbf{q}_{0x} + h' \mathbf{k}_{0x} + k \mathbf{q}_{0y} + k' \mathbf{k}_{0y} + l \mathbf{q}_{0z} + l' \mathbf{k}_{0z}$$

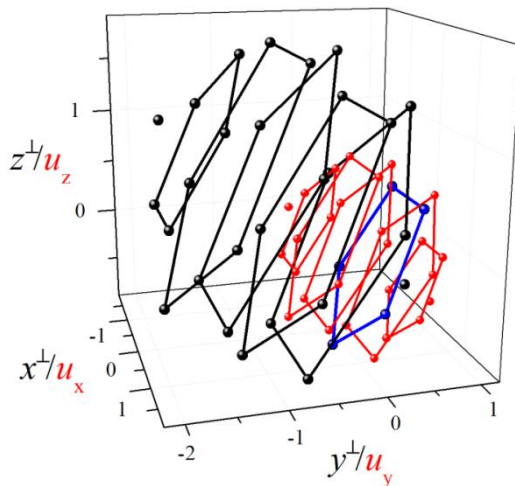
$$\mathbf{q}_{0x} = \left[ \frac{1}{\sqrt{\tau+2}}, 0, 0 \right]; \quad \mathbf{q}_{0y} = \left[ 0, \frac{1}{\sqrt{\tau+2}}, 0 \right]; \quad \mathbf{q}_{0z} = \left[ 0, 0, \frac{1}{\sqrt{\tau+2}} \right]$$

$$\mathbf{k}_{0x} = \left[ \frac{\tau}{\sqrt{\tau+2}}, 0, 0 \right]; \quad \mathbf{k}_{0y} = \left[ 0, \frac{\tau}{\sqrt{\tau+2}}, 0 \right]; \quad \mathbf{k}_{0z} = \left[ 0, 0, \frac{\tau}{\sqrt{\tau+2}} \right]$$

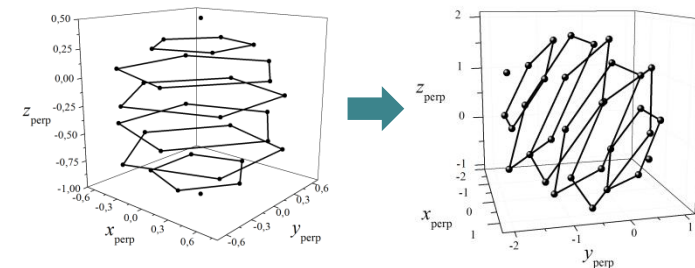
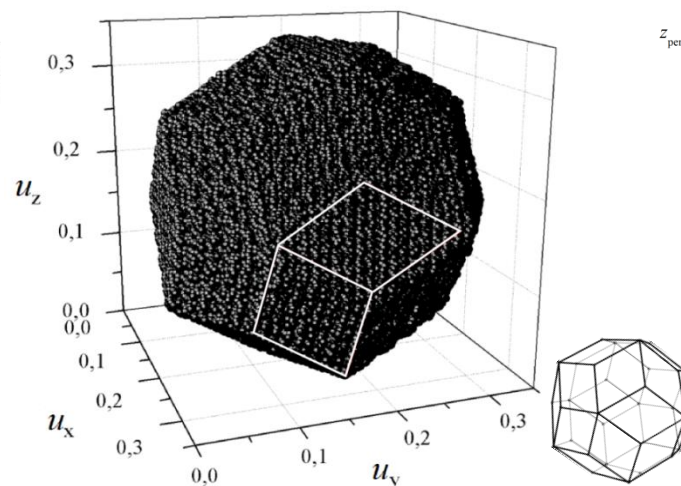
$$q_0 = \frac{2}{\sqrt{\tau+2}} \approx 0.5257, \quad k_0 = \frac{2\tau}{\sqrt{\tau+2}} \approx 0.8507$$



$P(\mathbf{u})$  vs. Pow. atomowa



$P(\mathbf{u})$  numerycznie





# Czynnik strukturalny dla pokrycia Ammanna

– dekoracja jednoatomowa w wierzchołkach

Czynnik strukturalny (geometryczny):

$$F(\mathbf{k}) = \sum_j f_j \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j^{\parallel})$$

$$1) \quad \begin{aligned} x &= \alpha_1 \lambda_{k1} + u_x & x &= \beta_1 \lambda_{q1} + v_x \\ y &= \alpha_2 \lambda_{k2} + u_y & y &= \beta_2 \lambda_{q2} + v_y \\ z &= \alpha_3 \lambda_{k3} + u_z & z &= \beta_3 \lambda_{q3} + v_z \end{aligned}$$

$$2) \quad \lambda_{ki} = \frac{2\pi}{k_{0i}}; \quad \lambda_{qi} = \frac{2\pi}{q_{0i}}; \quad i = 1, 2, 3$$

$$3) \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}^{\parallel} = h_1 q_0 v_x + h_2 k_0 u_x + h_3 q_0 v_y + h_4 k_0 u_y + h_5 q_0 v_z + h_6 k_0 u_z$$

$$v_x = -\tau^2 u_x$$

$$4) \quad v_y = -\tau^2 u_y$$

$$v_z = -\tau^2 u_z$$

$$5) \quad \begin{aligned} k_0 &= 2\pi\tau/(\tau + 2)^{1/2} \\ q_0 &= 2\pi/(\tau + 2)^{1/2} \end{aligned}$$

# Czynnik strukturalny dla pokrycia Ammanna

– dekoracja jednoatomowa w wierzchołkach

Czynnik strukturalny (geometryczny):

$$F(\mathbf{k}) = \sum_j f_j \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j^{\parallel})$$

$$1) \quad \begin{aligned} x &= \alpha_1 \lambda_{k1} + u_x & x &= \beta_1 \lambda_{q1} + v_x \\ y &= \alpha_2 \lambda_{k2} + u_y & y &= \beta_2 \lambda_{q2} + v_y \\ z &= \alpha_3 \lambda_{k3} + u_z & z &= \beta_3 \lambda_{q3} + v_z \end{aligned}$$

$$2) \quad \lambda_{ki} = \frac{2\pi}{k_{0i}}; \quad \lambda_{qi} = \frac{2\pi}{q_{0i}}; \quad i = 1, 2, 3$$

$$3) \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}^{\parallel} = h_1 q_0 v_x + h_2 k_0 u_x + h_3 q_0 v_y +$$

$$v_x = -\tau^2 u_x$$

$$4) \quad v_y = -\tau^2 u_y$$

$$v_z = -\tau^2 u_z$$

$$5) \quad \begin{aligned} k_0 &= 2\pi\tau/(\tau + 2)^{1/2} \\ q_0 &= 2\pi/(\tau + 2)^{1/2} \end{aligned}$$

$$F(\mathbf{k}) = \int_{\text{AUC}} \exp(i\boldsymbol{\chi} \cdot \mathbf{u}) d^3 \mathbf{u}$$

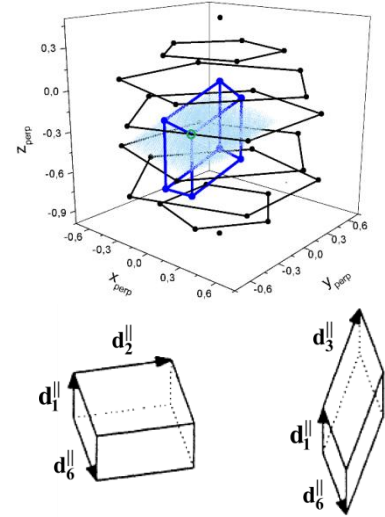
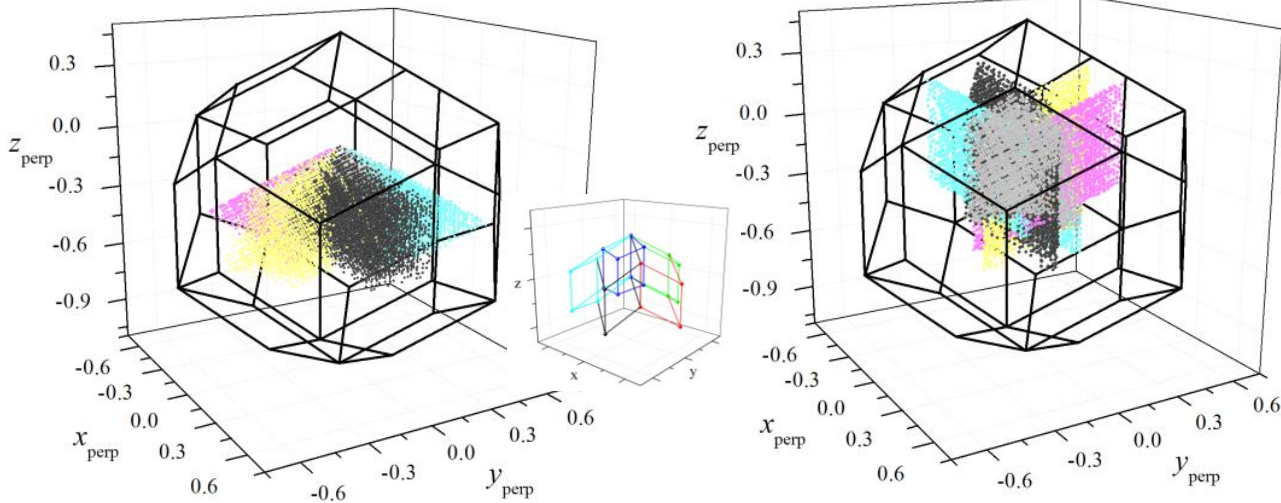
$$\boldsymbol{\chi} = [\chi_x, \chi_y, \chi_z] = k_0 [(h_2 - \tau h_1); (h_4 - \tau h_3); (h_6 - \tau h_5)]$$

$$\mathbf{u} = [u_x, u_y, u_z] = \left[ -\frac{1}{\tau} x^{\perp}; -\frac{1}{\tau} y^{\perp}; -\frac{1}{\tau} z^{\perp} \right],$$

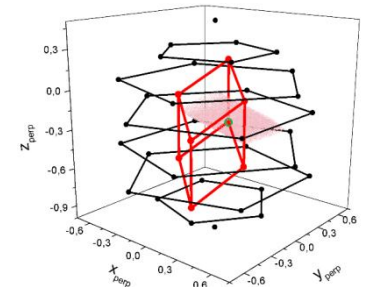
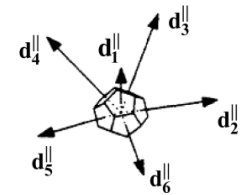
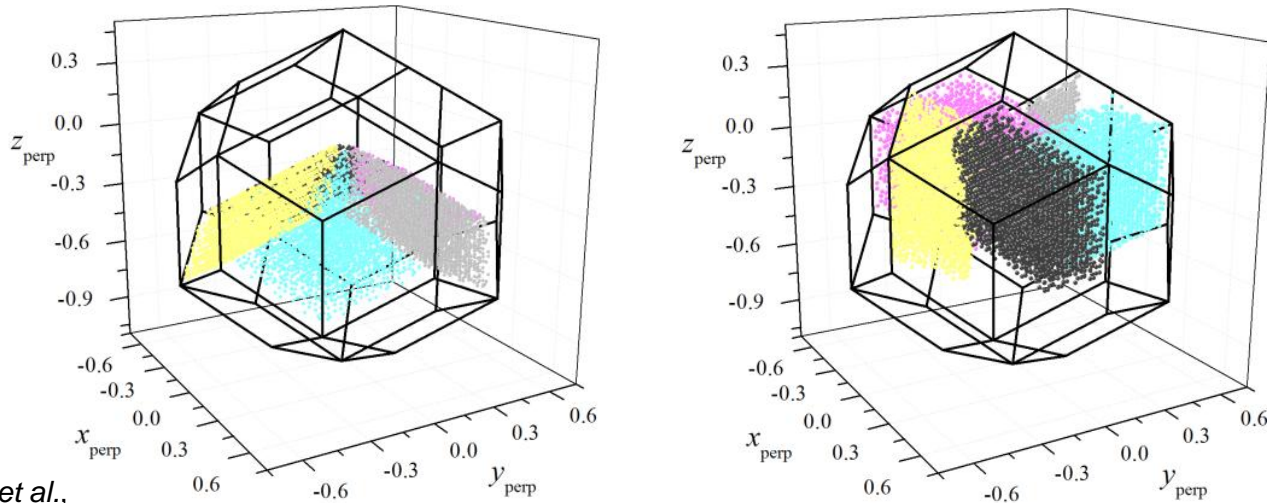
$$F(\mathbf{k}) = \int_0^{\lambda_{k1}} \int_0^{\lambda_{k2}} \int_0^{\lambda_{k3}} P(u_x, u_y, u_z) \exp(i\boldsymbol{\chi} \cdot \mathbf{u}) d^3 \mathbf{u}$$

# Dekoracja jednostek strukturalnych

OR:



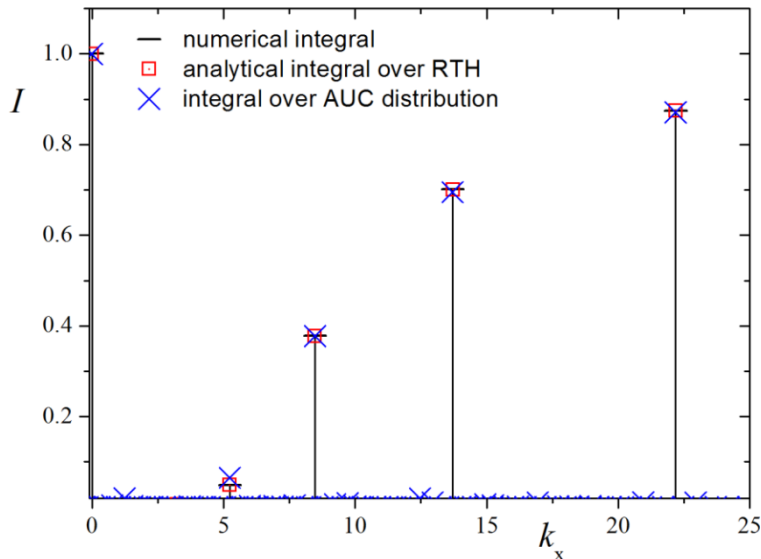
AR:



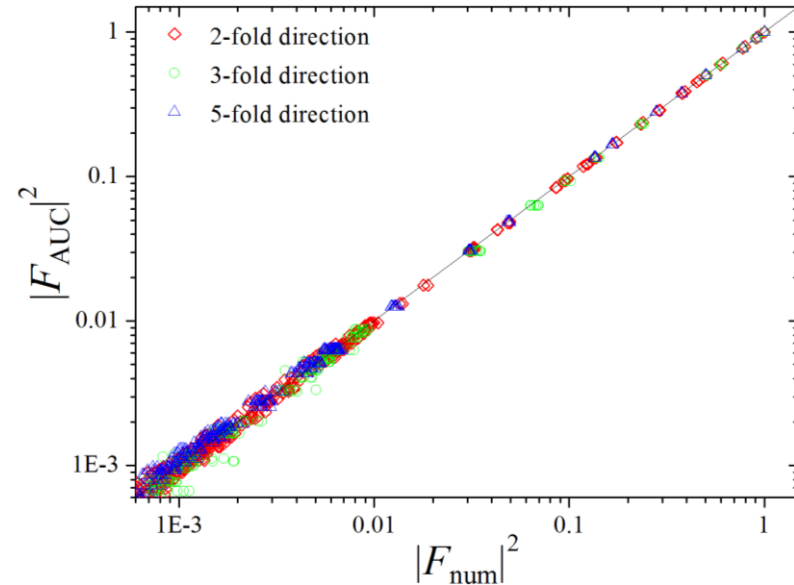
# Obraz dyfrakcyjny – test czynnika strukturalnego (dekoracja w wierzchołkach)

$$F(\chi) = \sum_{l=1}^{10} \left[ F(\chi)_l^{\text{OR}} \sum_{j=1}^{N_1} f_j \alpha_j \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j^l) \right] + \sum_{l=1}^{10} \left[ F(\chi)_l^{\text{AR}} \sum_{j=1}^{N_2} f_j \alpha_j \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j^l) \right]$$

Możliwy rozdział czynnika strukturalnego na część „sieciovą” (transformaty Fouriera po romboedrycznych rozkładach w ŚKE) oraz „atomową” (czynnik fazowy)



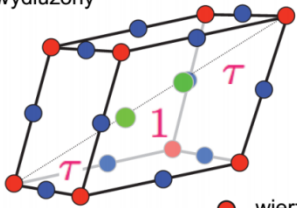
Porównanie obrazu dyfrakcyjnego obliczonego metodą ŚKE, wielowymiarową i numeryczną



Wykres *log-log* – sprawdzenie zgodności czynnika strukturalnego z danymi „eksperymentalnymi”

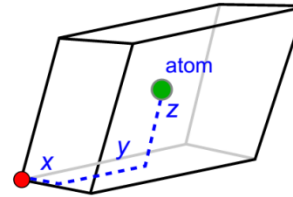
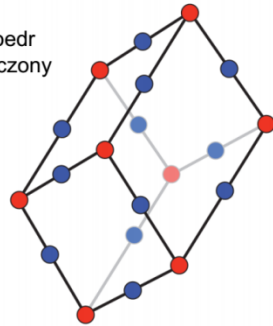
# Model prostej dekoracji

Romboedr wydłużony



- wierzchołki
- środki krawędzi
- długa przekątna romboedru wydłużonego

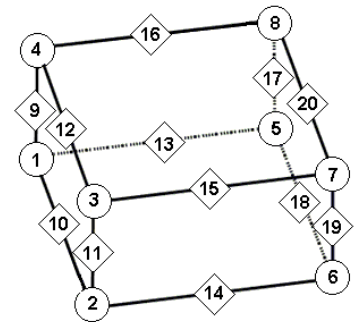
Romboedr spłaszczony



Wierzchołek odniesienia

$$\mathbf{r} = (x, y, z)$$

$$F(\boldsymbol{\chi}) = \sum_{l=1}^{10} \left( F(\boldsymbol{\chi})_l^{\text{OR}} \sum_{j=1}^{N_1} f_j \alpha_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j^l} \right) + \sum_{l=1}^{10} \left( F(\boldsymbol{\chi})_l^{\text{AR}} \sum_{j=1}^{N_2} f_j \alpha_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j^l} \right)$$

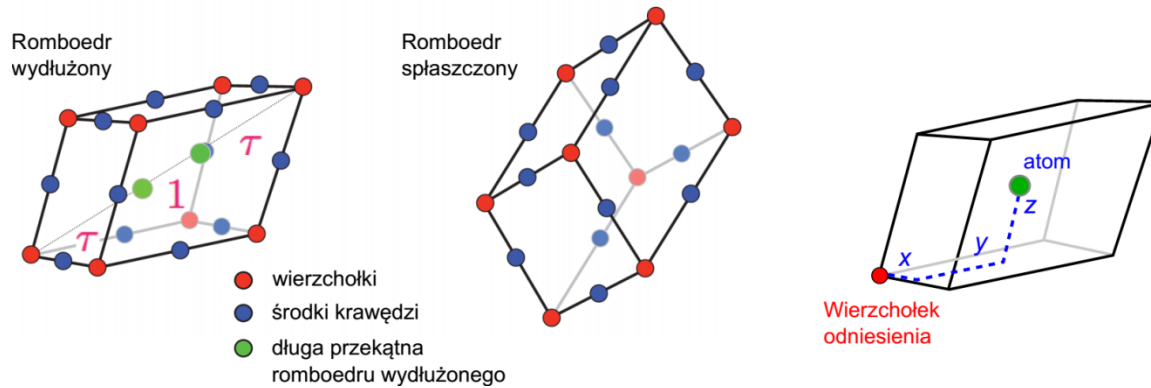


Fracje atomów w charakterystycznych pozycjach romboedrów

Zastosowanie modelu prostej dekoracji w modelach wielowymiarowych:  
Zn-Mg-Ho, Cd-Yb.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
OR	0.05	0.15	0.15	0.15	0.15	0.15	0.05	0.15	0.2	0.2
AR	0.05	0.05	0.05	0.35	0.05	0.35	0.05	0.05	0.4	0.1
	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
OR	0.3	0.3	0.2	0.3	0.2	0.3	0.3	0.3	0.2	0.2
AR	0.1	0.4	0.1	0.4	0.1	0.4	0.1	0.4	0.4	0.1

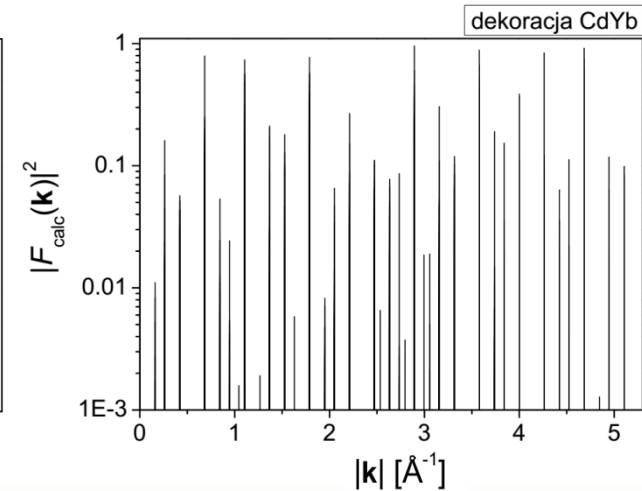
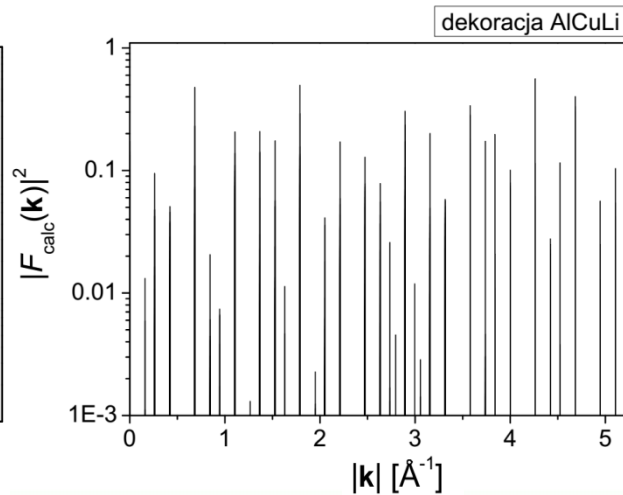
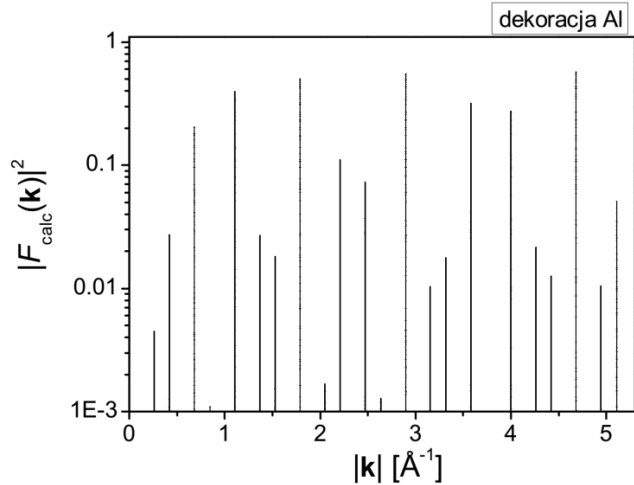
# Model prostej dekoracji



Jednoatomowa dekoracja tylko w wierzchołkach

● wierzchołki  $\neq$  ● środki krawędzi

● wierzchołki  $=$  ● środki krawędzi



# Model kwazikryształów ikozaedrycznych - podsumowanie i perspektywy

- Opracowana została analityczna formuła czynnika strukturalnego dla kwazikryształu ikozaedrycznego o dowolnej dekoracji sieci Ammanna przy użyciu metody statystycznej (w przestrzeni fizycznej).
- Czynn timerukturalny sprawdzono dla modelu „prostej dekoracji” i dla danych „eksperymentalnych” (wygenerowanych numerycznie).
- Czynn timerukturalny jest gotowy do zaimplementowania w procedurze udokładniania.
- Planowane jest połączenie metody udokładniania w oparciu o dane dyfrakcyjne i obliczenia energetyczne
- Możliwe jest odejście od obliczeń analitycznych i dopasowanie czynnika struktury zupełnie numerycznie

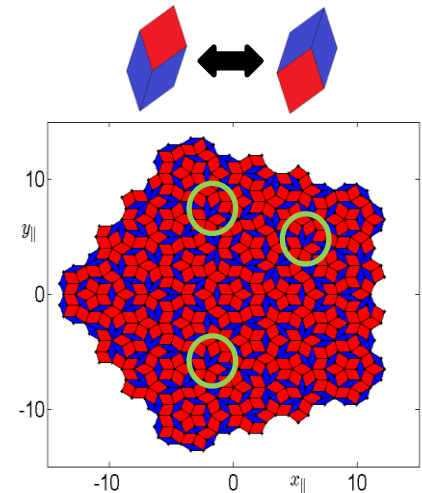
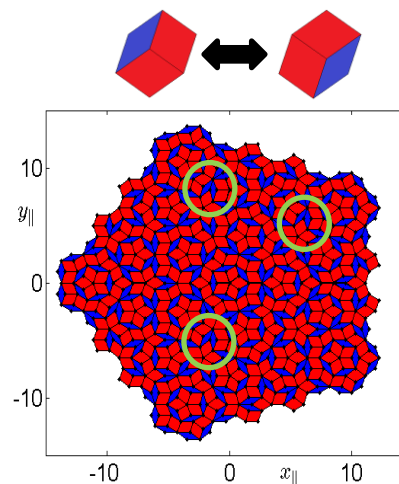
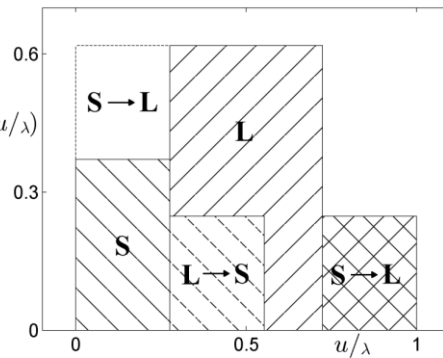
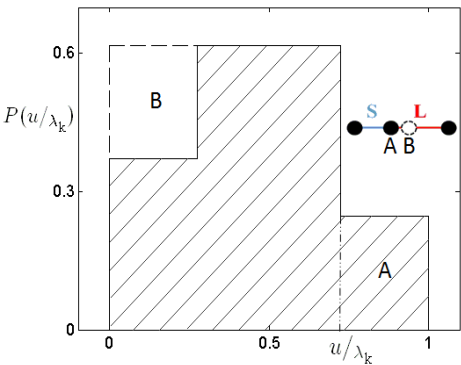
# Poprawki na fonony i fazony w kwazikryształach

**Fonony** są związane z przesunięciami atomów wokół położenia równowagi (np. wskutek drgań termicznych). Możemy sobie wyobrazić różną funkcję rozkładu atomów wokół położenia równowagi. Poprawka: czynnik Debye'a-Wallera

$$D_{phon}(\mathbf{k}) = \exp\{-2\pi^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)b_{phon}\}$$

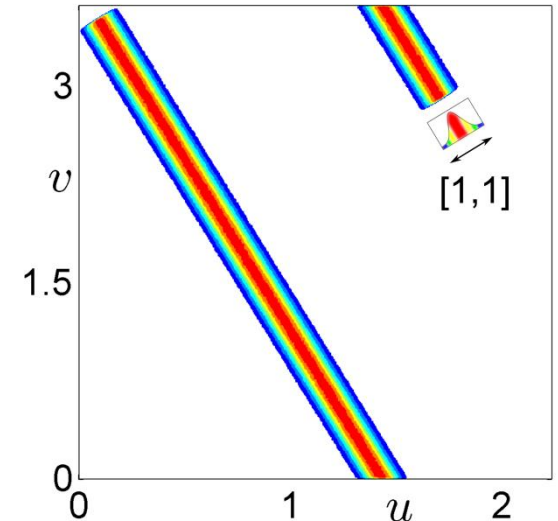
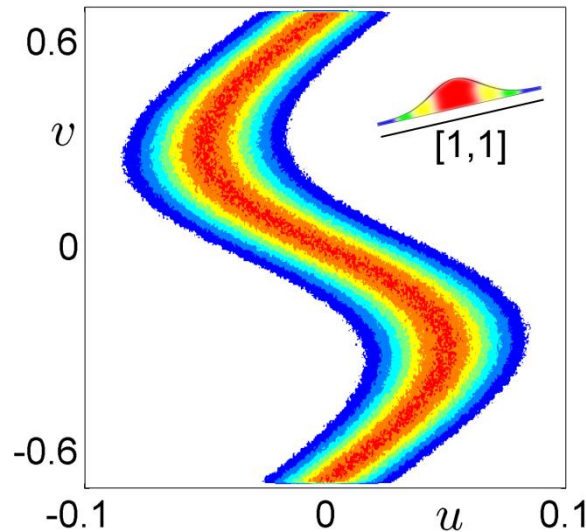
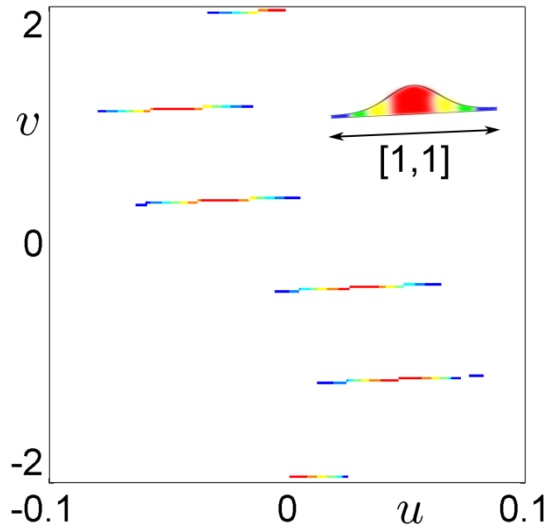
**Fazony** są związane z przeskokami atomów między węzłami (skutkuje to zmianą fazy w strukturze – stąd fazon). Fazon mają duże znaczenie w termodynamice krystalizacji kwazikryształów i wpływają na strukturę. Standardowa poprawka (tzw. fazonowy czynnik Debye'a-Wallera):

$$D_{phas}(\mathbf{k}^\perp) = \exp\left\{-\frac{1}{16\pi^2}(k_x^{\perp 2} + k_y^{\perp 2} + k_z^{\perp 2})b_{phas}\right\}$$



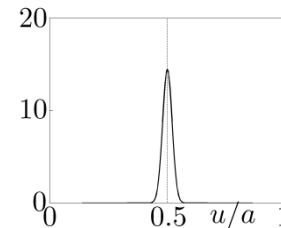


# Fonony

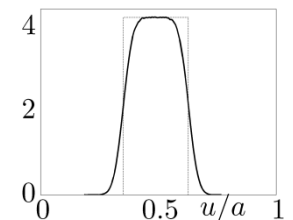


Wprowadzenie fononów powoduje rozmycie relacji skalowania wzdłuż kierunku  $[1,1]$  w parametrycznej przestrzeni  $(u,v)$ , co przekłada się także na modyfikację rozkładu prawdopodobieństwa  $P(u)$ :

np.

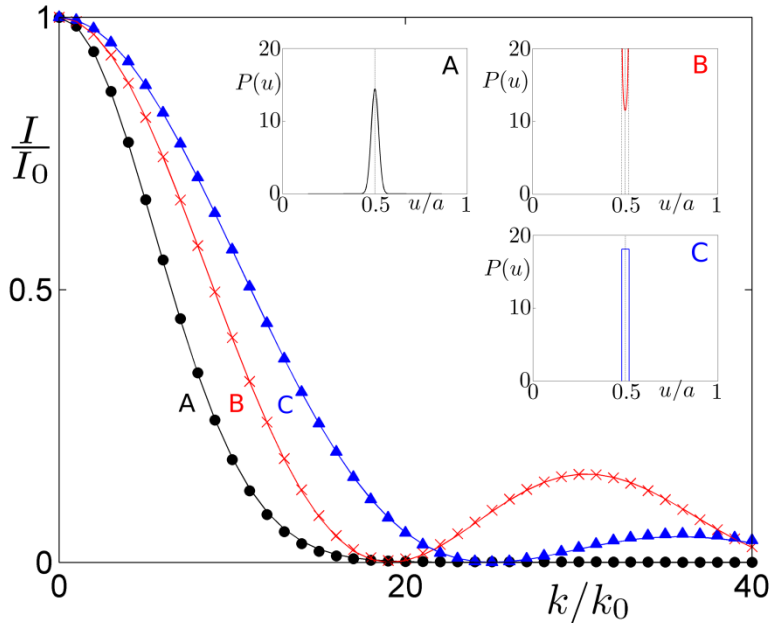


kryształ periodyczny

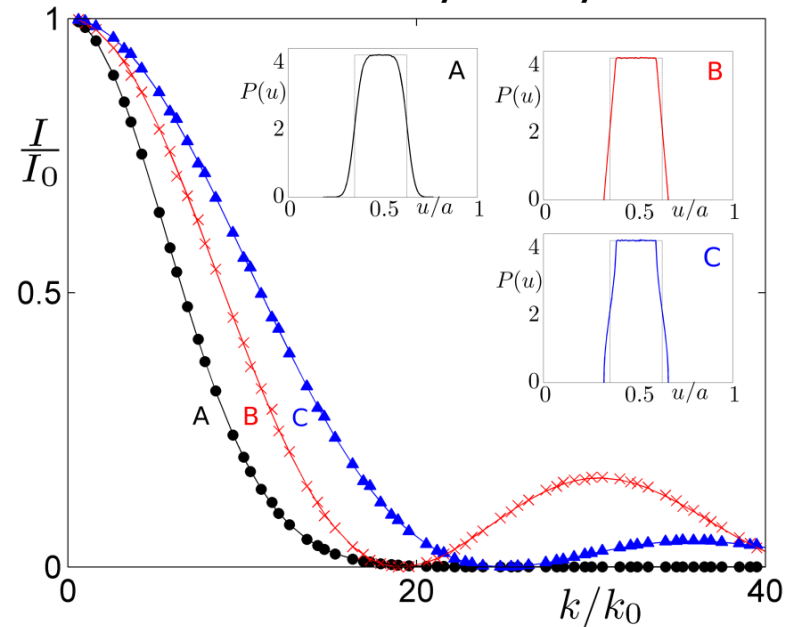


kwazikryształ

## kryształy periodyczne



## kwazikryształy



- Korekta ze względu na fonony dla struktur aperiodycznych jest przeprowadzana analogicznie jak dla struktur periodycznych
- Korekta w postaci czynnika Debye'a-Wallera jest wystarczająca, aby opisać piki w szerokim zakresie wartości wektora rozpraszania
- Inne postacie funkcji można ew. stosować w celu poprawy jakości dopasowania na końcowych etapach udokładniania.

# Kwazikryształy dekadagonalne – udokładnienie w przestrzeni fizycznej

## 1. Basic Ni-rich $\text{Al}_{72}\text{Ni}_{20}\text{Co}_8$

(Wolny, Kozakowski, Kuczera, Takakura, *Z. Kristallogr.* **223**, 847-850 (2008))

## 2. Basic Ni-rich $\text{Al}_{70.6}\text{Ni}_{20.7}\text{Co}_{6.7}$

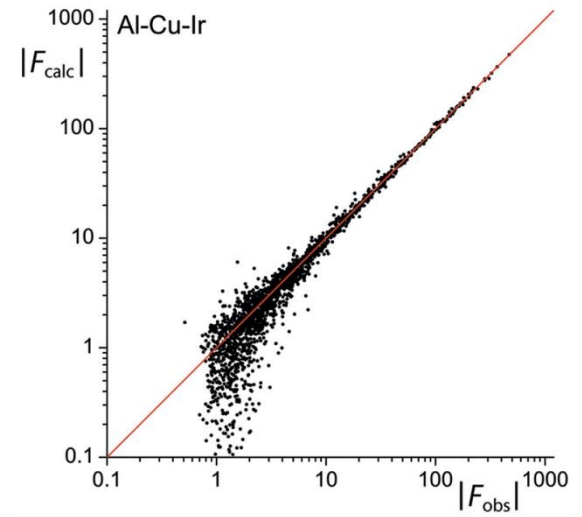
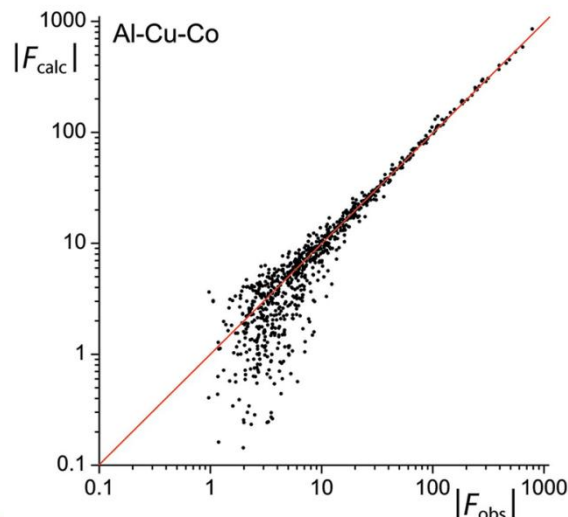
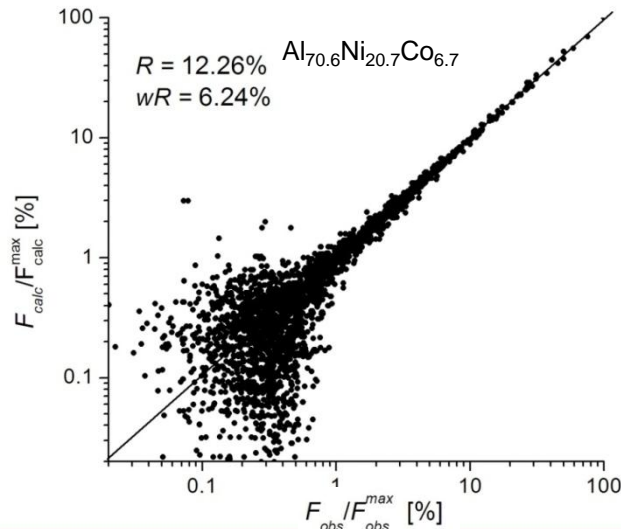
(Kuczera, Kozakowski, Wolny, Steurer, *J. Phys.: Conf. Ser.* **226**, 01200 (2010))

## 3. Edagawa phase $\text{Al}_{72.0}\text{Ni}_{15.6}\text{Co}_{12.4}$ , superstructure type I

(Kuczera, Wolny, Fleischer, Steurer, *Phil. Mag.* **91**, 2500-2509 (2011))

## 4. Comparative study of $\text{Al}_{64.4}(\text{Cu},\text{Co})_{35.6}$ , $\text{Al}_{60.6}\text{Cu}_{19.2}\text{Rh}_{20.2}$ , $\text{Al}_{58.3}\text{Cu}_{26.6}\text{Ir}_{16.9}$

(Kuczera, Wolny, Steurer, *Acta Cryst. B* **68**, 578-589 (2012))



# Fazy



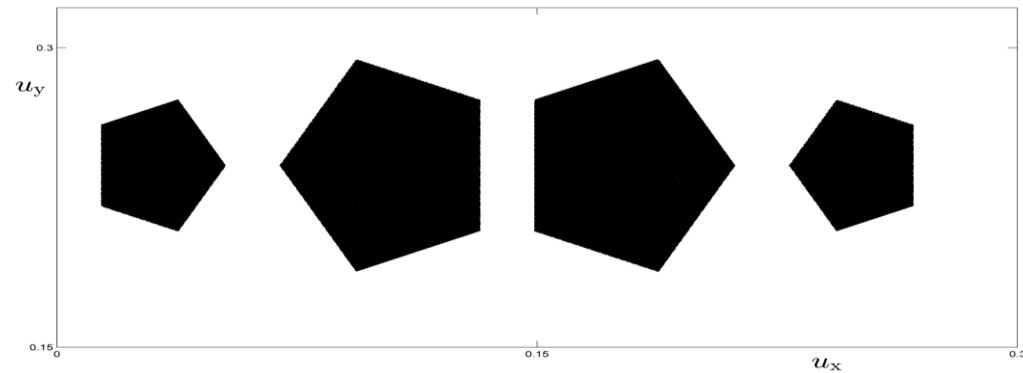
przeskok



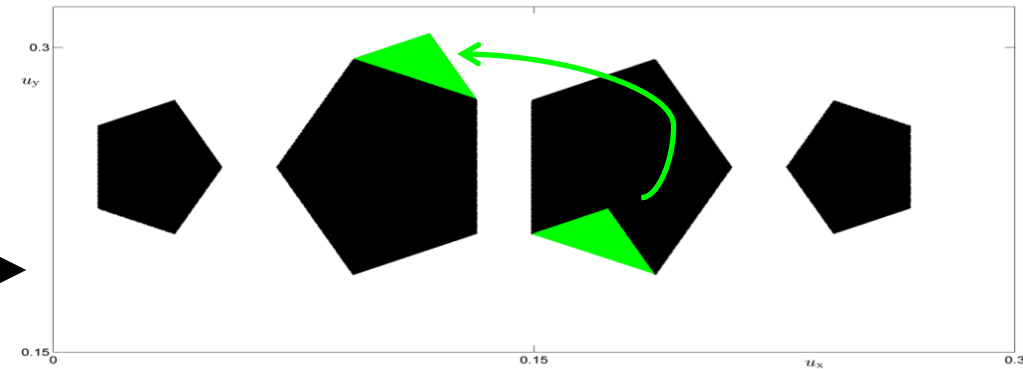
przeskok jednej konfiguracji (orientacji)  
rombów: gruby, gruby cienki  
(prawdopodobieństwo przeskoku 100%)

fazy powodują zmianę kształtu  
(fragmentację) SKE dla pokrycia  
Penrose'a

przed przeskokiem

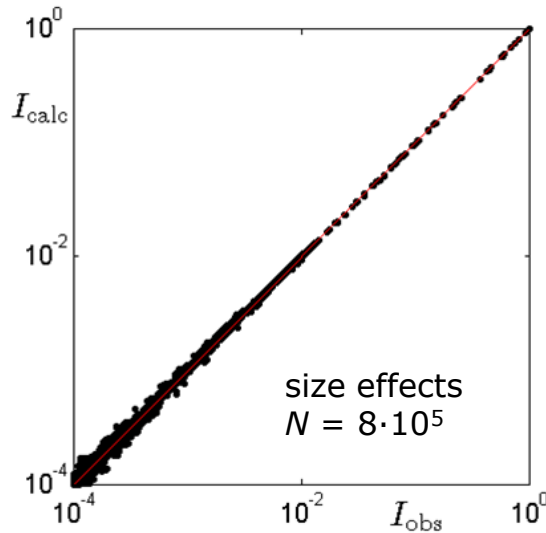


po przeskoku

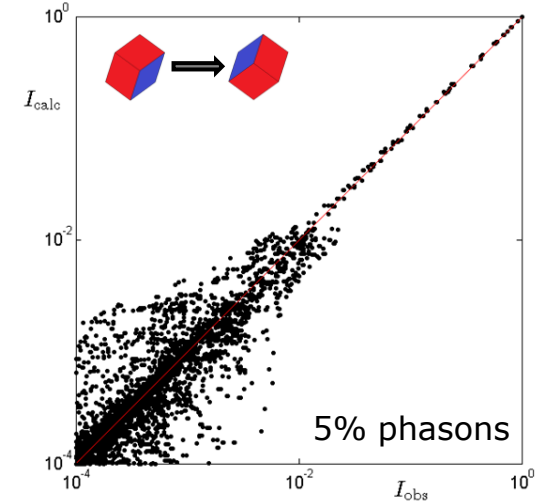


# Fazy – dla Penrose tiling

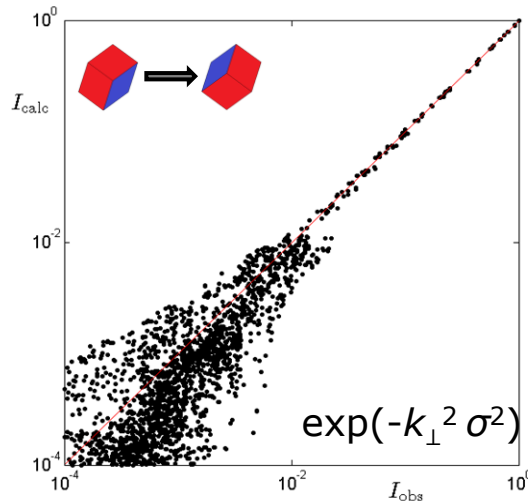
Penrose tiling z fazonami



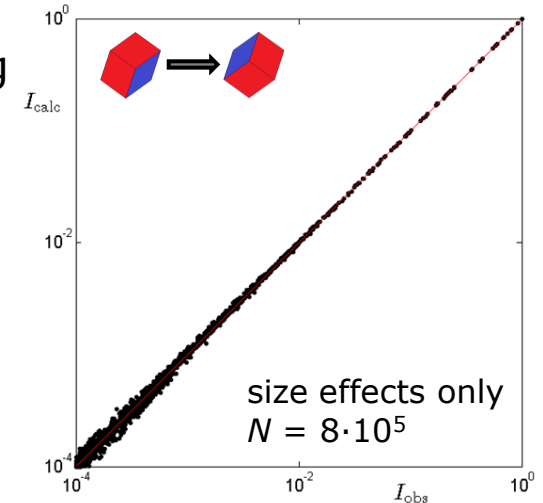
Penrose tiling z fazonami (bez poprawki)



Penrose tiling z fazonami (klasyczny czynnik D-W)

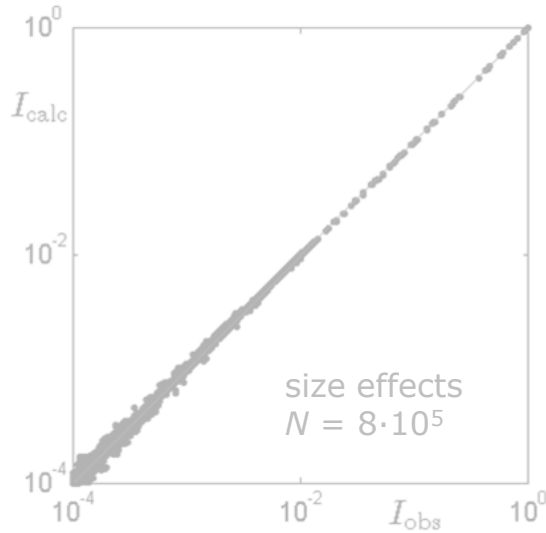


Penrose tiling z fazonami („trójkątna” poprawka do ŚKE)

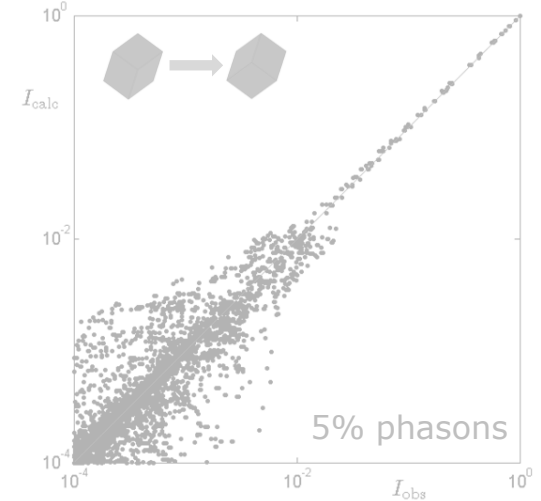


# Fazy – dla Penrose tiling

Penrose tiling z fazonami



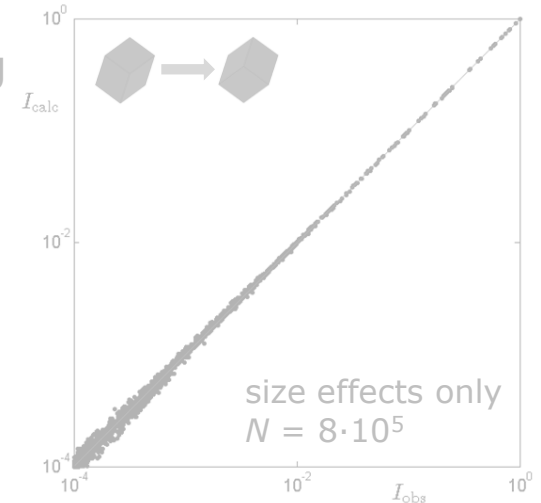
Penrose tiling z fazonami (bez poprawki)



Penrose tiling z fazonami (klasyczny czynnik D-W)



Penrose tiling z fazonami („trójkątna” poprawka do SKF)



**Klasyczny czynnik D-W nie rozwiązuje problemu wcale!**

size effects only  
 $N = 8 \cdot 10^5$

# Fonony i fazony – podsumowanie

- Wyzwaniem współczesnej krystalografii jest uwzględnienie bardzo słabych refleksów dyfrakcyjnych w procesie udokładniania (szczególnie struktur złożonych). Poprawna korekta na fonony i fazony jest kluczowa.
- Korekta na fonony dla kwazikryształów jest taka sama jak w przypadku struktur periodycznych (czynnik Debye'a-Wallera)
- Dla fazonów klasyczny czynnik Debye'a-Wallera,  $\exp(-k_{\perp}^2 \sigma^2)$ , jest raczej bezużyteczny.
- **Metoda statystyczna (ŚKE) daje unikalne możliwości poprawnej interpretacji fononów i fazonów w strukturach złożonych.**



# Podziękowania



WYDZIAŁ FIZYKI I INFORMATYKI STOSOWANEJ



prof. dr hab. Janusz Wolny  
dr inż. Bartłomiej Kozakowski  
dr inż. Paweł Kuczera  
dr Anna Wnęk  
dr Lucjan Pytlik  
mgr inż. Maciej Chodyń  
mgr inż. Ireneusz Bugański





# Podziękowania



WYDZIAŁ FIZYKI I INFORMATYKI STOSOWANEJ



prof. dr hab. Janusz Wolny  
dr inż. Bartłomiej Kozakowski  
dr inż. Paweł Kuczera  
dr Anna Wnęk  
dr Lucjan Pytlik  
mgr inż. Maciej Chodyń  
mgr inż. Ireneusz Bugański

***Dziękuję za uwagę!***