

Statystyczna metoda opisu układów aperiodycznych

2020

J. Wolny, R. Strzałka, I. Bugański, P. Kuczera, B. Kozakowski, A. Wnęk, Ł. Pytlik
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w
Krakowie

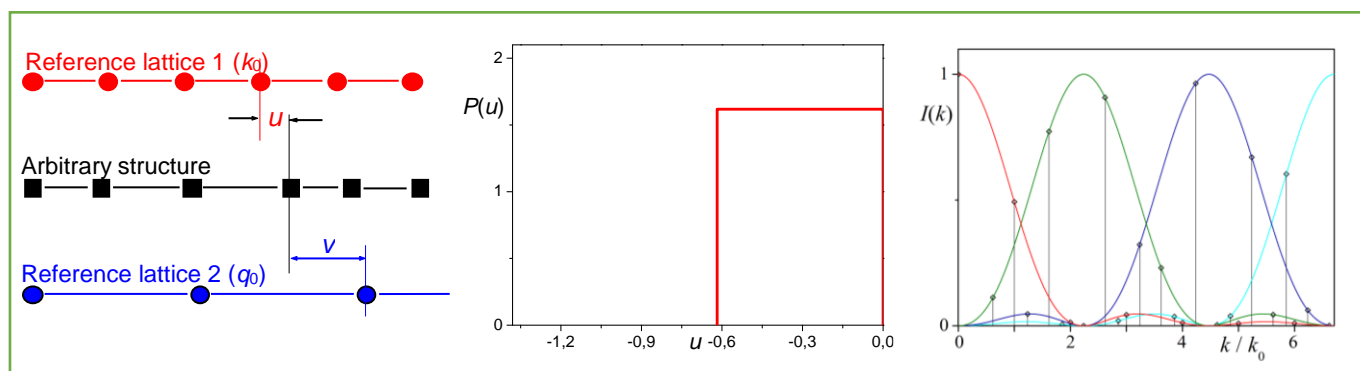
1920

1920-2020



100 LAT POLSKIEGO TOWARZYSTWA FIZYCZNEGO

Kwazikryształy są układami aperiodycznymi o zabronionych osiach symetrii obrazu dyfrakcyjnego. Podobnie jak w przypadku struktur niewspółmiernie modulowanych tradycyjne metody klasycznej krytalografii do opisu struktury atomowej i obrazu dyfrakcyjnego tej klasy układów zawodzą. Jedną z powszechnie używanych metod jest analiza wielowymiarowa [1]. W grupie naukowców z AGH powstała i od wielu lat z sukcesami rozwijana jest alternatywna metoda, która zakłada opis statystyczny, bazujący na koncepcjach sieci referencyjnej i średniej komórki elementarnej [1,2] (patrz: rysunek). Metoda ta nie wymaga używania abstrakcyjnych pojęć w wielowymiarowych przestrzeniach; opis struktury odbywa się w przestrzeni fizycznej. Średnia komórka elementarna, która jest rozkładem statystycznym $P(u, v)$ rzutów pozycji atomowych na wybrane sieci referencyjne, jest podstawowym obiektem do modelowania struktury. Transformata Fouriera średniej komórki daje czynnik strukturalny, na podstawie którego oblicza się obraz dyfrakcyjny. Metoda statystyczna została z sukcesem zastosowana do udokładnienia kwazikryształów o symetrii dekalnej (Al-Ni-Co, Al-Cu-{Co,Rh,Ir}) [3] oraz ikozaedrycznych (Zn-Mg-{Hf,Ho}) [4]. Ideę średniej komórki można z powodzeniem zastosować do opisu struktur niewspółmiernie modulowanych, aperiodycznych ciągów (np. Thue-Morse'a) [2]. Szczególnie unikalne zastosowanie metody znajdujemy dla uwzględnienia nieporządku strukturalnego (fonony, fazony) w kwazikryształach, gdzie opis tych efektów może odbywać się w przestrzeni fizycznej [5,6].



Idea średniej komórki elementarnej: Rozkład statystyczny $P(u, v)$ otrzymujemy przez zrzutowanie pozycji atomowych na sieci referencyjne stowarzyszone z wektorami falowymi k_0 i q_0 , które są niewspółmierne (po lewej). Dla ciągu Fibonacciego rozkład brzegowy $P(u)$ jest jednostajny i ciągły (w środku). Transformata Fouriera z $P(u, v)$ daje obraz dyfrakcyjny, składający się z periodycznych serii pików głównych i pików satelitarnych (po prawej).

Literatura:

1. J. WOLNY, I. BUGAŃSKI, R. STRZAŁKA, CRYSTALLOGRAPHY REVIEWS 24, 22 (2017).
2. J. WOLNY, B. KOZAKOWSKI, P. KUCZERA, R. STRZAŁKA, A. WNEK, ISR. J. CHEM. 51, 1275 (2011).
3. P. KUCZERA, J. WOLNY, W. STEURER, ACTA CRYST. B 68, 578 (2014).
4. I. BUGAŃSKI, J. WOLNY, H. TAKAKURA, ACTA CRYST. A 76, 180 (2020).
5. J. WOLNY, I. BUGAŃSKI, P. KUCZERA, R. STRZAŁKA, J. APPL. CRYST. 49, 2106 (2016).
6. R. STRZAŁKA, I. BUGAŃSKI, P. KUCZERA, L. PYTLIK, J. WOLNY, CRYSTALS 78, 1 (2019).

SŁOWA KLUCZOWE: KWAZIKRYSZTAŁY, STRUKTURY APERIODYCZNE, METODA STATYSTYCZNA

