

Nowy standard w analizie struktury wewnętrznej nanokryształów

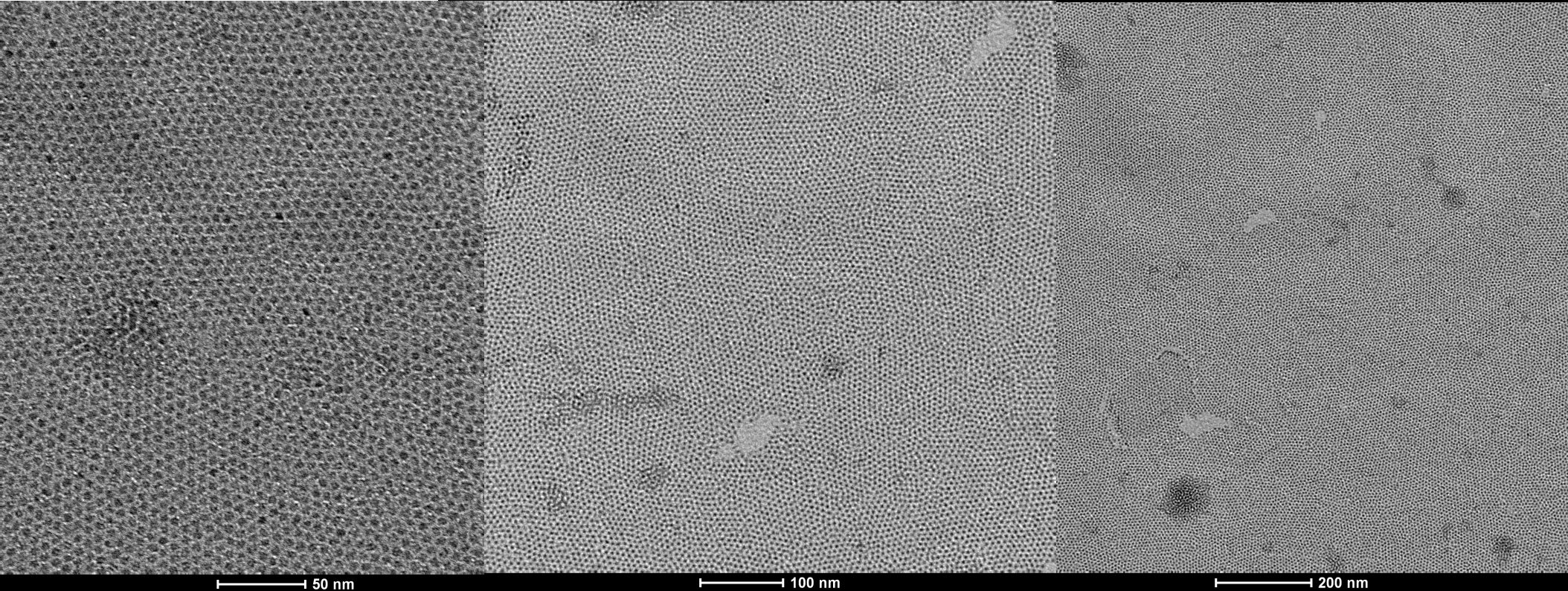
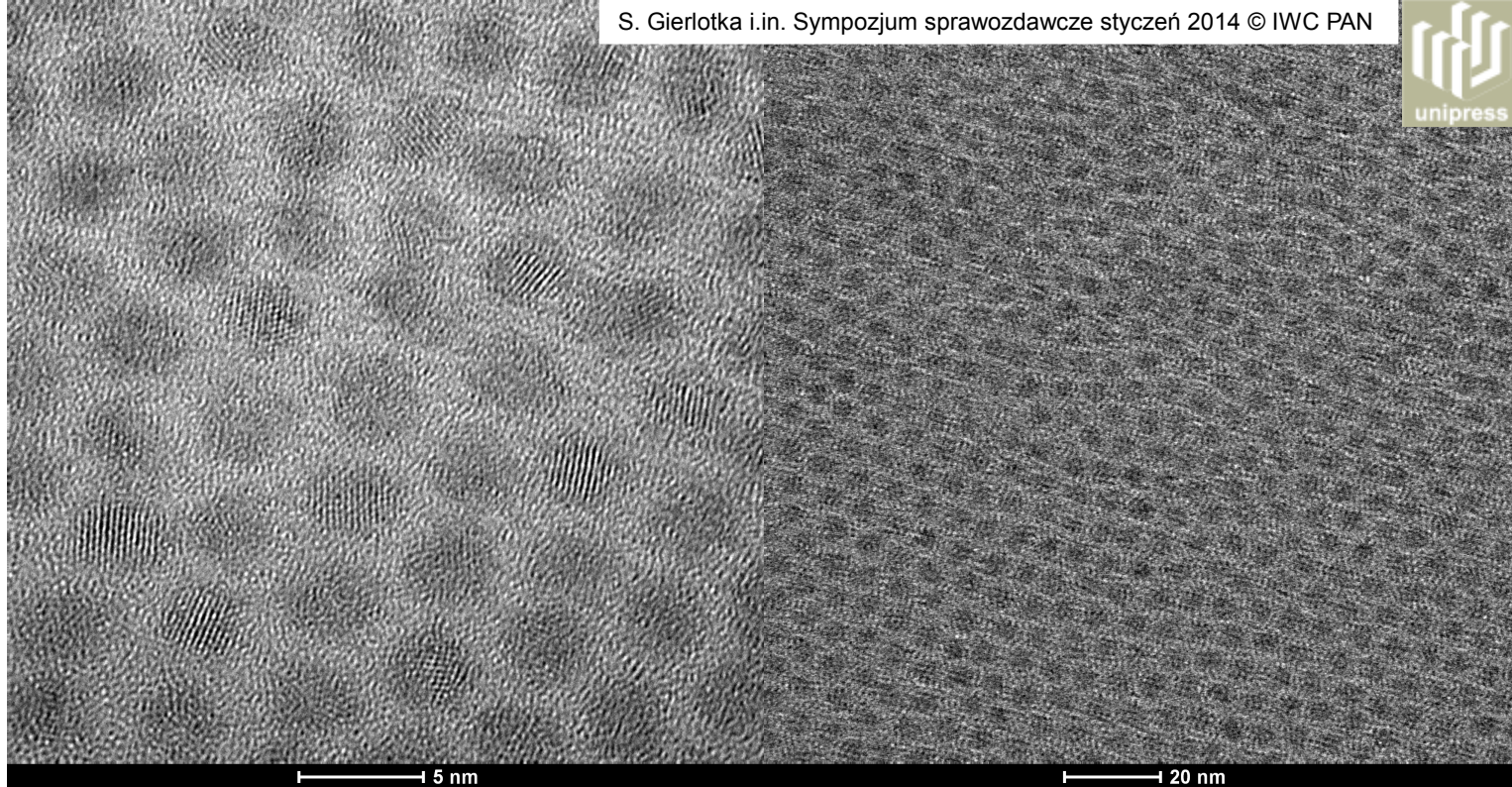
B. Pałosz
S. Gierlotka
S. Stelmakh
K. Skrobas

Plan działania

- Analiza nanokryształów metodą funkcji rozkładu radialnego, dotychczas stosowaną do materiałów amorficznych, zyskuje na znaczeniu.
- Proponujemy model nanokryształu z modulacją gęstości atomowej i metodę określenia jego parametrów poprzez analizę danych dyfrakcyjnych.
- Oprogramowanie, które tworzymy dla własnych potrzeb, po dopracowaniu i napisaniu instrukcji obsługi zostanie udostępnione społeczności naukowej.
- Oczekujemy, że dzięki dostępności oprogramowania, upowszechni się metoda analizy, a nasz model zyska zwolenników.
- W efekcie powinna znacznie wzrosnąć liczba cytowań naszych prac

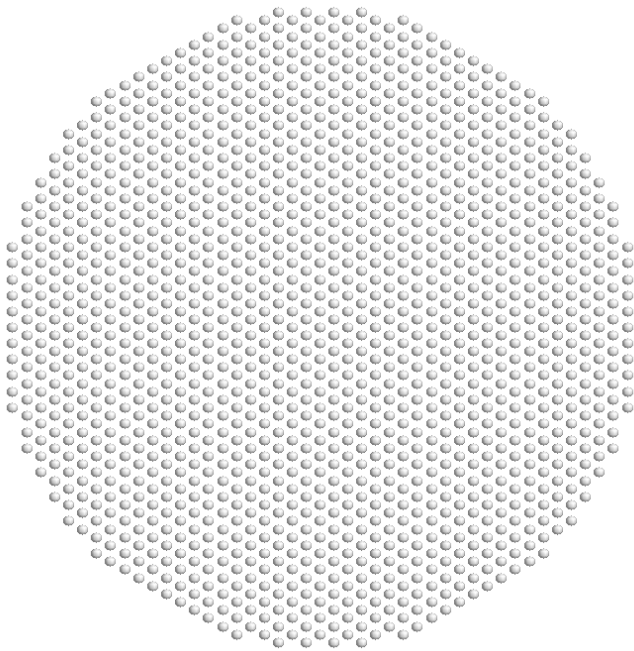
3

Warstwa nanokryształów CdSe w preparacie do transmisyjnej mikroskopii elektronowej w różnych powiększeniach

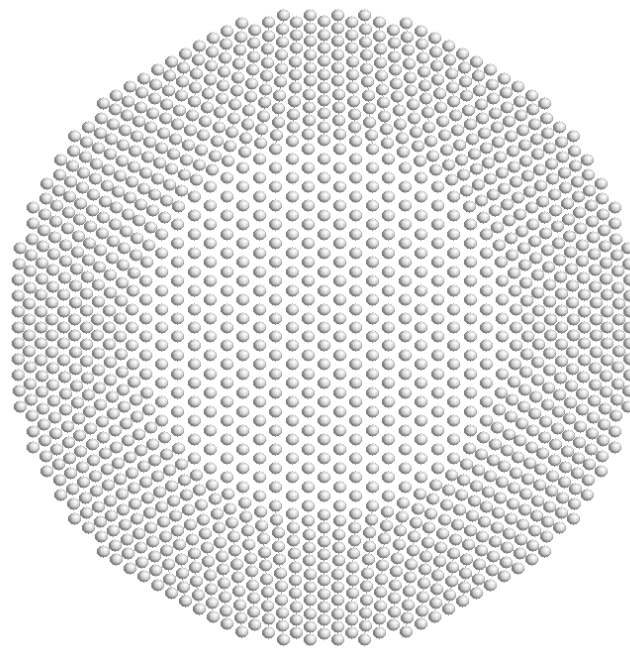


Ewolucja poglądów na strukturę atomową nanokryształów

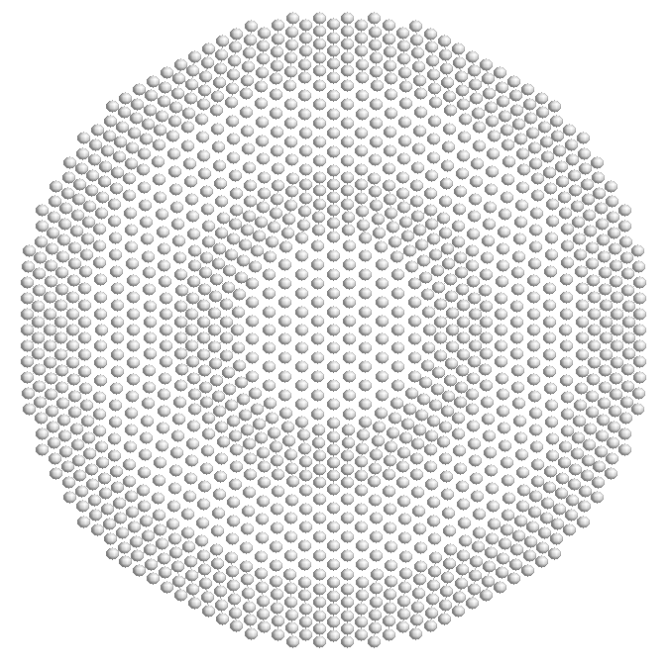
Nanokryształ
o sieci idealnej



Nanokryształ
w modelu “core-shell”



Nanokryształ
w modelu “density waves”



Fizyczne podstawy analizy struktury sieci krystalicznej w przestrzeni rzeczywistej *ang. Real Space Analysis*

- Dyfrakcja realizuje transformatę Fouriera kryształu.
- Dyfraktogram niesie informację o periodyczności kryształu. Analiza danych dyfrakcyjnych to analiza w przestrzeni odwrotnej (częstotliwości)
- *Reciprocal Space Analysis*.
- Odwrotna transformata Fouriera dyfraktogramu teoretycznie powinna pozwolić na odtworzenie informacji o strukturze krystalicznej.
- Dyfraktogram proszkowy to dane “jednowymiarowe” - informacja o trójwymiarowości struktury zostaje utracona.
- “Odwrócenie” dyfraktogramu proszkowego pozwala odtworzyć tylko niewielką część informacji początkowej. Uzyskuje się jednowymiarową Funkcję Dystrybucji Par (*Pair Distribution Function - PDF*) oznaczaną $G(r)$ zawierającą uśrednioną informację o odległościach międzyatomowych.
- Analiza $G(r)$ – analiza w przestrzeni rzeczywistej - pozwala stwierdzić, czy odległości międzyatomowe odpowiadają strukturze idealnej czy zmodyfikowanej

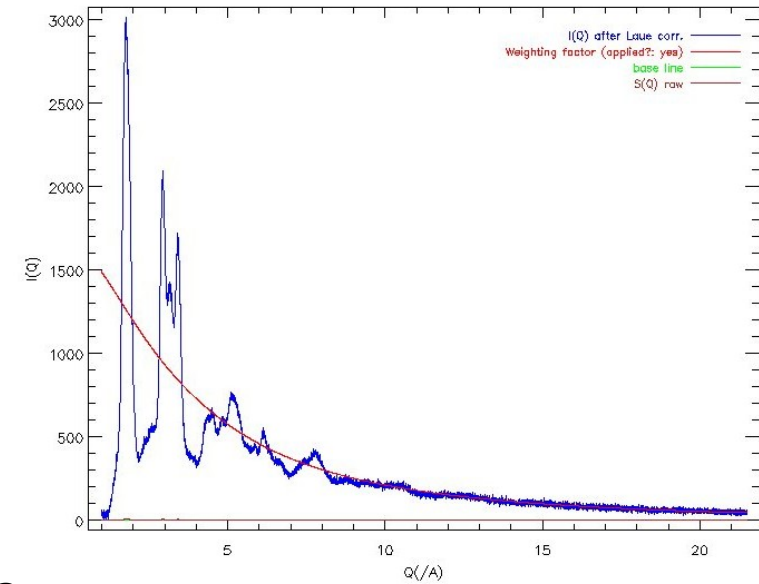
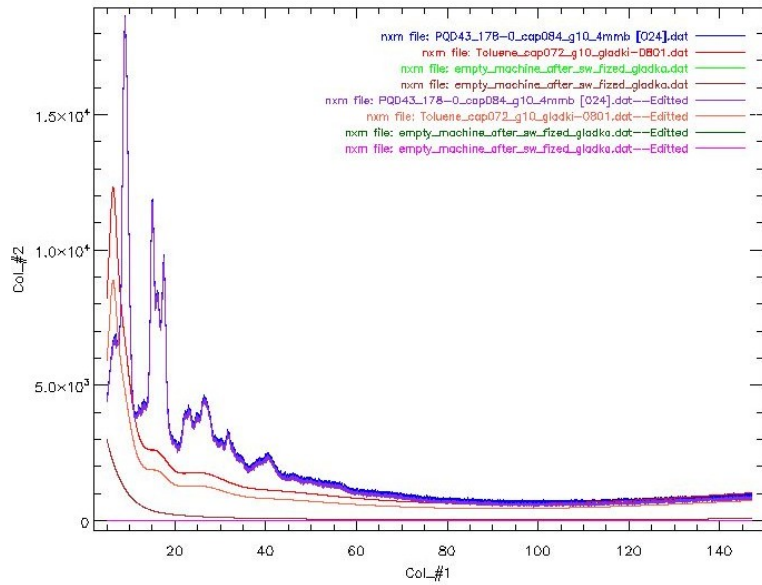


6

Otrzymywanie eksperymentalnej informacji o odległościach atomów w kryształach

Usuwanie "obcego" rozpraszania

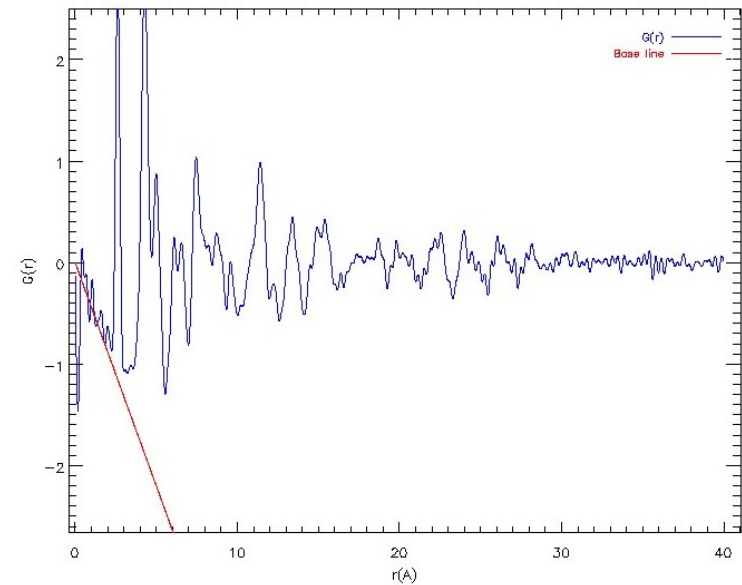
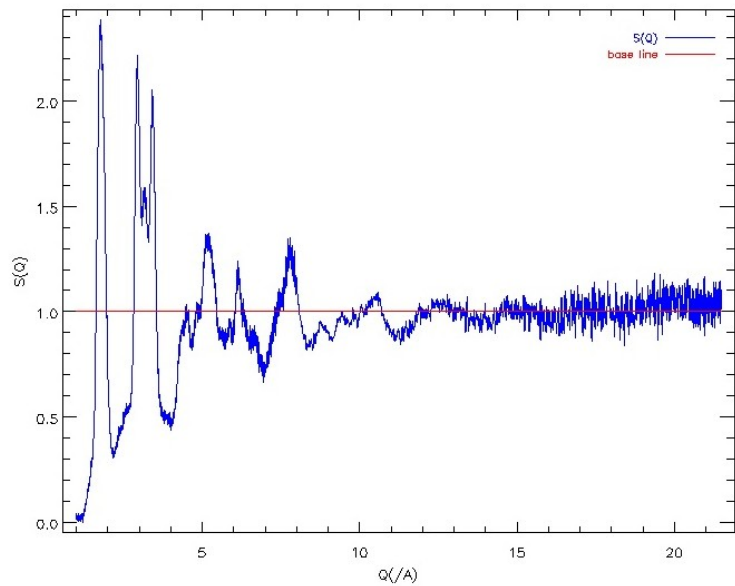
Usuwanie informacji o promieniowaniu



Transformata
Fouriera

Funkcja Dystrybucji Par

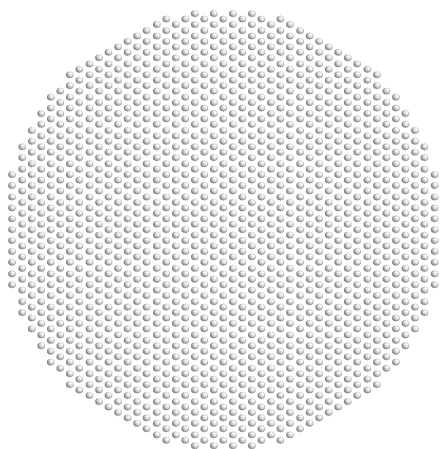
Funkcja rozpraszania struktury



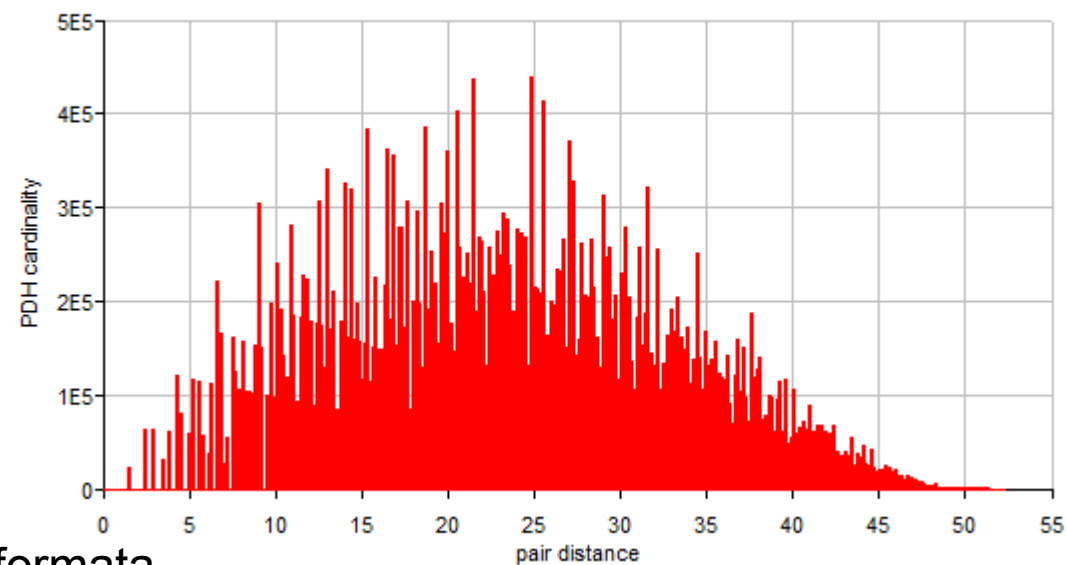
7

Teoretyczne obliczenia PDF dla atomistycznego modelu

Model nanokryształu



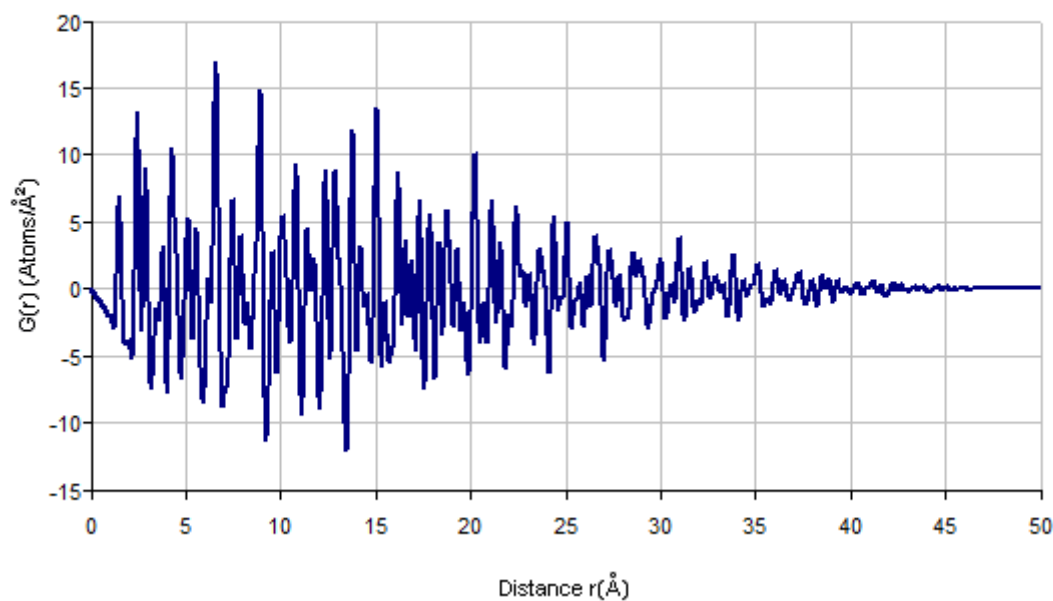
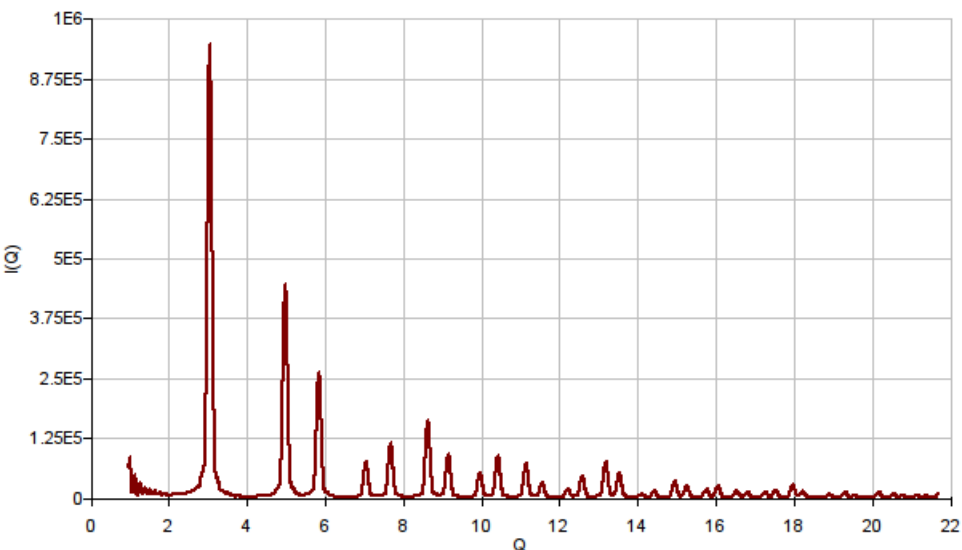
Histogram rozkładu odległości międzyatomowych



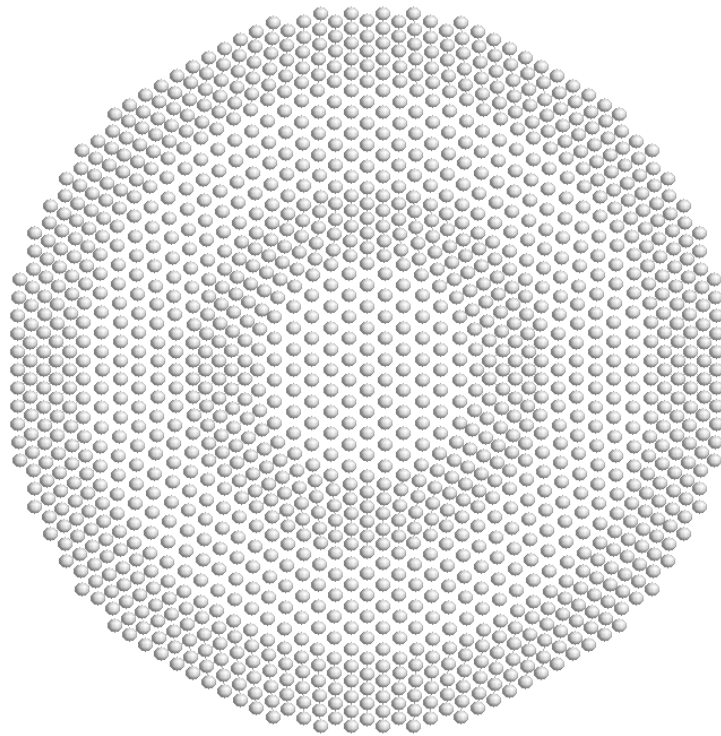
Transformata
Fouriera

Funkcja Dystrybucji Par

Dyfraktogram teoretyczny

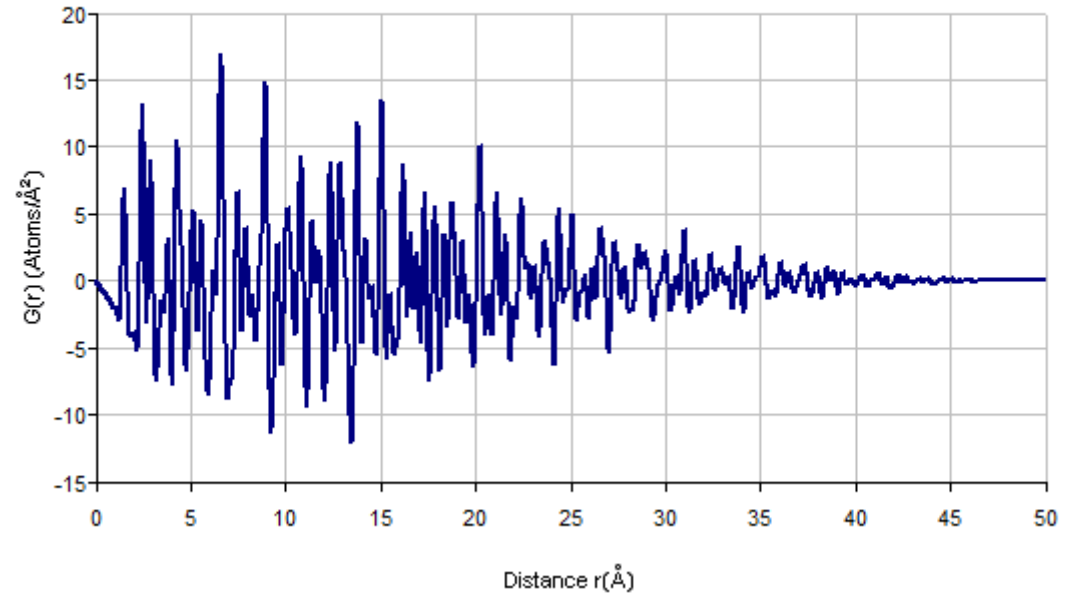


Wpływ rzeczywistej struktury nanokryształu na funkcję $G(r)$

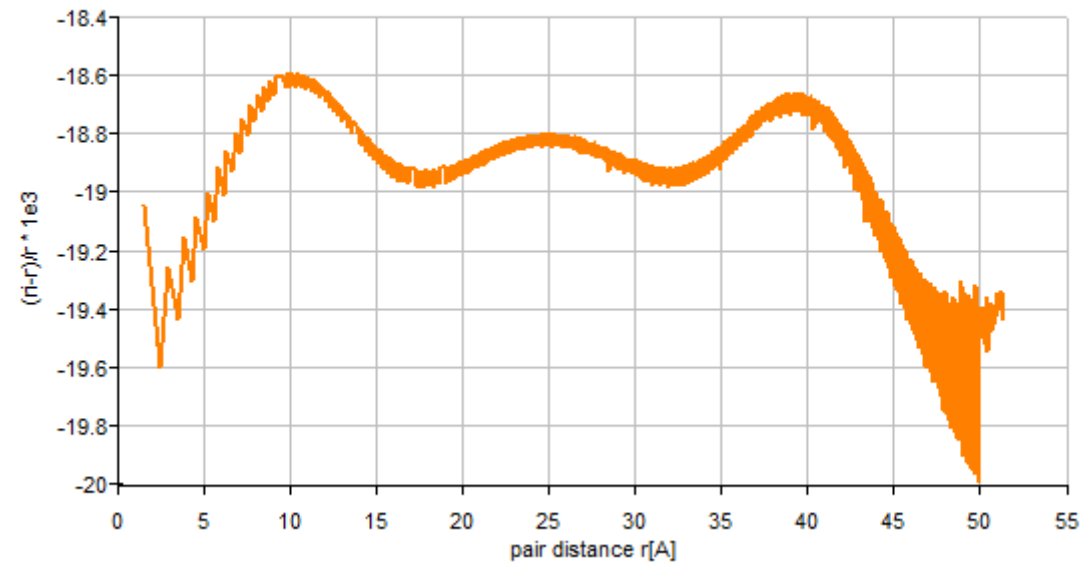


W modelu z modulacją gęstości odległości międzyatomowe są zmienione sposób ściśle związany z kształtem fali gęstości.

$G(r)$ function of diamond like structure of C



$(r_i-r)/r$ diagram



Wykres względnych zmian odległości międzyatomowych w 5nm kryształ o pokazanej strukturze

Jak porównać teorię do eksperymentu?

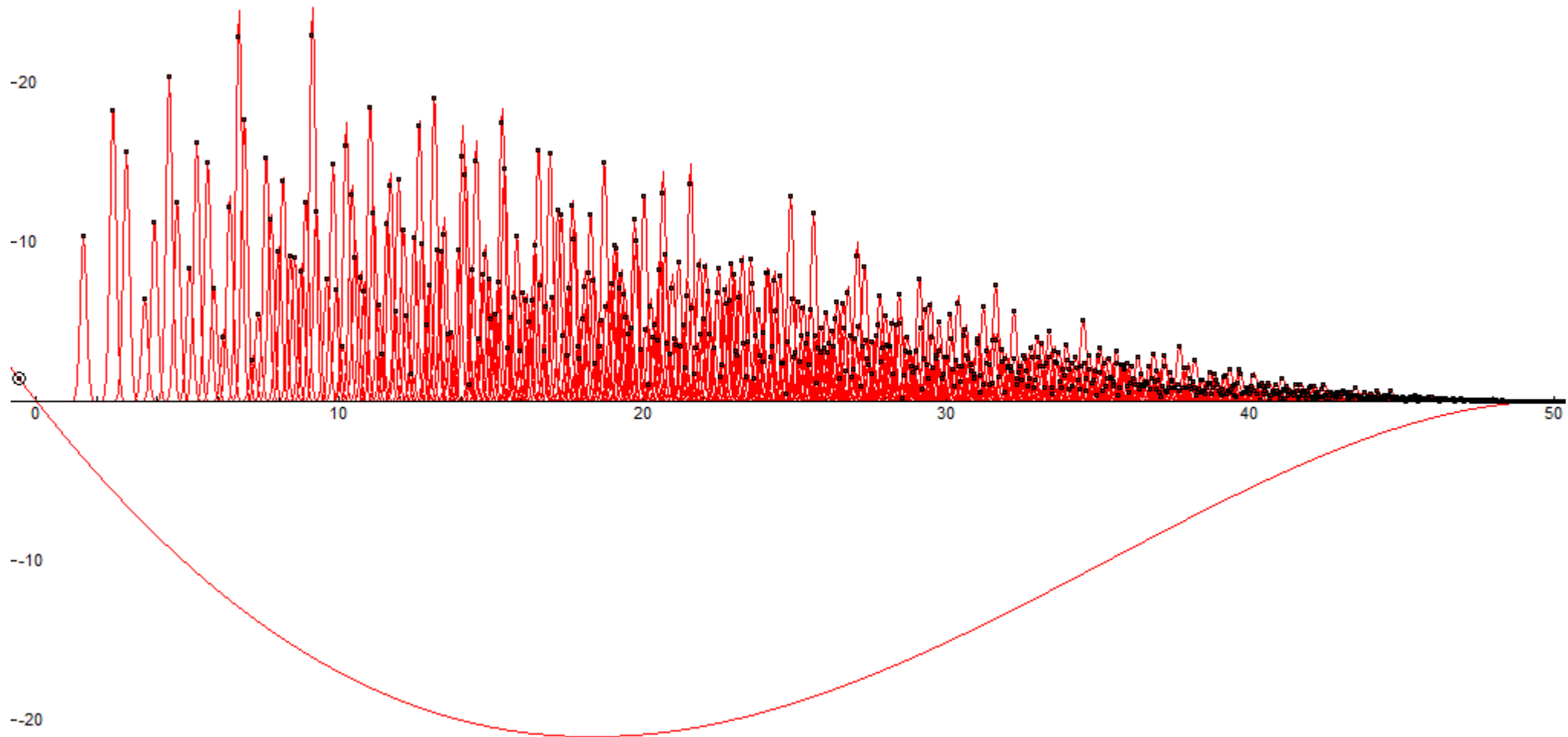
Porównywanie teoretycznego $G(r)$ obliczonego z modelu atomistycznego do funkcji eksperymentalnej jest niepraktyczne.

Pomiędzy modelem kryształu a funkcją dystrybucji par wykonywana jest transformata Fouriera, co uniemożliwia obliczenie pochodnych po parametrach modelu i przeprowadzenie dopasowania metodą najmniejszych kwadratów.

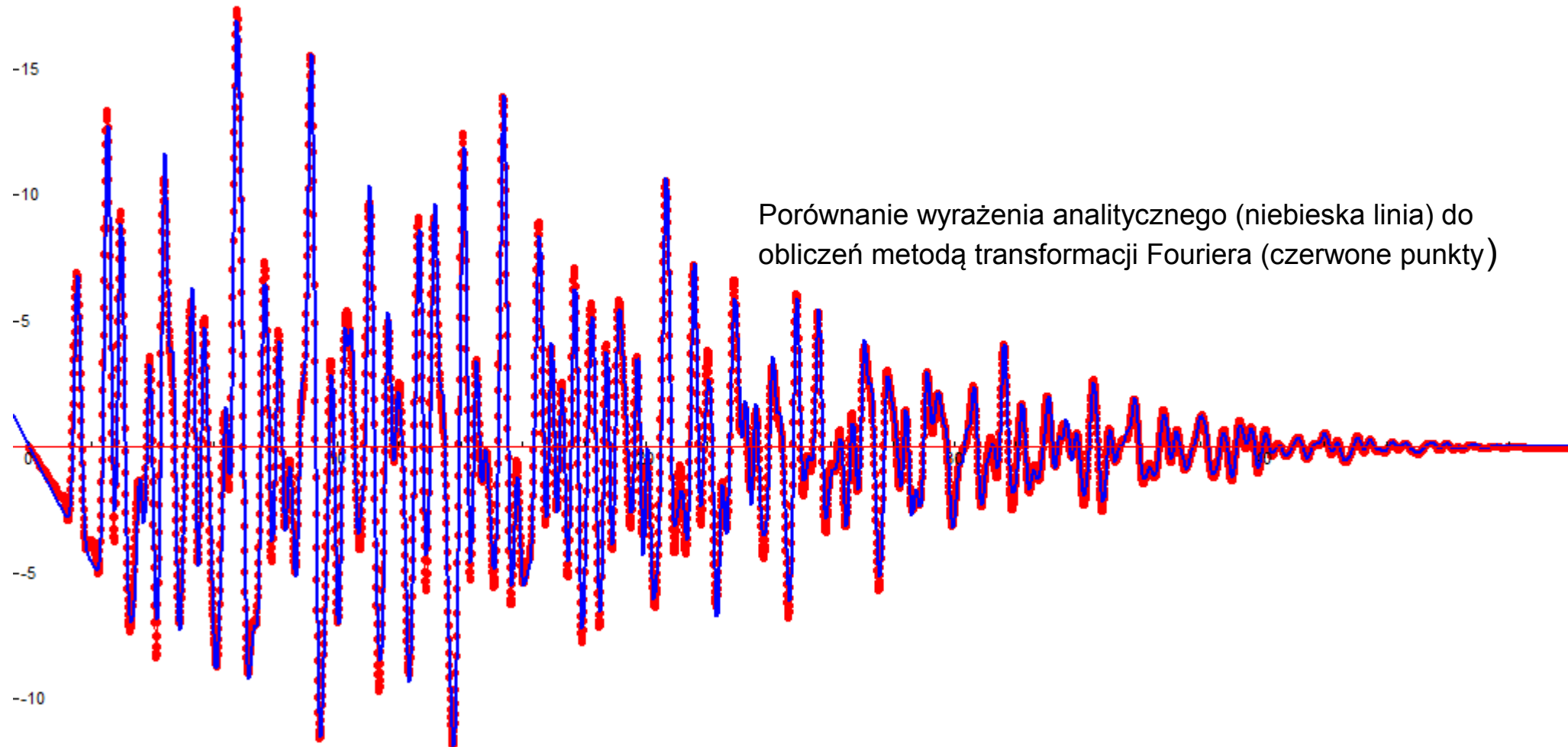
Potrzebne jest analityczne wyrażenie na $G(r)$!!!!

Analityczne wyrażenie na $G(r)$ można podać znając strukturę krystaliczną materiału badanego

np. dla 5nm nanokryształu składa się ono z 778 maksimum o kształcie gaussowskim o ściśle powiązanych wysokościach oraz z funkcji “tła”



Analityczne wyrażenie na $G(r)$ dla danej sieci krystalicznej
ma tylko kilka swobodnych parametrów:
czynnik skali, parametr sieci struktury, rozmiar kryształu, szerokość linii



Analityczna postać $G(r)$ pozwala na stworzenie numerycznych procedur do automatycznej analizy eksperymentalnej Funkcji Dystrybucji Par metodą najmniejszych kwadratów i budowania modeli struktury atomowej nanokryształów.

Główny wynik w roku 2013 !!!

Program NanoPDF

- Buduje model nanokryształów
- Wprowadza do modelu “falę gęstości”
- Oblicza funkcję zmiany średnich odległości międzyatomowych
- Oblicza krzywą dyfrakcji proszkowej
- Oblicza teoretyczną Funkcję Dystrybucji Par przez transformatę Fouriera
- Dopasowuje analityczną postać FDP do danych eksperymentalnych (NEW!!!)

Główne okno programu NanoPDF

NanoPDF64

File Options Windows Tools Help

Structure building

Atoms selection

monoatomic lattice biatomic lattice

C Si

Structure

cubic P (sc) diamond like cubic I (bcc) hcp P cubic F (fcc)



Latt. prm.(Angs)

Grain geometry

sphere cylinder

Radius (Angs)

N

Build  Modify 

Calculations

PDH $\sum_{i,j}^N \delta(r_i - r_j)$

Show PDH

Diffraction pattern Show pattern

G(r) PDF Show G(r)

Windowing function

None (BoxCar) Lorch

Range, step (in Angs)

start stop step

Diagram Radiation

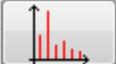



I or S, range, step, units

	Angle(°)	Q(Å ⁻¹)	
start	<input type="text" value="5"/>	<input type="text" value="1.6122"/>	<input type="radio"/> I <input checked="" type="radio"/> S
stop	<input type="text" value="180"/>	<input type="text" value="36.96"/>	<input type="radio"/> Angle
step	<input type="text" value="0.03125"/>	<input type="text" value="0.010079"/>	<input checked="" type="radio"/> Q(Angs-1)

$\delta(r) = \Delta(r)/r$

Show diagram

Bin width

*** WELCOME ***
NanoPDF-64-ver.1.0
***** NEW STRUCTURE *****
diamond like, number of nodes=858

... PDH CALCULATIONS ...
start time: 15:04:14
stop time: 15:04:14

Okno części programu NanoPDF realizującej procedurę najmniejszych kwadratów oraz wynik dopasowania teorii do danych eksperymentalnych

