Kondenzirana snov

Izidor Benedičič

Sipanje rentgenske svetlobe na kvazikristalu

1 Kvazikristal

Obravnavali bomo sipanje rentgenske svetlobe na enodimenzionalnem kvazikristalu. Kvazikristali so strukture, sestavljene iz končne množice osnovnih celic, ki so sicer urejene, a ne periodične - nimajo translacijske simetrije.
Primer takšnega vzorca v eni dimeziji je t.i. Fibbonacijevo zaporedje, ki ga generiramo po sledečem predpisu:

$$x_n = n + (\tau - 1) int\left(\frac{n}{\tau}\right), \tag{1}$$

kjer funkcije *int* vrne celi del argumenta, τ pa je definiran kot $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$. Kasneje nam bo koristila še zveza $\tau = 1 + 1/\tau$.
Razlika med dvema zaporednima členoma zaporedja je

$$\begin{aligned} x_{n+1} - x_n &= 1 + (\tau - 1)\left(int\frac{n+1}{\tau} - int\frac{n}{\tau}\right) \\ &= \begin{cases} 1 \\ \tau \end{cases} \end{aligned}$$

Če si zapišemo prvih nekaj člennov takšnega zaporedja, dobimo

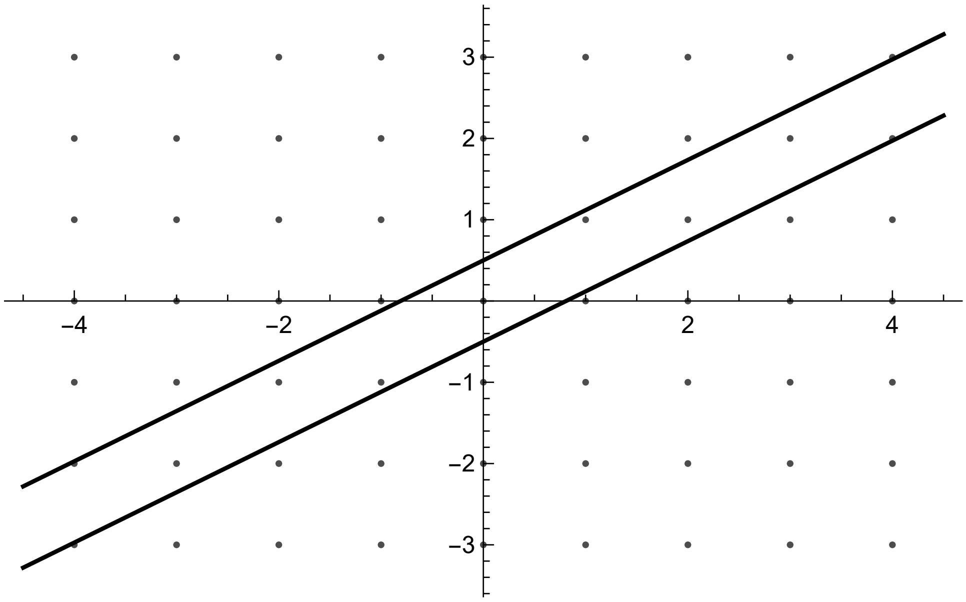
$$\tau 1 \tau \tau 1 \tau 1 \tau \tau 1 ...$$

Dobljeno zaporedje izgleda zelo regularno in ima tudi ve zanimivih matematičnih lastnosti, v katere pa se ne bomo spuščali. Pomembno je, da ni periodično in ne more biti, ker je τ iracionalno število.
Za nadaljno uporabo je ugodno, če zaporedje prepišemo v analitično obliko, ki se glasi

$$x_m = m + \sum_n \frac{n}{\tau}\Theta(n - m/\tau + 1)\Theta(m/\tau - n). \tag{2}$$

Zaradi kompaktnosti smo upoštevali $\tau - 1 = 1/\tau$. Vsota po n nas ne smoe prestrašiti: pomeni le, da se sprehodimo po vseh n-jih, Heavisidovi theta funkciji pa poskrbita, da vzamemo pravega, in sicer

$$\frac{m}{\tau} - 1 < n < \frac{m}{\tau}.$$



Zapisano funkcjo si je nazorno prestavljati v ravnini. Predstavjajmo si kvadratno mrežo z dimenzijo osnovne celice 1. Na abscisni osi potekajo m-ji, na ordinatni pa n-ji. Primerne n dobimo tako, da skozi koordinatno izhodišče naišemo z vertikalno širino 1. Pri vsakem m vtem pasu leži natanko ena točka. Člene zaporedja x_m nato dobimo tako, da točke, ki ležijo znotraj pasu, projiciramo na abscisno os, in sicer pravokotno na narisani pas. Še prikaz takšnega pasu:

2 Strukturni faktor

Spomnimo se, kako smo dobili pogoj za vrhove sipanja na pravilnem enodimenzionalnem kristalu z velikostjo osnovne celice a. Na vrsto atomov svetimo z ene strani z rentgensko svetlobo z valovnim vektorjem q, ki se sipa na vsakem od atomov. Sipalni vrh dobimo pri tistih q, ko sipana svetloba z vseh atomov interferira konstruktivno. Ta pogoj smo zapisali kot

$$1 + e^{2ika} + e^{4ika} + e^{6ika} + ... \neq 0. \tag{3}$$

Za kvazikristal bomo postopali povsem podobno: izračunali bomo strukturni faktor, ki ni nič drugega kot Fourierova transformacija gostote naboja. Za primer enodimenzionalega kristala je znan rezultat

$$\sum_n e^{iqn} = \sum_m \delta(q - 2\pi m/a),$$

kjer $2\pi m/a$ ni nič drugega kot vektor recipročne rešetke, s q pa smo označili $2k$. Interferenčni vrh bomo dobili, ko bo strukturni faktor neničelen. Toda medtem ko smo lahko za kristal "na roke"ugotovili, da bo to mogoče le pri večkratnikih vektorjev recipročne mreže, pa moramo za kvazikristal izraz izračunati povsem splošno.

Strukturni faktor je torej:

$$
\begin{aligned}
S_q &= \sum_n e^{iqx_n} && (4)\\
&= \sum_{m,n} e^{iq(m+n/\tau)\Theta(n-m/\tau+1)\Theta(m/\tau-n)} && (5)\\
&= \sum_{m,n} e^{iq(m+n/\tau)}\Theta(n-m/\tau+1)\Theta(m/\tau-n) && (6)\\
&= \iint dxdy e^{i\vec{q}\vec{\rho}} \sum_{m,n} \delta(x-m)\delta(y-m)\Theta(n-m/\tau+1)\Theta(m/\tau-n) && (7)
\end{aligned}
$$

V zadnjem koraku smo uvedli $\vec{q} = (q, q/\tau)$ in $\vec{\rho} = (x, y)$. Pravzaprav nismo še ničesar naredili, če izvedemo integrala in upoštevamo, da je $\int f(x)\delta(x-a)dx = f(a)$, se vrnemo na predzadnjo vrstico. Izraz smo spravili v to obliko, ker v njej lahpo prepoznamo Fourierjeo ransformacijo produkta dveh funkcij: kvadratne mreže in pasu, določenim z $\frac{n}{\tau}\Theta(n-m/\tau+1)\Theta(m/\tau-n$. Pri računu si lahko torej pomagamo z izrekom o konvoluciji, ki se glasi

$$
F(AB) = \frac{1}{2\pi} F(A) * F(B). \tag{8}
$$

Izračunajmo torej najprej Fourierovo transformacijo kvadratne mreže:

$$
\begin{aligned}
A(\vec{q}) &= \iint dxdy \sum_{m,n} \delta(x-m)\delta(y-n) e^{ik_x x} e^{ik_y y} && (9)\\
&= \sum_m e^{ik_x x} \sum_n e^{ik_y y} && (10)\\
&= \frac{(2\pi)^2}{a^2} \sum_{m',n'} \delta(q_x - 2\pi m'/a)\delta(q_y - 2\pi n'/a) && (11)\\
&\propto \frac{(2\pi)^2}{a^2} \sum_{m',n'} \delta(q_x - 2\pi m')\delta(q_y - 2\pi n') && (12)\\
& && (13)
\end{aligned}
$$

V zadnjem koraku smo upoštevali, da je v našem primeru dolžina osnovne celice kar 1. Predfaktor smo odvrgli, ker za rezultat ni pomemben.
Poglejmo si še drugi integral:

$$
\begin{aligned}
B(\vec{q}) &= \iint dxdy e^{i\vec{q}\vec{\rho}} \Theta(n-m/\tau+1)\Theta(m/\tau-n) && (14)\\
&= \int dx \int_{x/\tau-1}^{x/\tau} e^{ik_x x} e^{ik_y y} dy && (15)\\
&= \int dx \frac{1}{iq_y} \left(e^{iq_y x/\tau} - e^{iq_y(x/\tau-1)} \right) e^{iq_x x}. && (16)
\end{aligned}
$$

Sedaj nam kaže le še izračunati konvolucijo dobljenih funkcij, in sicer po enačbi

$$
A * B = \int d\vec{r}' A(\vec{r}' B(\vec{r} - \vec{r}') \tag{17}
$$

Ko v izraz vstavimo naši funkciji, dobimo

$$S(\vec{q}) \propto \iiint dxdq_xdqy \sum_{n',m'} \delta(q_x - q'_x - 2\pi m')\delta(q_y - q'_y - 2\pi n')\frac{1}{iq_y}\left(e^{iq_yx/\tau} - e^{iq_y(x/\tau-1)}\right)e^{iq_xx} \tag{18}$$

$$= \int dx \frac{1}{i(q_y - 2\pi m')} \sum_{n',m'} \left[e^{i(q_y-2\pi n')x/\tau} - e^{i(q_y-2\pi m')(x/\tau-1)}\right] e^{i(q_x-2\pi m')x} \tag{19}$$

$$= \int dx \frac{1}{i(q/\tau - 2\pi m')} \sum_{n',m'} \left[e^{i(q/\tau-2\pi n')x/\tau} - e^{i(q/\tau-2\pi m')(x/\tau-1)}\right] e^{i(q-2\pi m')x} \tag{20}$$

$$= \sum_{m',n'} \int dx \frac{1}{i(q/\tau - 2\pi m')} e^{i(q-2\pi n')x} e^{i(q/\tau-2\pi m')x/\tau - \left(1-e^{-i(q/\tau-2\pi m')}\right)} \tag{21}$$

$$= \sum_{m',n'} \int dx \frac{1}{iu}\left(1 - e^{-iu}\right) e^{i(q-2\pi n'+q/\tau^2-2\pi m'/\tau)} \tag{22}$$

V zadnji vrstici smo uvedli $u = q/\tau - 2\pi m'$. Ko si ogledamo izraz, ugotovimo, da lahko iz integrala postavimo vse, kar ni odvisno od x, kar nam ostane, pa je Fourierova transformacija enke, za kar pa vemo, da je razultat Diracova delta. Na koncu torej dobimo izraz

$$S(\vec{q}) = \sum_{m',n'} \frac{1}{iu}\left(1 - e^{-iu}\right)\delta(q - 2\pi n' + q/\tau^2 - 2\pi m'/\tau) \tag{23}$$

3 Sipalni vrhovi

Sipalne vrhove dobimo tam, kjer je argument Diracove delte enak 0, torej dobimo pogoj

$$0 = q - 2\pi n + q/\tau^2 - 2\pi m/\tau \tag{24}$$

$$q + q/\tau^2 = 2\pi n + 2\pi m/\tau \tag{25}$$

$$q_{m,n}x = \frac{2\pi(m + n\tau)}{\tau + 1/\tau} \tag{26}$$

Ker dobimo $q_{m,n}$ za vsak par (m,n), teh pa je neskončno, saj potekajo tako m kot n od $-\infty$ do ∞, dobimo neskončno diskretnih vrhov, ki so poljubno blizu. To imenujemo singularno zvezen spekter.
Niso pa vsi vrhovi enako visoki, zato bomo v praksi, ko uporabljamo detekotrje s končno ločljivostjo, videli samo tiste vrhove, ki so dovolj visoki. Višina vrha je sorazmerna s kvadratom amplitude strukturnega faktorja:

$$I(u) = \left|\frac{1 - e^{-iu}}{iu}\right| \tag{27}$$

$$= \frac{2(1 - cosu)}{u^2} \tag{28}$$

$$= \frac{sin^2(u/2)}{(u/2)^2}. \tag{29}$$

Dobljeni izraz je največji, ko je

$$\begin{aligned} u &= 0 \\ &= q/\tau - 2\pi m \\ &= \frac{1}{\tau}\frac{2\pi(m+n\tau)}{1/\tau+\tau} - 2\pi m \\ &= \frac{2\pi(n-\tau m)}{\tau+1/\tau}. \end{aligned}$$

Intenziteta vrha bo torej znatna takrat, ko bo števec čim bližje 0, torej:

$$\begin{aligned} n - \tau m &\approx 0 \\ \frac{n}{m} &\approx \tau \end{aligned}$$