

## Lista projektów 2025

Kurs Symetrie w układach krystalicznych (SwUK dla FT-2-S1)

Prowadzący: dr inż. Radosław Strzałka

[strzalka@fis.agh.edu.pl](mailto:strzalka@fis.agh.edu.pl)

tel. AGH 41-51

Wszystkie projekty wymagają dyskusji, dlatego zapraszam zainteresowanych danym Projektem do kontaktu i konsultacji. W trakcie realizacji zadań w każdej chwili można (jest to nawet wskazane) konsultować ze mną kolejne etapy i ew. trudności.

Jeśli ktoś z Państwa ma propozycję własnego tematu projektu, proszę się do mnie zgłosić, chętnie wysłucham.

### Projekt 1

Rozwiązanie i udokładnienie (prostej) struktury modulowanej  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  na podstawie monokrystalicznych danych dyfrakcyjnych w użyciu programu Jana2006. Na podstawie Example 5.2 (str. 319) jana2006 Cookbook (<http://jana.fzu.cz/>). Na zaliczenie należy wykonać:

- rozdziały I-IV w Cookbook'u (rozdział V dla chętnych)
- napisać sprawozdanie z omówieniem kolejnych kroków i przedstawieniem własnych wyników (obrazki, screeny, dane liczbowe etc.), wg kolejności w Cookbook'u.

### Projekt 2

Wyindeksowanie proszkowego dyfraktogramu kwazikryształu ikozaedrycznego. Należy napisać własny mały program, który będzie:

- wczytywał dane dyfrakcyjne (kąt  $2\theta$ , natężenie  $I$ ) dostarczone przez Prowadzącego;
- generował listę wskaźników  $h_1 \dots h_6$ ;
- przyporządkowywał najsilniejszemu refleksowi zadany zestaw wskaźników (np. (2,2,0,0,0,0) dla osi 2k) i na tej podstawie ustalał parametr sieci 6D (przy danym wyborze bazy przestrzeni odwrotnej 6D);
- indeksował wszystkie pozostałe refleksy.

Na podstawie wyindeksowanego obrazu dyfrakcyjnego można ustalić typ centrowania sieci 6D (z pomocą reguły wygaszeń). Na zaliczenie należy dostarczyć:

- kod źródłowy własnego programu do indeksowania;
- sprawozdanie z omówieniem kolejnych kroków i prezentacją wyników.

### Projekt 3

Obraz dyfrakcyjny uproszczonego modelu kwazikryształu dekadagonalnego. W projekcie należy:

- wygenerować położenia węzłów sieci w pokryciu Penrose'a (np. poprzez rzutowanie periodycznej struktury 5D na przestrzeń równoległą); w razie trudności Prowadzący dostarczy plik z wygenerowanymi pozycjami;
- obliczyć obraz dyfrakcyjny prostej struktury dekadagonalnej (dekoracja jednoatomowa w węzłach sieci Penrose'a); będzie to „obliczony” obraz dyfrakcyjny (pozycje  $k_{h_1 \dots h_5}$  wygenerowane na podstawie wielowymiarowej bazy, natężenia obliczone jako transformata Fouriera pozycji węzłów dla danego  $k_{h_1 \dots h_5}$ , czynniki atomowe  $f = 1$ ).

Na zaliczenie należy oddać:

- kod źródłowy własnego programu;
- sprawozdanie z omówieniem kolejnych kroków i prezentacją wyników (lista wygenerowanych refleksów oraz obraz dyfrakcyjny)

#### Projekt 4

Analiza Pattersona dekorowanego ciągu Fibonacciego. Ciąg Fibonacciego jest modelem 1D struktury kwazikryształu. W projekcie należy:

- wygenerować pozycje węzłów ciągu Fibonacciego (np. o  $L = \tau, S = 1$ ) i udekorować atomami typu A, dodać dekorację atomami B odcinka  $L$  (np. w odległości 1 od lewego końca);
- wygenerować obraz dyfrakcyjny CF z jednoatomową dekoracją atomami A tylko w węzłach i z dodatkową dekoracją atomami B w pozycjach międzywęzłowych, przedyskutować różnice;
- dla dekoracji tylko w węzłach dokonać analizy Pattersona i przedyskutować wynik.

Na zaliczenie należy dostarczyć:

- kod źródłowy własnego programu;
- sprawozdanie z omówieniem kolejnych kroków i prezentacją wyników (wykresy, dane liczbowe).

#### Projekt 5

Analityczna postać czynnika strukturalnego spinelu. Spinele to minerały o ogólnej stechiometrii  $AB_2O_4$  krystalizujące w układzie regularnym. W projekcie należy:

- obliczyć analityczną postać czynnika strukturalnego spinelu  $MgAl_2O_4$  (ustalić pozycje jonów; obliczyć ogólną postać  $F_{hkl}$ ); stworzyć tabelkę  $F_{hkl}$  dla refleksów z zakresu  $-5\dots 5$ ; przedyskutować ew. reguły wygaszeń;
- obliczyć położenia  $2\theta$  tych refleksów (na podstawie równania Bragga dla długości fali  $\lambda_{CuK\alpha} = 1,54 \text{ \AA}$ );
- obliczyć analitycznie intensywności refleksów (111), (200), (311), (222) oraz (400) z uwzględnieniem prawdziwych wartości atomowego czynnika rozpraszania (dane do zdobycia z internetu, np. z bazy NIST <https://physics.nist.gov/PhysRefData/FFast/html/form.html>, albo CXRO [https://henke.lbl.gov/optical\\_constants/asf.html](https://henke.lbl.gov/optical_constants/asf.html), a najlepiej z tablic krystalograficznych: <https://it.iucr.org/Cb/ch6o1v0001/ch6o1.pdf>).

Do zaliczenia należy oddać:

- sprawozdanie z dyskusją rozwiązań i prezentacją wyników.

#### Projekt 6

Odzyskanie mapy gęstości elektronowej dla dekadonalnego kwazikryształu AlCuRh. W projekcie należy:

- użyć programu Superflip (z zaimplementowanym algorytmem charge flipping) do odzyskania faz czynnika strukturalnego dekadonalnego kwazikryształu AlCuRh (lub innego). Plik wsadowy do programu będzie dostarczony (będzie wymagał drobnych modyfikacji ze strony studenta).
- „Sfazowany” obraz dyfrakcyjny należy użyć do odzyskania mapy gęstości atomowych (wielowymiarowych i dokonania cięć płaszczyzną rzeczywistą), za pomocą odwrotnej transformaty Fouriera;
- odzyskaną mapę gęstości elektronowych zwizualizować (np. dedykowanym programem graficznym typu VESTA, lub w Originie – mapa konturowa, lub przy użyciu bibliotek graficznych w matlabie, pythonie itp.).

Na zaliczenie trzeba oddać:

- plik z  $F_{h_1 \dots h_5}$  i odzyskanymi fazami;
- plik z mapą gęstości elektronowej (pozycje 5D i gęstość; oraz pozycje 2D (dla płaszczyzny aperiodycznej) i gęstość);
- sprawozdanie z opisaniem kolejnych kroków i wyników (w tym prezentacja graficzna cięć 2D mapy gęstości elektronowej).

## Projekt 7

Wyprowadzenie (analitycznie) czynnika strukturalnego dla ciągu Fibonacciego w metodzie statystycznej. Metoda statystyczna (alternatywna do opisu wielowymiarowego) polega na tym, że pozycje atomowe (np. w ciągu Fibonacciego) wyraża się względem dwóch sieci referencyjnych (periodycznych o stałych związanych z dwoma wektorami  $k_0$  i  $q_0$ , czy czym  $q_0 = k_0/\tau$ ). Transformata Fouriera rozkładu  $P(u, v)$  odległości  $u$  i  $v$  pozycji atomowych od najbliższych węzłów sieci referencyjnych daje czynnik strukturalny, zależny teraz od dwóch parametrów  $n$  i  $m$  (pełniących rolę wskaźników Millera). W projekcie należy:

- wyprowadzić analityczną postać czynnika strukturalnego dla ciągu Fibonacciego (dekoracja jednoatomowa w węzłach sieci) w metodzie statystycznej;
- narysować teoretyczny obraz dyfrakcyjny dla indeksów  $m, n \in (-10, 10)$ .
- Przedstawić sprawozdanie z opisanymi kolejnymi krokami wyprowadzenia i prezentacją obrazu dyfrakcyjnego.

Pomocna literatura:

- <https://doi.org/10.3390/cryst6090104>
- <https://misio.ftj.agh.edu.pl/media/misiofiles/1367f7fdc47b7893e63f88fc708ea418.pdf>