

## **Asferyczny model atomu - odkrywanie nowych metod określania struktur materiałów częściowo nieuporządkowanych**

Obecny, niezwykle szybki rozwój technologiczny nie byłby możliwy, gdyby nie wykorzystanie nowych, nowoczesnych i nieznanych wcześniej materiałów. Niezwykle istotnym zagadnieniem jest poszukiwanie związków pomiędzy własnościami fizycznymi nowych materiałów, a ich strukturą krystaliczną. Okazuje się bowiem, że sposób w jaki atomy ułożone są w przestrzeni (tzn. jaką tworzą strukturę) determinuje ich własności fizyczne i chemiczne. Niezwykle istotnym aspektem struktury materiałów jest określenie czy uporządkowanie atomów ma charakter periodyczny, a także czy w przypadku struktur periodycznych o dalekozasięgowym uporządkowaniu, występują odstępstwa od tego porządku o charakterze lokalnym. Te lokalne odstępstwa mogą mieć kluczowe znaczenie w przypadku niektórych zjawisk fizycznych takich jak półprzewodnictwo czy nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe.

Nieocenionym narzędziem służącym do określania struktury materiałów są badania dyfrakcyjne, przy użyciu promieniowania rentgenowskiego oraz neutronów. Atomy znajdujące się w materiale, a bardziej szczegółowo gęstość elektronowa, powoduje ugięcie promieniowania rentgenowskiego, którego rozkład w przestrzeni zależy od struktury materiału. Powszechnie używanym przybliżeniem opisującym rozkład gęstości elektronowej jest sferyczny model atomu, zakładający, iż atomy danego pierwiastka rozpraszają zawsze tak samo niezależnie od otoczenia, w którym się znajdują. Bardziej zaawansowanym modelem rozkładu gęstości elektronowej jest taki, biorący pod uwagę oddziaływania pomiędzy atomami oraz wiązania atomowe, zwany asferycznym modelem atomu. Obecność wiązań powoduje bowiem zniekształcenie rozkładu gęstości elektronowej, co w konsekwencji wpływa na obserwowany obraz dyfrakcyjny.

Obecnie, model niezależnych atomów, jest powszechnie stosowany, natomiast bardziej dokładny model asferycznych atomów został dotychczas wykorzystany jedynie do badań z użyciem monokryształu. W ramach projektu chcemy zastosować asferyczny model atomu do badań materiałów, w których lokalny nieporządek stanowi istotną cechę ich struktury. Będzie to możliwe, jeśli model asferycznych atomów uda się wykorzystać przy analizie innego rodzaju danych dyfrakcyjnych, takich jak dyfrakcja proszkowa, funkcja korelacji par, czy rozpraszanie dyfuzyjne.

W ramach projektu planujemy zaimplementować, rozwijaną obecnie na Wydziale Chemii UW, bibliotekę asferycznych modeli atomów DISCaMB do programu Discus służącego do analizy danych dyfrakcyjnych (rozwijanego na Uniwersytecie Friedrich-Alexander-University Erlangen-Nuremberg, Niemcy).

Planowanym, głównym efektem projektu jest opracowanie nowych metod badań nowych materiałów przy użyciu zjawiska dyfrakcji, które mogą dostarczyć bardziej precyzyjną informację na temat rzeczywistej struktury atomowej materiałów.