

Modeliranje difuznog raspršenja neutrona i x-zraka

Danijel Skeledžija

Prirodoslovno-matematički fakultet u Zagrebu, Fizički odsjek

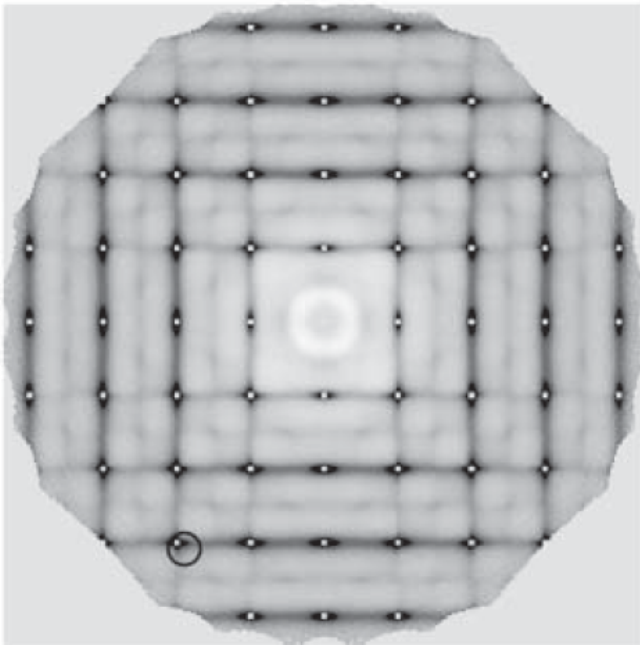
(Dated: 22. siječnja 2023.)

Pojava difuznog raspršenja poznata je od samih početaka kristalografije. Kada god raspršujemo neutrone ili x-zrake na kristalima, uz dobro poznate Braggove maksimume pojavljuje se i difuzno raspršenje između njih. Iako je difuzno raspršenje već dugo poznata pojava, pravi razvoj proučavanja difuznog raspršenja počeo je dosta kasnije u usporedbi sa standardnom kristalografijom. Tek s razvitkom sinhotronskih izvora i računala postalo je moguće lakše analizirati difuzno raspršenje te je time porastao interes za istraživanjem difuznog raspršenja. Za razliku od Braggovih maksimuma koji daju informacije o prosječnoj strukturi kristala, difuzno raspršenje daje nam informacije o lokalnoj strukturi kristala. Proučavanje lokalne strukture vrlo je važno za istraživanje svojstava raznih materijala te je to glavni interes pri istraživanju difuznog raspršenja. Cilj ovog seminara je ukratko objasniti uzroke i teoriju difuznog raspršenja te na primjeru stroncijevog rutenata pokazati kako se izvode Monte Carlo simulacije za difuzno raspršenje.

I. UVOD

A. Općenito o difuznom raspršenju

U ovom seminaru baviti ćemo se modeliranjem difuznog raspršenja neutrona i x-zraka na kristalima. Općenito, kada raspršujemo neutrone ili x-zrake na kristalu, na izmjerenoj slici raspršenja uočavamo područja različitih intenziteta. Točke najvećeg intenziteta su Braggovi maksimumi, a svo raspršenje između Braggovih maksimuma nazivamo difuznim raspršenjem.



Slika 1. Primjer uzorka difuznog raspršenja

Difuzno raspršenje ima intenzitet za nekoliko redova veličine manji od intenziteta Braggovih maksimuma. Iz

Braggovih maksimuma možemo saznati nešto o prosječnoj strukturi kristala. Kod kristalografskih istraživanja pretpostavljamo da imamo savršenu jedničnu ćeliju koja se beskonačno ponavlja u svakom smjeru. Međutim, u stvarnosti, uvijek imamo neke devijacije od prosječne strukture. Primjerice, ako imamo tanak kristalni uzorak, pretpostavka beskonačnog ponavljanja rešetke u svim smjerovima neće biti dobra. Upravo ta odstupanja od prosječne strukture uzrokuju difuzno raspršenje i zbog toga je potrebno proučavati difuzno raspršenje koje nam može reći nešto o lokalnoj strukturi kristala. Proučavanje difuznog raspršenja daje nam informacije u većem području (10-1000 Å) nego Braggovo raspršenje te je proučavanje lokalne strukture zapravo ključno za razumjevanje zanimljivih svojstava raznih materijala. Također, difuzno raspršenje nam zapravo daje informacije o kratkodosežnim korelacijama. Povijesno gledano, pojava difuznog raspršenja uočena je već kod samih začetaka kristalografije. Međutim, proučavanje prosječne strukture puno se bolje razvijalo u idućim godinama u usporedbi s proučavanjem difuznog raspršenja. Postoje dva glavna razloga za to. Prvi je to da je intenzitet difuznog raspršenja puno manji od intenziteta Braggovih maksimuma te je zbog toga u prošlosti bilo puno zahtjevnije i teže proučavati difuzno raspršenje. Tek s razvojem sinhotronskih izvora je ovaj problem postao zanemariv. Drugi razlog je to što ne postoji neko generalno rješenje za lokalnu strukturu iz difuznog raspršenja- za svaki kristal potrebno je pojedinačno postaviti model interakcija. U svakom kristalu različite kombinacije nereda uzrokuju difuzno raspršenje te je potrebno za svaki kristal pojedinačno proučiti problem i postaviti model. No s razvojem računala postalo je puno lakše simulirati probleme difuznog raspršenja te je danas u teoriji moguće postaviti model za veliku većinu kristala te precizno saznati uzroke difuznog raspršenja i tako naučiti nešto o lokalnoj strukturi kristala. U ovom seminaru mi ćemo difuzno raspršenje simulirati pomoću Monte Carlo simulacije (više detalja

o tome kasnije). Osnovna ideja ovog seminara je upoznati se s teorijom difuznog raspršenja te pokazati kako modelirati difuzno raspršenje i napraviti simulacije na primjeru stroncijevog rutenata.

B. Teorija difuznog raspršenja

Prije nego što proučimo difuzno raspršenje, spomenut ćemo nekoliko osnovnih pojmova vezanih za raspršenje čestica na idealnom kristalu te vidjeti kako se formule za intenzitet modificiraju za difuzno raspršenje. Kada pričamo o idealnom kristalu zapravo se podrazumjeva da imamo jediničnu ćeliju koja se beskonačno ponavlja u svim smjerovima te u toj rešetki nema nikakvih defekata. Raspršenje na takvom kristalu opisano je Braggovim zakonom $n\lambda = 2d\sin(\theta)$. Za određene kutove imat ćemo konstruktivnu interferenciju raspršenih valova i dobivamo dobro poznate Braggove maksimume. Amplituda raspršenog vala ovisi o vrsti atoma i bit će proporcionalna strukturnom faktoru:

$$F(\mathbf{Q}) = \sum_j b_j(\mathbf{Q})e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j} \quad (1)$$

gdje je \mathbf{Q} valni vektor definiran kao $\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$ (ovdje je \mathbf{k}_0 smjer upadnog vala, a \mathbf{k} smjer raspršenog vala). $b_j(\mathbf{Q})$ je duljina raspršenja koja ovisi o tipu upadnog zračenja. Za x-zrake, duljina raspršenja proporcionalna je sa atomskim brojem Z i pada sa porastom \mathbf{Q} . Za neutrone je duljina raspršenja konstantna sve do velikih vrijednosti valnog vektora (100 \AA^{-1}). Također, za neutrone ne postoji jednostavna ovisnost duljine raspršenja o atomskom broju budući da se neutroni raspršuju na jezgrama (a x-zrake na elektronskim oblacima) Za kristal s N jediničnih ćelija, intenzitet će biti jednak:

$$S(\mathbf{Q}) = N^2|F(\mathbf{Q})|^2 \quad (2)$$

Tu formulu možemo napisati i u obliku:

$$S(\mathbf{Q}) = \sum_i \sum_j b_i b_j e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \quad (3)$$

Ranije smo napomenuli kako je difuzno raspršenje posljedica odstupanja od prosječne strukture kristala. Želimo to odstupanje uvesti u formulu (3). To radimo na način da pretpostavimo da se svaki atom nalazi na poziciji $\mathbf{r}_j = \mathbf{R}_j + \mathbf{u}_j$ gdje je \mathbf{u} odstupanje odprosječnog položaja \mathbf{R}_j . Formula (3) onda poprima oblik:

$$S(\mathbf{Q}) = \sum_i \sum_j b_i b_j e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_i + \mathbf{u}_i - \mathbf{R}_j - \mathbf{u}_j)} \quad (4)$$

ako razvijemo eksponencijalni član u Taylorov red po \mathbf{u} , dobivamo izraz:

$$S(\mathbf{Q}) = \sum_i \sum_j b_i b_j e^{i\mathbf{Q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} (1 + i\mathbf{Q}(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) - \frac{1}{2}\mathbf{Q}(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j)^2 - \dots) \quad (5)$$

Ako od tog izraza oduzmemo izraz za Braggovo raspršenje, dobit ćemo izraz za difuzno raspršenje koji se sastoji samo od članova s različitim potencijama \mathbf{u}_j :

$$I_{dif} = I_0 + I_1 + I_2 + I_3 + \dots \quad (6)$$

Postoje naravno i viši članovi u razvoju, no mi ćemo se fokusirati na prva dva člana i na tip nereda koji je uzrok takvog raspršenja. Često je opravdano zanemariti više članove u intenzitetu jer su oni bitni samo za sustave s velikim stupnjem nereda u kojima je narušena pretpostavka beskonačnog periodičkog ponavljanja jedinične ćelije te mi u našim simulacijama nećemo promatrati takve slučajeve.

C. Kemijski kratkodosežni nered

Član I_0 u izrazu za difuzno raspršenje vezan je uz takozvani "Chemical short-range order"- kemijski kratkodosežni nered. SRO član se javlja kada u kristalu na isto mjesto (site) može doći više različitih vrsta atoma i kada vjerojatnost zauzeća jednog mjesta u kristalu ovisi o susjednim atomima. Na primjer, uzmimo da je koncentracija pojedine vrste atoma jednaka c_i . Ako su dva mjesta u kristalu udaljena za vektor \mathbf{d}_{lmn} (gdje su l , m i n indeksi vektora Bravaisove rešetke), vjerojatnost da je prvo mjesto zauzeto atomom tipa i , a druga atomom tipa j je p_{lmn}^{ij} . Korisne varijable koje jasno prikazuju efekt SRO-a su Warren-Cowley SRO parametri dani sa:

$$\alpha_{lmn}^{ij} = 1 - \frac{P_{lmn}^{ij}}{c_j} \quad (7)$$

ovdje je $P_{lmn}^{ij} c_i = p_{lmn}^{ij}$. Ako je $\alpha_{lmn}^{ij} = 0$, onda to znači da imamo nasumičnu distribuciju atoma u kristalu. Ako je $\alpha_{lmn}^{ij} > 0$, to znači da su parovi atoma tipa i i j udaljeni za vektor \mathbf{d}_{lmn} manje vjerojatni nego da imamo nasumičnu distribuciju. Ako je $\alpha_{lmn}^{ij} < 0$, onda ćemo imati više parova atoma i i j udaljenih za vektora \mathbf{d}_{lmn} nego da imamo nasumičnu distribuciju. Također, vrijedi da je $\alpha_{lmn}^{ij} = \alpha_{lmn}^{ji}$. Preciznije, član I_0 možemo napisati kao:

$$I_0 = -N \sum_{ij} \sum_{lmn} c_i c_j b_i b_j^* \alpha_{lmn}^{ij} \cos(2\pi(h_1 l + h_2 m + h_3 n)) \quad (8)$$

gdje su h_i koordinante u recipročnom prostoru. Zbog kosinusa u sumi ovaj tip nereda će uzrokovati raspršenje simetrično s obzirom na Braggove maksimume.

D. Size-effect raspršenje

Drugi tip raspršenja koji nastaje zbog nereda je takozvani "Size-effect scattering". Ovaj tip raspršenja javlja se kada udaljenosti između atoma ovise o vrstama atoma i vezan je za član I_1 u izrazu za difuzno raspršenje. I_1 poprima oblik:

$$I_1 = -2\pi N \sum_{ij} \sum_{lmn} c_i c_j b_i b_j^* (1 - \alpha_{lmn}^{ij}) * \sin(2\pi(h_1 l + h_2 m + h_3 n)) * [h_1 < X_{lmn}^{ij} > + h_2 < Y_{lmn}^{ij} > + h_3 < Z_{lmn}^{ij} >]$$

gdje su X, Y, Z komponente odmak od ravnotežnog položaja ($X_{lmn}^{ij} = (u_{lmn}^j)_x - (u_0^i)_x$). Iz ovog izraza vidimo da će ovo raspršenje biti antisimetrično s obzirom na Braggove maksimume (zbog sinusa u formuli). Size-effect scattering najlakše je shvatiti kao posljedicu toga što neki parovi atoma preferiraju biti bliže jedni drugima, a neki preferiraju biti udaljeniji. Ako imamo dva tipa atoma A i B moguće je, primjerice, da su parovi atoma A u prosjeku bliži nego što je prosječna udaljenost rešetke. Istovremeno, parovi A i B mogu u prosjeku biti udaljeniji nego što su u prosječnoj strukturi i te varijacije udaljenosti između atoma su nered koji uzrokuje difuzno raspršenje.

II. METODE SIMULIRANJA

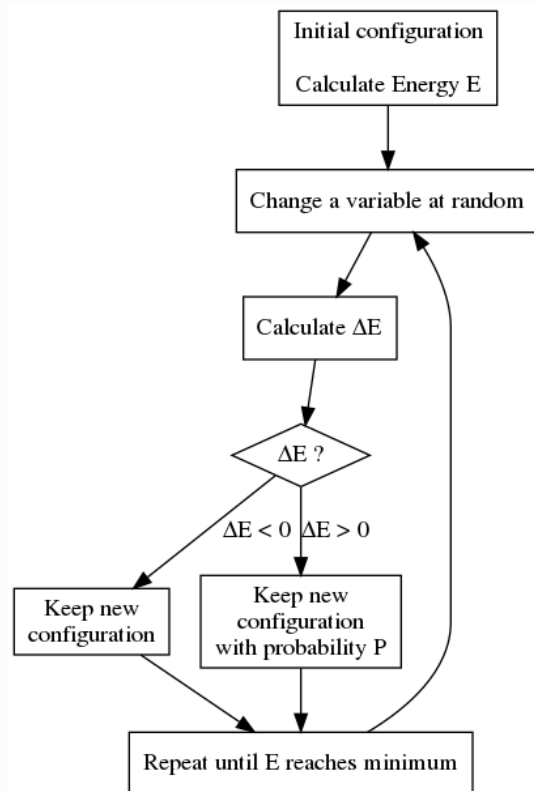
A. Ideja modeliranja difuznog raspršenja

Osnovna ideja kod modeliranja difuznog raspršenja zapravo je poprilično jednostavna. Za neki kristali izmjerili smo sliku raspršenja pomoću detektora (nebitno jesu li u pitanju neutroni ili x-zrake, princip simuliranja je isti). No zbog puno mogućih uzroka (i kombinacija uzroka) teško je odmah na prvu reći što točno uzrokuje difuzno raspršenje na izmjerenoj slici. Zbog toga postavljamo model pomoću kojeg želimo reproducirati izmjerenu sliku raspršenja. U našem modelu pretpostavljamo određeni tip interakcije između atoma te u model ubacujemo nered na neki način. Za dani model simuliramo lokalnu strukturu pomoću Monte-Carlo simulacije, zatim računamo sliku raspršenja i ako dobijemo poklapanje sa izmjerenom slikom naš model je dobar i možemo naučiti nešto o lokalnoj strukturi materijala. Čak i ako model ne reproducira željene rezultate, i to nam govori nešto o strukturi (zapravo saznajemo

što se ne događa u kristalu, a to je također korisna informacija). Naravno, prilikom postavljanja modela pokušavamo na temelju izmjerene slike i nekih podataka o kristalu što bolje pretpostaviti početni model. Primjerice, kao što smo prije napomenuli, ako uočimo antisimetrično raspršenje to nas upućuje na size-effect tip raspršenja. Modeliranje radimo pomoću programskog paketa Javelin za Python koji je specijaliziran za Monte Carlo simulacije lokalne strukture. Također, koristili smo programsScatty koji koristi FFT (fast Fourier transform) za brže računanje intenziteta raspršenja.

B. Monte Carlo simulacija

Kao što smo prije spomenuli, za simuliranje lokalne strukture kristala koristit ćemo Monte Carlo simulaciju. MC simulacija u ovom slučaju funkcionira na sljedeći način: prije svega, unosimo nered u naš model na neki način. Nakon toga pomičemo atome koje izaberemo iz ravnotežnog položaja za nasumičnu vrijednost iz normalne distribucije te pustimo sustav da se relaksira.



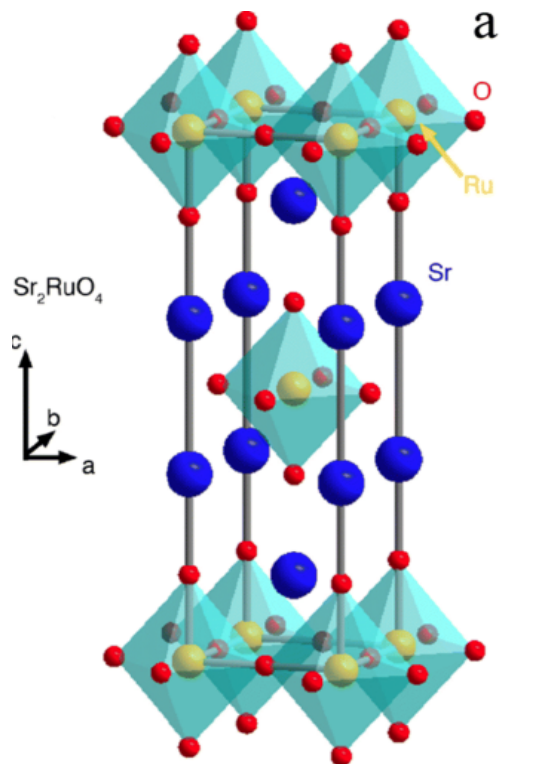
Slika 2. Dijagram toka za Monte Carlo simulaciju

Na slici 2 je prikazan dijagram toka MC simulacije. Na početku, računa se energija početne konfiguracije atoma. Nakon toga nasumično se mijenja neka varijabla

(pomakne se neki atom u našem slučaju i to nazivamo jednim potezom u simulaciji) te se računa vrijednost energije za novu konfiguraciju. Ako je promjena energije $\Delta E < 0$ nova konfiguracija se prihvaća te ponovno mijenjamo varijablu. Ako je $\Delta E > 0$, novu konfiguraciju prihvaćamo s vjerojatnošću P gdje je $P = e^{\frac{-\Delta E}{kT}}$. Kao što vidimo iz izraza za P , temperatura (odnosno Boltzmanov faktor) je bitan parametar kod MC simulacija difuznog raspršenja. Broj dobrih i loših poteza u simulaciji je dobar indikator postizanja termodinamičke ravnoteže u sustavu (broj dobrih i loših poteza bi trebao biti podjednak-dobri potezi su oni koje automatski prihvaćamo, a loši one koje prihvaćamo s vjerojatnošću P). Također, ono što još možemo kontrolirati u simulaciji je broj ciklusa koji će se izvoditi. Simulacija traje sve dok se konfiguracija atoma ne termalizira (dok sustav ne dođe u ravnotežu).

C. Stroncijev rutenat

U ovom seminaru proučavat ćemo difuzno raspršenje na primjeru kristala stroncijevog rutenata. Stroncijev rutenat, formule Sr_2RuO_4 bio je prvi otkriveni supravodič koji sadrži prijelazni metal u svojoj strukturi.

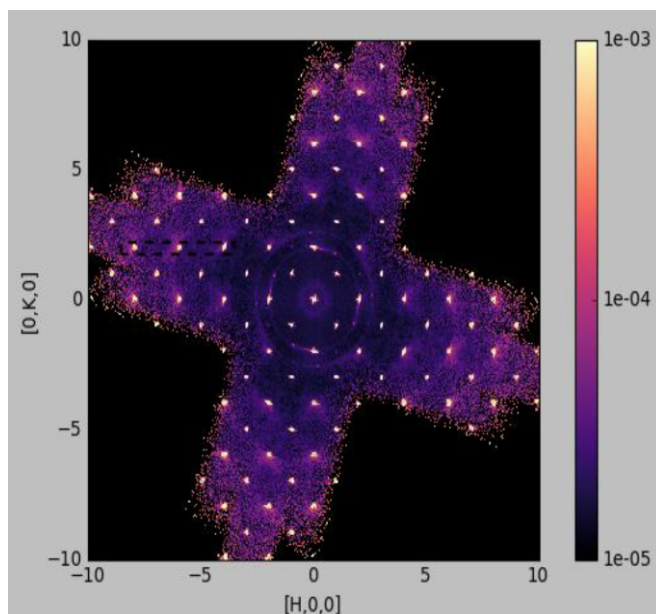


Slika 3. Jedinična ćelija Sr_2RuO_4

Za istraživanje raznih svojstava stroncijevog rutenata postoji veliki interes već dugi niz godina (praktički od

kada je otkriven, 1994.). Jedan od glavnih razloga za takav interes je to što se smatralo da bi stroncijev rutenat mogao biti prvi supravodič sa spinskim tripletnim stanjem. Ipak, čak i nakon više od dvadeset godina istraživanja znanstavnici i dalje u potpunosti ne razumiju supravodljivo stanje stroncijevog rutenata. Provedeni su brojni eksperimenti i istraživanja koja daju različite i nekonzistentne rezultate. Još uvijek nije pronađen parametar uređenja koji bi bio konzistentan sa svim istraživanjima te je naše razumjevanje svojstava ovog spoja i dalje poprilično loše. Sve ovo nas je motiviralo da modeliramo difuzno raspršenje stroncijevog rutenata kako bismo pokušali nešto naučiti o spoju.

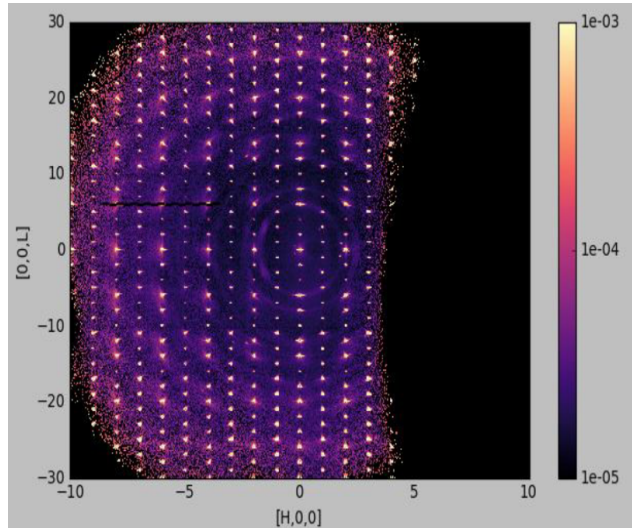
Kristalna rešetka je BCC tipa. Na slici 3 vidimo da su atomi rutenija okruženi sa 6 atoma kisika (4 ravninska i 2 apikalna) dok atomi stroncija neće biti toliko bitni za naše simulacije. Sva mjerenja difuznog raspršenja odrađena su na Oak Ridge National Laboratory pomoću CORELLI instrumenta (to je spektrometar za elastično difuzno raspršenje). Podaci mjerenja koje smo koristili postoje otprije, ali kao što smo prije naveli, još uvijek nije jasno što se točno događa u lokalnoj strukturi kristala pa je to bila dodatna motivacija za modeliranje ovog kristala.



Slika 4. Izmjereno raspršenje u [HK6] ravnini

Na slikama elastičnog raspršenja neutrona na kristalu (u [HK6] i [H2L] ravninama) vidimo neke karakteristike difuznog raspršenja. Raspršenje je asimetrično s obzirom na Braggove maksimume te se manifestira u obliku "oblaka" koji su izraženiji s jedne strane Braggovih maksimuma. Ta asimetrija nas upućuje na to da bi difuzno raspršenje moglo biti posljedica size-effecta

ili nekog višeg asimetričnog člana u formuli (6) za intenzitet. Prstenovi u središnjim dijelovima slika su posljedica raspršenja na aluminiju od kriostata te taj dio slike možemo zanemariti.



Slika 5. Izmjereno raspršenje u [H2L] ravnini

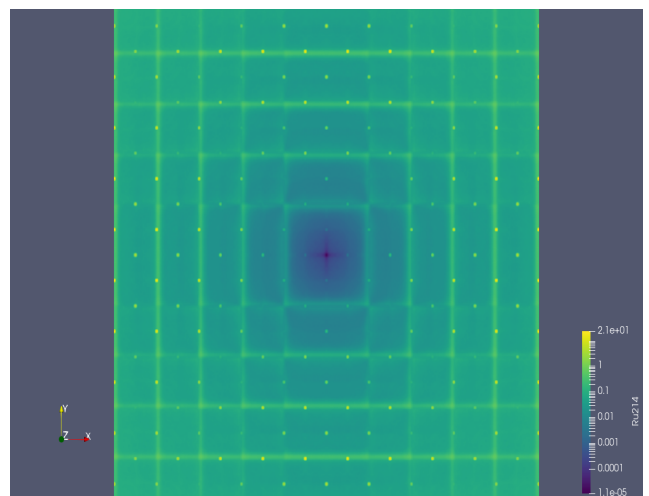
Mjerenja su napravljena i za kvazielastično raspršenje, ali se u tom slučaju ne vidi difuzno raspršenje što upućuje na to da je difuzno raspršenje posljedica nekakvog dinamičkog efekta u kristalu. Također, asimetrija u difuznom raspršenju na temperaturi od 5 K nam govori da to vjerojatno nije posljedica raspršenja na fononima. Napomenimo da se na slikama raspršenja za x-zrake ne vidi difuzno raspršenje. To nam ukazuje da su vjerojatno atomi kisika odgovorni za pojavu difuznog raspršenja te ćemo to koristiti u našim modelima. Naime, duljina raspršenja kisika za x-zrake je puno manja u usporedbi s duljinom raspršenja rutenija i stroncija te na slikama raspršenja x-zraka na kristalu praktički ne vidimo kisika. U slučaju raspršenja neutrona, duljina raspršenja za kisik je usporediva s duljinom raspršenja stroncija i rutenija te ćemo vidjeti efekte koje kisik proizvodi na slici raspršenja neutrona.

III. REZULTATI SIMULACIJA

A. Size-effect model

U prvom modelu koji smo postavili pokušali smo reproducirati size effect na slici raspršenja. Pomoću programskog paketa Javelin učitali smo strukturu kristala te smo zadali interakcije između atoma. Prepostavili smo da su atomi rutenija i kisika u x-y ravnini povezani "oprugom" (odnosno interagiraju preko potencijala koji ima oblik $E = K(u - u_0)^2$). Također, pret-

postavili smo da je određen postotak atoma rutenija (5 %) na neki način drukčiji od običnog rutenija (na taj način unosimo nered u kristal) te smo prepostavili da kisici preferiraju biti bliže takvim atomima rutenija nego običnim atomima (program nam omogućava da u potencijalu fiksiramo željenu ravnotežnu udaljenost između atoma koji interagiraju). Fizikalno, moguće je da postoji nekakav lokalizirani naboj (odnosno polaron) te smo zapravo preko tih "čudnih" atoma rutenija to ubacili u model. Atome kisika i rutenija izmknemo iz prosječnog položaja za nasumičnu vrijednost iz normalne distribucije te pustimo sustav da se relaksira. Veličina super ćelije koju smo simulirali je $20 \times 20 \times 5$.



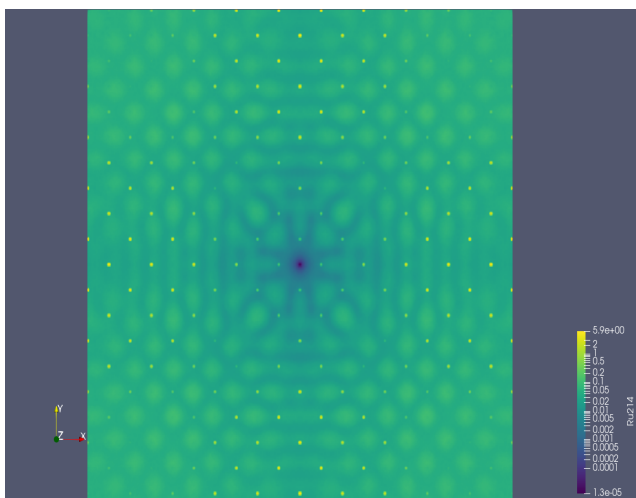
Slika 6. Simulirana slika raspršenja u size-effect modelu

Na slici vidimo linije koje su karakteristične za size effect tip raspršenja. Braggovi maksimumi su izuzeti sa slike. Slične linije možemo vidjeti na slici1 koja pokazuje tipičan primjer izmjereneog size effecta. Mjerenje jedinice intenziteta su proizvoljne. Ovaj model ne reproducira sliku raspršenja sličnu izmjerenoj slici, ali je to bio dobar početni model za isprobavanje simulacija te pokazuje kako se doista može reproducirati željeni size effect. Također, bitno je napomenuti da smo prepostavili da se pomiču samo ravninski kisici, a ne i apikalni. Razlog za to je što na izmjerenoj slici raspršenja vidimo najintenzivnije raspršenje u ravnini te smo zbog toga prepostavili da je efekt koji vidimo uglavnom ravninski. Zbog toga smo sve simulacije radili u [HK0] ravnini.

B. Asimetrični model

Drugi model za koji smo radili simulacije bio je model u kojem smo ponovno prepostavili da je određen postotak atoma rutenija drukčiji od običnih atoma rutenija, ali smo sada prepostavili da jedan dio kisika

preferira biti bliže "čudnim" atomima rutenija, dok ostatak kisika preferira biti dalje od "čudnih" rutenija. Konkretno, pretpostavili smo da je željena udaljenost za 15 % kisika 0.45 parametra rešetke, dok je ostatak kisika na željenoj udaljenosti 0.6 (prosječna udaljenost je 0.5 parametra rešetke). Naravno, ovakav model zapravo eksplicitno lomi orijentacijsku simetriju kvadrata. Također, u ovom modelu smo pretpostavili da atomi kisika interagiraju s rutenijem preko Morse potencijala te smo u ovom slučaju pretpostavili da se ruteniji ne miču (što je donekle opravdano budući da su atomi rutenija puno teži od atoma kisika.)



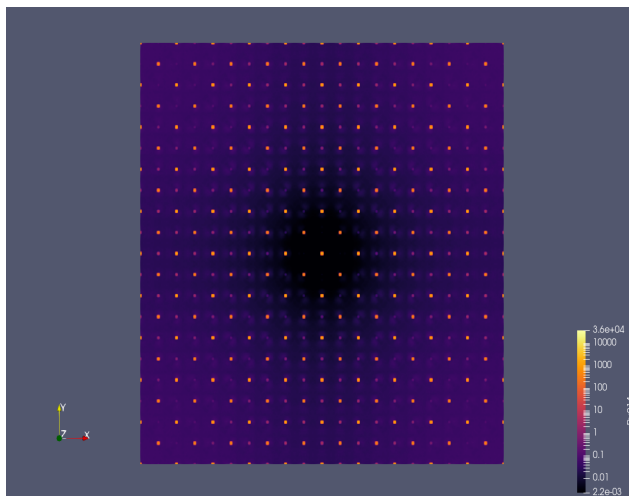
Slika 7. Simulirana slika raspršenja u asimetričnom modelu

Na slici raspršenja možemo vidjeti "oblake" difuznog raspršenja. Točnije, pojavljuju se difuzni signali koji odgovaraju udvostručivanju jedinične ćelije (odnosno kratkodosežnom uređenju veza tipa kraće-dulje-kraće-dulje). Budući da smo pretpostavili da se ruteniji ne miču, u ovom slučaju nismo dobili linije raspršenja kao u prvoj simulaciji. Braggovi maksimumi su izuzeti sa slike kao i u prvom modelu. Glavna motivacija za ovaj model bila je ta da pokušamo reproducirati asimetriju koju vidimo na izmjernim slikama raspršenja, ali nismo dobili poklapanje.

C. Yukawa model

Posljednji model za koji ćemo pokazati dobivene rezultate je model u kojem se samo ravninski kisici miču tako da zasjene lokalne nabojne fluktuacije na ruteniju koje stvaraju Yukawin potencijal sa duljinom zasjenjenja usporedivom s konstantom rešetke. Kao i u ostalim modelima, ponovno smo pretpostavili da je dio atoma rutenija na neki način drukčiji od običnih atoma rutenija te smo u ovom slučaju pretpostavili da su atomi

kisika i atomi rutenija povezani "oprugom" (isti potencijal kao u prvom modelu).



Slika 8. Simulirana slika raspršenja u Yukawa modelu

Na ovoj slici su prikazani i Braggovi maksimumi. Možemo uočiti asimetrične "oblake" difuznog raspršenja oko točaka visokih intenziteta i Braggovih maksimuma te ovaj model ima neke karakteristike slične izmjerenoj slici raspršenja, ali i dalje ne možemo biti zadovoljni s poklapanjem. Kao što vidimo, na izmjerenoj slici su "oblaci" raspršenja veći s vanjske strane, a manji s unutarnje što ne vidimo u ovom modelu te također "oblaci" nisu pravilno raspoređeni u ovom modelu. Napomenimo još da smo u svim ovim modelima računali samo raspršenje neutrona. Ako bismo htjeli računati intenzitete za x-zrake samo bismo morali u kodu promijeniti tip raspršenja u x-zrake.

IV. ZAKLJUČAK

U ovom seminaru opisali smo problem i teoriju difuznog raspršenja. Iz difuznog raspršenja možemo saznati nešto o lokalnoj strukturi kristala, za razliku od Braggovih maksimuma koji nam daju informaciju o prosječnoj strukturi kristala. Glavna ideja modeliranja difuznog raspršenja je da pomoću simulacija pokušavamo replicirati izmjerenu sliku raspršenja te tako želimo naučiti nešto o lokalnoj strukturi kristala. Pokazali smo kako se izvode Monte Carlo simulacije difuznog raspršenja neutrona (ili x-zraka) na tri različita modela. Pokušali smo replicirati sliku raspršenja izmjerenu za stroncijev rutenat te smo u jednom modelu dobili donekle slične uzorke difuznog raspršenja, ali nismo dobili potpuno poklapanje s izmjerenom slikom.

V. LITERATURA

-
- [1] T.R. Welberry, T.Weber. *One hundred years of diffuse scattering*
- [2] T. R. Welberry and D. J. Goossens. *The interpretation and analysis of diffuse scattering using Monte Carlo simulation methods*
- [3] Thomas Weber and Arkadiy Simonov. *The three-dimensional pair distribution function analysis of disordered single crystals: basic concepts*
- [4] Matthew J. Krogstad. *Diffuse scattering and local order in lead-based relaxor ferroelectrics*
- [5] Slika 3 preuzeta sa: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10948-020-05717-6>
- [6] Slika 2 preuzeta sa: <https://javelin.readthedocs.io/en/latest/javelin/mc.html>
- [7] Andrew P. Mackenzie, Thomas Scaffidi, Clifford W. Hicks and Yoshiteru Maeno. *Even odder after twenty-three years: the superconducting order parameter puzzle of Sr₂RuO₄*