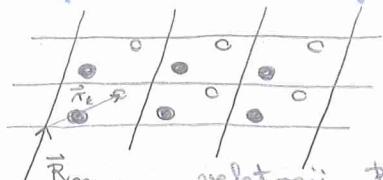


Strukture in fazna stanja

① KRISTALI

- struktturni red dolgega dosega

- periodično ponavljanje osnovne celice



$$\vec{r}_{mk}(t) = \vec{R}_m + \vec{r}_k + \vec{u}_{mk}(t)$$

poravnava lega
v celici

(velja za
(idealen kristal))
 \vec{k} -tega atoma

← KLASIČNO

- Bravaisova mreža: $\vec{R}_m = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3$

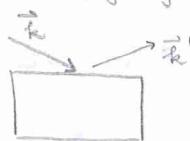
- Pogoj za kristal: $\langle u_{mk}^2 \rangle < \infty$ (odmiki so končni)

klasično: $\overline{u_{mk}^2(t)} < \infty$ → Braggov odboj

kvantno: $\langle 0 | u_{mk}(t) | 0 \rangle < \infty$ (bo le če bodo odmiki končni)

(o amorfnih mavcih (npr. steklo) odmiki divergirajo)

↳ kristal: Braggov odboj



pogoj:

$$\vec{k}' - \vec{k} = \vec{K}$$

mogoči le diskretni \vec{k} ; ↗ vektorji RECIPROČNE mreže

Debye-Waller: (odmiki razmanjšujejo intenziteto)

$$\tilde{S}(\vec{k}) = S(\vec{k}) e^{-W} \quad W \propto \langle u_{mk}^2 \rangle$$

↑ struktturni faktor

② ZLITINE

→ že od Bronarste dobe (-3000 do -1000,

→ železna doba: 3000 z.c. 1000 z.c.

jeklo (visje talice, boljše lastnosti)

→ razlog: čist baker je premehek,

- kovinske slitine:

baker
↓ (tin)

te slitine so dovolj trde
imajo hrsko talico

bron: Cu + 10% - 30% Sn (+As)

trdo od
čistega Cu oz. Fe

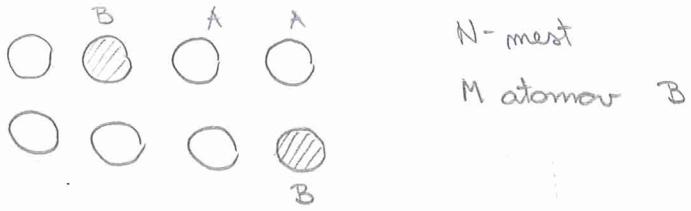
medenina: Cu > 65% + Zn

kar spajine; $A_n B_m$
molekule

slitine

stohiometrične:

neurejene: $A_x B_y$



entropija takega sistema:

$$S = k_B \ln \frac{(N!)}{(N-M)! M!} \quad \begin{matrix} \text{st. možnih} \\ \text{realizacij} \end{matrix}$$

$$S = k_B \ln \frac{N!}{(N-M)! M!}$$

Stirlingova formula

$$\ln K! = K \ln K - K + \dots$$

Računamo na približek $M \ll N$:

$$\ln \frac{N!}{(N-M)! M!} = N \ln N - N - (N-M) \ln(N-M) + N - M - M \ln M + M$$

$$= M \ln \frac{N}{M} + M$$

$$(N-M) \cdot (\ln N - \frac{M}{N})$$

$$N \ln N - M \ln N - M + \frac{M^2}{N} \approx 0$$

vpeljem koncentracija $C = \frac{M}{N}$

$$\frac{1}{N} \ln \left(\frac{N}{M} \right) = -C \ln C + C$$

prosta energija:

$$E = M \cdot E \quad \begin{matrix} \text{"B" at. kahtevajo } E \text{ vec en.} \\ \text{je vec redkava ugodnej da je} \\ C > 0 \text{ (pri } T > 0) \end{matrix}$$

$$F = E - TS = N(CE + k_B T C(\ln C - C))$$

Nakima koncentracija bo optimalna?

$$\frac{\partial F}{\partial C} = 0 \rightarrow E + k_B T (\ln C - C + 1) = 0$$

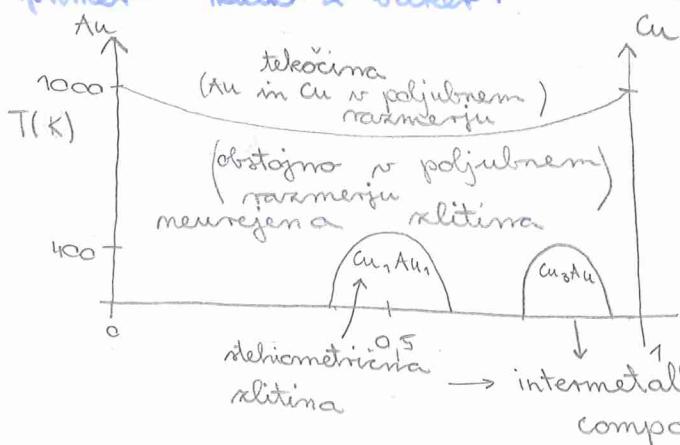
$$C = e^{-\beta E} \quad (\beta = \frac{1}{k_B T})$$

Temu recemo topljivost. ($C > 0$)

oglijs C se "topi" v železu (Fe)

poporna topljivost: redko-

primer: relats & baker:



medkovinske spojine
(tvari kristal)
intermetallic = compound

③ FAZNA SEPARACIJA



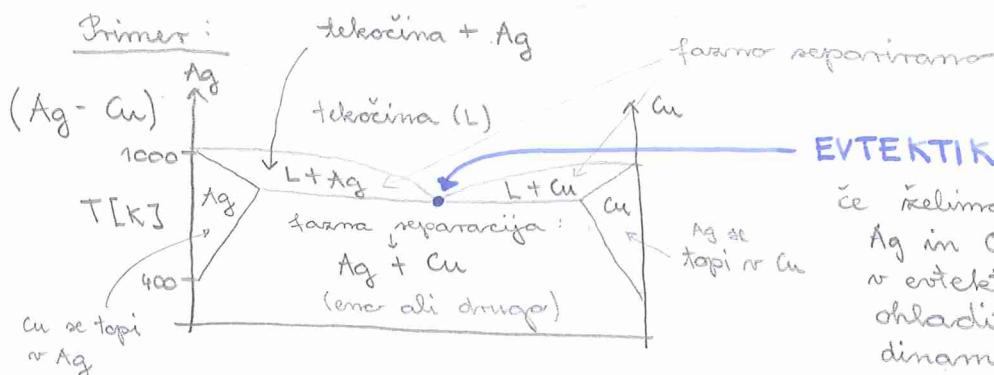
$c_a < c < c_b$: fazna separacija \rightarrow sistem se razdeli na 2 fazi

$$F_{fs} = \frac{f}{\text{delež faze B}} F(c_a) + \frac{1-f}{\text{delež faze A}} F(c_b)$$

↑ fraction / delež faze A

$$c = f c_a + (1-f) c_b \rightarrow f = \frac{c - c_b}{c_a - c_b}, \quad 1-f = \frac{c_a - c}{c_a - c_b}$$

$$F_{fs} = \frac{c_b - c}{c_b - c_a} F(c_a) + \frac{c - c_a}{c_b - c_a} F(c_b)$$



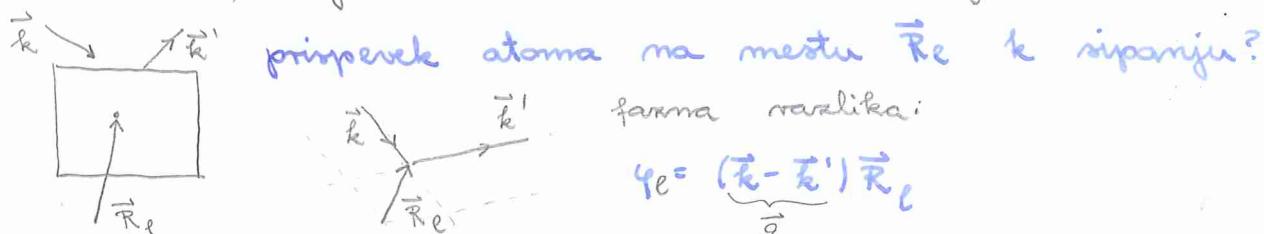
EVTEKTIK / eutektična točka

če želimo nevijeno slitino Ag in Cu moramo tekočino v eutektični točki hitro ohladiti (fazna separacija je dinamičen proces; rabi energijo pod dol. t. mi mogoča) \rightarrow dolimo slitino

(steklo je amorfna spojina, ni slitina!)

④ TEKOČINE

prenosnost, magnetne last. (celo SP) niso nujno le v kristalih



fazna razlika:

$$\varphi_e = \frac{(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}_e}{2}$$

Intensiteta sisanega valovanja? $I \propto |A_{\frac{1}{2}}|^2$

$$A_{\frac{1}{2}} = \sum_l e^{i \frac{1}{2} \vec{R}_e \cdot \vec{k}_l}$$

nato po vsakih al.

\rightarrow strukturni faktor:

$$\begin{aligned} \frac{I}{N} &= S_{\frac{1}{2}}^2 = \frac{1}{N} \sum_{l_1, l_2} e^{i \frac{1}{2} (\vec{R}_{l_1} - \vec{R}_{l_2}) \cdot \vec{R}_e} \\ &= \frac{1}{N} \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \underbrace{\delta(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)}_{\sum_{l_1, l_2} e^{i \frac{1}{2} (\vec{R}_{l_1} - \vec{R}_{l_2}) \cdot \vec{r}}} \cdot e^{i \frac{1}{2} (\vec{R}_e - \vec{r}) \cdot \vec{r}} \\ &\quad \times \sum_{l_1, l_2} \langle \delta(\vec{r}_1 - \vec{R}_e) \delta(\vec{r}_2 - \vec{R}_e) \rangle \end{aligned}$$

Korelacijska

V homogenem sistemu pričakujemo, da bo $m(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ le funkcija razdalje:

$$m(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = m_2(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \leftarrow \text{gostotna korelacijska funkcija}$$

tekćina:

→ homogenost + isotropnost → m je še funkcija razdalje

$$m_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = m_2(1\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = m_2(r), \quad r \neq 0 \rightarrow r=0 \text{ moramo šteeti posebaj}$$

$$S_2^z = 1 + \frac{1}{N} m_2(z); \quad m_2(z) = \int d\vec{r} e^{iz\vec{r}} \underbrace{m_2(r)}_{m^2 \cdot (g(r)-1) + m^2}$$

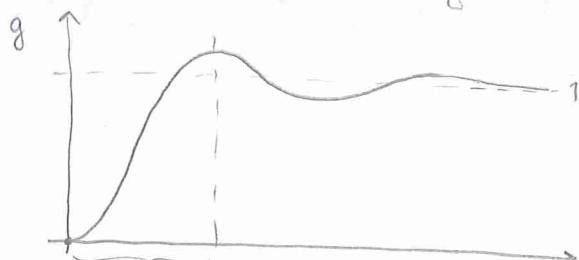
Obovo korelacijsko funkcijo $g(r)$ definiramo kot:

$$\boxed{g(r) = \frac{m_2(r)}{m^2}} \quad g(r \rightarrow \infty) = 1$$

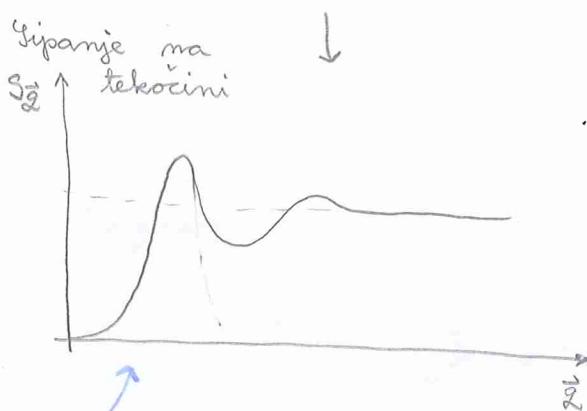
TARSKA KORELACIJSKA FUNKCIJA

$$m_2(r \rightarrow \infty) = \left| \sum_{\vec{r}} \underbrace{\delta(\vec{r} - \vec{R}_c)}_{N \cdot \left[\frac{1}{m^3} \right]} \right|^2 = m^2$$

$\xrightarrow{\text{gostota delcev}}$ \Rightarrow gostota delcev 2



tipična razdalja med 2 at. v tekćini



(intenziteta sorazmerna velikosti, me le jakosti kot pri mezici)

tekćina, amorfna mor

⑤ TEKOČI KRISTALI

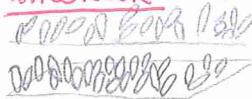
- ni translacijske simetrije (diskretne), → ni kristal
- ima orientacijsko simetrijo / → ni tekočina
orientacijski mediter, nedolgega doseg

nematič



- na + molekula lahko definiramo direktor \vec{m}
- v povprečju $\langle \vec{m} \rangle \neq 0$
- $\sigma = \int \vec{m}(\vec{\tau}, \vec{\Omega}) \left(\frac{3}{2} \cos^2 \vec{\tau} - 1 \right) d\vec{\tau} d\Omega \neq 0$
meditereni parameter

smektič



- mediter v plasti, še vedno brez transl. sim.

⑥ KVAZIKRISTALI

→ odkriti medii 80ih let
→ prof. Dolinšek

- trdna mor
- kristal ima razl. simetrijske lastnosti, npr.:
 - rotacijska os (2, 3, 4, 6 - števna)
 - translacija
- mori, ki imajo Braggov odboj in 5, 10 - števna os.
so t.i. kvažikristali:
 - imajo diskretno rotacijsko simetrijo
 - ni translacijske simetrije
- Za koncept lahko nazamemo t.i. Penroseove ploščice

