

Elektronovou hustotu v kouli je možné popsat pomocí sférických harmonických (Y_{lm}) a sférických Besselových [$g_l(k_n r)$] funkcí (určitá analogie atomových orbitalů, s využitím hlavního, orbitalového a magnetického kvantového čísla) a rozvojové koeficienty je možné vypočítat ze strukturních faktorů:

$$(r, \theta, \phi) = \sum_{l, m} a_{nlm} g_l(k_n r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2)$$

$$a_{nlm} = \int_0^a \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \rho(r, \theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta, \phi) R_{nl}(h, a) r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \quad (3)$$

Analogicky je možné určit rozvojové koeficienty elektronové hustoty fragmentu:

$$b_{nlm} = \int_0^a \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \rho_f(r, \theta, \phi) S_{nlm} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \quad (4)$$

Orientaci fragmentu je potom možné počítat pomocí FFT. Koeficienty C_{lm} se vypočítají z koeficientů a_{nlm} a b_{nlm} . D_{mm} jsou Wignerovy matice pro moment hybnosti používané v kvantové mechanice.

$$R(\theta, \phi) = \sum_{l, m} c_{lm} d_{lm}^l(\theta) \exp[i(m - m')\phi] \quad (5)$$

V PRCTF se na lokalizaci fragmentů v elektronové hustotě, v skutečnosti elektronová hustota vůbec nepoužívá. Metoda je implementována v programu **NUT** [2].

Pro velmi malé fragmenty, nízké rozlišení nebo nepřesné fáze strukturních faktorů nemá překryvový integrál (1) někdy dostatečnou schopnost odlišit správná a falešná řešení. Za tímto účelem byl napsán malý program **DOK**, který počítá interakční energii mezi ligandem a proteinem v příslušné proteinové dutině (cavity). Kombinací dvou fyzikálně odlišných přístupů je možné eliminovat prakticky všechna nesprávná řešení.

Odkazy

1. W. Jahnke, D.A. Erlanson, *Fragment-based Approaches in drug Discovery*, WILEY-VCH, Weinheim, Germany, 2006.
2. F. Pavelcik, *J. Appl. Cryst.* **39**, (2006), 483-486.

Main Lectures - Session VI, Thursday, June 14

L13

POPIS DIFRAKČNÍCH PROFILŮ POMOCÍ POJMŮ MATEMATICKÉ STATISTIKY

M. Čerňanský

Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i., Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, Česká republika
cernan@fzu.cz

Podobnost tvaru difrakčních profilů s grafickým znázorněním funkcí hustoty pravděpodobnosti v matematické statistice vedla k formálnímu převzetí některých pojmů matematického aparátu teorie pravděpodobnosti a k jejich využití pro popis difrakčních profilů. Zejména se jednalo o momenty funkce hustoty pravděpodobnosti, které stručně, numericky popisují polohu, rozptyl, asymetrii a plochost rozložení náhodné proměnné.

Podobně tomu, se poloha difrakčního profilu, kromě polohy jeho maxima, může popisovat polohou jeho těžiště – což je první moment kolem počátku (souřadnic). Kromě šířky v poloviční výšce profilu, nebo kromě integrální šířky lze šířku difrakčního profilu popsat variancí – druhým centrálním momentem. Asymetrii, resp. plochost difrakčního profilu lze kvantitativně popsat pomocí parametrů souvisejících se třetím, resp. čtvrtým momentem.

Jednou z výhod popisu difrakčních profilů pomocí momentů je to, že pro funkce svázané relací konvoluce platí určité vztahy také pro jejich momenty. Zejména pro těžiště a variance jsou tyto vztahy velmi jednoduché.

Přitom je relace konvoluce u difrakčních profilů velmi důležitá. Vyjadřuje souvislost mezi profilem měřeným, instrumentálním a fyzikálním. Podobně tak mezi profilem fyzikálním, profilem od velikosti krystalických částic a profilem od mikrodeformací. Např. těžiště fyzikálního profilu lze určit přímo jen z těžiště profilu měřeného a z těžiště profilu instrumentálního.

Další výhodou je to, že druhý centrální moment – variance fyzikálního profilu má přímou fyzikální interpretaci ve smyslu velikosti krystalických částic a mikrodeformací. Čtvrté momenty byly použity k určení velikosti částic a mikrodeformací v případě, že je k dispozici jenom jedna difrakční linie. V tomto případě – u vyšších momentů – jsou však vztahy mezi momentami funkcí svázanými konvolucí složitější, a proto bylo navrženo použít z matematické statistiky, resp. teorie pravděpodobnosti další pojem – kumulanty (semiinvarianty). To je výhodné zvláště namísto vyšších momentů a v případě více než dvou funkcí svázaných konvolucí.

Tato práce vznikla v rámci realizace projektu Akademie věd České republiky – KAN 300100801.



L14

SIMULATION OF RECIPROCAL SPACE MAPS FROM ELASTIC STRAIN FIELD IN PERIODICAL NANOSTRUCTURES

L. Horák, J. Matějová

Department of Condensed Matter Physics, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University in Prague, Ke Karlovu 5, 121 16 Praha, Czech Republic
horak@karlov.mff.cuni.cz

Laterally periodical nanostructures epitaxially grown on substrates, such as quantum dot arrays and wires, are extensively used in electronic and optoelectronic applications. The strain field in the nanostructure, caused by an epitaxial mismatch, strongly affects the material properties, e.g. electronic band structure or magnetic anisotropy. This strain field can be investigated by means of High Resolution X-ray diffraction (HRXRD).

The strain induced shifts of the atoms from their bulk-lattice positions together with the shape of the objects are manifested in the distribution of the diffracted intensity in the reciprocal space in the vicinity of the Bragg diffraction maxima. The interpretation of measured reciprocal space maps is not direct, the strain field has to be determined by a comparison of the measured data and the numerical simulation of the diffraction experiment. The shape of the objects can be obtained by complementary methods, e.g. scanning electron microscopy (SEM), and this known

information is usually included in the model for the computation of the strain field.

We will present the experimental technique (coplanar HRXRD) for the measurement of reciprocal space maps, which can be performed with a standard laboratory high-resolution diffractometer. The simulation of the diffraction maps is based on the simple kinematic x-ray scattering theory, which transforms the problem to the numerical computation of Fourier-like integrals producing numerical difficulties to be treated.

The strain field entering into the computation of the diffraction maps can be constructed in several ways depending on specified problem we want to solve. From many of them, three particular cases will be presented:

Firstly, one can be interested in the shape of crystalline core of the nanostructure, while this information is not accessible by SEM. If the composition of the nanostructure material is homogenous and the elastic properties are known, the strain field can be calculated using theory of

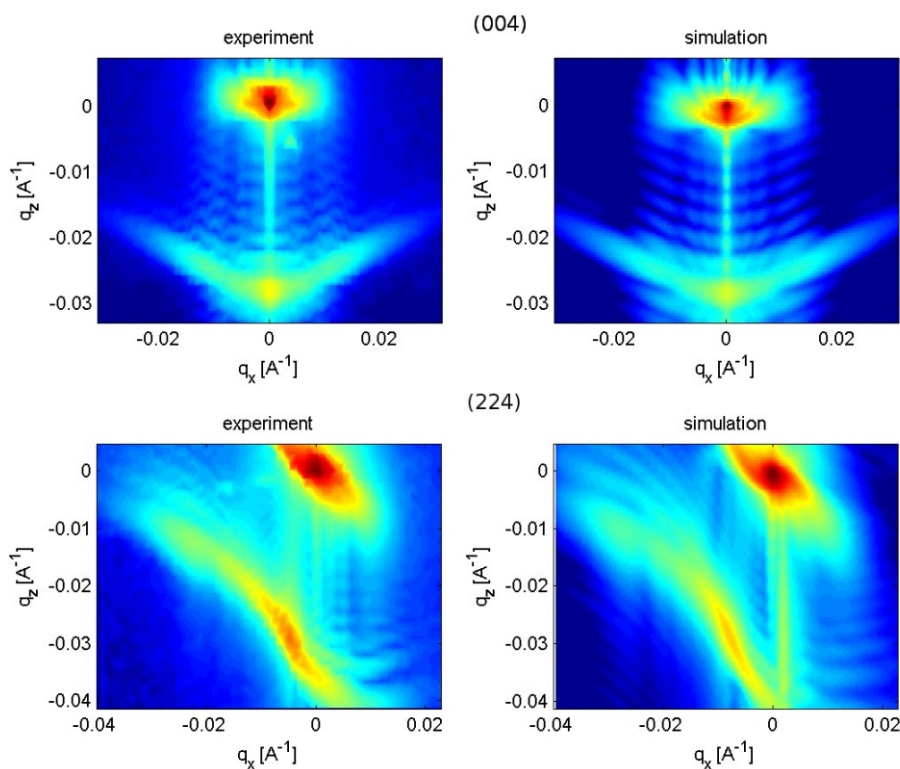


Figure 1. Reciprocal space maps near Bragg maxima (004) and (224) measured and simulated in order to determine the shape of the (Ga,Mn)As micro-wires on GaAs substrate. The most intensive point is the substrate peak of unstrained GaAs, the intensity distributed around this peak is related to the strained parts of the substrate in the vicinity of the wires. The intensity from partially relaxed (Ga,Mn)As wires is concentrated in the intense streak below the substrate peak, the fringes in between are the thickness oscillations from the wires.

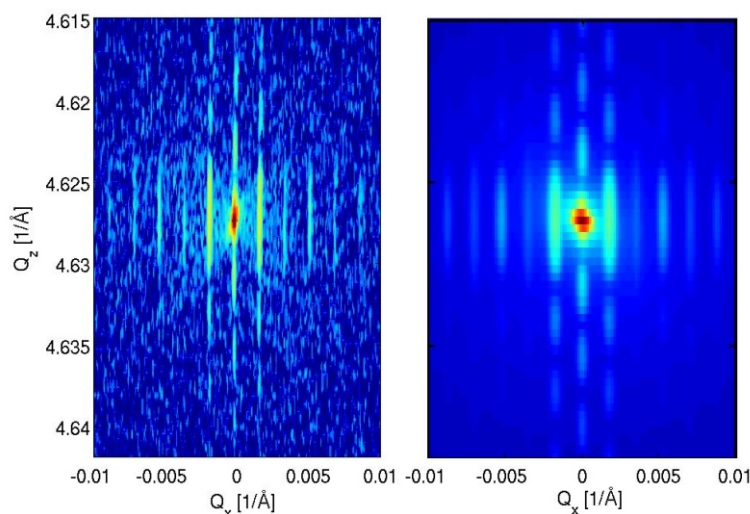


Figure 2. Measured (left) and simulated (right) diffraction map from oxidized Si-wires for Ge nanoheteroepitaxy. The intensity is present only along the truncation rods as a consequence of the lateral periodicity of the wires. The lateral period is very small in this case, therefore the distance of the truncation rods in the reciprocal space is large enough to see the individual satellites.

elasticity by means of finite-element method (FEM). The strain field is fully defined just by the object-core shape, which has to be optimized.

Secondly, the nanostructure of a known shape has inhomogeneous composition, which locally determines the unstrained lattice parameter. The unknown distribution of occupancy enters into the strain computation. The resulting strain field is given by the solution of elasticity equations solved by FEM. If we have a model predicting the occupancy distribution, e.g. based on atomic diffusion, we can

optimize its parameters to find agreement with the measured data.

Thirdly, the periodical nanostructures, made of identical material to the substrate, are covered by an additional film, which induces the strain in the objects. The task is to evaluate just the strain field in the nanostructures, although there is no reliable model for computation via the theory of elasticity. The strain field is parameterized and directly optimized to get agreement of the experimental and simulated diffraction maps.