



nebo nejvíce pravděpodobné hodnoty neznámých proměnných, pak lze vyřešit i takovou krystalovou strukturu, která má 36 nevodíkových atomů v asymetrické části buňky a 45! stupňů volnosti (Rukiah et al., 2004).

Altomare A., Cuocci C., Giacovazzo C., Moliterni A., Rizzi R., Corriero N., Falcicchio A. (2013). *J. Appl. Cryst.* **46**, 1231-1235.

Baerlocher Ch., McCusker L. B., Palatinus L. (2007). *Z. Kristallogr.* **222**(2), 47-53.

Cerny R., Favre-Nicolin V. (2007). *Z. Kristallogr.* **222** 105-113.

Habermehl S., Morschel P., Eisenbrandt P., Hammer S.M., Schmidt M.U. (2014). *Acta Cryst.* **B70**, 347-359.

- Oszlányi, G. & Suto, A. (2004). *Acta Cryst.* **A60**, 134–141.
- Rukiah M., Lefebvre J., Hernandez O., van Beek W., Serpelloni M. (2004). *J. Appl. Cryst.* **37**, 766-772.
- Rivera A., Rohliček J., Sadat-Bernal J., Ríos-Motta J., Dušek M. (2014). *Z. Kristallogr.* **229**(4), 319–327.
- Sisak D., Baerlocher Ch., McCusker L.B., Yoshinari T., Seebach D. (2014) *J. Appl. Crystallogr.* **47**, 1569-1576.
- Shankland K., Spillman M.J., Kabova E.A., Edgeleya D.S., Shankland N. (2013). *Acta Cryst.* **C69**, 1251–1259.
- Shankland K., Markvardsen A.J., Rowlett C., Shankland N., David W.I.F. (2010). *J. Appl. Cryst.* **43**, 401–406.

Session VIII, Thursday, June 25

L35

DIVERSITY AND SYSTEMATICS OF STRUCTURES OF BINARY MIXTURES OF ORGANIC SEMICONDUCTORS

J. Novák¹, A. Hinderhofer², K. Broch², A. Gerlach², A. Aufderheide², R. Banerjee², J. Dieterle², C. Frank², S. Kowarik³, F. Schreiber²

¹CEITEC Masaryk University, Group of Functional Properties of Nanostructures, Kotlářská 2, bldg. 9, CZ-611 37 Brno, Czech Republic

²Inst. Für Angewandte Physik, Eberhard Karls Universität Tübingen, Auf der Morgenstelle 10, D-72076 Tübingen, Germany

³Institut für Physik, Humboldt-Universität zu Berlin, Newtonstr. 15, D-12489 Berlin, Germany
frank.schreiber@uni-tuebingen.de

In the past decades, organic semiconductors (OSC) have attracted interest of researchers for their possible applications in organic field effect transistors, organic photovoltaic (OPV), and organic light emitting diodes (OLEDs) [1, 2]. In many of these applications, several molecular components, typically donor-acceptor (D/A) combinations, are needed and their mixing behaviour plays a key role for the performance of the devices. As an example, in OPV devices, the size of the D/A domains for partially mixing OSCs has to be comparable to the effective charge carrier diffusion length for the effective charge carriers separation and their withdrawal towards electrodes. Recent research on OSCs mixing, stimulated by the device related importance of the topic, has also shown some new and unexpected results at the fundamental level.

The presentation will review recent findings in the field of OSCs mixing behaviour. We will focus on blends of small OSCs molecules in thin films prepared by co-evaporation on weakly interacting silicon substrates. At the very beginning, we shortly introduce some most studied OSCs and highlight the importance of the OSCs blends for device applications. Thereafter, we will mention the process of OSM thin film growth via organic molecular beam deposition and the X-ray scattering techniques employed in the structural studies on them, including X-ray specular reflectivity and grazing incidence X-ray diffraction [3].

The main part of the presentation will deal with crystal structure of binary mixtures of OSCs and how it is influenced by molecular interactions. Some structures of OSC blends find direct counterparts in the well explored ele-

mental systems, such as binary alloys, while other mixing scenarios are completely new and surprising. Similar to the elemental systems, phase separation, statistical mixing of molecular components, and formation of a new molecular compound phase, respectively, are observed for OSC mixtures [4]. However, in contrast to the elemental blends, not only interaction between molecular components of mixtures determines the realized mixing scenario but also the steric, i.e. shape, compatibility of the molecules plays an important role [4, 5]. Additionally, anisotropy of the shape and of the interaction potential of the OSC molecules can lead to an ordering anisotropy, where the mixed system shows periodicity only along a certain preferential direction [6].

1. *Physics of Organic Semiconductors*. Ed.: W. Brüttling and C. Adachi, Wiley-VCH, Weinheim 2012, 2nd ed.
2. *Physical and Chemical Aspects of Organic Electronics*. (Ed.: C. Wöll), Wiley-VCH, Weinheim 2009.
3. U. Pietsch, V. Holý, T. Baumbach, *High Resolution X-ray Scattering: From Thin Films to Lateral Nanostructures*. New York: Springer 2009, 2nd ed.
4. A. Hinderhofer and F. Schreiber, *ChemPhysChem*, **13**, (2012) 628.
5. A. Opitz, J. Wagner, W. Brüttling, A. Hinderhofer, F. Schreiber, *Phys. Status Solidi A*, **206**, (2009), 2683.
6. A. Aufderheide, K. Broch, J. Novák, A. Hinderhofer, R. Nervo, A. Gerlach, R. Banerjee, and F. Schreiber, *Phys. Rev. Lett.*, **109**, (2012), 156102.



L36

RECONSTRUCTION OF CRYSTAL SHAPES BY X-RAY NANODIFFRACTION FROM 3D MULTIPLE QUANTUM WELLS

M. Meduňa¹, C.V. Falub², F. Isa³, D. Chrastina³, T. Kreiliger², G. Isella³, H. von Känel²

¹Department of Condensed Matter Physics & CEITEC, Masaryk University, Kotlářská 2, 61137 Brno,
Czech Republic

²Laboratory for Solid State Physics, ETH-Zürich, Schafmattstrasse 16, 8093 Zürich, Switzerland

³L-NESS, Department of Physics, Politecnico di Milano, via Anzani 42, 22100 Como, Italy
mjme@physics.muni.cz

Advances in focusing of X-rays during past years have allowed tremendous increase in spatial resolution of scattering techniques. In this work we show that scanning sub-micrometer diffraction using focused synchrotron radiation can unravel the three-dimensional structure of epitaxial crystals containing a periodic multiple quantum wells underneath their faceted surface.

As an example we use 8 micron high SiGe crystals (Ge content 90%) grown by low-energy plasma enhanced chemical vapor deposition (LEPECVD) on a regular array of Si pillars etched deep into the Si substrate. The SiGe crystals are monolithically formed by self limited lateral growth [1] into the shape of high, 3D faceted towers as a buffer for final growth of multilayer on top, see Figure 1. These SiGe microcrystals are further conformal overgrown by a periodical Ge/SiGe multiple quantum well (MQW) structure [2], see scheme in Figure 2. This allows amplification of the truncation rod diffraction from every part of the surface. For a nanodiffraction experiment the neighbouring crystals were isolated in order to detect the signal only from one individual crystal [3].

The X-ray nanodiffraction experiment was performed at the ID01 beamline of the European Synchrotron Radiation facility (ESRF) in Grenoble. The beam was focused down to 500 nm using a Fresnel zone plate (FZP) and scanned over the sample by a piezo stage, see Figure 2. By mapping reciprocal space using 2D pixel detector, three-dimensional reciprocal space maps (RSMs) were constructed

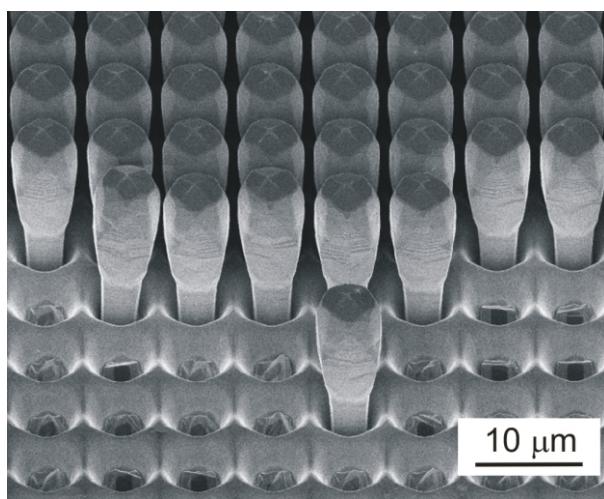


Figure 1. SEM image of epitaxial grown 8 μm high Ge crystals grown on 8 μm high Si pillars, see Ref. [4].

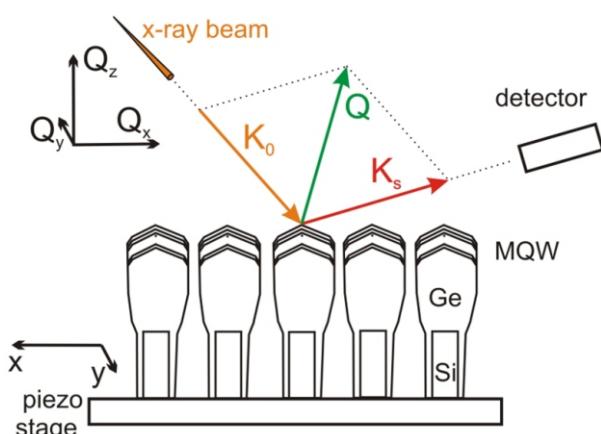


Figure 2. Schematic sketch of scattering geometry with incident beam \mathbf{K}_0 and exit beam \mathbf{K}_s defining the scattering vector \mathbf{Q} , see Ref. [4].

for each (x,y) position of the x-ray beam on the sample. Since the microcrystal surface with facets, see Figure 3a, was covered by MQW, the diffracted intensity was aligned into MQW satellites in reciprocal space ordered along four truncation rods each perpendicular to irradiated surface, see Figures 3d,e,f. A cut through isointensity plot of 3D RSM is shown in Figure 3c.

If we limit the detected intensity only to selected MQW satellite peaks, the diffraction signal is sensitive only to particular surface corresponding to selected facet. Thus using this scanning diffraction technique, we can map shape of individual facets. In Figure 3b, the (x,y) mesh of total intensity collected around all SL-1 peaks is plot and it clearly shows the shape of {113} crystal facets on top. If only peaks from one truncation rod are selected, the mesh will image only the one corresponding facet. This type of imaging in Figure 3b well correlates with the SEM image in Figure 3a, observed from the same viewing angle as the incidence angle of X-ray beam.

Using this method we could determine also the MQW properties on top of each individual crystal facet depending on the beam position [4]. From the diffraction peak shape we could map the very high crystalline quality of the structure as well. The presence of the MQW allows the reconstruction of the crystal shape without the need of any structural model.

We acknowledge the staff of ID01 beamline at ESRF; the FIRST Center for Micro- and Nanoscience of ETH Zürich

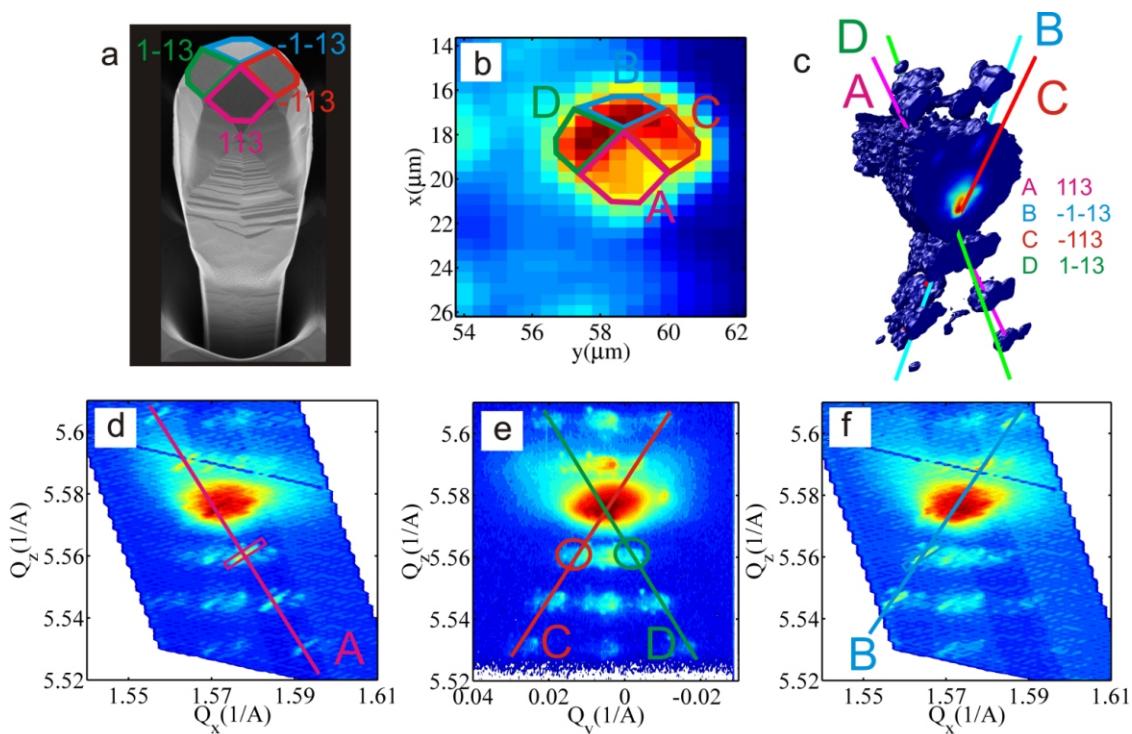


Figure 3. Perspective SEM micrograph view of 8 m tall Ge crystal with significant crystallographic facets, A (113), B (-1-13), C (-113), D (1-13). (a). The intensity mesh from all SL-1 peaks shows the complete shape of crystal surface covered by diffracting MQW structure (b). 3D isolevel plot of the scattered intensity cut in the middle shows all four ABCD truncation rods (c). Examples of (Q_x, Q_z) 3D RSM projections around SiGe (115) reciprocal lattice point recorded at facet A (113) (d) and B (-1-13) (f). The projection of 3D RSM into (Q_y, Q_z) plane shows truncation rods from both facets C (-113) and D (1-13) (e), see Ref. [4].

for making available its infrastructure and helpful discussions with B. Batlogg and A. Dommann.

1. C.V. Falub, H. von Känel, F. Isa, R. Bergamaschini, A. Marzegalli, D. Chrastina, G. Isella, E. Müller, P. Niedermann, L. Miglio, *Science*, **335**, (2012), 1330.
2. F. Pezzoli, F. Isa, G. Isella, C.V. Falub, T. Kreiliger, M. Salvalaglio, R. Bergamaschini, E. Grilli, M. Guzzi, H. von Känel, L. Miglio, *Phys. Rev. Applied*, **1**, (2014), 044005.
3. C. V. Falub, M. Meduňa, D. Chrastina, F. Isa, A. Marzegalli, T. Kreiliger, A.G. Taboada, G. Isella, L. Miglio, A. Dommann, and H. von Känel, *Scientific Reports* **3** (2013), 2276.
4. M. Meduňa, C.V. Falub, F. Isa, D. Chrastina, T. Kreiliger, G. Isella, H. von Känel, *J. Appl. Cryst.*, **47**, (2014), 2030.

XTOP-16

13th Biennial Conference on High Resolution
X-Ray Diffraction and Imaging

Konference se v České republice uskuteční již podruhé.
Tentokrát v Brně v září 2016.



L37

VYUŽITÍ FOURIEROVY TRANSFORMACE PŘI OBRAZOVÉ ANALÝZE MIKROFOTOGRAFIÍ II

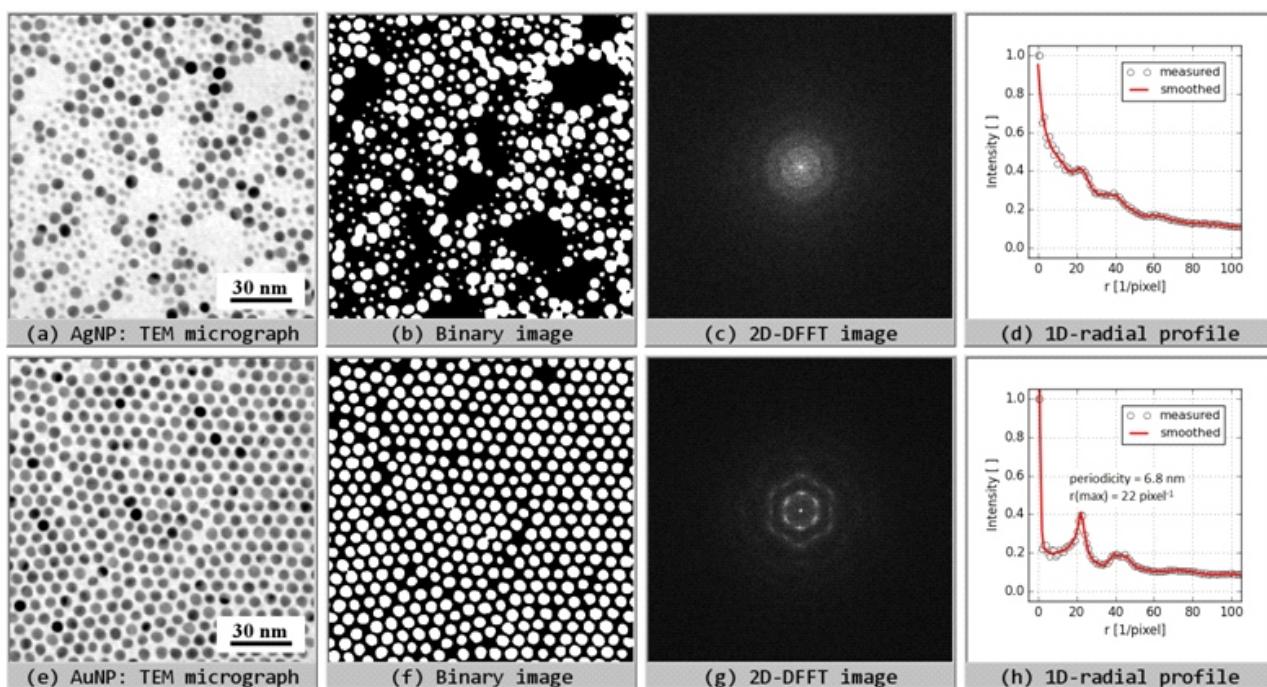
M. Šlouf

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 16206 Praha 6
slouf@imc.cas.cz

Fourierova transformace (FT) je jedním z nástrojů, který lze využít v obrazové analýze mikrofotografií (IMA), neboli při „převodu obrázků na čísla“. Tento příspěvek navazuje na naše dvě předchozí práce, prezentované na kolokviích krystalografické společnosti [1, 2]. V první práci [1] jsme představili programový balík MDFT (sadu skriptů pro programovací jazyk Perl [3]), který dokázal převádět mikrofotografie na difrakční obrazy (tj. počítat dvourozměrnou diskrétní FT z vybraných částí obrazu) a následně z difrakčních obrazů počítat radiální profily (tj. intenzitu jako funkci vzdálenosti od středu difrakčního obrazu), což bylo možno využít pro určování periodických vzdáleností v polymerních systémech [4]. Ve druhé ze zmíněných prací [2] jsme původní programový balík MDFT zjednodušili (kratší a přehlednější skripty v jazyce Python [5]), podstatně zrychlili (využití modulů pro rychlou práci s rozsáhlými poli, které jsou součástí vybraných volně šířitelných distribucí Pythonu, např. [6]) a rozšířili o další funkce (uživatelsky definovatelná normalizace, definovatelné vyhlažování dat, azimutální profily).

Nyní představujeme finalizovanou verzi balíku MDFT. Jedná se o sadu skriptů ve volně šířitelném programovacím jazyce Python, které lze snadno a rychle modifikovat a aplikovat na libovolnou mikrofotografiu. Oproti předchozí verzi obsahují skripty řadu drobných vylepšení. Navíc jsou v nich stručné textové popisky usnadňující uživatelské úpravy. V neposlední řadě má balík MDFT také zlepšenou nápovědu a příklady na [www\[7\].](http://www[7].)

Python-skripty z balíku MDFT [7] používáme zpravidla v kombinaci s jiným volně šířitelným programem ImageJ [8], který má grafické uživatelské rozhraní a je přímo specializován na práci s mikrofotografiemi. Kombinace těchto dvou programů umožňuje následující využití FT při obrazové analýze: (i) výpočet jednorozměrné diskrétní FT (1D-DFFT) z vybraných čárových profilů na mikrofotografiích, (ii) výpočet dvojrozměrné diskrétní FT (2D-DFFT) z vybraných oblastí nebo celých mikrofotografií, (iii) převod 2D-DFFT na jednorozměrné radiální profily, (iv) převod 2D-DFFT na jednorozměrné azimutální profily a (v) využití 2D-DFFT k filtrování, což v praxi zahrnuje zejména odstraňování náhodného šumu,



Obrázek 1. Ukázka, co dokáže současná verze programu MDFT [7]. Zde se jedná o analýzu schopnosti samouspořádání nanočistic stříbra (AgNP; a–d) a zlata (AuNP; e–h). TEM mikrofotografie (a, e) byly pomocí programu ImageJ [8] převedeny na binární obrazy (b, f). Pomocí skriptů z balíku MDFT byla vypočtena dvojrozměrná Fourierova transformace (c, g) a výsledné 2D-DFFT obrazy byly přepočteny na 1D radiální profily (d, h). Symetrie difrakčních obrazů (c, g) jasně prokázala nižší míru samouspořádání a orientace u bimodálních AgNP ve srovnání s monodisperzními AuNP. Z piků na radiálních profilech bylo navíc možno vypočítat průměrnou vzdálenost mezi česticemi (6,8 nm; obr. h), tedy veličinu, jejíž přímé měření je dosud pracné.



odstraňování periodického šumu a vyrovnání nerovnoměrného pozadí na mikrofotografiích. Body (i–iv) souvisí s popisem a kvantifikací periodického uspořádání. Zde existuje analogie mezi 2D-DFFT obrazy mikrofotografii a difraktogramy z XRD či ND. Na rozdíl od XRD/ND se ale v případě IMA zpravidla nejedná o atomární strukturu, ale o periodické uspořádání na mikroskopické úrovni (stovky mikrometrů až jednotky nanometrů). Bod (v) nemá přímou analogii s XRD/ND a je specifický pro IMA.

Obsahem rozšířeného abstraktu, přednášky a dokumentace programu MDFT na www [7] jsou příklady z praxe ilustrující všechny shora zmíněné aplikace (tj. body i–v, uvedené v předchozím odstavci). V přednášce uvedeme též vybrané publikaci výstupy [4, 9], v nichž byla FT analýza mikrofotografii využita. Z příkladů budou patrné dvě výhody balíku MDFT ve srovnání s některými komerčními i volně šířitelnými balíky pro IMA: (a) *flexibilita* neboli možnost přizpůsobit si svůj skript „na míru“ dané mikrofotografii či sérii mikrofotografii a (b) *automatizace* neboli možnost spustit stejný skript i na velmi rozsáhlé sérii mikrofotografii.

1. M. Šlouf, H. Synková, J. Baldrian, *Materials Structure*, **12**, (2005), 85–89.

2. M. Šlouf, T. Vacková, *Materials Structure*, **21**, (2014), 79.
3. Domovská stránka programu Perl: <http://www.perl.org/>.
4. M. Šlouf, H. Synková, J. Baldrian, A. Marek, J. Kovářová, P. Schmidt, H. Dorschner, M. Stefan, U. Gohs, *J Biomed Mater Res Part B: Appl Biomater.*, **85B**, (2008), 240–251.
5. Domovská stránka programu Python: <https://www.python.org/>.
6. Domovská stránka distribuce WinPython, obsahující klíčové moduly pro výpočty FT: <http://winpython.github.io/>.
7. Domovská stránka programu MDFT: http://www.imc.cas.cz/vymena/morpho_data/MDFT/000index.htm.
8. Domovská stránka programu ImageJ: <http://imagej.nih.gov/ij/>.
9. L. Matějka, M. Janata, J. Pleštík, A. Zhigunov, M. Šlouf, *Polymer*, **55**, (2014), 126–136.

Poděkování: tato práce vznikla díky finanční podpoře od Technologické agentury České republiky (projekt TE 01020118) a Grantové agentury České republiky (projekt P108/14-17921S).

L38

X-RAY SCATTERING ON HIGHLY PERTURBED CARBON NANOMATERIALS

Milan Dopita¹ and Zdeněk Matějka²

¹Institute of Materials Science, Technical University of Freiberg, Gustav-Zeuner-Strasse 5, Freiberg, D-09599, Germany

²Max IV Laboratory, Lund University, Ole Römers väg 1, 223 63 Lund, Sweden
dopita@gmail.com

Simulations of scattered intensity distributions from two and three dimensional carbon structures of different shapes and sizes were done using the general Debye scattering equation [1]. The influence of the lattice defects typical for the turbostratic structure, i.e. random fluctuations in the parallel layer spacings, random lateral translations of graphitic layers, the curvatures of layers and mutual disorientations of individual parallel layers around the layers normal direction, on the resulting simulated scattered intensities were studied and discussed [2]. The microstructure-induced changes in the line broadening, in the shape parameter in the Scherrer formula and in the lattice parameters determined from the positions of the X-ray diffraction lines are discussed in particular. The set of presented Scherrer parameters allows the calculation of the cluster sizes along and normal to the basal planes from the measured X-ray scattering. The applicability of the Warren-Bodenstein's approach [3] and paracrystalline model [4, 5] for description of scattering on turbostratic carbon structures was proven. Intensity distributions simulated using both approaches were compared to those obtained using the general Debye scattering equation.

A computer program adopting Warren-Bodenstein's approach and paracrystalline model allowing fitting of whole measured scattering powder patterns was written. The program enables refinement of physical parameters of

turbostratic carbon materials, i.e. the mean lattice parameters a_0, c_0 , the mean cluster sizes parallel and perpendicular to the graphitic planes La and Lc , their distributions as well as the mean square atomic displacements $\langle u_a^2 \rangle$ and $\langle u_c^2 \rangle$. A series of high melting coal-tar synthetic pitch specimens, annealed at different temperatures, was prepared and investigated [6]. In studied samples we observed the increase of the clusters sizes, changes in the mean lattice parameters a_0, c_0 , and decay of disorder with increasing annealing temperature.

The generalized Warren-Bodenstein's method describing the scattering on turbostratic carbon was implemented into the Rietveld program MStruct [7] allowing fitting of measured scattered intensity distribution from mixtures of crystalline materials with turbostratic carbon, refinement of essential microstructural parameters and quantitative phase analysis.

1. P. Debye, *Ann Phys*, **351**, **6**, (1915), 809.
2. M. Dopita, M. Rudolph, A. Salomon, M. Emmel, C. G. Aneziris & D. Rafaja, *Adv. Eng. Mater.*, **15**, (2013) 1280.
3. B. E. Warren & P. Bodenstein, *Acta Cryst.*, **18**, (1965), 282.
4. S. Hendricks and E. Teller, *J Chem Phys*, **10**, (1942), 147.
5. R. Hosemann, *Zeit Phys*, **128**, (1950), 465.

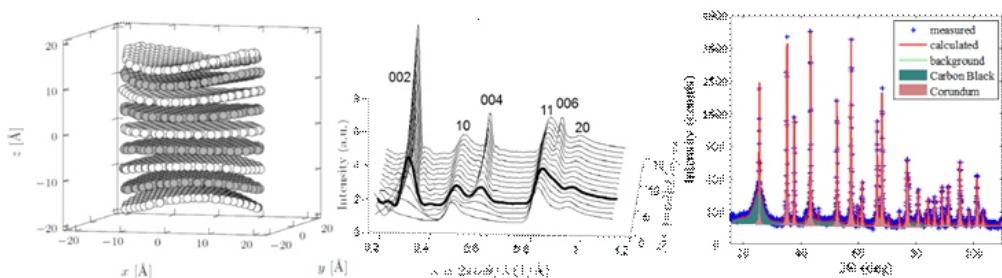


Figure 1. Model of turbostratic carbon cluster of cylindrical shape (a). Calculated coherently scattered intensity contribution from cylindrical turbostratic carbon cluster with diameter $La = 10$ Å; number of parallel layers varied between 1 and 15 (b). Measured and refined X-ray scattering patterns from mixture of crystalline Al_2O_3 and turbostratic carbon (25 wt. %) sample (c).

6. M. Dopita, M. Emmel, A. Salomon, M. Rudolph, Z. Matěj, C. G. Aneziris, D. Rafaja, *Carbon* **81**, (2015), 272.
7. Z. Matěj, A. Kadlecová, M. Janeček, L. Matějová, M. Dopita, R. Kužel, *Powder Diffraction*, **29**, S2, (2014), S35.

The authors would like to thank the German Research Foundation (DFG) for supporting the subproject A05, which is a part of the Collaborative Research Centre 920 (CRC 920) "Multi-Functional Filters for Metal Melt Filtration - A Contribution towards Zero Defect Materials".



Konference se koná v době od 30. 8. do 4. 9. 2015 v barokním Břevnovském klášteře, prvním mužském klášteře v Čechách založeném v roce 993. Jedná se o osmou konferenci v řadě konferencí Aperiodic pořádaných každé tři roky. Tyto konference se snaží přilákat a shromáždit vědce věnující se různým aspektům aperiodických krystalů a příbuzným problémům. Předsedou mezinárodního programového výboru je Václav Petříček, organizačního výboru pak Michal Dušek, dále v něm pracují Lukáš Palatinus, Jindřich Hašek, Radek Kužel a Jiřina Pilná. Očekávaná účast je 130-150 lidí. Kromě Krystalografické společnosti jsou pořadateli Komise aperiodických krystalů IUCr, speciální zájmová skupina (SIG) aperiodických krystalů při ECA a Fyzikální ústav AV ČR. www.crysa.fzu.cz/aperiodic2015/.