

# F7030 Rentgenový rozptyl na tenkých vrstvách

O. Čaha  
PřF MU

Prezentace k přednášce  
Numerické simulace  
Příklady experimentů  
Vybrané vztahy

# Syllabus

1. Experimentální technika: zdroje, vznik rtg záření, goniometry, optické prvky (monochromátory, kolimátory, zrcadla, fokusační optika), detektory. Základní experimenty: polykrystalové a monokrystalové metody, mapování reciprokého prostoru
2. Kinematická teorie rozptylu: úvod do teorie rozptylu, rozptyl na elektronu, izolovaném atomu, krystal, strukturní a geometrický faktor, omezená velikost krystalu
3. Difrakce na polykrystalech I: strukturní faktor, velikost krystalitu (Scherrerova formule), vliv deformace na polohy a šířky difrakčních maxim, zbytková napětí, kvantifikace fázového složení (vnitřní normál)
4. Polykrystaly II: Full profile fitting; Texture, ODF (orientation distribution function); Debyeův vztah, PDF (pair distribution function).
5. SAXS: teoretický popis, řídké roztoky – Guinierův a Porodův vztah, uspořádané částice – long range a short-range order
6. Dokonalé, téměř dokonalé krystaly, epitaxní vrstvy: Kinematická teorie na monokrystalu a epitaxní vrstvě – polohy difrakcí, truncation rod, deformace v epitaxní vrstvě, relaxace. Mozaikový krystal
7. Dynamická teorie rtg reflexe: Jednovlnná aproximace – hloubka vniku, reflexe na hladkém rozhraní, multivrstvy (formalismus přenosové matice), TRXRF
8. Dynamická teorie rtg difrakce: Dvojevlnná aproximace: případ Bragg a Laue, Borrmannův jev, stojatá vlna, GID, epitaxní vrstvy
9. Semikinematická teorie I: DWBA, Rozptyl na drsných rozhraních – popis drsného rozhraní, příklady: fraktálové rozhraní, dvouúrovňové, vicinální, spekulární odraz a nespekulární rozptyl, drsné multivrstvy
10. Semikinematická teorie II: GISAXS na částicích na povrchu a uvnitř vzorku, Difuzní rozptyl na defektech v krystalu v okolí difrakce
11. Experimentální rozlišení Experimentální rozlišení v reciprokém prostoru: analyzer streak, detector streak, monochromator streak, DuMondovy grafy, disperzní a nedisperzní uspořádání, koherenční šířka a délka
12. Další rentgenové metody: Fluorescenční spektroskopie, absorpční spektroskopie – XAFS, XMCD.

# Difrakce na polykrystalech

Poznámky k výpočtům intenzit:

Dříve uvedené vztahy jsou pro integrální intenzity píků

Integrální intenzita píku je úměrná objemu vzorku (objemu krystalitu násobeno počtem zrn)

Terminologická poznámka:

Zrno

Krystalit

Koherentně difraktující doména

R-faktor

# Difrakce na polykrystalech

Experiment výhody – nevýhody, požadavky:

Pro kvantitativní vyhodnocení vzorek musí být bez preferenční orientace a jemně nadrcen

Bragg-Brentano

Rovinnost vzorku

Dobré úhlové rozlišení

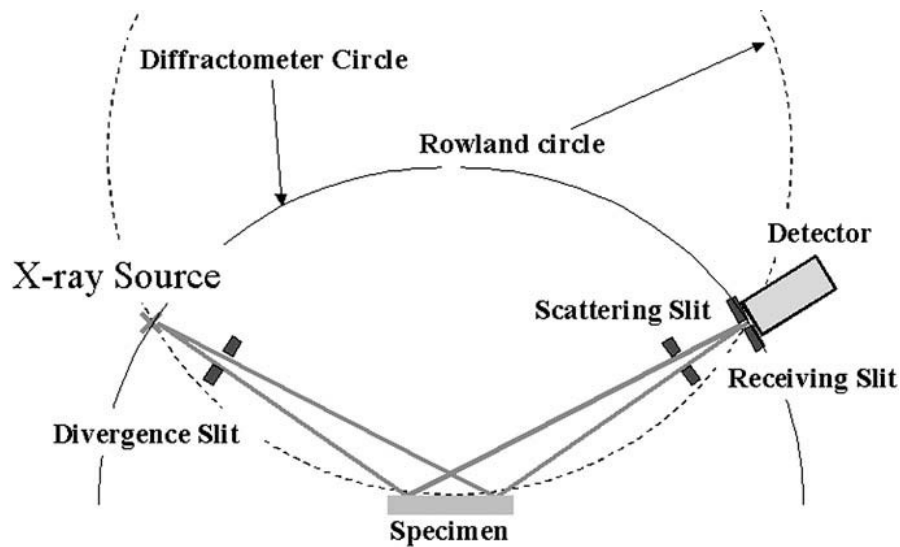
Velká intenzita

parallel beam

menší požadavky na vzorek

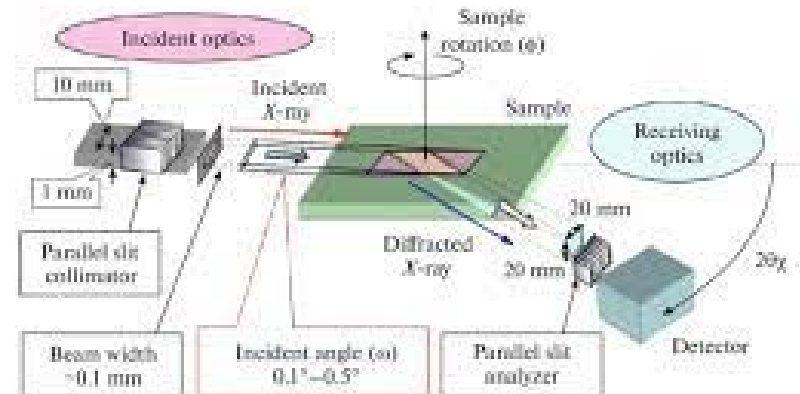
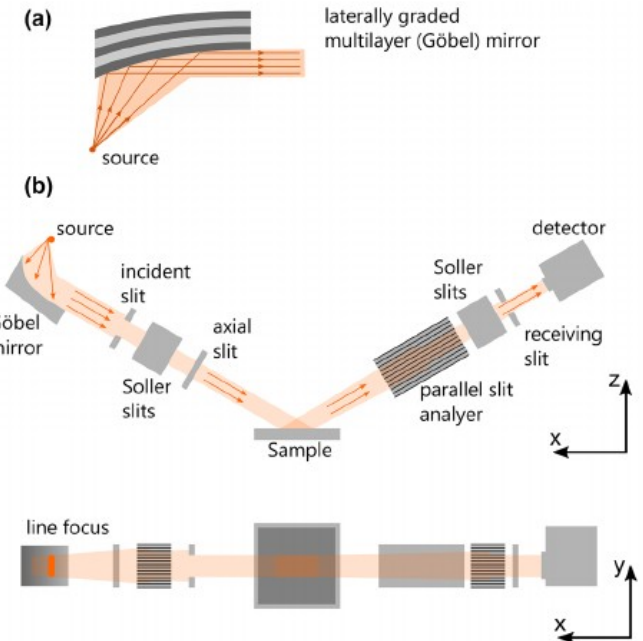
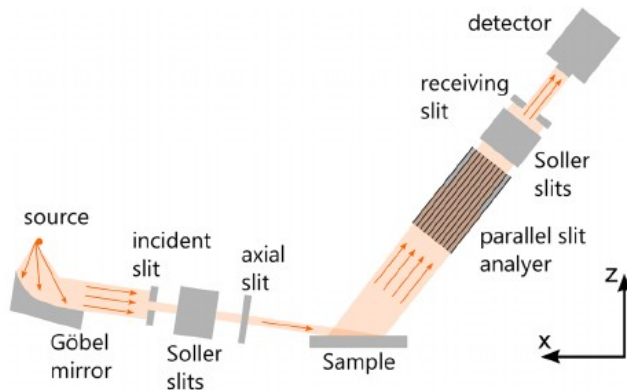
horší rozlišení

nižší intenzita



grazing incidence

in-plane geometry



# Difrakce na polykrystalech

Kvalitativní fázová analýza:  
Porovnání poloh píků v záznamu s databází

Databáze:

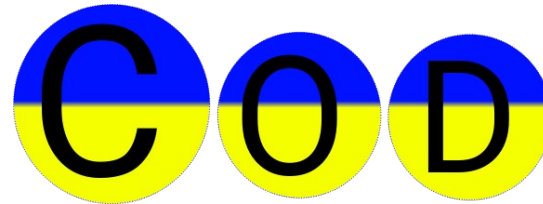
PDF -- <https://www.icdd.com/>



I N T E R N A T I O N A L C E N T R E F O R D I F F R A C T I O N D A T A

COD <http://www.crystallography.net/cod/>

Cif strukturní soubory



Inorganic Crystal Structure Database (ICSD) Karlsruhe

<https://icsd.products.fiz-karlsruhe.de/>



FIZ Karlsruhe – Leibniz Institute for Information Infrastructure

# Cif soubor crystallography information file

data\_2310932

loop\_

\_publ\_author\_name

'Ramsdell, L.S.'

'Kohn, J.A.'

\_publ\_section\_title

;

Developments in silicon carbide research

;

\_journal\_name\_full 'Acta Crystallographica (1,1948-23,1967)'

\_journal\_page\_first 215

\_journal\_page\_last 224

\_journal\_volume 5

\_journal\_year 1952

\_chemical\_formula\_sum 'C Si'

\_chemical\_name\_systematic 'Si C'

\_space\_group\_IT\_number 156

\_symmetry\_space\_group\_name\_Hall 'P 3 -2'''

\_symmetry\_space\_group\_name\_H-M 'P 3 m 1'

\_cell\_angle\_alpha 90

\_cell\_angle\_beta 90

\_cell\_angle\_gamma 120

\_cell\_formula\_units\_Z 8

\_cell\_length\_a 3.079

\_cell\_length\_b 3.079

\_cell\_length\_c 10.073

\_cell\_volume 165.401

\_citation\_journal\_id ASTM ACCRA9

\_cod\_data\_source\_file Ramsdell\_ACCRA9\_1952\_154.cif

\_cod\_data\_source\_block C1Si1

\_cod\_original\_cell\_volume 165.4013

\_cod\_original\_formula\_sum 'C1 Si1'

\_cod\_database\_code 2310932

loop\_

\_symmetry\_equiv\_pos\_as\_xyz

x,y,z

-y,x-y,z

-x+y,-x,z

-y,-x,z

x,x-y,z

-x+y,y,z

loop\_

\_atom\_site\_label

\_atom\_site\_type\_symbol

\_atom\_site\_fract\_x

\_atom\_site\_fract\_y

\_atom\_site\_fract\_z

\_atom\_site\_occupancy

\_atom\_site\_U\_iso\_or\_equiv

C1 C-4 0 0 0.188 1 0.0

C2 C-4 0.3333 0.6667 0.438 1 0.0

C3 C-4 0.6667 0.3333 0.688 1 0.0

C4 C-4 0.3333 0.6667 0.938 1 0.0

Si1 Si+4 0 0 0 1 0.0

Si2 Si+4 0.3333 0.6667 0.25 1 0.0

Si3 Si+4 0.6667 0.3333 0.50 1 0.0

Si4 Si+4 0.3333 0.6667 0.75 1 0.0

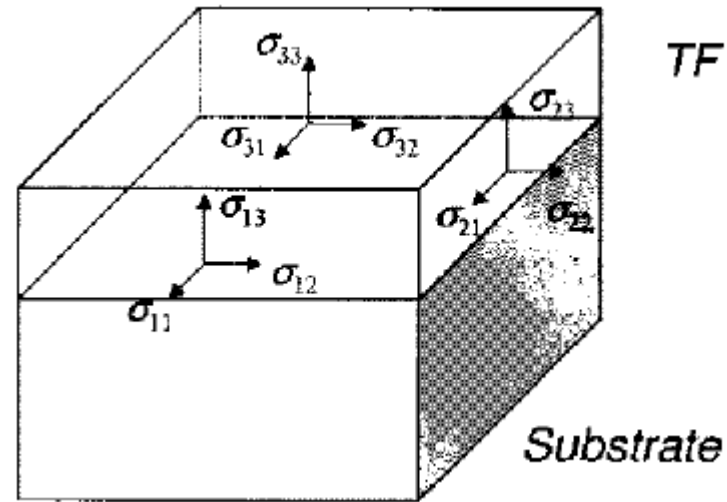
# Zbytková napětí

Hookův zákon v izotropním kontinuu

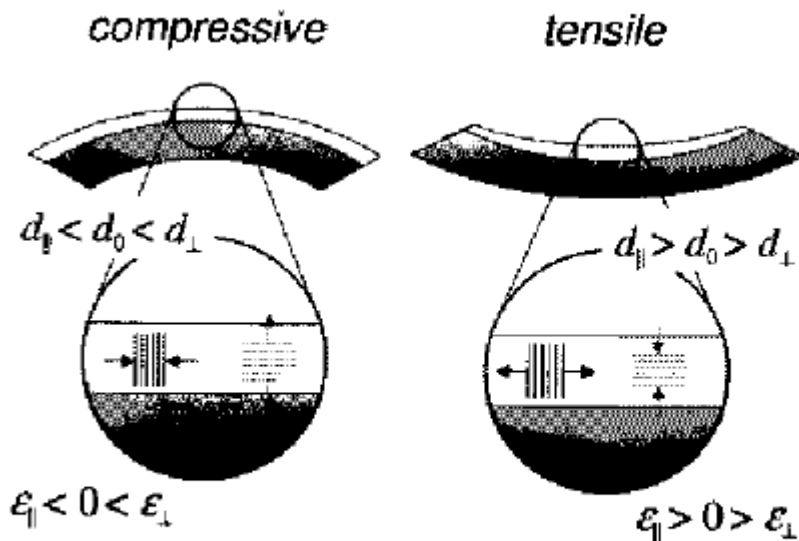
$$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E} \sigma_{ij} - \delta_{ij} \frac{\nu}{E} \sum_k \sigma_{kk}$$

$$\varepsilon_{\phi\psi} = \frac{d_{\phi\psi} - d_0}{d_0}$$

$$\varepsilon_{\psi} = \frac{d_{\psi} - d_0}{d_0}$$



Poloměr křivosti  
Stoneyho vztah



**Figure 6.4** Typically bowed film–substrate composite under compressive and tensile stress in the film plane (exaggerated).

# Zbytková napětí

$$\sigma_{ij}^S = \begin{pmatrix} \sigma_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\parallel} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Metoda "sin psi kvadrát"

$$\varepsilon_{\psi} = \frac{1+\nu}{E} \sigma_{\parallel} \sin^2 \psi - \frac{2\nu}{E} \sigma_{\parallel}$$

$$\sin \psi^* = \sqrt{\frac{2\nu}{1+\nu}}$$

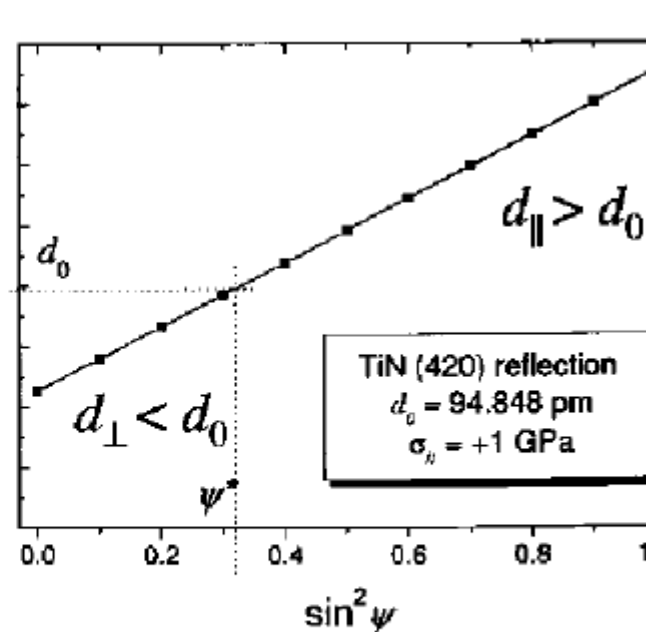
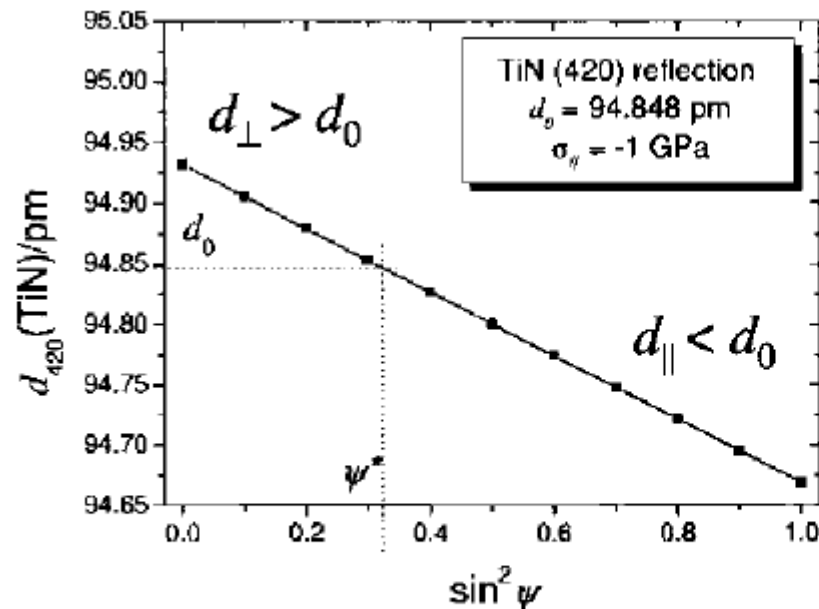


Figure 6.5 Course of simulated  $d(\psi)$  distribution of thin TiN film under compressive (left) and tensile (right) stress. The in-plane stress was assumed to be 1 GPa.



# Zbytková napětí

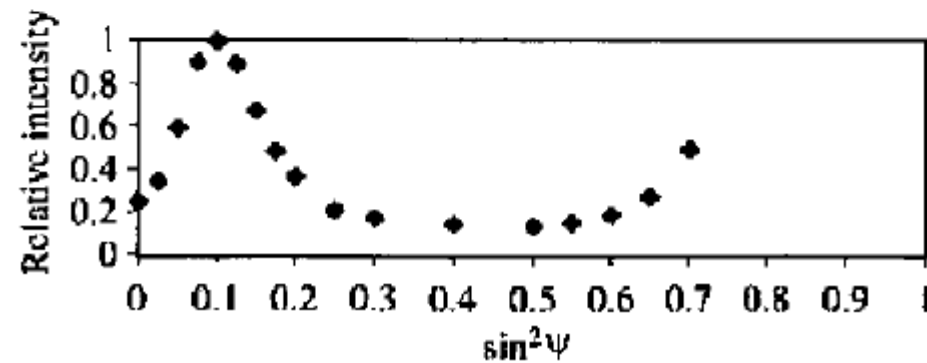
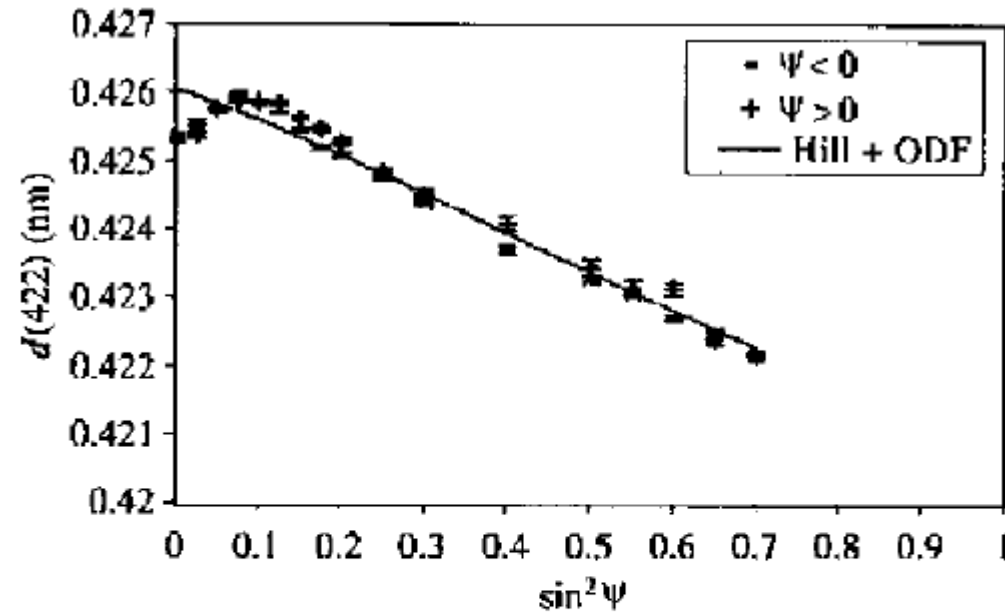
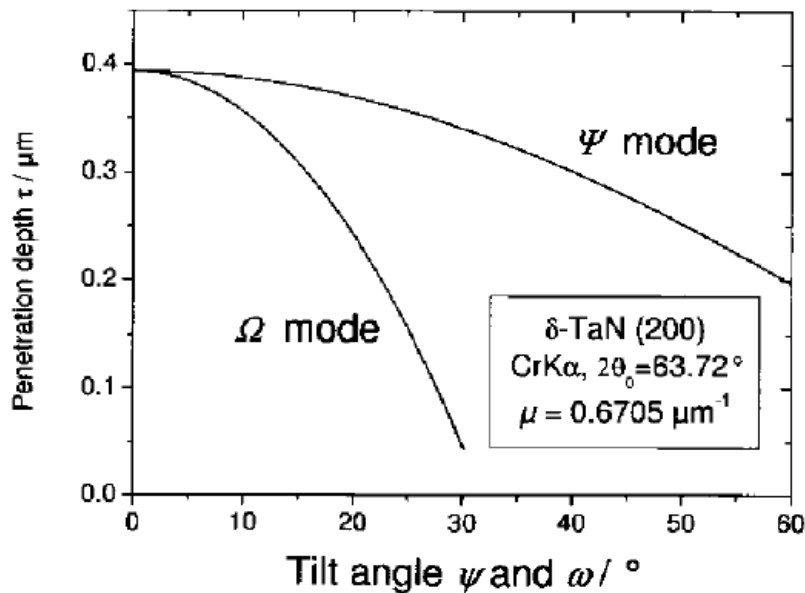
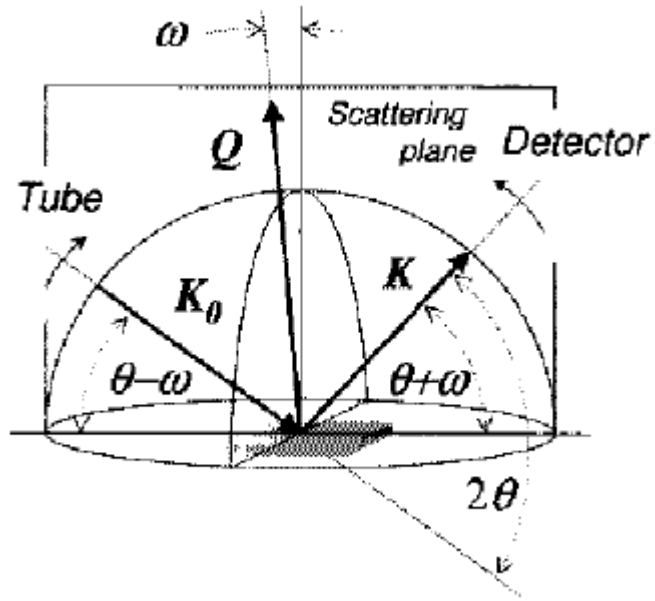


Figure 6.8 Penetration depths for TaN 200 reflection in  $\Omega$  and  $\Psi$  mode recorded with Cr  $K\alpha$  radiation.

# Zbytková napětí

Anizotropní elasticita

$$\epsilon_{ij} = \sum_{k,l=1}^3 s_{ijkl} \sigma_{kl}$$

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l=1}^3 c_{ijkl} \epsilon_{kl}$$

$$s_{ijkl} = (c_{ijkl})^{-1}$$

$$\langle \epsilon_{33}^L \rangle^r = \left\langle \sum_{mn} s_{33mn}^L \sigma_{mn}^L \right\rangle^r$$

$$\frac{1+\nu}{E} \rightarrow \frac{1}{2} s_2(hkl)$$

$$-\frac{\nu}{E} \rightarrow s_1(hkl)$$

$$\epsilon_\psi = \left[ \frac{1}{2} s_2(hkl) \right] \sigma_{\parallel} \sin^2 \psi + 2 [s_1(hkl)] \sigma_{\parallel}$$

Interakce mezi zrnny

Reuss všechna zrna stejné napětí:

$$\langle \epsilon_{33}^L \rangle^r = \sum_{mn} s_{33mn}^L \langle \sigma_{mn}^L \rangle^r$$

$$\langle \epsilon_{33}^L \rangle^r = \sum_{i,j,k,l,m,n,o,p} a_{3i}^{LC} a_{3j}^{LC} a_{mk}^{LC} a_{nl}^{LC} a_{mo}^{LS} a_{np}^{LS} c_{ijkl}^C \langle \sigma_{op}^S \rangle^r$$

$$s_1 = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} a_i^{CL} a_j^{CL} (\delta_{kl} - a_k^{CL} a_l^{CL}) A_{ijkl}$$

$$\frac{1}{2} s_2 = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} a_i^{CL} a_j^{CL} (3a_k^{CL} a_l^{CL} - \delta_{kl}) A_{ijkl}$$

$$A_{ijkl} = \begin{cases} \langle c_{ijkl}^{-1} \rangle & \text{Voigt} \\ s_{ijkl} & \text{Reuss} \end{cases}$$

Voigt: všechna zrna stejná deformace

$$s_1 = \frac{s_0 (s_{1111} + 2s_{1122}) + 10s_{1122}s_{1212}}{3s_{1111} - 3s_{1122} + 4s_{1212}}$$

$$\frac{1}{2} s_2 = \frac{10s_{1212} (s_{1111} - s_{1122})}{3s_{1111} - 3s_{1122} + 4s_{1212}}$$

(Voigt, cubic lattices)

$$s_1 = s_{1122} + \Gamma s_0$$

$$\frac{1}{2} s_2 = s_{1111} - s_{1122} - 3\Gamma s_0$$

(Reuss, cubic lattices)

$$\Gamma = \frac{h^2 k^2 + k^2 l^2 + h^2 l^2}{(h^2 + k^2 + l^2)^2}$$

$$s_0 = s_{1111} - s_{1122} - 2s_{1212}$$

# Zbytková napětí

Klasifikace napětí:

Napětí 1. typu:

$$\sigma^I = \left( \int \sigma dV / \int dV \right)_{\text{many crystallites}}$$

2. typu

$$\sigma^{II} = \left( \int \sigma dV / \int dV \right)_{\text{one crystallite}} - \sigma^I$$

3. typu

$$\sigma^{III}(x, y, z) = \sigma(x, y, z) - \sigma^I - \sigma^{II}$$

# Texture

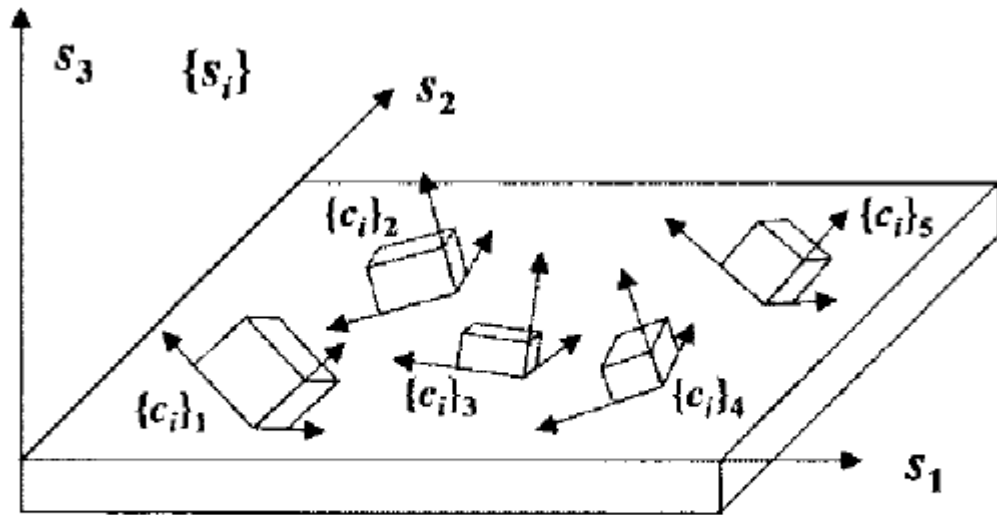


Figure 5.1 Sample reference frame \$\{s\_i\}\$ and crystallographic reference frames \$\{c\_i\}\_j\$ of individual crystallites in a polycrystalline thin film.

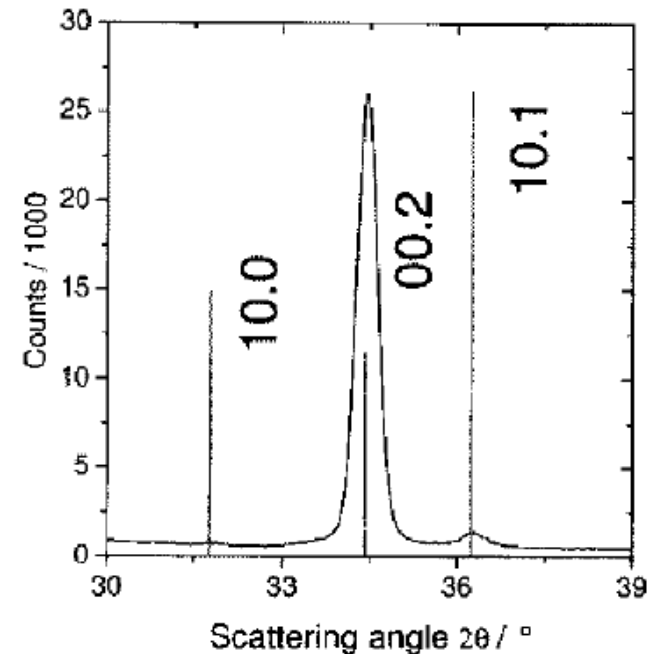


Figure 5.2 Symmetrical \$\theta/2\theta\$ diffraction pattern of a nominally 500 nm thin ZnO film.

Texturní faktory:

$$I_h^m = SCF^m T_h |F_h|^2 m_h L P A_{\theta 2\theta}$$

$$I_h^{ICDD} = SCF^{ICDD} |F_h|^2 m_h L P$$

$$T_h = \frac{I_h^m / A_{\theta 2\theta}(\theta_h)}{I_h^{ICDD}} \frac{\sum_{h'} I_{h'}^{ICDD}}{\sum_{h'} I_{h'}^m / A_{\theta 2\theta}(\theta_{h'})}$$

# Texture

Pólové obrazce:

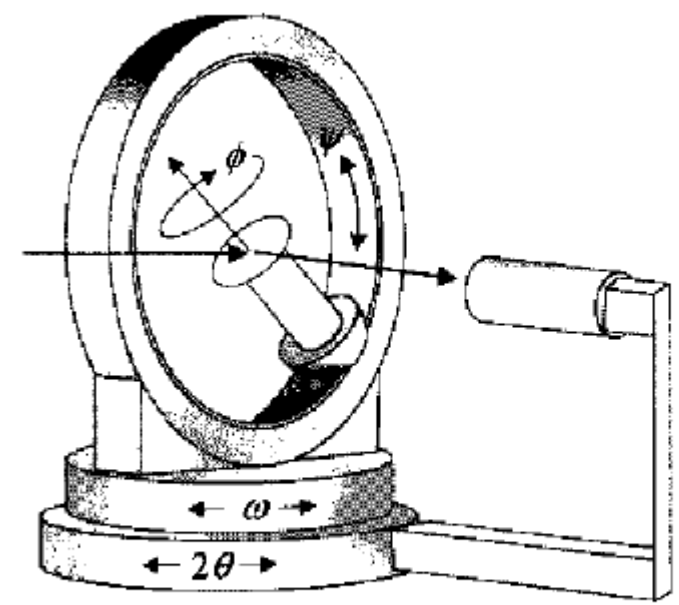
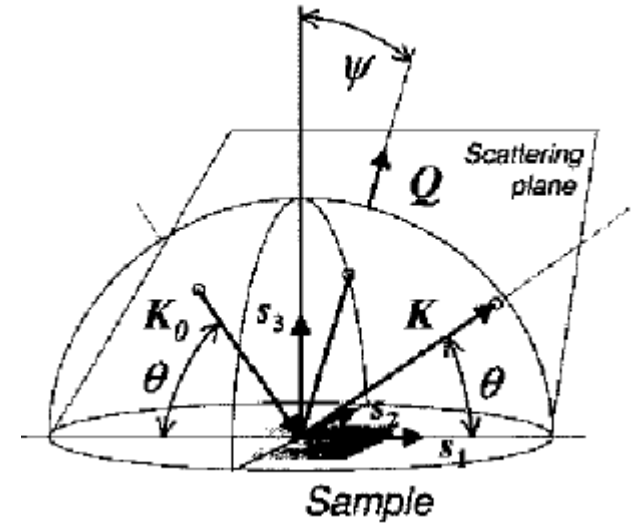
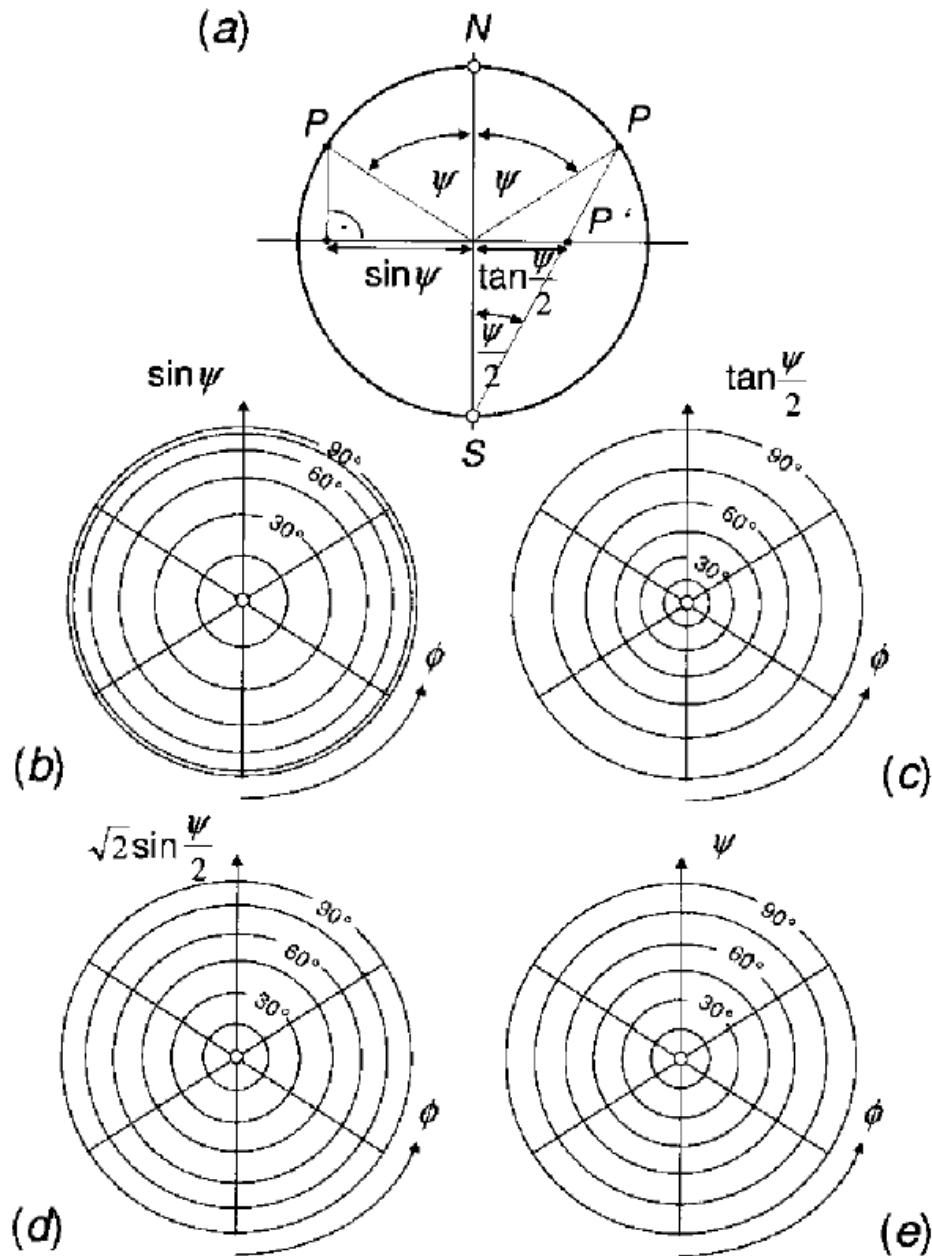


Figure i6.1 Four-circle Euler cradle with variable azimuth  $\phi$  and tilt angle  $\psi$ .

# Texture

Při náklonu se mění absorpční faktor a ozářená plocha:

$$k_{\psi} = \frac{2}{\sin \theta \cos \psi}$$

$$A_{\psi} = \left[ 1 - \exp\left(-\frac{2\mu t}{\sin \theta \cos \psi}\right) \right]$$

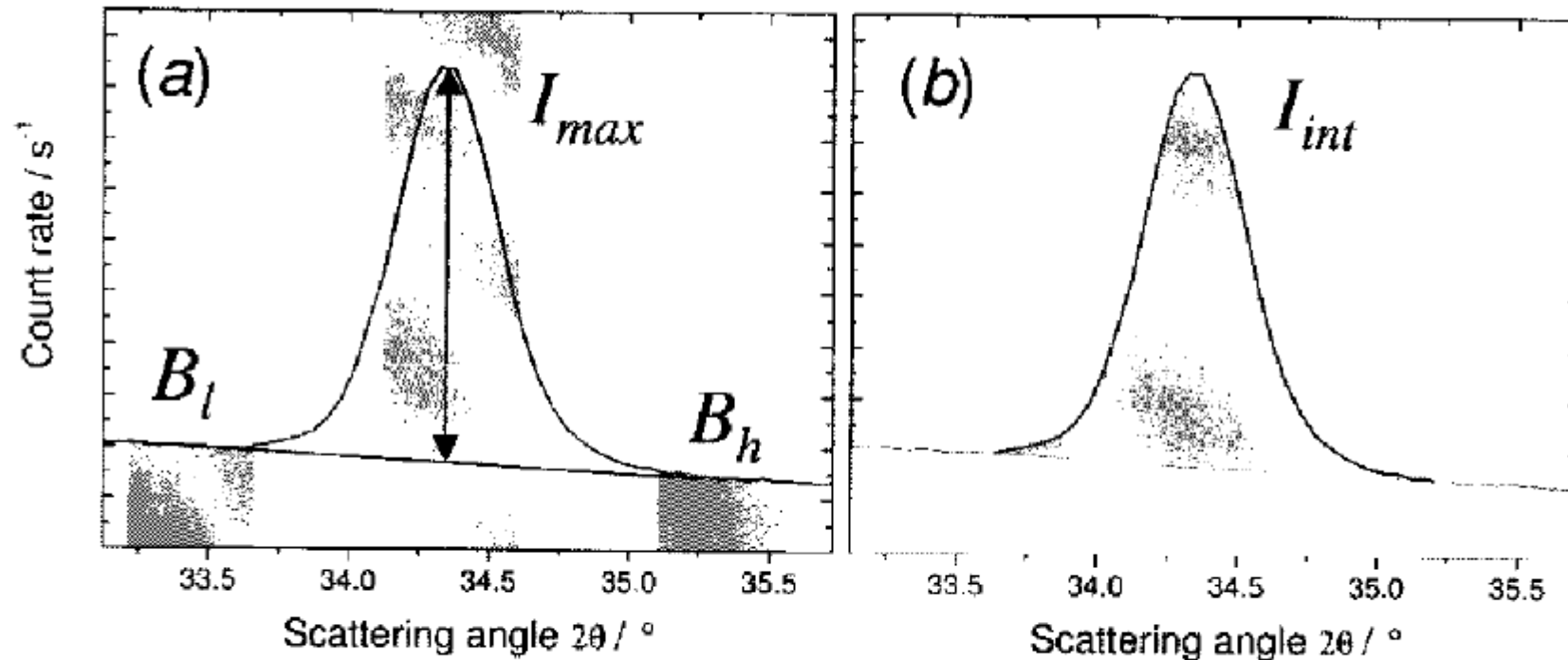
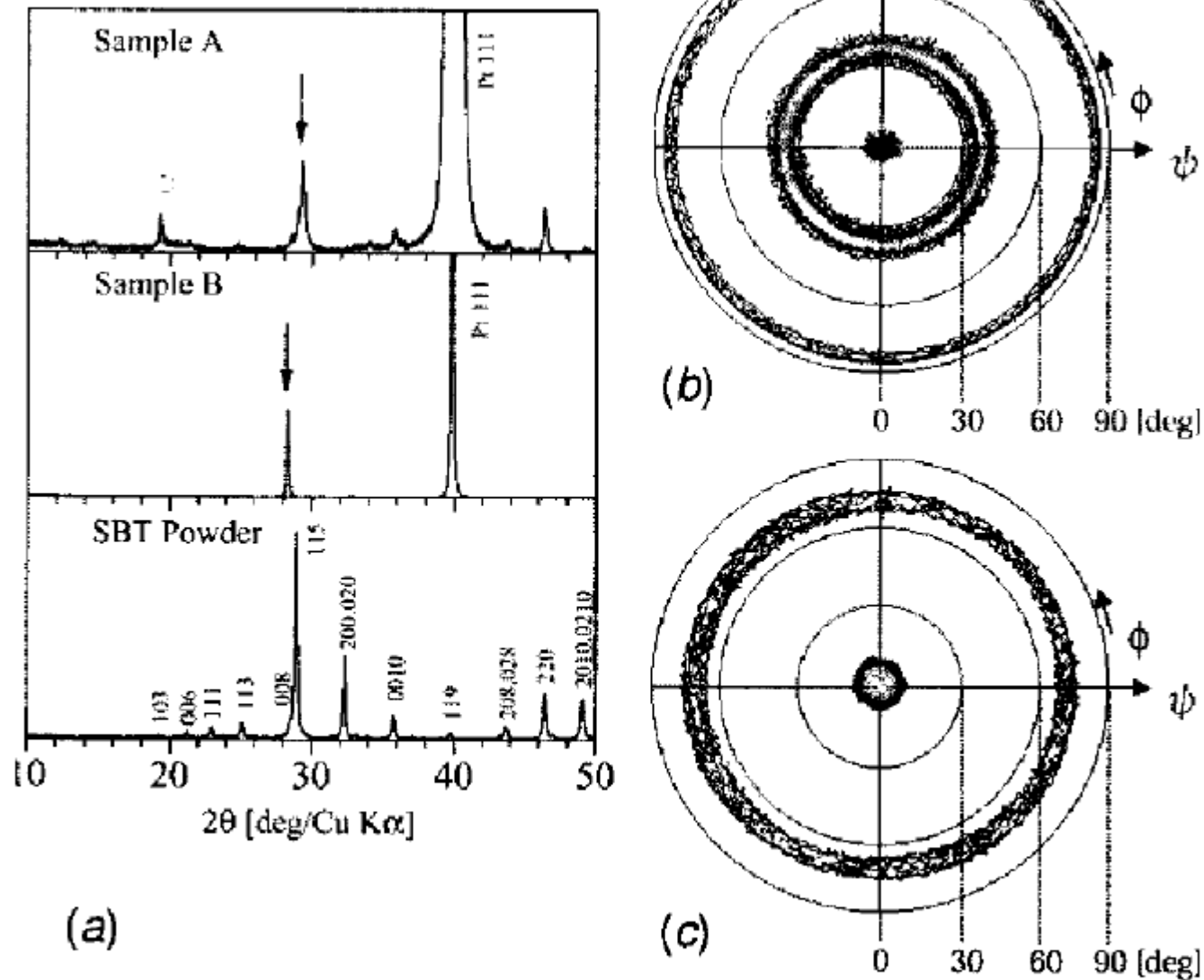


Figure 5.7 Peak intensity measurement in (a) conventional texture analysis and (b) as recommended for thin-film work.

# Texture



**Figure 5.8:** (a)  $\theta/2\theta$  diffraction patterns and (b) and (c) pole figures from the Bragg reflection at  $29^\circ$  of polycrystalline Sr-Bi-Ta-Nb-O thin films (from Ref. [3]).

# Texture

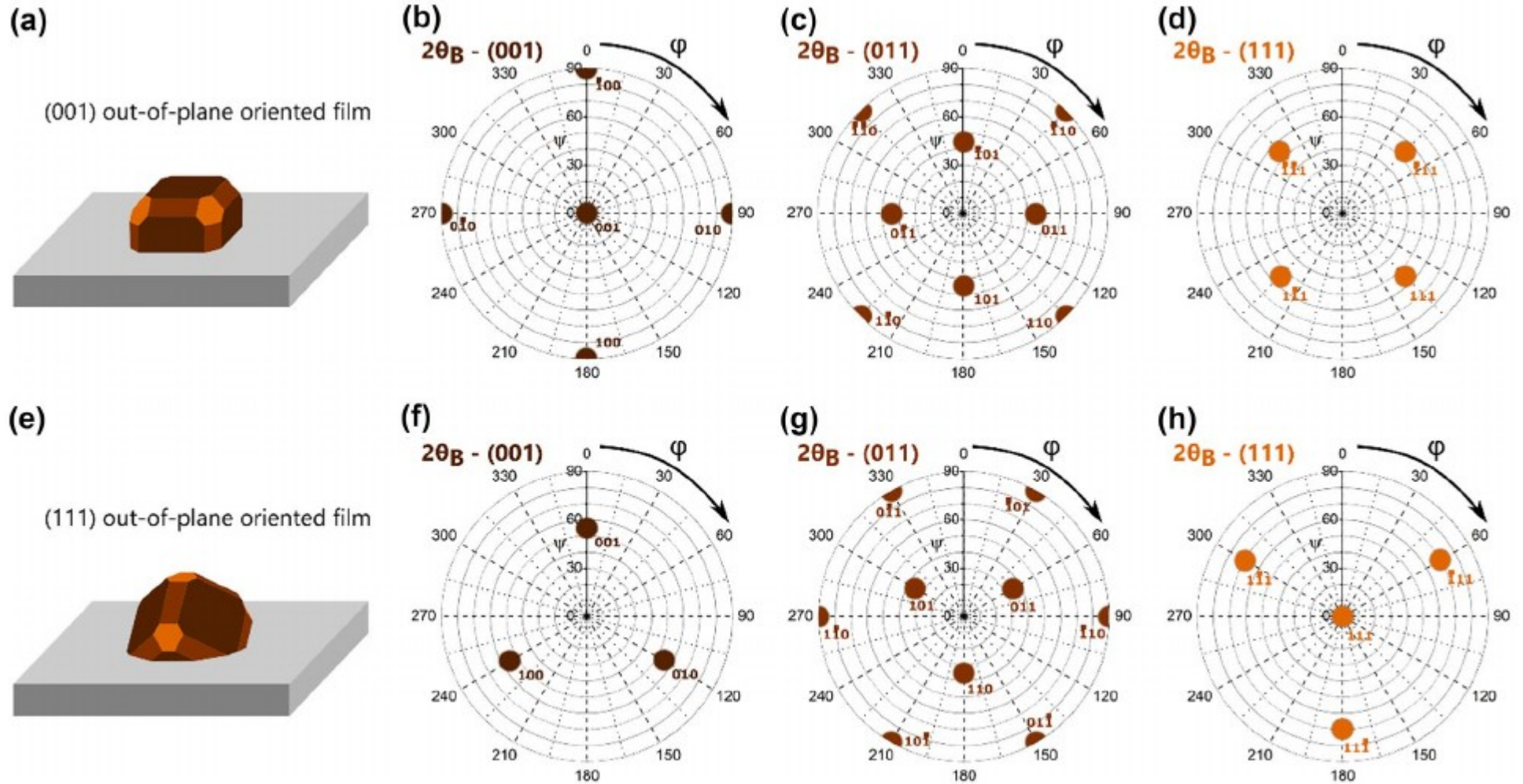


Fig. 12 Example pole figures for a (a) (001) out-of-plane oriented film and (e) (111) out-of-plane oriented film. Pole figures from the (b, f) 001 Bragg reflection, (c, g) 011 Bragg reflection, and (d, h) 111 Bragg reflection



# Texture

ODF – orientational distribution function

3 úhly – Eulerovy úhly

K určení třeba více difrakčních pólových obrazců

ODF se obvykle vyjadřuje pomocí zobecněných sférických harmonických funkcí

$$f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m,n=-l}^l C_l^{mn} T_l^{mn}(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$$

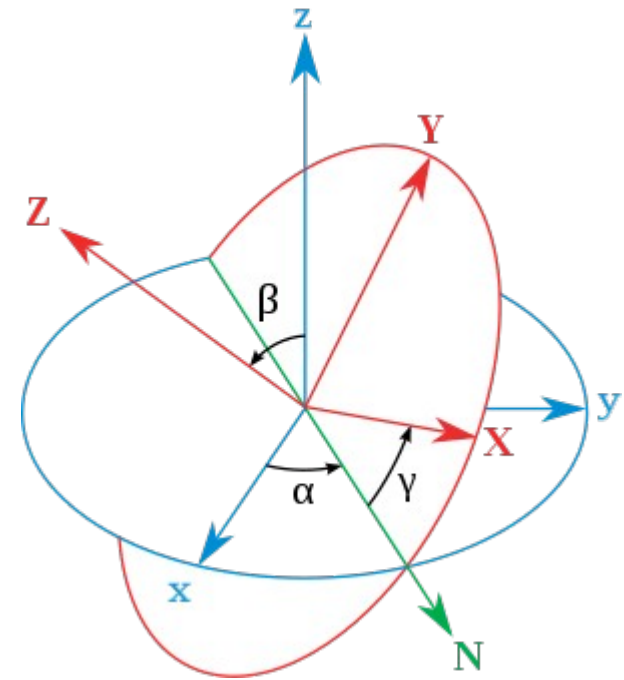
$$T_l^{mn}(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) = e^{im\varphi_2} P_l^{mn}(\cos \Phi) e^{in\varphi_1}$$

$$P_l^{mn}(x) = \sqrt{\frac{(l-m)!(l+n)!}{(l+m)!(l-n)!}} \frac{i^{n-m} (-1)^{l-m}}{2^l (l-m)!} (1-x)^{-\frac{n-m}{2}} (1+x)^{-\frac{n+m}{2}} \frac{d^{l-n}}{dx^{l-n}} [(1-x)^{l-m} (1+x)^{l+m}]$$

První úhel  $\alpha = \varphi_1$

Druhý  $\beta = \Phi$

Třetí  $\gamma = \varphi_2$



# Texture

ODF

Započtení symetrie krystalové mříže

$$T_i^{\mu\nu} = \sum_{m,n=-l}^l A_i^{m\mu} A_i^{n\nu} T_i^{mn}$$

$$f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) = \sum_{l=0}^{l_{\max}} \sum_{\mu=1}^{M(l)} \sum_{\nu=1}^{N(l)} C_l^{\mu\nu} T_i^{\mu\nu}(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$$

Table 5.2  $A_i^{m\mu}$  for different crystal symmetries.

$A_i^{m\mu}$	Orthorhombic ( $D_{2h}$ )		Tetragonal ( $D_{4h}$ )		Hexagonal ( $D_{6h}$ )	
	$m$ condition	$\mu$	$m$ condition	$\mu$	$m$ condition	$\mu$
1	$m = 0$	1	$m = 0$	1	$m = 0$	1
$1/\sqrt{2}$	$ m  \bmod 2 = 0$	$1 + m/2$	$ m  \bmod 4 = 0$	$1 + m/4$	$ m  \bmod 6 = 0$	$1 + m/6$
0	$ m  \bmod 2 \neq 0$	. / .	$ m  \bmod 4 \neq 0$	. / .	$ m  \bmod 6 \neq 0$	. / .

“Ostrost texture”

$$J = \sum_{l,\mu,\nu} \frac{1}{2l+1} (C_l^{\mu\nu})^2$$

Určení koeficientů

Každý pólový obrazec rozvineme do SH

$$I_{h_i}(\phi, \psi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\nu=1}^{N(l)} F_l^{\nu}(\mathbf{h}_i) k_l^{\nu}(\phi, \psi)$$

Kombinace různých difrakcí:

$$F_l^{\nu}(\mathbf{h}_i) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{\mu=1}^{M(l)} C_l^{\mu\nu} k_l^{\mu}(\mathbf{h}_i)$$

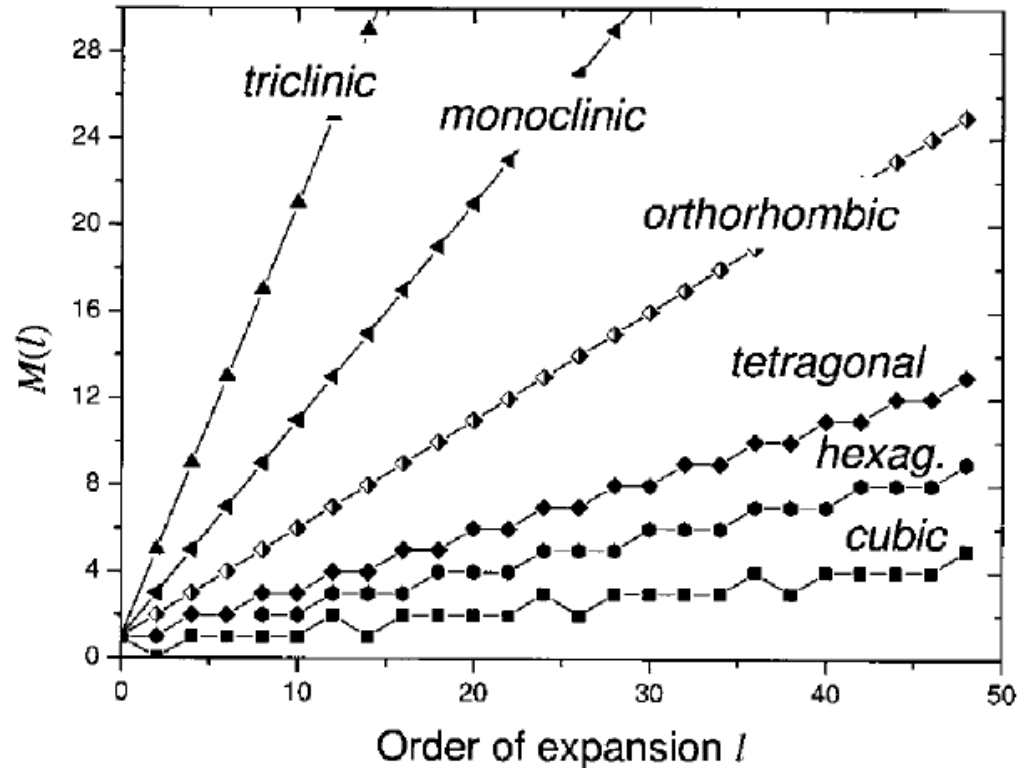
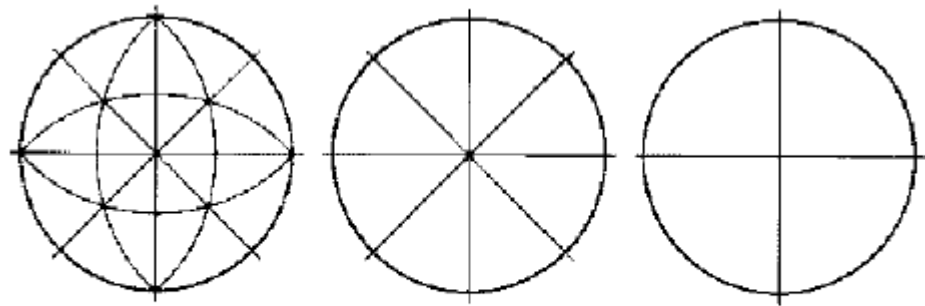


Figure 5.26  $M(l)$  for different crystal symmetries (after Ref. [2]).

# Texture

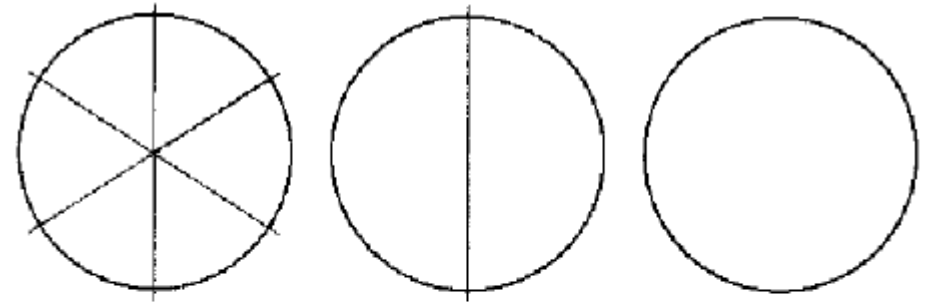
Inverzní pólové obrazce:  
Rozložení orientací do určitého směru  
Obvykle normála k povrchu



*cubic*

*tetragonal*

*orthorhombic*

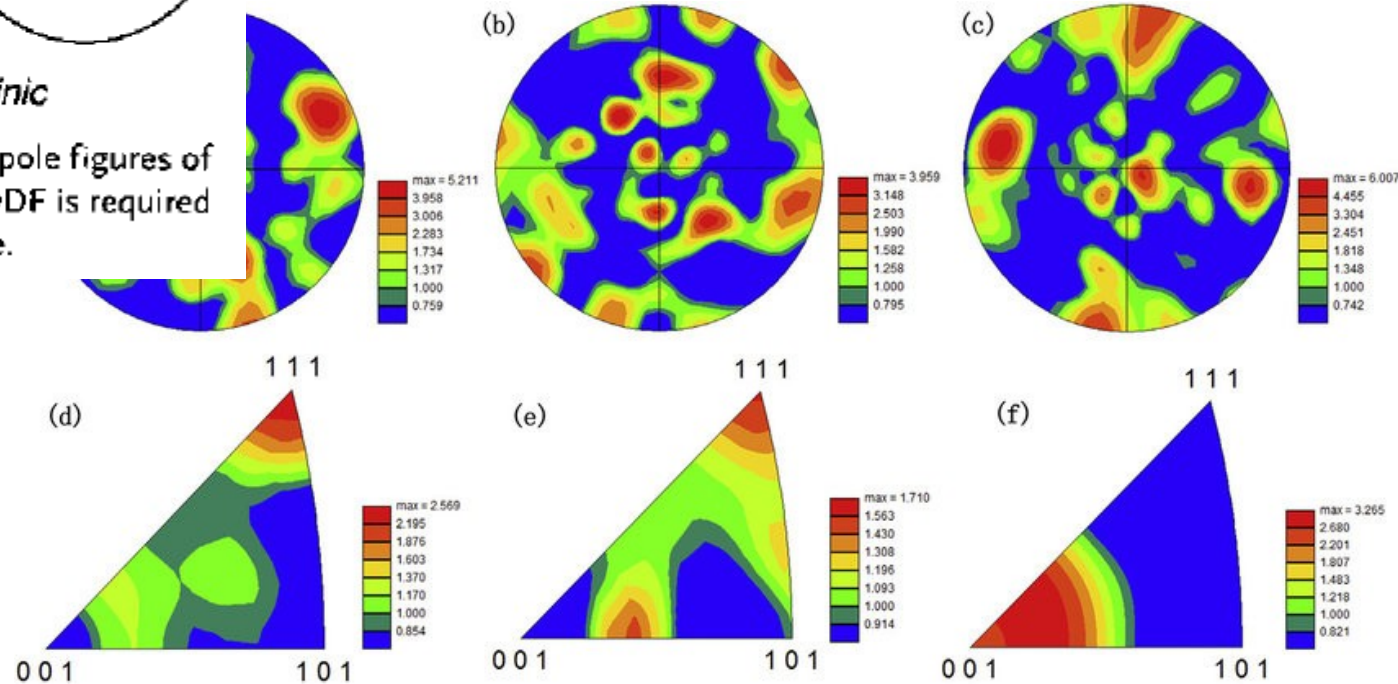


*hexagonal*

*monoclinic*

*triclinic*

**Figure i6.2** Symmetry-related areas in inverse pole figures of six crystal systems. The determination of the ODF is required only in the shaded subsets of orientation space.



# Texture

ODF – orientational distribution function

Klasifikace textur:

Náhodná

Vláknitá

Válcovací

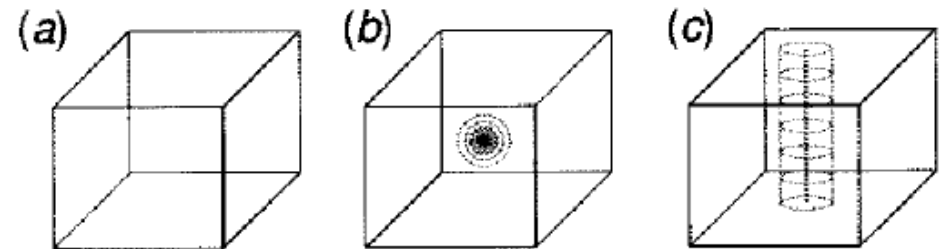


Figure 5.23 Special types of texture displayed in Euler space: (a) random orientation, (b) biaxial texture and (c) fiber texture.

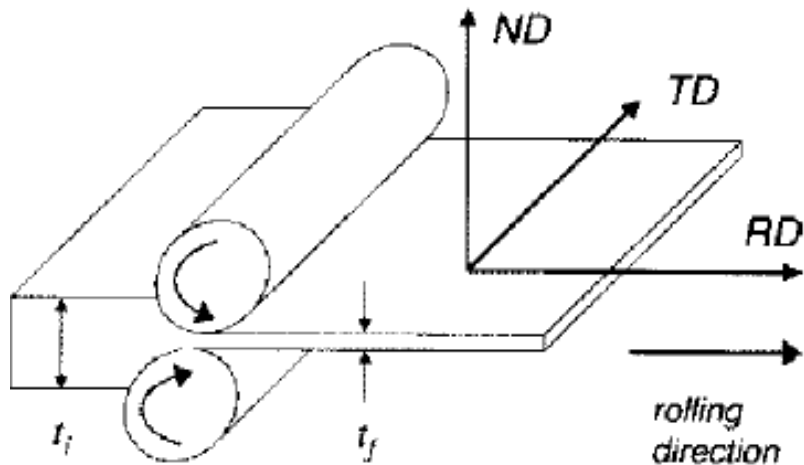
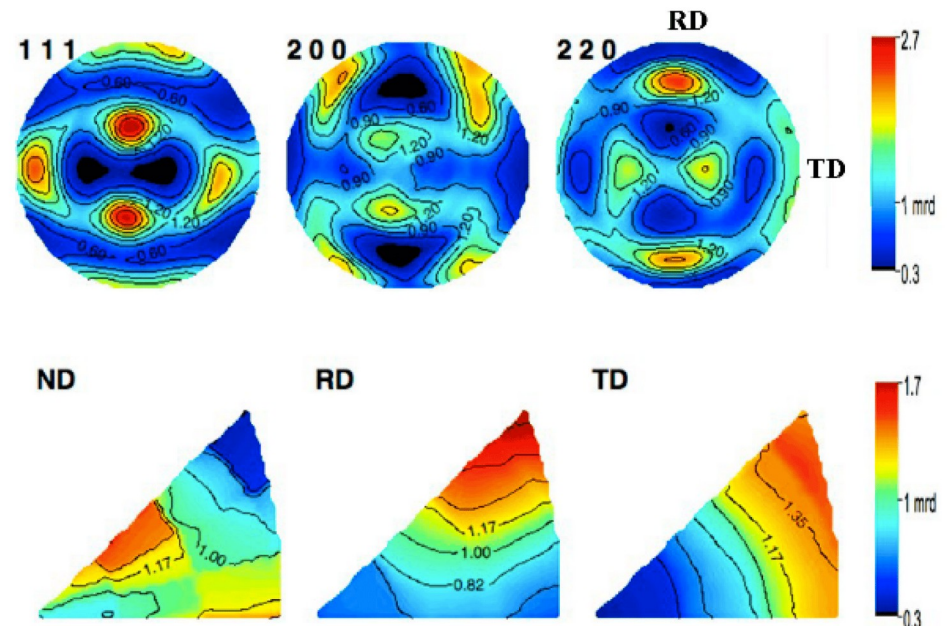


Figure 5.24 Definition of directions RD, TD and ND in metallographic texture analysis.

Hliníková slitina



(a) Cold-rolling

# Amorfní látky, pair distribution function

$$A(\mathbf{Q}) = f_1 + f_2 e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}$$

$$I(\mathbf{Q}) = f_1^2 + f_2^2 + f_1 f_2 e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} + f_1 f_2 e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}$$

$$\langle I(\mathbf{Q}) \rangle_{\text{orient. av.}} = f_1^2 + f_2^2 + 2 f_1 f_2 \langle e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} \rangle_{\text{orient. av.}}$$

$$\langle e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} \rangle_{\text{orient. av.}} = \frac{\int e^{iQr \cos \theta} \sin \theta d\theta d\varphi}{\int \sin \theta d\theta d\varphi}$$

$$\begin{aligned} \int e^{iQr \cos \theta} \sin \theta d\theta d\varphi &= 2\pi \int_0^\pi e^{iQr \cos \theta} \sin \theta d\theta = 2\pi \left( \frac{-1}{iQr} \right) \int_{iQr}^{-iQr} e^x dx \\ &= 4\pi \frac{\sin(Qr)}{Qr} \end{aligned}$$

$$\langle e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} \rangle_{\text{orient. av.}} = \frac{\sin(Qr)}{Qr}$$

# Amorfní látky, pair distribution function

Pattersonova funkce:

$$P(u, v, w) = \sum_{h,k,\ell \in \mathbb{Z}} |F_{h,k,\ell}|^2 e^{-2\pi i(hu+kv+\ell w)}.$$

$$P(\vec{u}) = \rho(\vec{r}) * \rho(-\vec{r}).$$

Středování přes všechny směry:

$$g(\vec{r}, \vec{r}') = p(\vec{r}, \vec{r}') V^2 \frac{N-1}{N}$$

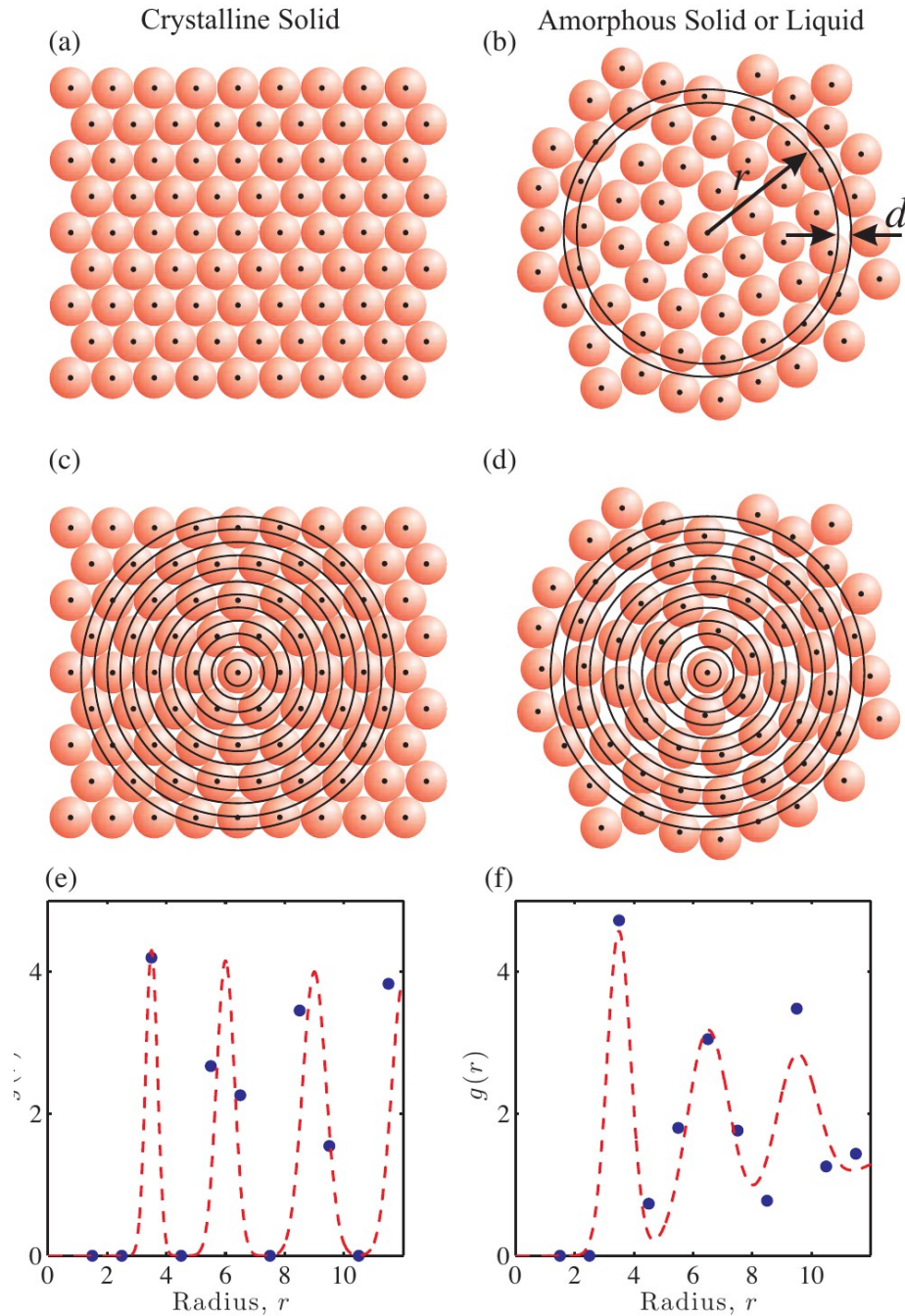
$$\begin{aligned} S(\mathbf{q}) &= 1 + \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i \neq j} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \right\rangle = 1 + \frac{1}{N} \left\langle \int_V d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \sum_{i \neq j} \delta[\mathbf{r} - (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)] \right\rangle \\ &= 1 + \frac{N(N-1)}{N} \int_V d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \rangle \end{aligned}$$

$$S(\mathbf{q}) = 1 + \rho \int_V d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} g(\mathbf{r})$$

$$S(q) = 1 + \rho \int_V d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} [g(r) - 1] = 1 + 4\pi\rho \frac{1}{q} \int dr r \sin(qr) [g(r) - 1]$$

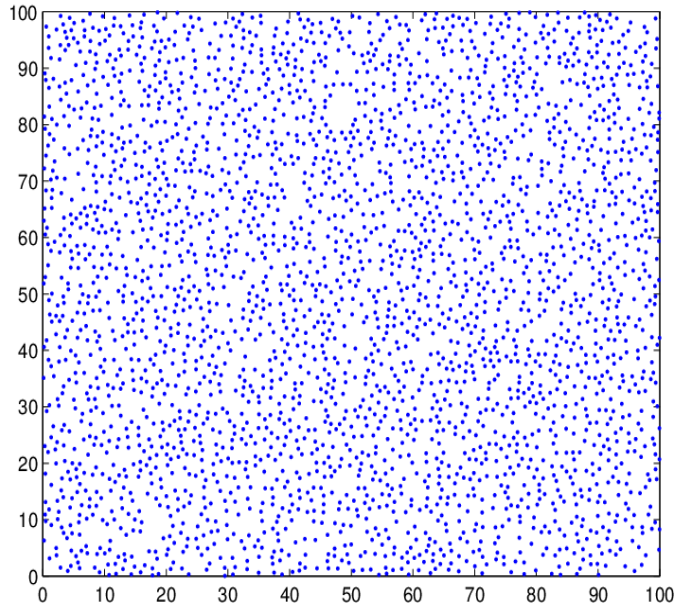


# Amorfní látky, pair distribution function

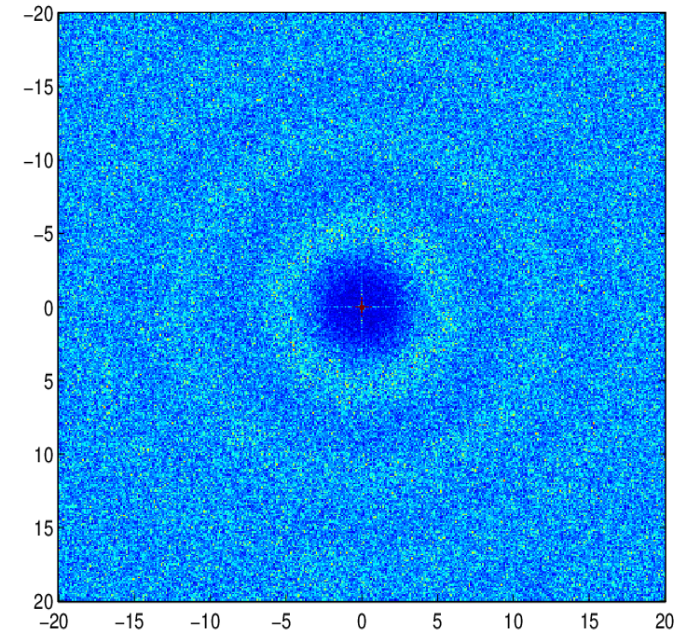


# Amorfní látky, pair distribution function

Model tuhých koulí v 2D

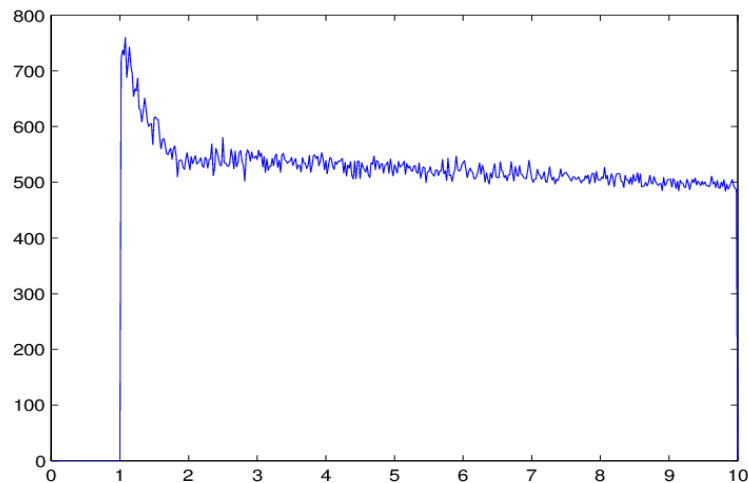


Poloha částic Monte Carlo simulace pro minimální vzdálenost 1

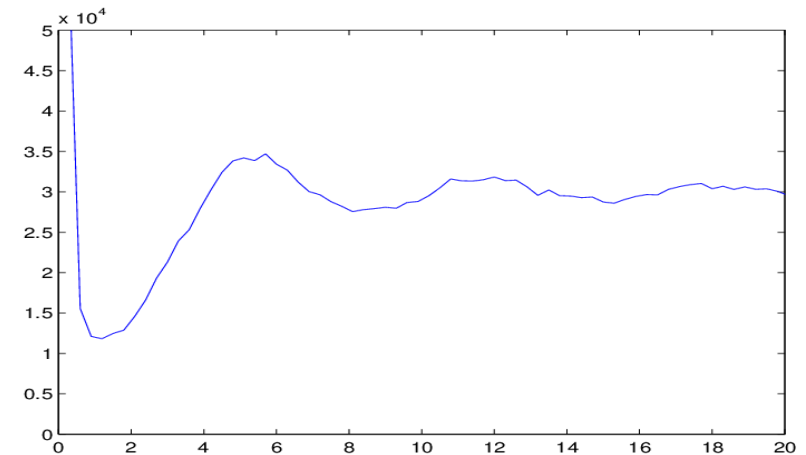


Intenzita v rec. prostoru

Pravděpodobnost nalezení částice na vzdálenosti



směrově středovaná intenzita





# Amorfní látky, pair distribution function

$$I(\mathbf{Q}) = f(\mathbf{Q})^2 \sum_n e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_n} \sum_m e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_m} = f(\mathbf{Q})^2 \sum_n \sum_m e^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m)}$$

$$I(\mathbf{Q}) = Nf(\mathbf{Q})^2 + f(\mathbf{Q})^2 \sum_n \sum_{m \neq n} e^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m)}$$

$$I(\mathbf{Q}) = \underbrace{Nf(\mathbf{Q})^2 + f(\mathbf{Q})^2 \sum_n \int_V [\rho_n(\mathbf{r}_{nm}) - \rho_{at}] e^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m) dV_m}_{I^{SRO}(\mathbf{Q})} + \underbrace{f(\mathbf{Q})^2 \rho_{at} \sum_n \int_V e^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m) dV_m}_{I^{SAXS}(\mathbf{Q})}}$$

$$I^{SRO}(\mathbf{Q}) = Nf(\mathbf{Q})^2 + Nf(\mathbf{Q})^2 \int_V [\rho(\mathbf{r}) - \rho_{at}] e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} dV$$

$$I^{SRO}(\mathbf{Q}) = Nf(\mathbf{Q})^2 + Nf(\mathbf{Q})^2 \int_0^\infty [\rho(r) - \rho_{at}] 4\pi r^2 \frac{\sin(Qr)}{Qr} dr$$

$$S(\mathbf{Q}) = \frac{I^{SRO}(\mathbf{Q})}{Nf(\mathbf{Q})^2} = 1 + \frac{4\pi}{Q} \int_0^\infty r [\rho(r) - \rho_{at}] \sin(Qr) dr$$

# Amorfní látky, pair distribution function

$$Q[S(Q) - 1] = \int_0^{\infty} \mathcal{H}(r) \sin(Qr) dr$$

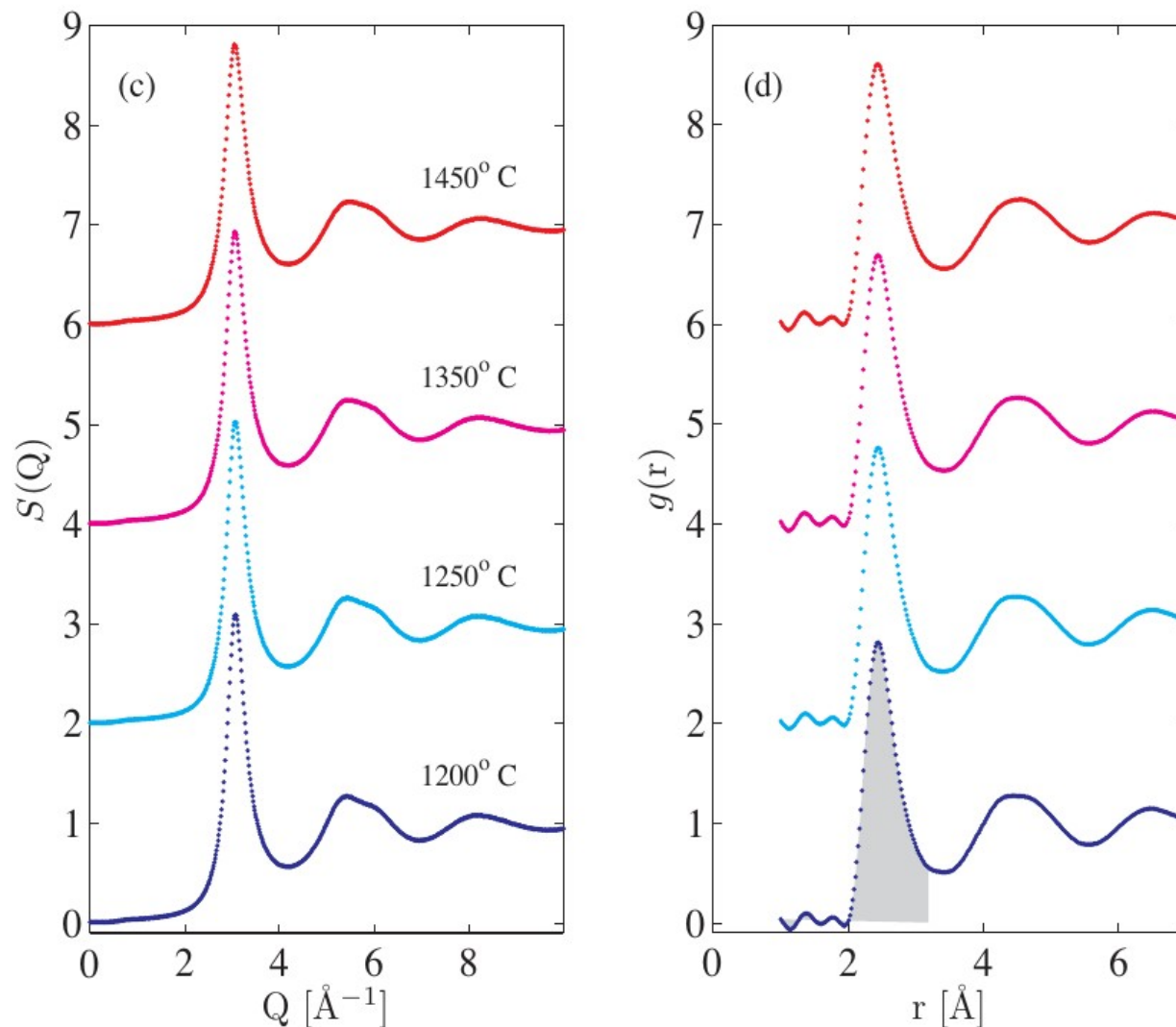
$$\mathcal{H}(r) = 4\pi r [\rho(r) - \rho_{at}] = 4\pi r \rho_{at} [g(r) - 1]$$

$$\mathcal{H}(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} Q[S(Q) - 1] \sin(Qr) dQ$$

$$g(r) = 1 + \frac{1}{2\pi^2 r \rho_{at}} \int_0^{\infty} Q[S(Q) - 1] \sin(Qr) dQ$$

# Amorfní látky, pair distribution function

Kapalné kovy:



**Fig. 4.9** X-ray scattering from liquid metals. (a) Image of a drop of a liquid metal (diameter approximately 2 mm) electrostatically levitated in an ultra-high vacuum chamber. (b) Drops levitated in this way can be heated with a laser, here causing the drop to glow. The metallic sample shown in (a) and (b) is  $\text{Ti}_{39.5}\text{Zr}_{39.5}\text{Ni}_{21}$ . (c) Wavevector dependence of the liquid X-ray structure factor of nickel for selected temperatures below its freezing point of  $1455^\circ\text{C}$ . (d) The radial distribution function of liquid nickel evaluated using Eq. (4.19). The shaded area under the bottom most curve corresponds to a coordination number of 12 in the nearest neighbour shell. (Images courtesy Jan Rogers, NASA's Marshall Space Flight Center, Huntsville, AL; data from K. F. Kelton, Washington University in St. Louis.)