

Oppgave 1

$$a) I = I_0 \exp\left(-\left(\frac{\mu}{\rho}\right) \cdot \rho \cdot x\right)$$

$$\left(\frac{\mu}{\rho}\right) = \sum_i w_i \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i$$

$$= \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{\text{CuK}\alpha}^{Al} \cdot w_{Al} + \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{\text{CuK}\alpha}^{Mg} \cdot w_{Mg}$$

$$= (48,7 \cdot 0,5 + 40,6 \cdot 0,5) \text{ cm}^2/\text{g} = 44,65 \text{ cm}^2/\text{g}$$

$$\frac{I_0}{I} = \exp\left(\left(\frac{\mu}{\rho}\right) \rho x\right) = \exp(44,65 \cdot 2,12 \cdot 0,01) = \underline{2,58}$$

$$b) \left(\frac{I_0}{I}\right)_{\text{CuK}\alpha}^{Al} = \exp(48,7 \cdot 2,70 \cdot 0,01) = 3,72$$

$$\left(\frac{I_0}{I}\right)_{\text{CuK}\alpha}^{Mg} = \exp(40,6 \cdot 1,74 \cdot 0,01) = 2,03$$

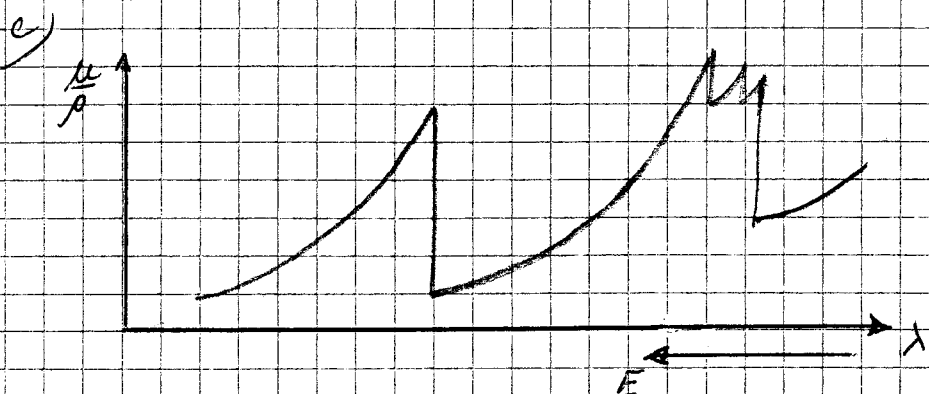
$$\left(\frac{I_0}{I}\right)_{\text{CuK}\alpha}^{Al} = \exp(149,0 \cdot 2,70 \cdot 0,01) = 55,87$$

$$\left(\frac{I_0}{I}\right)_{\text{CuK}\alpha}^{Mg} = \exp(120,1 \cdot 1,74 \cdot 0,01) = 8,08$$

Kontrast for CuK α : | Kontrast for CrK α :

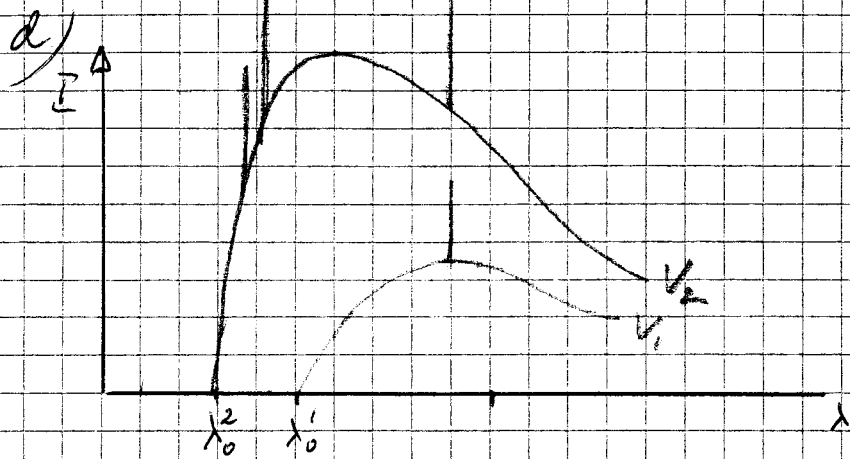
$$\left(\frac{I_{Mg}}{I_{Al}}\right)_{\text{CuK}\alpha} = \frac{3,72}{2,03} = \underline{1,83} \quad \left(\frac{I_{Mg}}{I_{Al}}\right)_{\text{CrK}\alpha} = \frac{55,87}{8,08} = \underline{6,91}$$

\Rightarrow Bruk av CrK α gir best kontrast.



I områder mellom absorpsjonskanter er masseabsorpsjonskoeffisienten tilnærmet proporsjonal med λ^{-n} der n er en faktor mellom 2,5 og 3, litt avhengig av atomnummeret for absorbatoren.

Når energien av innkommende stråling er akkurat stor nok til å frigjøre et elektron fra et indre nivå, inntreer en slags kvantemekanisk resonanseeffekt. Sannsynligheten for at et røntgenkvant skal innfanges og eksitere nivået, stiger da brått. Ved ytterligere økning av energien (minning av bølglengden) minsker eksitasjonssannsynligheten, og absorpsjonskoeffisienten minsker som antydde. Den brå endringen av absorpsjonskoeffisienten kalles en absorpsjonskant.



3

Emisjonspektret $I(\lambda)$ har fasing omtrent som antydnet for de to v \ddot{u} rspeiningene V_1 og V_2 der $V_2 > V_1$. Kortb \ddot{u} lgegrensene λ_0^1 og λ_0^2 er gitt ved ligningen $h \frac{c}{\lambda_0} = e \cdot V$, og den kontinuerlige str \ddot{a} lingen har sitt maksimum omtrent ved $\lambda_{\max} = 2 \lambda_0$ (intensiteten er da m \ddot{a} lt som antall r \ddot{o} ntgenkvanta pr tidsenhet og pr fl \ddot{a} teenhet). For at karakteristiske r \ddot{o} ntgenlinjer skal opp \ddot{t} re, m \ddot{a} $\lambda_0 < \lambda_{\text{kant}}$ der λ_{kant} er b \ddot{o} lgelengden for absorpsjonskanten som representerer det energiniv \ddot{e} et som m \ddot{a} i ioniseres (f \ddot{a} k \ddot{a} stet ut et elektron) for α og m \ddot{u} nlighet for den energiovergangen som resulterer i vedkommende karakteristiske b \ddot{o} lgelengde.

Oppgave 2

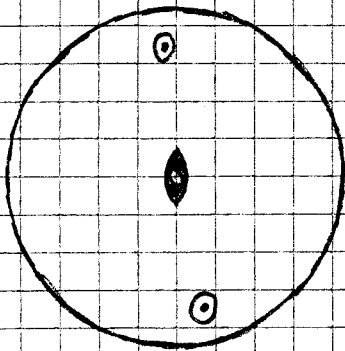
a) }
b) } Se kompendiumtillegg
c) }

Oppgave 3a: Se kompendium

Oppgave 3 forts

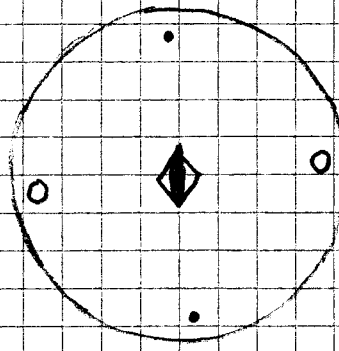
5

b)



$\frac{2}{m}$

Symmetrisentrum

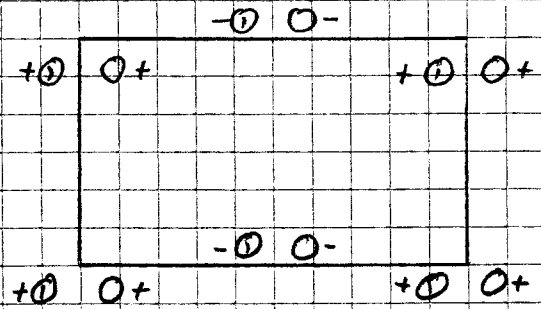
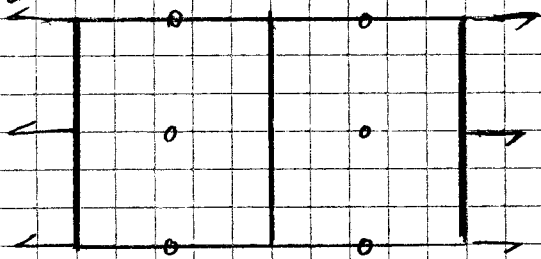


$\bar{4}$

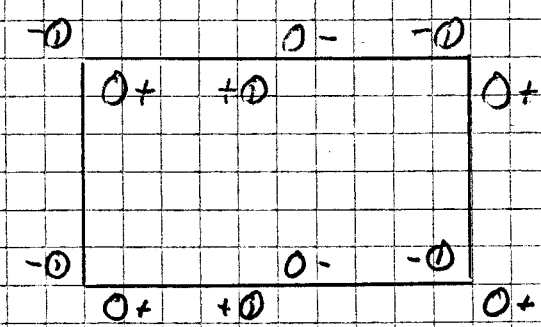
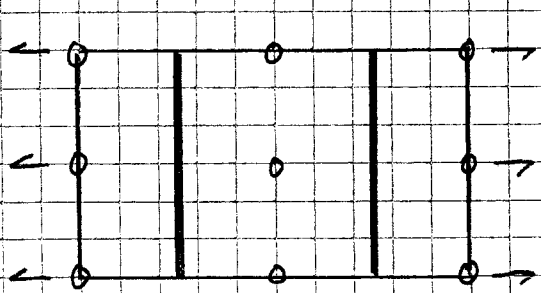
Inne symmetrisentrum

c) Enhetscellen er primitiv. Langs b-aksen har den en totallig skiveakse vinkelrett på et speilplan. Symmetrielementer langs bare en akse \rightarrow Monoklin

d)



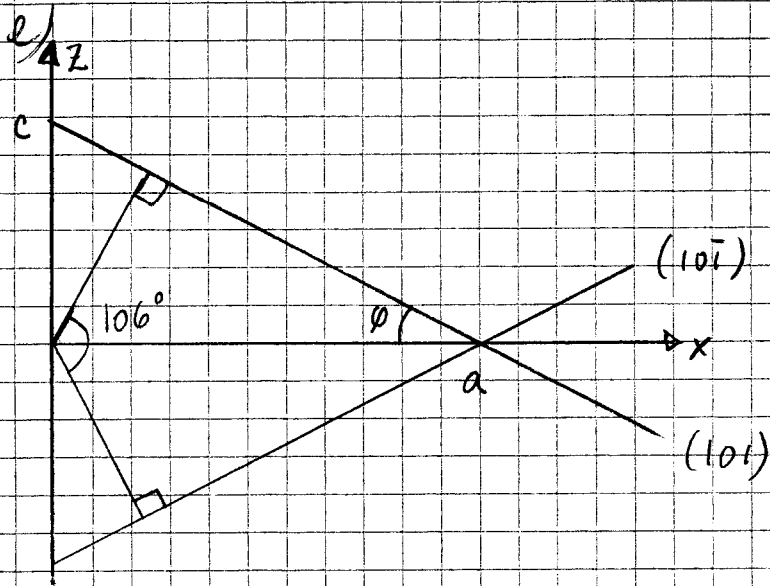
d) overensstemmelse med konvensjonen legger vi origo i et symmetrisentrum:



Generelle ekvivalente posisjoner: x, y, z ; $x, \frac{1}{2}-y, z$
 $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$; $\bar{x}, \frac{1}{2}+y, \bar{z}$

Oppgave 3 forts

(6)



Tetragonal krystall: $a = b \neq c$

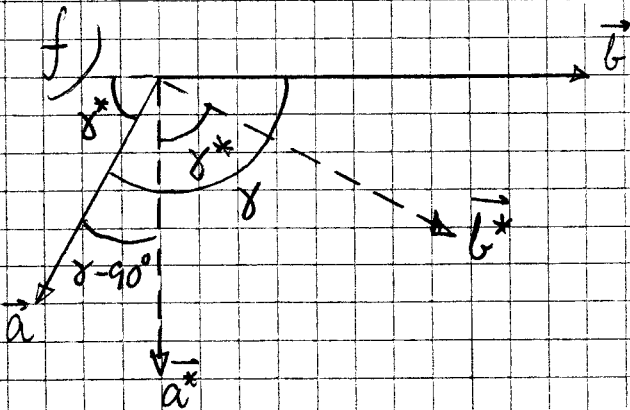
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

$$\frac{c}{a} = \tan \varphi$$

$$\varphi = 180^\circ - (90^\circ + \frac{106^\circ}{2})$$

$$\varphi = 37^\circ$$

$$\frac{c}{a} = \tan 37^\circ = \underline{0,754}$$



$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

$$\vec{c} \perp \vec{a} \quad \vec{c} \perp \vec{b}$$

$$\vec{a}^* \perp \vec{b} \quad \vec{a}^* \perp \vec{c}$$

$$\vec{b}^* \perp \vec{a} \quad \vec{b}^* \perp \vec{c}$$

$$\vec{c}^* \parallel \vec{c}$$

$$\gamma = 180^\circ - \gamma^* = 180^\circ - 57,2^\circ = \underline{122,8^\circ}$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

$$\vec{a} \cdot \vec{a}^* = |\vec{a}| \cdot |\vec{a}^*| \cdot \cos(\gamma - 90^\circ) = |\vec{a}| \cdot |\vec{a}^*| \cdot \sin \gamma = 1$$

$$|\vec{a}^*| = \frac{1}{a_{100}} = \frac{1}{a \sin \gamma}$$

$$\text{Tilsvarende: } |\vec{b}^*| = \frac{1}{b_{010}} = \frac{1}{b \sin \gamma}$$

$$|\vec{c}^*| = \frac{1}{c}$$

Oppgave 4

(8)

a) A-atomene danner et F-gitter. B-atomene er forskjøvet $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ fra A-atomene, slik at B-atomene også danner et F-gitter. Dermed danner krystallen et F-gitter med 4 A-atomer og 4 B-atomer pr enhetscelle, dvs med ett A-atom og ett B-atom pr identisk punkt i cellen.

b)

$$A = A_e \sum_n f_n \exp(2\pi i \vec{r}_n \cdot \vec{S}) \sum_m \exp(2\pi i \vec{r}_m \cdot \vec{S})$$

der første sum går over atomene i enhetscellen og utgjør strukturfaktoren F_{hkl} , mens andre sum går over cellene i krystallen og utgjør Laues interferensfunksjon.

$$\begin{aligned} F_{hkl} &= \sum_n f_n \exp(2\pi i \vec{r}_n \cdot \vec{S}) \\ &= \sum_{j=1}^N f_j \exp(2\pi i (x_j \vec{a} + y_j \vec{b} + z_j \vec{c}) (h \vec{a}^* + k \vec{b}^* + l \vec{c}^*)) \\ &= \sum_{j=1}^N f_j \exp(2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)) \end{aligned}$$

h, k, l er indeksene for den resiproke spredningsvektoren (og dermed for de reflekterende nettplan).

x_j, y_j, z_j er fraksjonskoordinater for atom j i enhetscellen.

Oppgave 4 forts

9

c) Vi innfører $f = f_A \exp(i) + f_B \exp(2\pi i (\frac{h}{4} + \frac{k}{4} + \frac{l}{4}))$
 $= f_A + (i)^{h+k+l} \cdot f_B$

Vi summerer over de identiske posisjonene i F-gitteret:

$$F_{hkl} = f (\exp(i) + \exp(2\pi i (\frac{h}{2} + \frac{k}{2})) + \exp(2\pi i (\frac{h}{2} + \frac{l}{2})) + \exp(2\pi i (\frac{k}{2} + \frac{l}{2})))$$
$$= f (1 + (-1)^{h+k} + (-1)^{h+l} + (-1)^{k+l})$$

$F_{hkl} = \underline{4(f_A + f_B \cdot (i)^{h+k+l})}$ ublandede indekser

$F_{hkl} = \underline{0}$ blandede indekser

d) $F_{hkl} = 4(f_A + f_B)$ $I \propto f_A^2 + f_B^2 + 2f_A f_B$ $h+k+l = 4n$: Sterke

$F_{hkl} = 4(f_A + i f_B)$ $I \propto f_A^2 + f_B^2$ $h+k+l = 4m \pm 1$: Middele

$F_{hkl} = 4(f_A - f_B)$ $I \propto f_A^2 + f_B^2 - 2f_A f_B$ $h+k+l = 4m + 2$: Svake

$F_{hkl} = 0$ Blandede ind. \Rightarrow Utst

Oppgave 4 forts

(10)

e) Atomformfaktoren f er lik antall elektroner
når spredningsvinkelen $\theta \approx 0$

$$\Rightarrow f_{\text{Ga}^-} = Z_{\text{Ga}} + 1 = 31 + 1 = 32$$

$$f_{\text{As}^+} = Z_{\text{As}} - 1 = 33 - 1 = 32$$

For de systematisk svake refleksene får
vi derfor for $\sin\theta/\lambda \approx 0$:

$$I_{hkl} \propto |F_{hkl}|^2 \propto (f_A - f_B)^2 = (f_{\text{As}^+} - f_{\text{Ga}^-})^2 = 0$$