

①

Oppgave 1

a) Kortbølgegrensen er minste bølgelengde i røntgen-spektriet. Den tilsvarende at all kinetisk energi for et elektron som treffer anoden i et røntgenrør, overføres til ett røntgenfoton

$$eU = h\nu = h \frac{c}{\lambda_0}$$

$$\lambda_0 = \frac{hc}{eU}$$

$$\text{Jmvatt: } \lambda_0 (\text{\AA}) = \frac{12,398}{U (\text{kV})}$$

$$U = 40 \text{ kV} \Rightarrow \lambda_0 = \frac{12,398}{40} \text{ \AA} = \underline{0,310 \text{ \AA}}$$

b) Tilført energi for å eksitere K-linjene må tilsvare energispillet  $W_K - W_U \approx W_K$  siden  $W_U =$  energi av ytre ubesatt nivå, og  $W_U \ll W_K$

$$\Rightarrow h\nu_{K\text{-kant}} = h \frac{c}{\lambda_{K\text{-kant}}} \approx W_K = e \cdot U_{K\text{-krit.}}$$

$$U_{K\text{-krit}} = \frac{hc}{e \cdot \lambda_{K\text{-kant}}}$$

$$U_{K\text{-krit}} [\text{kV}] = \frac{12,398}{\lambda_{K\text{-kant}}} = \frac{12,398}{0,1534}$$

$$U_{K\text{-kritisk}} = \underline{80,82 \text{ kV}}$$

Med denne spenningen vil også L-linjene bli eksitert, idet

$$U_{L\text{-kritisk}} = \frac{12,398}{1,0399} \text{ kV} = \underline{11,92 \text{ kV}}$$

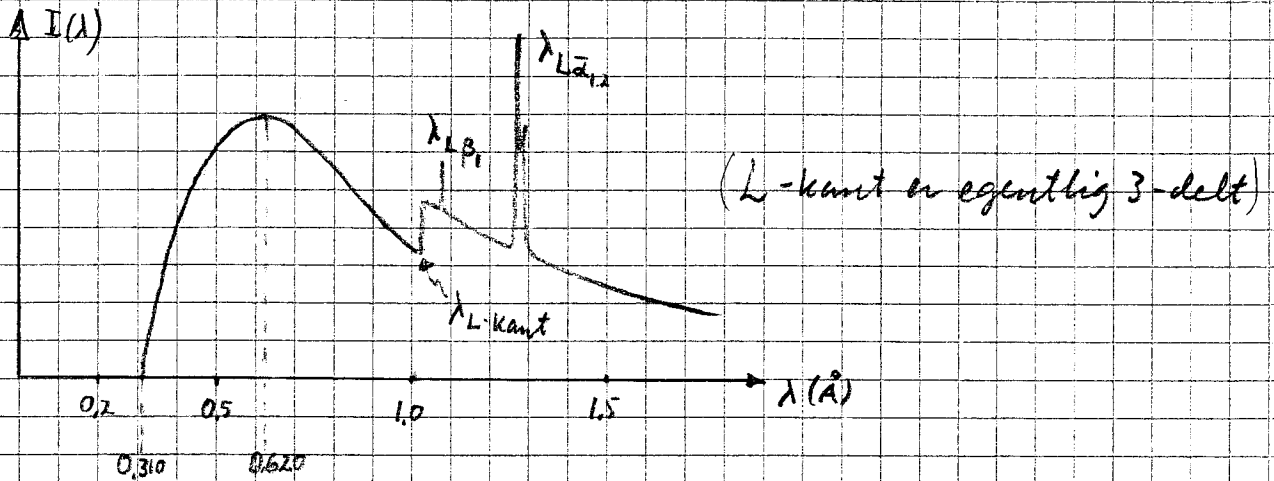
(2)

c)

$$I(\lambda) = K Z \frac{1}{\lambda} \left( \frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda} \right)$$

$$\frac{dI(\lambda)}{d\lambda} = 0$$

$$\frac{dI(\lambda)}{d\lambda} = K Z \left( -\frac{1}{\lambda_m^2 \lambda_0} + \frac{2}{\lambda_m^3} \right) = 0 \Rightarrow \lambda_m = 2\lambda_0 = 0.62 \text{ \AA}$$



$$d) \frac{1}{\lambda} = R(Z-\sigma)^2 \gamma \quad \text{der } \gamma = \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right)$$

$R$  = Rydbergs konstant

$\lambda$  = bølglengde av kar. stråling  
(ev. av absorpsjonskant)

$Z$  = Atomnummer

$n_i$  = Hovedkvantetall for atomets startnivå

$n_f$  = ———— " ———— " ———— " ———— sluttnivå

$\sigma$  = Midlere avskjermingskonstant for de to nivåene  
og de andre elektronene nær kjernen.

Merkelig: Bølglengden for en karakteristisk emisjonslinje i røntgen-spektriet uttrykkes ved differensen mellom hoveddelen av atomets energi i starttilstand og slutt-tilstand. Siden også absorpsjonskantenergien er kvantisert og gitt ved energiaprang mellom diskrete nivåer i atomet, kan en lignende relasjon settes opp for hoveddelen av denne energien.  $\sigma$  og  $\gamma$  får da andre tallverdier.

e)

$$2d \sin \theta = \lambda \Rightarrow \lambda = 2 \cdot 2,0133 \cdot \sin \theta \text{ (\AA)}$$

	Cu	Sn	X
$2\theta (^{\circ})$	40,10	12,11	19,70
$\lambda \text{ (\AA)}$	1,3805	0,4247	0,6888

$$\left(\frac{1}{1,3805}\right)^{1/2} = R^{1/2} \cdot \gamma^{1/2} (29 - \sigma) \quad \text{I}$$

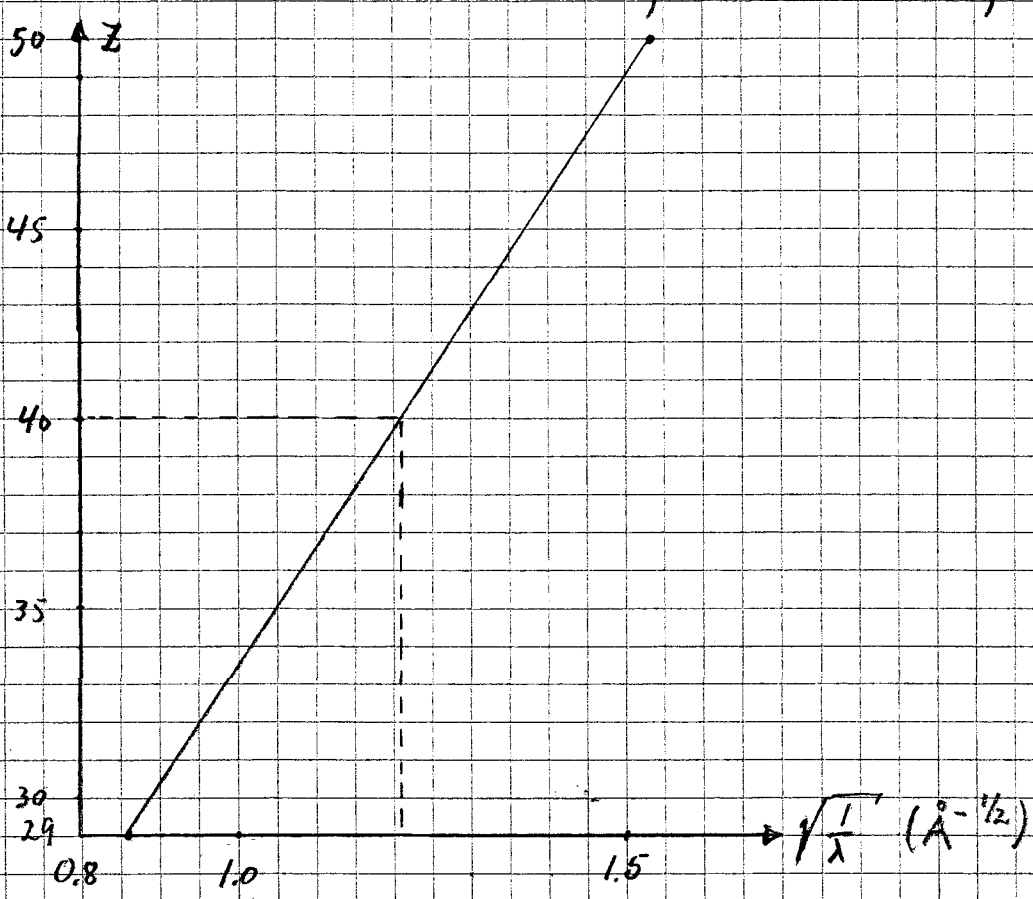
$$\left(\frac{1}{0,4247}\right)^{1/2} = R^{1/2} \cdot \gamma^{1/2} (50 - \sigma) \quad \text{II}$$

$$\text{II/I} \Rightarrow \sigma = 2,845548 \Rightarrow (R \cdot \sigma)^{1/2} = 0,0325414$$

$$\Rightarrow \left(\frac{1}{0,6888}\right)^{1/2} = (R \cdot \sigma)^{1/2} (Z_x - \sigma) \Rightarrow Z_x = 39,87 \approx 40$$

$Z_x = 40$  (element X er Zr)

Grafisk løsning:  $\sqrt{\frac{1}{1,3805}} = 0,8511$ ,  $\sqrt{\frac{1}{0,4247}} = 1,5345$ ,  $\sqrt{\frac{1}{0,6888}} = 1,2049$



(4)

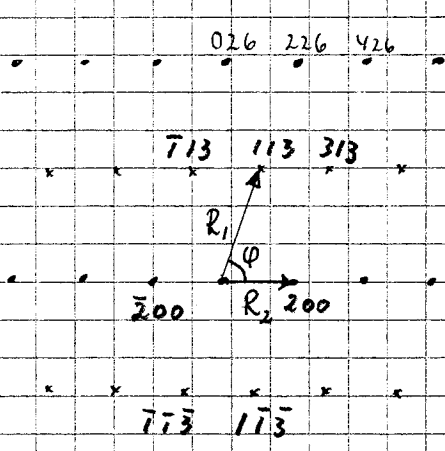
f) Vi kan bestemme  $X$  ved analyse av karakteristiske emisjonslinjer ved fluorescenspektrometer, mikrosonde eller elektronmikroskop.

Vi kan analysere diffraksjonslinjer (d-verdier og relative intensiteter) ved hjelp av diffraktometer og ASTM-indeks

Vi kan bruke optisk emisjonsspektrometri ved hjelp av glimutladning (GDOS), sekundærionemassespektrometri (SIMS) eller forskjellige elektronmikroskopiske metoder, men felles for disse er at de egner seg best for overflatestudier, og vil være forholdsvis intensitetsmessige for å bestemme  $X$ .

Oppgave 2.

$$a) \frac{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2} = \left(\frac{R_1}{R_2}\right)^2 = \left(\frac{34.8}{21.0}\right)^2 = 2.746 \approx \frac{11}{4}$$



Prøver  $h, k, l, = 311$

$$h_2 k_2 l_2 = 200$$

$$\Rightarrow \cos \phi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

$$= \frac{6}{\sqrt{44}} = 0.9045 \Rightarrow \phi = 25.2^\circ$$

Det stemmer ikke

Prøver  $h, k, l, = 113$

$$h_2 k_2 l_2 = 200$$

$$\Rightarrow \cos \phi = \frac{2}{\sqrt{44}} = 0.3015 \Rightarrow \phi = 72.45^\circ$$

Dette synes OK. Resten av indikeringen er den vektoraddisjon.

Soneakse:  $[200] \times [113] = [0\bar{6}2] \Rightarrow$  Soneakse  $[0\bar{3}1]$

b) MgS har NaCl-struktur, som er kubisk flatesentert.

Struktur faktoren er derfor null for blandede indekser.

For ublandede indekser (enten innbyrdes forskyvning =  $\frac{a}{2}$ ):

$$F_{MgS} = 4(f_{Mg} \exp(0) + f_S \exp(2\pi i \frac{h}{2})) = 4(f_{Mg} + f_S (-1)^h)$$

$$= \begin{cases} 4(f_{Mg} + f_S) & \text{for partallsindekser} \\ 4(f_{Mg} - f_S) & \text{for odde indekser} \end{cases}$$

c) Diffraction fra MgS får retstrækning for blandede inddeksler.

For partallindeksler blir refleksene sterke ( $I \propto F^2$ ) mens refleksene blir svake for odde indeksler.

d) Vi ser av indiseringen at sterke refleksler har partallindeksler, mens svake refleksler har odde indeksler. Det er derfor sannsynlig mellom strukturfaktoren for MgS og antagelsen om at diffraksjonsbildet stammer fra MgS.

### Oppgave 3

a) På grunn av atomenes termiske vibrasjoner smøres elektron tettheten i tidsmiddel ut over et større volum i rommet. Derfor svekkes de diffrakterte intensitetene raskere med  $|S| = 2 \sin \theta / \lambda$ .

I tillegg oppstår termisk diffus spredning som øker sakt med  $\sin \theta / \lambda$ , og som bidrar til å svekke kontrasten for Bragg-sprekte intensiteter.

Svekkelsen av Bragg-sprekte intensiteter kan uttrykkes ved

$$I_{hkl} \propto |F_{hkl}|^2 e^{-2M}$$

der  $M = B \sin^2 \theta / \lambda^2$  og  $B = 8\pi^2 \langle u^2 \rangle$  og  $\langle u^2 \rangle$  er middlere kvadratiske utsving for atomene.

$\exp(-2B \sin^2 \theta / \lambda^2)$  er Debye-Waller-faktoren

Dempningen øker eksponentielt med  $\sin^2 \theta / \lambda^2$ , og begrenser mengden observerbare diffraksjonsdata.

Atomene kan også ha statistisk avvik fra perfekt likevektsposisjon, og slike avvik vil ha tilsvarende vitering.

b) Vi antar for enkelthets skyld at stråleaksene går langs z-aksen. Går de langs andre akser, blir utstrålingsbetingelsene lmdret tilsvarende.

Generelt gjelder at refleksjon fra plan normalt stråleaksen blir utstråket for bestemte refleksjons-ordener.

Totalt, stråleakse:  $F_{00l} = 0$  for  $l \neq 2m$

Oppg 3a forts

Tretallig struktur:  $F_{00l} = 0$  for  $l \neq 3n$

Firetallig struktur:

$4_1$  og  $4_3$ :  $F_{00l} = 0$  for  $l \neq 4n$

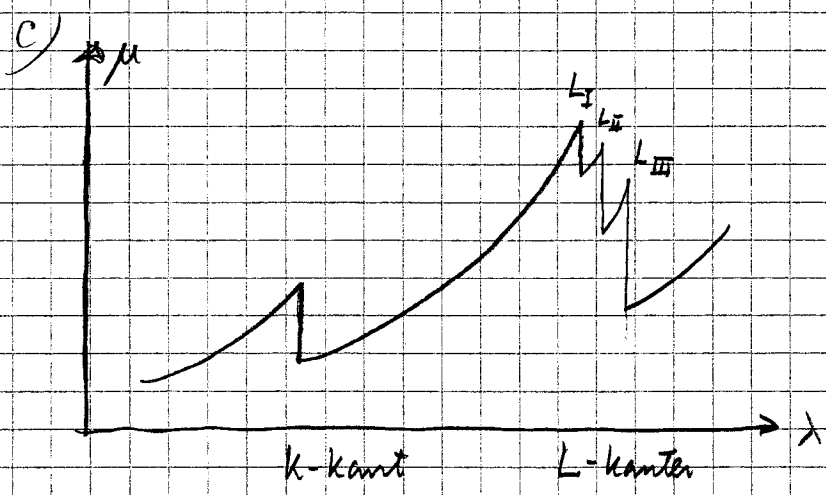
$4_2$ :  $F_{00l} = 0$  for  $l \neq 2n$

Sechstallig struktur:

$6_1$  og  $6_3$ :  $F_{00l} = 0$  for  $l \neq 6n$

$6_2$  og  $6_4$ :  $F_{00l} = 0$  for  $l \neq 3n$

$6_3$ :  $F_{00l} = 0$  for  $l \neq 2n$



Mellom absorpsjonskanten er absorpsjonskoeffisienten omtrent proporsjonal med  $\lambda^m$  der  $m$  er ca 2,75:  
 $\mu = C \lambda^m$  På den andre siden av en absorpsjonskant får  $C$  en annen verdi. Både  $C$  og  $m$  endrer seg fra element til element. Den angitte formelen viser til ren fotoelektrisk absorpsjon (Vi kan jo også spredning). Absorpsjonskantene opptrer ved energier som kreves for å ionisere de tilsvarende elektronshell. Høyden av kantene avhenger av sannsynligheten for at et foton med energi på



### Oppg 3c forts

9

kanten forårsaker en ionisering av det tilsvarende atomnummeret i absorbatoren.

d)  $F_{hkl} = \sum_{j=1}^N f_j \exp(2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j))$  er struktur faktoren

Identiske posisjoner ved C-sentering:

$$x, y, z \quad \text{og} \quad x + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow F_{hkl} &= \sum_{j=1}^{N/2} f_j \left( \exp(2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)) + \exp(2\pi i(h(x + \frac{1}{2}) + k(y + \frac{1}{2}) + lz)) \right) \\ &= (1 + \exp(\pi i(h+k))) \sum_{j=1}^{N/2} f_j \exp(2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)) \\ &= (1 + (-1)^{h+k}) \sum_{j=1}^{N/2} f_j \exp(2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)) \end{aligned}$$

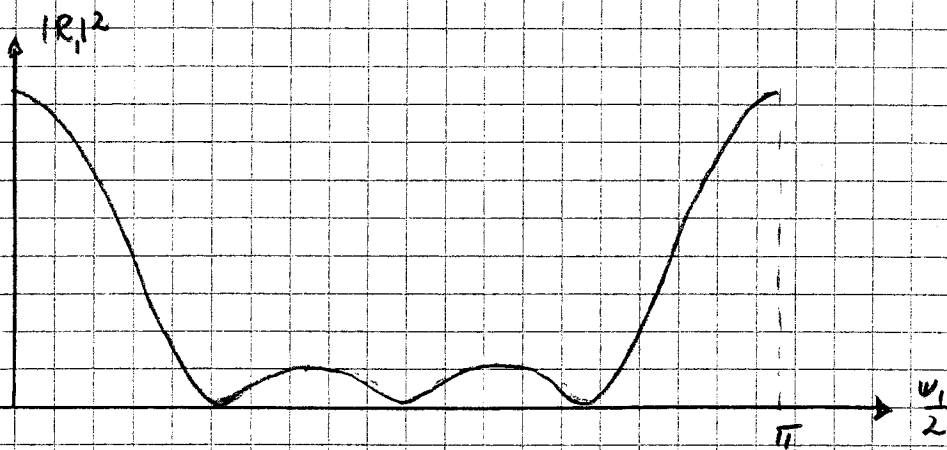
Vi ser at vi får  $F_{hkl} = 0$ , og dermed utstråling, for  $h+k = 2m+1$

e), f) g), h) : Kfr kompendium og tilleggsark.

i)  $N_i$  = antall gitterpunkter i det endimensjonale gitteret  
 $\vec{S}$  = diffraksjonsvektoren.  $\vec{S} = \frac{\vec{s} - \vec{s}_0}{\lambda}$  der  $\vec{s}$  og  $\vec{s}_0$  er enhetsvektorene i henholdsvis diffraktert og innfallende stråle.  $|\vec{S}| = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}$

$\psi_j = 2\pi \vec{a} \cdot \vec{S}$  er faseforskjellen mellom diffrakterte stråler fra nabogitterpunkter.

$|\mathcal{R}|^2$  modulerer diffrakterte intensiteter s.f.a. retning og periodisitet i krysstallen.  $|\mathcal{R}|^2$  kan betraktes som en formfunksjon som definerer intensitetsfordelingen i og nær hvert punkt i det resiproke gitter.



Tappish utseende av  $|R_1|^2$  for  $N_1 = 4$



Tappish utseende av  $|R_1|^2$  for store  $N_1$