

Oppgave 1

a) Innskyrdes forklaring av to like allsidig flatesenterte kubiske gitter vil også gi et allsidig flatesentert kubisk gitter idet det stadig vil være fire identiske punkter i cellen. I dette tilfellet er det imidlertid to atomer per identisk punkt - ett Si-atom og ett C-atom.

b) Vi legger origo i et Si-atom:

$$\begin{aligned}
 F_{hkl} &= f_{Si} \left(e^0 + e^{2\pi i(h \cdot \frac{1}{2} + k \cdot \frac{1}{2})} + e^{2\pi i(h \cdot \frac{1}{2} + l \cdot \frac{1}{2})} \right. \\
 &\quad \left. + e^{2\pi i(k \cdot \frac{1}{2} + l \cdot \frac{1}{2})} \right) + f_C \left(e^{2\pi i(h \cdot \frac{1}{4} + k \cdot \frac{1}{4} + l \cdot \frac{1}{4})} \right. \\
 &\quad \left. + e^{2\pi i((h \cdot \frac{1}{2} + k \cdot \frac{1}{2}) + h \cdot \frac{1}{4} + k \cdot \frac{1}{4} + l \cdot \frac{1}{4})} \right. \\
 &\quad \left. + e^{2\pi i((h \cdot \frac{1}{2} + l \cdot \frac{1}{2}) + h \cdot \frac{1}{4} + k \cdot \frac{1}{4} + l \cdot \frac{1}{4})} \right. \\
 &\quad \left. + e^{2\pi i(k \cdot \frac{1}{2} + l \cdot \frac{1}{2} + h \cdot \frac{1}{4} + k \cdot \frac{1}{4} + l \cdot \frac{1}{4})} \right) \\
 &= f_{Si} \left(1 + (-1)^{h+k} + (-1)^{h+l} + (-1)^{k+l} \right) \\
 &\quad + f_C \left(1 + (-1)^{h+k} + (-1)^{h+l} + (-1)^{k+l} \right) \cdot e^{\frac{\pi}{2} i (h+k+l)} \\
 &= \left(1 + (-1)^{h+k} + (-1)^{h+l} + (-1)^{k+l} \right) \left[f_{Si} + f_C \left\{ \cos \frac{\pi}{2} (h+k+l) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + i \sin \frac{\pi}{2} (h+k+l) \right\} \right]
 \end{aligned}$$

c) $F_{hkl} = 0$ for blandede indekser i overensstemmelse med udstikningsregelen for flatesentrerte krystallgitter

For ublandede indekser:

$$\begin{array}{l} 1) F_{hkl} = 4(f_{Si} - f_C) \quad \text{for } h+k+l = 4m+2 \\ 2) F_{hkl} = 4(f_{Si} + f_C) \quad \text{for } h+k+l = 4m \end{array} \left. \begin{array}{l} h, k, l \\ \text{alle} \\ \text{partall} \end{array} \right\}$$

$$3) F_{hkl} = 4(f_{Si} \pm i f_C) \quad \text{for } h+k+l = 4m \pm 1 \left. \begin{array}{l} h, k, l \text{ alle} \\ \text{oddetall} \end{array} \right\}$$

$$I \propto F^2 \quad \text{Antall } f_{Si} \approx 2.5 \cdot f_C$$

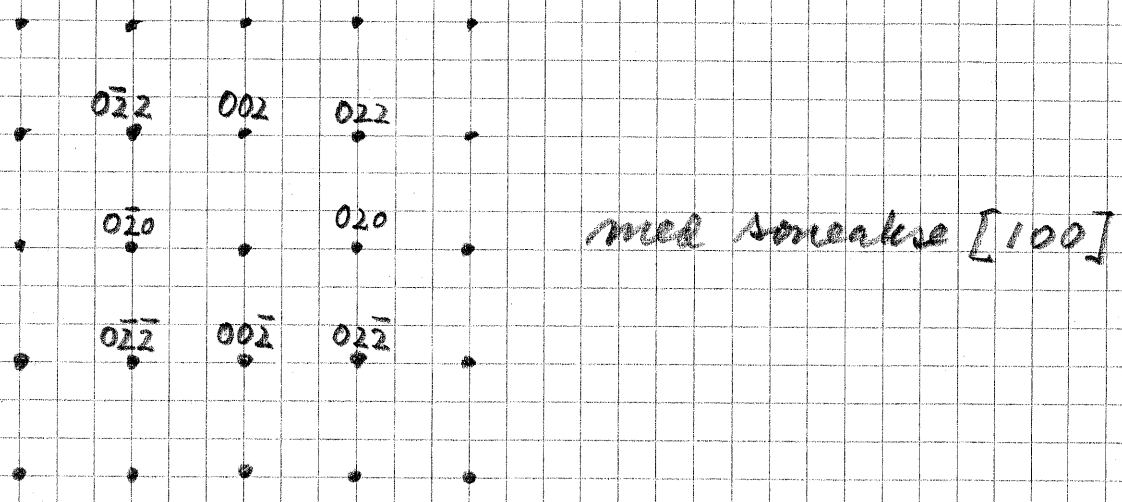
$$I_1 \propto (2.5 f_C - f_C)^2 = 2.25 f_C^2$$

$$I_2 \propto (2.5 f_C + f_C)^2 = 12.25 f_C^2$$

$$I_3 \propto (2.5 f_C + i f_C)(2.5 f_C - i f_C) = 6.25 f_C^2 + f_C^2 = 7.25 f_C^2$$

Vi venter altså (når vi ser bort fra andre effekter) sterke refleksjoner for $h+k+l = 4m$, svake refleksjoner for $h+k+l = 4m+2$ og middels sterke refleksjoner for $h+k+l = 4m \pm 1$

d) Med firetallig symmetri i diffraksjonsbildet er det allerede i utgangspunktet rimelig å vente at det er et oppstak av en 100-sone. De resiproke vektorene i fcc er proporsjonale med \sqrt{N} der $N = h^2 + k^2 + l^2$. Stigende tillatte verdier av N er 3, 4, 8, 11, 12, 16, 19, 20. $R \neq [111]$ fordi $[111]$ -vektorene ikke står vinkelrett på hverandre, og heller ikke vinkelrett på $[100]$. $R = [020]$ er imidlertid en mulighet. $[020] \perp [002]$ og begge er $\perp [100]$. En mulig indisering blir derfor



Kamera konstant $K = R \cdot d$

$$K = R_{020} \cdot d_{020} = 20 \text{ mm} \cdot \frac{4.0498 \text{ \AA}}{\sqrt{2^2}}$$

$$= 40.495 \text{ mm \AA} = 4.0495 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2 = \underline{4.05 \mu\text{m}^2}$$

(4)

$$e) \left(\frac{R_2}{R_1}\right)^2 = \left(\frac{41.6}{16.1}\right)^2 = 6.68 \approx \frac{20}{3}$$

Vi antar derfor $R_2 = [420]$ $R_1 = [111]$

$$\cos \varphi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}} = \frac{4 \cdot 1 + 2 \cdot 1}{\sqrt{20} \sqrt{3}} = 0.724597$$

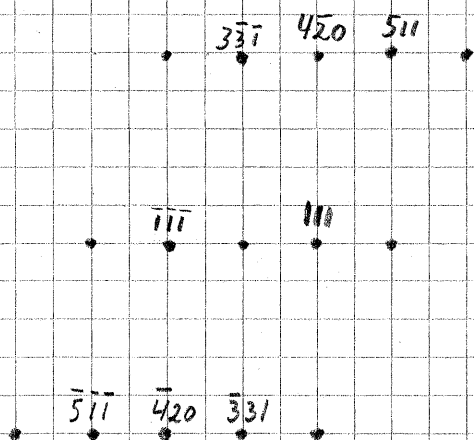
$\Rightarrow \varphi = 39.23^\circ$. Dette er åpenbart feil.

Vi prøver derfor $R_2 = [4\bar{2}0]$ og $R_1 = [111]$

$$\Rightarrow \cos \varphi = \frac{4 \cdot 1 - 2 \cdot 1}{\sqrt{20} \sqrt{3}} = 0.2582 \Rightarrow \varphi = \underline{75.04^\circ}$$

som passer

En mulig indisering blir derfor



Soneakse: $[111] \times [4\bar{2}0] = [24\bar{6}]$

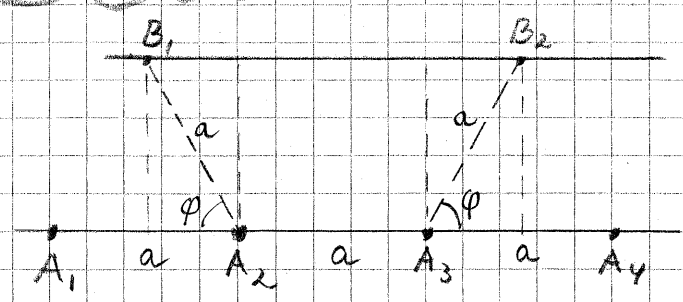
Derfor soneaksen er $[12\bar{3}]$

$$R_{\text{SiC}} \cdot d_{\text{SiC}} = R_{\text{Ag}} \cdot d_{\text{Ag}} = K = R_{4\bar{2}0} \cdot \frac{a_{\text{SiC}}}{\sqrt{4^2 + 2^2 + 0^2}}$$

$$a_{\text{SiC}} = \frac{40.495 \text{ nm} \cdot \sqrt{20}}{41.6 \text{ nm}} = \underline{4.35 \text{ \AA}}$$

Oppgave 2

a)



m -tallig rotasjonsakse i A_1 må gjenta seg parallelt i gitterpunktene A_2, A_3, A_4 osv. En akse gjennom A_2 vil overføre A_1 til B_1 ved rotasjonen $\phi = 2\pi/m$. En rotasjon om A_3 vil overføre A_4 til B_2 . B_1 og B_2 definerer en ny gitterlinje identisk med den første. B_1, B_2 må da være et helt antall identitetsperioder a .

$$2a \cos \frac{2\pi}{m} + a = m \cdot a$$

$$\cos \frac{2\pi}{m} = \frac{m-1}{2} = \frac{N}{2} \quad \text{der } N \text{ må være heltallig}$$

$$|\cos \frac{2\pi}{m}| \leq 1 \implies N \text{ kan ha verdiene } -2, -1, 0, 1, 2$$

$$\implies m \text{ kan ha verdiene } 1, 2, 3, 4, 6$$

\implies Bare med disse tallighetene for rotasjonsaksene er det mulig å generere et periodisk repeterende gitter. Det gjelder også om aksene er inverterte eller skiveaksene.

b) Det kontinuerlige røntgenspektret (bremsstrålespektret) oppstår ved at elektronene som treffer anoden i røntgenrøret, medbremses ved vekselvirkning med atomene i anoden. Dermed avgir elektronene stråling, idet en akselerert ladet partikkel generelt avgir stråling med bølglengde avhengig av akselerasjonen. Ettersom et stort antall elektroner vekselvirker med et stort antall atomer i forskjellige avstander, vil et kontinuerlig bånd av bølglengder oppstå.

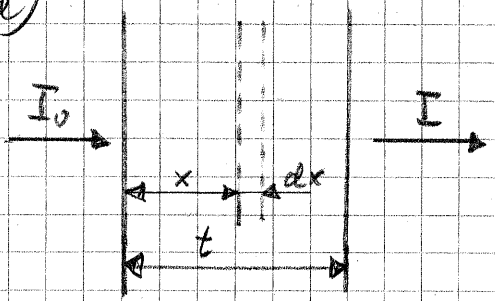
Det karakteristiske røntgenspektret oppstår ved at elektronene som treffer anoden i røntgenrøret, eksiterer atomer i anodematerialet (slår ut elektroner fra indre nivåer i atomet). (Slik eksitasjon kan også skje pga innkommende stråling (fluoresens)). Elektroner fra høyere liggende nivåer vil "falle ned" til de ledige indre nivåer, og energidifferensen kan delvis avgis som røntgenstråling. Ettersom strålingsavgivelsen representerer energidifferens mellom diskrete nivåer, vil avgitt stråling ha bare bestemte bølglengder karakteristiske for atomet. Vi kaller dette det karakteristiske røntgenspektret.

c) Strålingsenergien som avgis fra en akselerert ladet partikkel, kan ikke være større enn den kinetiske energien for partikkelen. Dermed all kinetiske energi for partikkelen avgis som ett eneste strålingskvant, har altså kvantet den største energi, og dermed den minste bølgelengde, det kan ha. Denne bølgelengden kaller vi kortbølgegrensen.

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

$$\lambda_0 = \frac{hc}{eU} = \frac{6,622 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 5 \cdot 10^4} \text{ m} = 2,48 \cdot 10^{-11} \text{ m} = \underline{0,25 \text{ \AA}}$$

d)



Stråling med intensitet I_0 treffer et materiale med tykkelse t . I dybden x har intensiteten sunket til I_x .

Svekkelsen i det differensielle skiktet dx antas å være proporsjonal med I_x og med dx . Proporsjonalitetsfaktoren μ kaller vi den lineære absorpsjonskoeffisienten

$$dI_x = -\mu \cdot I_x \cdot dx$$

$$\frac{dI_x}{I_x} = -\mu dx \Rightarrow \int_{I_0}^I \frac{dI_x}{I_x} = -\int_0^t \mu dx$$

$$\ln \frac{I}{I_0} = -\mu t \Rightarrow \underline{I = I_0 e^{-\mu t}}$$

Som er absorpsjonsloven

d) forts

Dette kan også skrives som

$$I = I_0 e^{-\mu t} = I_0 e^{-\frac{\mu}{\rho} \cdot \rho \cdot t}$$

der ρ er massetetthet
av absorbatormaterialet

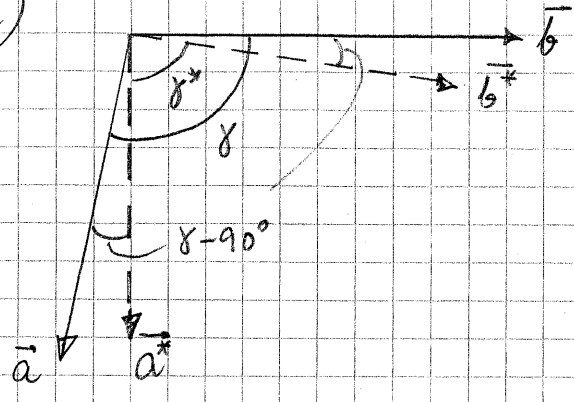
$\frac{\mu}{\rho}$ kalles masseabsorpsjonskoeffisienten.

For en blanding av flere elementer, hvert med
en massefraksjon C_i :

$$\frac{\mu}{\rho} = \sum_i C_i \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i = C_1 \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_1 + C_2 \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_2 + C_3 \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_3 + \dots$$

e) }
f) } kfr utleverte ark
g) }

k)



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

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

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

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

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

$\gamma = 180^\circ - \gamma^* = 180^\circ - 81.2^\circ = 98.8^\circ \quad \alpha = \beta = 90^\circ$

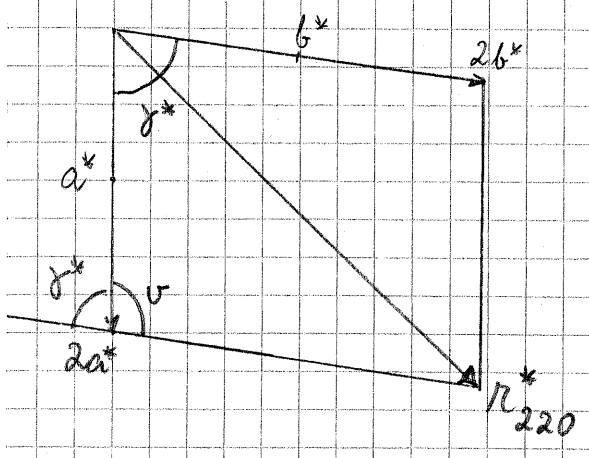
$\bar{a} \cdot \bar{a}^* = |\bar{a}| \cdot |\bar{a}^*| \cdot \cos(\gamma - 90^\circ) = |\bar{a}| \cdot |\bar{a}^*| \sin \gamma = 1 = \bar{b} \cdot \bar{b}^*$

$|\bar{a}^*| = \frac{1}{d_{100}} = \frac{1}{a \sin \gamma} \quad |\bar{b}^*| = \frac{1}{d_{010}} = \frac{1}{b \sin \gamma} \quad |\bar{c}^*| = \frac{1}{c}$

$a = \frac{1}{a^* \sin \gamma} = \frac{1}{0.123 \sin 98.8^\circ} \text{ \AA} = 8.227 \text{ \AA}$

$b = \frac{1}{b^* \sin \gamma} = \frac{1}{0.145 \cdot \sin 98.8^\circ} \text{ \AA} = 6.979 \text{ \AA}$

$c = \frac{1}{c^*} = \frac{1}{0.167} \text{ \AA} = 5.988 \text{ \AA}$



$\nu = 180^\circ - \gamma^* = 180^\circ - 81.2^\circ = 98.8^\circ = \gamma$

Utvidet Pythagoras:

$|\bar{h}_{220}^*|^2 = (2a^*)^2 + (2b^*)^2 - 2 \cdot 2a^* \cdot 2b^* \cdot \cos \nu$
 $= (2 \cdot 0.123)^2 + (2 \cdot 0.145)^2 - 8 \cdot 0.123 \cdot 0.145 \cdot \cos 98.8^\circ$

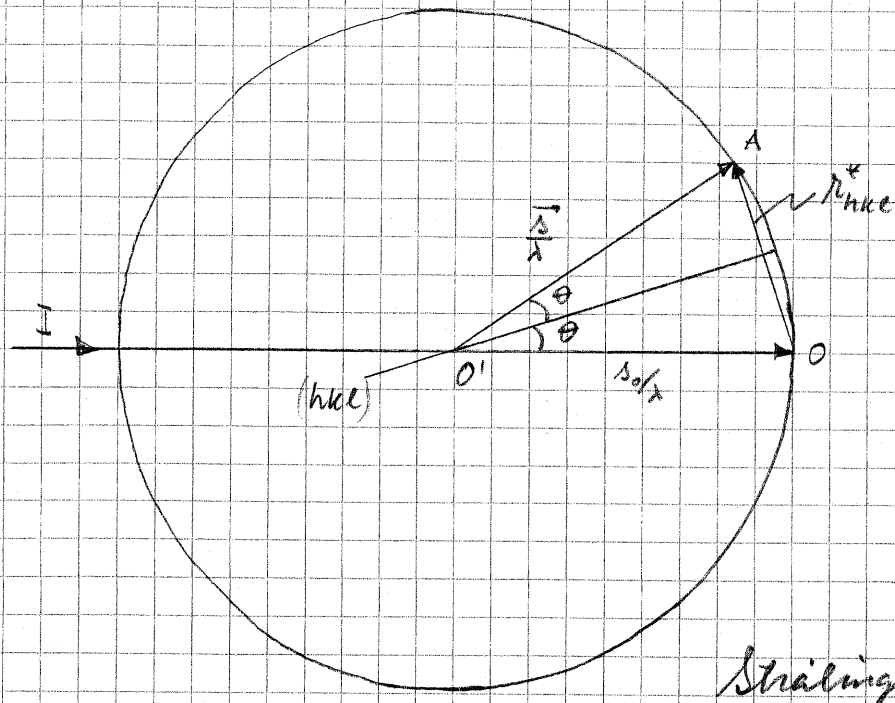
$|\bar{h}_{220}^*|^2 = 0.1664 \text{ \AA}^{-2}$

\bar{c}^* står normalt på \bar{h}_{220}^*

$|\bar{h}_{222}^*|^2 = |\bar{h}_{220}^*|^2 + |2\bar{c}^*|^2 = 0.1664 + (2 \cdot 0.167)^2 \text{ \AA}^{-2} = 0.2780 \text{ \AA}^{-2}$

$h_{222}^* = 0.527 \text{ \AA}^{-1}$

i)



Strålingsbølglengde λ .

Innkommende stråle treffer krystall i O' med krystallplan (hkl) . Kule med radius $\frac{\lambda}{2}$ slås omkring O' .

Primærstrålens forlengelse treffer kulen i O . Primærstrålens enhetsvektor er \vec{s}_0 og den spredte strålens enhetsvektor er \vec{s} og danner vinkelen 2θ med \vec{s}_0 . Den spredte strålen treffer kulen i A .

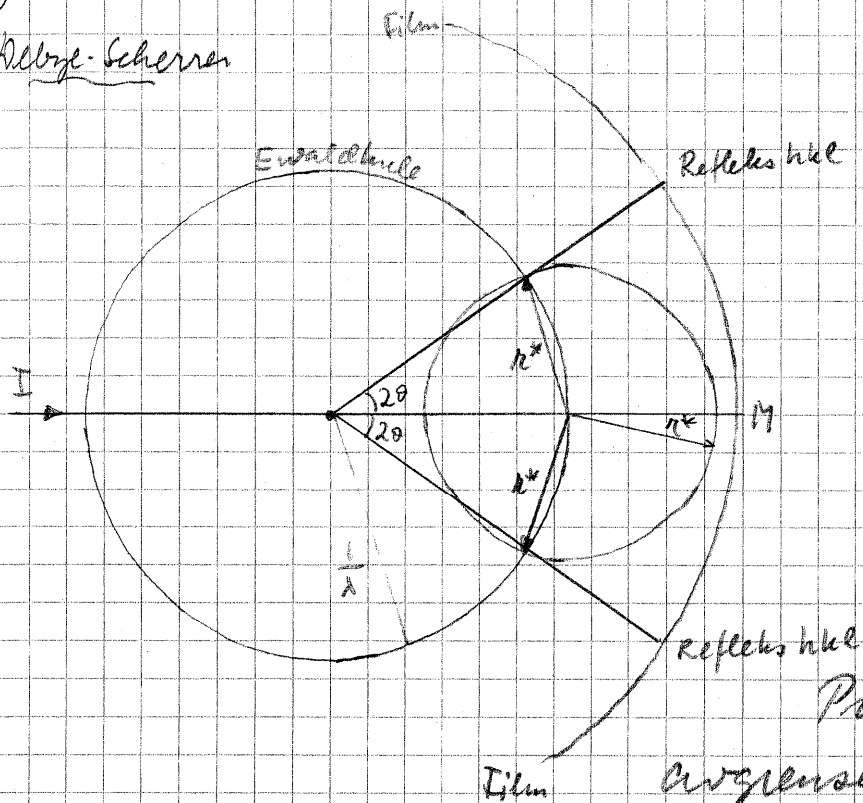
$$\sin \theta = \frac{OA/2}{|\vec{s}_0|/\lambda} \Rightarrow OA = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}$$

Men etter Braggbetingelsen er $\lambda = 2d \sin \theta \Rightarrow OA = \frac{1}{d}$

Vektoren \vec{OA} har altså lengde $|\vec{OA}| = |\vec{s}| = \frac{1}{d}$

Men \vec{OA} er også vinkelrett på (hkl) . Altså er OA både i lengde og retning lik den resiproke gittervektoren \vec{S} . Dette betyr at hvis vi med origo i O tegner opp det resiproke gitteret for krystallen i O' , vil Braggbetingelsen være oppfylt hvis en resiprokevektor fra O treffer kulen, dvs hvis et resiprokgitter-plet er på kuleflaten (i A).

j)
Debye-Scherrer

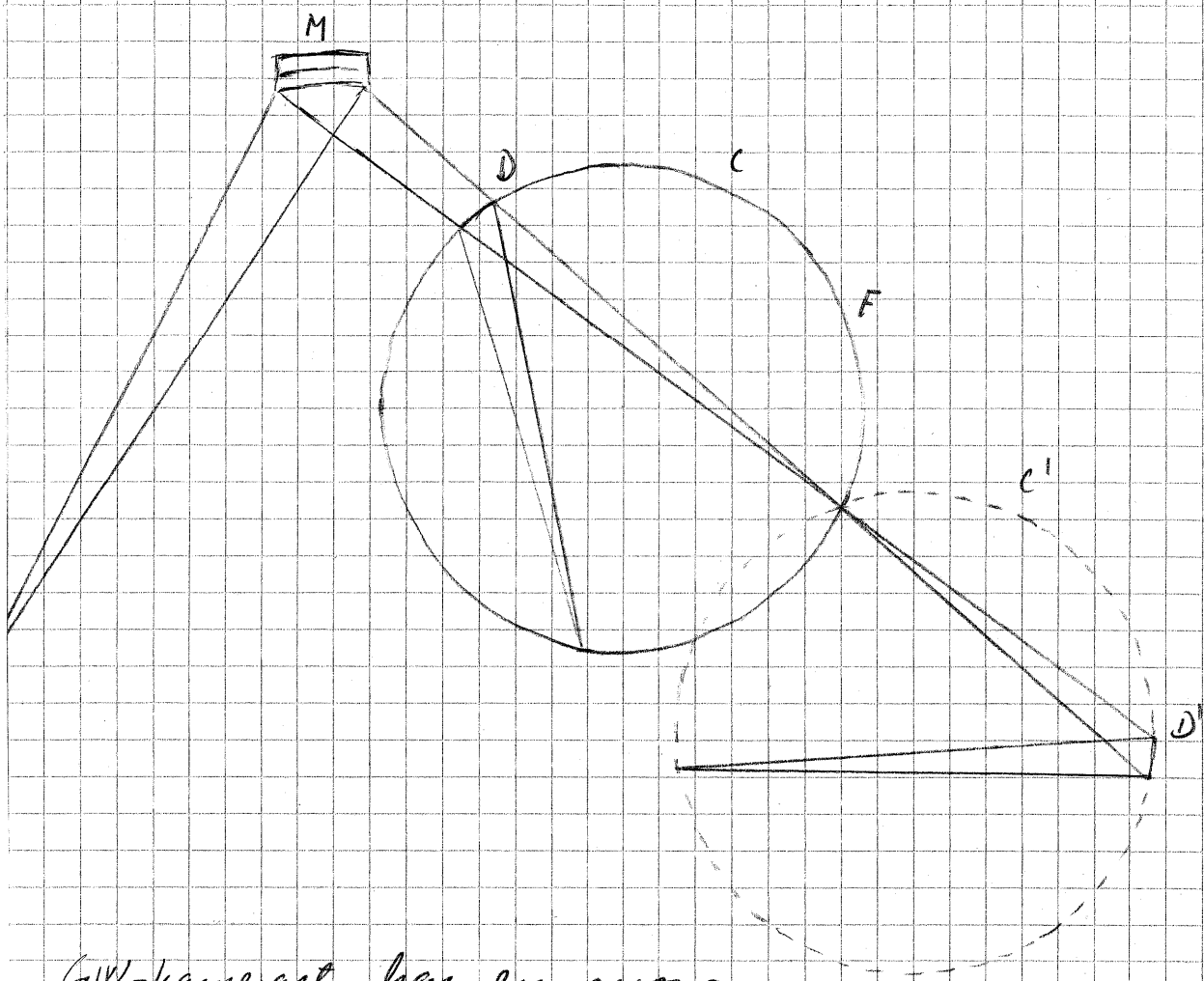


Primærstrålen er
avgjenssel med kollimator.

I Debye-Scherrer-kameraet kan prøven form av en tyynn
stift som står i akse for det sylindriske kameraet
Pulverhorn er orientert i alle mulige retninger, og like
lange reiproke vektorene vil derfor ende på en kuleflate.
Skjæringen mellom kuleflaten og Ewaldkule vil gi
oppfyllelse av Braggbetingelsen, og på den sylindriske
filmen vil det bli reflekser symmetrisk beliggende
om midtpunktet M.

Metoden egner seg for nøyaktig bestemmelse av nettplanavstande.
Ved bruk av f.eks Hanawalds søkemetode og ASTM-
indeks kan >50000 stoffer identifiseres

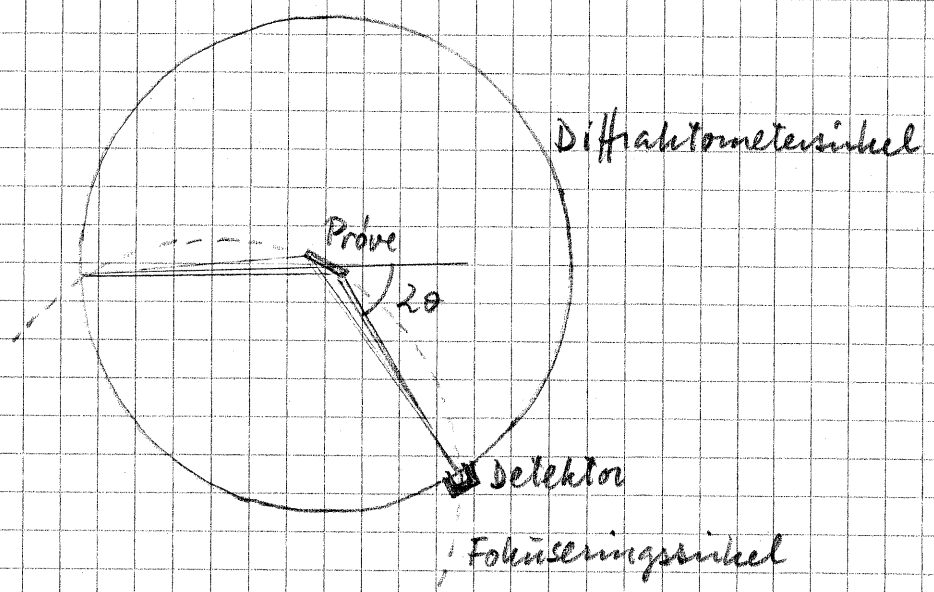
Gammelin-de Wolff kameraet



GW-kameraet har en mono-kromatorlinse M som fokuserer primærstrålen fra røntgenbilden R mot filmen F som legges sylindrisk om røret C. Refleksene fra prøven i D fokuseres på filmen. Prøveholderen er delt i 4 felter der pulverprøver kan plasseres på en klibbig folie. Dermed kan opptil 4 forskjellige prøver undersøkes samtidig. Dersom ett av dem er et kjent stoff, med kjente d-verdier, er det lett å lage en kalibreringskurve for sammenhengen mellom d-verdi og avstand på filmen. Dersom vi plasserer prøven i D' og filmen om C' (tilbakestrålings-tilfellet) har vi et såkalt Seemann-Bohlin-kamera.

Pulverdiffraktometer

Et tellerdiffraktometer for pulver gir ikke riktig så nøyaktige d-verdier som DS-kameraet kan gi, men er til gjengjeld mindre arbeidskrevende å bruke, gir nøyaktigere intensitetsbestemmelse, og resultatene egner seg for direkte behandling i regnemaskin.

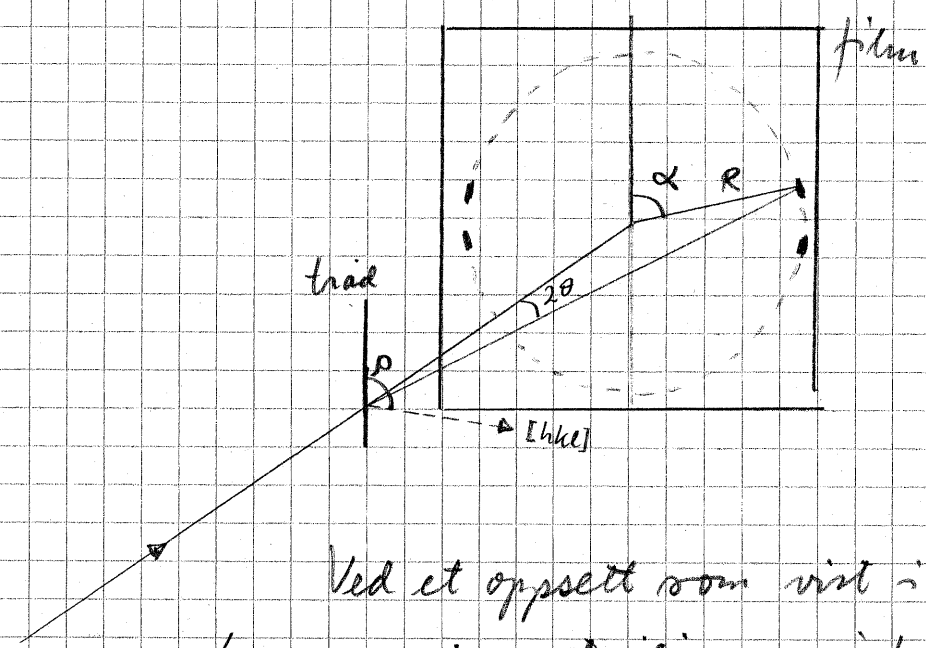


Dirktestrålen avgrenses i bredde og høyde av spalte, før den treffer pulverprøven som er festet til den kulebrige overflaten av en plan holder. Refleksene vil med god tilnærming fokuseres på diffraktometersirkelen der en röntgendetektor er plassert. Ved endring av Braggvinkelen dreies detektor (langs diffraktometersirkelen) og prøven i vinkelforholdet 2:1. Dermed vil detektoren alltid stå i riktig posisjon til å registrere Braggspredt stråling. Detektorsignalet forsterkes og integreres og føres til en linjeskriver. Utslaget på skriveren er da proporsjonalt med tellehastigheten i detektoren. Vi får dermed

intensitet som funktion af θ , og dermed som funktion af d . Kombineret med database over ASTM-indeks og en regnemaskine kan stoff i prøven identificeres automatisk.

14

k) En tråd med polykrySTALLINSK materiale kan godt sett betragtes som et pulver. Når tråden har tekstur, dvs når en bestemt kristallretning falder langs tråddaksen, vil kristallittorienteringen omkring tråddaksen være vilkårlig.



Ved et oppsett som vist i figuren kommer primærstrålingen vinkelrett inn mot fiberen (tråden), og går også vinkelrett mot filmen som er parallell med tråden. Utten tekstur ville vi da få diffraksjonsinger på filmen. Avhengig av graden av tekstur vil det være svertningmaksima i posisjoner for refleksen fra tråd med ideell tekstur. Vinkelen er ρ mellom fiberretningen og plan-normalen for reflekterende plan. Hvis α er vinkelen som vist på figuren, kan det vises at for kubisk materiale gjelder sammenhengen $\cos \rho = \cos \alpha \cdot \cos \theta$. Ved sammenligning med tabeller over vinkler mellom retninger i kubisk kristall kan da mulige indekser for fiberretningen finnes.

g

Inversionszentrum: $\bar{1}$
 Spiegelplan: m
 Totaltlig Symmetri: 2_1
 a-glideplan: a

