

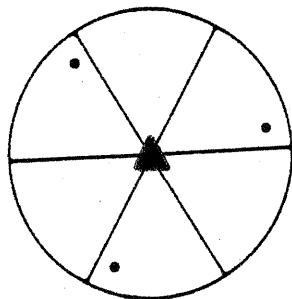
TFY4175 Materialfysikk og karakterisering  
 Eksamen 1. juni, 2004  
 Løsningsforslag

Oppgave 1

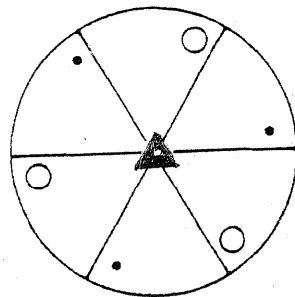
a)  $n$ -tallig akse-operasjon: Dreier et punkt vinkelen  $\varphi = 360^\circ/n$  om akse. Tilbake til utgangspunktet etter  $n$  operasjoner. Tillatte verdier for  $n$ : 1, 2, 3, 4 og 6.

b)

3



$\bar{3} \equiv 3 + \bar{1}$



c)

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$\{2C_{100}\}$        $\{2C_{010}\}$        $\{2C_{001}\}$

d)

Par V :  $mm2$

Par H :  $\bar{4}2m$

e) Monoklint :  $a \neq b \neq c$   $\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$  1. setting  
 $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$  2. setting

Hexagonalt :  $a = b \neq c$   $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

De øvrige : triklint, ortorombisk, tetragonalt  
 trigonalt, kubisk

## Oppgave 2

a) I Til hvert fcc gitter er det tilordnet 4 Ge atomer  
 Antall Ge atomer i cella :  $2 \times 4 = 8$

II Korteste Ge-Ge avstand :  $(000) - (\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$

$$\begin{aligned} \underline{d_{\text{Ge-Ge}}} &= \sqrt{\left(\frac{a}{4}\right)^2 + \left(\frac{a}{4}\right)^2 + \left(\frac{a}{4}\right)^2} = \frac{a}{4} \sqrt{3} \\ &= \frac{5.6574}{4} \sqrt{3} \text{ \AA} = \underline{2.4497 \text{ \AA} \approx 2.45 \text{ \AA}} \end{aligned}$$

$$\text{III } \rho = \frac{n \cdot M_{\text{Ge}}}{N_{\text{A}} \cdot V} = \frac{8 \cdot 72.59 \text{ g/mol}}{(5.6574 \cdot 10^{-8})^3 \text{ cm}^3 \cdot 6.0221 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}}$$

$$\underline{\rho = 5.325 \text{ g/cm}^3}$$

b) Ekviv. pos. i f. gitter :  $000, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$   
 Gitteret forskyvet  $\frac{1}{4}$  romdiagonal har det samme  
 settet av ekviv. pos. med et tillegg  $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$  i hver.

$$F_{hkl} = f_{Ge} \left[ e^0 + e^{2\pi i (h/2 + k/2)} + e^{2\pi i (h/2 + l/2)} + e^{2\pi i (k/2 + l/2)} \right] \\ + f_{Ge} \cdot e^{2\pi i (h/4 + k/4 + l/4)} \left[ 1 + e^{2\pi i (h/2 + k/2)} + e^{2\pi i (h/2 + l/2)} + e^{2\pi i (k/2 + l/2)} \right]$$

$$F_{hkl} = f_{Ge} \left[ 1 + e^{\pi i (h/2 + k/2 + l/2)} \right] \left[ 1 + (-1)^{h+k} + (-1)^{h+l} + (-1)^{k+l} \right]$$

$$F_{hkl} = \begin{cases} 0 & \text{- for blandet indeksparitet} \\ 4 f_{Ge} \left[ 1 + e^{\pi i/2 (h+k+l)} \right] & \text{- for udl. indekspar.} \end{cases}$$

Utbl. regel ovenfor gælder generelt for  
F-sentrert celle

$$\text{Ledet } \left[ 1 + e^{\pi i/2 (h+k+l)} \right] \rightarrow$$

Paritet

[...]

lik

$$h+k+l = 4n$$

$$1+1 = 2$$

lik

$$h+k+l = 4n+2$$

$$1-1 = 0$$

odde

$$h+k+l = 4n \pm 1$$

$$1 \pm i$$

Altså også utsløking for  $h+k+l = 4n+2$

c) Fra Braggs lov  $\lambda = 2d \sin \theta \Rightarrow \frac{1}{d} = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}$

Fra def. av res. gittervektor (kubisk symmetri):

$$|\underline{S}_{hkl}| = \frac{1}{d} = \sqrt{h^2 a^{*2} + k^2 a^{*2} + l^2 a^{*2}}$$

$$= \frac{1}{a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}$$

Max. Braggvinkel  $\theta_{\max} = 90^\circ \Rightarrow \sin \theta_{\max} = 1$

$$\Rightarrow \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \leq \frac{2 \cdot 1 \cdot a}{\lambda}$$

Refl. av typen  $hh0 \Rightarrow h^2 + h^2 \leq \left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2$

$$2h_{\max}^2 \leq \left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2 = \left(\frac{2 \cdot 5.6574}{1.5418}\right)^2 \sim 53.86$$

$$\Rightarrow h_{\max} \leq 5.19 \quad \therefore h_{\max} = 5$$

Refl. 550 oppfyller Braggvilkåret men den har blandet indeksparitet og er derfor utsløkt.

Max. observerbar refl. av type  $hh0$  : 440

d)  $\text{I } P4_3 2_1 2$  : primitiv tetragonal celle;  $4_3$  - 4-t  
skruakse med transl.  $\frac{3}{4} \parallel [001]$ ;  $2_1$  - 2-t  
skruakse med transl.  $\frac{1}{2} \parallel [100] / [010]$ ;  
2 - 2-t rot.akse  $\parallel [110] / [1\bar{1}0]$

$$\bar{\rho}_\gamma = \frac{n \cdot M_{Ge}}{V \cdot N_A} = \frac{12 \cdot 72.59 \text{ g/mol}}{(5.93^2 \cdot 6.98) \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3 \cdot 6.0221 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}}$$

$$\underline{\rho_\gamma = 5.89 \text{ g/cm}^3}$$

For  $\alpha$ -Ge er  $\rho_\alpha = 5.325 \text{ g/cm}^3$ , dvs.  $\gamma$ -fasen har ca. 10% større tetthet. Volumet for hvert atom er komprimert som følge av det økte trykket for å lage  $\gamma$ -fasen.

e) To hovedmekanismer for spredning

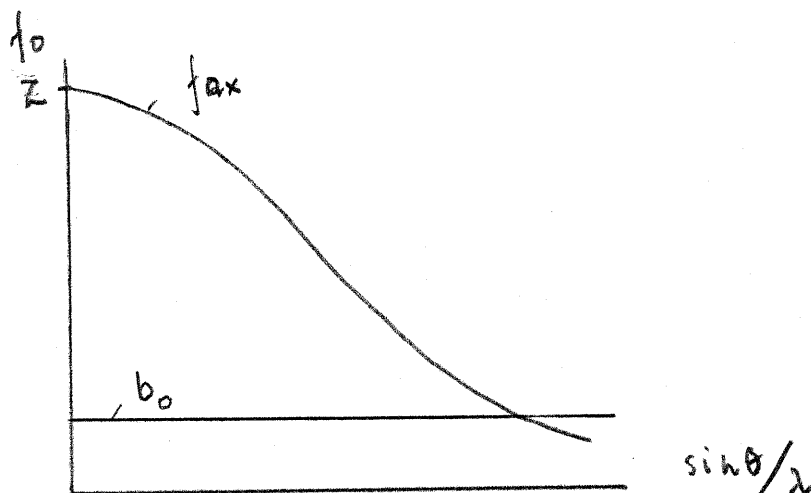
### I Kjernespredning (kohærent)

Siden kjerneradius  $\sim 10^{-15} \text{ cm} \ll$  typiske bølglengder for innfallende nøytroner:  $\sim 1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ cm}$  så vil kjernene oppføre seg som punktspredere og spredningsfaktor  $f_0$  (ell.  $b_0$ ) er isotrop og uavhengig av  $\sin\theta/\lambda$ .  $b_0$  som er av størrelse  $10^{-12} \text{ cm}$  kan være både positiv og negativ avhengig av element. Det kan være stor forskjell på  $b_0$  for naboelementer i det periodiske system, også for ulike isotoper av samme element.

### II Magnetisk spredning

Vekselvirkning mellom netto magn. moment hos elementer med ikke avsluttet elektronskall og nøytronenes magn. moment (knyttet til spin). Magnetisk spredning foregår i et visst volum utenfor kjernen  $\Rightarrow$  spredningsevnen avtar med  $\sin\theta/\lambda$ .

Røntgenfotonene spris på elektronene rundt atomkjernen i et volum av utstrøking, sammenliknbart med typisk bølgelengde  $\sim 1 \text{ \AA}$ .  
Spredningsevnen avtar med  $\sin\theta/\lambda$ .



### Oppgave 3

- a) I  $\lambda_0$  - korteste bølgelengde i bremsestrålespektret. Tilsvaret at all kinetisk energi i innfallende elektroner mot anoden går over i utstrålt fotonenergi.

$$\text{II } h\nu_0 = h c / \lambda_0 = e U$$

$$\lambda_0 = \frac{h c}{e U} = \frac{6.62608 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \cdot 2.997925 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{1.60218 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot U \text{ V}}$$

$$\Rightarrow \lambda_0 [\text{\AA}] = \frac{12.398}{U [\text{kV}]}$$

$$U = 54 \text{ kV} \Rightarrow \lambda_0 = \frac{12.398}{54} [\text{\AA}] \Rightarrow \lambda_0 = \underline{0.230 \text{ \AA}}$$

b) Spektral fordeling av bremsstråling:

$$I(\lambda) = KZ \frac{1}{\lambda} \left( \frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda} \right) = KZ \left( \frac{1}{\lambda\lambda_0} - \frac{1}{\lambda^2} \right)$$

Max. I ved  $\lambda_m$  fra  $\frac{dI(\lambda)}{d\lambda} = 0$

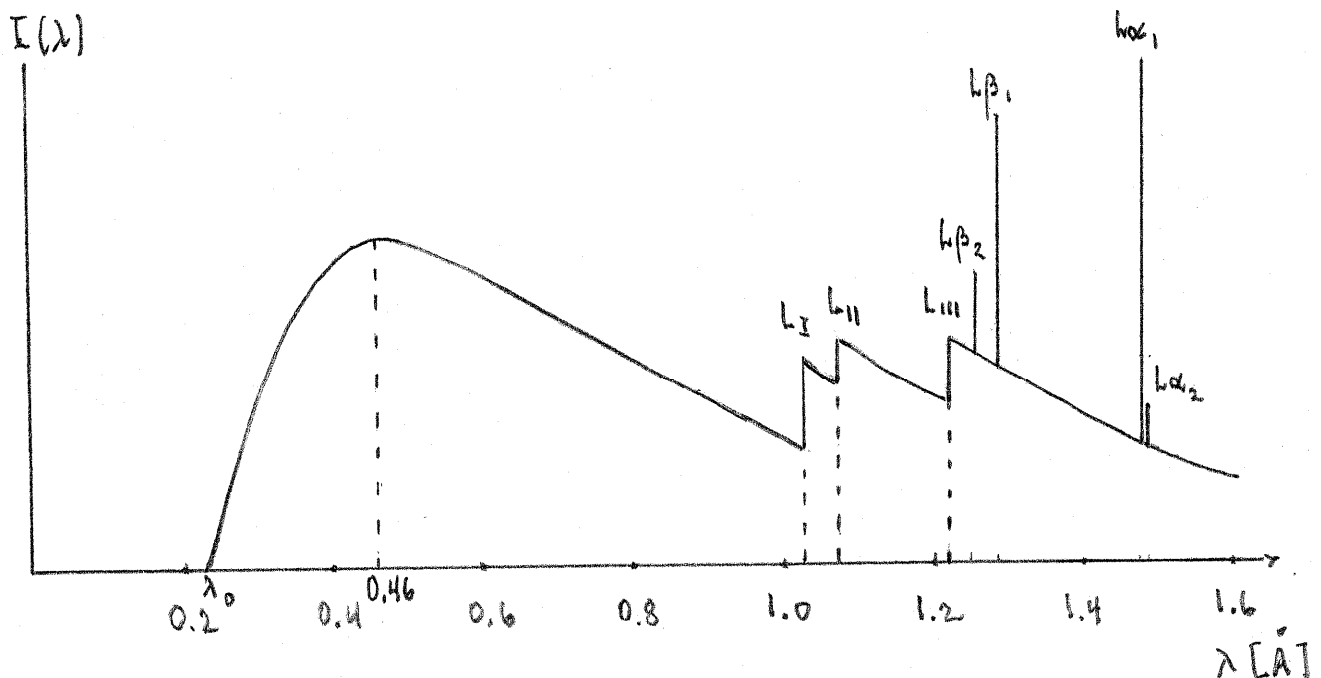
$$\Rightarrow \frac{1}{\lambda_0} \left( -\frac{1}{\lambda^2} \right) - \left( -\frac{2\lambda}{\lambda^4} \right) = 0$$

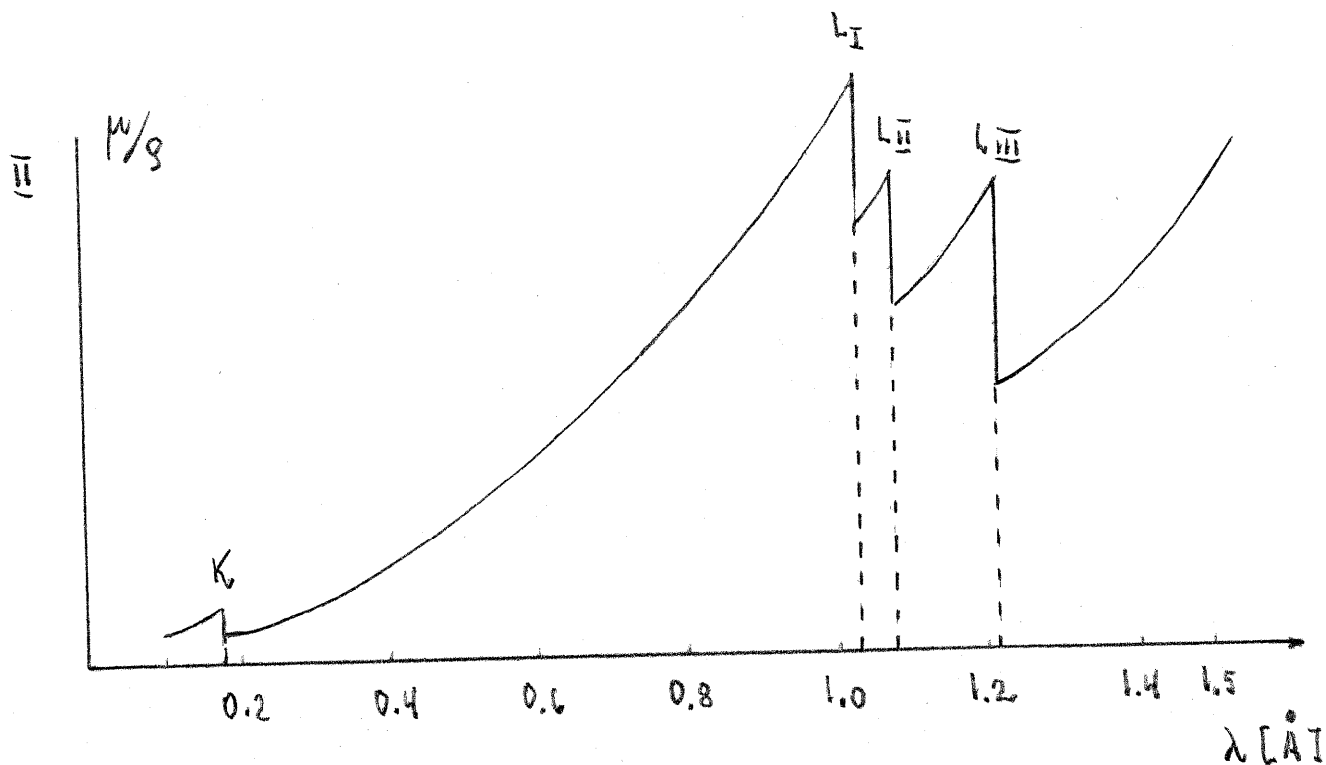
$$-\frac{1}{\lambda_0} + \frac{2}{\lambda} = 0 \quad \Rightarrow \quad \underline{\lambda = \lambda_m = 2\lambda_0}$$

$$U = 54 \text{ keV} \quad \Rightarrow \quad \underline{\lambda_m = 0.460 \text{ \AA}}$$

c) I ved  $U = 54 \text{ keV}$  blir bare  $L$ -linjene eksitert siden  $AK = 69.525 \text{ keV}$ . Omregning av energi i keV til bølgelengde i  $\text{\AA}$ , se a) II

$L\alpha_1$	$L\alpha_2$	$L\beta_1$	$L\beta_2$	$AL_I$	$AL_{II}$	$AL_{III}$
1.4764	1.4874	1.2818	1.2446	1.0246	1.0740	1.2147





d) Strålingsloven

$$J_{\bar{\alpha}} = J_{\bar{\alpha},0} \cdot e^{-(\mu/\rho)_{\bar{\alpha}} \cdot \rho \cdot t}$$

$$J_{\beta_1} = J_{\beta_1,0} \cdot e^{-(\mu/\rho)_{\beta_1} \cdot \rho \cdot t}$$

Int. forhold etter gj. gang i foliet:

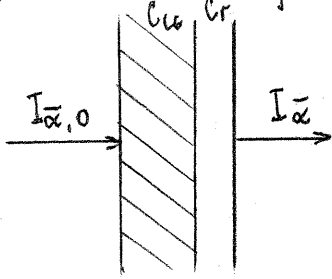
$$\frac{J_{\bar{\alpha}}}{J_{\beta_1}} = \frac{J_{\bar{\alpha},0}}{J_{\beta_1,0}} \cdot e^{-[(\mu/\rho)_{\bar{\alpha}} - (\mu/\rho)_{\beta_1}] \cdot \rho \cdot t}$$

$$\frac{J_{\bar{\alpha}}}{J_{\beta_1}} = 1.66 \cdot e^{-[44.45 - 236.4] \frac{\text{cm}^2}{\text{g}} \cdot 8.96 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \cdot 20 \cdot 10^{-4} \text{cm}}$$

$$\frac{J_{\bar{\alpha}}}{J_{\beta_1}} = 51.76 \sim 51.8$$



e) Strålegang:



$$I_{\bar{\alpha}} = (I_{\bar{\alpha},0} \cdot e^{-(\mu/\rho)_{Cu} \cdot \rho_{Cu} \cdot t_{Cu}}) \cdot e^{-(\mu/\rho)_{Cr} \cdot \rho_{Cr} \cdot t_{Cr}}$$

$$\frac{I_{\bar{\alpha}}}{I_{\bar{\alpha},0}} \cdot e^{(\mu/\rho)_{Cu} \cdot \rho_{Cu} \cdot t_{Cu}} = e^{-(\mu/\rho)_{Cr} \cdot \rho_{Cr} \cdot t_{Cr}}$$

$$\ln \left[ \frac{I_{\bar{\alpha}}}{I_{\bar{\alpha},0}} \cdot e^{(\mu/\rho)_{Cu} \cdot \rho_{Cu} \cdot t_{Cu}} \right] = -(\mu/\rho)_{Cr} \cdot \rho_{Cr} \cdot t_{Cr}$$

$$t_{Cr} = \frac{\ln \left[ \frac{I_{\bar{\alpha}}}{I_{\bar{\alpha},0}} \cdot e^{(\mu/\rho)_{Cu} \cdot \rho_{Cu} \cdot t_{Cu}} \right]}{-(\mu/\rho)_{Cr} \cdot \rho_{Cr}}$$

$$t_{Cr} = \frac{\ln \left[ \frac{1}{10} \cdot e^{(44.45 \text{ cm}^2/\text{g} \cdot 8.96 \text{ g/cm}^3 \cdot 20 \cdot 10^{-4} \text{ cm})} \right]}{-(219.7) \text{ cm}^2/\text{g} \cdot 7.19 \text{ g/cm}^3} = \frac{-1.50604}{-1579.643}$$

$$\underline{t_{Cr} = 0.00095 \text{ cm} = 9.5 \text{ } \mu\text{m}}$$

f) Noen karakteristiske egenskaper ved SR:

- kontinuerlig spektrum over et stort energiområde, fra mikrobølger til røntgenstråling
- meget sterk fluks (intensitet)
- nesten fullstendig polarisert stråle i horisontalplanet
- pulset emisjon av fotoner  $\Rightarrow$  tidsstruktur
- lite tverrsnitt av strålen
- ekstremt liten divergens av strålen i vertikallplanet.