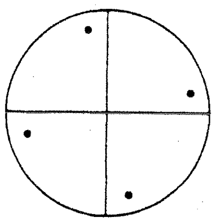
TFY4175 MATERIALFYSIKK OG KARAKTERISERING
MIDTSEM. PRØVE 10.03.05
LØSNINGSFORSLAG

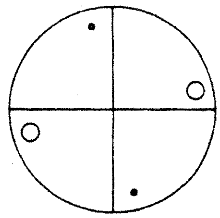
Oppgave 1

a) En n-tallig rotasjonsakse dreier et punkt eller en figur vinkelen $\phi = 360°/n$ om aksen, dvs. tilbake til utgangspunktet etter n operasjoner. Mulige verdier for n i et krystallgitter (gitt av kravet om translasjonsrepetisjon): 1, 2, 3, 4 og 6.

b)



4



$\bar{4}$

c)

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

$$\{2_{[100]}\} \cdot \{\bar{1}\} \equiv \{m_{[100]}\}$$

dvs. kombinasjonen av en 2-tallig akse $\parallel$ [100] og et inversjonssentrum er ekvivalent med et speilplan $\perp$ [100].

Oppgave 2

a) Bare tallighetene n = 1, 2, 3, 4 og 6 er 'tillatt'. I kombinasjonen 2 2 n må n være $\geq$ 2 fordi en kombinasjon av to (ortogonale) 2-tallige akser genererer en tredje 2-tallige akse som er ortogonal med begge de to første. Den siste kombinasjonen 2 3 5 i oversikten er ikke 'tillatt' pga. 5-tallighet. Til sammen har vi for tre akser med $n \geq 2$:

2 2 2	2 2 4	2 3 3
2 2 3	2 2 6	2 3 4

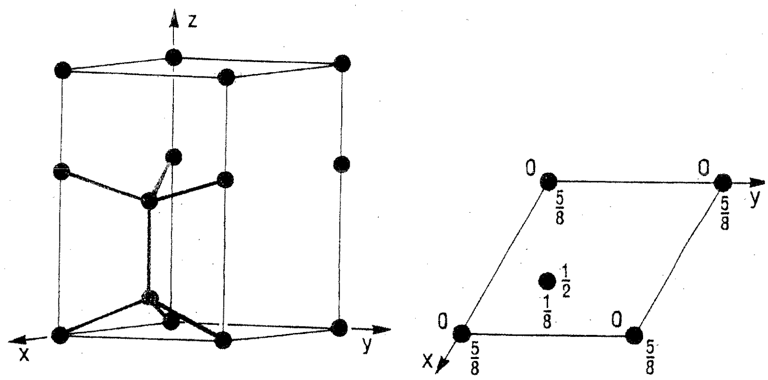
b) De forskjellige mulige 3-dim. gitrene inndeles i krystallsystemer, som også må være i samsvar med de tillatte kombinasjonene av akser i et punkt, se 2a). Vi kan derfor bruke de tillatte akser eller kombinasjoner av akser til å klassifisere gitre i krystallsystem. I tillegg til kombinasjonene av tre akser med $n \geq 2$, kommer et som bare har 1-tallige akser (triklin) og et med bare en 2-tallig akse i tillegg til to 1-tallige (monoklin). Aksekombinasjonene 2 3 3 og 2 3 4 regnes begge til det kubiske krystallsystemet.

c) I. Monoklin: $a \neq b \neq c$; $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta \neq 90^\circ$ (b unik) eller $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma \neq 90^\circ$ (c unik).
Tetragonal: $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

II. De øvrige 5 krystallsystemene: triklin, ortorombisk, trigonal, hexagonal, kubisk.

<u>Oppgave 3</u>

a) I.



II. Antall atomer i cella: $8 \cdot 1/8 + 4 \cdot 1/4 + 1 + 1 = \underline{4}$

b) I. Minste C – C avstand langs c-aksen: $3/8 \cdot c = 3/8 \cdot 4.1186$ Å $= \underline{1.5445 \text{ Å}}$
Samme lengde har bindingene fra C med $z = 1/8\ c$ til hver av de tre C med $z = 0$.

II. Cellevol. $V = a \cdot b \sin 60^\circ \cdot c = 2.5221^2 \cdot \sin 60^\circ \cdot 4.1186$ Å^3

Masseinnhold $m = \dfrac{Z \times M}{N_A}$; Tetthet $\rho_h = \dfrac{m}{V} = \dfrac{Z \times M}{N_A \times V}$

$$\rho_h = \frac{4 \cdot 12.0107 \text{g/mol}}{6.0221 \cdot 10^{23} \text{mol}^{-1} (2.5221^2 \cdot \sin 60^\circ \cdot 4.1186) \cdot 10^{-24} \text{cm}^3}$$

$\underline{\rho_h = 3.516 \text{ g/cm}^3}$

b) Tettheten i kubisk diamant

$$\rho_k = \frac{8 \cdot 12.0107 \text{g/mol}}{6.0221 \cdot 10^{23} \text{mol}^{-1} \cdot 3.5667^3 \cdot 10^{-24} \text{cm}^3}$$

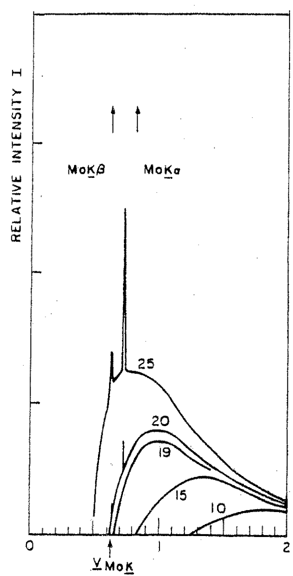
$\underline{\rho_k = 3.516 \text{ g/cm}^3}$ dvs. $\underline{\rho_k = \rho_h}$

Oppgave 4

a) Det er to mekanismer for generering av stråling i et røntgenrør:

I. *Bremsestråling:* De innfallende elektronene bremses ned og avbøyes i sine baner pga. påvirkning fra de positive kjernene i anoden. Akselerasjon eller deakselerasjon av ladete partikler (elektroner) medfører emisjon av stråling. Fordi det er et stort område av avbøyingsforløp – fra direkte støt og total overføring av kinetisk energi til strålingsenergi (kortbølgegrensen) til liten avbøying – vil bremsestrålinga vise et kontinuerlig spektrum av energi. Bremsestråling oppstår for alle energier av innfallende elektroner. For et gitt element Z og konstant rørstrøm er intensiteten $\propto V^2$ der V = rørspenningen.

II. *Karakteristisk stråling*: Når de innfallende elektronene har kinetisk energi større enn bindingsenergien for elektroner i de indre (energirikeste) nivåene hos atomene i anodematerialet kan støtet føre til at elektroner i indre nivå skytes ut til et ytre ubesatt nivå og etterlater seg vakanser. Denne eksiterte tilstanden er ikke stabil. I løpet av kort tid ($\leq 10^{-8}$ s) starter en deeksitasjonsprosess som medfører at elektroner i utenforliggende nivå springer inn i vakanser i innenforliggende nivå. Samtidig vil det bli emittert stråling som tilsvarer energispranget mellom start- og slutt-nivåene for overgangen (fluorescens). Energiforskjellene mellom indre atomnivåer tilsvarer stråling i røntgenområdet. Energien for emisjonslinjene er karakteristisk for hvert element og spektret framstår som skarpe linjer på en bakgrunn av bremsestråling.



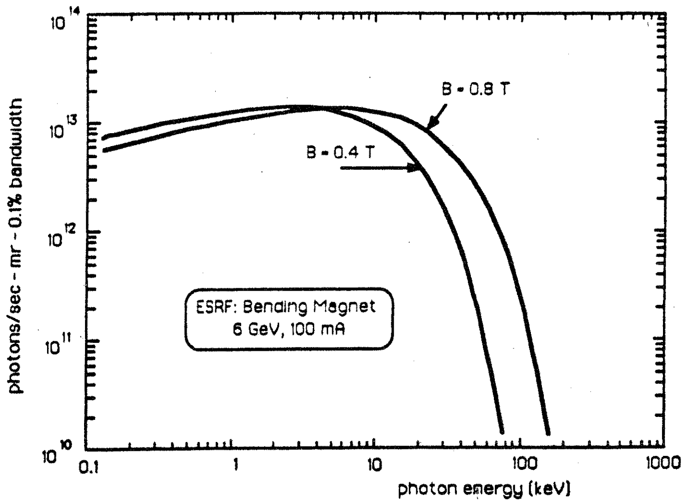
Stråling fra Mo anode for rørspenninger under, ved og over K eksitasjonsspenningen 20.0 kV.

Kortbølgegrensen λ_o i bremsestrålespekteret framkommer av:

$$\tfrac{1}{2} mv^2 = eV = h\nu_o = h\,c/\lambda_o \quad \Rightarrow \quad \lambda_o = \frac{hc}{eV}$$

Maksimum λ_m i bremsestrålespekteret ligger ved $2\lambda_o$.

b) I en synkrotron skapes strålingen ved at et pulstog av injiserte elektroner avbøyes i sin bane av feltet fra en enkelt vertikaltstående magnetisk dipol (bøyemagnet) eller et nett av flere dipoler etter hverandre med alternerende feltretning (wiggler, undulator). Retningsforandringen av elektronenes hastighetsvektor i horisontalplanet betyr akselerasjon og den medfører emisjon av stråling i en kjegle som tangerer elektronbanen. Jo større hastighet pulstoget av elektroner har desto større intensitet og mindre divergens har strålingen. I en synkrotron vil elektronhastigheten ligge nær lyshastigheten.



Spektral fluks for stråling fra en bøyemagnet med to forskjellige feltstyrker, 0.8 og 0.4 T

c) Moseley's lov for røntgenlinjene

$$(k/R)^{1/2} = \kappa(Z - \sigma)$$

k = $1/\lambda$ = bølgetallet
R = Rydbergkonstanten, en konst. med enhet [m^{-1}] som uttrykker energi.
κ = $(1/n_i^2 - 1/n_f^2)^{1/2}$, der n_i og n_f er hovedkvantetall for hhv. starttilstand og sluttilstand for atomet tilsvarende ei emisjonslinje. F.eks for K-linjene er $\kappa = (1/1^2 - 1/2^2)^{1/2}$ = 0.866. κ blir i praksis bestemt eksperimentelt.
Z = atomnummer
σ = avskjermingskonstant: et indre elektron opplever et litt reduseret kjernefelt pga. avskjerming fra andre indre elektroner.

Moseley's lov sier at bølgetallet ($\propto$ energien) av røntgen-emisjonslinjene er proporsjonalt med atomnummeret Z for elementet.

Oppgave 5

a) Vektfraksjon av Mg: x, og av Al: $1 - x$

Absorpsjonsloven: $I = I_o \cdot e\text{-}(\mu/\rho)\rho \cdot t$

Samlet absorpsjon i folien: $(\mu/\rho)_t = (\mu/\rho)_{Mg} \cdot x + (\mu/\rho)_{Al} \cdot (1 - x)$

Innsatt: $9040 = 64500 \cdot \exp -((39.07 \cdot x + 46.93 \cdot (1-x))\ \text{cm}^2/\text{g} \cdot 2.229\ \text{g/cm}^3 \cdot 2 \cdot 10^{-2}\ \text{cm}$

$$\frac{\ln\left(\dfrac{64500}{9040}\right)}{2.229 \cdot 2 \cdot 10^{-2}} = (39.07 - 46.93)\,x + 46.93$$

$$x = \frac{\dfrac{\ln\left(\dfrac{64500}{9040}\right)}{2.229 \cdot 2 \cdot 10^{-2}} - 46.93}{(39.07 - 46.93)} = 0.3628$$

$\underline{x = 0.363\ (\text{Mg})\ \text{og}\ (1-x) = 0.637\ (\text{Al})}$

b) Masseabsorpsjonskoeffisienten $(\mu/\rho) \propto Z^3$ mellom absorpsjonskantene. $Z_{\text{Si}} = 14$, $Z_{\text{Al}} = 13$ dvs. vi venter at (μ/ρ) og dermed også absorpsjonen øker om Al erstattes med Si.