

Kollokvieoppgaver i pulver-nøytondiffaksjon – MENA3100 (vår 2017)

Oppgave 1

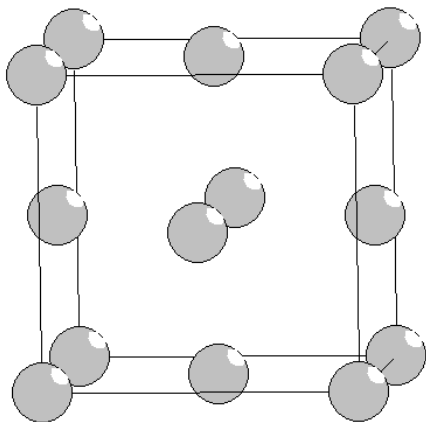
Vurder om pulver-røntgen- eller nøytrondiffaksjon (PXD/PND) er best egnet for de følgende problemstillingene:

- Bestemme den magnetiske strukturen til en antiferromagnet.
- Identifisere de krystallinske fasene i en geologisk prøve.
- Bestemme strukturen til YH_{2+x} .
- Bestemme strukturen til MgB_2 .
- Undersøke fordelingen av Co og Fe i $\text{Sr}(\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2})\text{O}_{2.8}$.
- Undersøke stabiliteten til et materiale under 1 kbar N_2 -gass.
- Følge faseutviklingen under hurtig hydrogenabsorpsjon i LaNi_5 -legering.

Oppgave 2

Du har varmet opp en klump med titan til 300°C under 20 bar deuterium. En rask PXD-måling viser at materialet er flatesentrert kubisk (fcc) med en akselengde $a = 4.55 \text{ \AA}$. Metallisk titan er heksagonalt. Du mistenker at materialet har tatt opp en betydelig mengde deuterium og dannet et metalldeuterid, f.eks. TiD_2 .

- a) Hvis du antar at produktet faktisk er TiD_2 , hva er den mest sannsynlige posisjonen til D i fcc-strukturen av Ti?

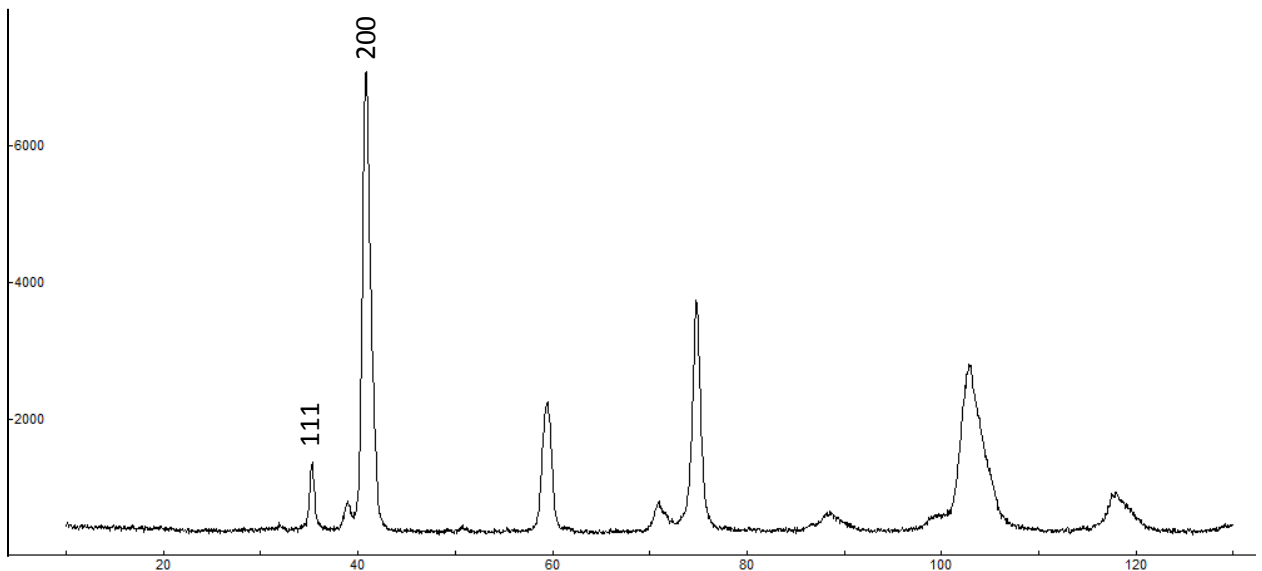


fcc-struktur

- b) Du ønsker å avgjøre om svaret i a) stemmer ved hjelp av pulverdiffraksjon. Regn ut intensitetsforholdet du kan forvente ved PXD mellom Bragg-refleksene med Millerindeks 111 og 200 for fcc titan med og uten deuterium. Anta at de atomære

spredningsfaktorene (b_i i likningen for strukturfaktoren) er konstanter og lik antall elektroner for hvert atom.

- Gjenta beregningene i b) for PND. Spredningslengdene for nøytroner er $b(\text{Ti}) = -3.30 \text{ fm}$ og $b(\text{D}) = 6.67 \text{ fm}$.
- Hva er intensiteten til 100-refleksen?
- Sammenlikn svaret i c) med PND-dataene for materialet på neste side. Støtter beregningene i c) modellen du forslo i a)?
- Hva slags videre skritt kan du ta for å få en mer entydig konklusjon? Hva slags ekstra informasjon kan et slikt skritt gi?



PND data for Ti varmet til 350°C i 20 bar D₂-atmosfære. Bragg-refleksene kan indekseres i henhold til en fcc enhetscelle og de to første refleksene er indeksert (den svake refleksen ved 2theta ~39° er fra en forurensningsfase). $\lambda = 1.555 \text{ \AA}$.

Nyttige likninger

$$F_{hkl} = \sum_i b_i \cdot e^{2\pi i(hx_i + ky_i + lz_i)} = \sum_i b_i \cdot (\cos(2\pi(hx_i + ky_i + lz_i)) + i \sin(2\pi(hx_i + ky_i + lz_i)))$$

$$I_{hkl} \propto |F_{hkl}|^2$$