

**TEKST NR 201**

**1990**

Undersøgelse af atomare korrelationer  
i amorfe stoffer  
ved røntgendiffraktion  
af:

Karen Birkelund  
Klaus Dahl Jensen

Vejledere :  
Petr Višćor  
Ole Bakander

IMFUFA, Roskilde Universitetscenter  
Postbox 260, 4000 Roskilde

7 juni 1990

**TEKSTER fra**

**IMFUFA**

**ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER**  
INSTITUT FOR STUDIET AF MATEMATIK OG FYSIK SAMT DERES  
FUNKTIONER I UNDERVISNING, FORSKNING OG ANVENDELSER

IMFUFA, Roskilde Universitetscenter, Postboks 260, 4000 Roskilde

Undersøgelse af atomare korrelationer i amorfe stoffer ved  
røntgendiffraktion.

af: Karen Birkelund og Klaus Dahl Jensen

Vejledere: Petr Viscor og Ole Bakander

IMFUFA tekst nr. 201/90 88 sider

ISSN 0106-6242

---

Abstract:

I denne tekst søges opstillet en procedure til eksperimentel undersøgelse af atomare korrelationer i monatomiske, amorfe stoffer (eksemplificeret ved amorf germanium) ved brug af røntgendiffraktometri, på baggrund af klassisk spredningsteori.

Teksten er inddelt i to hovedafsnit:

1) En generel, teoretisk del, indeholdende en gennemgang af forskellige typer vekselvirkninger mellem røntgenstråling og atomer, samt udledning af et feltudtryk for stråling, elastisk (og dermed coherent) spredt på monatomiske stoffer.

På baggrund heraf udledes endelig en relation mellem atomare korrelationer i stoffet og intensiteten af den coherent spredning.

2) En eksperimentel del omfattende en gennemgang af den anvendte eksperimentelle procedure (til fremstilling af Ge-prøver og optagelse af røntgenspektre) og udledning af algoritmer til databehandling – det vil sige korrektion af måledata for absorption, fluorescence og inelastisk spredning med videre, samt normalisering af de korrigerede data.

Endelig fremstilles og diskuteres vore eksperimentelle resultater.

# Indledning

I et laboratorium på IMFUFA (Roskilde Universitet Center), er opstillet et Philips røntgendiffraktometer med tilhørende højspændingsgenerator, kontrolenhed og køleanlæg.

Diffraktometeret er primært konstrueret til kvalitativ og semikvantitativ identifikation af krystallinske materialer.

Vor vejleder gennem første halvdel af projektforløbet, Niels Boye Olsen foreslog os, som et eksperimentelt dybdemodul-projekt i fysik, at udvikle en hensigtsmæssig eksperimentel procedure til strukturel analyse af *amorfe* stoffer ved brug af det omtalte apparat; samt ved en vurdering af de eksperimentelle resultater, opnået med denne procedure at afgøre, hvorvidt apparatet overhovedet egner sig hertil.

Kort sagt: Vi gik ind på forslaget og problemstillingen, der ligger til grund for dette projekt, er den ovenfor specificerede.

Vi forestillede os straks fra begyndelsen, at projektforløbet logisk måtte falde i fire dele:

- 1) Fremstilling af amorfe tyndfilm.
- 2) Optagelse af diffraktionsspektre.
- 3) Databehandling med henblik på (a) relevante korrektioner af diffraktionsdata, (b) at fremskaffe information om atomare korrelationer på grundlag af således korrigerede røntgenspektre.
- 4) Vurdering af eksperimentelle resultater.

Heraf måtte (lige så logisk) den absolutte hovedvægt lægges på punkterne 2), 3) og 4) ifølge projektets erklærede formål. Ikke desto mindre er der brugt lang tid på fremstillingen af amorfe tyndfilm, blandt andet på grund af problemer med at undgå krystallisation.

I praksis må imidlertid føjes endnu et punkt til listen, nemlig udvikling af det nødvendige programmel til opsamling og lagring af diffraktionsdata samt til analyse heraf. Analysedelen findes bagest i projektrapporten, (software udviklet til dette formål kan købes hos Philips, men er efter sigende meget dyrt, og da disse tider ikke er til store ekstrabevillinger, måtte vi selv igang!).

Set i relation til gældende studietidsnormering (et projekt pr. semester) var dette uheldigt, eftersom programudviklingen, selv med Ole Bakanders engagerede og kvalificerede bistand, for hvilken vi er ham tak skyldig, tog os rundt regnet et halvt semester. Men nu ligger programmet der, forhåbentlig til gavn for eventuelle andre, der måtte have lyst til at forsøge sig udi røntgendiffraktometriens mysterier.

Ifølge studieordningen kan et dybdeprojekt omhandle fagdidaktik eller eksperimentelt arbejde; herunder blandt andet metodeudvikling. Dette projekt falder i sidstnævnte kategori.

Rapporten er opdelt i tre dele; en teoretisk del, som ligger til grund for den endelige eksperimentelle korrektion, en eksperimentel del indeholdende eksperimentel opsætning samt apparatur og behandling af eksperimentelle data, endelig en tredje del, hvor projektets resultater fremlægges og diskuteres efterfulgt af konklusion.

Det skal her pointeres, at samtlige teoretiske udledninger er fortaget på et klassisk grundlag.

# Indhold

<b>1 Røntgen-diffraktion, Teori</b>	<b>5</b>
1.1 Røntgenstråling . . . . .	5
1.2 Vekselvirkning af røntgenstråling med stof . . . . .	8
1.2.1 Absorption . . . . .	9
1.2.2 Spredningsprocesser . . . . .	10
1.2.3 Polarisering . . . . .	15
1.3 Den elektriske feltstyrke af røntgenstråling, spredt coherent på stof . . . . .	17
1.4 Atomare korrelationer udtrykt ved den coherent spredningsintensitet . . . . .	22
1.4.1 Spredningsintensiteten relateret til Van Hoove's korrelationsfunktion . . . . .	23
1.4.2 Den radiale distributionsfunktion . . . . .	25

<b>2</b>	<b>Eksperimentel procedure</b>	<b>29</b>
2.1	Fremstilling af amorfe germaniumfilm ved pådampning . . . . .	30
2.1.1	Pådamplingskammeret . . . . .	31
2.1.2	Fremgangsmåde ved pådampningen . . . . .	33
2.2	Optagelse af diffraktionsspektre . . . . .	35
2.2.1	Røntgendiffraktometeret . . . . .	35
2.2.2	Valg af røntgentarget . . . . .	38
2.2.3	Målestrategi . . . . .	40
2.3	Databehandling . . . . .	44
2.3.1	Extrapolation fra intervalgrænserne . . . . .	44
2.3.2	Korrektion og normalisering . . . . .	46
2.4	Grafiske repræsentationer af eksperimentelle data . . . . .	56
2.4.1	Sample 1 (GEP1-s16) . . . . .	57
2.4.2	Sample 2 (GEP3-s25) . . . . .	62
<b>3</b>	<b>Diskussion og konklusion</b>	<b>69</b>
3.1	Konklusion . . . . .	75
<b>A</b>	<b>Beregning af lineære absorptionskoefficienter.</b>	<b>77</b>

# Kapitel 1

## Røntgen-diffraktion, Teori

### 1.1 Røntgenstråling

Røntgenstråling er elektromagnetisk stråling i energiområdet fra  $1,2 \cdot 10^3 eV$  til  $2,4 \cdot 10^5 eV$ . Det tilsvarende bølgelængdeområde ligger fra omkring  $10^{-9} m$  til  $6 \cdot 10^{-12} m$  og frekvensintervallet er fra  $3 \cdot 10^{17} Hz$  til  $5 \cdot 10^{19} Hz$ .

Røntgenstråling kan frembringes i et katoderør (eller røntgenrør), hvor anoden består af et materiale også kaldet target. Ved at sætte spænding over katoderøret accelereres elektroner fra den negative katode mod den positive anode; elektronstrømmen fra katode til anode kaldes katodestråling. Elektronerne kan vekselvirke med target-materialet på to måder, hvorved der frembringes røntgenstråling.

Når elektronerne passerer gennem target, vil de elektriske felter om targetatomernes kerner decelerere disse, hvorved deres energi reduceres. Energitalbet  $\Delta E$  emitteres som stråling, også kaldet bremsestråling. Den emitterede stråling kan maksimalt have en energi svarende til de indkommende elektroners energi, som er bestemt af spændingen over katoderøret. Energien af den emitterede foton er lig elektronens energitalb, når den bremses, og er givet ved  $\Delta E = h\nu$ , hvor  $h$  er Plancks konstant og  $\nu$  er frekvensen. Hvis accelerationsspændingen er i størresordenen kV, vil den emitterede stråling ligge i røntgenområdet. Det fremkomne spektrum er et bredt kontinuum af varierende bølgelængde/energi. Spektralfordelingen af bremsestrålingen kaldes for det

kontinuerte spektrum. På nedenstående figur ses det kontinuerte spektrum for røntgenstråling fra et wolfram target. (Klug og Alexander, X-ray diffraction procedures s.80)

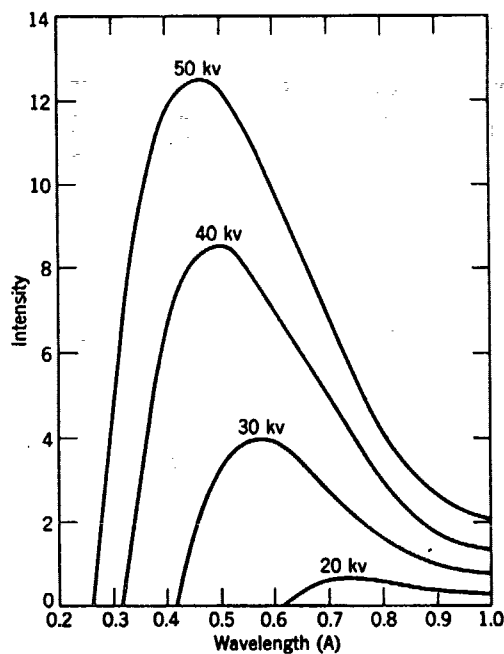


Fig. 1

Intensiteten af bremsestrålingen afhænger både af targetmaterialet og rørspændingen, idet intensiteten øges med stigende atomnummer og stigende rørspænding.

En anden type røntgenstråling opstår, når elektronerne trænger ind i targetmaterialet og eksiterer dets atomer. I et atom betegnes de mulige elektron-energiniveauer skaller. Traditionelt navngives disse skaller K, L, M og så videre, idet K-skallen er den tættest kernen, L-skallen næsttættest og så fremdeles. De elektroner, der befinder sig i K-skallen, er stærkest bundet og kaldes for K-elektroner, og så videre.

Når elektronerne trænger ind i target, kan dets atomer som nævnt eksiteres, idet atomernes elektroner absorberer energi fra de indkommende elektroner, og derved ændrer energitilstand. Den energi der skal til for at eksitere en K-elektron til en anden energitilstand og herved danne en K-vacans, kaldes K-eksitationsenergien og betegnes  $E_K$ . Hvis energien er mindre end  $E_K$ , kan en af de ydre elektroner eksiteres alt afhængig af energiens størrelse. Efter et gennemsnitligt tidrum afhængig af, hvilket



atom og hvilken vacans der er tale om, vil elektroner fra andre skaller henfalde under emission af fotoner med energi svarende til differensen mellem de to niveauer.

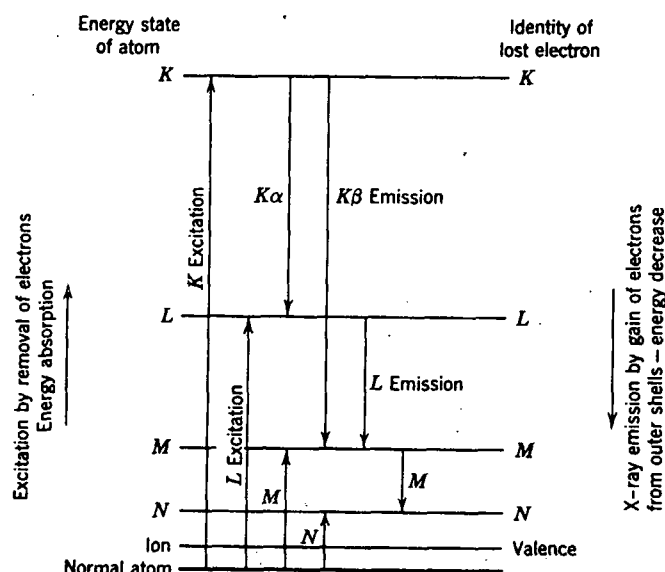


Fig. 2: Skematisk energiniveau diagram for et mange-elektron atom. (Klug og Alexander, X-ray diffraction procedures s.85)

Hvis en L-elektron henfalder til K-skallen udsendes  $K_{\alpha}$ -stråling,  $K_{\beta}$ -stråling emitteres hvis henfaldet sker fra M-skallen.  $K_{\alpha}$ -strålingen er delt i to linier:  $K_{\alpha 1}$  og  $K_{\alpha 2}$ . På tilsvarende måde benævnes strålingen, emitteret ved overgange til de øvrige skaller.

I det fremkomne spektrum vil man observere en veldefineret top, hvor strålingen når et maksimum i intensitet. Denne skarpe top svarer til en bestemt energi alt afhængig af hvilket targetmateriale der benyttes. Øges spændingen over katoderøret vil flere skarpe toppe fremkomme svarende til L- og M-linierne. Dette spektrum kaldes det karakteristiske spektrum.

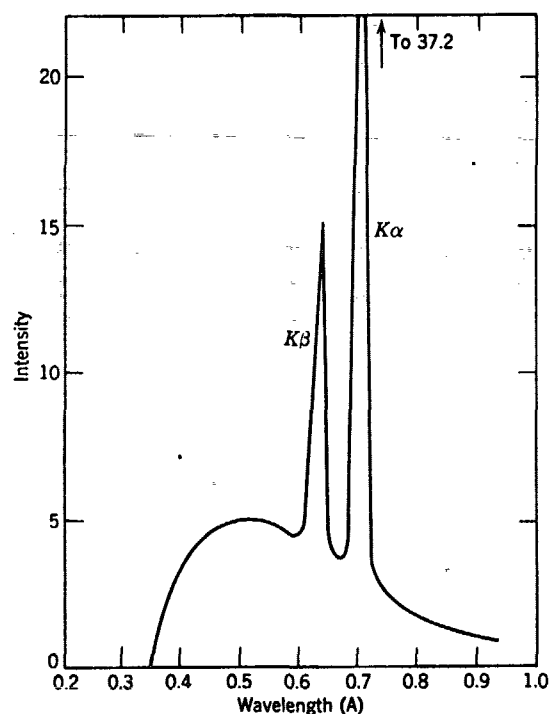


Fig. 3: Intensitetskurve for røntgenstråling fra et molybdæn target. (Klug og Alexander, X-ray diffraction procedures s.82)

På ovenstående figur ses det kontinuerte spektrum overlejret af de nævnte karakteristiske toppe. Man skal op på en vis energi for at se den karakteristiske røntgenstråling. Denne energi afhænger af, hvilket materiale der beskydes.

## 1.2 Vekselvirkning af røntgenstråling med stof

Der vil i det følgende blive redegjort for processer, som bevirker en reduktion af intensitet, når stråling i røntgenområdet vekselvirker med elektronerne i det materiale strålingen passerer.

Under forudsætning af, at røntgenstrålingen er monokromatisk, hvilket vil sige stråling af samme bølgelængde, og er absorbereren homogen og isotrop, kan denne reduktion udtrykkes ved:

$$I = I_0 e^{-\mu x}$$

hvor  $I_0$  er den oprindelige strålingsintensitet,  $\mu$  er den lineære absorptionskoefficient (enhed: reciprok længde),  $x$  er stoffets tykkelse, og  $I$  er den transmitterede strålingsintensitet.

Der er to effekter at skelne mellem, når man taler om tab i intensitet. Den ene er den rene absorption, og den anden er spredningen. Ved den rene absorption sker en overførsel af hele røntgenkvantets energi til elektronerne. Til den rene absorption er knyttet absorptionskoefficienten  $\tau$ .

Ved spredningsprocesser overføres en del af fotonens energi og impuls til absorberatomernes elektronsystemer, hvorefter fotonen fortsætter med en anden energi og impuls. Er differensen af fotonens energien før og efter spredning nul, siges spredningen at være elastisk. Er differensen forskellig fra nul, er der tale om uelastisk spredning.

Til spredning knyttes spredningskoefficienten  $\sigma$ . Den totale lineære absorptionskoefficient  $\mu$  er givet ved:

$$\mu = \tau + \sigma$$

### 1.2.1 Absorption

Den rene absorption skyldes flere processer, der i blandt den fotoelektriske effekt og fluorescens.

Fotoelektrisk effekt er en proces, hvor elektroner i stoffet absorberer energi fra elektromagnetisk stråling, som er større end eller lig med deres bindingsenergi, hvorved de løsriveres fra stoffet og forlader dette med en kinetisk energi:

$$\frac{1}{2}mv^2 = E - E_b$$

hvor  $E = h\nu$  og  $E_b$  er elektronens bindingsenergi. Hvis  $E < E_b$  vil elektronen ikke løsriveres. Det er forskelligt, hvor stor en energi de forskellige elektroner skal have tilført for at være i stand til at forlade materialet. For hvert stof er der en nedre grænse  $E_0$ , som kaldes løsrivelsesenergien, således at maksimum for elektronernes kinetiske energi bliver:

$$\frac{1}{2}mv_{max}^2 = E - E_0 = h\nu - E_0$$

Fotoelektrisk effekt er ansvarlig for en stor del af absorptionen af røntgenstråling, når denne passerer gennem stof.

Fluorescens kan opstå som en følge af den fotoelektriske effekt, ved at elektroner fra højere energitilstande henfalder til vacansen, hvor en elektron er blevet fjernet. Ved dette henfald udsendes elektromagnetisk stråling (fluorescensstråling). Fluorescensstrålingen kan ikke have energi større end energien af den indkommende røntgenstråling.

Fluorescens kan også opstå, hvis røntgenstrålingen eksiterer atomet ved, at en elektron fra atomets indre skaller eksiteres til en ydre skal, det vil sige en højere energitilstand. Efter en tid kan elektroner henfalde under udsendelse af stråling. Denne proces kræver, at den indkommende strålings energi svarer til energiforskellen mellem to skaller.

Fluorescensstrålingen siges at være incoherent, eftersom der på grund af tidsforskydningen mellem absorption og emission, ingen faserelation er mellem den indkommende stråling og fluorescensen.

### 1.2.2 Spredningsprocesser

Ved spredning af elektromagnetisk stråling på en elektron, kan elektronen betragtes som en sekundær kilde til elektromagnetisk stråling. Den spredte stråling udbreder sig som kuglebølger væk fra elektronen, ifølge Huygens princip.

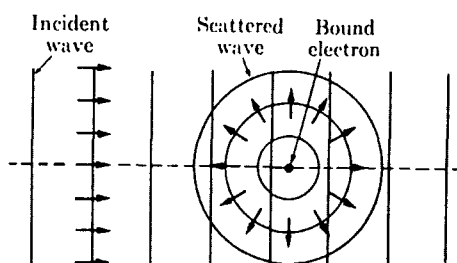


Fig. 4: Spredning af elektromagnetisk stråling på en bunden elektron. (Alonso/Finn, Fundamental university physics vol.II, s.376)

Spredes elektromagnetisk stråling på et atom vil strålingen spredes på hver enkelt elektron i atomets elektronsystem. Man kan dog tilnærmelsesvis betragte hele atomet som en punktkilde for den spredte stråling.

Intensiteten af den spredte stråling afhænger af, hvilken type atom der spreder og retningen af den spredte stråling.

Grundlæggende skelnes mellem elastiske og uelastiske spredningsprocesser.

### Elastisk spredning

Ved elastisk spredning forstås, som før nævnt, at den spredte stråling har samme energi (og dermed bølgelængde) som den indkommende stråling. Er den indkommende stråling monokromatisk og spredningen elastisk, vil der være en fast faserelation mellem de spredte bølger og den indkommende bølge: det vil sige spredningen er coherent, den spredte stråling fra elektronerne interfererer. Ved elastiske spredningsprocesser ændres den indre energi hos det spredende atom ikke.

### Uelastisk spredning

Uelastisk spredning opstår, klassisk set, når en foton kolliderer med en relativt løst bunden elektron. Ved det uelastiske sammenstød overføres energi og impuls fra fotonen til elektronen. Der sker en ændring af fotonens impuls – fotonen ændrer retning – og spredes med en ændret energi.

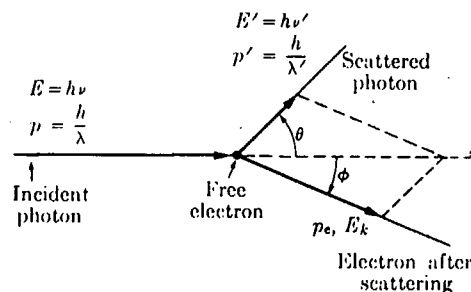


Fig. 5: Impuls- og energi-relationer ved uelastisk spredning. (Alonso/Finn, Fundamental university physics vol.II, s.383)

Energien (og dermed bølgelængden) for den uelastisk spredte stråling afhænger af spredningsvinklen  $\Theta$  ifølge relationen:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

hvor  $\lambda$  er bølgelængden af den oprindelige stråling, og  $\lambda'$  er bølgelængden af den spredte stråling.

Denne form for spredning kaldes incoherent diffus spredning, når den sker på atomer, idet den spredte stråling fra de enkelte elektroner ikke er i fase, fordi dens energi afhænger af elektronernes impuls og derfor ikke interfererer. Uelastisk spredning på en fri elektron kaldes også for Comptonspredning.

### Absorptionskanter

Den totale absorptionskoefficient for et givet materiale varierer med bølgelængden af røntgenstrålen der passerer det. Bestemmes absorptionskoefficienten for et materiale ved forskellige bølgelængder og plottes disse med  $\lambda$  på førsteaksen og  $\mu$  på andenaksen, ses det, at  $\mu$  aftager, når  $\lambda$  bliver mindre, endvidere observeres nogle diskontinuiteter. Disse diskontinuiteter betegnes for materialets kritiske absorptionskanter og benævnes henholdsvis K-absorptionskanten og  $L_{I-III}$ -absorptionskanten osv.

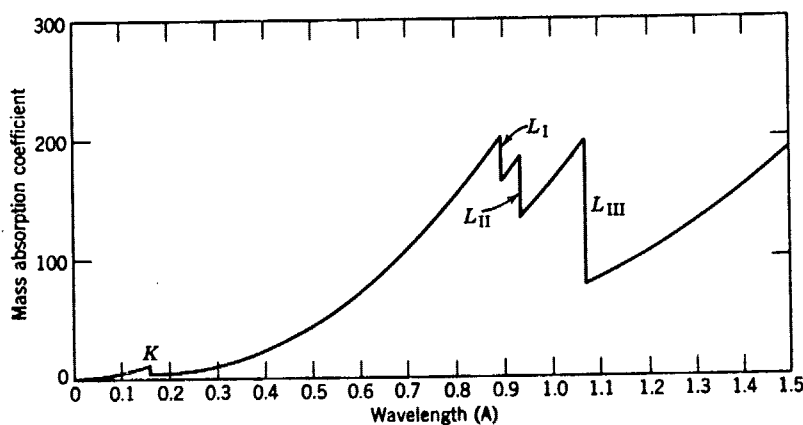


Fig. 6: Plot af absorptionskoefficient som funktion af bølgelængde. (Klug og Alexander, X-ray diffraction procedures s.93)

Absorptionskanterne markerer de punkter, hvor røntgenstrålingens energi er stor nok til at eksitere en elektron fra en K-, L-, eller M-skal og så videre. Når energien nærmer sig minimumsenergien for at løsrive en L-elektron, sker der en forøgelse af  $\mu$ .

### Røntgenfiltre

Det emitterede røntgenspektrum fra et røntgenrør består som tidligere sagt af det kontinuerte spektrum overlejret af de karakteristiske toppe med bølgelængder, der er karakteristiske for target-materialet i røntgenrøret. Ved diffraktionseksperimenter er det nødvendigt, at den røntgenstråling, der benyttes, er monokromatisk. Det er derfor af interesse at isolere den del af røntgenstrålingen med den ønskede bølgelængde fra resten af spektret. Det er dog ikke altid nødvendig med streng monokromatisk stråling; ofte er det tilstrækkelig at dæmpe en overvejende del af strålingsintensiteten, således at stråling med den ønskede bølgelængde er dominerende.

Dette kan gøres ved at vælge et materiale af en passende tykkelse som absorberer røntgenstrålingen på nær den stråling, der ønskes isoleret. Et sådan materiale betegnes røntgenfilter.

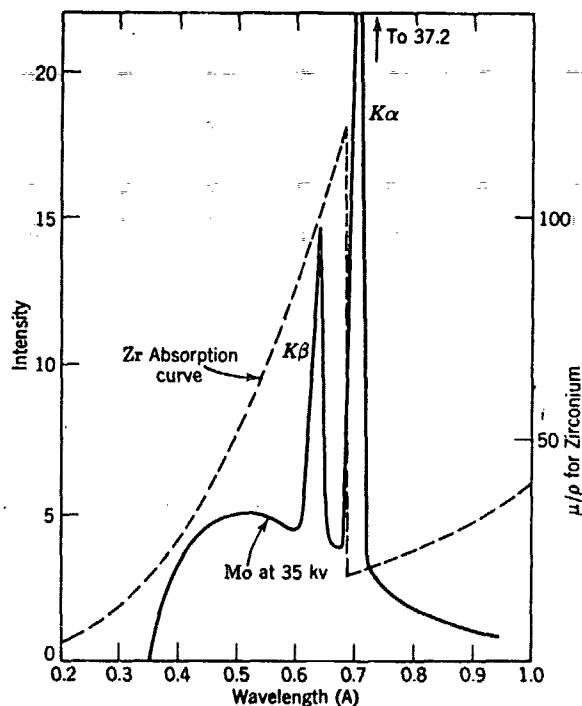


Fig. 8: Zirconium absorptionskurve overlejret af ståling fra et molybdæn target. (Klug og Alexander, X-ray diffraction procedures s.101)

Ofte er det tilstrækkeligt at isolere  $K_{\alpha}$ -toppen. Da gælder det om at vælge et filter af et materiale med en K-absorptionskant, der ligger lige under og så tæt som muligt på  $K_{\alpha}$ -toppens absorptionskant. Filtermateriale og tykkelse afhænger af hvilket targetmateriale der benyttes.

For et røntgenrør med molybdentarget emitteres  $K_{\alpha 1}$ -toppen med en bølglængde på 0,70926 Å og  $K_{\alpha 2}$ -toppen med en bølglængde på 0,71354 Å. Af udtrykket  $(2\lambda_{K_{\alpha 1}} + \lambda_{K_{\alpha 2}})/3$  (Azaroff, Elements of X-ray crystallography s.102) fås den karakteristiske bølglængde for  $K_{\alpha}$ -dupletten til 0,7107 Å. Zirconium har K-absorptionskant ved bølglængden 0,68877 Å og absorberer derfor røntgenstråling med bølglængder under 0.68877 Å. Tykkelsen af zirconiumfiltret afhænger af, hvor meget af den uønskede stråling der ønskes fjernet og kan beregnes af:

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\mu x}$$



hvorved man ved forskellige valgte tykkelser kan se hvor stor en del af strålingen der transmitteres.

### 1.2.3 Polarisation

I forrige afsnit blev det nævnt at når røntgenstråling spredes på atomer vil intensiteten være retningsafhængig. Dette vil der nu blive gjort rede for.

Sendes upolariseret karakteristisk røntgenstråling ind på en fri elektron, hvor den spredes elastisk, vil den efter spredningen være delvis polariseret. Hvor meget strålen polariseres afhænger af spredningsvinklen ( $2\theta$ ).

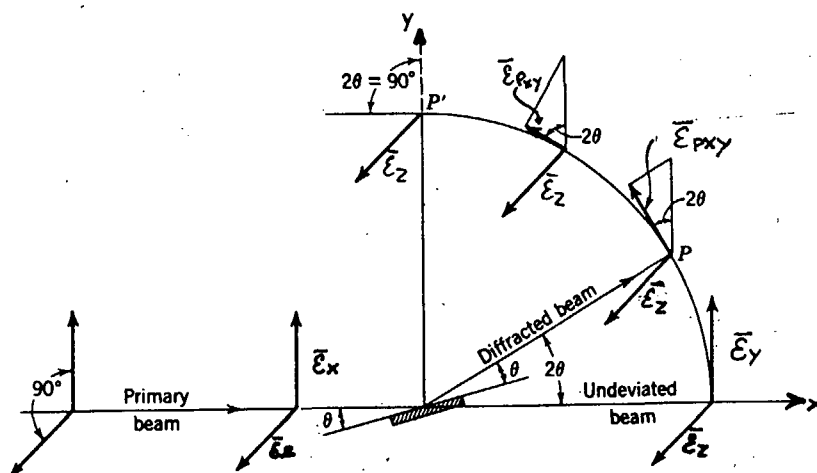


Fig. 9: Polarisation af en spredt røntgenstråle på en fri elektron. (Klug og Alexander, X-ray diffraction procedures s.133)

En upolariseret røntgenstråle sendes ind på en elektron. Før spredning vil det elektriske felt svinge i alle retninger vinkelret på udbredelsesretningen. Betragtes disse tilfældigt orienteret  $\vec{E}$ -feltvektorer opløst i to lige store vinkelrette enhedsvektorer  $\vec{E}_y$  og  $\vec{E}_z$ , vil de hver have amplitude proportional med  $\frac{\sqrt{2}}{2}$ . (Klug og Alexander, X-ray diffraction procedures s.132)

Når strålen rammer elektronen vil elektronen sættes i tvungne vibrationer parallel med feltvektorerne og vinkelret på udbredelsesretningen.

Den spredende elektron udsender ingen energi parallelt med vibrationsretningen. Vinkelret på vibrationsretningen udsendes maksimal energi. De to grænsetilfælde er da  $2\theta = 0^\circ$  og  $2\theta = 90^\circ$

Ved  $2\theta = 0^\circ$  afviger strålen ikke fra den oprindelige udbredelsesretning, og her vil ingen polarisation af strålen være.  $\vec{\mathcal{E}}_y$  og  $\vec{\mathcal{E}}_z$  vil optræde ved fuld styrke. Ved  $2\theta = 90^\circ$  vil  $\vec{\mathcal{E}}_z$ -komponenten optræde for fuld styrke,  $\vec{\mathcal{E}}_y$ -komponenten vil derimod ikke kunne observeres, idet der ingen energiudstråling er parallelt med vibrationsretningen.

Langs den elastisk spredte stråle ved P vil  $\vec{\mathcal{E}}_z$  stadig agere for fuld styrke, mens  $\vec{\mathcal{E}}_y$  vil være svækket afhængig af spredningsvinklen  $2\theta$ .

Der kan nu udledes et udtryk for polarisationsfaktoren i punktet P for en vilkårligt valgt spredningsvinkel  $2\theta$ .

Lad  $\vec{\mathcal{E}}_{pxy}$  være  $\vec{\mathcal{E}}_y$ 's projektion på normalen til den elastisk spredte røntgenstråles udbredelsesretning.  $\vec{\mathcal{E}}_{pxy}$  kan da udtrykkes ved

$$\vec{\mathcal{E}}_{pxy} = \vec{\mathcal{E}}_y \cos 2\theta$$

og

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_{pxy} + \vec{\mathcal{E}}_z$$

Endvidere observeres det at  $\vec{\mathcal{E}}_{pxy} \perp \vec{\mathcal{E}}_z$ .

$\vec{\mathcal{E}}_z$  polariseres ikke uanset spredningsvinklen og findes ved fuld styrke ved P og har amplitude proportional med  $\frac{\sqrt{2}}{2}$ .  $\vec{\mathcal{E}}_y$  polariseres alt efter spredningsvinklen.

Lad  $\vec{\mathcal{E}}_{pxy}$  være  $y$ -komponentens bidrag i punktet P ved spredningsvinklen  $2\theta$ , da vil amplituden være proportional med  $\frac{\sqrt{2}}{2} \cos 2\theta$ .

Da intensiteten er proportional med kvadratet på amplituden og amplituden er proportional med  $\frac{\sqrt{2}}{2}$ , fås et udtryk for intensiteten af røntgenstrålingen i punktet P:

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_{pxy} + \vec{\mathcal{E}}_z \Leftrightarrow$$

$$\mathcal{E} = \sqrt{(\mathcal{E}_{pxy})^2 + (\mathcal{E}_z)^2 + \mathcal{E}_{pxy}\mathcal{E}_z \cos 90} \Leftrightarrow$$

$$\mathcal{E}^2 = (\mathcal{E}_{pxy})^2 + (\mathcal{E}_z)^2$$

Intensiteten er da:

$$\begin{aligned} I \propto \mathcal{E}^2 &= \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2 \cos^2 2\theta + \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2 \\ &= \frac{1}{2} \cos^2 2\theta + \frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{2}(1 + \cos^2 2\theta) \end{aligned}$$

hvilket er polarisationsfaktoren.

Polarisationsfaktoren indgår i Thomson's ligning, som i cgs-enheder beskriver spredningen af elektromagnetisk stråling på en fri elektron:

$$\mathcal{E}_e = \mathcal{E}_0 \frac{e^2}{Rmc^2} \sqrt{\frac{1 + \cos^2 2\Theta}{2}}$$

$c$  er lyshastigheden,  $m$  er elektronens hvilemasse,  $e$  er elementarladningen,  $R$  er afstanden fra elektronen til det punkt, hvor feltstyrken af den spredte stråle registreres,  $\mathcal{E}_e$  er feltstyrken af den spredte stråling, og  $\mathcal{E}_0$  er feltstyrken af den indkommende stråling.

### 1.3 Den elektriske feltstyrke af røntgenstråling, spredt coherent på stof

#### Røntgenspredning på atomer og atomsystemer

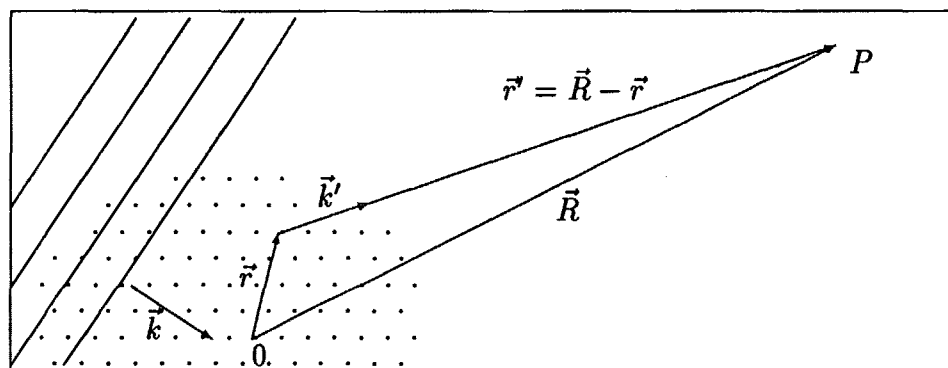
Som ovenfor beskrevet, er den elastiske spredning på en individuel, isoleret elektron givet ved Thomson's ligning. Ved spredning på hele atomer, må imidlertid tages i betragtning at afstandene mellem elektroner i et atom, er sammenlignelige med bølgelængden af røntgenstråling. I retningen parallelt med den indkommende strålings udbredelsesretning, er den totale feltamplitude fra spredning på et atom stadig  $Z \mathcal{E}_e$ , hvor  $Z$  er det pågældende atom's nummer; Men for spredning i enhver anden retning, vil vejlængdeforskellen — fra strålingskilde, til spredende elektron, til det pågældende rum punkt — med hensyn til de individuelle elektroners placeringer i atomet, give anledning til en delvis, destruktiv interferens. Den totale feltamplitude aftager således for voksende spredningsvinkel.

Et lignende fænomen observeres ved spredning på en mængde af et givent materiale, idet interferensen i dette tilfælde opstår på grund af fasedifferenser for stråling, spredt på individuelle atomer og molekyler i stoffet. For di- og polyatomiske materialer, skelnes i den forbindelse mellem en intern interferens mellem atomer ordnet i molekulare strukturer, og en extern interferens mellem individuelle molekyler. For monatomiske stoffer, er naturligvis kun den externe interferenseffekt aktuel.

I materialer med relativt veldefinerede interatomare middelfastande (såsom væsker og amorfe stoffer, i modsætning til gasser), bliver interferenseffekten særligt udpræget, med karakteristiske diffraktions"toppe", svarende til disse middelfastande. For et sådant stof er det muligt, på basis af diffraktionsspektre, at drage konklusioner vedrørende stoffets atomkonfiguration.

Med dette mål for øje, udledes nedenfor en ligning for den elektriske feltstyrke, af coherent spredning på et monatomisk sample. I afsnit 1.4 vises med udgangspunkt heri, hvordan spredningsintensiteten er relateret til tæthedsfordelingen af samplets atomer.

På nedenstående figur er skitseret udbredelsen i et fast stof af en plan, elektromagnetisk bølge med bølgetalsvektor  $\vec{k}$ . Positionen af et af samplets atomer er bestemt ved stedvektoren  $\vec{r}$ , udfra et arbitrært nul-punkt. Ved detektorpunktet  $P$  detekteres elastisk spredt stråling fra dette atom.



Mellem punkterne 0 og  $r$ , er fasedifferensen for den indkommende bølge givet ved:

$$\vec{k} \cdot \vec{r} = \frac{2\pi}{\lambda} r \cos(\vec{r}, \vec{k})$$

Til tiden  $t = 0$ , er bølgens fasefaktor ved  $\vec{r}$  altså:

$$e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}+\alpha)} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i\alpha}$$

hvor  $\alpha$  er bølgefasesen ved 0. Da vi imidlertid kun er interesseret i fasefaktoren ved  $\vec{r}$  relativt til nulpunktet, vil vi blot betegne den med udtrykket,  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ . Antages nu at en del af den indkommende stråling spredes på atomet, placeret ved  $\vec{r}$ , observeres ved detektorpunktet  $P$  da stråling, med en  $\mathcal{E}$ -feltstyrke, som er proportional med fasefaktoren,  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ , for den indkommende stråling ved  $\vec{r}$ , og med fasefaktoren  $e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} = e^{ik'r'}$  for den spredte stråling ved  $P$ . Den totale fasefaktor ved  $P$  (relativt til nulpunktet) er derfor:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{ik'r'} = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}+k'r')} \quad (1.1)$$

Imidlertid kan  $r'$  også skrives:

$$\begin{aligned} r' &= \sqrt{R^2 + r^2 - 2rR \cos(\vec{r}, \vec{R})} \\ &= R\sqrt{1 + r^2/R^2 - 2(r/R) \cos(\vec{r}, \vec{R})} \end{aligned}$$

Men da  $r$  er af størrelsesorden som samplets tykkelse, mens  $R$  svarer til afstanden fra sample til detektor, har vi at  $r^2 \ll R^2$ , hvorfor der gælder:

$$r' \simeq R\sqrt{1 - 2(r/R) \cos(\vec{r}, \vec{R})}$$

Taylorudvikling af dette giver:

$$\begin{aligned} r' &\simeq R - \frac{\cos(\vec{r}, \vec{R})}{\sqrt{1 - 2(r/R) \cos(\vec{r}, \vec{R})}} r + \varepsilon(r)r \\ &\simeq R - r \cos(\vec{r}, \vec{R}) \end{aligned}$$

Fasefaktoren ved  $P$  kan derfor også skrives:

$$e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}+k'R-k'r \cos(\vec{r}, \vec{R}))}$$

Eftersom  $k'R$  blot er et konstant bidrag til bølgefasesen ved  $P$ , uagtet placeringen af det spredende atom i samplet, ser vi bort herfra og får:

$$e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-k'r \cos(\vec{r}, \vec{R}))}$$

I praksis er vektorerne  $\vec{r}$  og  $\vec{R}$  tilnærmelsesvis parallelle, således at  $\cos(\vec{r}, \vec{R}) \simeq \cos(\vec{r}, \vec{r}')$ , hvilket indsat heri giver:

$$\begin{aligned} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - k' r \cos(\vec{r}, \vec{r}'))} &= e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} \\ &= e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r}} \end{aligned} \quad (1.2)$$

hvor  $\Delta\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$  fremover betegnes spredningsvektoren. Vinklen mellem vektorerne  $\vec{k}$  og  $\vec{k}'$  er *spredningsvinklen*, og sættes til  $2\theta$ . Idet  $k' = k$ , for coherent spredning, har  $\Delta k$  størrelsen:

$$\begin{aligned} \Delta k &= \sqrt{2k^2(1 - \cos 2\theta)} \\ &= \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{2(1 - \cos 2\theta)} \\ &= \frac{2\pi}{\lambda} \sqrt{4 \sin^2 \theta} \\ &= \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta \end{aligned}$$

Det resulterende  $\mathcal{E}$ -felt i detektorpunktet fremkommer ved superponering af feltbidragene fra samtlige spredende atomer i samplet. Disse bidrag er proportionale med fasefaktorerne givet ved (1.2), og med elektrontætheden,  $\rho_e(\vec{r})$ , i det infinitesimale volumenelement omkring  $\vec{r}$ . Dvs:

$$\mathcal{E} \propto \int_V \rho_e(\vec{r}) e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r}} dV$$

hvor der integreres over hele det spredende sample-volumen. Herudover er  $\mathcal{E}$  proportional med  $\mathcal{E}_e$ , defineret som den tidslige middelværdi af  $\mathcal{E}$ -feltet i detektorpunktet, hidrørende fra spredning på én "isoleret" elektron. Denne er givet ved Thomson's ligning:

$$\mathcal{E}_e = \mathcal{E}_0 \frac{e^2}{Rmc^2} \sqrt{\frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}}$$

hvor  $\mathcal{E}_0$  er amplituden af den indkommende stråling,  $e$  er elementarladningen,  $R$  er afstanden fra elektron til detektor,  $m$  er elektronmassen og  $c$  er lyshastigheden. Det samlede udtryk for  $\mathcal{E}$  bliver da:

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \mathcal{E}_0 \frac{e^2}{Rmc^2} \sqrt{\frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}} \cdot \int_V \rho_e(\vec{r}) e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r}} dV \\ &= \mathcal{E}_e \int_V \rho_e(\vec{r}) e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r}} dV \end{aligned} \quad (1.3)$$

Imidlertid kan  $\mathcal{E}$ -feltet mere praktisk udtrykkes som en funktion af *atomtætheden* i samplet, istedet for af  $\rho_e(\vec{r})$ . Da elektronerne er at betragte som "udtværede" over hele rummet, er  $\rho_e(\vec{r})$  reelt en sum af tæthedsbidrag fra hvert enkelt af samplets atomer. Idet vi antager en sfærisk, symmetrisk elektrontæthedsfordeling for det individuelle atom, er størrelsen af det  $n$ 'te atoms bidrag til  $\rho_e(\vec{r})$  udelukkende en funktion af afstanden fra  $\vec{r}$  til dette atoms tyngdepunkt, og vi skriver:

$$\rho_e(\vec{r}) = \sum_{n=1}^N \rho_n(\vec{r} - \vec{r}_n) \quad (1.4)$$

hvor  $\rho_n$  er atomtætheden i det infinitesimale volumenelement omkring  $r$ . Ved substitution af (1.4) i (1.3) fås:

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \mathcal{E}_e \int_V \sum_{n=1}^N \rho_n(\vec{r} - \vec{r}_n) e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} dV \\ &= \mathcal{E}_e \sum_{n=1}^N \int_V \rho_n(\vec{r} - \vec{r}_n) e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} dV \\ &= \mathcal{E}_e \sum_{n=1}^N e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}_n} \int_V \rho_n(\vec{r} - \vec{r}_n) e^{i\Delta\vec{k}\cdot(\vec{r}_n - \vec{r})} dV \end{aligned} \quad (1.5)$$

I (1.5) summeres altså over samtlige  $N$  atomer, og for det  $n$ 'te atom summeres de enkelte elektroners bidrag til  $\mathcal{E}$ -feltet ved detektorpositionen.  $\mathcal{E}$ -feltbidraget fra det  $n$ 'te atom,  $\mathcal{E}_a$ , er:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_a &= \mathcal{E}_e \int_V \rho_n(\vec{r} - \vec{r}_n) e^{i\Delta\vec{k}\cdot(\vec{r}_n - \vec{r})} dV \\ &= \mathcal{E}_e f(\Delta\vec{k}) \end{aligned}$$

hvor  $f(\Delta\vec{k}) = \mathcal{E}_a/\mathcal{E}_e$  er en stofkonstant, den atomare spredningsfaktor, som udelukkende afhænger af  $\Delta\vec{k}$ , forudsat samtlige atomer har identiske elektronkonfigurationer, dvs for rene grundstoffer. (1.5) kan dermed forkortes til:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_e f(\Delta\vec{k}) \sum_{n=1}^N e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}_n}$$

Endelig bemærkes at positionen af det  $n$ 'te atoms tyngdepunkt,  $\vec{r}_n$ , er udsat for termisk fluktuation og derfor tidsafhængig. Når tiden indføres som parameter (vi har af hensyn til overskueligheden sat  $t=0$

i ovenstående udledning), bliver udtrykket for  $\mathcal{E}$ :

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_e f(\Delta\vec{k}) \sum_{n=1}^N e^{-i(\omega_0 t - \Delta\vec{k} \cdot \vec{r}_n(t))} \quad (1.6)$$

hvor  $\omega_0$  er vinkelfrekvensen for den indkommende stråling.

## 1.4 Atomare korrelationer udtrykt ved den coherente sprednings-intensitet

Intensiteten af elektromagnetisk stråling i et rum punkt er proportional med kvadratet af strålingens feltstyrke, hvilket kan skrives:

$$I'(t) \propto \text{Re}^2(\mathcal{E}(t))$$

eftersom det fysiske felt er givet ved realdelen af  $\mathcal{E}(t)$ . Tidsafhængigheden af fasefaktorerne i udtrykket for  $\mathcal{E}(t)$  domineres altovervejende af den lineære komponent  $\omega_0 t$ . Man kan derfor antage at disse fasefaktorer, oscillerer med tilnærmelsesvis konstant vinkelfrekvens  $\omega_0$ , og udtrykke den (eksperimentelt målelige) tidslige middelværdi for spredningsintensiteten, som kun afhænger af  $\Delta\vec{k}$ :

$$I(\Delta\vec{k}) = \alpha \langle \mathcal{E}(t)\mathcal{E}^*(t) \rangle_t \quad (1.7)$$

hvor vi har indført proportionalitetskonstanten  $\alpha = c/4\pi$  (cgs-enheder!) og "\*" angiver kompleks konjugeret. Som "enhed" for spredningsintensitet, vil vi fremover benytte "elektron unit's", idet 1 eu, jvf Thomsons ligning, defineres som den tidsmidlede, spredningsintensitet fra en fri elektron:

$$1_{eu} = I_0 \frac{e^4}{R^2 m^2 c^4} \cdot \frac{1 + \cos^2 2\Theta}{2} = \alpha \mathcal{E}_e^2$$

Med " $I_{eu}^{coh}$ " betegnes i denne tekst intensiteter af coherent spredning, målt i eu (når vi taler om "elektron enheder" skal det ikke forstås alt for bogstaveligt — der er naturligvis ikke tale om en enhed i ordets egentlige forstand, idet en intensitet udtrykt i eu *ikke* har dimensionen energi pr. flade pr. tid, men er en dimensionsløs brøk).

I de to næstfølgende afsnit, udledes først en relation mellem  $I_{eu}^{coh}(\Delta\vec{k})$  og Van Hoove's korrelationsfunktion (defineres nedenfor). Med udgangspunkt heri, fremstilles den radiale distributionsfunktion for samplets atomer.



### 1.4.1 Sprednings-intensiteten relateret til Van Hoove's korrelationsfunktion

Idet vi substituerer (1.6) i (1.7), og udtrykker resultatet i enheden eu, har vi:

$$\begin{aligned} I_{eu}^{coh}(\Delta\vec{k}) &= f^2(\Delta\vec{k}) \left\langle \sum_{n=1}^N e^{-i(\omega_0 t - \Delta\vec{k} \cdot \vec{r}_n(t))} \sum_{m=1}^N e^{i(\omega_0 t - \Delta\vec{k} \cdot \vec{r}_m(t))} \right\rangle_t \\ &= f^2(\Delta\vec{k}) \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \left\langle e^{-i\Delta\vec{k} \cdot (\vec{r}_m(t) - \vec{r}_n(t))} \right\rangle_t \end{aligned} \quad (1.8)$$

Den statistiske middelværdi af fasefaktoren for den m'te partikel kan udtrykkes ved:

$$\frac{1}{N} \sum_{m=1}^N \left\langle e^{-i\Delta\vec{k} \cdot (\vec{r}_m(t) - \vec{r}_n(t))} \right\rangle_t$$

hvor  $N$  er antallet af spredningscentre. Ved summation over  $n$ , fås *interferensfunktionen*,  $S(\Delta\vec{k})$ :

$$S(\Delta\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \left\langle e^{-i\Delta\vec{k} \cdot (\vec{r}_m(t) - \vec{r}_n(t))} \right\rangle_t \quad (1.9)$$

Efter substitution af (1.9) i (1.8), opnås følgende, kompakte udtryk for intensiteten af den coherente spredning:

$$I_{eu}^{coh}(\Delta\vec{k}) = N f^2(\Delta\vec{k}) \cdot S(\Delta\vec{k}) \quad (1.10)$$

#### Van Hoove's korrelationsfunktion

I den nedenfor definerede korrelationsfunktion, angives partikeltætheden i et punkt ved hjælp af *Dirac-deltafunktionen*, som er karakteriseret ved følgende egenskaber:

$$\int_V \delta(\vec{r}) dV = 1, \text{ og: } \begin{cases} \delta(\vec{r}) = 0 & , \text{ for } \vec{r} \neq 0 \\ \delta(\vec{r}) \neq 0 & , \text{ for } \vec{r} = 0 \end{cases} \quad (1.11)$$

Van Hoove's korrelationsfunktion defineres som følger:

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \left\langle \delta(\vec{r} - [\vec{r}_m(t) - \vec{r}_n(t)]) \right\rangle_t \quad (1.12)$$

For det betragtede systems (dvs det spredende sample's)  $N$  atomer (for  $\vec{r}_m(t) = \vec{r}_1(t), \vec{r}_2(t), \dots, \vec{r}_N(t)$ ), summeres altså de tidsmidlede sandsynlighedstætheder i punktet  $\vec{r}_n(t) + \vec{r}$ , hvor  $\vec{r}_n(t)$  angiver positionen af det  $n$ 'te atom's tyngdepunkt til tiden  $t$ . Middelværdien af denne sum tages med hensyn til  $n$ , således at  $G(\vec{r})$ , for et *vilkårligt* valgt atom  $n$ , giver den statistiske sandsynlighed for at der befinder sig et atom i punktet  $\vec{r}_n(t) + \vec{r}$ .

Som det fremgår heraf må der endvidere gælde:

$$\int_V G(\vec{r}) dV = N$$

altså, at  $G(\vec{r})$  integreret over hele rummet giver samplets  $N$  atomer.

For Dirac-deltafunktionen  $\delta(\vec{r})$ , gælder jvf (1.11) følgende relation:

$$\begin{aligned} \int_V \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} dV &= e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}_0} \int_V \delta(0) dV \\ &= e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}_0} \end{aligned}$$

hvor  $\vec{r}_0$  er en konstant vektor. Idet vi substituerer  $\vec{r}_0 = \vec{r}_m - \vec{r}_n$  heri, har vi således:

$$\begin{aligned} \int_V G(\vec{r}) e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} dV &= \\ \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \left\langle \int_V \delta(\vec{r} - [\vec{r}_m - \vec{r}_n]) e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} dV \right\rangle_t &= \\ \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \left\langle e^{-i\Delta\vec{k}\cdot(\vec{r}_m - \vec{r}_n)} \right\rangle_t & \end{aligned}$$

Som det fremgår ved sammenligning med (1.9), er dette lig med interferensfunktionen  $S(\Delta\vec{k})$ . Der gælder derfor:

$$S(\Delta\vec{k}) = \int_V G(\vec{r}) e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} dV \quad (1.13)$$

En relation der sammenknytter  $G(\vec{r})$  med intensiteten af den coherente spredning, fås ved at indsætte  $S(\Delta\vec{k})$ , givet ved (1.13), i (1.10) hvorefter vi har:

$$I_{eu}^{coh}(\Delta\vec{k}) = N f^2(\Delta\vec{k}) \int_V G(\vec{r}) e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} dV \quad (1.14)$$

## 1.4.2 Den radiale distributionsfunktion

Atomkonfigurationen i et amorf stof er karakteriseret ved en vis grad af lokal, strukturel orden, og ved sfærisk symmetri omkring et givent centralatom. Der er derfor god mening i at søge en beskrivelse af sådanne stoffers atomare struktur, ved at skelne mellem en middelatomtæthed  $\rho_0$ , i modsætning til den faktiske atomtæthed  $\rho(r)$ , i en given afstand  $r$ , fra centralatomet. Eksistensen af sfærisk symmetri i stoffet, gør det bekvemt at tale om *den radiale distributionsfunktion*  $4\pi r^2 \rho(r)$ , defineret som det gennemsnitlige antal atomer pr. volumenenhed, i en kugleskal med radius  $r$ , og infinitesimal tykkelse  $dr$ .

Korrelationsfunktionen vil vi, af hensyn til den videre udledning, udtrykke som en sum af to funktioner: *par-korrelationsfunktionen*  $G_p(\vec{r})$ , for  $\vec{r}_m \neq \vec{r}_n$ , og *selv-korrelationsfunktionen*  $G_s(\vec{r})$ , for  $\vec{r}_m = \vec{r}_n$ . Det ses umiddelbart af (1.12) at  $G_s(\vec{r})$  er en  $\delta$ -funktion, idet  $G_s(\vec{r}) \neq 0$  hvis, og kun hvis  $\vec{r}=0$ .

Som nævnt ovenfor, er atomkonfigurationen i (bl.a) amorfe stoffer karakteriseret ved sfærisk symmetri omkring et centralatom. Dette vil sige at tæthedfordelingen for  $\vec{r} \neq 0$ , givet ved par-korrelationsfunktionen  $G_p(\vec{r})$ , ikke afhænger af vektoren  $\vec{r}$ 's retning men kun af dens længde – på grund af overfladeeffekten, må vi dog principelt forudsætte, at det betragtede system kan antages at have en uendelig udstrækning.  $G_p(\vec{r})$  kaldes derfor også "den radiale tæthedsfunktion", og betegnes fremover  $\rho(r)$ . Vi har ifølge ovenstående:

$$G(\vec{r}) = \rho(r) + \delta(\vec{r})$$

Dette indsættes i (1.14), hvilket giver følgende udtryk for spredningsintensiteten:

$$\begin{aligned} I_{eu}^{coh}(\Delta\vec{k}) &= N f^2(\Delta\vec{k}) \int_V [\rho(r) + \delta(\vec{r})] e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} dV \\ &= N f^2(\Delta\vec{k}) \left[ 1 + \int_V \rho(r) e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} dV \right] \end{aligned} \quad (1.15)$$

hvor  $N f^2(\Delta\vec{k})$ , er spredningsintensiteten fra  $N$  ukorrelerede atomer, mens udtrykket i parenteser er interferensfunktionen. Imidlertid fås heraf, for  $\Delta\vec{k} \rightarrow \vec{0}$ :

$$\lim_{\Delta\vec{k} \rightarrow \vec{0}} S(\Delta\vec{k}) = 1 + \int_{V=\infty} \rho(r) dV = \infty$$

For at skaffe os af med denne divergens, substituerer vi nu  $\rho(r) = [\rho(r) - \rho_0] + \rho_0$  i (1.15), hvori  $\rho_0$  er den gennemsnitlige atomtæthed i samplet:

$$I_{eu}^{coh}(\Delta\vec{k}) = Nf^2(\Delta\vec{k}) \left[ 1 + \int_V [\rho(r) - \rho_0] e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} dV + \rho_0 \int_V e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} dV \right]$$

Det sidste af integralledene i parentesens korresponderer til den såkaldte "forward scattering", og konvergerer så hurtigt mod nul for voksende  $\Delta k$ , at det i praksis kan betragtes som en deltafunktion, dvs:

$$\rho_0 \int_V e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} dV \simeq 0 \quad \text{for } \Delta k > 0$$

Intensitetsbidraget fra denne størrelse negligeres som regel ved praktiske beregninger, da dets betydning således er begrænset til et ganske snævert  $\Delta k$ -område tæt ved nul.<sup>1</sup> Vi tillader os derfor at skrive:

$$I_{eu}^{coh}(\Delta\vec{k}) = Nf^2(\Delta\vec{k}) \left[ 1 + \int_V [\rho(r) - \rho_0] e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} dV \right] \quad (1.16)$$

Der gælder for par-korrelationsfunktionen  $\rho(r)$ :

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \rho(r) = \rho_0$$

eftersom partikeltætheden hurtigt nærmer sig middelværdien  $\rho_0$ , for voksende  $r$ . Integralet i det sidste udtryk konvergerer dermed for alle  $\Delta\vec{k}$ .

Til brug andetsteds i teksten, bemærker vi at (1.16) også kan skrives:

$$I_{eu}^{coh}(\Delta\vec{k}) = Nf^2(\Delta\vec{k}) \left[ S(\Delta\vec{k}) - \rho_0 \int_V e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}} dV \right]$$

hvilket, ved anvendelse af (1.13), ses at medføre:

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta\vec{k} \rightarrow \vec{0}} I_{eu}^{coh}(\Delta\vec{k}) &= Nf^2(\Delta\vec{k}) \left[ \int_V G(r) dV - \rho_0 \int_V dV \right] \\ &= Nf^2(\vec{0})[N - N] = 0 \end{aligned} \quad (1.17)$$

For at løse integralet i (1.16), konverterer vi fra rektangulære til sfærisk, polære koordinater, eftersom atomtæthedsfordelingen antages at

<sup>1</sup>Azóroff, "Elements of x-ray crystallography", s.178, samt Y. Waseda "Lecture Notes in Physics" (204), s.7

være sfærisk symmetrisk.  $dV$  er i dette tilfælde volumenelementet, afgrænset af to parallelle, plane snit, orienteret vinkelret på  $\Delta\vec{k}$ , i en kugleskal med centralatomet i centrum og radius  $r$ . Idet  $\phi$  betegner vinkelen mellem vektorerne  $\vec{r}$  og  $\Delta\vec{k}$ , er  $dV$  altså et "ringformet" udsnit af kugleskallen, med radius  $r \sin \phi$ , bredde  $r d\phi$  og tykkelse  $dr$ . Til brug ved omskrivningen har vi så:

$$\begin{aligned}dV &= 2\pi r^2 \sin \phi d\phi dr \\ \Delta\vec{k} \cdot \vec{r} &= \Delta k r \cos \phi\end{aligned}$$

Volumenintegralet i (1.16) giver da:

$$\begin{aligned}\int_V [\rho(r) - \rho_0] e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r}} dV &= \\ \int_0^\infty \int_0^\pi 2\pi r^2 [\rho(r) - \rho_0] e^{-i\Delta k r \cos \phi} \sin \phi d\phi dr &= \\ \int_0^\infty 2\pi r^2 \left[ [\rho(r) - \rho_0] \frac{2}{\Delta k r} \frac{e^{i\Delta k r} - e^{-i\Delta k r}}{2i} \right] dr &= \\ 4\pi \int_0^\infty r^2 [\rho(r) - \rho_0] \frac{\sin \Delta k r}{\Delta k r} dr &\end{aligned}$$

Idet vi definerer *den reducerede interferensfunktion*,  $i(\Delta\vec{k})$ :

$$\begin{aligned}i(\Delta\vec{k}) &= S(\Delta\vec{k}) - 1 \\ &= \int_V [\rho(r) - \rho_0] e^{-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{r}} dV \\ &= \frac{I_{eu}^{coh}(\Delta\vec{k})}{N f^2(\Delta\vec{k})} - 1\end{aligned}$$

fås ved substitution af det sidste resultat i (1.16):

$$\Delta k i(\Delta\vec{k}) = 4\pi \int_0^\infty r [\rho(r) - \rho_0] \sin \Delta k r dr \quad (1.18)$$

Ved at benytte Fourier's integralteorem på (1.18), får vi følgende udtryk for den radiale distributionsfunktion:

$$\begin{aligned}D(r) &= 4\pi r^2 \rho(r) \\ &= 4\pi r^2 \rho_0 + \frac{2r}{\pi} \int_0^\infty \Delta k i(\Delta\vec{k}) \sin \Delta k r d(\Delta k) \quad (1.19)\end{aligned}$$



## Kapitel 2

### Eksperimentel procedure

I det følgende søges opstillet en fremgangsmåde til eksperimentel undersøgelse af et givent amorft stofs atomkonfiguration. Forløbet af en sådan undersøgelse falder naturligt i tre dele:

1) Fremstilling af en prøve af stoffet i dets amorfe tilstand. Dette foregår i et pådampningskammer, hvor en portion af stoffet (på krystallinsk form) under vacuum opvarmes i en digel, således at det fordamper. Over digelen er anbragt en substratfilm, som ved hjælp af en kvælstofkølet kryostat samt et termoelement holdes afkølet ved en passende lav temperatur. En del af det fordampede stof opsamles på substratet og underafkøles ved kontakten hermed, således at der på substratets overflade dannes en film af det amorfe stof.

2) At fremskaffe diffraktionsdata for spredning af monokromatisk røntgenstråling på den amorfe stofprøve. Eksperimentet udføres med det her på stedet tilgængelige røntgendiffraktometer; mere herom følger senere.

3) Databehandling, omfattende:

a) Fra måledata må vi søge at isolere den "teoretiske" coherente spredningsintensitet. Dette gøres ved at korrigere måledata for absorption, uelastisk spredning samt spredning forårsaget af det anvendte substrat.

b) De korrigerede måledata skal normaliseres, det vil sige konverteres fra arbitrære enheder (tælleantal) til absolutte (*eu* pr. atomar spredet).

c) Beregning af interferensfunktionen, den radiale distributionsfunktion og diverse andre korrelationsfunktioner ud fra de således korrigerede og normaliserede måledata. Dette sker i overensstemmelse med den teoretiske udledning i kapitel 2.

### Valg af substrat

Et ikke uvæsentligt punkt i forbindelse med fremstilling af amorfe tyndfilm til diffraktioneksperimenter er valget af et passende substrat. Nedenfor gøres nogle overvejelser med henblik på, hvilke krav substratet skal efterkomme, både med hensyn til processen i pådampningskammeret og den efterfølgende røntgendiffraktion.

I pådampningskammeret belastes substratet ved temperatursvingninger og ionbombardement. Kravet til substratet i den forbindelse er, at det ikke må smelte ved de høje temperaturer, ej heller krystalisere eller revne ved de lave temperaturer. Endvidere må denne behandling ikke bevirke, at spredningen fra substratet ved røntgendiffraktion ændres i forhold til spredningen før pådampningen – for eksempel på grund af strukturelle forandringer i substratet.

Af hensyn til korrektionen af det optagne røntgenspektrum for substratspredning, er det naturligvis af betydning, at den sidstnævnte ikke udgør for stor en del af den totale intensitet af spredningen på samplet.

Med disse overvejelser for øje valgte vi på et tyndt plastfolie. For at finde det forhåndenværende bedst egnede, optog vi en række røntgendiffraktionspektre på adskillige plastarter og valgte det der gav mindst signal. Det endelige substratvalg faldt således på et PVC-folie ("Vita Wrap") med en tykkelse på 12  $\mu\text{m}$ .

## 2.1 Fremstilling af amorfe germanium-film ved pådampning

I det følgende vil pådampningskammeret, der benyttes til fremstilling af amorfe Ge-film, blive beskrevet. Der vil dernæst blive redegjort for den anvendte pådampningsstrategi.



## 2.1.1 Pådampningskammeret

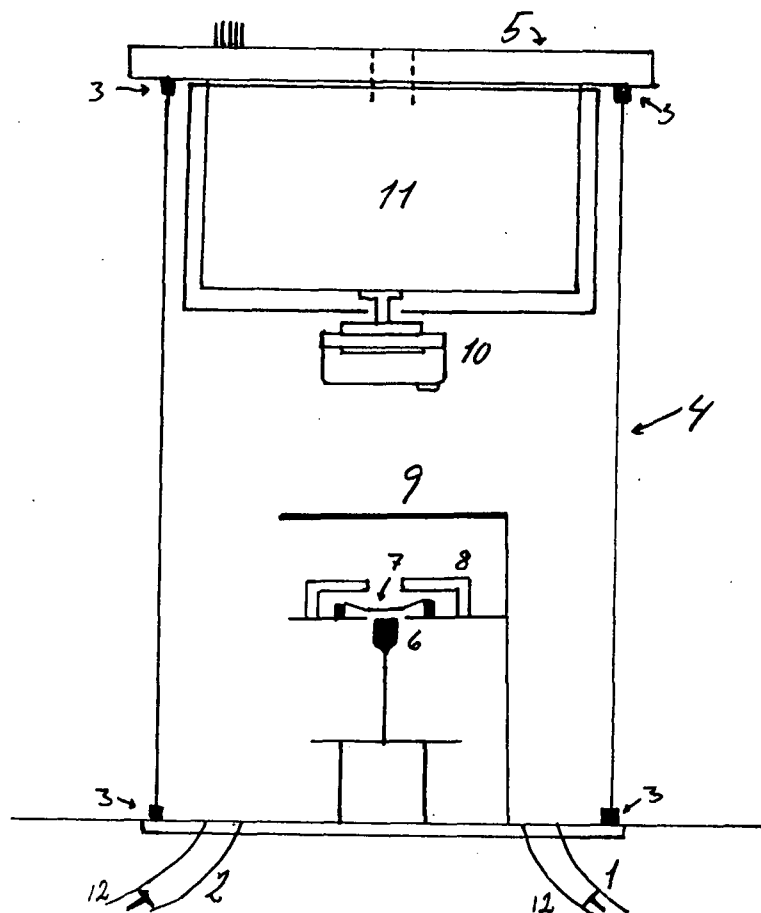


Fig. 10: Pådampningskammer. (1) udtag til kapselpumpe, (2) udtag til olie-diffusionspumpe, (3) gummiringe til vakuum-tætning, (4) metalcylinder der omslutter det hele, (5) låg med udgange til elektriske installationer, (6) grafitdige (rummer ca 1/4 gram Ge), (7) wolframglødetråd, (8) tantalskærm, (9) drejelig metalblænde, (10) substrat, (11) kryostat, (12) ventiler.

Pådamningskammeret består af en metalcylinder (diameter ca. 30 cm og højde ca. 40 cm). Låget er en 2 cm tyk stålplade påmonteret kryostat og substratholder (herom senere). Der er anbragt gummipakninger mellem beholder og bund og mellem beholder og låg. For at bedre vakuum-tætningen er der brugt vakuumfedt. På låget er gennemføring til termoelement, en piezo-elektrisk krystal og en platinmodstand (pT-100).

I bunden af kammeret findes udtag til kapselpumpen (1), der benyttes til den grove evakuering af kammeret, trykket kommer herved ned på ca.  $10^{-2}$  mbar. Olie-diffusionspumpen benyttes til den fine evakuering af kammeret. Trykket kommer da ned på ca.  $10^{-6}$  mbar. Dette lave tryk søges opretholdt under pådampning blandt andet for at undgå forurening af den pådampede germaniumfilm. Tantalskærmen, der er placeret umiddelbart over glødetråden, beskytter filmen for en del af varmemstrålingen fra glødetråd. Den drejelige blænde gør det muligt at starte og slutte pådampningen øjeblikkeligt, så man kender pådampningstiden.

I bunden af kammeret er desuden gennemføring for glødestrøm og accelerationsspænding. Når der sendes strøm gennem glødetråden emitteres elektroner herfra. Accelerationsspændingen mellem diglen og glødetråden bevirker at elektronerne trækkes ned i diglen, hvor deres energi afsættes som termisk energi til det krystallinske germanium. Herved smelter germaniumet og fordamper. Er substratet tilstrækkeligt koldt, sker der en underafkøling af de germaniumatomer, der opsamles herpå, og germaniumet vil blive amorf, da det fortættes, inden det når at danne den krystallinske atomkonfiguration.

Topstykket i opstillingen vil nu blive forklaret.

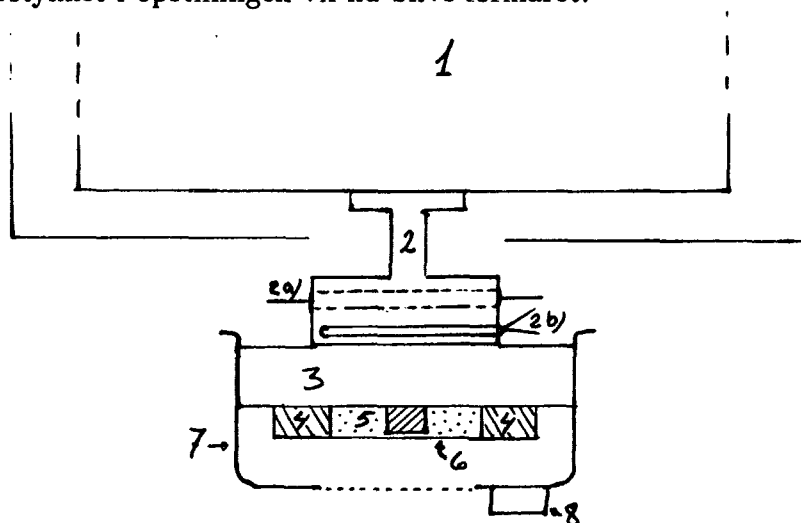


Fig. 11: Kryostat og substratholder. (1) kryostat, (2) messingklods i direkte termisk kontakt med kryostat, endvidere udstyret med termoelement og pT-100, (3) kobberklods, (4) aluminiumsramme (sampleholder fra diffraktometer), (5) hulrum fyldt med glycerol, (6) substrat (PVC-film (Vita Wrap)), (7) kobberskærm, (8) piezo-elektrisk krystal.

Kryostaten fyldes med kvælstof, så kuldereservoiret har en konstant temperatur på  $-196^{\circ}\text{C}$ . I messingklodsen er indført en pT-100 (platinmodstand) og et termoelement. Gennem pT-100 sendes en strøm, hvorved en modstand kan registreres. Da modstanden er temperaturafhængig, kan den registrerede modstand konverteres til en temperatur. Til dette brug forefindes en tabel. pT-100 og termoelementet benyttes til regulering af temperaturen i messingklodsen.

Den piezo-elektriske krystal bruges til estimering af tykkelsen af det pådampede germaniumlag. Sagt i korthed foregår dette ved en fortløbende måling af krystallens resonansfrekvens. Eftersom denne resonansfrekvens ændres, når krystallens masse øges (på grund af det pådampede stof), er det i princippet muligt at omsætte en registreret frekvensændring under pådampningen til en pådampet lagtykkelse. I praksis foretages denne konvertering ved hjælp af en kalibreringskurve.

I vores opstilling er der et hulrum mellem substrat og kobberpladen, hvilket giver et problem med at bortlede den varme, der afsættes på substrat fra germaniumatomerne. For at opnå varmeledning mellem kryostat og substrat, fyldes hulrummet med en vædske. Endvidere anbragtes en skrue i kobberpladen, således at dens hoved stak ned i vædsken; skruen skulle fungere som "coldfinger".

Kravet til vædsken må være at den har et lavt frysepunkt, at den skal være nem at fjerne fra filmen, så samplet ikke beskadiges, og den må ikke reagere kemisk med substratet. Til formålet valgtes glycerol. Glycerol kan let skylles væk med vand.

### 2.1.2 Fremgangsmåde ved pådampningen

Før evakueringen af pådampningskammeret fyldtes kryostaten med flydende kvælstof, i messingklodsen opretholdtes en konstant temperatur på  $-60^{\circ}\text{C}$ , ved hjælp af pT-100 og termoelement. Da temperaturen var på ca.  $10^{\circ}\text{C}$ , blev kapselpumpen tilsluttet, her observeredes det, at glycerolen sivede ud i siderne, og der dannedes små luftblærer i rummet med glycerol. Da trykket var nede på  $10^{-2}$  mbar, blev olie-diffusionspumpen sat igang. Efter et halvt døgn var trykket i kammeret på  $10^{-6}$  mbar, hvorefter pådampningen påbegyndtes.

Der fremstilles to sampler.

Ved fremstillingen af den første film, anvendtes en tantalglødetråd. Glødestrømmen blev holdt konstant på 100 mA og spændingen på 1.2 kV under pådampningen, således at effekten afsat til diglen var konstant pr. tidsenhed. Første kørsel var af 30 sek. varighed, den næste af 60 sek. varighed, derefter pådampede vi tre gange, hver gang i 3 min. Endelig ville vi pådampe 4 min. af gangen, til der ikke længere registreredes synderlig ændring af den piezo-elektriske krystals svingningsfrekvens. Men efter seks gange brændte glødetråden over, og pådampningen måtte stoppe. Mellem hver pådampning ventede vi 10 min.

Den anden film blev pådampet ved hjælp af en glødetråd af wolfram. For at opnå en større pådampningshastighed satte vi glødestømmen til 110 mA, således at flere elektroner emitteredes fra glødentråden. Accelerationsspændingen holdtes på 1.3 kV. Vi benyttede to digler, for at opnå så tykt et lag amorft germanium som muligt. Første kørsel varede 30 sek, den næste varede 60 sek, derefter kørte vi en i 2 min., og til begge digler stort set var tomme kørte vi i tempi af 3 min. Her var ligeledes 10 min. mellem hver pådampning.

Det viste sig, at de fremstillede Ge-film var en smule krakeleret. At de var krakeleret kan skyldes, at PVC-filmen har strukket sig under temperaturpåvirkninger. Da der blev lukket luft ind i pådampningskammeret efter endt pådampning, dannedes der et undertryk i rummet med glycerol, hvilket bevirkede, at PVC-foliet med Ge-film blev suget lidt opad. Dette kan være med til at forklare krakeleringen.

Tykkelsen af de amorfe Ge-film skulle estimeres ud fra målingen af ændringen af den piezo-elektriske krystal resonansfrekvens. Den første film blev ved denne metode bestemt til at være  $0.7 \mu m$ . Under pådampning af den anden film "døde" krystallen, så vi ikke kendte den endelige frekvensændring. Vores vejleder Petr Višcov har siden bestemt tykkelsen til at være  $3.5 \mu m$  ved hjælp af infrarød spektrofotometri (FTIR).

## 2.2 Optagelse af diffraktionsspektre

Det benyttede røntgendiffraktometer vil nu blive beskrevet, derefter kommer nogle overvejelser med henblik på valg af røntgenrør, samt vores strategi for udførelsen af diffraktioneksperimenterne.

### 2.2.1 Røntgendiffraktometeret

Det til diffraktioneksperimenterne benyttede apparatur er et Philips compact X-ray diffractometer system (PW 1840), tilsluttet en højspændingsgenerator (PW 1729) til at drive røntgenrøret. Intensitetsdata overføres serielt (via RS232-standard) til en PC'er og lagres sammen med parameterværdier og andre relevante oplysninger på disk til senere analyse. Omvendt er det muligt at sende kommandoer fra computeren til diffraktometerets kontrolenhed, således at styring af diffraktometeret kan foretages direkte herfra.

Diffraktometeret består af et goniometer, en detektor og en stepmotor. Goniometeret er et Bragg-Brentano design, hvis geometri skal forklares. Samplet, som sidder i en sampleholder, der er centreret i diffraktionskammeret, roterer med vinkelhastighed  $\Theta$ , mens detektoren, der er placeret på goniometerkanten, kører med den dobbelte vinkelhastighed, altså  $2\Theta$ . Herved opnås, at de vinkler, som henholdsvis den indkommende og den detekterede spredte stråling danner med samplets overflade, er identiske. Dette tjener til at sikre den bedst mulige fokusering samt minimal absorption. Det er herved muligt at måle på tykke sampler og ved store spredningsvinkler. Rotation af sampleholder og drejning af detektor drives af en stepmotor, som har steplængde  $0.01 \Theta$ .

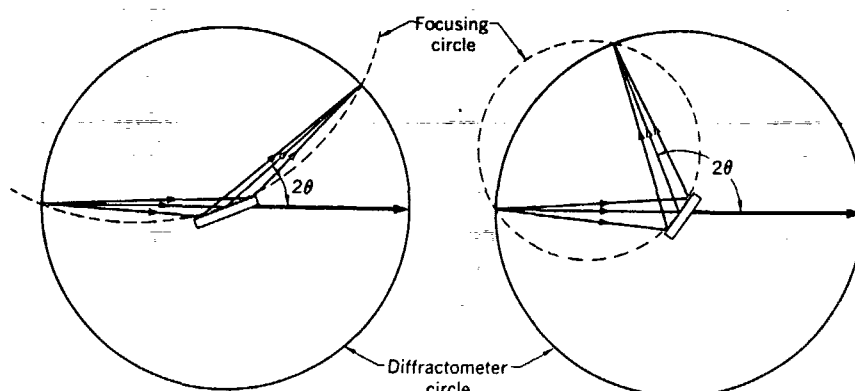


Fig. 12: Diffraktorgeometri. (Azaroff, Elements of X-ray crystallography s.366)

Mellem røntgenrørets target og sample er anbragt et udskifteligt monokromatiseringsfilter, en kollimator og en automatisk divergensslit. Divergensslittens bredde varierer med vinklen  $\theta$ , således at det bestrålede areal af samplet holdes konstant under kørsel.

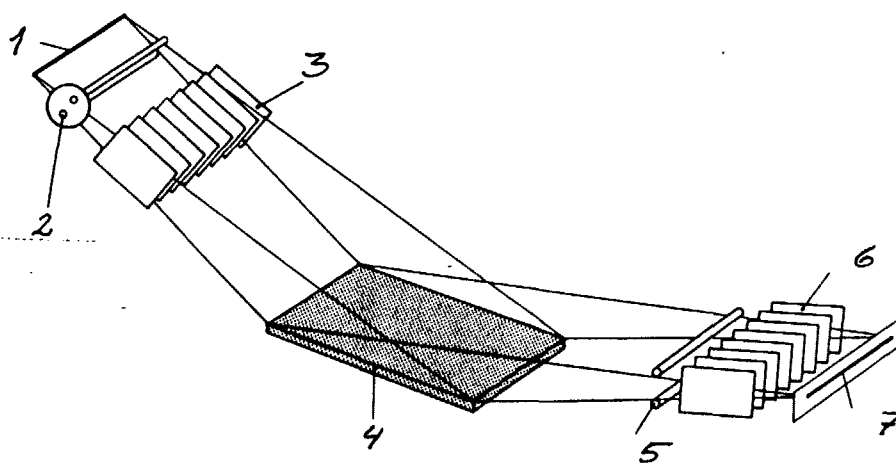


Fig. 13: (1) røntgenkilde, (2) automatisk divergensslit, (3) kollimator, (4) sample, (5) slit, (6) kollimator, (7) detektor og variabel modtager slit (receiving slit). (Fra manual)

Den spredte stråling registreres af en faststoffdetektor, hvis primære følsomhedsområde med hensyn til strålingsenergi er i intervallet mellem 5 keV og 12 keV (ifølge manual). Hvordan detektorens kvanteeffektivitet nærmere bestemt afhænger af strålingsenergien vides ikke. Mellem

sample og detektor er anbragt en slit, en kollimator og en modtagerslit. Slittens bredde er ikke variabel, men fast sat på  $3.3^\circ$  og modtagerslitten er af konstant bredde under kørsel.

Det bedst egnede materiale at anvende som monnokromatiseringsfilter kan findes ved brug af fremgangsmåden s. 14 i kap1. Man finder da, at det bedst egnede filter til at isolere  $K_\alpha$ -dubletten fra et røntgenrør med Cu-target, er et filter af nikkel. Som det fremgik af s. 14 i kap1, er zirconium velegnet som filter for stråling fra et Mo-rør.

### Parameterværdier

Parameter	Range	Default value
FROM	$0^\circ-120^\circ 2\Theta$ , in steps of 0.01	012.00
TO	$0^\circ-120^\circ 2\Theta$ , in steps of 0.01	100.00
SPEED	0.001 0.01 $0.1^\circ 2\Theta/s$ 0.002 0.02 0.005 0.05	00.020
CHART	0 5 10 20 50 mm/ $^\circ 2\Theta$	00010
RANGE	$5 \cdot 10^2$ $1 \cdot 10^3$ $1 \cdot 10^4$ $1 \cdot 10^5$ cps $2 \cdot 10^3$ $2 \cdot 10^4$ $2 \cdot 10^5$ $5 \cdot 10^3$ $5 \cdot 10^4$ $5 \cdot 10^5$	1 10 4
T.C.	0.1 0.2 0.5 1, 2, 5, 10 seconds	0001.0
SLIT	0.05 0.1 0.2 0.3 mm	000.20
ANGLE	Actual Angle display	
SAMPLE	0.35	

Fig. 14: Mulige parameterværdier. (Fra manual)

Før en kørsel indstilles parameterværdier. De mulige værdier er som på ovenstående skema.

FROM angiver, hvilken vinkel scannet starter ved, og TO angiver slutvinkel for scannet, maksimal scanområde er fra  $0^\circ 2\Theta$  til  $120^\circ 2\Theta$ . SPEED er den hastighed, hvormed goniometer drejer angivet i enheder af  $^\circ 2\Theta/\text{sec}$ . Sættes SPEED til  $0.1^\circ 2\Theta/\text{sec}$ . varer et scan 20 min.,  $0.001^\circ 2\Theta/\text{sec}$ . er den mindste hastighed og giver en scanvarighed på 33 timer og 20 min. Den bedste målestetistik opnås naturligvis med den

lange scantid. CHART er en parameter, der skal stilles, hvis diffraktometeret er tilkoblet en skriver, og CHART angiver da den hastighed, hvormed papiret i skriveren kører. RANGE bestemmer skaleringen af den detekterede intensitet (counts pr.sec). TC skal stilles, hvis der benyttes en skriver, og TC er en tidskonstant af det signal, der sendes til skriveren. SLIT er modtagerslittens bredde. ANGLE viser den aktuelle vinkel, der er nået under et scan. SAMPLE er aktuel, hvis der til diffraktometeret anvendes en sampleskifter, så man kan køre flere scan efter hinanden uden at skulle ændre parameterverdier og uden at skulle sætte en måling i gang efter hvert scan. SAMPLE sættes på det aktuelle antal sampler, man ønsker at undersøge.

Røntgenrøret drives af generatoren og herpå justeres accelerationspænding og strømstyrke; maximum effekt er  $50 \text{ kV} \cdot 60 \text{ mA} = 3000 \text{ Watt}$ . Hvilke værdier spændingen og strømstyrken skal have afhænger af, hvilket tybe røntgenrør man benytter, dette kan slås op i manualen hørende til apparaturet.

### 2.2.2 Valg af røntgentarget

Til diffraktometeret forefindes tre forskellige røntgerør, forsynet med henholdsvis wolfram-, molybdæn- og kobber-targets. Til diffraktionseksperimenter er det vigtigt, at man udvælger sig et røntgenrør passende til det stof, man ønsker at undersøge. Kriteriet for, hvilket røntgenrør man bør vælge, er at man skal tage det, der giver stråling med en bølgelængde, så der opstår mindst fluorescens, når stoffet bestråles. Det vil sige, at den indkommende stråling (i diffraktionseksperimenter som regel  $K_{\alpha}$ -stråling) skal have en bølgelængde så langt fra det bestrålede stof's K- og L-absorptionskanter som muligt. Grunden til at man bør undgå fluorescens er, at de søgte effekter ved diffraktion ellers kan overskygges af fluorescens.

Nedenstående illustrerer fluorescensdannelsen ved benyttelse af henholdsvis Cu-rør og Mo-rør til diffraktion på germanium.



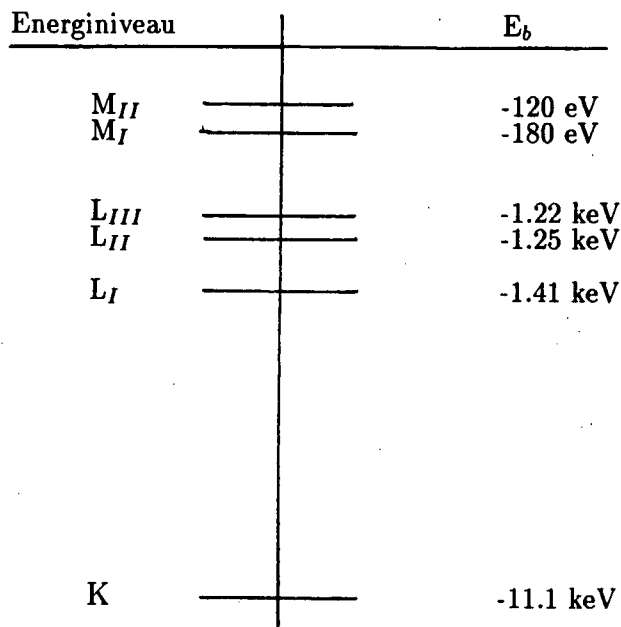


Fig. 15: Energyniveau diagram for germanium.

Det ses at for at eksitere en elektron fra germaniumatomets K-skal kræves en energi større end 9.7 keV, da energien af K-strålingen fra et Cu-rør er 8 keV, er det ikke muligt med et Cu-target at eksitere en elektron fra K-skallen. Det er imidlertid muligt med denne energi at eksitere elektroner fra  $L_I$ -skallen. Hvis vacansen udfyldes af en elektron fra  $M_{II}$ -skallen, udsendes der fluorescensstråling. Energien af denne fluorescens er  $1.414 \text{ keV} - 0.120 \text{ keV} \approx 1.29 \text{ keV}$ . Energien bliver lidt større, hvis det er en elektron fra en højere tilstand der henfalder.

Anvendes Mo-rør ser tingene lidt anderledes ud. Energien af K-strålingen fra et Mo-rør ligger på 17.5 keV. Denne stråling er altså i stand til at eksitere elektroner fra germaniumatomets K-skal. Fluorescensen, der opstår, når en elektron henfalder til vacansen i K-skallen, ligger i energiområdet 9-11 keV, når det er elektroner fra L-, M- og N-skallerne der henfalder. Henfald af elektroner fra yderligere skaller til K- og L-vacanser forekommer stort set aldrig. Et røntgenrør med wolfram som target giver en  $K_\alpha$ -stråling med stor energi (58.9 keV). Her vil man ligeledes opnå en stor uønsket fluorescens.

Forholdet mellem energien af fluorescens og den indkommende stråling er større, når et Mo-target anvendes, end når et Cu-rør benyttes. Det samme gør sig gældende for et wolframrør.

Ud fra ovenstående kan man let overbevise sig om, at det er en fordel at benytte et Cu-rør frem for et Mo-rør eller W-rør, da energien af fluorescensstrålingen frembragt, ved at benytte Cu-rør ligger langt under detektorens primære følsomhedsområde. Endvidere må det formodes, at fluorescensen, der fremkommer ved brug af et Mo-rør, bliver dominerende, idet denne fluorescensenergi ligger inden for detektorens følsomhedsområde, mens den coherent spredte stråling har energien 17.5 keV, som ligger udenfor.

Af ovenstående kan det nu konkluderes, at et Cu-rør er velegnet til diffraktionseksperimenter med germanium, mens et Mo-rør eller et W-rør er knap så velegnet, på grund af den store fluorescens. Dette kan dog afhjælpes, hvis man benytter en energiopløsende detektor eller anvender et filter, som ikke tillader fluorescensstråling at passere.

Et Mo-rør er dog favorabelt at benytte, i den forstand at man herved kan opnå intensitetsdata for et større  $\Delta k$ -rum.  $\Delta k_{max}$  kan beregnes af:

$$\Delta k_{max} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin 120^\circ$$

Således fås for Cu-rør, hvor  $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ ,  $\Delta k_{max} = 7.06 \text{ \AA}^{-1}$ . For Mo-rør haves  $\lambda = 0.7107 \text{ \AA}$ , hvilket giver  $\Delta k_{max} = 15.3 \text{ \AA}^{-1}$ . Ved at benytte Mo-rør opnås altså et større udsnit af spektret og derved mere information.

### 2.2.3 Målestrategi

Til diffraktionseksperimenterne brugte vi de i pådampningskammeret fremstillede Ge-film af to forskellige tykkelser. Disse sampler benævnes henholdsvis GEP1 (tykkelse:  $0.7 \mu m$ ) og GEP3 (tykkelse:  $3.5 \mu m$ ). Intentionen var at foretage målinger i diffraktometeret af to omgange. Første omgang ved at benytte et røntgenrør med kobbertarget (Cu-rør); i anden ombæring ved at benytte et røntgenrør med molybdæntarget (Mo-rør). Vi håbede herved at opnå rimeligt grundlag for en analyse af reproducerbarheden af de eksperimentelle resultater.

Målestrategien for vores endelige spektre var som følger:

Parameterverdier: TC, CHART og SAMPLE blev ikke benyttet, da vi ikke var tilkøbet en skriver, men en computer, og vi havde ingen

automatisk sampleskifter. Vi kørte i fuld scanområde; fra  $0^{\circ}2\theta$  til  $120^{\circ}2\theta$ . RANGE blev sat efter, hvor stor en intensitet vi forventede at registrere afhængig af, hvad vi målte på. SLIT blev sat til 0.2 mm. SPEED blev sat til  $0.02^{\circ}2\theta/\text{sek}$ .

Efter flere målinger med hastigheden  $0.001^{\circ}2\theta/\text{sek}$ ., hvor der forekom strømsvigt, så vores data gik tabt, valgte vi en måletid på 100 minutter. Ved hjælp af en lille procedure i styreprogrammet gentog vi kørslen 25 gange for derefter at tage middelværdien. Herved opnåede vi en rimelig statistik, og vi havde altid data at arbejde med trods et eventuelt strømsvigt.

Målinger: For røntgenrør med Cu-target udførte vi et scan af baggrund, substrat (PVC1) hørende til GEP1, substrat (PVC3) hørende til GEP3, Ge-film (GEP1) og Ge-film (GEP3).

Baggrundspektret optog vi ved at sætte en tom aluminiumsramme i sampleholderen. Aluminiumsrammen er designet til at passe i sampleholderen og beregnet til at montere stofprøver på. Substratspektrene blev kørt, hvor PVC-filmen var limet på en aluminiumsramme. Der blev optaget et spektrum af det pågældende stykke PVC-film, hvorpå vi senere pådampede germanium.

De endelige spektre benævnes med notationen BGR-s25, PVC1-s15, PVC3-s25, GEP1-s16 og GEP3-s25. GEP1-s16 er meget domineret af substratspektret, men man kan ane germaniumtoppene (se Fig. 16). På GEP3-s25 er det tydeligt at se, at germaniumfilmen er betydelig tykkere end den første, men man kan stadig skimte substratspredningen. Endvidere kan nogle skarpe toppe observeres. Ved sammenligning med den karakteristiske placering med hensyn til  $\Delta k$  af de første diffraktionsmaksima for krystallinsk germanium, konstateres at de er sammenfaldende, hvoraf vi konkluderer, at vores Ge-film er delvist krystalliserede.

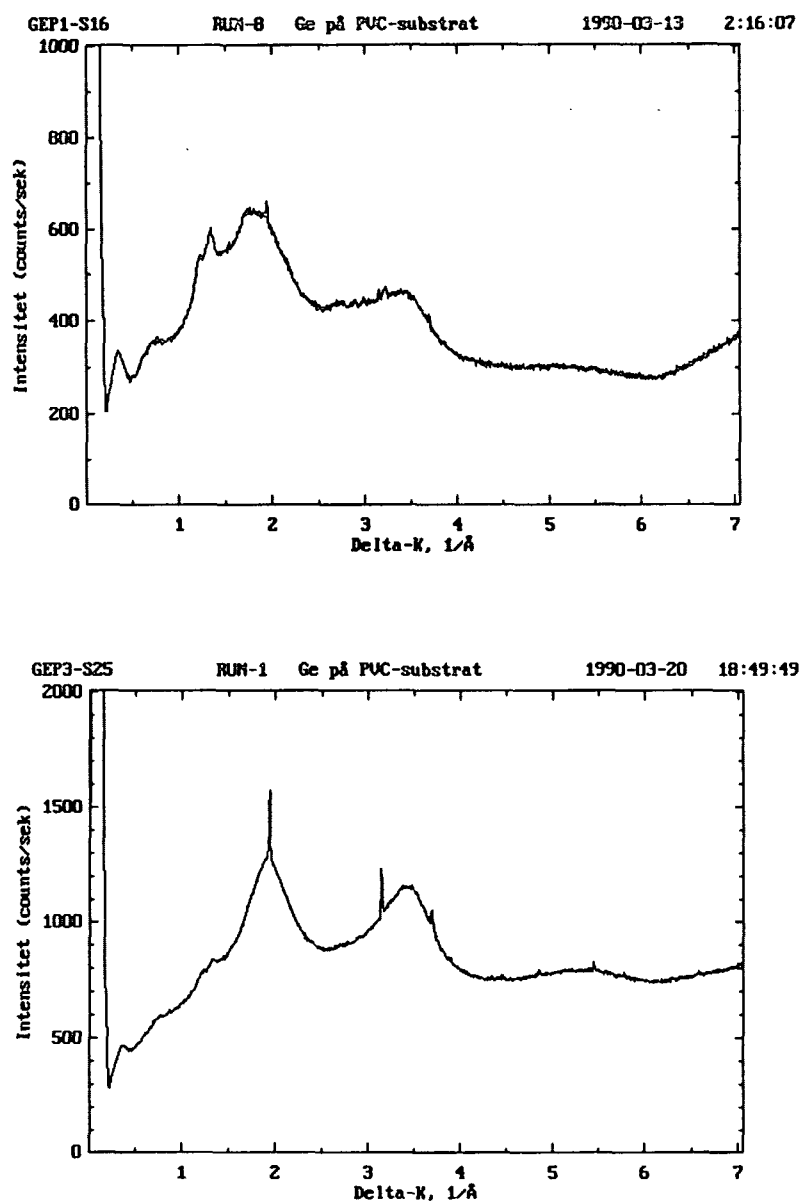


Fig. 16: Intensitetskurver for spredning af Cu- $K_{\alpha}$ -stråling på GEP1 og GEP3.

Dernæst skiftede vi røntgenrør til et med Mo-target. Vi kørte med samme parameterværdier som i den foregående måleserie. Resultatet af målinger med Mo-rør gav ikke noget brugbart. Spektret ses på Fig. 17.

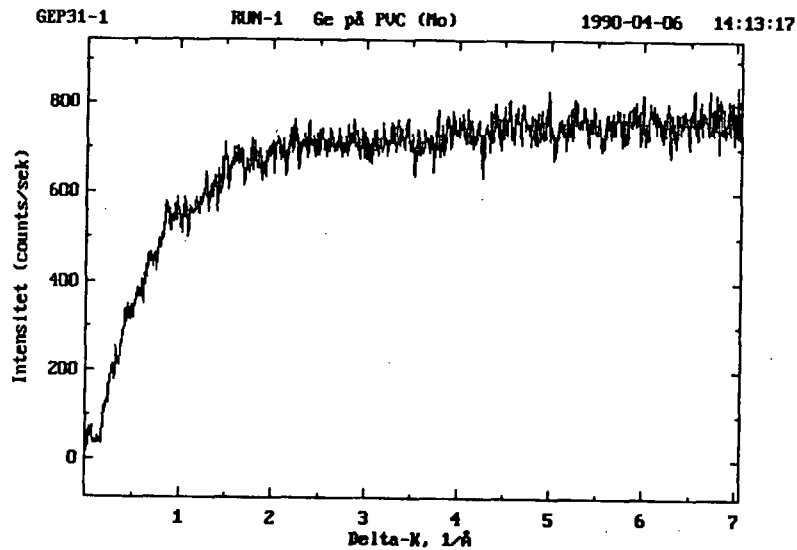


Fig. 17: Intensitetskurve for spredning af Mo- $K_{\alpha}$ -stråling på GEP3.

På figuren illustreres med al tydelighed at Mo-target ikke er egnet til diffraktioneksperimenter på amorft germanium når detektoren ikke har energiopløsning. Vores diffraktionsdata består hovedsageligt af fluorescensstråling. Vi så ikke nogen umiddelbar løsning på problemet, hvorfor vi i det videre forløb må nøjes med den information, vi kan få af spektrene opnået ved brug af et røntgenrør med Cu-target.

## 2.3 Databehandling

For at kunne finde parkorrelationsfunktionen og heraf afledte funktioner på basis af måledata, ud fra de i afsnit 2.3.2. udledte formler, er det selvsagt nødvendigt at isolere den coherente spredningsintensitet fra det optagne røntgenspektrum. Der skal altså i første omgang korrigeres for substratspredning, baggrundsstråling og incoherent spredning (Compton-spredning) — muligheden for forekomst af andre uønskede spredningsprocesser såsom fluoressens, multipel spredning og "small angle scattering" (som er coherent spredning på hulrum og andre makroskopiske inhomogeniteter i spredningslaget) må i den forbindelse også overvejes.

Andre forhold, som nødvendiggør korrektion, er polarisation og absorption i spredningslaget.

Endelig fremstår den experimentelt målte intensitet i arbitrære enheder (tælletal), og skal derfor normaliseres, det vil sige konverteres til enheden  $eu$ .

### 2.3.1 Extrapolation fra intervalgrænserne

Det er med det tilgængelige apparatur ikke muligt at skaffe eksperimentelle værdier af spredningsintensitet for  $2\theta > 120$ . Og for  $2\theta$  i området fra 0 til omtrent 2,5 er den "direkte stråling" så dominerende, at måledata for dette område i praksis er uanvendelige.

Vi vil derfor ad matematisk vej søge information om, hvordan den teoretisk udledte intensitetsfunktion opfører sig uden for scanneområdet.

Idet vi benytter rækkeudviklingen:

$$\frac{\sin \Delta kr}{\Delta kr} = 1 - \frac{(\Delta kr)^2}{3!} + \frac{(\Delta kr)^4}{5!} - \dots$$

kan ligningen for  $I_{eu}^{coh}$ , (1.16), omskrives:

$$I_{eu}^{coh}(\Delta \vec{k}) = N f^2(\Delta \vec{k}) \left[ 1 + \int_V [\rho(r) - \rho_0] e^{-i\Delta \vec{k} \cdot \vec{r}} dV \right]$$

$$\begin{aligned}
&= N f^2(\Delta \vec{k}) \left[ 1 + 4\pi \int_0^\infty r^2 [\rho(r) - \rho_0] \frac{\sin \Delta k r}{\Delta k r} dr \right] \\
&= N f^2(\Delta \vec{k}) \left[ 1 + 4\pi \int_0^\infty r^2 [\rho(r) - \rho_0] dr \right. \\
&\quad \left. - 4\pi (\Delta k)^2 \int_0^\infty [\rho(r) - \rho_0] \frac{r^4}{3!} dr \right. \\
&\quad \left. + 4\pi (\Delta k)^4 \int_0^\infty [\rho(r) - \rho_0] \frac{r^6}{5!} dr - \dots \right] \quad (2.1)
\end{aligned}$$

Fra (1.16) og (1.17) har vi desuden:

$$1 + 4\pi \int_0^\infty r^2 [\rho(r) - \rho_0] dr = S(\vec{0}) - \rho_0 \int_V dV = 0$$

For  $\Delta k$  tæt ved nul, vil de af rækkens led, som er af laveste grad (med hensyn til  $\Delta k$ ), være dominerende, således at intensitetsfunktionen kan approximeres ved:

$$I_{eu}^{coh}(\Delta \vec{k}) \simeq -4\pi N f^2(\Delta \vec{k}) \cdot (\Delta k)^2 \int_0^\infty [\rho(r) - \rho_0] \frac{r^4}{3!} dr$$

Og da:

$$\lim_{\Delta \vec{k} \rightarrow \vec{0}} I_{eu}^{coh}(\Delta \vec{k}) = 0$$

ifølge (1.17), har vi til brug ved extrapolationen, at intensitetskurven skal konvergere parabolisk mod nul.

Forløbet af  $I_{eu}^{coh}$  for store  $\Delta \vec{k}$  kan udledes ved en let omskrivning af (1.18):

$$\begin{aligned}
i(\Delta \vec{k}) &= \frac{I_{eu}^{coh}(\Delta \vec{k})}{N f^2(\Delta \vec{k})} - 1 \\
&= \frac{4\pi}{\Delta k} \int_0^\infty r [\rho(r) - \rho_0] \sin \Delta k r dr \Rightarrow \\
I_{eu}^{coh}(\Delta \vec{k}) &= N f^2(\Delta \vec{k}) \left[ 1 + \frac{4\pi}{\Delta k} \int_0^\infty r [\rho(r) - \rho_0] \sin \Delta k r dr \right]
\end{aligned}$$

Integralet i parenteser er konvergent, mens  $1/\Delta k$  går mod nul, hvilket sammenholdt med ovenstående medfører:

$$I_{eu}^{coh}(\Delta \vec{k}) \rightarrow N f^2(\Delta \vec{k}) \text{ for } \Delta k \rightarrow \infty \quad (2.2)$$

altså at den coherente spredningsintensitet konvergerer asymptotisk mod spredningsintensiteten for et system bestående af  $N$  ukorrelerede atomer (gasspredningen), for voksende  $\Delta k$ . Dette forhold skal vi sidenhen benytte ved normaliseringen af måledata.

### 2.3.2 Korrektion og normalisering

Som udgangspunkt for korrektionen benytter vi følgende teoretiske opsplitning af den eksperimentelt målte spredningsintensitet:

$$I_{exp}^{tot} = [I^{coh} + I^{inc} + I^{flr}]_{exp} + I_{exp}^{sub} + I_{exp}^{bgr} \quad (2.3)$$

Her er  $I_{exp}^{tot}$  den totale, eksperimentelt målte spredningsintensitet,  $I^{coh}$ ,  $I^{inc}$  og  $I^{flr}$  betegner henholdsvis coherent spredning, incoherent (Compton-) spredning og fluorescens.  $I_{exp}^{sub}$  er spredning hidrørende fra substratet (korrigeret for baggrundsstråling og absorption) mens  $I_{exp}^{bgr}$  er baggrundsstrålingen.

Vi forudsætter altså, at bidraget fra eventuelle andre typer af spredningsprocesser til  $I_{exp}^{tot}$  kan negligeres.

Det samme gælder multipel spredning, altså at sekundær vekselvirkning mellem spredt stråling og samplets atomer ikke influerer nævneværdigt på den målte spredningsintensitet. Hvorvidt denne forudsætning er opfyldt, må man afgøre i den konkrete eksperimentelle situation, på grundlag af de relevante koefficienter for spredning og absorption.

Den følgende udledning har til formål at isolere  $I_{exp}^{coh}$  fra den eksperimentelt målte intensitet, samt at korrigere  $I_{exp}^{coh}$  for absorption i spredningslaget og for spredningsvinkelafhængigheden af den indkommende (og dermed den spredte) strålingsintensitet.

Ved korrektionen anvendes to spektre (optaget ved samme spænding og strømstyrke som anvendes i selve diffraktionseksperimentet): et spektrum for en prøve af det anvendte substrat, og et for baggrundsstrålingen. Disse målte intensiteter betegnes henholdsvis  $I_{mli}^{sub}$  og  $I_{mli}^{bgr}$ .

Ved samtlige absorptionskorrektioner i de følgende afsnit benyttes udtryk af den generelle form:

$$I_{ud} = I_{ind} \cdot e^{-(\mu_1 + \mu_2)t / \sin \Theta} \quad (2.4)$$



hvor  $t$  er tykkelsen af spredningslaget, mens  $\Theta$  er den halve spredningsvinkel,  $I_{ind}$  og  $I_{ud}$  er intensiteterne af henholdsvis indkommende og spredt stråling;  $\mu_1$  og  $\mu_2$  er lineære absorptionskoefficienter for det absorberende materiale, svarende til bølglængderne af henholdsvis indkommende og spredt stråling. For elastisk spredning har vi naturligvis  $\mu_1 = \mu_2$ . Imidlertid kan vi for comptonspredningen beregne den maksimale bølglængdeforskydning, det vil med vor eksperimentelle opstilling sige  $\Delta\lambda$  ved  $2\Theta = 120^\circ$ :

$$\begin{aligned}\Delta\lambda_{max} &= \frac{h}{m_e c} (1 - \cos 120^\circ) \\ &= 0,03639 \text{ \AA}\end{aligned}$$

For  $K_\alpha$ -stråling fra et Cu-target svarer dette til en maksimal relativ forskydning på ca. 2% af  $\lambda$  (med Mo-target ca. 4%). På grund af denne relativt lille forskydning, sammenholdt med de fakta, at comptonintensiteten ved spredning af Cu- $K_\alpha$ -stråling på Ge er ganske ubetydelig i forhold til intensiteten af den coherente spredning (ved  $\Delta k = 7 \text{ \AA}^{-1}$  er forholdet ca. 1:17), og at comptonspredningen er spektralfordelt og derfor ikke interfererer, anser vi det for tilladeligt, også for comptonspredningen at sætte  $\mu_1 = \mu_2$ .

### Baggrund og substratspredning

Vi antager, at baggrundsstrålingen i alt væsentligt stammer fra røntgenspredning på luften i diffraktionskammeret (ideelt set burde eksperimentet foregå i vaccum, men det har vi ikke udstyr til). Da både den indkommende og den detekterede stråling er kollimeret, kan vi desuden gå ud fra at det luftvolumen som detektoren "ser", er et lag af få millimeters tykkelse, placeret centralt i diffraktionskammeret.

Når en stofprøve monteres i kammeret, deles det spredende luftvolumen i to omtrent lige store dele; spredningen på den del som ligger mellem sample og detektor ændres ikke af samplets tilstedeværelse, hvorimod den stråling som spredes af luftlaget på samplets modsatte side absorberes delvis.

For at finde den i diffraktionseksperimentet aktuelle substratspredning korrigeres først for baggrundsstråling efter forskriften:

$$I^{sub} = I_{mll}^{sub} - \frac{1}{2} I_{mll}^{bgr} [1 + e^{-2\mu_s t_s / \sin \Theta}] \quad (2.5)$$

hvor  $t_s$  er substratrykkelsen, mens  $\mu_s$  er absorptionskoefficienten for substratet, svarende til bølgelængden af den anvendte stråling.

Dernæst skal  $I^{sub}$  korrigeres for absorption i det egentlige spredningslag (det amorfe sample). Vi må her tage i betragtning, at vort aktuelle sample er krakeleret under fremstillingsprocessen, således at det kun delvis dækker substratet. Den blottede del af substratet benævnes "H" (et tal mellem 0 og 1), og spredningen herfra skal naturligvis ikke absorptionskorrigeres. Heraf fås nu:

$$I_{exp}^{sub} = I^{sub} \left[ H + (1 - H)e^{-2\mu_a t_a / \sin \Theta} \right] \quad (2.6)$$

I (2.5) og (2.6) er det forudsat at  $\mu_1 = \mu_2$  jævnfør (2.4). Ud fra samme forudsætninger, og i øvrigt analogt til ovenstående, beregnes den i eksperimentet aktuelle baggrundsstråling:

$$I_{exp}^{bgr} = \frac{1}{2} I_{mlt}^{bgr} + \frac{1}{2} I_{mlt}^{bgr} e^{-2\mu_s t_s / \sin \Theta} \left[ H + (1 - H)e^{-2\mu_a t_a / \sin \Theta} \right] \quad (2.7)$$

$\mu_a$  er absorptionskoefficienten for amorft Ge og  $t_a$  er Ge-lagets tykkelse.

### Den coherente spredning.

Idet vi sætter  $2\Theta = \phi$ , og med  $K(\phi)$  betegner den coherente spredningsintensitet i eu pr. volumenenhed af samplet, eller jvf. (1.10):

$$K(\phi) = \frac{N}{V} f^2(\Delta \vec{k}) S(\Delta \vec{k})$$

har vi for den teoretiske, coherente spredning,  $I_{teo}^{coh}$  (svarende til den i kapitel 2 udledte, coherente spredningsintensitet):

$$I_{teo}^{coh} = I_e' K(\phi) V \quad (2.8)$$

idet:

$$I_e' = I_e \left[ \frac{1 + \cos^2 2\Theta}{2} \right]^{-1} = I_0 \frac{e^4}{R^2 (m_e c^2)^2}$$

i cgs-enheder, jvf. Thomson's ligning.

Vi betragter altså her den teoretiske spredningsintensitet som en lineær funktion af samplets volumen, hvilket tilsyneladende stemmer dårligt overens med, at atomernes positioner er indbyrdes korrelerede, hvilket

jo skulle give interferens mellem de strålingskvanter, som spredes på vilkårlige atomer i samplet. Imidlertid udviskes middelfastandskorrelationerne, og dermed den gennemsnitlige interferenseffekt, over større interatomare afstande — dette skyldes dels det forhold, at den strukturelle orden i amorf stoffer er af lokal karakter (afstandskorrelationen af atomernes ligevægtpunkter fluktuerer statistisk), dels den termiske fluktuation i stoffet (altså en tidlig fluktuation omkring ligevægtpunktet for det individuelle atom):

For et sample af makroskopisk størrelsesorden, er et givet atom, statistisk set, således kun afstandskorrelateret med de atomer, som befinder sig indenfor et lille volumenelement,  $dV$ . Med tilnærmelse gælder der således at stråling, spredt på forskellige af sådanne volumenelementer, ikke interfererer indbyrdes. Denne antagelse er essentiel for den følgende udledning.

For den eksperimentelt målte, coherente spredning må der, på baggrund af ovenstående, gælde:

$$dI_{exp}^{coh} = I_e' K(\phi) e^{-2\mu_a x / \sin \Theta} \frac{1 + \cos^2 2\Theta}{2} K_D(\lambda) dV \quad (2.9)$$

Den bølgelængdeafhængige faktor  $K_D(\lambda)$  betegner her (og fremover) den brøkdelen af den spredte stråling, som registreres af detektoren, det vil sige:

$$K_D(\lambda) = \frac{A_{rec}}{4\pi R^2} q(\lambda)$$

hvor  $A_{rec}$  er arealet af detektorens "recieving slit",  $R$  er afstanden fra sample til detektor.  $q(\lambda)$  er detektorens kvanteeffektivitet, altså forholdet mellem den energi, som passerer detektoren pr. tidsenhed og den energi, som faktisk registreres, pr. tidsenhed.

Idet vi sætter volumenelementet  $dV = A dx$ , hvor  $A$  er det bestrålede areal's (konstante) udstrækning og  $dx$  den infinitesimale fraktion af sampletykkelsen  $t_a$ , løses den sidste differentiaalligning ved integration over intervallet  $[0, t_a]$ :

$$\begin{aligned} I_{exp}^{coh} &= I_e' K(\phi) \frac{1 + \cos^2 2\Theta}{2} K_D(\lambda) A \int_0^{t_a} e^{-2\mu_a x / \sin \Theta} dx \\ &= I_e' K(\phi) \frac{\sin \Theta}{2\mu_a} \cdot \frac{1 + \cos^2 2\Theta}{2} K_D(\lambda) A [1 - e^{-2\mu_a t_a / \sin \Theta}] \quad (2.10) \end{aligned}$$

Ved substitution af (2.8) i (2.10) fås heraf (da  $V = A \cdot t_a$ ):

$$I_{exp}^{coh} = I_{teo}^{coh} \frac{\sin \Theta}{2\mu_a t_a} \left[ 1 - e^{-2\mu_a t_a / \sin \Theta} \right] \frac{1 + \cos^2 2\Theta}{2} K_D(\lambda) \Rightarrow$$

$$I_{teo}^{coh} = I_{exp}^{coh} \frac{2\mu_a t_a}{\sin \Theta} \left[ 1 - e^{-2\mu_a t_a / \sin \Theta} \right]^{-1} \frac{2}{1 + \cos^2 2\Theta} K_D^{-1}(\lambda) \quad (2.11)$$

Ved division med  $I_e'N$  normaliseres dette intensitetsudtryk til *eu* pr. atomar spredner:

$$I_{eu,teo}^{coh}/N = I_{exp}^{coh} \frac{2\mu_a t_a}{\sin \Theta} \left[ 1 - e^{-2\mu_a t_a / \sin \Theta} \right]^{-1} \frac{2[I_e'N K_D(\lambda)]^{-1}}{1 + \cos^2 2\Theta} \quad (2.12)$$

### Comptonspredning.

Da vi ikke har mulighed for at bestemme intensiteten af den incoherente spredning (Comptonspredningen) eksperimentelt, må vi tage til takke med tabulerede værdier. Vi benytter hertil tabellen i "International Tables of X-ray Crystallography" Vol. III, s.251, hvor intensiteten angives som funktion af  $\Delta k/4\pi$  i elektronenheder pr. atomar spredner. Man må her være opmærksom på, at de tabulerede værdier er divideret med rekylfaktoren, svarende til den vinkelafhængige reduktion af den Comptonspredte strålings frekvens (Comptonspredningen er som bekendt forklaret uelastisk).

Denne rekylfaktor er givet som  $R = (\nu'/\nu)^3$ , hvor  $\nu$  er frekvensen af den indkommende stråling, mens  $\nu'$  er frekvensen efter spredning. Dette kan også skrives:

$$R = \left[ \frac{\lambda}{\lambda'} \right]^3 = \left[ 1 - \frac{1}{\lambda' m_e c} (1 - \cos 2\Theta) \right]^3 \quad (2.13)$$

hvor  $\lambda$  og  $\lambda'$  er henholdsvis den oprindelige og den forskudte bølgelængde. For den maximale bølgelængdeforskydning (som fås ved den maximale spredningsvinkel, altså ved  $2\Theta = 120^\circ$ ) har vi:

$$\Delta\lambda_{max} = \frac{3}{2} \frac{h}{m_e c}$$

og dermed:

$$\lambda'_{max} = \lambda + \Delta\lambda_{max} = \lambda + \frac{3}{2} \frac{h}{m_e c}$$

Med et Cu-target i røntgenrøret er  $\lambda$  for  $K_\alpha$ -linien 1,5418 Å, hvilket giver  $\lambda'_{max} = 1,5782\text{Å}$ . Herefter kan vi ved at indsætte denne værdi i (2.13) beregne den maximale og den minimale rekylfaktor:

$$R_{min} = R(2\Theta = 120^\circ) = 0,93$$

$$R_{max} = R(2\Theta = 0^\circ) = 1,00$$

Da den maximale relative afvigelse med hensyn til  $R$  således kun er på 7%, sætter vi fremover  $R \simeq 1$ , således at tabelværdierne kan benyttes direkte.

Udtrykket for den teoretiske Comptonspredning (kompatibelt med (2.8)) bliver nu:

$$\begin{aligned} I_{teo}^{inc} &= I'_e N S(\Delta k) \\ &\simeq I'_e N S(\Delta k) / R \end{aligned}$$

hvor  $S(\Delta k)$  er den Comptonspredte intensitet i eu pr. atom, og  $S(\Delta k)/R$  er den direkte aflæste tabelværdi.

For den  $n$ 'te atomare spreder bliver den faktiske (eksperimentelle) intensitet:

$$I_{exp}^{inc}(n) = I'_e S(\Delta k) e^{-2\mu_a x(n)/\sin\Theta} K_D(\lambda)$$

idet  $x(n)$  er den vinkelrette afstand fra samplets overflade, til det  $n$ 'te atom. I modsætning til den elastiske spredning polariseres Comptonspredningen ikke, hvorfor der ikke optræder nogen polarisationsfaktor i dette udtryk.

Vi ønsker imidlertid at få udtrykt Comptonspredningen som funktion af samplets tykkelse, hvorfor vi omformer (2.14) til en differentiallyigning ved at multiplicere højresiden med samplets atomtæthed  $\rho_n$ , og med det infinitesimale volumenelement  $dV = A dx$ , hvor  $A$  er det bestrålede areal's (konstante) udstrækning og  $dx$  dets tykkelse. Herved fås:

$$\begin{aligned} dI_{exp}^{inc}(x) &= dI_{exp}^{inc}(n) \rho_n A dx \\ &= I'_e S(\Delta k) e^{-2\mu_a x(n)/\sin\Theta} K_D(\lambda) \rho_n A dx \end{aligned}$$

Eftersom  $\rho_n A = N/t_a$ , fås ved integration over intervallet  $[0, t_a]$  og derpå følgende substitution af (2.8) i det resulterende udtryk:

$$I_{exp}^{inc} = I'_e S(\Delta k) K_D(\lambda) \frac{N}{t_a} \int_0^{t_a} e^{-2\mu_a x(n)/\sin\Theta} dx$$

$$\begin{aligned}
 &= I_e' S(\Delta k) K_D(\lambda) N \frac{\sin \Theta}{2\mu_a t_a} [1 - e^{-2\mu_a t_a / \sin \Theta}] \\
 &= I_{teo}^{inc} K_D(\lambda) \frac{\sin \Theta}{2\mu_a t_a} [1 - e^{-2\mu_a t_a / \sin \Theta}]
 \end{aligned}$$

heraf fås umiddelbart:

$$I_{teo}^{inc} = I_{exp}^{inc} \frac{2\mu_a t_a}{\sin \Theta} [1 - e^{-2\mu_a t_a / \sin \Theta}]^{-1} K_D^{-1}(\lambda)$$

hvilket normaliseres ved division med  $I_e' N$ :

$$\begin{aligned}
 I_{eu,teo}^{inc} / N &= S(\Delta k) \\
 &= I_{exp}^{inc} \frac{2\mu_a t_a}{\sin \Theta} \cdot \frac{[I_e' N K_D(\lambda)]^{-1}}{[1 - e^{-2\mu_a t_a / \sin \Theta}]} \quad (2.15)
 \end{aligned}$$

### Fluorescens.

Som før omtalt, vil man normalt søge at tilrettelægge sit eksperiment på en sådan måde at fluorescensstrålingens bidrag til den målte spredningsintensitet er negligerbar — dels ved at vælge et passende røntgen-target, dels ved at anvende en strålingsdetektor med energiselektion.

Nedenfor angives et udtryk for den eksperimentelle fluorescensintensitet, hvor  $\mathcal{F}$  angiver intensiteten i eu pr. atomar spreder. Det bemærkes, at  $\mathcal{F}$  ikke afhænger af spredningsvinklen;

$$I_{exp}^{flr} = \mathcal{F} N I_e' K_D(\lambda_{flr}) \frac{\sin \Theta}{[\mu_a + \mu_{flr}] t} [1 - e^{-(\mu_a + \mu_{flr}) t / \sin \Theta}] \quad (2.16)$$

Her er  $\lambda_{flr}$  og  $\mu_{flr}$  bølgelængde og lineær absorptionskoefficient for fluorescensstrålingen. Eftersom  $\lambda_{flr}$  i mange tilfælde kan ligge langt fra  $\lambda$ , og da detektorens effektivitet er frekvensafhængig, vil  $K_D(\lambda) \neq K_D(\lambda_{flr})$ .

### Normaliserings procedure

Ved nu at sammenholde ligningerne (2.3), (2.12), (2.15) og (2.16) fås:

$$I_{eu,teo}^{coh} / N \cdot \frac{1 + \cos^2 2\Theta}{2} + S(\Delta k)$$

$$\begin{aligned}
& + \mathcal{F} \frac{2\mu_a}{[\mu_a + \mu_{flr}]} \cdot \frac{[1 - e^{-(\mu_a + \mu_{flr})t/\sin\Theta}]}{[1 - e^{-2\mu_a t/\sin\Theta}]} \cdot \frac{K_D(\lambda_{flr})}{K_D(\lambda)} \\
& = [I^{coh} + I^{inc} + I^{flr}]_{exp} \cdot \frac{Q}{[1 - e^{-2\mu_a t/\sin\Theta}] \sin\Theta} \\
& = [I^{tot} - I^{sub} - I^{bgr}]_{exp} \cdot \frac{Q}{[1 - e^{-2\mu_a t/\sin\Theta}] \sin\Theta}
\end{aligned}$$

hvor vi har indført normaliseringskonstanten  $Q$  ved substitutionen:

$$Q = \frac{2\mu_a t_a}{I_e' N K_D(\lambda)}$$

Endelig isoleres den normaliserede teoretiske, coherente spredningsintensitet:

$$\begin{aligned}
I_{eu,teo}^{coh}/N & = \left[ Q \frac{[I^{tot} - I^{sub} - I^{bgr}]_{exp}}{[1 - e^{-2\mu_a t/\sin\Theta}] \sin\Theta} - \mathcal{S}(\Delta k) \right. \\
& \left. - \mathcal{F} \frac{2\mu_a}{[\mu_a + \mu_{flr}]} \cdot \frac{[1 - e^{-(\mu_a + \mu_{flr})t_a/\sin\Theta}]}{[1 - e^{-2\mu_a t_a/\sin\Theta}]} \frac{K_D(\lambda_{flr})}{K_D(\lambda)} \right] \frac{2}{1 + \cos^2 2\Theta}
\end{aligned} \quad (2.17)$$

hvor  $I_{exp}^{sub}$  og  $I_{exp}^{bgr}$  er givet ved henholdsvis (2.6) og (2.7). I almindelighed vil vi som nævnt negligere fluorescensen, og benytte det modificerede udtryk:

$$I_{eu,teo}^{coh}/N = \left[ Q \frac{[I^{tot} - I^{sub} - I^{bgr}]_{exp}}{[1 - e^{-2\mu_a t/\sin\Theta}] \sin\Theta} - \mathcal{S}(\Delta k) \right] \frac{2}{1 + \cos^2 2\Theta} \quad (2.18)$$

Til at fastlægge normaliseringskonstanten  $Q$ , benyttes den allerede udledte konvergensrelation (2.2):

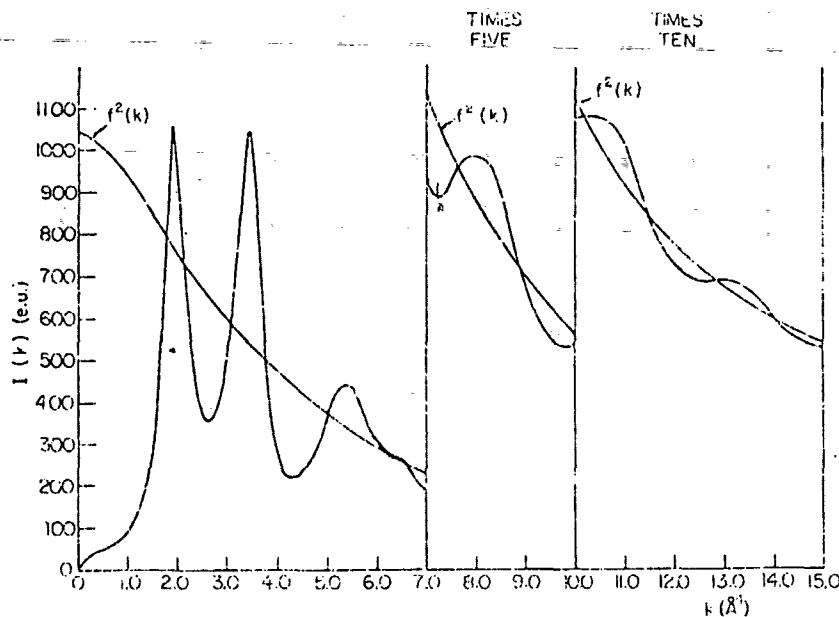
$$I_{eu,teo}^{coh}(\Delta \vec{k})/N \rightarrow f^2(\Delta \vec{k}) \text{ for } \Delta k \rightarrow \infty \quad (2.19)$$

hvilket ses umiddelbart at medføre:

$$\begin{aligned}
Q \frac{[I^{tot} - I^{sub} - I^{bgr}]_{exp}}{[1 - e^{-2\mu_a t/\sin\Theta}] \sin\Theta} \cdot \frac{2}{1 + \cos^2 2\Theta} & \rightarrow f^2(\Delta \vec{k}) + \frac{2}{1 + \cos^2 2\Theta} \mathcal{S}(\Delta k) \\
\text{for } \Delta k & \rightarrow \infty
\end{aligned}$$

Ved at variere  $Q$ , kan den korrigerede eksperimentelle intensitetskurve nu "fittes", indtil den opfylder konvergensbetingelsen som illustreret

nedenfor (figuren er hentet fra R. J. Temkin m.fl. : "The structural and optical properties of amorphous germanium", s.596).



Coherent X-ray scattering intensity,  $I(k)$ , in electron units (e.u.), for an a-Ge film with  $T_s = 150^\circ\text{C}$ . Also shown is  $f^2(k)$ , the square of the dispersion corrected atomic scattering factor of Ge.

Hvis fluorescensintensiteten er af en størrelsesorden der ikke umiddelbart kan negligeres som bidragyder til den målte spredningsintensitet — hvilket for eksempel kan tænkes at være aktuelt, når diffraktionseksperimentet, som i vort tilfælde, udføres med en strålingsdetektor uden energiopløsning — skal der imidlertid tages hensyn hertil ved normaliseringen, som i dette tilfælde behæftes med en betydelig usikkerhed. Idet vi som normaliseringsfaktor for fluorescensen indfører:

$$K_{flr} = \mathcal{F} \frac{2\mu_a}{[\mu_a + \mu_{flr}]} \frac{K_D(\lambda_{flr})}{K_D(\lambda)}$$

bliver konvergenzkriteriet nu:

$$Q \frac{[I^{tot} - I^{sub} - I^{bgr}]_{exp}}{[1 - e^{-2\mu_a t / \sin \Theta}] \sin \Theta} \rightarrow f^2(\Delta \vec{k}) \frac{1 + \cos^2 2\Theta}{2} + \mathcal{S}(\Delta k) + K_{flr} \frac{[1 - e^{-(\mu_a + \mu_{flr})t_a / \sin \Theta}]}{[1 - e^{-2\mu_a t_a / \sin \Theta}]} \quad (2.20)$$

De to konstanter,  $Q$  og  $K_{flr}$ , varieres nu succesivt, indtil denne betingelse skønnes at være bedst muligt opfyldt.



Den/de fundne normaliseringskonstant(er) indsættes i henholdsvis (2.17) eller (2.18), hvorefter den reducerede interferensfunktion umiddelbart kan findes, ved brug af:

$$i(\Delta k) = \frac{I_{eu,teo}^{coh}/N}{f^2(\Delta k)} - 1$$

For at finde den radiale distributionsfunktion  $D(r)$ , skal  $i(\Delta k)$  indsættes i ligningen (1.19):

$$D(r) = 4\pi r^2 \rho_0 + \frac{2r}{\pi} \int_0^\infty \Delta k i(\Delta k) \sin \Delta k r d(\Delta k) \quad (2.21)$$

som derefter løses ved numerisk integration. Heraf kan direkte fremstilles den reducerede radiale distributionsfunktion:

$$D_R(r) = 4\pi r^2 [\rho(r) - \rho_0] = D(r) - 4\pi r^2 \rho_0 \quad (2.22)$$

Af andre korrelationsfunktioner kan for eksempel fremstilles den totale korrelationsfunktion:

$$t(r) = 4\pi r \rho(r) = \frac{D(r)}{r} \quad (2.23)$$

og afledt heraf den differentielle korrelationsfunktion, som siden benyttes:

$$d(r) = 4\pi r [\rho(r) - \rho_0] = t(r) - 4\pi r \rho_0 \quad (2.24)$$

## 2.4 Grafiske repræsentationer af eksperimentelle data

Der fremstilledes, som nævnt andetsteds i teksten, to sampler af germanium, pådampet PVC-film ("Vita-wrap") af tykkelse  $12 \mu\text{m}$  (ifølge varedeklarationen på pakken).

Ved fremstillingen af samtlige diffraktogrammer, præsenteret i det følgende, er anvendt et Philips røntgenrør ("Long fine focus") med Cu-target, forsynet med Ni-filter. Accelerationsspændingen sættes til 40 kV, strømstyrken til 40 mA med en resulterende generatoreffekt på 1,6 kW.

Desuden er som faste parameterverdier anvendt følgende:

Scanneinterval:  $0^\circ - 120^\circ (2\theta)$

Goniometer hastighed:  $0,02^\circ 2\theta \text{ s}^{-1}$

Receiving-slitbredde:  $0,2 \text{ mm}$

Ved korrektionerne er benyttet følgende konstanter, med de i afsnit (2.3.2) anvendte betegnelser:

Bølgelængder:

$$\lambda_{\text{Cu-K}\alpha} = 1,5418 \text{ \AA}$$

$$\lambda_{\text{fIr}} = 10,3 \text{ \AA}$$

Lineære absorptionskoefficienter:

$$\mu_a = \mu_{\text{Ge}}(\lambda_{\text{Cu-K}\alpha}) = 0,038 \mu\text{m}^{-1}$$

$$\mu_s = \mu_{\text{PVC}}(\lambda_{\text{Cu-K}\alpha}) = 0,0078 \mu\text{m}^{-1}$$

$$\mu_{\text{fIr}} = \mu_{\text{Ge}}(\lambda_{\text{fIr}}) = {}^2 1,1 \mu\text{m}^{-1}$$

Tykkelse af substrat:

$$t_s = t_{\text{PVC}} = 12 \mu\text{m}$$

---

<sup>2</sup>1,1 er den benyttede værdi, skønt beregningen af  $\mu_{\text{fIr}}$  (Appendix A) giver 1,3. Dette skyldes en for sent opdaget simpel regnefejl.

### 2.4.1 Sample 1 (GEP1-s16)

Tykkelsen af det pådampede Ge-lag er estimeret ud fra en registreret frekvensændring på den pizelektrisk krystal, under pådampningen, på 19,9 kHz, hvilket svarer til en lagtykkelse på  $0,7 \mu\text{m}$  (ifølge kalibreringskurve udført af Petr Višcor).

Det viste spektrum (GEP-s16) er fremkommet ved en midling af 15 individuelt optagne diffraktogrammer.

#### Ubehandlede data

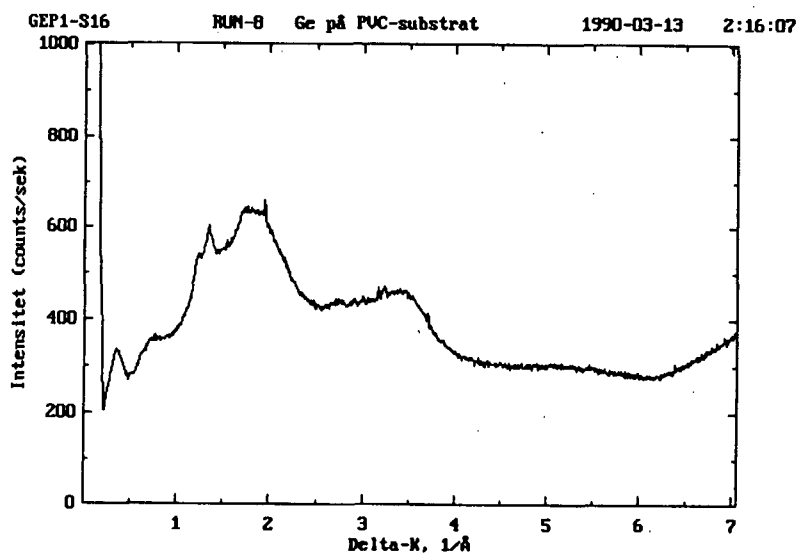


Fig. 1: Ukorrigeret diffraktogram af sample 1.

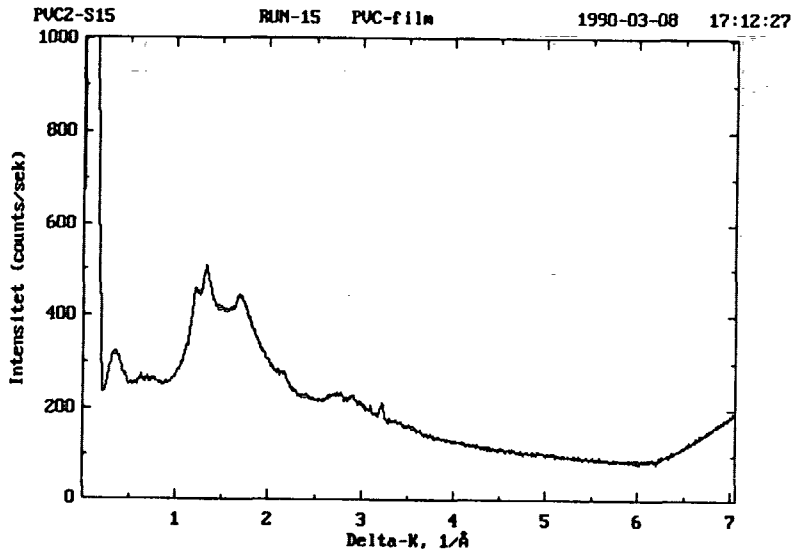


Fig. 2: Ukorrigeret diffraktogram af substrat 1.

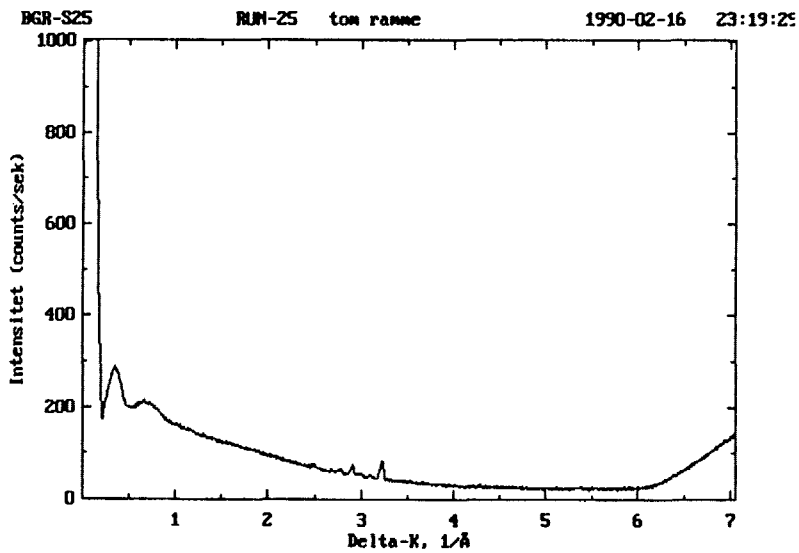


Fig. 3: Ukorrigeret diffraktogram af baggrundsstrålingen.

## Korrektion for substratspredning, baggrund og absorption

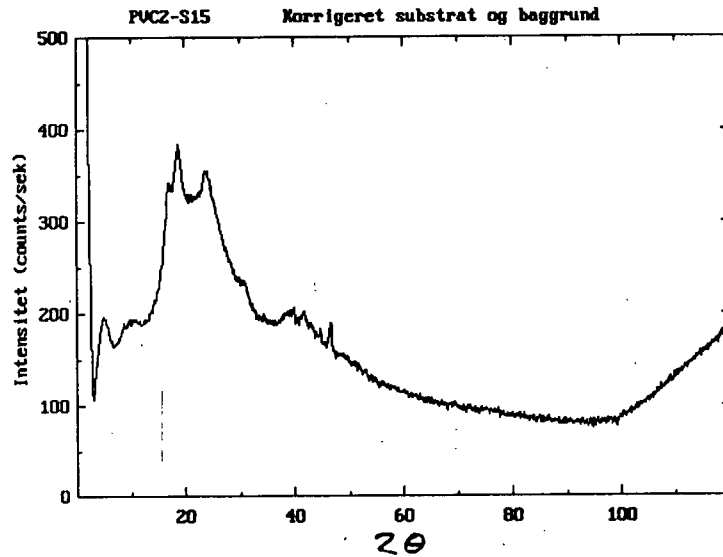


Fig. 4: Substrat 1, korrigeret for absorption og baggrund, iflg formel (2.4) plus absorptionskorrigeret baggrund.

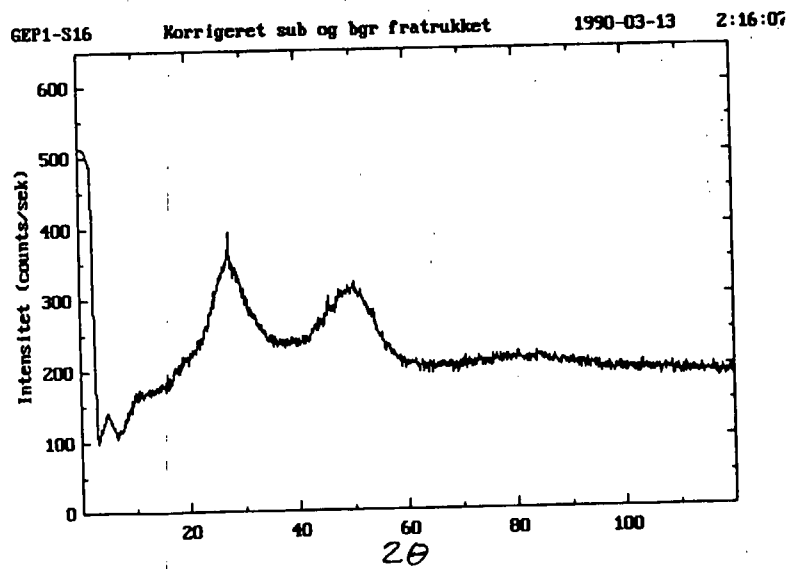


Fig. 5: Sample 1, korrigeret for substrat og baggrund.

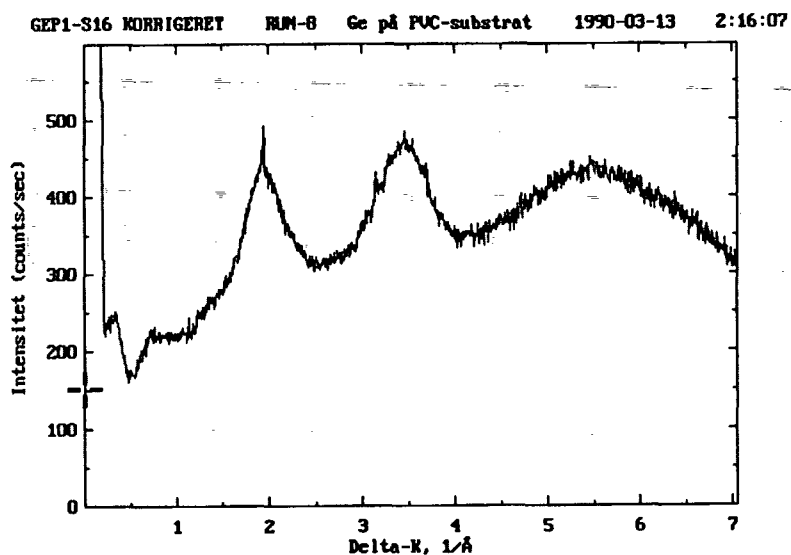


Fig. 6: Sample 1, korrigeret for substrat, baggrund og absorption.

### Normalisering og korrektion for incoherent spredning

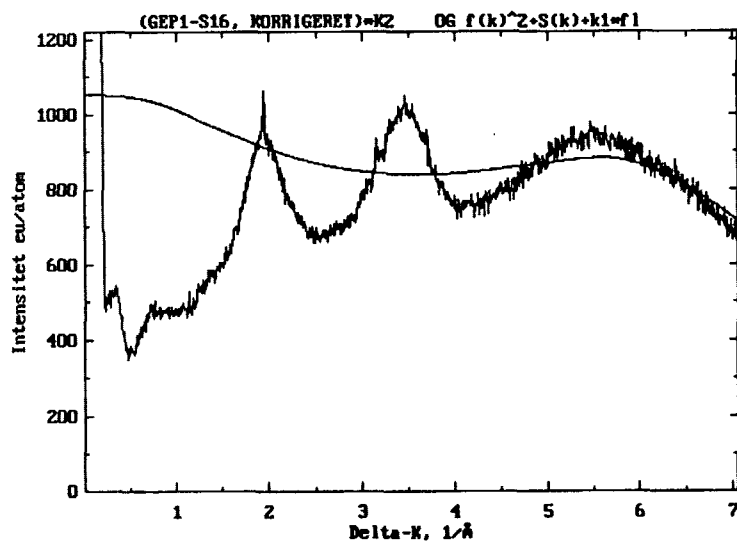


Fig. 7: Normaliseringskonstanter fastlægges, ved anvendelse af konvergensrelationen (2.20). ( $K_F = 30$ ,  $Q = 0,17$ ).

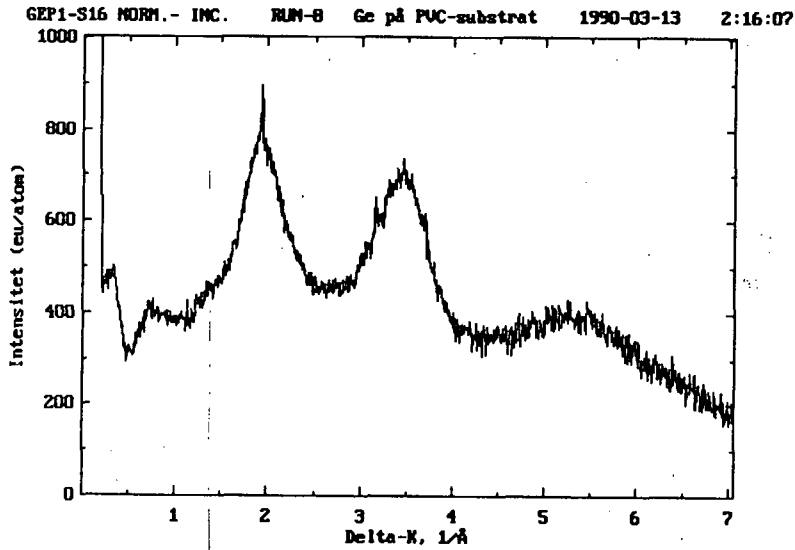


Fig. 8: Fra den normaliserede, teoretiske intensitet subtraheres Comptonspredning og fluorescens.

### Beregning af den reducerede interferensfunktion og den reducerede radiale distributionsfunktion

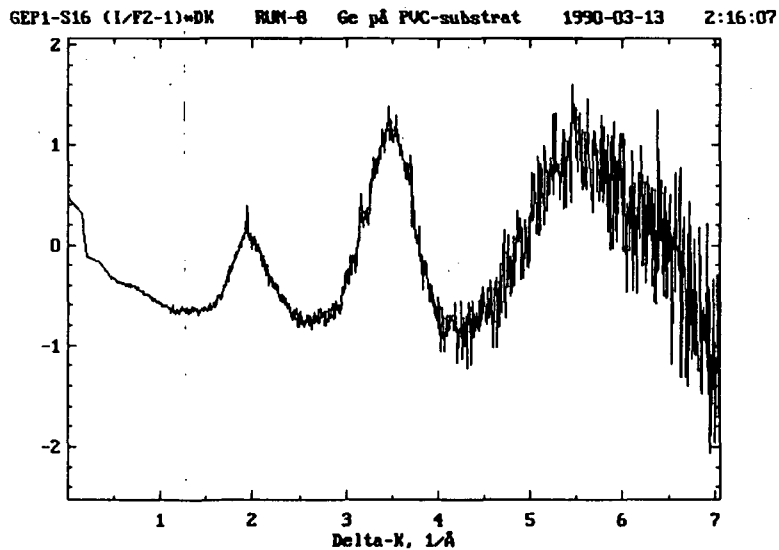


Fig. 9: Den reducerede interferensfunktion  $i(\Delta k)$ , multipliceret med  $\Delta k$ .

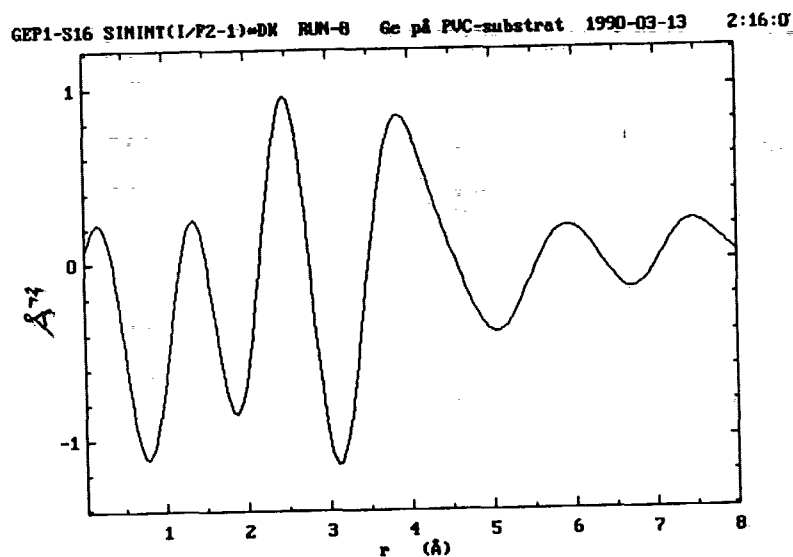


Fig.10: Ved Fouriertransformation af  $\Delta k i(\Delta k)$  findes den differentielle korrelationsfunktion (formel (2.21))

#### 2.4.2 Sample 2 (GEP3-s25)

Ge-lagets tykkelse er her beregnet ved IR-spektrofotometri, til 3,5  $\mu\text{m}$ . Intensitetskurven for "GEP3-s25" er fremstillet ved midling af 25 difraktogrammer.



## Ubehandlede data

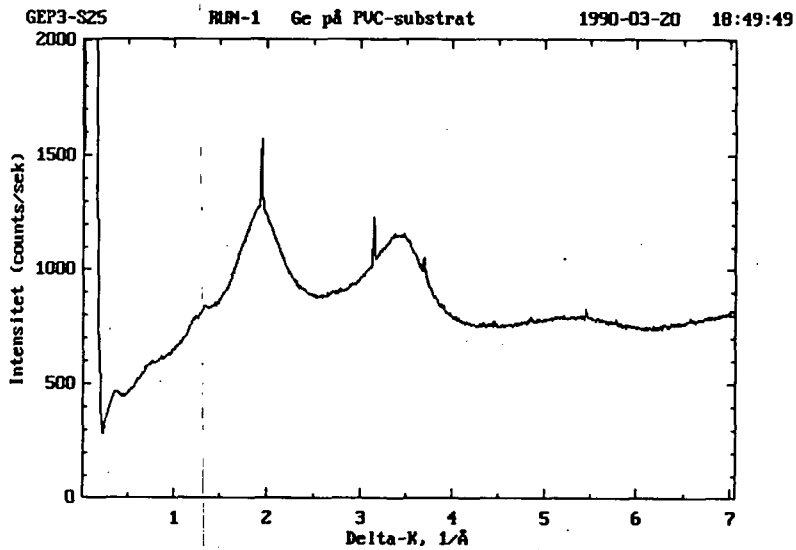


Fig.11: Ukorrigeret diffraktogram af sample 2.

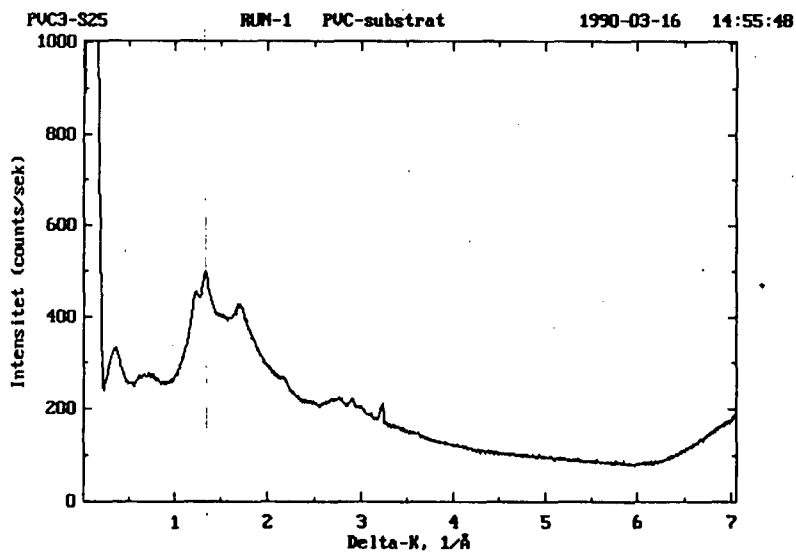


Fig.12: Ukorrigeret diffraktogram af substrat 2.

## Korrektion for substratspredning, baggrund og absorption

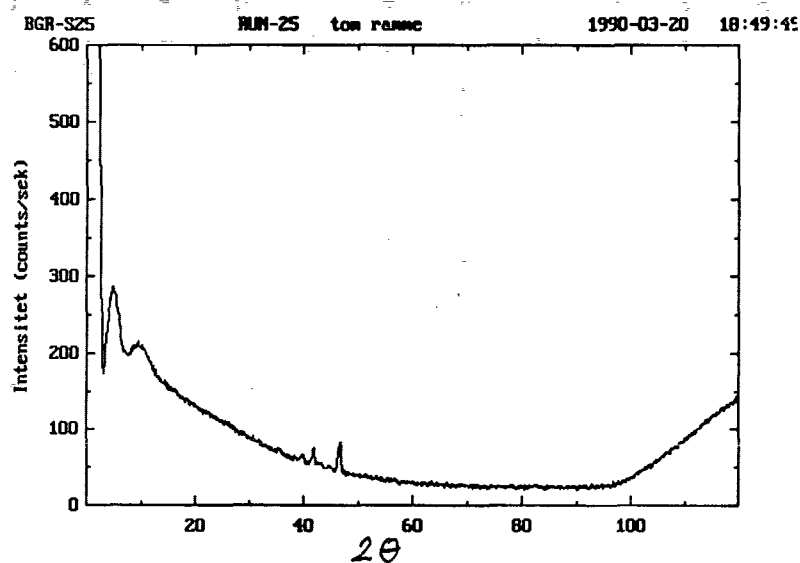


Fig.13: Ukorrigeret diffraktogram af baggrundsstrålingen.

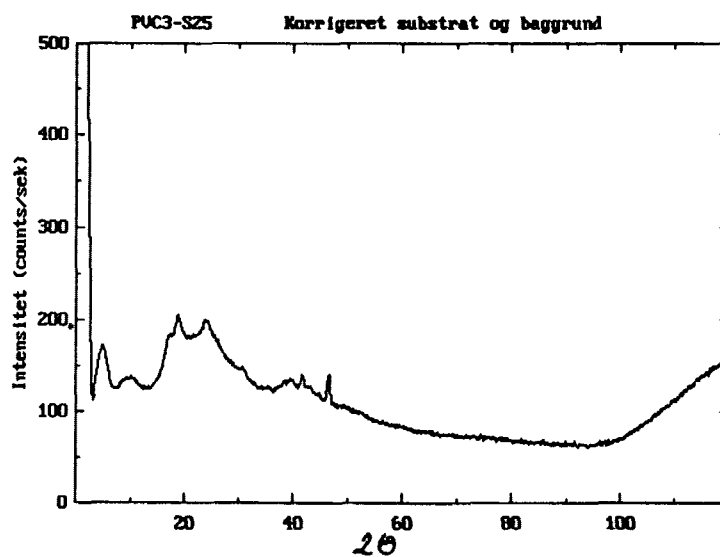


Fig.14: Substrat 2, korrigeret for absorption og baggrund, plus absorptionskorrigeret baggrund .

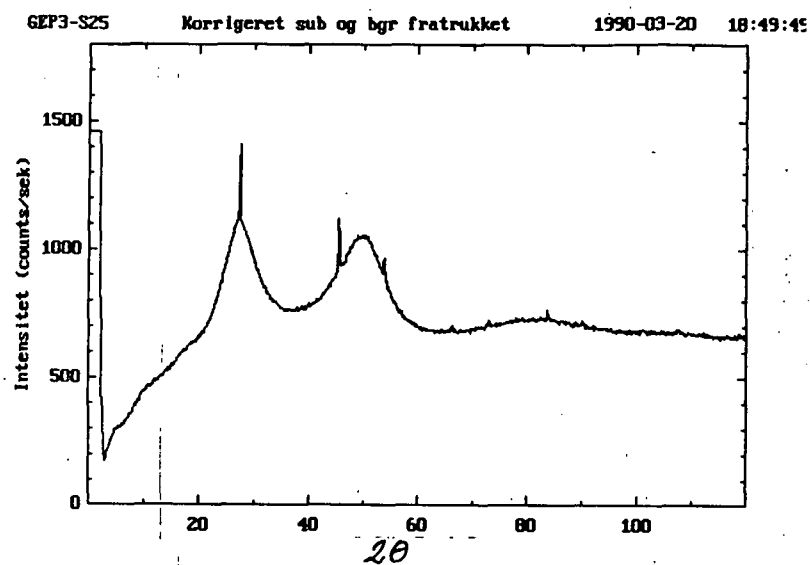


Fig.15: Sample 2, korrigeret for substrat og baggrund.

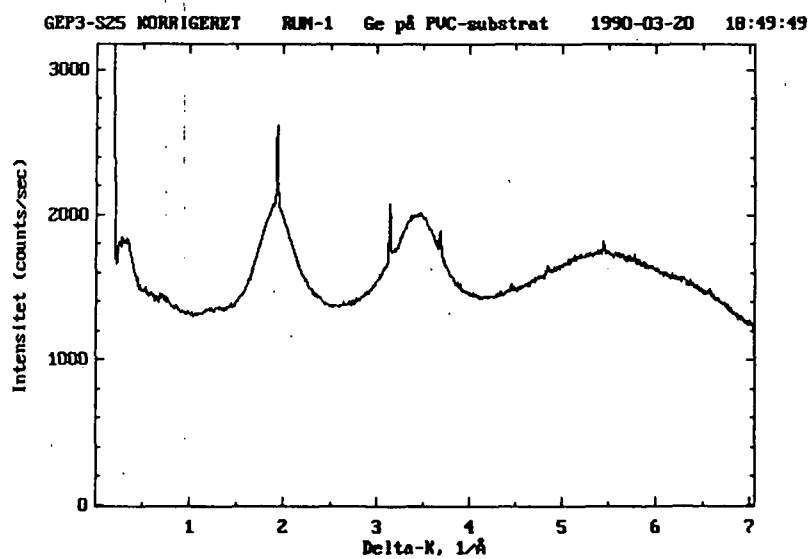


Fig.16: Sample 2, korrigeret for substrat, baggrund og absorption. Parameterrummet er transformeret fra  $2\theta$  til  $\Delta k$ .

## Normalisering og korrektion for incoherent spredning

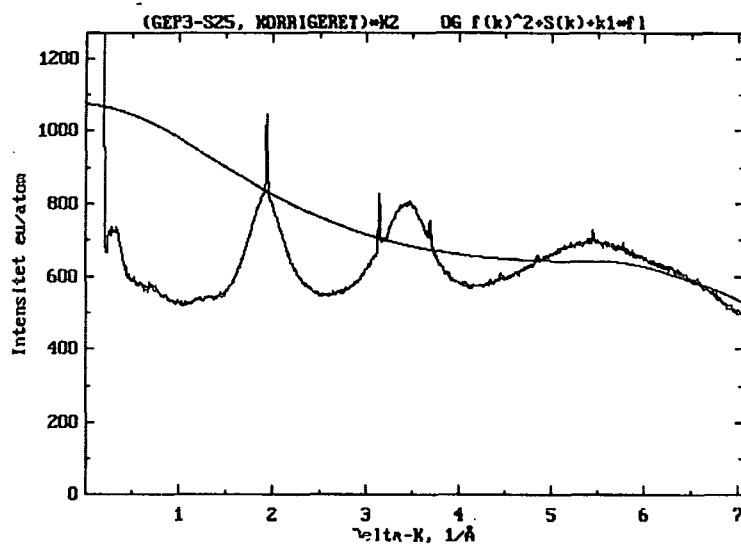


Fig.17: Normaliseringskonstanter fastlægges, ved anvendelse af konvergensrelationen (2.20). ( $K_F = 50$ ,  $Q = 0,15$ )

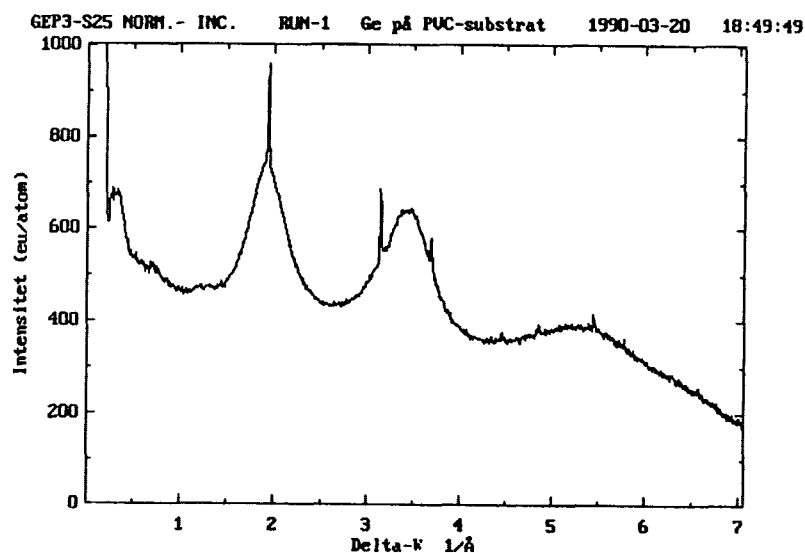


Fig.18: Fra den normaliserede, teoretiske intensitet subtraheres Comptonspredning og fluorescens.

### Beregning af den reducerede interferensfunktion og den reducerede radiale distributionsfunktion

GEP3-S25 (1/FZ-1)=DK RUM-1 Ge på PUC-substrat 1990-03-20 18:49:49

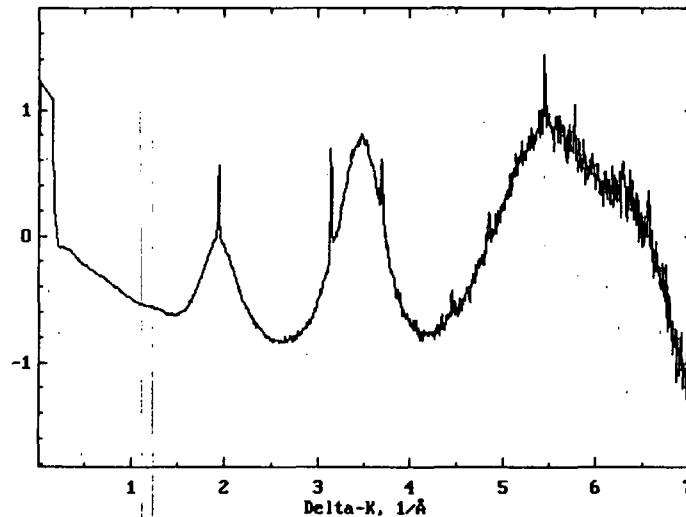


Fig.19: Den reducerede interferensfunktion  $i(\Delta k)$ , multipliceret med  $\Delta k$ .

GEP3-S25 SININT(1/FZ-1)=DK RUM-1 Ge på PUC-substrat 1990-03-20 18:49:49

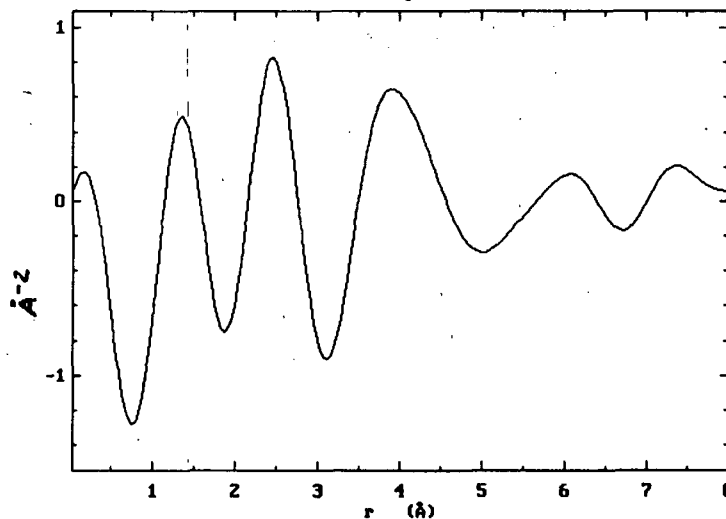


Fig.20: Ved Fouriertransformation af  $\Delta k i(\Delta k)$  findes den differentielle korrelationsfunktion (formel (2.20))



## Kapitel 3

# Diskussion og konklusion

### Vurdering af intensitetsdata for sample-1 og -2, før og efter korrektion

I intensitetskurverne for begge sampler bemærkes tilstedeværelsen af (mindst) tre skarpe diffraktionstoppe. Placeringen af disse toppe i  $\Delta k$ -rummet svarer ganske nøje til de første tre intensitetsmaxima i røntgenspektre for krystallinsk germanium. Vi må derfor konstatere, at der åbenbart er sket en delvis krystallisation under pådampningsprocessen. For krystallinske stoffer, kan den coherente spredningsintensitet imidlertid beskrives ved en tilnærmet deltafunktion, hvorfor vi antager at intensiteten udenfor de nævnte diffraktionstoppe kun udgør et ganske ringe bidrag til den totale intensitet. Fremfor at forsøge at korrigere herfor, vil vi derfor blot negligere intensitetsbidraget fra krystallinsk Ge.

Den, for absorption, baggrund og substratspredning, korrigerede intensitetskurve konvergerer tilsyneladende ikke mod nul, hvilket man umiddelbart skulle forvente, idet vi jo har:

$$I_{eu,teo}^{coh} \rightarrow f^2(\Delta k) \rightarrow 0$$

for store  $\Delta k$ . Det skal her indskydes, at årsagen ikke kan være Comptonspredningens bidrag, idet denne er helt ubetydelig ved spredning af Cu- $K_\alpha$ -stråling på Ge. For  $\Delta k = 7$  har vi således at  $f^2(\Delta k)/S(\Delta k) \simeq 17$ . Vi må derfor konkludere at andre spredningsprocesser, end de to nævnte, bidrager til den eksperimentelle intensitet.

Vi bemærker endvidere at intensitetskurverne for sample-1 og -2 efter absorptionskorrektion forløber kvalitativt forskelligt, hvilket mere tydeligt fremgår af nedenstående to figurer:

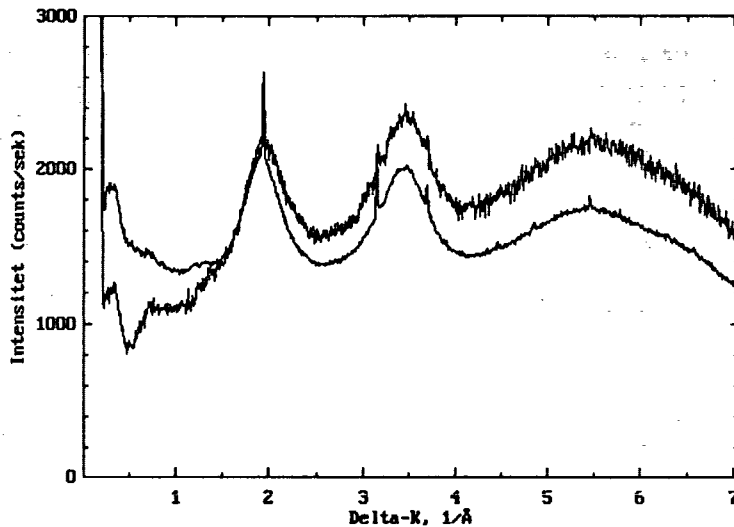


Fig. 1: Sample-1 er her multipliceret med forholdet  $t_2/t_1$ .  $t_1$  og  $t_2$  er tykkelsen af henholdsvis sample-1 og sample-2. De angivne intensiteter er korrigerede for baggrund, substrat og absorption. Det ses tydeligt at kurverne ikke er proportionale.

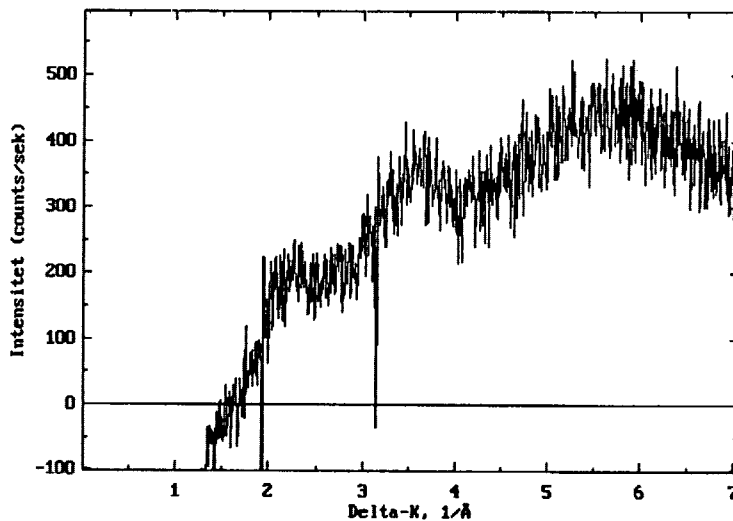


Fig. 2: Differensen mellem de to intensitetskurver, vist på fig. 1.



Den anvendte absorptionskorrektionsfaktor afhænger, foruden af sam-  
pletykkelse, spredningsvinkel og konstante faktorer, kun af den lineære  
absorptionskoefficient,  $\mu_a = \mu_{Ge}(\lambda_{Cu-K\alpha})$ . Forudsat de respektive sam-  
plers tykkelse er rigtigt estimeret, må forklaringen derfor være, at  $\mu_a$   
*ikke* beskriver den totale absorption i spredningslaget — det vil sige: at  
en del af den spredte stråling har en bølgelængde, som afviger væsent-  
ligt fra bølgelængden af Cu- $K_\alpha$ -strålingen. Vi tolker denne stråling af  
afvigende bølgelængde som værende fluorescens, som jvf. ovenstående  
altså må udgøre en betragtelig del af den målte intensitet.

På nedenstående fig. 3 vises afvigelsen mellem de beregnede fluore-  
scensintensiteter for sampletykkelser svarende til sample-1 og -2 (hen-  
holdsvis  $0,7\mu m$  og  $3,5\mu m$ ), multipliceret med de respektive (ligele-  
des t-afhængige) absorptionskorrektionsfaktorer. Absorptionskoeffici-  
enten for absorption i Ge af fluorescensstrålingen ( $\lambda_{flr} = 10,3\mu m$ ),  
er som ved behandlingen af de eksperimentelle data sat til  $1,1\mu m^{-1}$ .

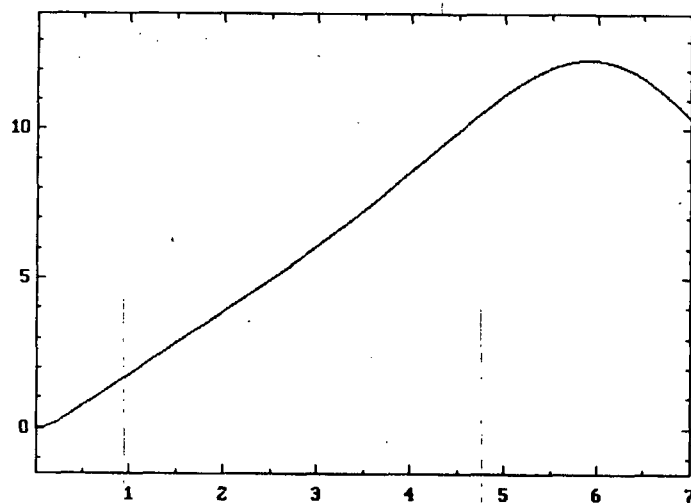


Fig.3

Hvis ovenstående antagelse (om en dominerende fluorescensintensitet i  
eksperimentet) skal kunne accepteres, må forudsætningen være, at de to  
differenskurver på fig.2 og fig.3 udviser stort set samme karakteristiske  
forløb. Dette synes også at være tilfældet.

Intensitetskurverne falder ikke af mod nul, som forventet, for  $\Delta k \rightarrow 0$ .  
Divergensen blæses voldsomt op ved absorptionskorrektionen, som jo

involverer division med  $\sin \Theta$ . Som mulige årsager til denne afvigelse har vi overvejet:

(1) Multipel spredning.

Denne må imidlertid antages at være ganske ubetydelig, idet den lineære spredningskoefficient, for spredning af Cu- $K_\alpha$ -stråling på Ge er så lille som  $0,17 \cdot 10^4 \mu\text{m}^{-1}$ , hvorudfra vi anslår den totale spredningsintensitet (fluorescens ikke iberegnet) til mindre end 1 promille af intensiteten af den indkommende stråling. Intensiteten af den multiple spredning anslår vi derfor til at være af størrelsesordenen promille af den totale spredning, og dermed negligerel.

(2) "Small angle scattering".

Hermed menes coherent spredning på hulrum af makroskopisk størrelsesorden og andre inhomogeniteter, dannet i Ge-laget under pådampningsprocessen. Ved små  $\Delta k$  kunne denne spredning tænkes at yde et måleligt bidrag til den totale intensitet. Vi har imidlertid ikke undersøgt fænomenet nærmere.

### Normaliseringen

Et væsentligt problem ved den her anvendte normaliseringsprocedure er naturligvis at hele to konstanter skal fastlægges alene ud fra et skøn, da vi mangler præcise kriterier, for hvornår den hertil benyttede konvergensbetingelse er opfyldt. Med hensyn til konstanten  $Q$ , er problemet dog primært at konvergensforholdet er uklart på grund af intensitetskurvens afslutning allerede ved  $\Delta k = 7,1 \text{ \AA}^{-1}$ ; dette dog naturligvis forudsat at  $K_F = \mathcal{F}K_D(\lambda_{flr})/K_D(\lambda_{Cu-k_\alpha})$  er valgt korrekt. Er denne forudsætning opfyldt anslår vi, at det er muligt at bestemme  $Q$  inden for en usikkerhed på ca 10%. Hovedproblemet er den korrekte bestemmelse af  $K_F$ , og om den heri involverede usikkerhed har vi ikke nogen klar ide.

Det må imidlertid konstateres at vi ved normaliseringen af intensitets-spektrene for sample<sub>1</sub> og sample<sub>2</sub> har fundet frem til to forskellige værdier af  $K_F$ , henholdsvis 30 og 50. Det er ikke lykkedes os at opnå blot nogenlunde rimelige konvergensforløb for begge intensitetskurver, med den samme værdi af  $K_F$ .

Vi mener ikke at den store forskel (næsten en faktor 2 !) alene beror på fejlskøn, idet en meget betydelig usikkerhed må tages i betragtning, ved bestemmelsen af absorptionskoefficienten for absorption af fluorescensstrålingen i Ge,  $\mu_{flr}$  (se Appendix A). Vores vurdering er, at den største fejlkilde skal søges her.

### Den differentielle korrelationsfunktion, $d(r)$

De i afsnit (2.4) viste grafer for  $d(r)$  er fremkommet ved integration over  $\Delta k$ -intervallet  $0,28 \text{ \AA}^{-1} - 6,68 \text{ \AA}^{-1}$ .

For at teste betydningen for den beregnede  $d(r)$ , af den ovenfor omtalte divergens af intensiteten for små  $\Delta k$ , har vi udført en tilsvarende beregning for sample-2, blot med den forskel at intensiteten er sat

lig nul, for  $\Delta k < 1,5 \text{ \AA}^{-1}$ . Den således fremkomne kurve er vist nedenfor på Fig.4.

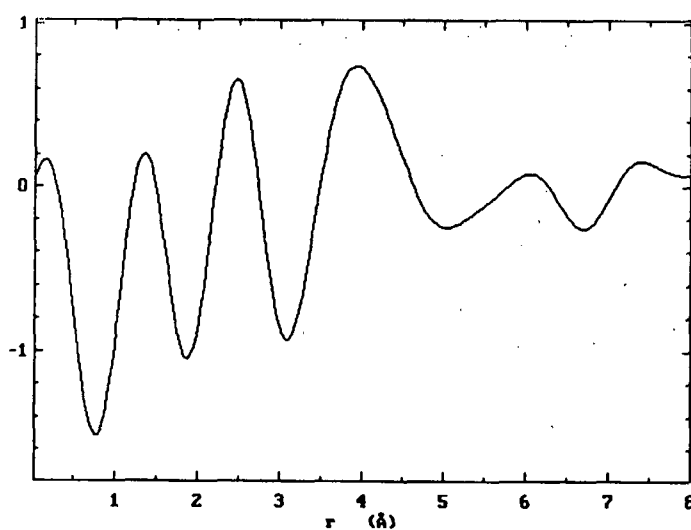
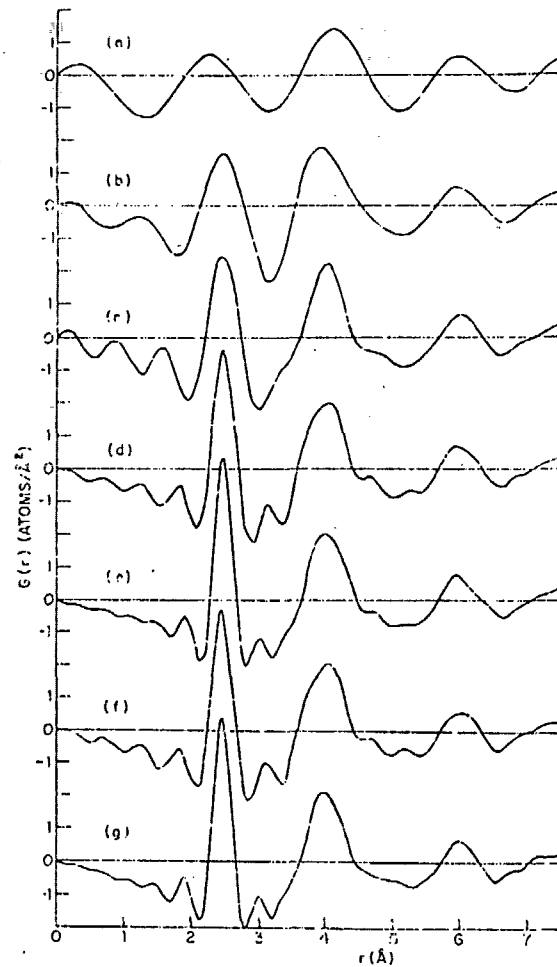


Fig.4

Ved sammenligning finder vi ikke at kurvens forløb er ændret i bety-  
dende grad.

På Fig.5 er vist eksperimentelt fundne kurver af  $d(r)$ , med varierende fejl, opstået ved afslutning med hensyn til  $\Delta k$ .



$G(r)$  of  $\alpha$ -Ge,  $T_g = 150^\circ\text{C}$ . for  $F(k)$  data terminated at (a)  $4 \text{ \AA}^{-1}$ , (b)  $6 \text{ \AA}^{-1}$ , (c)  $9 \text{ \AA}^{-1}$ , (d)  $12 \text{ \AA}^{-1}$ , and (e)  $15 \text{ \AA}^{-1}$ . Also  $G(r)$  of  $\alpha$ -Ge,  $T_g = 350^\circ\text{C}$ , for  $F(k)$  data terminated at (f)  $12 \text{ \AA}^{-1}$  and (g)  $15 \text{ \AA}^{-1}$ .

Fig.5 Kilde: R.J.Temkin m.fl. "The structural and optical properties of amorphous germanium", s. 604.

Ved sammenligning af "vores"  $d(r)$ , med kurve (b) på Fig.5 synes der at

være en rimelig overensstemmelse med hensyn til toppenes placering og indbyrdes størrelsesforhold, når man ser bort fra de kraftige oscillationer for  $\Delta k$  mellem 0 og 2 Å. Oscillationerne som sådan skyldes den fejl som opstår ved afslutningen med hensyn til  $\Delta k$  (i princippet skal Fourierintegralet jo udvikles fra 0 til  $\infty$ ). Årsagen til at disse oscillationer bliver så kraftige har vi derimod

ikke kunnet identificere; vi kan i den forbindelse blot henvise til de før omtalte usikkerhedsmomenter ved normaliseringsproceduren; i særdeleshed problemerne forbundet med korrektionen for fluorescensstråling.

### 3.1 Konklusion

Ved afslutningen af dette projektarbejde må vi konstatere, at vi må lade en række problemer uløste.

Det største af dem er uden tvivl, at det ikke er lykkedes os at udvikle en datakorrektionsprocedure som på tilfredsstillende vis

er i stand til at kompensere for den væsentligste mangel ved vor eksperimentelle opstilling; nemlig at røntgendiffraktometret er forsynet med en strålingsdetektor uden energiopløsning. I forbindelse med vor eksperimentelle procedure, medfører dette en række besværligheder, som alle opstår på grund af forekomsten af fluorescens i vore eksperimentelle diffraktionsdata:

- (a) En endog særdeles usikker normalisering af intensitetsdata.
- (b) Et indtil videre uløst problem i forbindelse med absorptionskorrektionerne, da det ikke er lykkedes os at fremskaffe

eksakte data for absorptionen i spredningslaget, af den i eksperimentet forekommende fluorescens.

- (c) Ved diffraktionseksperimenter med Ge som spredner, er det efter alt at dømme omsonst at benytte andre targetmaterialer end Cu. At dømme efter Fig.5 er det begrænsede  $\Delta k$ -rum dog ikke noget stort problem ved kortlægning af korrelationsfunktionens kvalitative forløb, da afslutningsfejlen med  $\Delta k_{max} > 6 \text{ \AA}^{-1}$  åbenbart ikke i særlig grad påvirker placeringen i realrummet af maxima og minima for  $\rho(r)$  og deraf afledte korrelationsfunktioner.

Hvis diffraktometeropstillingen i praksis skal benyttes til korrelationsundersøgelser af amorfe stoffer, bør et absolut midstekrav efter vor mening være, at rimelig præcise data for absorption i det stof som skal undersøges, samt pålidelig og udførlig information om kvanteeffektiviteten af diffraktometrets

strålingsdetektor, bringes til veje, således at usikkerheden ved den nødvendige fluorescenskorrektur (forhåbentlig) kan reduceres betragteligt. Dog ville en langt bedre løsning være at udskifte den famøse detektor til en, til formålet, bedre egnet (det vil naturligvis sige en detektor med en rimelig energioopløsning).

Det ville naturligvis også i høj grad være ønskeligt, at årsagen til det omtalte divergensproblem ved små  $\Delta k$  blev opklaret. Vi er ikke i stand til at foreslå nogen egentlig løsningsmodel, men til en mere konkret analyse af problemet, vil vi dog anbefale at man fremskaffer stofsprøver som faktisk er amorfe, som ikke er krakelerede og som i det hele taget er fremstillet under bedre kontrollerede omstændigheder, end det har været os muligt. Kort sagt: at man så vidt muligt sørger for at være velinformeret om, hvad det faktisk er man måler på.

## Appendiks A

### Beregning af lineære absorptionskoefficienter.

I "International tables of X-ray crystallography", Vol.3, s.161 er angivet en empirisk relation til beregning af masseabsorptionskoefficienter:

$$\frac{\mu}{\rho} = C\lambda^3 - D\lambda^4 + \sigma_{K-N}NZ/A \quad (\text{A.1})$$

hvor  $\lambda$  er strålingsbølgelængden,  $Z$  er protonmassen gange atomnummeret for det pågældende grundstof,  $A$  er neutronmassen gange antallet af neutroner i kernen,  $N$  er avogadros tal,  $\sigma_{K-N}$  er massespredningskoefficienten for en fri elektron. Det sidste led i (A.1) kan negliceres ved bølgelængder af den her aktuelle størrelsesorden, da den er forsvindende i forhold til de andre led.

Koefficienterne  $C$  og  $D$  antages at være konstante i intervallet mellem to absorptionskanter og er tabuleret for et varierende antal af disse intervaller, for grundstoffer med atomnumre fra  $Z = 1$  til og med  $Z = 83$ .

For absorption af  $\text{Cu-K}_\alpha$ -stråling i  $\text{Ge}$ , har vi at  $K_{abs} < \lambda < L_{abs}$ , hvor  $K_{abs}$  og  $L_{abs}$  er K- og L-absorptionskanternes placering i  $\lambda$ -rummet. Ud fra de tabulerede værdier af  $C$  og  $D$  findes umiddelbart:

$$\frac{\mu_{\text{Ge}}(\lambda_{\text{Cu-K}_\alpha})}{\rho_{\text{Ge}}} = 0.0076 \mu\text{m}^{-1}$$

Massedensiteten for krystallinsk Ge er  $5,2g/cm^3$ , men da atomerne i amorft Ge er knap så tæt "pakket", skønner vi at  $\rho_{Ge} \sim 5,0g/cm^3$  og finder da:

$$\mu_{Ge} = 0,038\mu m^{-1}$$

Ved Cu- $K_\alpha$ -bestråling ( $\lambda = 1,5418\text{\AA}$ ) forekommer ingen K-fluorescens, da  $K_{abs}$  for Ge er  $1,116\text{\AA}$ . Imidlertid er  $L_{abs} = 10,229\text{\AA}$ , og vi må derfor antage at fluorescensen emitteres ved henfald af elektroner til vacanser i Ge-atomernes L-skaller. Dette giver en fluorescens med bølgelængden:

$$\lambda_{flr} = 10,3\text{\AA}, (E_{flr} = 1,29keV)$$

altså en anelse over  $L_{abs}$ .

Det har ikke været os muligt at skaffe hverken teoretiske eller eksperimentelle data for absorptionen i Ge af så lave strålingsenergier (koefficienterne C og D er ikke tabuleret for  $\lambda > L_{abs}$ ).

Da fluorescensen imidlertid synes at udgøre en væsentlig del af den i diffraktionseksperimentet målte intensitet, har vi set os nødsaget til at estimere absorptionskoefficienten ved extrapolation.

### Extrapolation 1

Værdierne af koefficienterne C og D,  $L_{abs} < \lambda < K_{abs}$  er ikke tabuleret for grundstoffer med  $Z < 53$ . For I( $Z=53$ ) finder vi imidlertid forholdet:

$$\frac{\mu_I(\lambda > L_{abs})}{\mu_I(\lambda < L_{abs})} = \frac{207}{971} = 0,21$$

med  $\lambda \sim L_{abs}$ .

For I( $Z=53$ ) ændres  $\mu$  altså omtrent med en faktor 5, når  $L_{abs}$  passeres ved ændring af  $\lambda$ .

På tilsvarende måde finder vi for Bi( $Z=83$ ):

$$\frac{\mu_{Bi}(\lambda > L_{abs})}{\mu_{Bi}(\lambda < L_{abs})} = \frac{62}{199} = 0,31$$

Vi extrapolerer lineært med hensyn til Z og finder for  $\mu_{Ge}$ :

$$\frac{\mu_{Ge}(\lambda > L_{abs})}{\mu_{Ge}(\lambda < L_{abs})} = 0,16$$



Ved brug af (A.1) finder vi for  $\lambda$  i området lige under  $L_{abs}$ :

$$\frac{\mu_{Ge}}{\rho_{Ge}} \simeq 0,9 \mu m^{-1}$$

Ved at benytte den fundne extrapolationsfaktor fås:

$$\mu_{Ge}(\lambda_{flr}) \sim \rho_{Ge} \cdot 0,9 \cdot 0,16 = 0,72 \mu m^{-1}$$

### Extrapolation 2

Fra tabellen "International tables of X-ray crystallography", Vol.IV, s.62 findes ved et hurtigt skøn, at absorptionstværsnittene for Fe og Ge forholder sig til hinanden som 1:2,3 for bølglængder i intervallet:  $K_{abs} < \lambda < L_{abs}$ .

På kurven s.56 (fra tabellen) aflæses absorptionstværsnittet for Fe, for bølglængder lige under  $L_{abs}$  til:

$$\sigma_{Fe} \sim 2 \cdot 10^{-19} cm^2/atom$$

Ved multiplikation med 2,3 estimeres absorptionstværsnittet for Ge:

$$\sigma_{Ge} \sim 4,63 \cdot 10^{-19} cm^2/atom$$

hvilket omregnes til masseabsorptionskoefficienten:

$$\frac{\mu_{Ge}}{\rho_{Ge}} \sim \frac{\sigma_{Ge}}{m_a(Ge)} \sim 3,8 \cdot 10^3 cm^2/g$$

hvor  $m_a(Ge)$  er atommassen i gram.

Heraf fås:

$$\mu_{Ge} \sim 1,9 \mu m^{-1}$$

Som et bud på den søgte absorptionskoefficient tager vi middelværdien af de to resultater og får:

$$\mu_{Ge} = 1,3 \mu m^{-1}$$

```

2220 // save "databehandling.cml"
2230 //
2240 //
2250 // (C)O.Bakander,Karen,Klaus
2260 // 08.12.89
2270 //
2280 //
2290 // ***** INITIATION *****
2300 //
2310 //
2320 //
2330 ppinit
2340 ppstandard1
2350 gcinit
2360 initalan
2370 USE unidump
2380 dump_type(4) // HP-Laser Typ II
2390 dump_resolution(1) // 150dpi
2400
2410 PROC initalan
2420 USE system
2430 ok$=""10"C="
2440 er$=""10***"
2450 DIM setup1$ OF 500
2460 DIM setup2$ OF 500
2470 DIM text$ OF 500
2480 DIM a(1200), c1(1200), c2(1200), c3(1200)
2490 sampletykkelse:=0.7 // thicness in my
2500 k_s:=0
2510 substrattykkelse:=12
2520 lambda_cu:=1.5418; lambda_mo:=0.7107; lambda_cu_ge_fl:=10.3
2530 my_cu_ge:=0.038; my_cu_ge_fl:=0.3; my_pvc:=0.0078
2540 t_s:=substrattykkelse; t:=sampletykkelse // in use
2550 lambda:=lambda_cu; lambda_fl:=lambda_cu_ge_fl // In use!
2560 my:=my_cu_ge; my_fl:=my_cu_ge_fl; my_s:=my_pvc //In use!
2570 np#:=0
2580 ENDPROC initalan
2590
2600 // ***** DATA STORING *****
2610
2620 PROC savedata(REF x(),REF y(),n#,filnavn$) CLOSED //Gemmer data i en fil
2630 OPEN FILE 1,filnavn$+" Dat",WRITE
2640 FOR i#:=1 TO n# DO
2650 WRITE FILE 1: x(i#),y(i#)
2660 ENDFOR i#
2670 CLOSE FILE 1
2680 ENDPROC savedata
2690
2700 // ***** DATA RESTORING *****
2710
2720 FUNC getmidstr$(REF string$,str1$,str2$) CLOSED
2730 TRAP
2740 p1#:=str1$ IN string$
2750 IF str1$="" THEN p1#:=1
2760 p2#:=str2$ IN string$(p1#+LEN(str1$):)
2770 IF p1# THEN
2780 IF str2$="" THEN RETURN string$(p1#+LEN(str1$):)
2790 IF p2# THEN
2800 p1#:=p1#+LEN(str1$)
2810 p2#:=p2#+p1#-2
2820 RETURN string$(p1#:p2#)
2830 ENDIF
2840 ENDIF
2850 HANDLER
2860 ENDTRAP
2870 RETURN ""
2880 ENDFUNC getmidstr$

```

```

2900 PROC getfile(REF x(),REF y(),filnavn$) CLOSED // Henter datafil
2910 OPEN FILE 1,filnavn$,READ
2920 i#:=1
2930 WHILE NOT EOF(1) DO
2940 READ FILE 1: x(i#),y(i#)
2950 i#:+1
2960 ENDWHILE
2970 CLOSE FILE 1
2980 ENDPROC getfile
2990
3000 PROC readsetup(REF text$,filnavn$) CLOSED // Henter tekstfil
3010 text$:=""
3020 OPEN FILE 1,filnavn$,READ
3030 text$:=GET$(1,500)
3040 CLOSE FILE 1
3050 ENDPROC readsetup
3060
3070 // ***** SMA PROCEDURER *****
3080
3090 PROC sub(REF a1(),REF a2(),REF a3(),np#) CLOSED //Subtraherer to datasat
3100 FOR i#:=1 TO np# DO
3110 a3(i#):=a1(i#)-a2(i#)
3120 ENDFOR i#
3130 ENDPROC sub
3140
3150 PROC add(REF a1(),REF a2(),REF a3(),np#) CLOSED //Adderer to datasat
3160 FOR i#:=1 TO np# DO
3170 a3(i#):=a1(i#)+a2(i#)
3180 ENDFOR i#
3190 ENDPROC add
3200
3210 FUNC sintheta(a) CLOSED //Beregner sinus til den halve spredningsvinkel
3220 s:=SIN(a*PI/360)
3230 RETURN s
3240 ENDFUNC sintheta
3250
3260 FUNC polfak(a) CLOSED //Beregner polarisationsfaktoren
3270 c:=COS(a*PI/180)
3280 pf:=(1+c^2)/2
3290 RETURN pf
3300 ENDFUNC polfak
3310
3320 FUNC asin(x) CLOSED //Beregner arcussinus til x
3330 IF ABS(x)>1 THEN RETURN 0
3340 IF ABS(x)=1 THEN
3350 RETURN SGN(x)*PI/2
3360 ELSE
3370 RETURN ATN(x/SQR(1-x^2))
3380 ENDIF
3390 ENDFUNC asin
3400
3410 FUNC absorb(x,a) CLOSED //Beregner absorptionsleddet
3420 IMPORT sintheta,my
3430 k:=-2*my*x
3440 y:=EXP(k/sintheta(a))
3450 RETURN y
3460 ENDFUNC absorb
3470
3480 PROC deltak(pnt#) CLOSED //Transformerer fra vinkelrum til delta k-rum
3490 IMPORT a(),sintheta
3500 lambda_cu:=1.5418; lambda_mo:=0.7107
3510 lambda:=lambda_cu
3520 k:=4*PI/lambda
3530 FOR i#:=1 TO pnt# DO
3540 a(i#):=k*sintheta(a(i#))
3550 ENDFOR i#
3560 ENDPROC deltak

```

```

3570
3580 PROC setframe(ra$,fra,til,fil$,head$,dato$,tim$,enhed$) CLOSED
3590  IMPORT ppdrawframe,ppsettext,ppclearscreen,ppsetlimits,ppsetexprotnation
3600  IMPORT upper$
3610  ppsetexprotnation(12,-4,4)
3620  ppsettext(1,"Delta-K, 1/A")
3630  ppsettext(2,""+enhed$)
3640  fil$:=upper$(fil$)
3650  lspc#:=((52-LEN(fil$)-LEN(head$))/2)
3660  IF lspc#<0 THEN lspc#:=0
3670  ppsettext(3,fil$+SPC$(lspc#)+head$+SPC$(lspc#)+dato$+" "+tim$)
3680  ppclearscreen
3690  ppdrawframe(fra,til,0,VAL(ra$)) //VAL(ra$:(("E" IN ra$)-1:))
3700  ENDPROC setframe
3710
3720 PROC md(fil$,start#,slut#) CLOSED // Adderer n datasæt
3730  IMPORT add,getfile,a(),c1(),c2()
3740  getfile(a(),c1(),fil$+STR$(start#))
3750  FOR n#:=start#+1 TO slut# DO
3760    getfile(a(),c2(),fil$+STR$(n#))
3770    add(c1(),c2(),c1(),1200)
3780  ENDFOR n#
3790  ENDPROC md
3800
3810 PROC middelværdi CLOSED // Tager middelværdien af n datasæt
3820  IMPORT md,a(),c1(),c2(),c3()
3830  INPUT "Filnavn   ": fil$
3840  INPUT "Start nr  ": start#
3850  INPUT "Slut nr   ": slut#
3860  md(fil$,start#,slut#)
3870  OPEN FILE 1,fil$+"S"+STR$(slut#),WRITE
3880  nr#:=slut#-start#+1
3890  FOR i#:=1 TO 1200 DO
3900    c3(i#):=c1(i#)/nr#
3910    WRITE FILE 1: a(i#),c3(i#)
3920  ENDFOR i#
3930  CLOSE FILE 1
3940  ENDPROC middelværdi
3950
3960 // ***** DATA-KORREKTIONER *****
3970
3980 // Korrektion for sub., baggr. og absorption
3990
4000 PROC abs_corr(filnavn1$,filnavn2$) CLOSED
4010  IMPORT my,t,my_s,t_s,a(),c1(),c2(),c3()
4020  IMPORT getfile,setup1$,k_s
4030  IMPORT getmidstr$,sub,sintheta,deltak,polfak,absorb,rng$,dato$,tim$
4040  IMPORT ppwaitkey,ppclearscreen,setframe,ppdrawgraph,gczoomgraph
4050  pnt#:=VAL(getmidstr$(setup1$,"PNTS:",""13""))
4060  getfile(a(),c2(),"bgr-s25.dat")
4070  getfile(a(),c1(),filnavn2$+".dat")
4080  FOR i#:=1 TO pnt# DO
4090    c3(i#):=c2(i#)*(1+EXP(-2*my_s*t_s/sintheta(a(i#))))/2
4100  ENDFOR i#
4110  sub(c1(),c3(),c3(),pnt#)
4120  FOR i#:=1 TO pnt# DO
4130    c1(i#):=c3(i#)*(k_s+(1-k_s)*absorb(t,a(i#)))
4140  ENDFOR i#
4150  // ppclearscreen
4160  // gczoomgraph(a(),c1(),pnt#,10)
4170
4180  FOR i#:=1 TO pnt# DO
4190    c2(i#):=c2(i#)*(1+(EXP(-2*my_s*t_s/sintheta(a(i#))))*(k_s+(1-k_s)
      *absorb(t,a(i#))))/2
4210    c1(i#):=c1(i#)+c2(i#)
4220  ENDFOR i#
4230  // ppclearscreen

```

```

4240 // gczoomgraph(a(),c1(),pnt#,10)
4250 PRINT "Subtraherer korrigeret substratspredning og baggrund"
4260 getfile(a(),c2(),filnavn1$+".dat")
4280 sub(c2(),c1(),c3(),pnt#)
4290 setframe(rng$,a(1),a(pnt#),filnavn1$,"Korrigeret sub og bgr fratrukket",
dato$,tim$,"(counts/sek)")
4300 // ppclearscreen
4310 // gczoomgraph(a(),c3(),pnt#,10)
4320 PRINT "Korrigerer for absorbtion, og transformerer til Delta-k"
4330 FOR i#:=1 TO pnt# DO
4340
4350     n:=1/(sintheta(a(i#)))
4360     m:=1-absorb(t,a(i#))
4370     q:=n/m
4380     z:=q/pol fak(a(i#))
4390     c1(i#):=c3(i#)*z*(1+k_s)
4400 ENDFOR i#
4410 deltak(pnt#)
4420 ENDPROC abs_corr
4430
4440 FUNC f(x) CLOSED // Interpolerer tabelværdier for atomar spredningsfaktor
4450 DIM k1(21), i(21)
4460 READ k1()
4470 DATA 0.0,0.05,0.1,0.15,0.2,0.25,0.3,0.35,0.4,0.45,0.5,0.55,0.6,0.65,0.7,
0.75,0.8,0.85,0.9,0.95,1.0 //1.05,1.1,1.15,1.2,1.25,1.3
4480 READ i()
4490 //DATA 14,13.45,12.16,10.79,9.67,8.85,8.22,7.7,7.2,6.72,6.24,5.77125
4500 //DATA 5.31,4.87875,4.47,4.095,3.75,3.43875,3.16,2.91,2.69,2.50375,2.35,
2.2025,2.07,1.96,1.87 //for silicium
4510 DATA 32,31.28,29.52,27.48,25.53,23.76,22.11,20.54,19.02 //for germanium
4520 DATA 17.76875,16.19,14.91,13.72,12.64625,11.68,10.82525,10.08,9.426255,
8.87,8.377555,7.96

4530
4540 j#:=1
4550 x:=x/(4*PI)
4560 IF x=0 THEN RETURN i(1)
4570 WHILE x>k1(j#) DO j#:+1
4580 IF j#<3 THEN
4590     p:=(k1(j#)-x)/(k1(j#)-k1(j#-1))
4600     y:=p*(p-1)/2*i(j#+1)+(1-p*p)*i(j#)+(p+1)*p/2*i(j#-1)
4610 ELSE
4620     p:=(x-k1(j#-1))/(k1(j#)-k1(j#-1))
4630     y:=p*(p-1)/2*i(j#-2)+(1-p*p)*i(j#-1)+p*(p+1)/2*i(j#)
4640 ENDFOR
4650 RETURN y
4660 ENDFUNC f
4670
4680 FUNC s(x) CLOSED // Interpolerer tabelværdier for comptonspredning
4690 IMPORT pol fak,asin
4700 DIM k2(11), cs(11)
4710 READ k2()
4720 DATA 0.0,0.1,0.2,0.3,0.4,0.5,0.6,0.7,0.8,0.9,1
4730 READ cs()
4740 //DATA 0.0,2.46,4.57,5.76,6.82,7.85,8.79,9.6,10.21,10.82,11.26125,
11.59,11.80625,11.91 // for silicium
4750 DATA 0.0,1.59,4.75,7.39,10.02,12.54,14.73,16.59,17.9475,19.59,20.83125
//for germanium

4760 j#:=1
4770 x:=x/(4*PI)
4780 IF x=0 THEN RETURN cs(1)
4790 WHILE x>k2(j#) DO j#:+1
4800 IF j#<3 THEN
4810     p:=(k2(j#)-x)/(k2(j#)-k2(j#-1))
4820     y:=p*(p-1)/2*cs(j#+1)+(1-p*p)*cs(j#)+(p+1)*p/2*cs(j#-1)
4830 ELSE
4840     p:=(x-k2(j#-1))/(k2(j#)-k2(j#-1))
4850     y:=p*(p-1)/2*cs(j#-2)+(1-p*p)*cs(j#-1)+p*(p+1)/2*cs(j#)

```

```

4860 ENDIF
4870 lambda:=1.5418
4880 a:=2*asin(lambda*x)
4890 RETURN y/polpak(a)
4900 ENDFUNC s
4910
4920 FUNC fluorescens(a) CLOSED // Beregner fluorescens-korrektion
4930 IMPORT lambda,my,my_fl,t
4940 IMPORT pplotgraph,gczoomgraph,sintheta,deltak,asin,polpak
4950 p:=t*(my+my_fl)
4960 q:=2*t*my
4970 b:=a*lambda/(4*PI)
4980 h:=1-EXP(-q/b)
4990 k:=1-EXP(-p/b)
5000 y:=(1/polpak(360*asin(b)/PI))*k/h
5010 RETURN y
5020 ENDFUNC fluorescens
5030
5040 PROC sum(REF a(),k1) CLOSED // Adderer s, f i anden potens og k1*flr.
5050 IMPORT f,s,c2(),pplotgraph,ppwaitkey,fluorescens
5060 FOR i#:=1 TO 1200 DO
5070 c2(i#):=((f(a(i#))^2+s(a(i#)))+k1*fluorescens(a(i#)))
5080 ENDFOR i#
5090 ENDPROC sum
5100
5110 PROC sinint(REF k(),REF f(),REF r(),REF sf(),n1#,n2#,nr#,dr) CLOSED
//sinustransformation
5120 dk:=(k(100)-k(1))/99
5130 r1:=0
5140 FOR i#:=1 TO nr# DO
5150 PRINT AT 2,2: " "
5160 PRINT AT 2,2: i#
5170 r1:=r1+dr
5180 r(i#):=r1
5190 s:=0
5200 FOR j#:=n1# TO n2# DO
5210 s:=s+SIN(k(j#)*r1)*f(j#)
5220 ENDFOR j#
5230 sf(i#):=s*dk*2/PI //*r1*2/PI
5240 ENDFOR i#
5250 ENDPROC sinint
5260
5270 PROC norm CLOSED
5280 IMPORT readsetup,getfile,setup1$,ppdrawgraph,a(),c1(),c2(),c3(),setframe
5290 IMPORT getmidstr$,ppwaitkey,gczoomgraph,sub,deltak,sum,abs_corr,s,f
5300 IMPORT ppclearscreen,ppsetaxes,ppsetlimits,pplotgraph,polpak
5310 IMPORT ppsetstartindex,fft,ppsettext,sinint,fluorescens
5320 INPUT "filnavn 1 :": filnavn1$
5330 INPUT "filnavn 2 (sub.fil) :": filnavn2$
5340 ppsetstartindex(1)
5350 readsetup(setup1$,filnavn1$+".stp")
5360 rng$:=getmidstr$(setup1$,"RANGE","13")
5370 a1:=VAL(getmidstr$(setup1$,"FROM","13"))
5380 a2:=VAL(getmidstr$(setup1$,"TO","13"))
5390 head1$:=getmidstr$(setup1$,"HEAD:",",13")
5400 pnt#:=VAL(getmidstr$(setup1$,"PNTS:",",13"))
5410 dato$:=getmidstr$(setup1$,"DATE:",",13")
5420 tim$:=getmidstr$(setup1$,"TIME:",",13")
5430
5440 abs_corr(filnavn1$,filnavn2$)
5450 ppclearscreen
5460 gczoomgraph(a(),c1(),pnt#,10)
5470
5480 // Konstanterne K_flr (k1) og Q (k2) fittes
5490 ok1:=FALSE
5500 WHILE NOT ok1 DO
5510 ppclearscreen

```

```

5520 INPUT "Fluorescens norm konstant:": k1
5530 sum(a(),k1)
5540 ppclearscreen
5550 setframe(STR$(2000),a(1),a(pnt#)," ",
    "f(k)^2+S(k)+k1*f(", "", "", "eu/atom")
5560 ppdrawgraph(a(),c2(),pnt#,10)
5570 ppwaitkey
5580
5590 ok2:=FALSE
5600 WHILE NOT ok2 DO
5610 ppclearscreen
5620 INPUT "Normaliserings konstant :": k2
5630 FOR i#:=1 TO 1200 DO
5640 c3(i#):=c1(i#)*k2
5650 ENDFOR i#
5660 setframe(rng$,a(1),a(pnt#),"(+filnavn1$+", korrigeret)*k2"," OG
    f(k)^2+S(k)+k1*f(", "", "", "eu/atom")
5670 ppclearscreen
5680 pplotgraph(a(),c2(),pnt#,10)
5690 PRINT "k1 = ";k1;" k2 = ";k2
5700 ppdrawgraph(a(),c3(),pnt#,10)
5710 ppwaitkey
5720 ppclearscreen
5730 INPUT "Normalisering ok ? ": ok2
5740 ENDWHILE
5750 INPUT "Fluorescens norm ok? ": ok1
5760 ENDWHILE
5770
5780 // Normaliseret intensitetskurve
5790 ppclearscreen
5800 gczoomgraph(a(),c3(),pnt#,10)
5810 PRINT "k1 = ";k1;" k2 = ";k2
5820
5830 FOR i#:=1 TO pnt# DO // Fluorescens og comptonspredning fratrakkes
5840 c1(i#):=c3(i#)-s(a(i#))-k1*fluorescens(a(i#))
5850 ENDFOR i#
5860 ppclearscreen
5870 gczoomgraph(a(),c1(),pnt#,10)
5880 PRINT "k1 = ";k1;" k2 = ";k2
5890
5900 FOR i#:=1 TO 50 DO
5910 c1(i#):=0
5920 ENDFOR i#
5930 FOR i#:=1 TO 1200 DO // Den reducerede interferensfunktion
5940 c2(i#):=c1(i#)/f(a(i#))^2-1
5950 ENDFOR i#
5960 ppclearscreen
5970 gczoomgraph(a(),c2(),pnt#,10)
5980 PRINT "k1 = ";k1;" k2 = ";k2
5990
6000 FOR i#:=1 TO pnt# DO // Multiplikation med delta k
6010 c1(i#):=c2(i#)*a(i#)
6020 ENDFOR i#
6030 ppclearscreen
6040 gczoomgraph(a(),c1(),pnt#,10)
6050 PRINT "k1 = ";k1;" k2 = ";k2
6060 nps#:=200
6070 sinint(a(),c1(),c2(),c3(),1,1040,nps#,0.04)
6080 setframe(rng$,a(1),a(pnt#),filnavn1$+" sinint(1/f2-1)*dk",
    head1$, "", "", "Diff. Corr.-function d(r) (1/sqr(Å))")
6090 ppsettext(1,"r (Å)")
6100 ppsetstartindex(1)
6110 gczoomgraph(c2(),c3(),nps#,10)
6120 ENDPROC norm
6130

```

---

## Litteraturliste

Alonso/Finn: Fundamental university physics vol.II. Addison-Wesley, 1967.

Azaroff, L.V: Elements of X-ray crystallography. McGraw-Hill, 1968.

Klug og Alexander: X-ray diffraction procedures. Wiley, 1954

International tables for X-ray crystallography, vol I-IV. The Kynoch Press, England, 1968.

Tekster fra IMFUFA: tekst nr.78 1984 "jævnstrømsledningsevne og gitterstruktur i amorft germanium" af Hans Hedal, Frank C.Ludvigsen og Finn C. Physant.

R.J.Temkin, W. Paul og G. A. N. Connell: The structural and optical properties of amorphous germanium. Harvard University, Cambridge, Mass.02138.

Yoshio Waseda: Novel application of anomalous (resonance X-ray scattering for structural characterization of disordered materials. Springer Verlag 1984.



- 1/78 "TANKER OM EN PRAKSIS" - et matematikprojekt.  
 Projekt rapport af: Anne Jensen, Lena Lindenskov, Marianne Kesselhahn og Nicolai Lomholt.  
 Vejleder: Anders Madsen
- 2/78 "OPTIMERING" - Menneskets forøgede beherskelsesmuligheder af natur og samfund.  
 Projekt rapport af: Tom J. Andersen, Tommy R. Andersen, Gert Krenøe og Peter H. Lassen  
 Vejleder: Bernhelm Boss.
- 3/78 "OPCAVESAMLING", breddekursus i fysik.  
 Af: Lasse Rasmussen, Aage Bonde Kræmmer og Jens Højgaard Jensen.
- 4/78 "TRE ESSAYS" - om matematikundervisning, matematiklæreruddannelsen og videnskabsrindalismen.  
 Af: Mogens Niss  
 Nr. 4 er p.t. udgået.
- 5/78 "BIBLIOGRAFISK VEJLEDNING til studiet af DEN MODERNE FYSIKS HISTORIE".  
 Af: Helge Kragh.  
 Nr. 5 er p.t. udgået.
- 6/78 "NOGLE ARTIKLER OG DEBATINDLÆG OM - læreruddannelse og undervisning i fysik, og - de naturvidenskabelige fags situation efter studenteroprøret".  
 Af: Karin Beyer, Jens Højgaard Jensen og Bent C. Jørgensen.
- 7/78 "MATEMATIKKENS FORHOLD TIL SAMFUNDSØKONOMIEN".  
 Af: B.V. Gnedenko.  
 Nr. 7 er udgået.
- 8/78 "DYNAMIK OG DIAGRAMMER". Introduktion til energy-bond-graph formalismen.  
 Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 9/78 "OM PRAKSIS' INDFLYDELSE PÅ MATEMATIKKENS UDVIKLING". - Motiver til Kepler's: "Nova Stereometria Doliorum Vinarium".  
 Projekt rapport af: Lasse Rasmussen.  
 Vejleder: Anders Madsen.
- 
- 10/79 "TERMODYNAMIK I GYMNASIET".  
 Projekt rapport af: Jan Christensen og Jeanne Mortensen,  
 Vejledere: Karin Beyer og Peder Voetmann Christiansen.
- 11/79 "STATISTISKE MATERIALER".  
 Af: Jørgen Larsen.
- 12/79 "LINEÆRE DIFFERENTIALLIGNINGER OG DIFFERENTIALLIGNINGSSYSTEMER".  
 Af: Mogens Brun Heefelt.  
 Nr. 12 er udgået.
- 13/79 "CAVENDISH'S FORSØG I GYMNASIET".  
 Projekt rapport af: Gert Kreinøe.  
 Vejleder: Albert Chr. Paulsen.
- 14/79 "BOOKS ABOUT MATHEMATICS: History, Philosophy, Education, Models, System Theory, and Works of".  
 Af: Else Høyrup.  
 Nr. 14 er p.t. udgået.
- 15/79 "STRUKTUREL STABILITET OG KATASTROFER i systemer i og udenfor termodynamisk ligevægt".  
 Specialeopgave af: Leif S. Striegler.  
 Vejleder: Peder Voetmann Christiansen.
- 16/79 "STATISTIK I KRÆFTFORSKNINGEN".  
 Projekt rapport af: Michael Olsen og Jørn Jensen.  
 Vejleder: Jørgen Larsen.
- 17/79 "AT SPØRGE OG AT SVARE i fysikundervisningen".  
 Af: Albert Christian Paulsen.
- 18/79 "MATHEMATICS AND THE REAL WORLD", Proceedings af an International Workshop, Roskilde University Centre, Denmark, 1978.  
 Preprint.  
 Af: Bernhelm Booss og Mogens Niss (eds.).
- 19/79 "GEOMETRI, SKOLE OG VIRKELIGHED".  
 Projekt rapport af: Tom J. Andersen, Tommy R. Andersen og Per H.H. Larsen.  
 Vejleder: Mogens Niss.
- 20/79 "STATISTISKE MODELLER TIL BESTEMMELSE AF SIKRE DOSER FOR CARCINOGENE STOFFER".  
 Projekt rapport af: Michael Olsen og Jørn Jensen.  
 Vejleder: Jørgen Larsen
- 21/79 "KONTROL I GYMNASIET-FORMAL OG KONSEKVENSER".  
 Projekt rapport af: Crilles Bacher, Per S.Jensen, Preben Jensen og Torben Nysteen.
- 22/79 "SEMIOTIK OG SYSTEMEGENSKABER (1)".  
 1-port lineært response og støj i fysikken.  
 Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 23/79 "ON THE HISTORY AF EARLY WAVE MECHANICS - with special emphasis on the role af reality".  
 Af: Helge Kragh.
- 
- 24/80 "MATEMATIKOPFATTELSE HOS 2.G'ERE".  
 a+b  
 1. En analyse. 2. Interviewmateriale.  
 Projekt rapport af: Jan Christensen og Knud Lindhardt Rasmussen.  
 Vejleder: Mogens Niss.
- 25/80 "EKSAMENSOPGAVER", Dybdemodulet/fysik 1974-79.
- 26/80 "OM MATEMATISKE MODELLER".  
 En projekt rapport og to artikler.  
 Af: Jens Højgaard Jensen m.fl.
- 27/80 "METHODOLOGY AND PHILOSOPHY AF SCIENCE IN PAUL DIRAC'S PHYSICS".  
 Af: Helge Kragh.
- 28/80 "DELENTRISK RELAXATION - et forslag til en ny model bygget på væskemes viscoelastiske egenskaber".  
 Projekt rapport af: Gert Kreinøe.  
 Vejleder: Niels Boye Olsen.
- 29/80 "ODIN - undervisningsmateriale til et kursus i differentiaalligningsmodeller".  
 Projekt rapport af: Tommy R. Andersen, Per H.H. Larsen og Peter H. Lassen.  
 Vejleder: Mogens Brun Heefelt.
- 30/80 "FUSIONSENERGIEN - - - ATOMSAMFUNDETS ENDESTATION".  
 Af: Oluf Danielsen.  
 Nr. 30 er udgået.
- 31/80 "VIDENSKABSTEORETISKE PROBLEMER VED UNDERVISNINGSSYSTEMER BASERET PÅ MÆNGDELÆRE".  
 Projekt rapport af: Troels Lange og Jørgen Karrebæk.  
 Vejleder: Stig Andur Pedersen.  
 Nr. 31 er p.t. udgået.
- 32/80 "POLYMERE STOFFERS VISCOELASTISKE EGENSKABER - BELYST VED HJÆLP AF MEKANISKE IMPEDANSMÅLINGER MØSSBAUEREFFEKTÅLINGER".  
 Projekt rapport af: Crilles Bacher og Preben Jensen.  
 Vejledere: Niels Boye Olsen og Peder Voetmann Christiansen.
- 33/80 "KONSTITUERING AF FAG INDEN FOR TEKNISK - NATURVIDENSKABELIGE UDDANNELSER. I-II".  
 Af: Arne Jakobsen.
- 34/80 "ENVIRONMENTAL IMPACT AF WIND ENERGY UTILIZATION".  
 ENERGY SERIES NO. I.  
 Af: Bent Sørensen  
 Nr. 34 er udgået.

- 35/80 "HISTORISKE STUDIER I DEN NYERE ATOMFYSIKS UDVIKLING".  
Af: Helge Kragh.
- 36/80 "HVAD ER MENINGEN MED MATEMATIKUNDERVISNINGEN?".  
Fire artikler.  
Af: Mogens Niss.
- 37/80 "RENEWABLE ENERGY AND ENERGY STORAGE".  
ENERGY SERIES NO. 2.  
Af: Bent Sørensen.
- 
- 38/81 "TIL EN HISTORIE TEORI OM NATURERKENDELSE, TEKNOLOGI OG SAMFUND".  
Projekt rapport af: Erik Gade, Hans Hedal, Henrik Lau og Finn Physant.  
Vejledere: Stig Andur Pedersen, Helge Kragh og Ib Thiersen.  
Nr. 38 er p.t. udgået.
- 39/81 "TIL KRITIKKEN AF VEKSTØKONOMIEN".  
Af: Jens Højgaard Jensen.
- 40/81 "TELEKOMMUNIKATION I DANMARK - oplæg til en teknologivurdering".  
Projekt rapport af: Arne Jørgensen, Bruno Petersen og Jan Vedde.  
Vejleder: Per Nørgaard.
- 41/81 "PLANNING AND POLICY CONSIDERATIONS RELATED TO THE INTRODUCTION OF RENEWABLE ENERGY SOURCES INTO ENERGY SUPPLY SYSTEMS".  
ENERGY SERIES NO. 3.  
Af: Bent Sørensen.
- 42/81 "VIDENSKAB TEORI SAMFUND - En introduktion til materialistiske videnskabsopfattelser".  
Af: Helge Kragh og Stig Andur Pedersen.
- 43/81 1. "COMPARATIVE RISK ASSESSMENT OF TOTAL ENERGY SYSTEMS".  
2. "ADVANTAGES AND DISADVANTAGES OF DECENTRALIZATION".  
ENERGY SERIES NO. 4.  
Af: Bent Sørensen.
- 44/81 "HISTORISKE UNDERSØGELSER AF DE EKSPERIMENTELLE FORUDSÆTNINGER FOR RUTHERFORDS ATOMMODEL".  
Projekt rapport af: Niels Thor Nielsen.  
Vejleder: Bent C. Jørgensen.
- 
- 45/82 Er aldrig udkommet.
- 46/82 "EKSEMPLARISK UNDERVISNING OG FYSISK ERKENDELSE-  
1+11 ILLUSTRERET VED TO EKSEMPLER".  
Projekt rapport af: Torben O. Olsen, Lasse Rasmussen og Niels Dreyer Sørensen.  
Vejleder: Bent C. Jørgensen.
- 47/82 "BARBERÄCK OG DET VÆRST OFFICIELT-TÆNKELIGE UHELD".  
ENERGY SERIES NO. 5.  
Af: Bent Sørensen.
- 48/82 "EN UNDERSØGELSE AF MATEMATIKUNDERVISNINGEN PÅ ADGANGSKURSUS TIL KØBENHAVNS TEKNIKUM".  
Projekt rapport af: Lis Eilertzen, Jørgen Karrebæk, Troels Lange, Preben Nørregaard, Lissi Pedesen, Laust Rishøj, Lill Røn og Isac Showiki.  
Vejleder: Mogens Niss.
- 49/82 "ANALYSE AF MULTISPEKTRALE SATELLITBILLEDER".  
Projekt rapport af: Preben Nørregaard.  
Vejledere: Jørgen Larsen og Rasmus Ole Rasmussen.
- 50/82 "HÆRSLEV - MULIGHEDER FOR VEDVARENDE ENERGI I EN LANDSBY".  
ENERGY SERIES NO. 6.  
Rapport af: Bent Christensen, Bent Hove Jensen, Dennis B. Møller, Bjarne Laursen, Bjarne Lillethorup og Jacob Mørch Pedersen.  
Vejleder: Bent Sørensen.
- 51/82 "HVAD KAN DER GØRES FOR AT AFHJÆLPE PICES BLOKERING OVERFOR MATEMATIK?".  
Projekt rapport af: Lis Eilertzen, Lissi Pedersen, Lill Røn og Susanne Stender.
- 52/82 "DESUSPENSION OF SPLITTING ELLIPTIC SYMBOLS".  
Af: Bernhelm Booss og Krzysztof Wojciechowski.
- 53/82 "THE CONSTITUTION OF SUBJECTS IN ENGINEERING EDUCATION".  
Af: Arne Jacobsen og Stig Andur Pedersen.
- 54/82 "FUTURES RESEARCH" - A Philosophical Analysis of Its Subject-Matter and Methods.  
Af: Stig Andur Pedersen og Johannes Witt-Hansen.
- 55/82 "MATEMATISKE MODELLER" - Litteratur på Roskilde Universitetsbibliotek.  
En biografi.  
Af: Else Højrup.  
Vedr. tekst nr. 55/82 se også tekst nr. 62/83.
- 56/82 "EN - TO - MANGE" -  
En undersøgelse af matematisk økologi.  
Projekt rapport af: Troels Lange.  
Vejleder: Anders Madsen.
- 
- 57/83 "ASPECT EKSPERIMENTET"-  
Skjulte variable i kvantemekanikken?  
Projekt rapport af: Tom Juul Andersen.  
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen.  
Nr. 57 er udgået.
- 58/83 "MATEMATISKE VANDRINGER" - Modeltrafning-  
ger over spredning af dyr mellem småblotoper i agerlandet.  
Projekt rapport af: Per Hammershøj Jensen og Lene Vagn Rasmussen.  
Vejleder: Jørgen Larsen.
- 59/83 "THE METHODOLOGY OF ENERGY PLANNING".  
ENERGY SERIES NO. 7.  
Af: Bent Sørensen.
- 60/83 "MATEMATISK MODEKSPERIMENT"- et eksempel.  
Projekt rapport af: Erik O. Gade, Jørgen Karrebæk og Preben Nørregaard.  
Vejleder: Anders Madsen.
- 61/83 "FYSIKS IDEOLOGISKE FUNKTION, SOM ET EKSEMPEL PÅ EN NATURVIDENSKAB - HISTORISK SET".  
Projekt rapport af: Annette Post Nielsen.  
Vejledere: Jens Højrup, Jens Højgaard Jensen og Jørgen Vogelius.
- 62/83 "MATEMATISKE MODELLER" - Litteratur på Roskilde Universitetsbibliotek.  
En biografi 2. rev. udgave.  
Af: Else Højrup.
- 63/83 "CREATING ENERGY FUTURES: A SHORT GUIDE TO ENERGY PLANNING".  
ENERGY SERIES No. 8.  
Af: David Crossley og Bent Sørensen.
- 64/83 "VON MATEMATIK UND KRIEG".  
Af: Bernhelm Booss og Jens Højrup.
- 65/83 "ANVENDT MATEMATIK - TEORI ELLER PRAKSIS".  
Projekt rapport af: Per Hedegård Andersen, Kirsten Habekost, Carsten Holst-Jensen, Annelise von Moos, Else Marie Pedersen og Erling Møller Pedersen.  
Vejledere: Bernhelm Booss og Klaus Grünbaum.
- 66/83 "MATEMATISKE MODELLER FOR PERIODISK SELEKTION I ESCHERICHIA COLI".  
Projekt rapport af: Hanne Lisbet Andersen, Ole Richard Jensen og Klavs Frisdahl.  
Vejledere: Jørgen Larsen og Anders Hede Madsen.
- 67/83 "ELEPSOIDE METODEN - EN NY METODE TIL LINEÆR PROGRAMMERING?".  
Projekt rapport af: Lone Billmann og Lars Boye.  
Vejleder: Mogens Brun Heefelt.
- 68/83 "STOKASTISKE MODELLER I POPULATIONSGENETIK" - til kritikken af teoriladede modeller.  
Projekt rapport af: Lise Odgård Gade, Susanna Hansen, Michael Hvild og Frank Mølgård Olsen.  
Vejleder: Jørgen Larsen.

- 69/83 "ELEVFORUDSÆTNINGER I FYSIK"  
- en test i l.g med kommentarer.  
Af: Albert C. Paulsen.
- 70/83 "INDLÆRINGS - OG FORMIDLINGSPROBLEMER I MATEMATIK PÅ VOKSENUNDERVISNINGSNIVEAU".  
Projektrapport af: Hanne Lisbet Andersen, Torben J. Andreasen, Svend Åge Houmann, Helle Glerup Jensen, Keld Fl. Nielsen, Lene Vagn Rasmussen.  
Vejleder: Klaus Grünbaum og Anders Hede Madsen.
- 71/83 "PIGER OG FYSIK"  
- et problem og en udfordring for skolen?  
Af: Karin Beyer, Sussanne Blegaa, Birthe Olsen, Jette Reich og Mette Vedelsby.
- 72/83 "VERDEN IFØLGE PEIRCE" - to metafysiske essays, om og af C.S Peirce.  
Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 73/83 ""EN ENERGIANALYSE AF LANDBRUG"  
- økologisk contra traditionelt.  
ENERGY SERIES NO. 9  
Specialeopgave i fysik af: Bent Hove Jensen.  
Vejleder: Bent Sørensen.
- 
- 74/84 "MINIATURISERING AF MIKROELEKTRONIK" - om videnskabeliggjort teknologi og nytten af at lære fysik.  
Projektrapport af: Bodil Harder og Linda Szkotak Jensen.  
Vejledere: Jens Højgaard Jensen og Bent C. Jørgensen.
- 75/84 "MATEMATIKUNDERVISNINGEN I FREMTIDENS GYMNASIUM"  
- Case: Linear programmering.  
Projektrapport af: Morten Blomhøj, Klavs Frisdahl og Frank Mølgaard Olsen.  
Vejledere: Mogens Brun Heefelt og Jens Bjørneboe.
- 76/84 "KERNEKRAFT I DANMARK?" - Et hørings svar indkaldt af miljøministeriet, med kritik af miljøstyrelsens rapporter af 15. marts 1984.  
ENERGY SERIES No. 10  
Af: Niels Boye Olsen og Bent Sørensen.
- 77/84 "POLITISKE INDEKS - FUP ELLER FAKTA?"  
Opinionsundersøgelser belyst ved statistiske modeller.  
Projektrapport af: Svend Åge Houmann, Keld Nielsen og Susanne Stender.  
Vejledere: Jørgen Larsen og Jens Bjørneboe.
- 78/84 "JÆVNSTRØMSLEDNINGSEVNE OG GITTERSTRUKTUR I AMORFT GERMANIUM".  
Specialrapport af: Hans Heddal, Frank C. Ludvigsen og Finn C. Physant.  
Vejleder: Niels Boye Olsen.
- 79/84 "MATEMATIK OG ALMENDANNELSE".  
Projektrapport af: Henrik Coster, Mikael Wennerberg Johansen, Povl Kattler, Birgitte Lydholm og Morten Overgaard Nielsen.  
Vejleder: Bernhelm Booss.
- 80/84 "KURSUSMATERIALE TIL MATEMATIK B".  
Af: Mogens Brun Heefelt.
- 81/84 "FREKVENSafhængig LEDNINGSEVNE I AMORFT GERMANIUM".  
Specialrapport af: Jørgen Wind Petersen og Jan Christensen.  
Vejleder: Niels Boye Olsen.
- 82/84 "MATEMATIK - OG FYSIKUNDERVISNINGEN I DET AUTO - MATISEREDE SAMFUND".  
Rapport fra et seminar afholdt i Hvidovre 25-27 april 1983.  
Red.: Jens Højgaard Jensen, Bent C. Jørgensen og Mogens Niss.
- 83/84 "ON THE QUANTIFICATION OF SECURITY":  
PEACE RESEARCH SERIES NO. 1  
Af: Bent Sørensen  
nr. 83 er p.t. udgået
- 84/84 "NOGLE ARTIKLER OM MATEMATIK, FYSIK OG ALMENDANNELSE".  
Af: Jens Højgaard Jensen, Mogens Niss m. fl.
- 85/84 "CENTRIFUGALREGULATORER OG MATEMATIK".  
Specialrapport af: Per Hedegård Andersen, Carsten Holst-Jensen, Else Marie Pedersen og Erling Møller Pedersen.  
Vejleder: Stig Andur Pedersen.
- 86/84 "SECURITY IMPLICATIONS OF ALTERNATIVE DEFENSE OPTIONS FOR WESTERN EUROPE".  
PEACE RESEARCH SERIES NO. 2  
Af: Bent Sørensen.
- 87/84 "A SIMPLE MODEL OF AC HOPPING CONDUCTIVITY IN DISORDERED SOLIDS".  
Af: Jeppe C. Dyre.
- 88/84 "RISE, FALL AND RESURRECTION OF INFINITESIMALS".  
Af: Detlef Laugwitz.
- 89/84 "FJERNVARMEOPTIMERING".  
Af: Bjarne Lillethorup og Jacob Mørch Pedersen.
- 
- 90/84 "ENERGI I L.G - EN TEORI FOR TILRETTELÆGGELSE".  
Af: Albert Chr. Paulsen.
- 91/85 "KVANTETEORI FOR GYMNASIET".  
1. Lærervejledning  
Projektrapport af: Biger Lundgren, Henning Sten Hansen og John Johansson.  
Vejleder: Torsten Meyer.
- 92/85 "KVANTETEORI FOR GYMNASIET".  
2. Materiale  
Projektrapport af: Biger Lundgren, Henning Sten Hansen og John Johansson.  
Vejleder: Torsten Meyer.
- 93/85 "THE SEMIOTICS OF QUANTUM - NON - LOCALITY".  
Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 94/85 "TREENIGHEDEN BOURBAKI - generalen, matematikeren og ånden".  
Projektrapport af: Morten Blomhøj, Klavs Frisdahl og Frank M. Olsen.  
Vejleder: Mogens Niss.
- 95/85 "AN ALTERNATIV DEFENSE PLAN FOR WESTERN EUROPE".  
PEACE RESEARCH SERIES NO. 3  
Af: Bent Sørensen.
- 96/85 "ASPEKTER VED KRAFTVARMEFORSYNING".  
Af: Bjarne Lillethorup.  
Vejleder: Bent Sørensen.
- 97/85 "ON THE PHYSICS OF A.C. HOPPING CONDUCTIVITY".  
Af: Jeppe C. Dyre.
- 98/85 "VALGMULIGHEDER I INFORMATIONSDALDEREN".  
Af: Bent Sørensen.
- 99/85 "Der er langt fra Q til R".  
Projektrapport af: Niels Jørgensen og Mikael Klintorp.  
Vejleder: Stig Andur Pedersen.
- 100/85 "TALSsystemets OPBYGNING".  
Af: Mogens Niss.
- 101/85 "EXTENDED MOMENTUM THEORY FOR WINDMILLS IN PERTURBATIVE FORM".  
Af: Ganesh Sengupta.
- 102/85 OPSTILLING OG ANALYSE AF MATEMATISKE MODELLER, BELYST VED MODELLER OVER KØERS FODEROPtAGELSE OG - OMSÆTNING".  
Projektrapport af: Lis Eilertzen, Kirsten Habekost, Lill Røn og Susanne Stender.  
Vejleder: Klaus Grünbaum.

- 103/85 "ØDSLE KOLDKRIGERE OG VIDENSKABENS LYSE IDEER".  
 Projekt rapport af: Niels Ole Dam og Kurt Jensen.  
 Vejleder: Bent Sørensen.
- 104/85 "ANALOGREGNEMASKINEN OG LORENZLIGNINGER".  
 Af: Jens Jäger.
- 105/85 "THE FREQUENCY DEPENDENCE OF THE SPECIFIC HEAT OF THE GLASS REANITION".  
 Af: Tage Christensen.
- "A SIMPLE MODEL OF AC HOPPING CONDUCTIVITY".  
 Af: Jeppe C. Dyre.  
 Contributions to the Third International Conference on the Structure of Non - Crystalline Materials held in Grenoble July 1985.
- 106/85 "QUANTUM THEORY OF EXTENDED PARTICLES".  
 Af: Bent Sørensen.
- 107/85 "EN MYG GØR INGEN EPIDEMI".  
 - flodblindhed som eksempel på matematisk modellering af et epidemiologisk problem.  
 Projekt rapport af: Per Hedegård Andersen, Lars Boye, Carsten Holst Jensen, Else Marie Pedersen og Erling Møller Pedersen.  
 Vejleder: Jesper Larsen.
- 108/85 "APPLICATIONS AND MODELLING IN THE MATHEMATICS CURRICULUM" - state and trends -  
 Af: Mogens Niss.
- 109/85 "COX I STUDIE TIDEN" - Cox's regressionsmodel anvendt på studenteroplysninger fra RUC.  
 Projekt rapport af: Mikael Wennerberg Johansen, Poul Katter og Torben J. Andreassen.  
 Vejleder: Jørgen Larsen.
- 110/85 "PLANNING FOR SECURITY".  
 Af: Bent Sørensen
- 111/85 "JORDEN RUNDT PÅ FLADE KORT".  
 Projekt rapport af: Birgit Andresen, Beatriz Quinones og Jimmy Staal.  
 Vejleder: Mogens Niss.
- 112/85 "VIDENSKABELIGGØRELSE AF DANSK TEKNOLOGISK INNOVATION FREM TIL 1950 - BELYST VED EKSEMPLER".  
 Projekt rapport af: Erik Odgaard Gade, Hans Hedal, Frank C. Ludvigsen, Annette Post Nielsen og Finn Physant.  
 Vejleder: Claus Bryld og Bent C. Jørgensen.
- 113/85 "DE-SUSPENSION OF SPLITTING ELLIPTIC SYMBOLS 11".  
 Af: Bernhard Booss og Krzysztof Wojciechowski.
- 114/85 "ANVENDELSE AF GRAFISKE METODER TIL ANALYSE AF KONVIGENSTABELLER".  
 Projekt rapport af: Lone Billmann, Ole R. Jensen og Anne-Lise von Moos.  
 Vejleder: Jørgen Larsen.
- 115/85 "MATEMATIKKENS UDVIKLING OP TIL RENESSANCEN".  
 Af: Mogens Niss.
- 116/85 "A PHENOMENOLOGICAL MODEL FOR THE MEYER-NELDEL RULE".  
 Af: Jeppe C. Dyre.
- 117/85 "KRAFT & FJERNVARMEOPTIMERING".  
 Af: Jacob Mørch Pedersen.  
 Vejleder: Bent Sørensen
- 118/85 "TIDFELDTIGHEDEN OG NØDVENDIGHEDEN IFØLGE REINSTE OG FYSIKKEN".  
 Af: Peder Voetmann Christiansen
- 119/86 "HVER ER GANSKE VIST - - EUKLIDS FEMTE POSTULAT KUNNE NOK SKABE RØRE I ANDEDAMMEN".  
 Af: Ibhan Maj Christiansen  
 Vejleder: Mogens Niss.
- 120/86 "ET ANTAL STATISTISKE STANDARDMODELLER".  
 Af: Jørgen Larsen
- 121/86 "SIMULATION I KONTINUERT TID".  
 Af: Peder Voetmann Christiansen.
- 122/86 "ON THE MECHANISM OF GLASS IONIC CONDUCTIVITY".  
 Af: Jeppe C. Dyre.
- 123/86 "GYMNASIEFYSIKKEN OG DEN STORE VERDEN".  
 Fysiklærerforeningen, IMFUFA, RUC.
- 124/86 "OPGAVESAMLING I MATEMATIK".  
 Samtlige opgaver stillet i tiden 1974-jan. 1986.
- 125/86 "UVBY, 8 - systemet - en effektiv fotometrisk spektral-klassifikation af B-, A- og F-stjerner".  
 Projekt rapport af: Birger Lundgren.
- 126/86 "OM UDVIKLINGEN AF DEN SPECIELLE RELATIVITETSTEORI".  
 Projekt rapport af: Lise Odgaard & Linda Szkótak Jensen  
 Vejledere: Karin Beyer & Stig Andur Pedersen.
- 127/86 "GALOIS' BIDRAG TIL UDVIKLINGEN AF DEN ABSTRACTE ALGEBRA".  
 Projekt rapport af: Pernille Sand, Heine Larsen & Lars Frandsen.  
 Vejleder: Mogens Niss.
- 128/86 "SMÅKRYB" - en ikke-standard analyse.  
 Projekt rapport af: Niels Jørgensen & Mikael Wennerberg  
 Vejleder: Jeppe Dyre.
- 129/86 "PHYSICS IN SOCIETY"  
 Lecture Notes 1983 (1986)  
 Af: Bent Sørensen
- 130/86 "Studies in Wind Power"  
 Af: Bent Sørensen
- 131/86 "FYSIK OG SAMFUND" - Et integreret fysik/historie-projekt om naturanskuelsens historiske udvikling og dens samfundsmæssige betingethed.  
 Projekt rapport af: Jakob Heckscher, Søren Brønd, Andy Wierød.  
 Vejledere: Jens Høyrup, Jørgen Vogelius, Jens Højgaard Jensen.
- 132/86 "FYSIK OG DANNEELSE"  
 Projekt rapport af: Søren Brønd, Andy Wierød.  
 Vejledere: Karin Beyer, Jørgen Vogelius.
- 133/86 "CHERNOBYL ACCIDENT: ASSESSING THE DATA. ENERGY SERIES NO. 15."  
 Af: Bent Sørensen.
- 
- 134/87 "THE D.C. AND THE A.C. ELECTRICAL TRANSPORT IN AsSeTe SYSTEM"  
 Authors: M.B.El-Den, N.B.Olsen, Ib Høst Pedersen, Petr Visčor
- 135/87 "INTUITIONISTISK MATEMATIKS METODER OG ERKENDELSESTEORETISKE FORUDSÆTNINGER"  
 MATEMATIKSPECIALE: Claus Larsen  
 Vejledere: Anton Jensen og Stig Andur Pedersen
- 136/87 "Mystisk og naturlig filosofi: En skitse af kristendommen. første og andet møde med græsk filosofi"  
 Projekt rapport af Frank Colding Ludvigsen  
 Vejledere: Historie: Ib Thiersen  
 Fysik: Jens Højgaard Jensen
- 137/87 "HOPMODELLER FOR ELEKTRISK LEDNING I UORDNEDE FASTE STOFFER" - Resume af licentiatafhandling  
 Af: Jeppe Dyre  
 Vejledere: Niels Boye Olsen og Peder Voetmann Christiansen.

- 138/87 "JOSEPHSON EFFECT AND CIRCLE MAP."  
Paper presented at The International Workshop on Teaching Nonlinear Phenomena at Universities and Schools, "Chaos in Education". Balaton, Hungary, 26 April-2 May 1987.  
By: Peder Voetmann Christiansen
- 139/87 "Machbarkeit nichtbeherrschbarer Technik durch Fortschritte in der Erkennbarkeit der Natur"  
Af: Bernhelm Booss-Bavnbek  
Martin Bohle-Carbonell
- 140/87 "ON THE TOPOLOGY OF SPACES OF HOLOMORPHIC MAPS"  
By: Jens Gravesen
- 141/87 "RADIOMETERS UDVIKLING AF BLODGASAPPARATUR - ET TEKNOLOGIHISTORISK PROJEKT"  
Projektrapport af Finn C. Physant  
Vejleder: Ib Thiersen
- 142/87 "The Calderón Projektor for Operators With Splitting Elliptic Symbols"  
by: Bernhelm Booss-Bavnbek og  
Krzysztof P. Wojciechowski
- 143/87 "Kursusmateriale til Matematik på NAT-BAS"  
af: Mogens Brun Heefelt.
- 144/87 "Context and Non-Locality - A Peircan Approach  
Paper presented at the Symposium on the Foundations of Modern Physics The Copenhagen Interpretation 60 Years after the Como Lecture. Joensuu, Finland, 6 - 8 august 1987.  
By: Peder Voetmann Christiansen
- 145/87 "AIMS AND SCOPE OF APPLICATIONS AND MODELLING IN MATHEMATICS CURRICULA"  
Manuscript of a plenary lecture delivered at ICMIA 3, Kassel, FRG 8.-11.9.1987  
By: Mogens Niss
- 146/87 "BESTEMMELSE AF BULKRESISTIVITETEN I SILICIUM"  
- en ny frekvensbaseret målemetode.  
Fysikspeciale af Jan Vedde  
Vejledere: Niels Boye Olsen & Petr Višćor
- 147/87 "Rapport om BIS på NAT-BAS"  
redigeret af: Mogens Brun Heefelt
- 148/87 "Naturvidenskabsundervisning med Samfundsperspektiv"  
af: Peter Colding-Jørgensen DLH  
Albert Chr. Paulsen
- 149/87 "In-Situ Measurements of the density of amorphous germanium prepared in ultra high vacuum"  
by: Petr Višćor
- 150/87 "Structure and the Existence of the first sharp diffraction peak in amorphous germanium prepared in UHV and measured in-situ"  
by: Petr Višćor
- 151/87 "DYNAMISK PROGRAMMERING"  
Matematikprojekt af:  
Birgit Andresen, Keld Nielsen og Jimmy Staal  
Vejleder: Mogens Niss
- 152/87 "PSEUDO-DIFFERENTIAL PROJECTIONS AND THE TOPOLOGY OF CERTAIN SPACES OF ELLIPTIC BOUNDARY VALUE PROBLEMS"  
by: Bernhelm Booss-Bavnbek  
Krzysztof P. Wojciechowski
- 153/87 "HALVLEDERTEKNOLOGIENS UDVIKLING MELLEM MILITÆRE OG CIVILE KRÆFTER"  
Et eksempel på humanistisk teknologihistorie  
Historiespeciale  
Af: Hans Hedal  
Vejleder: Ib Thiersen
- 154/87 "MASTER EQUATION APPROACH TO VISCOUS LIQUIDS AND THE GLASS TRANSITION"  
By: Jeppe Dyre
- 155/87 "A NOTE ON THE ACTION OF THE POISSON SOLUTION OPERATOR TO THE DIRICHLET PROBLEM FOR A FORMALLY SELFADJOINT DIFFERENTIAL OPERATOR"  
by: Michael Pedersen
- 156/87 "THE RANDOM FREE ENERGY BARRIER MODEL FOR AC CONDUCTION IN DISORDERED SOLIDS"  
by: Jeppe C. Dyre
- 157/87 "STABILIZATION OF PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS BY FINITE DIMENSIONAL BOUNDARY FEEDBACK CONTROL: A pseudo-differential approach."  
by: Michael Pedersen
- 158/87 "UNIFIED FORMALISM FOR EXCESS CURRENT NOISE IN RANDOM WALK MODELS"  
by: Jeppe Dyre
- 159/87 "STUDIES IN SOLAR ENERGY"  
by: Bent Sørensen
- 160/87 "LOOP GROUPS AND INSTANTONS IN DIMENSION TWO"  
by: Jens Gravesen
- 161/87 "PSEUDO-DIFFERENTIAL PERTURBATIONS AND STABILIZATION OF DISTRIBUTED PARAMETER SYSTEMS: Dirichlet feedback control problems"  
by: Michael Pedersen
- 162/87 "PIGER & FYSIK - OG MEGET MERE"  
AF: Karin Beyer, Sussanne Blegaa, Birthe Olsen, Jette Reich, Mette Vedelsby
- 163/87 "EN MATEMATISK MODEL TIL BESTEMMELSE AF PERMEABILITETEN FOR BLOD-NETHINDE-BARRIEREN"  
Af: Finn Langberg, Michael Jarden, Lars Frellesen  
Vejleder: Jesper Larsen
- 164/87 "Vurdering af matematisk teknologi  
Technology Assessment  
Technikfolgenabschätzung"  
Af: Bernhelm Booss-Bavnbek, Glen Pate med  
Martin Bohle-Carbonell og Jens Højgaard Jensen
- 165/87 "COMPLEX STRUCTURES IN THE NASH-MOSER CATEGORY"  
by: Jens Gravesen

- 166/88 "Grundbegreber i Sandsynlighedsregningen"  
Af: Jørgen Larsen
- 167a/88 "BASISSTATISTIK 1. Diskrete modeller"  
Af: Jørgen Larsen
- 167b/88 "BASISSTATISTIK 2. Kontinuerte modeller"  
Af: Jørgen Larsen
- 168/88 "OVERFLADEN AF PLANETEN MARS"  
Laboratorie-simulering og MARS-analoger undersøgt ved Mössbauerspektroskopi.  
Fysikspeciale af:  
Birger Lundgren  
Vejleder: Jens Martin Knudsen  
Fys.Lab./HCØ
- 169/88 "CHARLES S. PEIRCE: MURSTEN OG MØRTEL TIL EN METAFYSIK."  
Fem artikler fra tidsskriftet "The Monist" 1891-93.  
Introduktion og oversættelse:  
Peder Voetmann Christiansen
- 170/88 "OPGAVESAMLING I MATEMATIK"  
Samtlige opgaver stillet i tiden 1974 - juni 1988
- 171/88 "The Dirac Equation with Light-Cone Data"  
af: Johnny Tom Ottesen
- 172/88 "FYSIK OG VIRKELIGHED"  
Kvantemekanikkens grundlagsproblem i gymnasiet.  
Fysikprojekt af:  
Erik Lund og Kurt Jensen  
Vejledere: Albert Chr. Paulsen og Peder Voetmann Christiansen
- 
- 173/89 "NUMERISKE ALGORITMER"  
af: Mogens Brun Heefelt
- 174/89 "GRAFISK FREMSTILLING AF FRAKTALER OG KAOS"  
af: Peder Voetmann Christiansen
- 175/89 "AN ELEMENTARY ANALYSIS OF THE TIME DEPENDENT SPECTRUM OF THE NON-STATIONARY SOLUTION TO THE OPERATOR RICCATI EQUATION"  
af: Michael Pedersen
- 176/89 "A MAXIMUM ENTROPY ANSATZ FOR NONLINEAR RESPONSE THEORY"  
af: Jeppe Dyre
- 177/89 "HVAD SKAL ADAM STÅ MODEL TIL"  
af: Morten Andersen, Ulla Engström, Thomas Gravesen, Nanna Lund, Pia Madsen, Dina Rawat, Peter Torstensen  
Vejleder: Mogens Brun Heefelt
- 178/89 "BIOSYNTESSEN AF PENICILLIN - en matematisk model"  
af: Ulla Eghave Rasmussen, Hans Oxvang Mortensen, Michael Jarden  
vejleder i matematik: Jesper Larsen  
biologi: Erling Lauridsen
- 179a/89 "LÆRERVEJLEDNING M.M. til et eksperimentelt forløb om kaos"  
af: Andy Wierød, Søren Brønd og Jimmy Staal  
Vejledere: Peder Voetmann Christiansen  
Karin Beyer
- 179b/89 "ELEVHÆFTE: Noter til et eksperimentelt kursus om kaos"  
af: Andy Wierød, Søren Brønd og Jimmy Staal  
Vejledere: Peder Voetmann Christiansen  
Karin Beyer
- 180/89 "KAOS I FYSISKE SYSTEMER eksemplificeret i torsions- og dobbeltpendul".  
af: Andy Wierød, Søren Brønd og Jimmy Staal
- 181/89 "A ZERO-PARAMETER CONSTITUTIVE RELATION FOR PURE SHEAR VISCOELASTICITY"  
by: Jeppe Dyre
- 183/89 "MATHEMATICAL PROBLEM SOLVING, MODELLING. APPLICATIONS AND LINKS TO OTHER SUBJECTS - State. trends and issues in mathematics instruction  
by: WERNER BLUM, Kassel (FRG) og MOGENS NISS, Roskilde (Denmark)
- 184/89 "En metode til bestemmelse af den frekvensafhængige varmfylde af en underafkølet væske ved glasovergangen"  
af: Tage Emil Christensen
- 
- 185/90 "EN NÆSTEN PERIODISK HISTORIE"  
Et matematisk projekt  
af: Steen Grode og Thomas Jessen  
Vejleder: Jacob Jacobsen
- 186/90 "RITUAL OG RATIONALITET i videnskabers udvikling"  
redigeret af Arne Jakobsen og Stig Andur Pedersen
- 187/90 "RSA - et kryptisk system"  
af: Annemette Sofie Olufsen, Lars Frellesen og Ole Møller Nielsen  
Vejledere: Michael Pedersen og Finn Munk
- 188/90 "FERMICONDENSATION - AN ALMOST IDEAL GLASS TRANSITION"  
by: Jeppe Dyre
- 189/90 "DATAMATER I MATEMATIKUNDERVISNINGEN PÅ GYMNASIET OG HØJERE LÆREANSTALTER  
af: Finn Langberg

- 190/90 "FIVE REQUIREMENTS FOR AN APPROXIMATE NONLINEAR RESPONSE THEORY"  
by: Jeppe Dyre
- 191/90 "MOORE COHOMOLOGY, PRINCIPAL BUNDLES AND ACTIONS OF GROUPS ON C\*-ALGEBRAS"  
by: Iain Raeburn and Dana P. Williams
- 192/90 "Age-dependent host mortality in the dynamics of endemic infectious diseases and SIR-models of the epidemiology and natural selection of co-circulating influenza virus with partial cross-immunity"  
by: Viggo Andreasen
- 193/90 "Causal and Diagnostic Reasoning"  
by: Stig Andur Pedersen
- 194a/90 "DETERMINISTISK KAOS"  
Projektrapport af : Frank Olsen.
- 194b/90 "DETERMINISTISK KAOS"  
Kørselsrapport  
Projektrapport af: Frank Olsen
- 195/90 "STADIER PÅ PARADIGMETS VEJ"  
Et projekt om den videnskabelige udvikling der førte til dannelse af kvantemekanikken.  
Projektrapport for 1. modul på fysikuddannelsen, skrevet af:  
Anja Boisen, Thomas Hougård, Anders Gorm Larsen, Nicolai Ryge.  
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
- 196/90 "ER KAOS NØDVENDIGT?"  
- en projektrapport om kaos' paradigmatisk status i fysikken.  
af: Johannes K. Nielsen, Jimmy Staal og Peter Bøggild  
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
- 197/90 "Kontrafaktiske konditionaler i HOL"  
af: Jesper Voetmann, Hans Oxvang Mortensen og Aleksander Høst-Madsen  
Vejleder: Stig Andur Pedersen
- 198/90 "Metal-Isolator-Metal systemer"  
Speciale  
af: Frank Olsen
- 199/90 "SPREDT FÆGTNING" Artikelsamling  
af: Jens Højgaard Jensen
- 200/90 "LINEÆR ALGEBRA OG ANALYSE"  
Noter til den naturvidenskabelige basisuddannelse.  
af: Mogens Niss