

# Lauediagram af Flusspat.

Af

Hans Clausen.

With a Summary of the Contents.

---

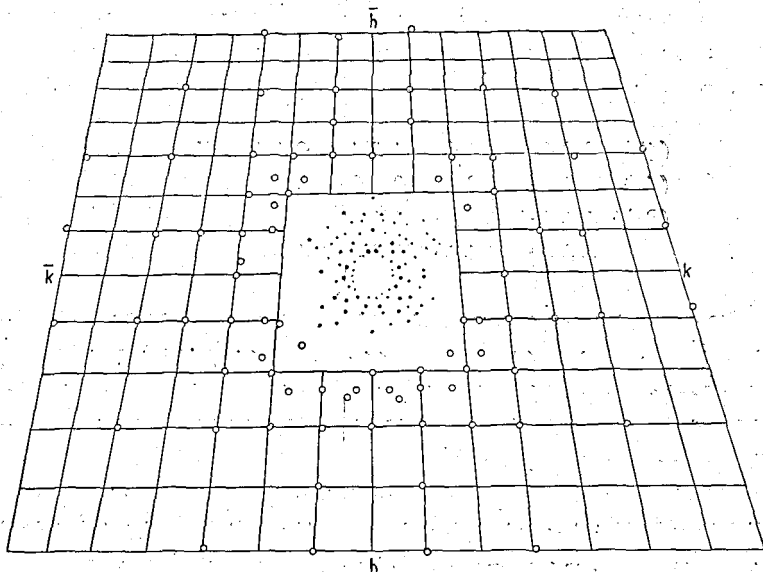
Flusspatens Struktur er allerede bestemt af W. L. BRAGG i 1914<sup>1)</sup> ved røntgenspektrometriske Undersøgelser. Imidlertid hviler Intensitetsundersøgelserne ved denne Metode paa ganske faa Flader; i Modsætning hertil giver et Lauediagram Reflexer fra et større Antal Former, og herigenem bliver Kontrollen med de beregnede Intensiteter bedre. Lauediagrammer af Flusspat har tidligere været optagne<sup>2)</sup>, men ikke undersøgt nærmere. Da det vilde være af Interesse at se, hvor godt den af BRAGG foreslaaede Struktur kan forklare Intensitetsforholdene i Flusspatens Lauediagram, foreslog Professor V. M. GOLDSCHMIDT, Mineralogisk Institut i Oslo, mig at undersøge disse Forhold paa hans Institut i Efteraaret 1925. Baade for Benyttelsen af Røntgenapparatet og for Vejledning i Strukturberegninger skylder jeg Professor GOLDSCHMIDT megen Tak.

Af Flusspat fra Konnerudkollen ved Drammen blev der optaget et Lauediagram omtrent parallel med en Terningflade; Afstanden fra Krystal til fotografisk Plade var 40 mm. Expositionstiden var 1½ Time, Spændingen 69 KV og Strømstyrken 3 MA.

---

<sup>1)</sup> Denne og de følgende Henvisninger gælder den efter Afhandlingen nævnte Litteratur.

Paa sædvanlig Maade overførtes Lauediagrammet til gnomonisk Projektion (Kugleradius 2,5 cm), og blandt Reflexer med lille Centraldistance udvalgte den, der skyldes Planet (531). Centraldistancen er her 1,10 cm, hvilket giver,



Figuren viser Lauediagrammets Punkter, samt den gnomoniske Projektion af de reflekterende Planer.

at sinus til Glansvinklen  $\theta$  er 0,134. Idet det maa antages, at Røntgenrørets minimale Bølgebredde,  $\lambda_{\min}$ , for 69 KV og 3 MA er ca. 0,2 Å, faas, naar  $a_0$  betegner Længden af Siden

i Flusspatens Enhedsterning,  $a_0 = \frac{0,2 \cdot \sqrt{5^2 + 3^2 + 1^2}}{2 \cdot 0,134} = 4,42 \text{ Å}$ .

Dette Tal er af samme Størrelsesorden som det af W. P. DAWEY ud fra Debyediagram fundne  $a_0 = 5,478 \text{ Å}$ ,<sup>3)</sup> saaledes at det stemmer med, at Enhedsterningen indeholder 4 „Molekuler“ Ca F<sub>2</sub>.

I Enhedsterningen skal altsaa findes 4 Ca og 8 F og begge sandsynligvis i ioniseret Tilstand. Opgaven bliver da at finde, paa hvilke Maader de 4 Ca og de 8 F kan anbringes i et kubisk Rumgitter.

Lauediagrammet viser ingen Hemiedri, og I Ordens Re-

flexer findes kun fra Planer med alle tre Indices ulige. Dette taler for, at Rumgitteret er det flade-centrerede kubiske Gitter  $\Gamma_c'$  (jvfr. WYCKOFF, 1924, S. 219).

Efter WYCKOFFS Tabeller<sup>4</sup>) er det muligt samtidigt at anbringe 4 og 8 ækvivalente Punkter i Rumgrupperne  $O^3$  og  $O_h^5$ , naar det til Grund for Strukturen liggende Gitter er  $\Gamma_c'$  og Hemiedri er udelukket. I begge Tilfælde er Positionerne for Ca enten

$$\begin{aligned} (4b): & 000; \frac{1}{2}\frac{1}{2}0; \frac{1}{2}0\frac{1}{2}; 0\frac{1}{2}\frac{1}{2} \text{ eller} \\ (4c): & \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}; \frac{1}{2}00; 0\frac{1}{2}0; 00\frac{1}{2} \text{ og for F} \\ (8e): & \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}; \frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}; \frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}; \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}; \\ & \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}; \frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}; \frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}; \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}. \end{aligned}$$

Det ses let, at i dette Tilfælde er det ligegyldigt, om man for Ca anvender (4 b) eller (4 c), da (4 c) blot betyder en Forskydning af Koordinatsystemets Begyndelsespunkt, men ikke forandrer Ca-Ionernes Beliggenhed i Forhold til Fluor-Ionernes.

Ved Beregningen af Intensiteten I af de af et Plan reflekterede Røntgenstråler forudsættes, at  $I \sim A^2 + B^2$ , hvor  $A + B = \bar{N} \Sigma (e^{2n\pi i(hx + ky + lz + \dots)})$ . Her betyder n Reflexernes Orden, hkl det reflekterende Plans Indices og xyz Positionen af Ionen N, hvis Reflexionsevne  $\bar{N}$  sættes lig dens Elektronantal (altsaa for  $Ca^{++} = 18$  og for  $F^- = 10$ ). Med de ved (4 b) og (8 e) angivne Positioner vil det imaginære Led B altid være 0, saa at  $I \sim A^2$ , hvor  $A = \bar{N} \Sigma [\cos 2n\pi(hx + ky + lz) \dots]$ .

Da Intensiteten af et Punkt paa Lauediagrammet foruden af Krystalstrukturen er afhængig bl. a. af Glansvinklen  $\theta$ , vil man faa et med de iagttagne Intensiteter bedre stemmende Resultat ved Multiplikation med  $\frac{1 + \cos^2 2\theta}{\cos \theta}$  (jvfr. WYCKOFF, 1924, S. 103).

Paa Figuren er gengivet den gnomoniske Projektion, samt i Midten Lauediagrammets Punkter, saaledes at Størrelsen af Pletterne svarer til de tre Trin i Intensitetsskalaen: st (stærk), m (middelstærk) og sv (svag). Stort nøjagtigere

er det ikke muligt ved Skøn at fastslaa Intensiteterne efter Sværtningsgraden; da denne iøvrigt er noget afhængig af Bølgebredden for den reflekterede Røntgenstraale, er Værdien  $n \cdot \lambda$  opført i nedenstaaende Oversigtstabel, hvori er opført et Plan som Repræsentant for hver Form, der giver Reflex i Lauediagrammet.

h k l	$h^2+k^2+l^2$	Centraldist.	$n \cdot \lambda$	I, beregn.	I, iagt.	Orden
201	5	4,35	1,965	23	m	IV
121	6	3,95	1,699	24	sv	IV
221	9	2,90	1,130	14	sv	IV
031	10	2,95	1,087	50	m-st	II
311	11	2,35	0,861	47	sv	III
321	14	2,00	0,675	38	m-st	II
141	18	1,95	0,582	30	m	II
331	19	1,70	0,505	114	st	
151	27	1,65	0,411	81	st	
512	30	3,05	0,640	17	sv	II
351	35	1,20	0,263	64	m-st	
711	51	1,45	0,266	43	sv-m	
551	51	1,40	0,256	44	sv-m	
553	59	3,65	0,569	32	sv-m	
371	59	1,15	0,1985	38	sv	
733	67	3,10	0,434	30	sv	
753	83	2,75	0,358	24	sv	
193	91	2,95	0,360	22	svsv	

Med Romertal er angivet Reflexionens Orden, forsaavidt den ikke er I Orden. Man ser, at Forholdene mellem de beregnede Intensiteter og de iagttagne er i god Overensstemmelse med hinanden, saaledes at Lauediagrammet smukt bekræfter, at Strukturen er som angivet ved (4 b) og (8 e), for henholdsvis  $Ca^{++}$  og  $F^-$ , eller med andre Ord: at den af W. L. BRAGG foreslaaede Struktur er rigtig.

## Summary.

A Laue photograph of fluorite.

The Laue photograph of fluorite was made with the photographic plate nearly parallel to a cube face, the distance from crystal to plate being 4 cm. The intensities of the reflexions may be interpreted by means of the structural conditions proposed by W. L. BRAGG, which are thus proved by the Laue photograph. The agreement of the observed intensities with the calculated ones appears from the table (p. 43) in which each of the reflecting forms is represented by one of its planes. The observed intensities are classified in st (strong), m (medium) and sv (weak).

---

### Literaturhenvisninger,

- <sup>1)</sup> W. L. BRAGG, Proc. Roy. Soc. London 1914, 89 A, 468.
  - <sup>2)</sup> R. GLOCKER, Physikal. Z. 1914, 15, 401 og Ann.d. Physik 1915, 47, 377.
  - <sup>3)</sup> W. P. DAVEY, Phys. Rev. 1922, 19, 248.
  - <sup>4)</sup> R. W. G. WYCKOFF: The analytical Expression of the Results of the Theory of Space Groups. Carnegie Inst. Publ. 318. Washington 1922. Henvisning til WYCKOFF (1924) gælder R. W. G. WYCKOFF: The Structure of Crystals. New York 1924.
-