
HTML5演示布拉格衍射实验

17307110206 马曜峥行

1. 目前演示实验目标

- 对于给定X光波长、入射光角度、接收器角度计算相对光强
 - 自动旋转入射、出射角度得到光强随角度变化并作图
 - 可调参数：
 - X光波长、入射出射角度
 - 晶胞尺寸
 - 晶胞类型 (sc、fcc、bcc)
 - 不同类型原子/考虑原子的形状因子 (待做)
 - 单个基或多个基/考虑几何结构因子 (待做)
-

2. 实验原理

- Laue公式

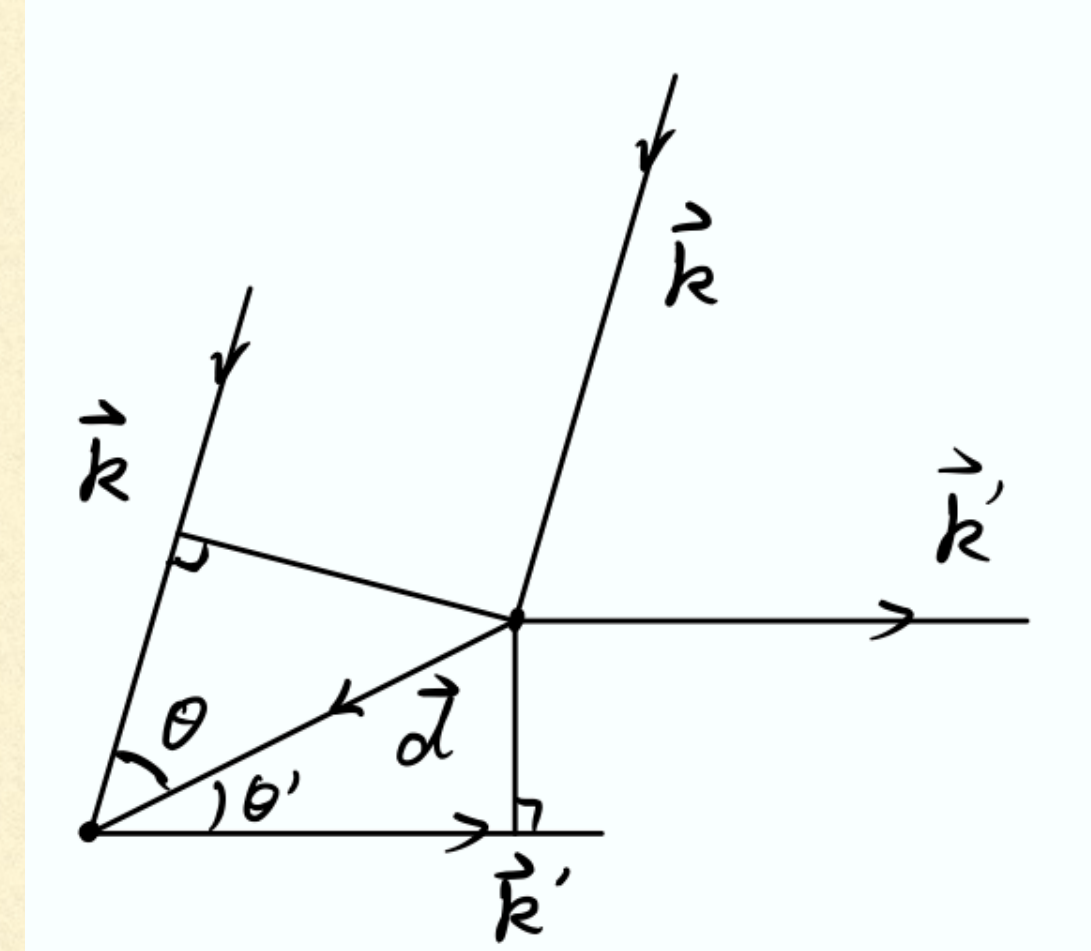
- $\vec{R} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi m$

- $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{e}_n$

- 几何结构因子与原子形状因子

- $S_{\vec{k}} = \sum_{j=1}^n f_j(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_j}$

- $f_j(\vec{k}) = -\frac{1}{e} \int d\vec{r} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \rho_j(\vec{r})$



3. 网页效果展示

X射线衍射实验

是否考虑原子形状因子影响:

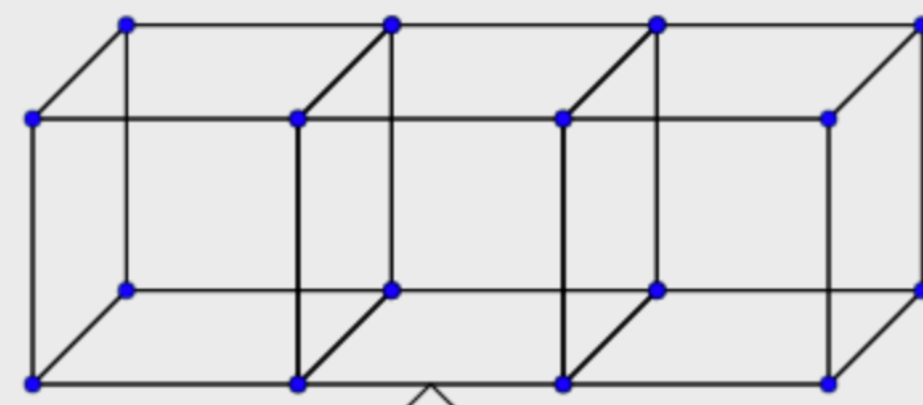
X射线波长/pm: ← 输入改变X射线波长

晶格常数/pm: ← 滑动改变晶体常数大小

入射角度/°: ← 输入改变入射出射角

接收角度/°:

晶胞类型: ← 选择晶体类型

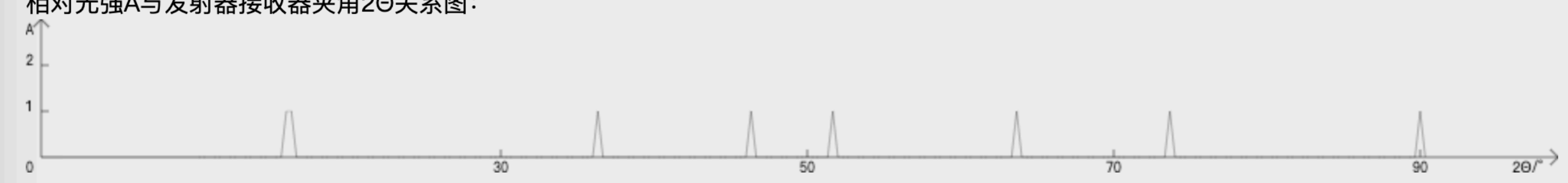


← 晶体效果示意图

X射线相对强度: 0 ← 该角度、波长下接收强度

Rotating-Crystal方法: ← 自动旋转得到关系图

相对光强A与发射器接收器夹角 2θ 关系图:



4. 本周实验进展：

1. 优化晶体示意图的显示，增加示意图的周期性
 2. 发现衍射强度的计算部分存在问题，没有考虑所有面的衍射
 3. 已基本完成单原子基衍射的计算
 4. 正进行多原子基衍射的计算部分
 5. 演示实验基本进入尾声，正寻找新项目
-