近代物理实验期末报告

X射线系列实验

实验人：周晓颖(A5)
合作者：杨　树
指导老师：俞　熹

摘 要

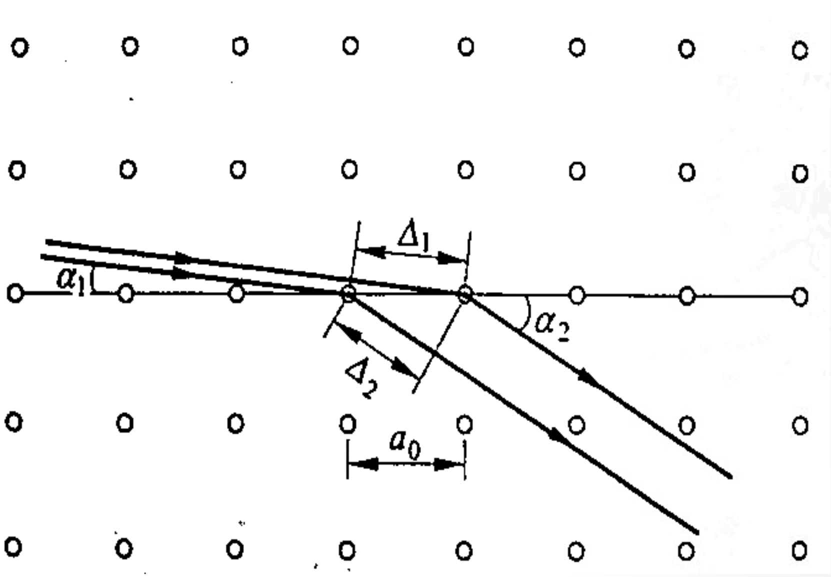
- 单晶衍射—劳厄相
  - 空间劳厄条件
  - 振幅计算
  - 劳厄斑计算

- 单晶粉末衍射—德拜相
  - 样品选择
  - 德拜相计算

单晶衍射—劳厄相

- 1912年，劳厄提出可以通过X射线在晶体上的衍射来证实X光的波动。弗瑞德里希和克尼平根据他的设想进行了实验。并观察到预期斑状衍射花样。

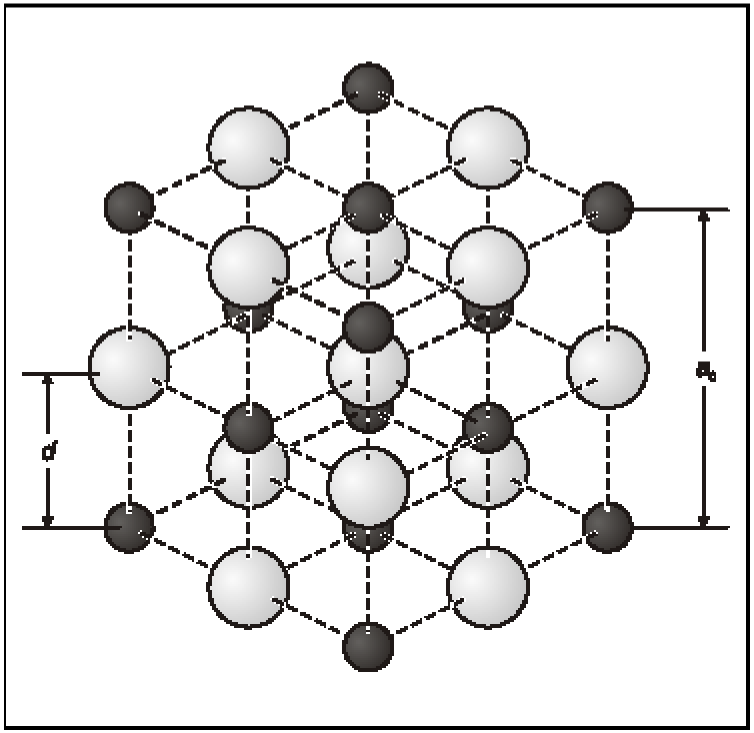
- 设想晶体有三维规则排列空间点阵组成



光程差$\Delta = \Delta_1 - \Delta_2 = a_0\cos\alpha_1 - a_0\cos\alpha_2$

Δ为波长的整数倍时，干涉极大

劳厄条件



简单立方晶包

空间劳厄条件

$$\begin{cases} a_0 \cos\alpha_1 - a_0 \cos\alpha_2 = h\lambda \\ a_0 \cos\beta_1 - a_0 \cos\beta_2 = k\lambda \\ a_0 \cos\gamma_1 - a_0 \cos\gamma_2 = l\lambda \end{cases}$$

$\alpha_1, \beta_1, \gamma_1$ 入射射线与格点线列的夹角

$\alpha_2, \beta_2, \gamma_2$ 出射射线与格点线列的夹角

h, k, l 米勒指数

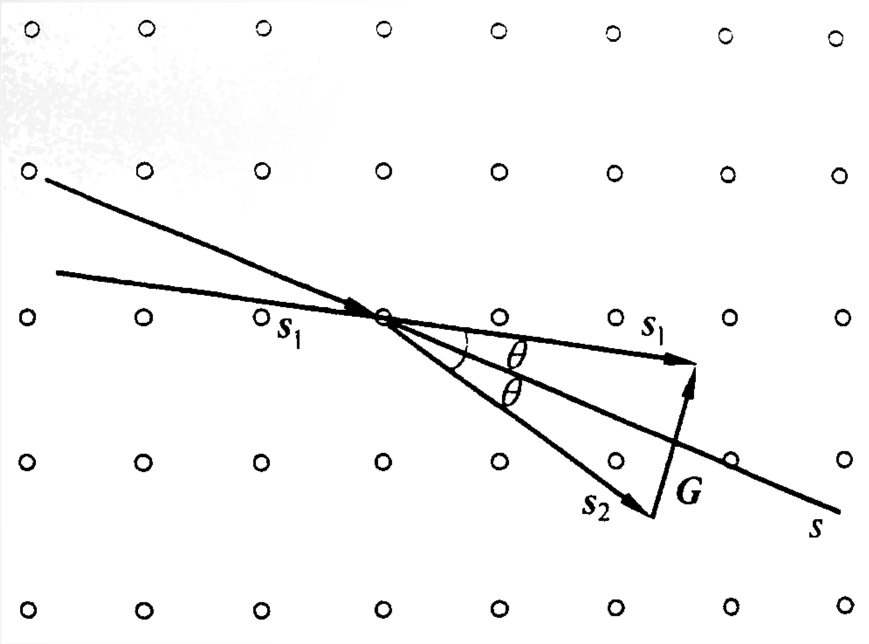
引入单位矢量$\vec{s}_1=(\cos\alpha_1,\cos\beta_1,\cos\gamma_1)$，$\vec{s}_2=(\cos\alpha_2,\cos\beta_2,\cos\gamma_2)$，

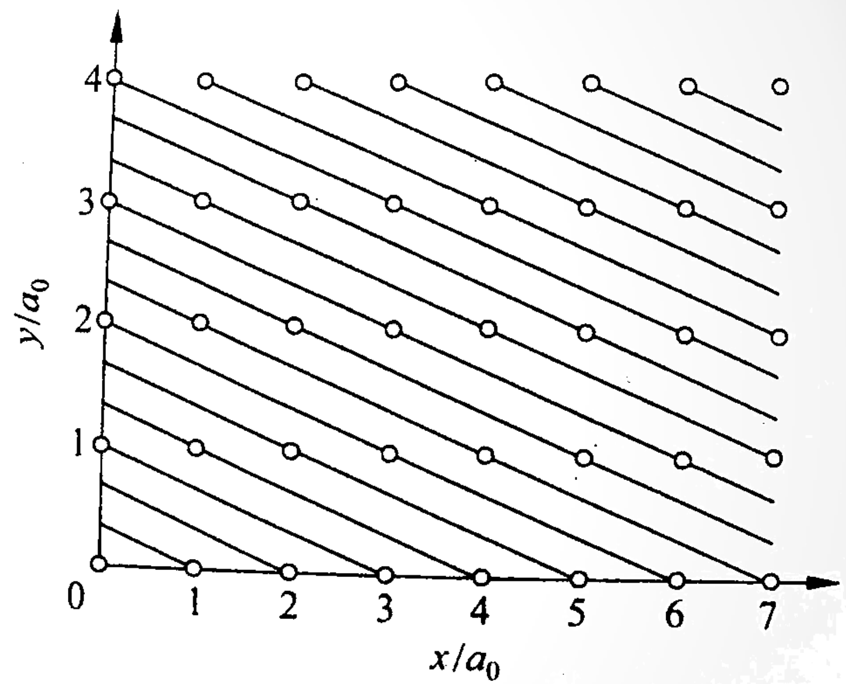
劳厄条件可以表示为：$\vec{s}_1-\vec{s}_2=\lambda\vec{G}$，

其中$\vec{G}=(h,k,l)\cdot\dfrac{1}{a_0}$，$\left|\vec{G}\right|=\dfrac{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}{a_0}$。$\vec{G}$称为倒格矢。

当h,k,l为整数，总使劳厄条件成立。

振幅计算





$$\lambda|G| = |s_1 - s_2| = 2\sin\theta$$

$$\lambda = 2\sin\theta \frac{a_0}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

$$d = \frac{a_0}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

$$xh + yk + zl = ma_0$$

在类 NaCl 晶体中，碱金属离子（如 Na^+）与卤素离子（如 Cl^-）相互交替排列。空间点阵由边长 a_0 的立方单胞排列而成，X 射线经碱金属离子 A 的散射波与经卤素离子 H 的散射波相干叠加构成 X 射线经单胞的散射波，光程差为 $\Delta_i = (\vec{s_1} - \vec{s_2}) \cdot \vec{r_i}$，其幅度有

$$A_A = f_A[\cos(\frac{2\pi}{\lambda}\Delta_1) + \cos(\frac{2\pi}{\lambda}\Delta_2) + \cos(\frac{2\pi}{\lambda}\Delta_3) + \cos(\frac{2\pi}{\lambda}\Delta_4)]$$

$$A_H = f_H[\cos(\frac{2\pi}{\lambda}\Delta_5) + \cos(\frac{2\pi}{\lambda}\Delta_6) + \cos(\frac{2\pi}{\lambda}\Delta_7) + \cos(\frac{2\pi}{\lambda}\Delta_8)]$$

$$A = A_A + A_H$$

若劳厄条件得到满足，则每个单胞的衍射波再次相干叠加才能得到劳厄斑，即有：

$$A_A = f_A\{1 + \cos[(h+k)\pi] + \cos[(h+l)\pi] + \cos[(k+l)\pi]\}$$

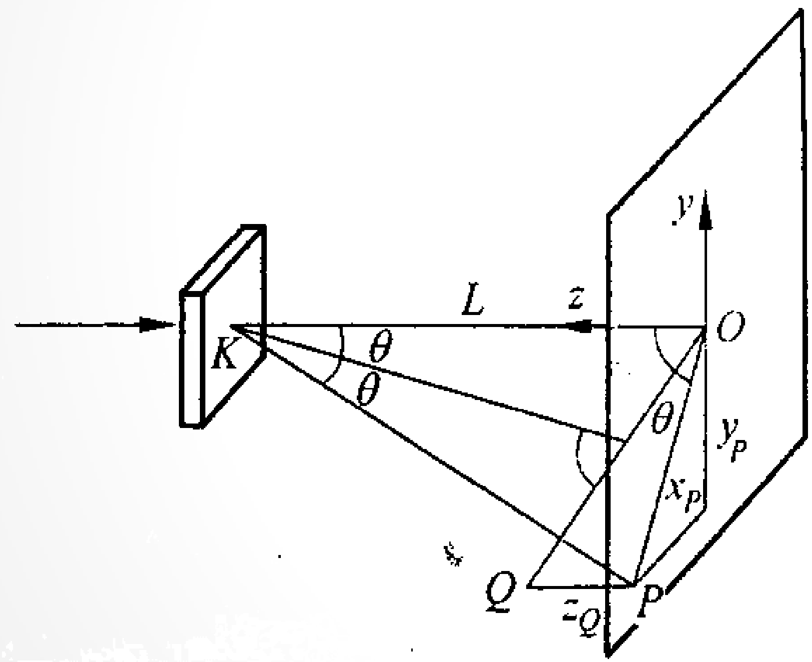
$$A_H = f_H\{\cos(h\pi) + \cos(k\pi) + \cos(l\pi) + \cos[(k+h+l)\pi]\}$$

经计算可得

$$A = \begin{cases} 4f_A + 4f_H & (h,k,l\text{为偶数}) \\ 4f_A - 4f_H & (h,k,l\text{为奇数}) \\ 0 & (h,k,l\text{奇偶混合}) \end{cases}$$

从单胞从单胞散射的X射线的幅度只有在全为偶数或全为奇数时才不为0

劳厄斑计算



$$\tan 2\theta = \frac{\sqrt{x_P^2 + y_P^2}}{L}$$

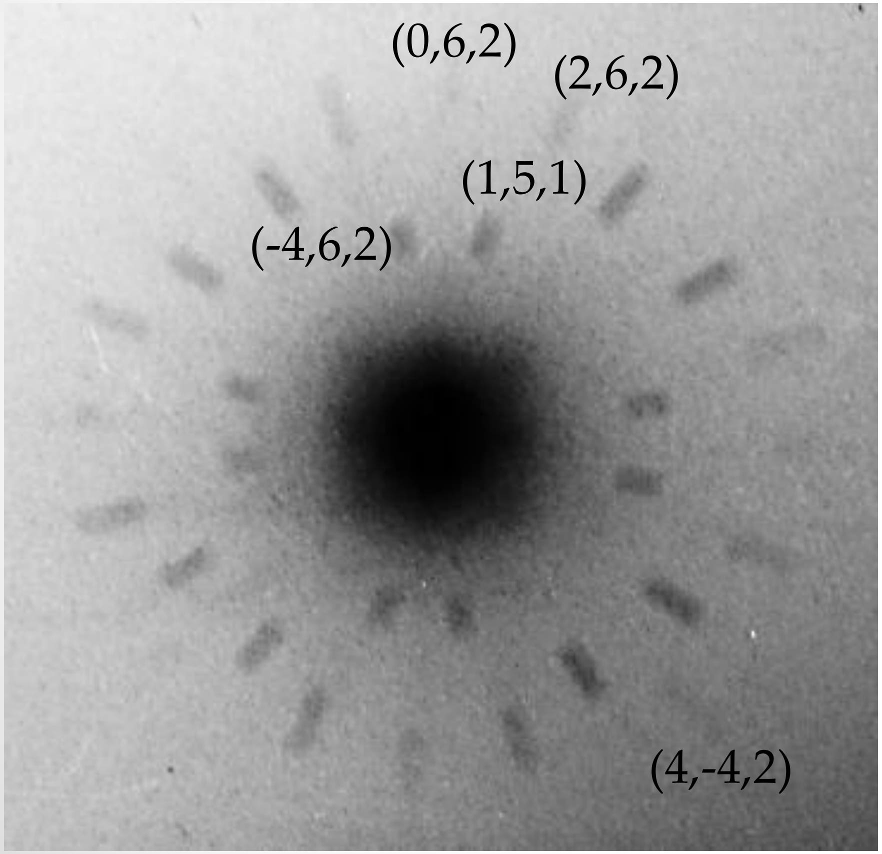
$$\tan\theta = \frac{z_Q}{\sqrt{x_Q^2 + y_Q^2}}$$

$$h:k:l = x_Q : y_Q : z_Q$$

$$z_Q = \sqrt{x_Q^2 + y_Q^2 + L^2} - L$$

劳厄相

NaCl



LiF

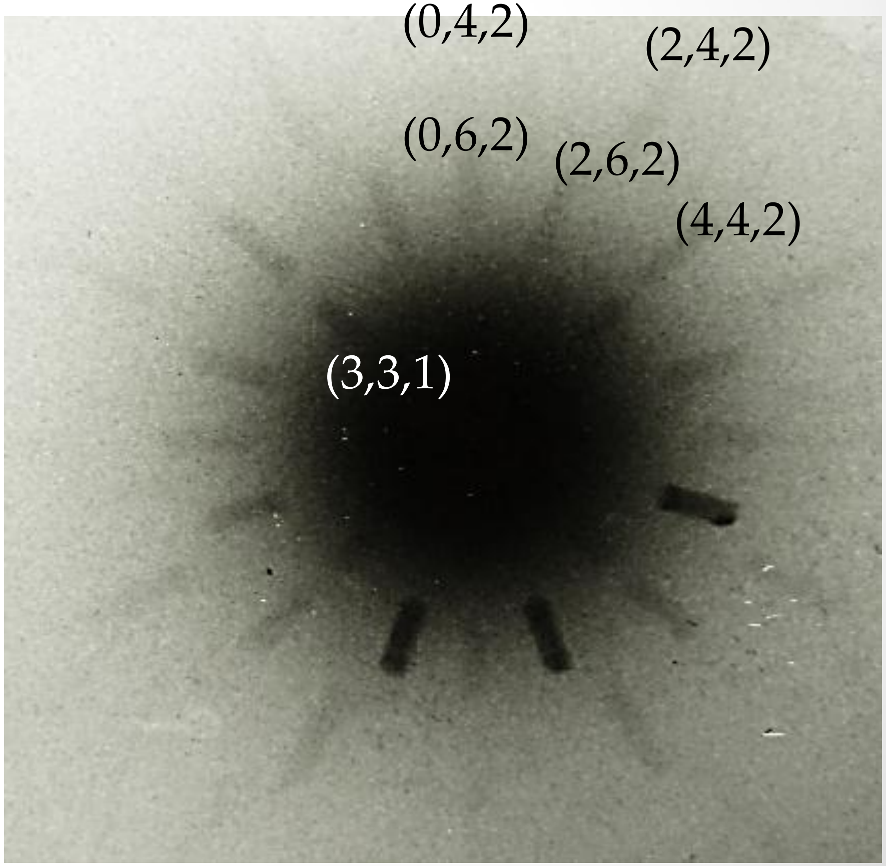


表 1.1

NaCl(a_0=564pm)　晶体劳厄像 L=15mm　X 光波长 71pm									
	x_Q/mm	y_Q/mm	z_Q/mm	x/mm	y/mm	h	k	l	d/pm
1	0.0	14.0	5.5	11.2	0.0	0	6	2	89.2
2	4.5	13.0	5.3	3.3	10.0	2	6	2	85.0
3	11.0	11.0	6.6	8.6	8.6	4	4	2	94.0
4	6.0	8.5	3.2	5.0	7.5	4	6	2	75.4
5	1.5	8.0	2.0	1.2	6.0	1	5	1	108.5

表 1.2

LiF(a_0=403pm)　晶体劳厄像 L=11mm　X 光波长 71pm									
	x_Q/mm	y_Q/mm	z_Q/mm	x/mm	Y/mm	h	k	l	d/pm
1	0.0	9.0	3,2	0.0	8.3	0	6	2	63.7
2	3.0	8.0	3.0	2.4	7.3	2	6	2	60.8
3	7.8	7.8	4.6	6.3	6.3	4	4	2	67.2
4	14.0	0.0	6.8	14.7	0.0	4	0	2	90.1
5	13.0	6.0	7.0	11.0	5.5	4	2	2	82.3
6	4.2	4.2	1.5	3.9	3.9	3	3	1	92.5

（1）　对劳厄斑坐标进行读数，得到表 1 数据

（2）　按 $z_Q=\sqrt{x_Q^2+y_Q^2+L^2}-L$ 计算 z_Q

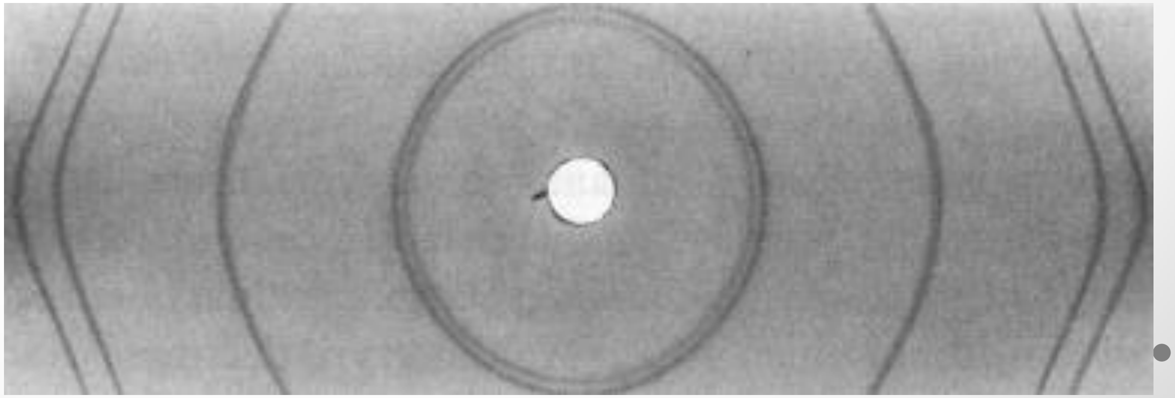
（3）　按 $d=\dfrac{a_0}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ 计算晶面间隔 d

单晶粉末衍射—德拜相

- 与劳厄像类似，将NaCl单晶换为单晶粉末，由于单晶粉末的镜面取向是随机的，对于入射光线来说，满足布拉格条件的取向有旋转对称性，衍射图案是同心圆。
- 满足几何关系$R = L\tan 2\theta$
- 布拉格条件$\sin^2\theta = \left(\frac{\lambda}{2a_0}\right)^2[(nh)^2 + (nk)^2 + (nl)^2]$

令$F = \left(\frac{\lambda}{2a_0}\right)^2$，$Z = (nh)^2 + (nk)^2 + (nl)^2$

有$\sin^2\theta = FZ$



选择NaCl粉末作为研究的样品，干燥的NaCl 晶体在研钵内细研后直径会小于10μm，由于晶体透明，样品粉的厚度可以达到0.1～0.5mm，在投射层充分厚的情况下，更有利于衍射环的出现。

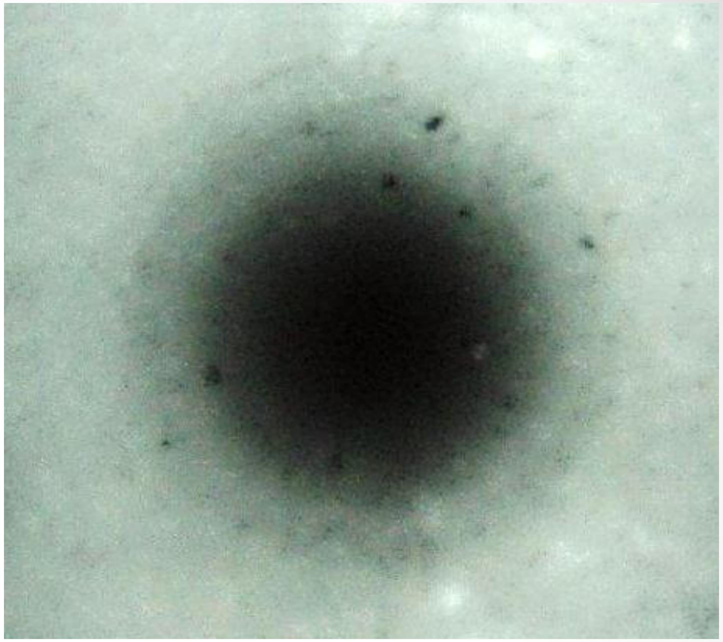


表 2

NaCl(a0=564pm)　晶体德拜像 L=13mm　X 光波长 71pm									
D/mm	θ/°	$\sin^2\theta$	Z	n	h	k	l	F	d/mm
7.0	7.53	0.0172	4	1	2	0	0	0.0043	279.5
10.0	10.52	0.0333	8	1	2	2	0	0.0042	197.6
14.5	14.58	0.0633	16	1	4	0	0	0.0039	139.8
17.0	16.59	0.0815	20	1	4	2	0	0.0040	125.0
19.2	18.22	0.0978	24	1	4	2	2	0.0040	114.1
23.0	20.75	0.1255	32	1	4	4	0	0.0039	98.8
25.0	21.94	0.1396	36	1	6	0	0	0.0038	93.2
				1	4	4	2		93.17
28.0	23.56	0.1598	40	1	6	2	0	0.0040	88.4

德拜相计算

（1） 量出德拜相的同心圆环直径 D

（2） 根据 $R = L\tan 2\theta$ 计算出布拉格角 θ，进而计算出 $\sin^2\theta$

（3） 猜测一整数 Z，并由 $F = (\frac{\lambda}{2a_0})^2$ 计算出常数因子 F

（4） 由表 2 数据，将 $\sin^2\theta$ 分解为常数 F 和整数 Z 之积，由 Z 求出晶面指数 h,k,l 以及衍射级次 n

（5） F 的平均值为 0.00404

（6） $\lambda = 71.1pm$（实验中加入 Zr 吸收片，69pm 处有一吸收边，去除 63pm 处 Kβ 线）

（7） 计算得到 NaCl 的晶格常数 $a_0 = \frac{\lambda}{2}\frac{1}{\sqrt{F}} = 559\,pm$（理论值 $a_0 = 564.02\,pm$）

Thanks for your attention