

研究 X 光与物质相互作用

07300190003 徐浩宇
复旦大学物理系

摘要:

实验中我们主要运用 X 射线衍射仪进行了光与物质相互作用的实验。通过 X 光穿过不同金属，测量金属的吸收系数及波长和原子序数的关系。并利用 X 光在晶格中衍射所得德拜像分析 NaCl 和 Si 的结构。

关键词

吸收系数, X 射线衍射, 德拜法, 晶格常数。

引言

在本实验中，主要研究 X 射线通过金属发生的吸收和通过晶格发生的衍射来再现光与物质相互作用的机理。验证了经过金属的 X 光透射率与波长、原子序数满足一定关系。德拜照相法主要利用晶体常数和 X 光波长接近特点使得 X 光在不同晶面之间发生衍射，得到衍射图像，证明 X 射线的波动性，并处理得到 NaCl 和 Si 的晶体结构。

1.吸收系数与波长和原子序数的关系

原理

X 光经过物理 x 距离与透射率的关系为

$T = e^{-\mu x}$ 。其中衰减系数 $\mu = \tau + \sigma$ ，其中线吸收系数 τ 和散射系数 σ 共同贡献。我们通常将这些系数除以密度，变为质量线吸收系数，质量散射系数和质量衰减系数。在吸收限之外质量吸收系数和波长、原子序数之间的关系满足 $\tau_m = K \cdot \lambda^3 \cdot Z^3$ 。

我们可以通过 $\tau_m = -\frac{\ln T}{\rho \cdot x}$ 将 T 转化成 τ_m 并对波长、

原子序数做拟合。由于样品的吸收限在 $\lambda = 48.6\text{pm}$ 至 $\lambda = 796\text{pm}$ 之间变化。有两种处理数据的方法。可以选择比较小的波长来避开所有金属的吸收限，或者可以将某个波长没有吸收限和有吸收限的金属分开拟合，两条拟合直线的斜率应该一致。

实验结果与讨论

将 Cu, Zr 分别放置在 X 光仪出射光阑处，将透射率转化成质量吸收系数，对波长作图。

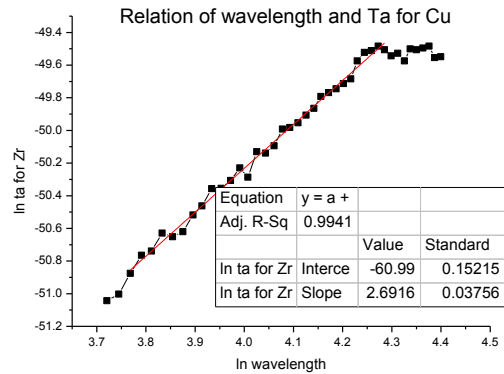


图 1.Cu 吸收系数和波长的关系

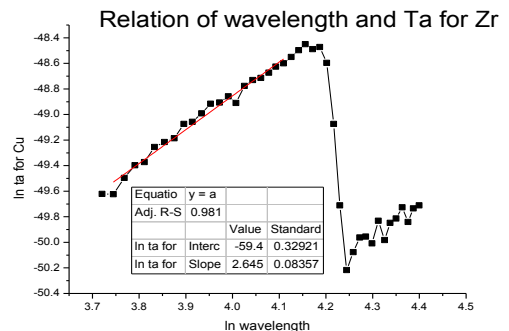


图 1.Zr 吸收系数和波长的关系

由于 Zr 在 68.9pm 处有吸收边，所以拟合选取远离吸收边的部分。可以得出 $\tau_m \sim \lambda^3$ 的关系。

在测量原子系数和质量吸收系数的关系时，运用 Al, Fe, Cu, Zr, Mo, Ag 这六个金属，在固定波长下测

量透射率。选取对于这六个金属都没有吸收边的43.4pm 以及 X 光强最大的特征峰 71.7pm 进行测量。

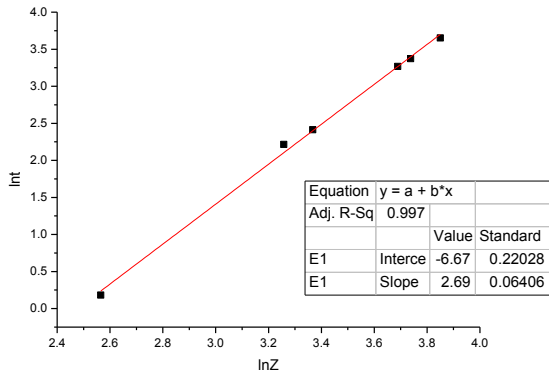


图 3.43.4pm 下六种金属原子序数和吸收系数的关系

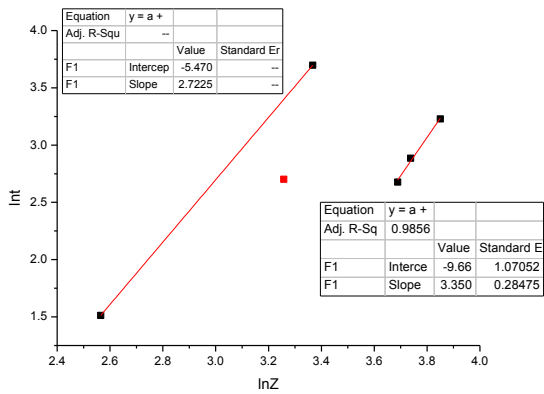


图 4. 71.7pm 下六种金属的原子序数和吸收系数的关系

可以看到在图3.中，由于六种金属在43.4pm之前都没有吸收边，所以吸收系数的关系和原子序数的关系可以反映在一条直线中。而在图4中由于原子序数比较小的Al,Fe,Cu没有吸收限而Zr,Mo,Ag存在吸收限，所以分开拟合。由于Fe的透射率0.003%接近本底的噪声，误差较大，所以不予拟合。由三条曲线分别拟合出的吸收系数和原子序数的关系可得

$$\tau_m = Z^{2.69}, \tau_m = Z^{2.72}, \tau_m = Z^{3.35}。误差可能来自于图2每条直线拟合的数据比较少，容易产生误差。$$

参考一些文章所得到的经验公式可以比较

$$^1\text{Siegbahn, } 1 \mu_m = C\lambda^n \text{ for a given } Z,$$

$$^2\text{Bragg and Pierce, } 2 \mu_a = CZ^4 \lambda^{5/2}$$

¹ M. Siegbahn, Physik. Zeits. 15, 753 (1914).

² W. H. Bragg, Phil. Mag. 29, 407 (1915).

$$^3\text{Hull and Rice, } 3 \mu / \rho_{Al} = 14.9\lambda^3 + 0.12$$

$$^4\text{Walter, } 4 \tau_a = 2.64 \times 10^{-26} Z^{3.94}$$

$$^5\text{Richtmyer, } 5 \mu_a = 2.29 \times 10^{-27} Z^4$$

前三式表达的是吸收系数与波长的关系，后两式主要表达线吸收系数与原子序数的关系，转化成质量吸收系数可看到与实验的符合较好。其中使用的物理模型可参照引用的文章原文。

2. 德拜照相法测NaCl和Si的结构

原理

德拜法主要是利用了晶体中的布拉格散射，当粉末状的晶体中某一晶面满足布拉格条件时会在屏上留下半径为 R 的点如图 3。

由于德拜照相法采用的是多晶样品，在各方向

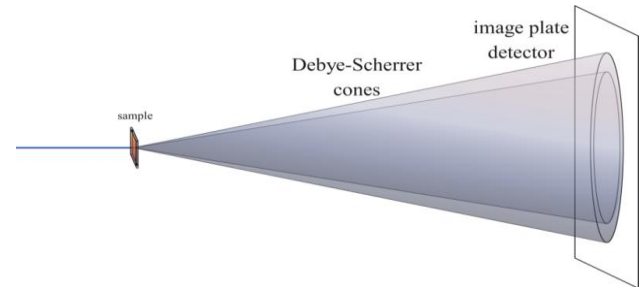


图 5.晶体的布拉格衍射产生的德拜圆环

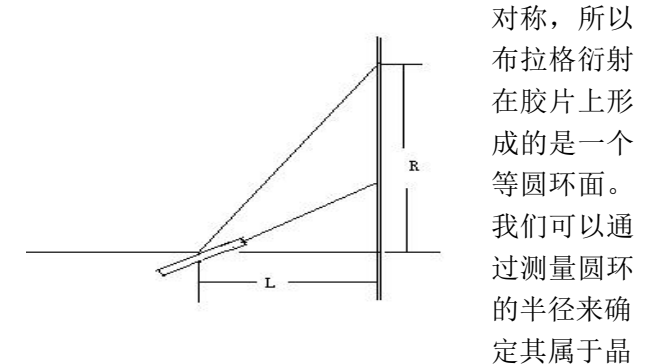


图 6.实验光路

体的哪个晶面。

实验中多晶样品与胶片相聚 L, 如果德拜环的半径为 R, 那么由简单的几何关系得

$$\theta = \frac{1}{2} \arctan \frac{R}{L}。$$

³ A. W. Hull and M. Rice, Phys. Rev. 8, 326 (1916).

⁴ B. Walter, Forts. a.d. Geb. d. Roentgen 35, 929, 1308 (1927).

⁵ F. K. Richtmyer, Phys. Rev. 18, 13 (1921).

再由布拉格条件和米勒指数与晶格常数，发生衍射晶面的间距之间的关系可以得到

$$\sin^2 \theta = \left(\frac{\lambda}{2d}\right)^2 = \frac{\lambda^2}{4a^2} (h^2 + k^2 + l^2)$$

我们用将数据稍作处理以方面从更直观的角度分析。由于实验所用光源为加了 Zr 片的 Mo 的 X 光衍射仪，

波长可认为是 K_α ，为常数。所以 $\sin^2 \theta_1 : \sin^2 \theta_i$ 的关系可以通过上式变换成将米勒指数的比值，

$(h^2 + k^2 + l^2) : (h_a^2 + k_b^2 + l_c^2)$ ，将实验中所得

$\sin^2 \theta_1 : \sin^2 \theta_i$ 值与晶面的标准值

$(h^2 + k^2 + l^2) : (h_a^2 + k_b^2 + l_c^2)$ 比较。这里有一点要注意，由于 NaCl 为面心立方结构，所以根据结构因子可得只有米勒指数同为奇数或偶数时才不会消光。

实验结果与讨论



图 7. NaCl 的德拜衍射图

$\sin^2 \theta_1 : \sin^2 \theta_i$ 的计算结果如下：

表 1. 计算 NaCl 的 $\sin^2 \theta_1 : \sin^2 \theta_i$

德拜环半径 /mm	$\theta / ^\circ$	$\sin \theta$	$\sin^2 \theta$	$\frac{\sin^2 \theta_i}{\sin^2 \theta_1}$
5.55	15.51	0.267	0.072	1
7.89	21.53	0.367	0.135	1.875
9.90	26.34	0.444	0.197	2.736

13.63	34.27	0.563	0.317	4.4
-------	-------	-------	-------	-----

将 $\sin^2 \theta_1 : \sin^2 \theta_i$ 的比值与晶面的理论的米勒指数

之比 $(h^2 + k^2 + l^2) : (h_a^2 + k_b^2 + l_c^2)$ 进行对比可得：

表 2. 猜 NaCl 的 $(h^2 + k^2 + l^2) : (h_a^2 + k_b^2 + l_c^2)$

h k l	$\frac{h^2 + l^2 + k^2}{1+1+1}$	$\frac{h^2 + l^2 + k^2}{2^2 + 0 + 0}$	$\frac{\sin^2 \theta_i}{\sin^2 \theta_1}$ (实验值)
1 1 1	1	-	
2 0 0	1.33	1	1
2 2 0	2.67	2	1.875
3 1 1	3.67	2.75	2.736
2 2 2	4	3	
4 0 0	5.33	4	
3 3 1	6.33	4.75	4.4
4 2 2	8	6	
4 4 0	10.67	8	

可以看出实验数据与第二组晶面组合比较匹配。再

利用 $a = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ 可以得到晶面间距，

分别为 531pm, 542pm, 521.9pm, 530pm 得到平均值为 531.23pm。与理论的晶面常数误差为 6.8%

我们再用同样的方法对晶体结构更为复杂的硅用德拜成像法作图。

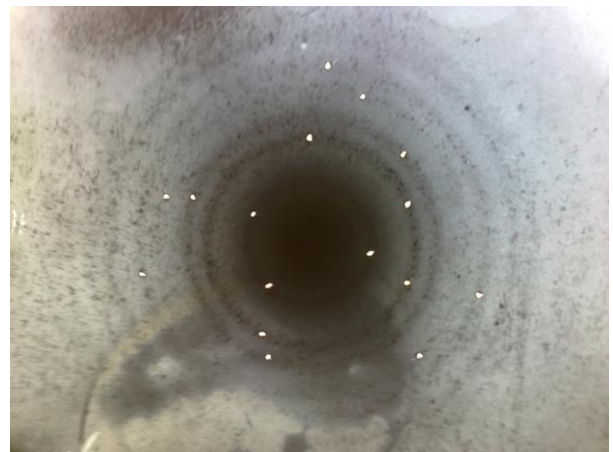


图 8. 硅的德拜衍射图

表 3. 计算 Si 的 $\sin^2 \theta_i : \sin^2 \theta_1$

德拜环半径 /mm	$\theta / ^\circ$	$\sin \theta$	$\sin^2 \theta$	$\frac{\sin^2 \theta_i}{\sin^2 \theta_1}$
5.83	8.5	0.147	0.0218	1
8.34	11.5	0.199	0.0390	1.7
10.82	14.2	0.245	0.0602	2.7
12.44	15.9	0.273	0.0750	3.4
14.50	17.95	0.308	0.0949	4.3

同样的对米勒常数之比作比较。此处的米勒常数要注意，由于 Si 为金刚石结构，只有米勒指数全为偶数时才不会发生消光条件。

表 4. 猜 Si 的 $(h^2 + k^2 + l^2) : (h_a^2 + k_b^2 + l_c^2)$

h k l	$\frac{h^2 + l^2 + k^2}{1+1+1}$	$\frac{h^2 + l^2 + k^2}{2^2 + 0 + 0}$	$\frac{\sin^2 \theta_i}{\sin^2 \theta_1}$ (实验值)
2 0 0	1	-	
2 2 0	2	1	1
2 2 2	3	1.5	1.7
4 0 0	4	2	
4 2 0	5	2.5	2.7
4 2 2	6	3	3.4
4 4 0	8	4	
4 4 2	9	4.5	4.3

看上去可能和第二种情况比较相近，然而用第二种情况的数据得到 Si 的晶面常数为 686.01pm, 622.9pm, 653.57pm, 641.08pm, 697.95pm. 平均值为 660.32pm, 与标准值 543.1pm 比较误差达到 22%。如果用第一种情况计算的话平均值为 508.7pm, 误差为 6.3%。显然第一种情况所对应的误差要小很多。将数据与第二种情况比对的尝试有问题。

由此可见，用德拜法测量引起的实验误差还是不小的。尤其当晶体的结构比较复杂如硅的金刚石结构。所以德拜法比较适合用来验证 X 光的衍射性以及分析德拜环得出其所对应的晶面，用德拜法来测量晶体的结构还是不够精确。

参考文献

1. 近代物理实验补充讲义
2. 杨福家.《原子物理学》(第三版),高等教育出版社,北京,2000.
3. 吴思诚,王祖铨.《近代物理实验(一)》,北京大学出版社,1986.
4. 陈星, 李剑龙, 韩文琪等 用 γ 射线做康普顿散射测量 物理实验. 2006, 26(6)
5. Kittel. 《固体物理导论》,化学工业出版社,北京,2005.
6. F. K. Richtmyer, Phys. Rev. 18, 13-30 (1921)
7. Probable X-Ray Mass Absorption Coefficients for Wave-Lengths Shorter Than the K Critical Absorption Wave-Length JOHN A. Victoreen
8. www.cce.ufes.br/jair/web/fes/X-ray.pdf

X-ray interact with matters

Haoyu Xu. Physics Department, Fudan University

Abstract

Two different ways of X-ray's interaction with matters is studied. One of them is to target X-ray at different metals and study the relation of atomic number and X-ray wavelength with the attenuation coefficients. The second experiment use Debye methods to explore the structure of NaCl and Si monocrystalline.

Key words

X-ray diffraction, attenuation coefficients, Debye method, lattice constant.