

X 光衍射实验中定标晶体对测量结果的影响

摘要：1895 年伦琴研究阴极射线管时发现了 X 光，开启了人类探索微观世界的大门。在 X 光衍射实验中，我们需要先用 NaCl 晶体为测角器定标。本文将阐述定标晶体表面潮解重结晶对于实验结果的影响。

关键词：X 光，布拉格公式，定标晶体，潮解

实验设备：莱宝公司 X 射线实验仪及其附件

引言

X 光衍射实验在物理史上有着非常重要的地位，同时，X 光衍射实验也是近代物理实验教学中非常经典的实验。利用布拉格衍射来测量晶面距离，是本系列实验中最基础的一个，这个实验需要用到靶台量角器。量角器通常使用 NaCl 晶体调零，那么，NaCl 晶体表面的质量将与定标结果息息相关。所以分析定标晶体对测量结果的影响，将是理解本实验的重要一步。

1 实验原理：

1.1 X 射线

X 射线是一种波长很短的电磁波，是由原子内层电子跃迁而来的。X 射线谱中，有一些特殊的线状光谱，取决于靶。这是靶元素的特征光谱。另外还有连续的光谱，来自于韧致辐射。

1.2 布拉格公式

当 X 射线与晶体表面夹 θ 角时，在满足布拉格公式：

$$2d \sin \theta = n\lambda; n = 1, 2, \dots$$

角度上可以观察到衍射极大峰。

1.3 计数器统计规律

X 光的强度为 $R + \sqrt{R}$ ，其相对不确定度为 $\sqrt{R} / R = 1 / \sqrt{R}$ ，计数 R 越大，相对不确定度越小，因此，为了提高计数的准确度，需要延长计数时间。

2 实验内容：

2.1 用 NaCl 晶体调校测角器零点并测 NaCl 晶面间距，验证布拉格公式

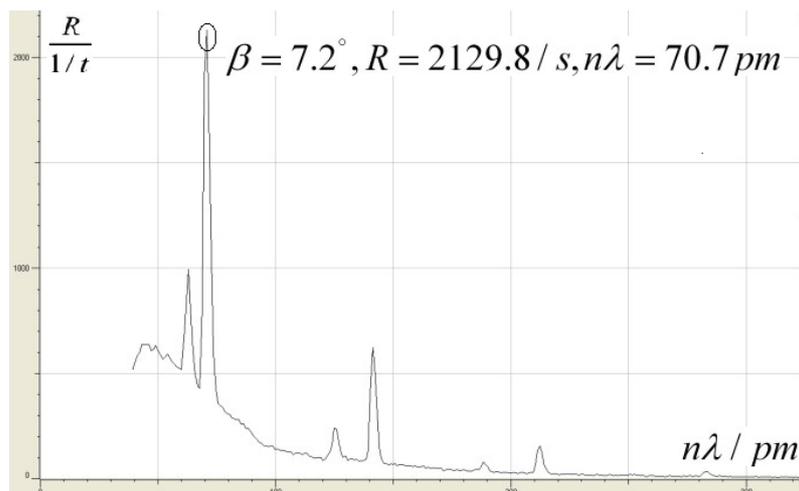


Figure 1 NaCl X 射线衍射谱

调零后测量 NaCl 衍射谱。注意到在 $\beta = 7.2^\circ$ 处出现了一个衍射极大峰，说明之前的定标准确。另外， $\beta = 7.2^\circ$ 峰是所有特征峰中最强的，这也解释了为何选取此峰定标：计数器相对不确定度为 $\sqrt{R}/R = 1/\sqrt{R}$ ，计数 R 越大，所得数据越准确。

谱线有展宽现象，我们认为这来自于晶体表面粗糙或晶体表面潮解造成的晶格无序所导致。实际上，实验室提供的 NaCl 晶体的确有裂纹，且表面粗糙，符合我们的推测。

2.2 测量 NaCl 晶格间距，验证布拉格公式

将 Figure 1 中读出的各峰值 β 和 $n\lambda$ 的关系作图：

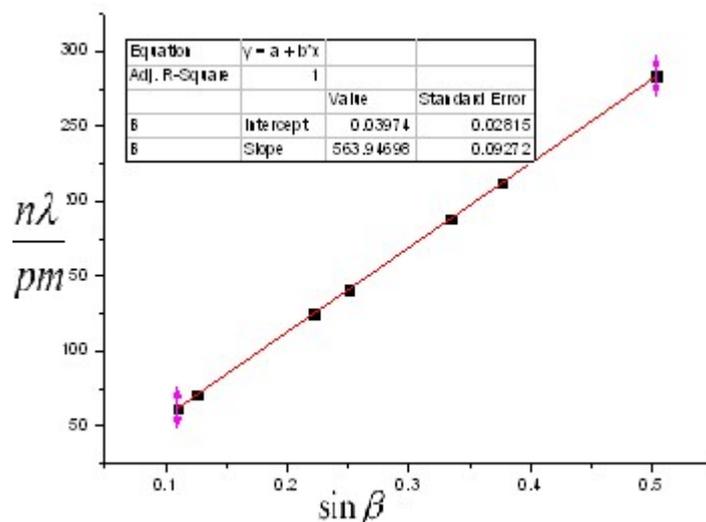


Figure 2 NaCl 布拉格公式

线性度非常好，很好地符合了布拉格公式 $2d \sin \theta = n\lambda; n = 1, 2, \dots$ 。

计算出 NaCl 晶面间距为 564.07nm，理论值（100 面）为 564.02nm，相对误差仅为 $8.9 \times 10^{-3}\%$

2.3 测量 LiF 晶面间距

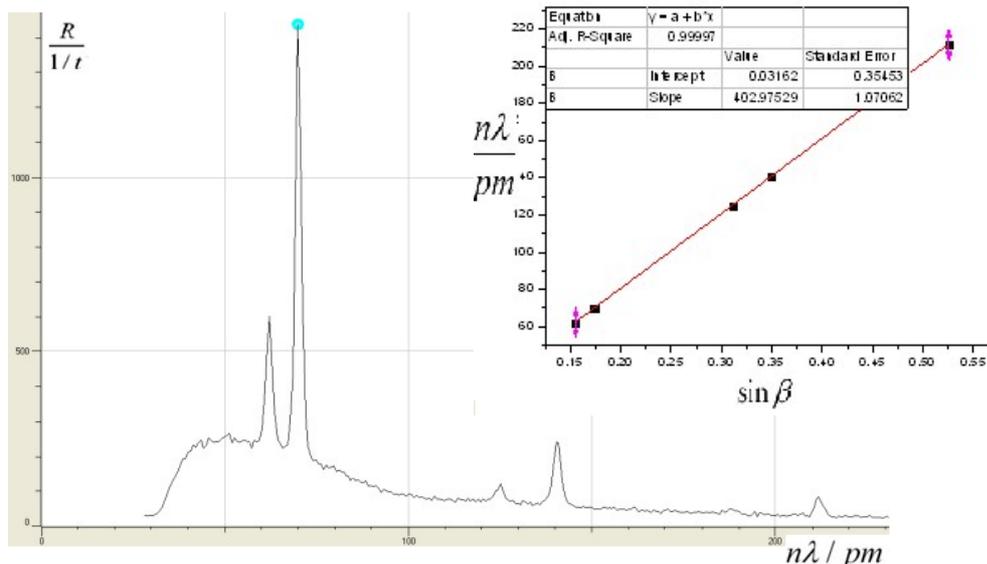


Figure 3 LiF X 射线衍射谱

β	$\sin\beta$	$n\lambda/pm$	$2d=a/pm$
8.9°	0.1547	62.3	402.7
10.0°	0.1736	69.9	402.5
18.1°	0.3107	125.1	402.7
20.4°	0.3486	141.0	404.5
31.7°	0.5255	211.6	402.7

测量所得 LiF 的晶面常数为 403.02nm，理论值为 402.7nm，相对误差为 $7.9 \times 10^{-2}\%$ ，相差一个数量级。

3 结果与讨论

使用同样方法测量晶面常数，两种不同的样品不确定度相差一个量级，说明实验结果受到某些因素的影响。分析 2.3 节中的表格，与理论值偏差最大的是 $\beta = 20.4^\circ$ 处的数据。半定量的计算后可以知道，如果此峰位对应的角度是 20.5° ，则计算此处的 $a=402.62pm$ ，与理论值非常接近。暗示着误差可能来自于量角器。

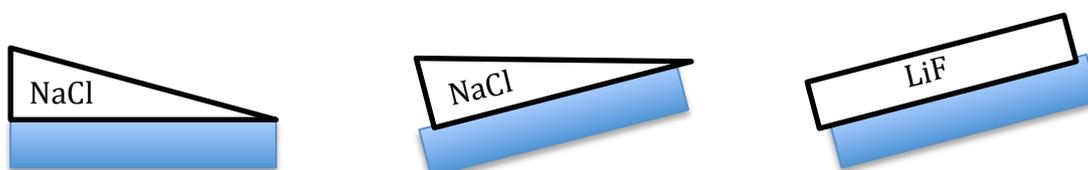


Figure 4 定标晶体导致量角器倾斜

如上图所示，在使用 NaCl 晶体定标时，实际上定的是靶台上 NaCl 晶体表面晶面零度的位置，如果定标时所用的 NaCl 晶体上下表面晶面不平行（左图），调零后靶台非但没有水平，反而变歪（中图）。那么在之后的测量中，如果新放上的晶体上下表面的角度差和定标晶体不同，就会导致以后测量时所得的角度有偏离，偏离量就是这个角度差。在本实验中，约为 0.1° 。实验中，

NaCl 晶体表面潮解严重，晶体表面潮解重结晶将会是导致定标结果偏离的主要原因。

4 结论

如果在第 3 节中的推测正确，在 NaCl 晶体的衍射图中，NaCl 自身同时作为定标晶体和测量晶体，定标时和测量时上下表面晶面的角度差相同，所以看不到异样，这和实验结果相一致。LiF 的标准谱中一个峰位在 10.1° 处，在实验中我们观察到在 10.0° 处，这个角度差与第三节中的分析一致。

鉴于实验中的 NaCl 晶体有明显裂纹和磨损，上下晶面存在角度差也不足为奇。X 光衍射实验精度非常高，但是，这个实验对于角度零点的定标也非常敏感。上下表面 0.1° 的误差难以避免。下一步，我建议可以将靶台上的 NaCl 在一次定标后旋转 180° ，这样如果存在两面角度差，在 NaCl 晶体的衍射图中即可发现问题。另外，由于角度度数精确到小数点之后一位，所以这一位的误差也可能来自于系统浮动，为了排除这个影响，需要更高精度的角度测量。

5 致谢

本工作中我的合作者程恋茜给与很大帮助，姚红英老师给与热情指导。