

# 用 X 光 Bragg 衍射透射谱验证 Moseley 定律

16307110262 俸昊嵘<sup>1</sup>

(1.复旦大学物理系, 上海 200433)

**摘要:** 本实验通过研究 X 光在 NaCl 单晶体上发生 Bragg 衍射的强度-波长图线及其对不同材料的透射谱, 得到 X 光对 Zr、Mo、Ag、In 四种金属的 K 吸收边, 并据此验证 Moseley 定律, 且得到 Rydberg 常数  $R = (11.2 \pm 0.2) \mu\text{m}^{-1}$  与中等重核的 K 壳层屏蔽因子  $\sigma_K = 3.7 \pm 0.4$ 。

**关键词:** X 射线; Bragg 衍射; Moseley 定律; 吸收边; Rydberg 常数; 屏蔽因子; NaCl 晶体

Moseley 定律是描述原子激发 X 射线频率与该原子序数的一个经验定律, 它的发现证实了 Bohr 轨道理论模型中的原子序数在数量上正比于核电荷数, 在量子力学发展史上有重要意义。这一定律表明了材料对通过其 X 光的吸收系数在特定波长 (称吸收边) 突变, 且吸收边与该材料元素原子序数、元素的屏蔽因子及 Rydberg 常数有关。本实验通过研究 X 射线在 NaCl 单晶晶片上发生 Bragg 衍射的强度-波长图线, 测量不通过其他材料与通过 Zr、Mo、Ag、In 四种金属的图线而得到四种金属的 X 光透射谱, 进而得到四种金属的 K 吸收边  $\lambda_K$ , 以验证 Moseley 定律, 并用该定律计算出 Rydberg 常数  $R_\infty$  与这几种元素对应的 K 层屏蔽因子  $\sigma_K$  的数值。

## 1 实验原理

### 1.1 理论原理

#### 1.1.1 X 光及其产生<sup>[1-2]</sup>

X 光 (X 射线) 是波长介于 10nm 与 10pm 间的电磁波。

一般使用高速电子撞击法, 通过如图 1 所示的装置产生 X 射线。在阴极, 灯丝通电加热产生激发电子, 通过在阴阳两极间加高压使电子加速获得能量, 高速撞击阳极金属靶, 与靶原子作用, 产生波长落在 X 光范围的电磁辐射:

**韧致谱:** 一部分电子发生散射, 改变运动

方向且损失部分能量, 这一能量以电磁辐射即 X 光的形式释放 (如图 2), 这种辐射称为韧致辐射, 其能量分布是连续的, 在光谱图上体现为连续谱;

**特征谱:** 另有一部分电子直接使原子内壳层的电子脱离原子而电离, 形成空位, 外层电子随即跃迁填补空位, 并以 X 光的形式释放能量 (如图 3), 这一能量代表能级跃迁间的能级差, 是不连续的, 体现为在连续谱的基础上形成高度不一的窄峰, 称为线光谱, 或特征谱线。其中, 实验用到的特征谱线为 L 层至 K 层的  $K_\alpha$  光 ( $\lambda = 71.08 \text{ pm}$ ) 与 M 层至 K 层的  $K_\beta$  光 ( $\lambda = 63.09 \text{ pm}$ )。

一个典型的 X 光谱线如图 4 所示。

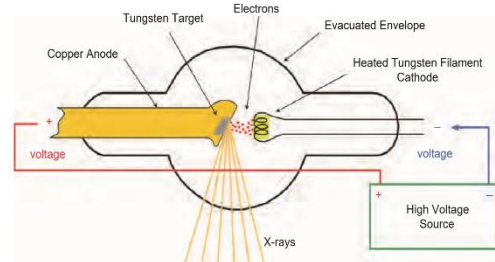


图 1 X 光产生装置<sup>[1]</sup>

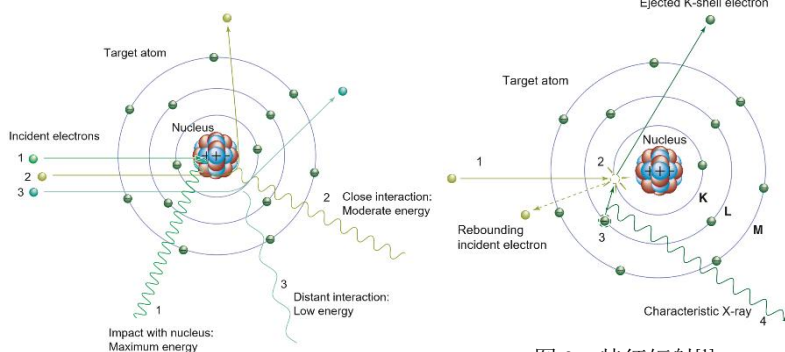


图 3 特征辐射<sup>[1]</sup>

图 2 韧致辐射<sup>[1]</sup>

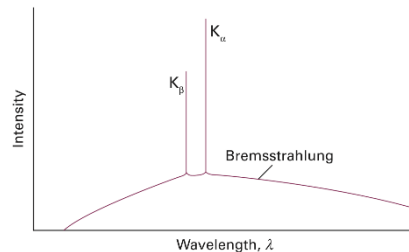


图 4 X 光谱线<sup>[3]</sup>

### 1.1.2 Bragg 衍射<sup>[3]</sup>

在单晶体的平直表面, 可视为一层层晶面以一定的间隔从外到内排列, 这间隔称为该晶体的晶格常数, 记为  $d$ 。

如图 5 所示, 对于与晶体表面成  $\theta$  角入射, 并在两个相邻晶面分别反射的光束, 产生的光程差为  $2d\sin\theta$ , 当这一光程差为波长  $\lambda$  的整数倍时, 不同晶面的反射光相位一致, 可以产生较大的反射强度。这称为 Bragg 衍射, 式

$$2d\sin\theta = k\lambda \quad (k = 1, 2, 3 \dots) \quad (1)$$

称为 Bragg 公式。

在实验中, 直接将某一角度的反射强度与在该晶体下通过 Bragg 公式得到的  $k\lambda$  对应; 实验用软件已给出适用不同晶体的转化选项。

### 1.1.3 X 光与物质的作用<sup>[1-2]</sup>

在实验涉及的 X 射线波长之内, X 光与其进入的物质作用, 主要有 Compton 散射与光电效应两种形式, Rayleigh 散射亦有一定贡献。

**光电效应:** 入射光子将所有能量传递给物质原子内层电子, 使其挣脱原子束缚成为自由电子, 原子的电子轨道出现空缺而处于激发态, 随即通过发射特征 X 射线回到基态, 如图 6。

**Compton 散射:** 入射光子与轨道电子作用时, 光子损失一部分能量并改变运动方向, 电子获得能量, 脱离原子, 如图 7。

**Rayleigh 散射:** 一个束缚电子吸收入射光子跃迁到高能级, 但未脱离原子; 随即跃迁回基态并放出能量约等于入射光子的散射光子, 光子的前后能量损失可忽略, 如图 8。

此外, 电子对效应、光核反应等作用, 在实验所用的 X 光波长范围内可以忽略。

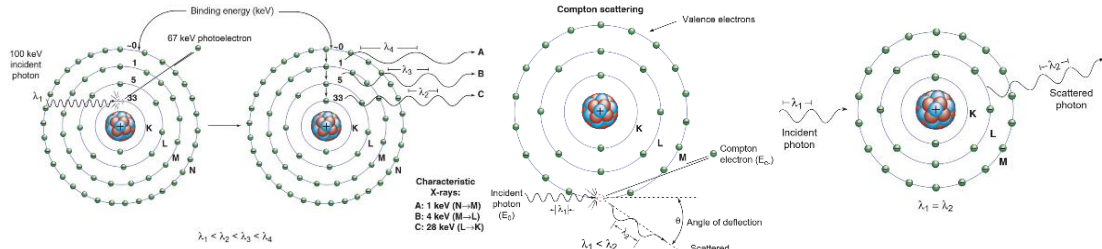


图 6 光电效应<sup>[1]</sup>

图 7 Compton 散射<sup>[1]</sup>

图 8 Rayleigh 散射<sup>[1]</sup>

### 1.1.4 X 光吸收限与 Moseley 定律<sup>[1][6]</sup>

考察 X 光对特定材料的透过, 在 X 光子能量逐渐变大的过程中, 存在一个特定的能量, 即某一壳层的结合能, 对应入射光子能量恰好足以将这一壳层的束缚电子从原子中打出, 因此大于该能量的光子才存在发生这一壳层光电效应的途径, 所以在这里物质的吸收率会发生一个突变, 如图 9, 在吸收率-光子能量图像中体现为陡然上升; 转化为实验所用的透射率-波长图像则仍是陡然上升。这里对应的入射 X 光波长称为 X 射线对该物质的吸收边; 本实验主要考察 K 壳层对应的吸收边——K 吸收边  $\lambda_K$ 。

对于不同原子序数的透射材料, 有 Moseley 定律

$$\lambda_K^{-1/2} = R^{1/2}(Z - \sigma_K) \quad (2)$$

其中  $\lambda_K$  为透射材料的 K 吸收边,  $Z$  为透射材料的原子序数,  $\sigma_K$  为透射材料的 K 壳层屏蔽因子 (在实验所探究的中等重核范围内可视为常数, 实验中心<sup>[6]</sup>给出参考值为 3.6),  $R$  为 Rydberg 常数, CODATA 参考值<sup>[7]</sup>为  $10.97373156816 \mu\text{m}^{-1}$ 。

### 1.2 仪器原理

本实验使用阳极 Mo 靶; 产生 X 射线的过程如前文 1.1.1

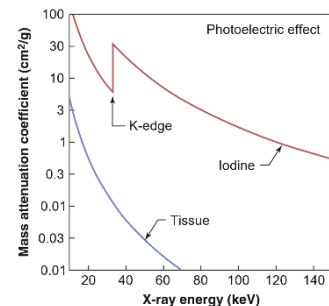


图 9 K 吸收边(K-edge)<sup>[1]</sup>

节所述。

探测 X 射线 Bragg 衍射谱线的装置如图 10 所示, X 光通过约束其角度范围的狭缝(1), 打在呈一定角度放置的单晶片(2)上, 并反射而被传感器(3)接收, 传感器为 GM 计数管, 在其线性工作区, 它所测得的计数  $R$  与 X 光的强度成正比。延长每次测量的持续时间, 从而增大总强度计数  $R$ , 有利于减少计数的相对不确定度。[6]

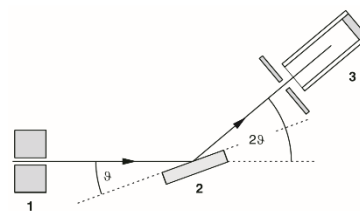


图 10 Bragg 实验装置[5]

放置晶片的平台与传感器都可以转动一定角度, 实验中通过设置仪器, 使传感器的转角为平台的 2 倍, 从而传感器可以接收反射光。

## 2 实验方法和步骤

本实验使用德国 Leybold 公司生产的 544-800 型 X 光实验仪[4]进行实验。如图 11 所示, 实验仪分为监控区、X 光管区和实验区。监控区可以调节所用参数, 包含管电压  $U$ 、管电流  $I$ 、每步探测时间  $\Delta t$ 、角度步长  $\Delta\beta$ 、角度  $\beta$  上下限范围。X 光管区包含发射极、阳极 Mo 靶、散热用 Cu 块、风扇、Pt 玻璃等, 用来发射 X 光, 并通过实验区的狭缝射入实验区。实验区内可以手动在晶片放置的靶台上更换晶片, 在 X 光入射路径上添加吸收片; 也可以通过监控区控制, 机械运作使晶片和传感器转动一定角度: SENSOR 模式可以仅调节传感器的转角, TARGET 仅调节靶台转角, 而 DOUBLE 模式则按照传感器的转角为靶台的 2 倍(原理见 1.2 节)而转动。



图 11 544-800 型 X 光实验仪[4]

实验仪器配有软件 X-Ray Apparatus, 进行实验数据的记录与分析。在分析数据时还用到了 Origin 2019b 软件。

### 2.1 仪器的调零

在靶台上放置 NaCl 晶体。使 X 光管预热一段时间后, 调节一定的管电压与管电流, 使 X 光管进入正常工作状态。

在 SENSOR 为  $7.2^\circ$ , TARGET 为  $14.4^\circ$  附近, 用 SENSOR 与 TARGET 手动调节到 GM 计数率最大(须等待几秒观察读数较稳定); 由 NaCl 的晶格常数已知为  $2d = 564.0 \text{ pm}$ , 可知这个计数率最大值对应  $\theta = 7.2^\circ$ , 这时用 DOUBLE 模式反向调整  $7.2^\circ$ , 以此时的靶台、传感器角度位置为零点, 并在仪器上重置。

### 2.2 透射谱的测量

设定  $I = 0.61 \text{ mA}$ ,  $U = 35.0 \text{ kV}$ ,  $\Delta t = 10 \text{ s}$ ,  $\Delta\beta = 0.1^\circ$ ,  $\beta = 3.0^\circ \sim 7.5^\circ$  (为节省实验时间, 对不同吸收片分别设定了符合其  $\lambda_K$  的更窄的  $\beta$  范围, 但都在  $3.0^\circ \sim 7.5^\circ$  范围内)。

先测量不放置吸收片时的  $R - n\lambda$  谱线: 打开 X 光管进行扫描测量, 在 X-Ray Apparatus 上 Bragg 一栏上即记录下不同靶台偏角  $\theta$  对应的感应器接收计数  $R$ , 并画出  $R - \theta$  谱线; 通过在 Settings 中选择“NaCl ( $2d = 564.0 \text{ pm}$ )”, 直接转化为  $R - n\lambda$  谱线(此处软件内部使用 Bragg 公式转换)。

随后, 先后在 X 光入射的狭缝上装上 Zr、Mo、Ag、In 四种金属的吸收片, 并分别类似上述步骤得到  $R - n\lambda$  谱线。这时, X-Ray Apparatus 已经自动在 Transmission 一栏计算四种金属在不同入射角下的透射率  $T_X = R_X / R_0$ , 并生成透射谱  $T - n\lambda$ 。

在透射谱上读出 K 吸收边  $\lambda_K$ 。这里  $\lambda_K$  的取法是: 记相邻两个  $T$  数据(即相隔步长  $\Delta\beta = 0.1^\circ$ ) 间差值为  $\Delta T$ 。找到  $T$  上升阶段中最大的  $\Delta T$ , 取其对应的位置中值为  $\lambda_K$ ; 若有相邻两段相差不多的  $\Delta T$  极大值, 则取这两段  $\Delta T$  的位置中值。

对各材料得到的  $\lambda_K$ ，作出  $\lambda_K^{-1/2} - Z$  图， $Z$  为材料原子序数。如果图线近似为直线，则验证了 Moseley 定律。对图线做线性拟合 (Origin 中的 Linear Fit)，得到截距与斜率，并以此代入 Moseley 定律(2)，求出 Rydberg 常数  $R$  与这几种元素对应的 K 层屏蔽因子  $\sigma_K$  的数值。

本系列实验同时进行了通过 LiF 衍射图线各峰位置利用 Bragg 定律推出 LiF 晶片晶格常数  $d$ ，以及通过测量 NaCl 衍射图线在不同管电压  $U$  下的最小波长  $\lambda_{\min}$  来验证 Duane-Hunt 定律并计算 Planck 常数  $h$  两项实验，这里不做过多展开。

### 3 实验结果和分析

#### 3.1 调零的验证

在进行其他实验时，测量了 NaCl 波长范围较大的一张 X 光谱线(如图 12)，并转换为 NaCl 对应的  $R - n\lambda$  谱。考察该谱线特征峰的位置，六个峰值位置分别为 62.9、70.7、126.9、142.2、190.1、214.0 (pm)，符合  $K_\alpha$  光与  $K_\beta$  光对应的波长。

##### 3.1.1 讨论

调零时，手动微调靶台与传感器转角并必须在每一格调节后等待几秒至 GM 计数管读数稍稳定。但这对人的操作能力与耐心要求较高，而且 GM 管读数即使在静置数秒后也不会很稳定，所以得到的调零结果仍有一定不确定性。并且，有可能将  $K_\beta$  光对应的极大值与  $K_\alpha$  光对应的极大值混淆。因此，笔者建议调零完毕后首先对 NaCl 进行一遍自动测量(若只考虑调零，可只选用含  $K_\alpha$  光和  $K_\beta$  光的一段)，并转为  $R - n\lambda$  谱与已知的  $K_\alpha$  光  $K_\beta$  光波长进行比对，以验证调零正确性。

#### 3.2 验证 Moseley 定律与计算 $\sigma_K$ 、 $R_\infty$

如图 13，作四种元素的透射谱  $T - \lambda$ ，并以 2.2 节所述方法取得 K 吸收边  $\lambda_K$ 。列表：

元素	原子序数 $Z$	K 吸收边 $\lambda_K / \text{pm}$	$\lambda_K^{-1/2} / \text{pm}^{-1/2}$
Zr	40	68.3	0.1210
Mo	42	61.4	0.1276
Ag	47	48.2	0.1440
In	49	43.8	0.1511

如图 14 所示，作出  $\lambda_K^{-1/2} - Z$  图并用 Origin 作线性拟合。结果为 X 轴截距 X Intercept =  $3.68 \pm 0.35$ ，斜率 Slope =  $(3.33 \pm 0.03) \times 10^{-3}$ ， $R^2 = 0.9997$ ，最大残差未超过  $0.3 \times 10^{-3}$ 。这说明线性拟合效果良好，从而验证了 Moseley 定律。

并通过  $R^{1/2} = (3.33 \pm 0.03) \times 10^{-3} \text{ pm}^{-1/2}$  及  $\sigma_K = 3.7 \pm 0.4$  计算得到：

Rydberg 常数  $R = (11.2 \pm 0.2) \mu\text{m}^{-1}$ ，比标准值  $10.97 \mu\text{m}^{-1}$  偏大 1.0% 或 1.0 个标准差。

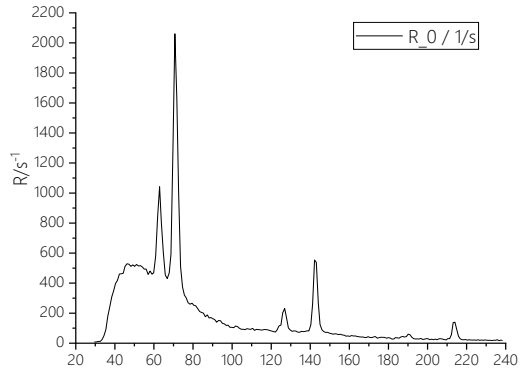


图 12 测量 NaCl 衍射谱线

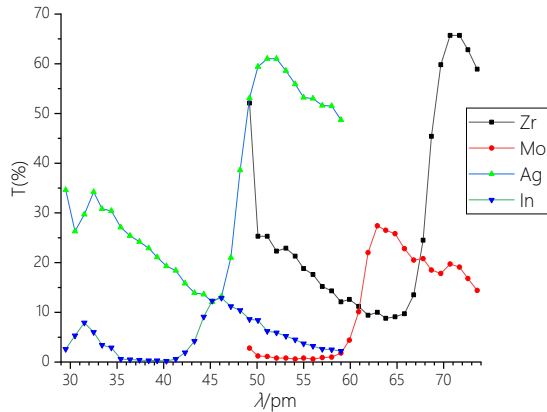


图 13 四种金属的  $T - \lambda$  图线

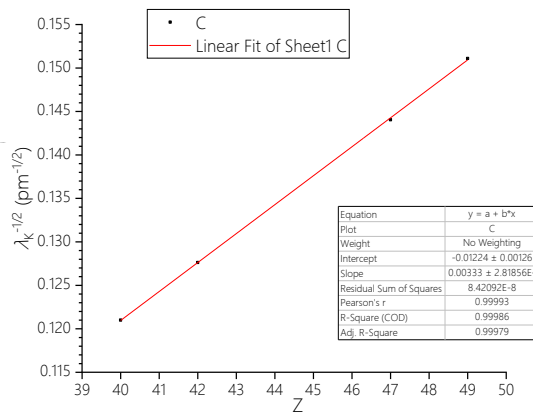


图 14 拟合  $\lambda_K^{-1/2} - Z$  图

中等重核的 K 壳层屏蔽因子  $\sigma_K = 3.7 \pm 0.4$ ，比参考值 3.6 偏大 2% 或 0.2 个标准差（因参考值本身的有效位数有限，这一准确度的具体数值部分损失意义）。

### 3.3 分析与讨论

#### 3.3.1 吸收限展宽分析

实际的  $T - n\lambda$  图线显示透射率在吸收限附近并非完全是突变，而是存在约 5pm 的展宽，在角度上对应约  $0.5^\circ$  或约 0.01rad。现分析其可能原因：

NaCl 表面不平整所致。查到 NaCl 晶片的一个典型表面粗糙度为“ $<100\text{\AA}$ ”，即 10nm；除以 0.01(rad) 对应的线度为  $1\mu\text{m}$ ，远小于晶片的 cm 级线度，由此可认为这并不是吸收限展宽的主要贡献。

X 光出射狭缝与感应器的宽度造成张角所致。狭缝、感应器到晶片距离估计为 5cm。乘以 0.01(rad)，对应的缝宽为 0.5mm，这符合实验仪器可能出现的一个缝宽。由此可认为这可能是吸收限展宽的主要贡献。

光栅分辨率所致。考虑光栅分辨率公式  $\Delta\theta = \frac{\lambda}{Nd\cos\theta}$ ，其中  $\Delta\theta$  为半角宽， $N$  是光栅总缝数（晶片厚度  $D$  估计为 1mm，则  $N = D/d \sim 10^6$ ）， $d$  是光栅常数， $\theta$  是衍射角。代入公式得  $\Delta\theta \sim 10^{-7} \ll 0.01$ ，故不是主要原因。

#### 3.3.2 验证 Moseley 定律与计算 $\sigma_K$ 、 $R_\infty$ 的误差来源

本次实验仅用了 4 组数据进行拟合，故拟合的准确度与个别点的  $\lambda_K$  值误差可能会有较大关系。在数据中， $\Delta\beta = 0.1^\circ$  的步长大约对应  $\lambda$  的 1.0 pm 步长。估计  $\lambda_K$  的取法会为其带来 0.7pm 的不确定度，代入实验中的数据估算，这代表  $10^{-3}$  的不确定度，略大于拟合中的最大残差（不超过  $0.3 \times 10^{-3}$ ）。因此可认为  $\lambda_K$  不确定度给拟合带来了不准确性。

求得的屏蔽因子  $3.7 \pm 0.4$ ，相对不确定度约 10%，较高。原因包括：对于所用的材料，原子序数在 40~49 间，屏蔽因子作为由截距计算的项，与之相比已经小了一个数量级，故相对不确定度比较高；还可能是因为屏蔽因子对实验所用不同原子仍有些微差别，并非常数。

## 4 实验结论

本实验通过测量 X 光对 Zr、Mo、Ag、In 四种金属的 K 吸收边，验证了 Moseley 定律 (2)，并计算得到 Rydberg 常数  $R = (11.2 \pm 0.2) \mu\text{m}^{-1}$ ，与标准值  $10.97373 \mu\text{m}^{-1}$  对比，偏大 1.0%；且标准值落在测量值 1 个标准差内；中等重核的 K 壳层屏蔽因子  $\sigma_K = 3.7 \pm 0.4$ ，与参考值 3.6 对比，偏大 2%；且参考值落在测量值 0.5 个标准差内。

并且，简单分析了：X 光实验仪的调零最好可通过再次扫描而验证；狭缝张角是 X 光吸收限展宽主要贡献； $\lambda_K$  值不确定度对验证 Moseley 定律所做的拟合不准确性有一定影响。

### 参考文献：

- [1] Bushberg, Seibert, Leidholdt, *etal.* *The Essential Physics of Medical Imaging*, 3e. Lippincott Williams & Wilkins, 2012.
- [2] 吉强, 洪洋(eds.) *医学影像物理学*, 4e. 北京: 人民卫生出版社, 2016.
- [3] Atkins, P., de Paula, J. *Physical Chemistry*, 10e. NY: W. H. Freeman and Company, 2014.
- [4] X-ray apparatus, Mo, complete. <https://www.levbold-shop.com/x-ray-apparatus-mo-complete-554801.html>
- [5] LEYBOLD physics Leaflets. [https://www.ld-didactic.de/literatur/hb/p\\_index\\_e\\_k.html](https://www.ld-didactic.de/literatur/hb/p_index_e_k.html)
- [6] Fudan Physics Teaching Lab. <http://phylab.fudan.edu.cn/doku.php?id=exp:xray>
- [7] CODATA Internationally recommended 2018 values. <https://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html>.