

Министерство образования и науки Российской Федерации
Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б. Н. Ельцина

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ МАССЫ АТОМА И ОЦЕНКА ЕГО
РАДИУСА ПО ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО
ИЗЛУЧЕНИЯ**

Методические указания к лабораторным работам
по курсу «Атомная физика»
для студентов физико-технического факультета

Екатеринбург
УрФУ
2010

УДК 548.1(076)

Составители: А. В. Чукин, А. К. Штольц, О. В. Денисова

Научный редактор доц. канд. техн. наук В. М. Стоцкий

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ МАССЫ АТОМА И ОЦЕНКА ЕГО РАДИУСА
ПО ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ:** методические
указания к лабораторным работам / сост. А. В. Чукин, А. К. Штольц,
О. В. Денисова. Екатеринбург: УрФУ, 2010. 21с.

Методические указания предназначены для использования при выполнении студентами физико-технического факультета лабораторных работ по курсу «Атомная физика». Они содержат в кратком изложении теории строения кристаллов и дифракции, а также описание содержания лабораторной работы, рекомендации по порядку ее выполнения и обработке экспериментальных данных.

Библиогр.: 3 назв. Рис. 9. Табл. 1.

Подготовлено кафедрами теоретической физики и прикладной математики
и кафедрой электрофизики

ВВЕДЕНИЕ

В 1895 г. немецкий физик В. Рентген, проводя опыты по прохождению тока между двумя электродами в вакууме, обнаружил, что экран, покрытый люминесцентным веществом (солью бария), светится, хотя разрядная трубка закрыта черным картонным экраном. Так было открыто излучение, проникающее через непрозрачные преграды, названное Рентгеном X-лучами.

Немецкий физик М. Лауэ предположил, что рентгеновские лучи являются таким же электромагнитным излучением, как и лучи видимого света, но с очень малой длиной волны, и что к ним применимы все законы оптики, в том числе возможна дифракция. В оптике видимого света дифракция на элементарном уровне может быть представлена как отражение света от системы штрихов – дифракционной решетки, происходящее только под определенными углами. При этом угол отражения лучей определяется углом падения лучей, расстоянием между штрихами дифракционной решетки и длиной волны падающего излучения. Для дифракции нужно, чтобы расстояние между штрихами было примерно равно длине волны падающего света.

Лауэ предположил, что рентгеновские лучи имеют длину волны, близкую к расстоянию между отдельными атомами в кристаллах, т. е. атомы в кристалле создают дифракционную решетку для рентгеновских лучей.

Позже стало ясно, что кристалл действительно является естественной трёхмерной *дифракционной решёткой* для рентгеновских лучей, так как расстояние между рассеивающими центрами (атомами) в кристалле одного порядка с длиной волны рентгеновских лучей ($\sim 1\text{Å} = 10^{-8}$ см). Для того чтобы правильно понять процессы, происходящие в кристалле при взаимодействии с рентгеновскими лучами, нам понадобятся элементарные сведения о кристаллической решетке.

1. ЭЛЕМЕНТЫ СТРУКТУРНОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Основное свойство кристалла – это трансляционная симметрия, т. е. возможность построения всего кристалла путем перемещения в трех направлениях *элементарной ячейки*. Элементарная ячейка представляет собой параллелепипед, построенный на трех некопланарных векторах. Векторы $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ выбирают таким образом, чтобы построенный на них параллелепипед был наиболее симметричным и по возможности меньшего размера. Передвигая элементарную ячейку вдоль направления ее ребер (т. е. векторов $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$), можно построить модель структуры вещества – пространственную решетку (рис. 1).

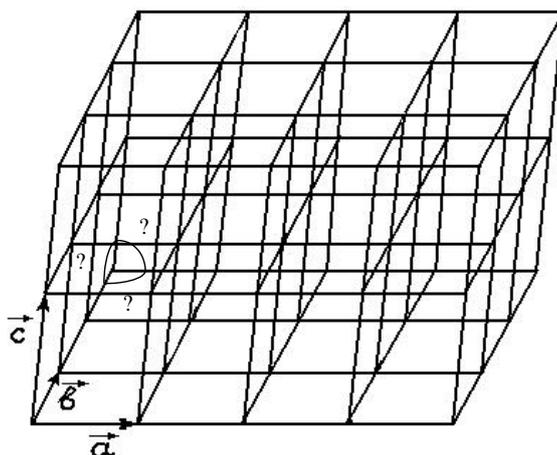


Рис.1

В наиболее общем виде модули векторов $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ ($|\vec{a}| = a, |\vec{b}| = b, |\vec{c}| = c$) необязательно должны быть равны между собой, а углы между ними α, β, γ не равны $\pi/2$. В природе существует всего семь возможных конфигураций этих шести параметров (a, b, c и α, β, γ), называемых *параметрами кристаллической решетки*. В зависимости от симметрии различают следующие элементарные ячейки (сингонии):

- триклинную; $a \neq b \neq c$; $\alpha \neq \beta \neq \gamma$;
- моноклинную; $a \neq b \neq c$; $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta \neq 90^\circ$;
- ромбическую; $a \neq b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$;
- тетрагональную; $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$;
- ромбоэдрическую; $a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$;
- гексагональную; $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$;
- кубическую; $a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

Очевидно, что наиболее симметричная решетка – кубическая. Атомы вещества могут располагаться в узлах кристаллической решетки, а также на ее гранях и внутри ячейки. Например, кубическая ячейка может быть:

- простой (если атомы вещества располагаются только в вершинах куба – рис. 2, а);
- объемно центрированной (если атомы вещества располагаются в вершинах куба и центре ячейки – рис. 2, б);
- гранецентрированной (если атомы вещества располагаются в вершинах куба и в центрах граней – рис. 2, в).

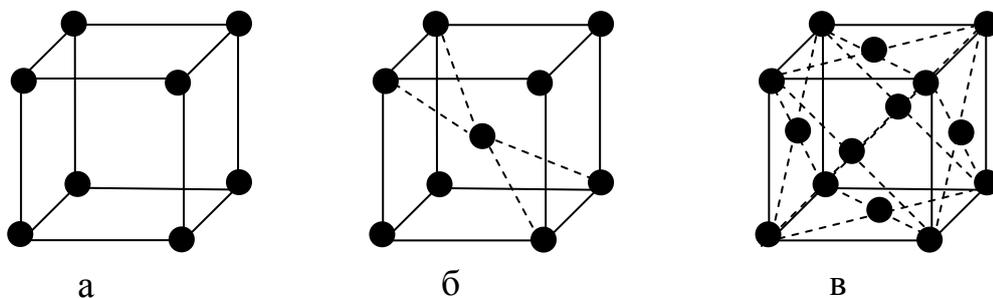


Рис. 2

При описании дифракционных свойств кристалла также важно знать количество атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку. Рассмотрим для примера структуру хлористого цезия CsCl (рис. 3).

В вершинах его кубической ячейки расположены атомы Cl, а в центре объема – Cs. При подсчете числа атомов, приходящихся на элементарную ячейку, нужно учесть, что каждая вершина принадлежит одновременно

восьми соседним ячейкам, т. е. на долю данной ячейки приходится $1/8$ часть вершинного атома.

Всего вершин 8, значит, на ячейку придется $1/8 \times 8 = 1$ атом Cl и еще один атом Cs внутри ячейки. Если бы атом находился на ребре, то его «вклад» в ячейку равнялся бы $1/4$, а если на плоскости граней, то $1/2$. При подсчете полного вклада всех таких атомов нужно учесть, что ребер 12, а граней 6.

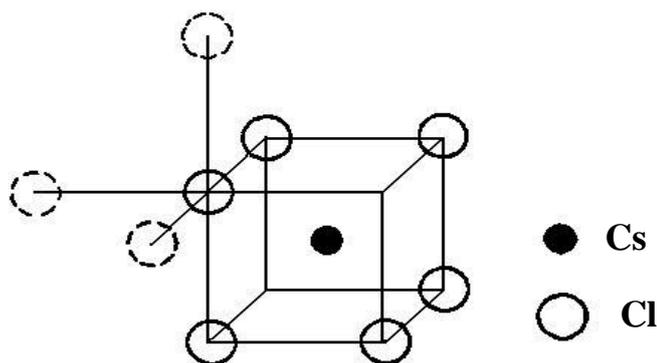


Рис.3

Через узлы кристаллической решетки можно провести плоскости. Из закона периодичности следует, что для любой такой плоскости существует множество идентичных, параллельно расположенных плоскостей, составляющих «семейство плоскостей», которое будет характеризоваться положением первой из них от начала координат, а также расстоянием между последующими плоскостями, которое называется межплоскостным расстоянием d . Известно, что положение плоскости можно задать отрезками, отсекаемыми ею на осях координат. В кристаллографии осями являются векторы $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, а единицей измерения вдоль оси – соответствующий период a, b или c (рис. 4).

Из рис. 4 видно, что любой из векторов, например \vec{b} , делится пачкой параллельных плоскостей на целое число k равных отрезков (для данного

примера число k равно четырем), так как через начало и конец вектора \vec{b} обязательно проходят плоскости этого «семейства». Значит, первая от начала координат плоскость отсекает отрезок $1/k \cdot b$. Соответственно на других осях она отсекает отрезки $1/h \cdot a$ и $1/l \cdot c$. Для определения положения плоскости (и всего «семейства») в данной решетке достаточно указать числа h, k, l , называемые индексами плоскости (или индексами Миллера).

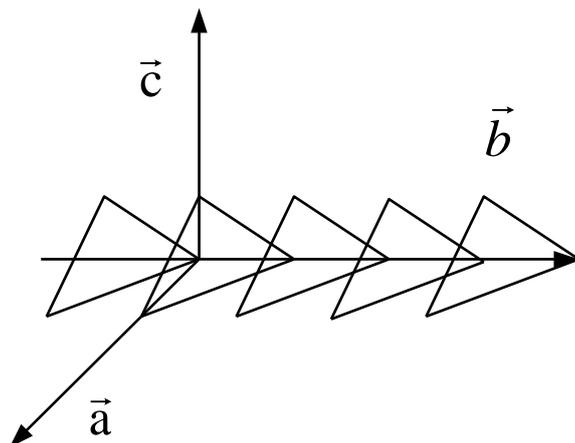


Рис. 4

Итак, индексы плоскости – это величины, **обратные отрезкам**, отсекаемым этой плоскостью на осях, причем за единицу измерения вдоль каждой оси принимается соответственно a, b, c .

На рис. 5 показаны несколько возможных плоскостей и их условные обозначения (единицы измерений вдоль каждой из осей определяются концом стрелки, их модули равны численным значениям периодов вдоль соответствующей оси).

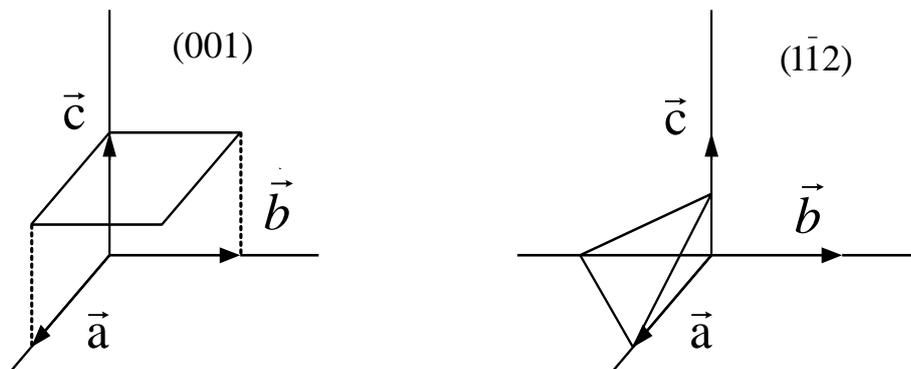
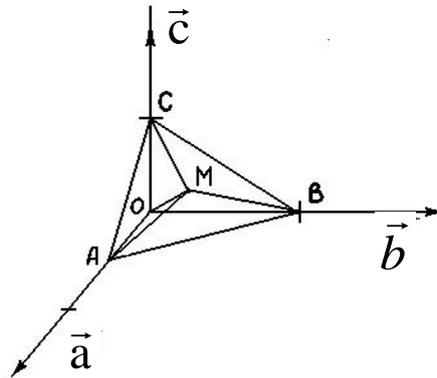


Рис. 5

Индексы плоскости принято указывать в круглых скобках, например (hkl) , отрицательная величина показывается чертой «-» сверху, например $(1, \bar{1}, 2)$ (рис. 5).

Другая характеристика «семейства плоскостей» – значение расстояния d (вдоль перпендикуляра к этим плоскостям). Величину d можно определить геометрически через индексы (hkl) и параметры решетки. Возьмем, например, ортогональную решетку, но с периодами $a \neq b \neq c$ (ромбическая



решетка) – рис. 6.

Рис.6

Допустим, мы выбрали систему координат таким образом, что ближайшая к началу координат будет плоскость $(3\ 2\ 2)$. Опустим из начала координат на плоскость ABC перпендикуляр OM . Его длина равна d . Рассмотрим прямоугольные треугольники AMO , BMO , CMO .

Имеем следующее:

$$\cos \angle AOM = \frac{OM}{AO}, \quad \cos \angle BOM = \frac{OM}{BO}, \quad \cos \angle COM = \frac{OM}{CO}.$$

Возведем в квадрат и сложим эти равенства:

$$\begin{aligned} OM^2 \left(\frac{1}{AO^2} + \frac{1}{BO^2} + \frac{1}{CO^2} \right) &= \\ &= \cos^2 \angle AOM + \cos^2 \angle BOM + \cos^2 \angle COM = 1. \end{aligned}$$

Согласно сказанному выше, отсекаемые отрезки следующие

$$AO = \frac{1}{h}a, \quad BO = \frac{1}{k}b, \quad CO = \frac{1}{l}c.$$

Получаем

$$d^2 = \left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \right)^{-1}. \quad (1)$$

Окончательная формула для ромбической решетки:

$$d = \frac{1}{\sqrt{h^2/a^2 + k^2/b^2 + l^2/c^2}}. \quad (2)$$

Для кубической решетки ($a = b = c$) эта формула упрощается и имеет вид

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}. \quad (3)$$

2. ДИФРАКЦИЯ КОРОТКОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ТРЕХМЕРНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

Принципиально дифракция осуществляется тогда, когда длина волны соизмерима с какими-то характерными размерами объекта. С размерами атомов соизмеримы электромагнитные волны с длинами волн порядка $0,01 - 10 \text{ \AA}$ (рентгеновские лучи) или для быстрых электронов волны де Бройля.

Взаимодействие рентгеновских лучей с атомами может быть объяснено в рамках классической электродинамики. Электромагнитная волна с большой частотой ($\nu \sim 10^{18} \text{ Гц}$) приводит в колебательное движение атомные электроны вещества, которые становятся источниками излучения той же частоты ν или длины волны λ по всем направлениям. Это обычно интерпретируется как рассеяние первичного пучка. В первом приближении можно считать, что все электроны одного атома излучают когерентно как один источник. Излучением тяжелых протонов можно пренебречь, так как его интенсивность примерно в 2000^2 раз слабее, чем от электронов, из-за гораздо большей массы протона по сравнению с массой электрона.

Благодаря большой проникающей способности первичного пучка рентгеновского излучения, образуется множество расположенных в объеме вещества источников рассеянных волн с одной и той же длиной волны λ . Эти волны интерферируют между собой и дают в определенных направлениях дифракционные максимумы.

2.1. Дифракция на одномерной структуре. Уравнение Лауэ

В 1912 г. М. Лауэ предсказал дифракцию рентгеновских лучей на монокристалле. Особенность его опыта заключалась в использовании узкого пучка рентгеновских лучей сплошного спектра (непрерывный набор длин волн от λ_0 до некоторого большого значения λ), которые не поглощались в веществе. Лауэ получил условия дифракции, называемые уравнениями Лауэ.

Выведем эти уравнения. Пусть $\varphi_0, \psi_0, \chi_0$ – углы, задающие ориентацию первичного луча \vec{S}_0 , а ориентацию рассеянного излучения \vec{S} задают углы φ, ψ, χ (рис. 7).

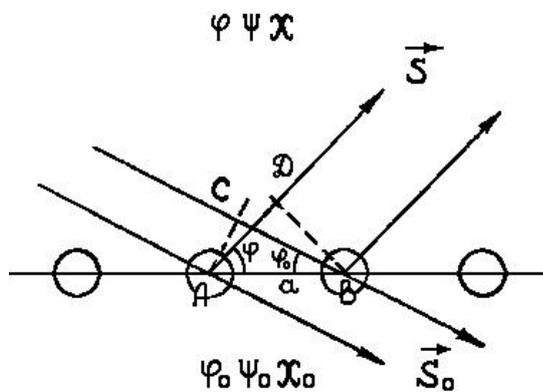


Рис. 7

Пунктирные линии AC и BD обозначают фронты падающей и дифрагированной волны соответственно.

Рассеяние волн происходит на атомах A, B и так далее, периодически расположенных вдоль некоторого кристаллографического направления, характеризующегося периодом a (дифракция на одномерной структуре).

Пучок лучей вдоль направления \vec{S} будет усилен (дифрагирует), если

разность хода волн, рассеянных атомами A , B и так далее, равна целому числу длин волн $\Delta l = H\lambda$, где H – целое число; λ – длина волны.

Как видно из рис.7,

$$\Delta l = AD - CB = a \cos \varphi - a \cos \varphi_0.$$

Таким образом, условие дифракции на одномерной структуре (уравнение Лауэ) будет иметь вид

$$a (\cos \varphi - \cos \varphi_0) \stackrel{?}{=} H\lambda.$$

Для трехмерной структуры имеем три уравнения Лауэ:

$$a (\cos \varphi - \cos \varphi_0) \stackrel{?}{=} H\lambda;$$

$$b (\cos \psi - \cos \psi_0) \stackrel{?}{=} K\lambda;$$

$$c (\cos \chi - \cos \chi_0) \stackrel{?}{=} L\lambda. \quad (4)$$

Целые числа H, K, L называются *индексами дифракции*. Неизвестными в этих уравнениях являются углы φ, ψ, χ , характеризующие направление луча \vec{S} . Эти три угла связаны между собой еще одним уравнением. Например, в прямоугольной системе координат

$$\cos^2 \varphi + \cos^2 \psi + \cos^2 \chi = 1. \quad (5)$$

Таким образом, для трех неизвестных имеем четыре уравнения, т.е. система несовместна. Иначе говоря, дифракция не получится, если значения $\varphi_0, \psi_0, \chi_0$ и λ определены заранее. Следовательно, для получения дифракционной картины необходимо изменять длину волны λ (т.е. пользоваться сплошным, а не монохроматическим спектром) или изменять ориентировку решетки (т.е. вращать монокристалл или превратить его в поликристалл – множество хаотически ориентированных кристалликов).

2.2. Уравнение Вульфа-Брегга

В 1913 г. московский кристаллограф Ю. В. Вульф и английские физики У. Г. Брегг и У. Л. Брегг (отец и сын) одновременно и независимо друг от

друга предложили условную интерпретацию сложной дифракции лучей на трехмерной решетке.

Условно дифракцию можно представить как «отражение» лучей от пачки полупрозрачных плоскостей с межплоскостным расстоянием d (рис.8).

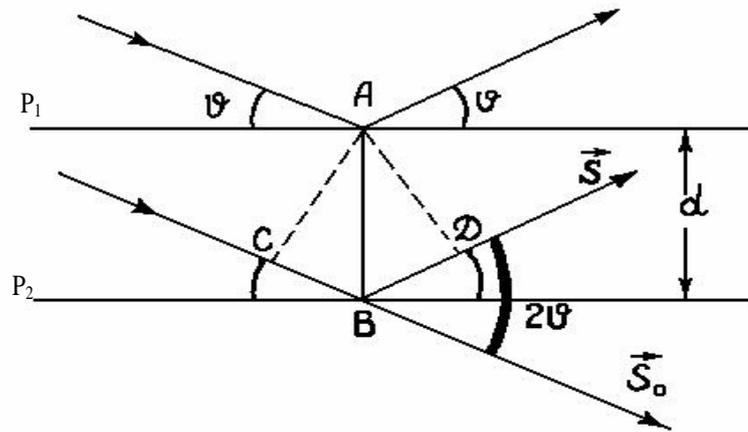


Рис.8

Пучки лучей \vec{S} , «отраженные» соседними плоскостями P_1 и P_2 , будут дифрагировать, если волны имеют разность хода $\Delta l = n\lambda$, где n – целое число. На рис. 8 пунктирные линии AC и AD обозначают соответственно фронты падающей и отраженной волны.

При этом оптическая разность хода

$$\Delta l = CB + BD = d \sin\theta - d \sin\theta = 2d \sin\theta.$$

Тогда условие дифракции следующее:

$$2d \sin\theta = n\lambda. \quad (6)$$

Это и есть уравнение Вульфа-Брегга. При произвольно заданных θ и λ (напомним, что d и n – дискретные величины) это условие не выполняется. Следовательно, для получения дифракции надо менять λ или θ .

Покажем эквивалентность трех уравнений Лауэ одному уравнению Вульфа-Брегга на примере орторомбической решетки.

Любая прямая линия, составляющая углы с осями координат (вдоль $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$), подчиняется уравнению

$$\cos^2 \varphi_0 + \cos^2 \psi_0 + \cos^2 \chi_0 = 1. \quad (7)$$

Кроме того, для угла между двумя прямыми \vec{S} и \vec{S}_0 справедливо соотношение

$$\cos \varphi_0 \cos \varphi + \cos \psi_0 \cos \psi + \cos \chi_0 \cos \chi = \cos \angle(\vec{S}, \vec{S}_0). \quad (8)$$

Теперь в уравнениях Лауэ (4) перенесем a, b, c в правую часть, возведем равенства в квадрат и сложим их:

$$\begin{aligned} \left(\frac{H\lambda}{a}\right)^2 + \left(\frac{K\lambda}{b}\right)^2 + \left(\frac{L\lambda}{c}\right)^2 &= \cos^2 \varphi + \cos^2 \psi + \cos^2 \chi - \\ &- 2 \left[\cos \varphi \cdot \cos \varphi_0 + \cos \psi \cdot \cos \psi_0 + \cos \chi \cdot \cos \chi_0 \right] \\ &+ \cos^2 \varphi_0 + \cos^2 \psi_0 + \cos^2 \chi_0. \end{aligned}$$

Воспользовавшись теперь соотношениями (7) и (8) и тем, что угол между направлением первичного луча \vec{S}_0 и дифрагированного луча \vec{S} равен 2θ , получаем следующее:

$$\left(\frac{H\lambda}{a}\right)^2 + \left(\frac{K\lambda}{b}\right)^2 + \left(\frac{L\lambda}{c}\right)^2 = 2 - 2 \cos(2\theta) = 4 \sin^2 \theta.$$

Далее введем следующее обозначение:

$$d_{HKL}^2 = \left(\frac{H^2}{a^2} + \frac{K^2}{b^2} + \frac{L^2}{c^2} \right)^{-1}.$$

Индексы дифракции H, K, L могут иметь общий множитель n , так что $H = n h, K = n k, L = n l$ (где h, k, l – кристаллографические индексы какой-то плоскости). Тогда с учетом выражения (1) получим

$$d_{HKL} = \frac{1}{n} d_{hkl}.$$

И окончательно имеем $2d \sin \theta = n\lambda$. Число n здесь определяет порядок отражения, т. е. номер плоскости, от которой происходит отражение. При необходимости n всегда можно найти из H, K, L .

Геометрия съемки может меняться в разных вариантах, но геометрия явления сохраняется – для каждого отраженного пучка лучей выполняется уравнение Вульфа-Брегга, а угол между «отраженным» пучком \vec{S} и продолжением падающего \vec{S}_0 всегда 2θ (рис. 8).

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Цель работы:

- 1) познакомиться с элементарными сведениями о кристаллической решетке;
- 2) понять суть явления дифракции рентгеновских лучей;
- 3) познакомиться с условиями рентгеновской дифракции;
- 4) снять дифрактограмму чистого металла и рассчитать ее;
- 5) определить массу и радиус атома, вычислить число Авогадро;
- 6) оценить погрешность определяемых величин.

3.1. Устройство дифрактометра

Перед выполнением работы необходимо ознакомиться с устройством дифрактометра по его описанию.

Все современные рентгеновские дифрактометры состоят из трех основных частей (рис. 9). Это рентгеновская трубка 1, которая является источником падающего пучка лучей \vec{S}_0 , предметный столик 2, на который устанавливается кювета с порошковым образцом, и детектор 3, регистрирующий отраженный пучок лучей \vec{S} .

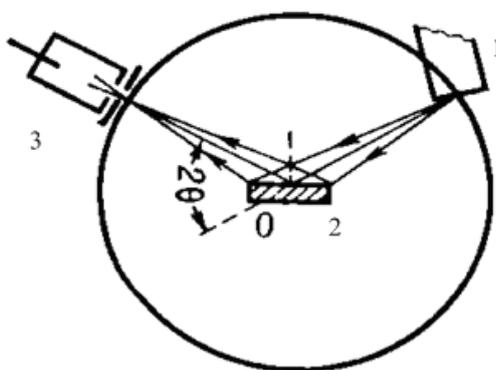


Рис.9

Рентгеновская трубка и счетчик монтируются на устройстве, называемом гониометром. Гониометр позволяет менять углы падения первичного пучка лучей \vec{S}_0 синхронно с изменением положения счетчика, фиксирующего рассеянный пучок \vec{S} . При этом угол поворота счетчика должен быть в два раза больше, чем угол поворота трубки, для того чтобы выполнялись условия Вульфа-Брегга.

Поскольку образец, на котором происходит дифракция, является порошковым (т. е. состоящим из огромного числа маленьких кристалликов, расположенных хаотично по отношению друг к другу), то всегда найдутся кристаллики, для кристаллографических плоскостей которых будет выполняться условие Вульфа-Брегга. Таким образом, изменяя углы падения первичного луча \vec{S}_0 в каком-то интервале, можно получить картину дифракции от всех отражающих плоскостей исследуемого вещества в этом интервале. При этом желательно, чтобы падающее рентгеновское излучение было бы монохроматическим, для того чтобы дифрактограмма не содержала лишних дифракционных максимумов от других длин волн.

3.2. Расчет дифрактограмм

По отснятой дифрактограмме прежде всего необходимо определить положение дифракционных линий (рефлексов). Для этого на дифрактограмме отмечают уровень фона, а затем линии нумеруют по порядку и для каждой линии находят ее средневзвешенное положение. Результаты записывают в таблицу.

Для расчета параметров решетки и для других целей надо знать индексы H, K, L . Если кристаллическое вещество имеет кубическую решетку, то индицирование можно провести расчетным путем. Для других решеток приходится использовать графическое определение, более сложное и менее точное.

Если использовать соотношение (3), уравнение Вульфа-Брегга и связь между индексами дифракции и индексами плоскости $H = n h, K = n k, L = n l$, то для кубической системы получим

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a^2} (H^2 + K^2 + L^2). \quad (9)$$

Здесь левая часть находится из данных дифрактограммы путем измерения углов дифракции θ по всем полученным рефлексам. Длина волны λ определяется излучением трубки. При этом неизвестное значение параметра a кубической решетки должно быть одним и тем же для всех дифракционных линий полученной дифрактограммы. Тогда для разных углов θ_i ($\theta_1, \theta_2, \theta_3, \dots$) справедливо соотношение

$$\sin^2 \theta_1 : \sin^2 \theta_2 : \sin^2 \theta_3 : \dots = (H_1^2 + K_1^2 + L_1^2) : (H_2^2 + K_2^2 + L_2^2) : (H_3^2 + K_3^2 + L_3^2) : \dots,$$

т. е. квадраты синусов соотносятся как целые числа, если решетка кубическая.

Это свойство кубической решетки помогает определить неизвестные индексы дифракции $(H_1 K_1 L_1), (H_2 K_2 L_2), (H_3 K_3 L_3) \dots$. Чтобы их найти, разделим все $\sin^2 \theta_i$ на $\sin^2 \theta_1$. Получим некоторые числа x_1, x_2, x_3, \dots , где $x_1=1$, а x_i последовательно возрастают. Если эти числа x_i близки к целым, то это и есть суммы квадратов индексов:

$$x_1 = (H_1^2 + K_1^2 + L_1^2),$$

$$x_2 = (H_2^2 + K_2^2 + L_2^2),$$

$$x_3 = (H_3^2 + K_3^2 + L_3^2),$$

...

Если хотя бы одно число отличается от целого более чем на 0,1, то надо весь ряд x_1, x_2, x_3, \dots умножить на подходящее целое число m такое, чтобы все величины были близки к целым с ошибкой менее 0,1. Это число m должно быть небольшим: 2, 3 или 4.

Для кубической решетки найдется только одно число m , при котором все значения mx_i будут близки к целым. Надо, кроме того, учитывать, что в ряду mx_1, mx_2, \dots и так далее не должно быть чисел 7, 15, 23, которые не являются суммой квадратов целых чисел. В противном случае весь ряд надо умножить на 2, чтобы задача была разрешимой.

Итак, имеем следующее:

$$mx_1 = H_1^2 + K_1^2 + L_1^2,$$

$$mx_2 = H_2^2 + K_2^2 + L_2^2,$$

$$mx_3 = H_3^2 + K_3^2 + L_3^2,$$

...

Далее нужно подобрать для каждого mx_i комбинацию чисел H_i, K_i, L_i . Это сделать нетрудно, если использовать целые числа и нуль. Порядок написания чисел, образующих комбинацию, безразличен.

Все данные измерений и расчета заносятся в таблицу.

Номер линии	θ_i	$\sin\theta_i$	$\sin^2\theta_i$	$\sin^2\theta_i / \sin^2\theta_1$	$H^2+K^2+L^2$	(HKL)

Теперь нужно определить тип ячейки. Как уже отмечалось, кубические решетки подразделяются на типы: простую, объемно центрированную, гранецентрированную. Для чистых металлов с плотной упаковкой атомов характерны две последние. Тип решетки сказывается на индексах дифракции. Если решетка объемно центрированная (рис. 2, б), то для каждой тройки (HKL) их сумма – четное число ($H + K + L = 2n$). В случае гранецентрированной решетки (рис. 2, в) каждая тройка чисел (HKL) одинаковой четности (все три четные или все три нечетные числа).

3.3. Вычисление периода кубической решетки и числа Авогадро

После того как индексы дифракции для каждой линии найдены, можно подставить их в формулу (9) и найти a :

$$a = \frac{\lambda}{2\sin\theta} \sqrt{H^2 + K^2 + L^2}. \quad (10)$$

Однако при этом возникает вопрос, какой для расчета брать угол θ . Наименьшую погрешность в определении a даст расчет по последней линии, для которой угол θ – наибольший. В самом деле, продифференцируем (6), считая $\lambda = \text{const}$:

$$2\Delta d \sin\theta + 2d \cos\theta \Delta\theta = 0.$$

С учетом формулы (3) имеем

$$\frac{\Delta d}{d} = \pm \Delta\theta \operatorname{ctg}\theta = \frac{\Delta a}{a}. \quad (11)$$

Знаки \pm означают, что ошибка определения угла $\Delta\theta$ может быть и в ту и в другую сторону. Из (11) видно, что если θ стремится к 90° , то $\frac{\Delta a}{a} \rightarrow 0$.

Значение $\Delta\theta$ находят по дифрактограмме как половину цены деления шкалы, по которой определялся угол θ . При этом ошибка в определении периода будет равна

$$\Delta a = \pm a \Delta\theta \operatorname{ctg}\theta. \quad (12)$$

Согласно определению, число Авогадро N_A – это число атомов в грамм-атоме металла или молекул в грамм-молекуле. Масса одного моля равна M граммов. Обозначим плотность данного металла через ρ . Тогда объем, занимаемый молем, можно рассчитать как $V = M / \rho$, а объем, приходящийся на один атом в элементарной ячейке, как $v = a^3 / p$, где p – число атомов, приходящихся на ячейку. В объемно центрированной решетке $p = 2$, в гранецентрированной – $p = 4$.

Найдем число Авогадро:

$$N_A = \frac{V}{v} = \frac{M p}{\rho a^3}. \quad (13)$$

На определение погрешности числа Авогадро оказывают влияние несколько величин. Плотность вещества определена с некоторой погрешностью (обычно порядка $0,1 \text{ г/см}^3$). Кроме того, дает свой вклад и погрешность в определении периода решетки (12).

Далее из полученного значения числа Авогадро N_A можно рассчитать массу атома A , зная его молярную массу M :

$$A = M / N_A. \quad (14)$$

Погрешность в определении массы атома возникает от погрешности числа Авогадро.

Зная тип кристаллической решетки и ее период, можно оценить из ее геометрии радиус атома $R_{\text{ат}}$. При этой оценке считать атомы плотно упакованными.

4. ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

1. Познакомиться с устройством и работой рентгеновского аппарата по описаниям в лаборатории.
2. Установить поликристаллический образец в дифрактометр.
3. Включить аппарат, используя инструкцию, имеющуюся в лаборатории. Выбрать соответствующую программу для записи дифрактограммы.
4. Снять дифрактограмму, распечатать.
5. По полученной дифрактограмме определить центры линий, измерить величины $2\theta_i$, провести расчет погрешности $\Delta\theta$, результаты занести в таблицу.
6. Рассчитать период решетки по последней линии, используя формулу (10), и оценить его погрешность. Вычислить число Авогадро по формуле (13), найти массу атома A и оценить его радиус. По аналогии с методом, использованным при выводе формулы (12), получить формулы для погрешностей ΔN_A , ΔA , $\Delta R_{\text{ат}}$ и рассчитать эти величины.

5. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ДЛЯ ДОПУСКА К ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЕ

1. Как осуществляется дифракция рентгеновских лучей?
2. Какими характеристиками отличаются дифракционные линии друг от друга?
3. Как найти индексы дифракции (HKL)?
4. Чем различаются индексы (HKL) и (hkl)?
5. Как получить период a с наименьшей погрешностью?
6. Из каких данных можно рассчитать число Авогадро?
7. Как рассчитать массу атома и оценить его радиус?

1. Шпольский Э. В. Атомная физика / Э. В. Шпольский. М.: Наука, 1984. Т.1, гл.IV, § 32, 33.
2. Горелик С. С. Рентгенографический и электронно-оптический анализ: учеб. пособие для вузов / С. С. Горелик, Ю. А. Скаков, Л. Н. Расторгуев 4-е изд. доп. и перераб. М.: МИСИС, 2002. 360 с.
3. Русаков А. А. Рентгенография металлов / А. А. Русаков. М.: Атомиздат, 1977. Гл. 2.

Учебное издание

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ МАССЫ АТОМА И ОЦЕНКА ЕГО РАДИУСА
ПО ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ**

Составители: **Чукин** Андрей Владимирович
Штольц Аэлита Константиновна
Денисова Ольга Владимировна

Редактор *О. В. Байгулова*

Подписано в печать 20.07.2010. Формат 60×84 1/16.
Бумага писчая. Плоская печать. Усл. печ. л. 1,21.
Уч.-изд. л. 1. Тираж 50 экз. Заказ

Редакционно-издательский отдел УрФУ
620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19
rio@mail.ustu.ru

Ризография НИЧ УрФУ
620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19