www.mientayvn.com

Dịch tiếng anh chuyên nghành khoa học tự nhiên và kĩ thuật.

Dịch các bài giảng trong chương trình học liệu mở của học viện MIT, Yale.

Tìm và dịch tài liệu phục vụ cho sinh viên làm seminer, luận văn.

Tại sao mọi thứ đều miễn phí và chuyên nghiệp ???

Trao đổi trực tuyến tại:

http://www.mientayvn.com/chat_box_li.html

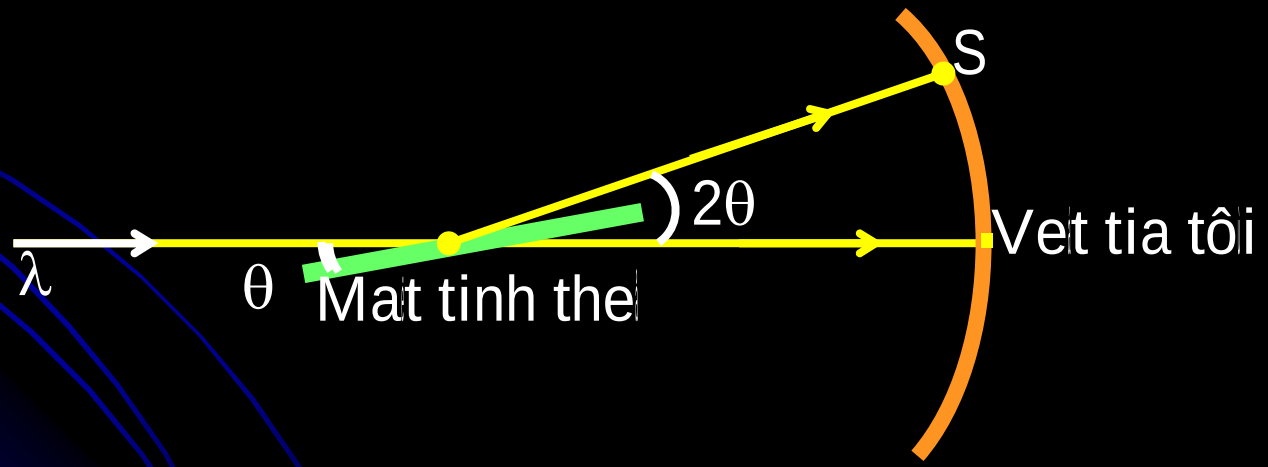
PHAN II

PHAN TÍCH CAU TRUC TINH THE BANG PHÖÔNG PHAP NHIEU XA TIA X

I. CÔNG THÖÙC NHIEÂU XAÏ CUÛA VULF – BRAGG

1. NHAÄN XEÙT CHUNG

Ñeå nghieân cöùu caáu truùc cuûa tinh theå ta phaûi chieáu vaøo tinh theå caùc böùc xaï coù böôùc soùng nhoû hôn hay baèng khoaûng caùch giöõa caùc nguyeân töû trong tinh theå, töùc laø: $\lambda \leq$ Å $\Rightarrow$ tia X, tia γ.



Nhöõng tia X cho hình aûnh roõ neùt vôùi ñoä chính xaùc cao hôn

$\Rightarrow$ Duøng tia X.

Tia X ñöôïc tao ra nhô ong phat tia X. Böôïc song ngan nhat ma ong co the phat ra lien quan tôi hieu ñien the giöa anod va catod cua ong phat tia bôi cong thöc:

$$\frac{hc}{\lambda_{min}} = eU \Rightarrow \lambda_{min} = \frac{hc}{eU}$$

Với $U = 10^4$ V thì :

$$\lambda_{min} = \frac{6{,}625.10^{-34}.3.10^8}{1{,}6.10^{-19}.10^4} = 1{,}24.10^{-10}\,\text{m} = 1{,}24\,\text{Å}^0$$

2. Coâng thöùc nhieãu xaï cuûa Vulf – Bragg:

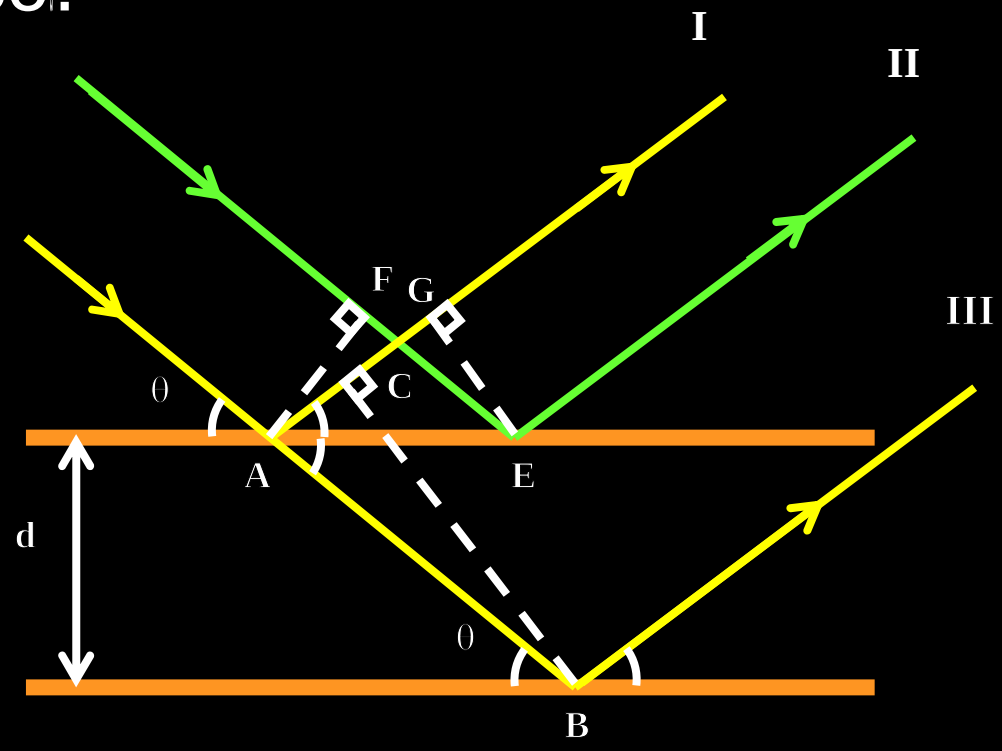
Chieáu moät chuøm tia X song song vaø ñôn saéc (coù λ xaùc ñònh) leân moät tinh theå döôùi goùc tröôït θ ñoái vôùi moät hoï maët maïng naøo ñoù.

Chuøm tia X seõ phaûn xaï treân caùc maët thuoäc cuøng hoï ñoù döôùi cuøng goùc θ. Ta coù:

Caùc tia phaûn xaï töø cuøng 1 maët maïng (tia I, II) coù hieäu ñöôøng ñi:

$$\delta = AG - FE = 0$$

$\Rightarrow$ Caùc tia phaûn xaï treân cuøng 1 maët maïng cuøng pha nhau.



- Goi δ la hieu ñöông ñi cua cac tia phan xa tö cac mat lan can nhau ta coi:

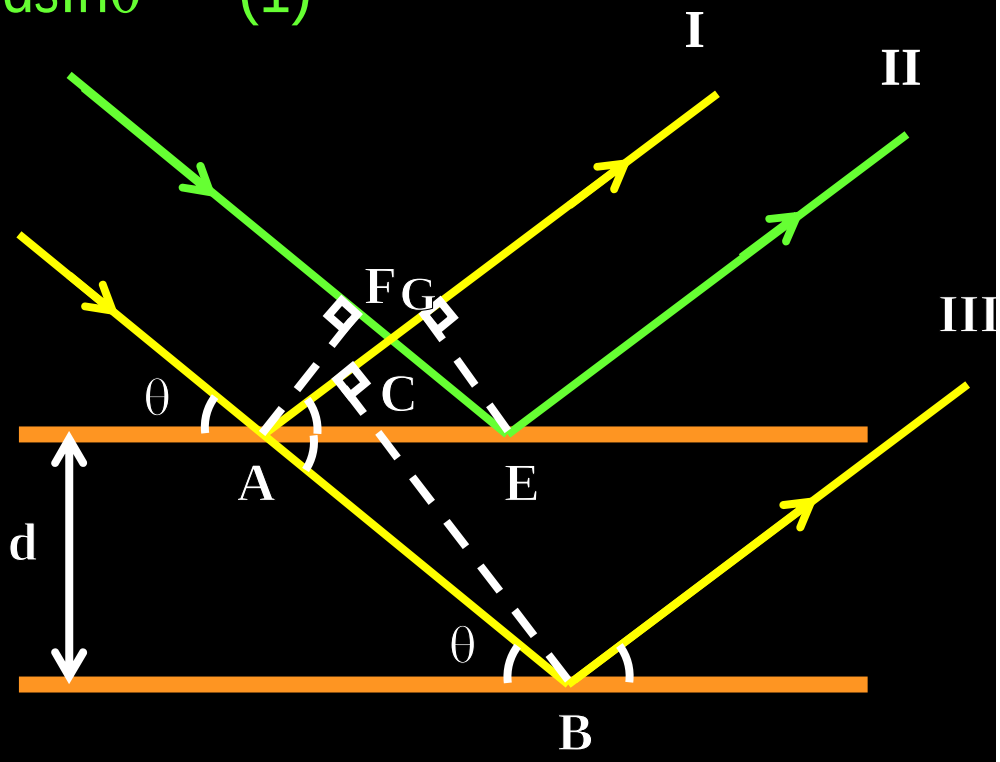
$$\delta = AB - AC$$

ma :

$$\delta = AB - AC = d(1 - \cos 2\theta)/\sin\theta = 2d\sin^2\theta/\sin\theta$$

$$\Rightarrow \delta = 2d\sin\theta \qquad (1)$$

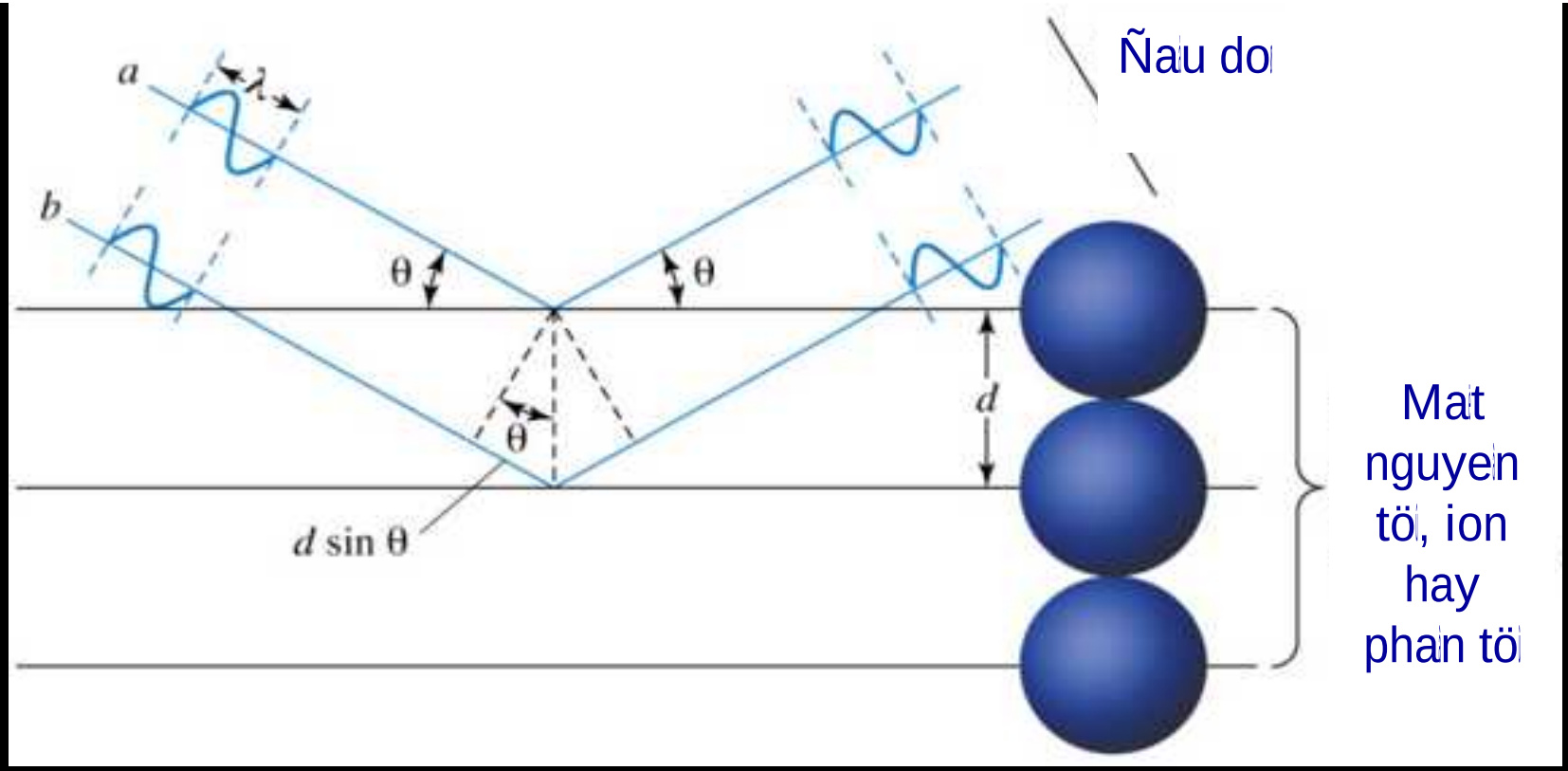
Trong quang hoc, ñieu kien ñe cac tia song coi cung böôc song coi cöc ñai giao thoa la:



$$\Delta\varphi = \frac{2\pi\delta}{\lambda} = 2n\pi \qquad (2)$$

Tö (1) va (2) $\Rightarrow \delta = n\lambda, n \in Z$

$2d\sin\theta = n\lambda$: ñieu kien nhieu xa cua Vulf – Bragg



NHAN XET

- Thöc nghiem chöng to cong thöc Vulf – Bragg co ño chính xac rat cao. Mac du cong thöc nay suy ra tö mot ñiem xuat phat ro rang khong ñung ve mat vat lí, ño la sö phan xa tia X tren nhöng mat nguyen tö töông töông.
- Chæ nhöng phep ño that chính xac môi phat hien ñöôc nhöng sai lech cua cong thức, nhöng sai lech ño lien quan tôi hien töông khuc xa cua tia X trong tinh the.

II. CAU PHAN XAI CUA EWALD

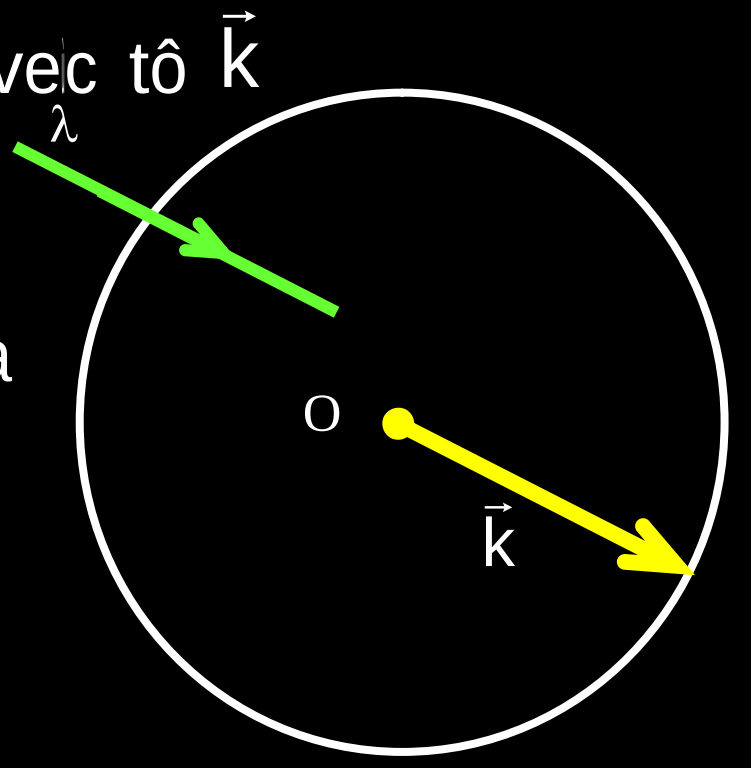
Ewald ñöa ra mot phöông phap ñôn gian vao viec giai quyet bai toan sau:

Cho mot chum tia X tôi, böôc song λ rôi tren mot tinh the ñat ô mot höông cho tröôc. Hoi co tia phan xai nao khong? Höông cua no nhö the nao?

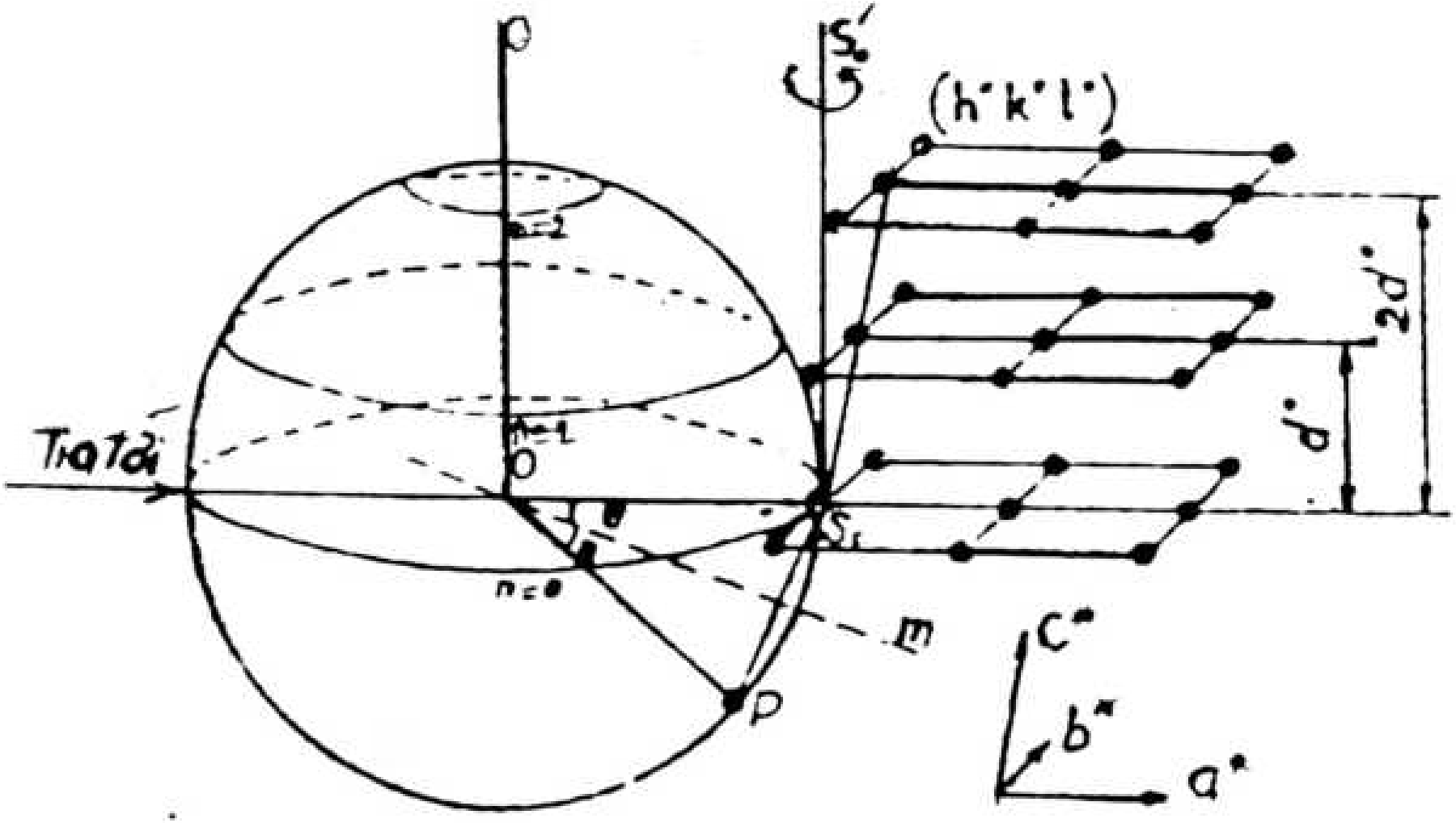
Lay 1 ñiem bat kì lam goc O, ve vec tô $\vec{k}$ thoa:

- góc tai O.
- phöông trung vôi phöông cua tia X tôi.
- ño lôn cua k :

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

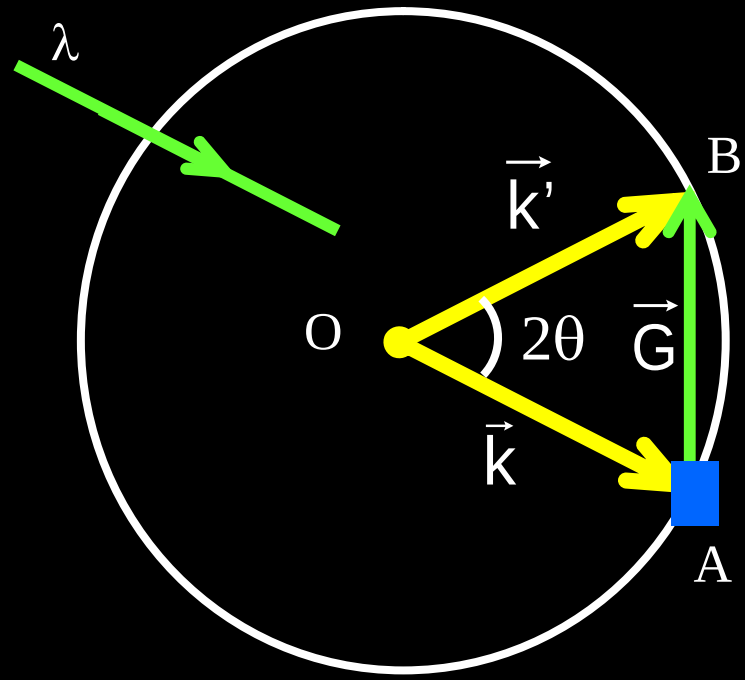


Töông töông ñaùt tinh theå taïi vò trí ngoïn cuûa $\vec{k}$. Goïi A laø ngoïn cuûa vectô $\vec{k}$. Laáy A laøm goác veà maïng ngöôïc cuûa tinh theå ñoù.



- Tö O veõ mot mat cau tam O, ban kính bang $k = \frac{2\pi}{\lambda}$. Ñieu kien nhieu xa Vulf – Bragg seõ thoa, töc la seõ coù tia nhieu xa neu coù nut cua maïng ngöôïc naèm treân mat cau nay.

Giaû söû coù nut cua maïng ngöôïc naèm treân mat cau nay tai B.



- Veõ vectô $\vec{G} = \overrightarrow{AB}$ vectô noái 2 nut cua maïng ngöôïc. Tia nhieu xa seõ truyeàn theo chieu cua vectô $\vec{k}'$ thoa:

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$$

CHÖNG MINH

Theo tính chat cua maïng ngöôïc :

$\vec{G}$ = laø mot vetô maïng ngöôïc cua hoï mat maïng (hkl)

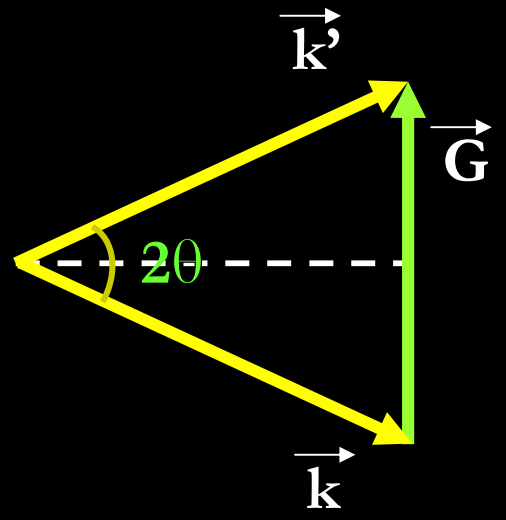
Do ño:

+ $\vec{G} \perp$ hoï mat maïng thuan (hkl)

$$+ |G| = \frac{2\pi}{d_{hkl}} \quad (1)$$

Mat khac, töø hình ve:

$$|\vec{G}| = 2.k.\sin\theta = 2.\frac{2\pi}{\lambda}.\sin\theta \quad (2)$$



Töø (1) vaø (2) suy ra:

$$2d_{hkl}\sin\theta = \lambda$$

DANG TONG QUAT CUA ÑIEU KIEN NHIEU XA VULF - BRAGG

Cong thöc Vulf – Bragg co the viet döôi dang tong quat sau:

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$$

$$\Rightarrow (\vec{k}')^2 = (\vec{k} + \vec{G})^2$$

$$\text{Vì } k = k' \text{ nen } 2.\vec{k}.\vec{G} + \vec{G}^2 = 0$$

$\Rightarrow$ Tia phan xa se öng vôi nhöng nut nao cua mang ngöôc nàm tren mat cau Ewald.

Neu khong co nut nao tren mat cau, töc khong co tia nhieu xa. Nhöng neu quay tinh the quanh A, luc ño mang ngöôc quay theo, vì vay bao giô cung co the ñöa mot nut bat kì G_{hkl} len mat cau neu $G_{hkl} \leq 4\pi/\lambda$.

NHAN XET

- Döng cau Ewald cho phep tìm bang hình hoc nhöng tia nhieu xa gay bôi mot tia tôi cho tröôc tren mot tinh the'.
- Ñay la phöông phap ñai cöông khai thac cua anh nhieu xa.
- Cong thöc Vulf – Bragg ñung vôi moi loai song truyen trong moi tröông tuan hoan. Vì vay, trong nhieu tröông hôp con co the dung chum electron hay chum nôtron co nang löông thích hôp vao viec phan tích cau truc tinh the.

III. CAC PHÖÔNG PHAP CHUP TINH THE BANG TIA X

- Moi tinh the cua mot loai vat chat co d ñac tröng rieng cho mình khong lan vôi cac chat khac du cac tinh the khac loai co cung cau truc.
- Trong phan tích cau truc: biet λ, ño θ bang thöc nghiem (anh nhieu xa) $\Rightarrow$ Xac ñònh ñöôc d.
- Mot chum tia tôi S rôi tren mot ho mat mang hkl vôi mot goc α bat kì noi chung khong cho tia nhieu xa S' vì ñieu kien Vulf – Bragg chöa thoa. Muon thu ñöôc chum tia nhieu xa ngöôi ta dung mot trong hai cach sau:
- Giöõ cố ñònh tinh the va tia tôi: thay ñoi λ cua chum tia tôi $\Rightarrow$ dung tia X trang: phöông phap Lauer.
- Giöõ λ = const, vò trí tia tôi co ñònh: xoay tinh the ñe goc α thay ñoi töø $0 \rightarrow 90^o$ se co mot vò trí phu hôp ñieu kien Vulf – Bragg $\Rightarrow$ thu ñöôc tia nhieu xa: phöông phap Debye - Scherrer, phöông phap ñôn tinh the xoay.

1. PHÖÔNG PHAP LAUE

- Dung chum tia X trang chieu qua mot diapham roi vao mot ñôn tinh the gan tren gia.
- Öng vôi moi ho mat mang bat kì lam vôi tia tôi mot goc θ nao ño se co mot böôc song λ thích hôp ñe thoa ñieu kien Vulf – Bragg $\Rightarrow$ cho anh nhieu xa.
- Qua anh nhieu xa ta co the xac ñònh ñöôc:
  - Tính ñoi xöng cua tinh the.
  - Ap dung ñöôc cho cac tinh the co hình dang khong hoàn chænh.
  - Ñònh höông ñöôc tinh the.
  - Nghien cöu lech mang: vet nhieu xa dai $\Rightarrow$ lech mang.

BUONG CHUP LAUE

- Gom ñau giac ke, nôi ñat ñôn tinh the vôi ñònh höông xac ñònh so vôi chum tia tôi va buong phim phang ñat tröc giao vôi chum tia tôi.
- Neu mau ñu mong ñe tia X xuyen qua, ngöôi ta chup theo sô ño truyen qua va anh nhieu xa nhan ñöôc goi la anh Laue truyen qua, goi tat la anh Laue.
- Neu mau day, chup theo sô ño phan xa va anh nhieu xa nhan ñuôc goi la anh Laue ngöôc hay con goi la epigram.

ONG PHAT TIA

Ong phat tia lam viec ô che ño böc xa lien tuc, töc ñien ap ñu be ñe böc xa ñac tröng hoac chöa co hoac co nhöng vôi cöông ño thap.

Nhô böc xa lien tuc, chum tia ña sac co böôc song thay ñoi tö :

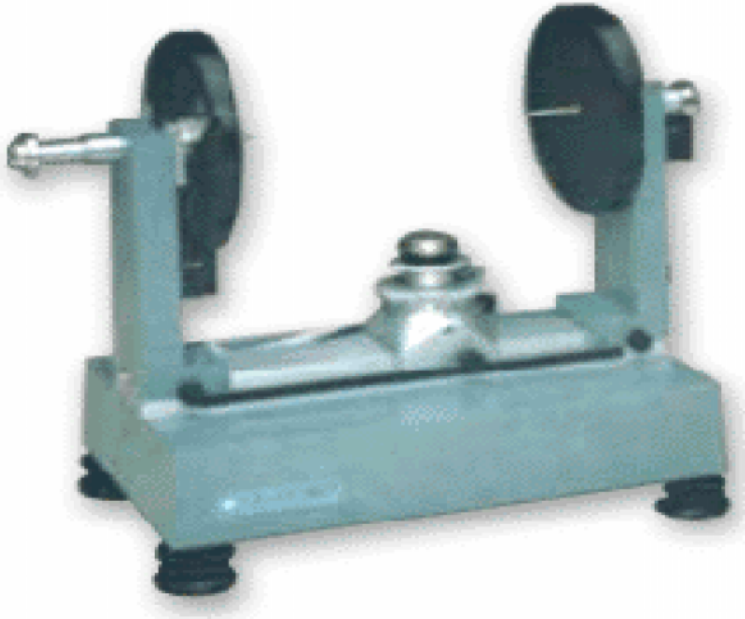
$$\lambda_{min} = 0{,}2.10^{-10} \text{ m ñen } \lambda_{max} = 2.10^{10} \text{ m}$$

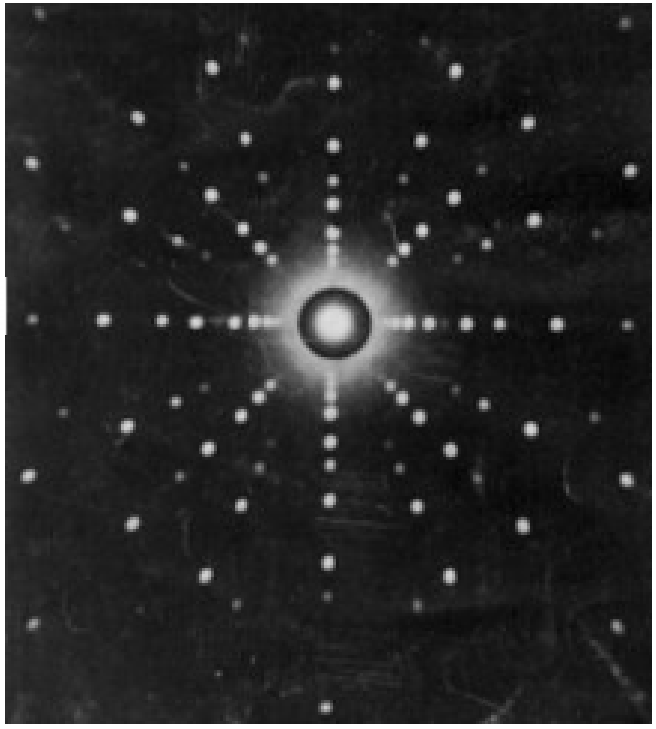
ANH NHIEU XA

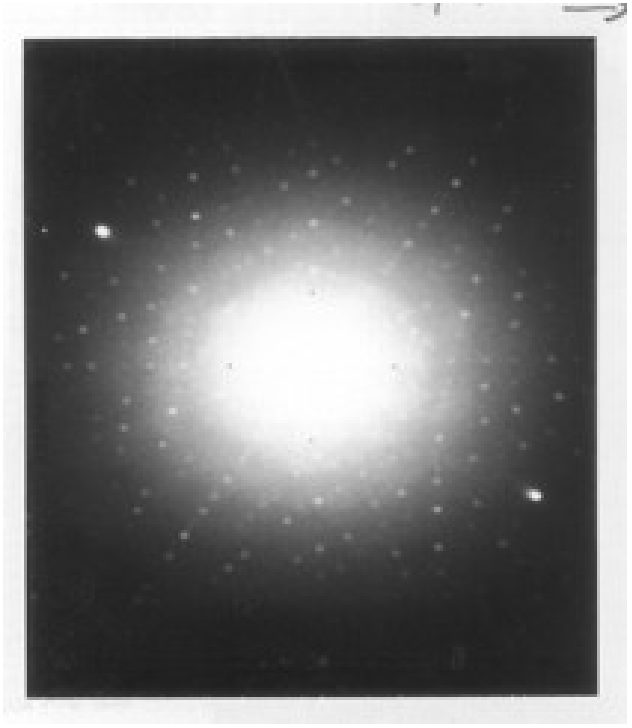
Anh nhieu xa gom mot loat cac vet nhieu xa. Cac vet nay the hien tính ñoi xöng cua tinh the theo cach ñònh höông tinh the luc chup.

Phöông phap Laue thöông dung ñe xac ñònh höông truc tinh the va tính ñoi xöng cua tinh the.

THIET BÒ CHUP PHO BA NG PHÖÔNG PHAP LAUE







2. PHÖÔNG PHAP ÑÔN TINH THE QUAY

- Dung tia X ñôn sac chieu qua diapham tôi tinh the nam ô truc cua buong chup co ban kính 57,3 mm.
- Tinh the quay quanh truc vôi toc ño 2 vong/phut.
- Dung phöông phap nay ñe xac ñònh thong so mang T cua chuoi trung vôi truc quay cua tinh the. Khi ño chæ can quay tinh the dao ñong tö $\pm 5^o \rightarrow \pm 15^o$.
- Tröông hôp can chæ so hoa cac vet nhieu xa ta phai xoay tinh the toan vong.
- Chu ý khi lap tinh the phai trung truc quay vôi mot truc quan trong cua tinh the.
- Ngöôi ta thöông chup ba anh nhieu xa vôi truc quay trung vôi truc [100], [010] va [001].

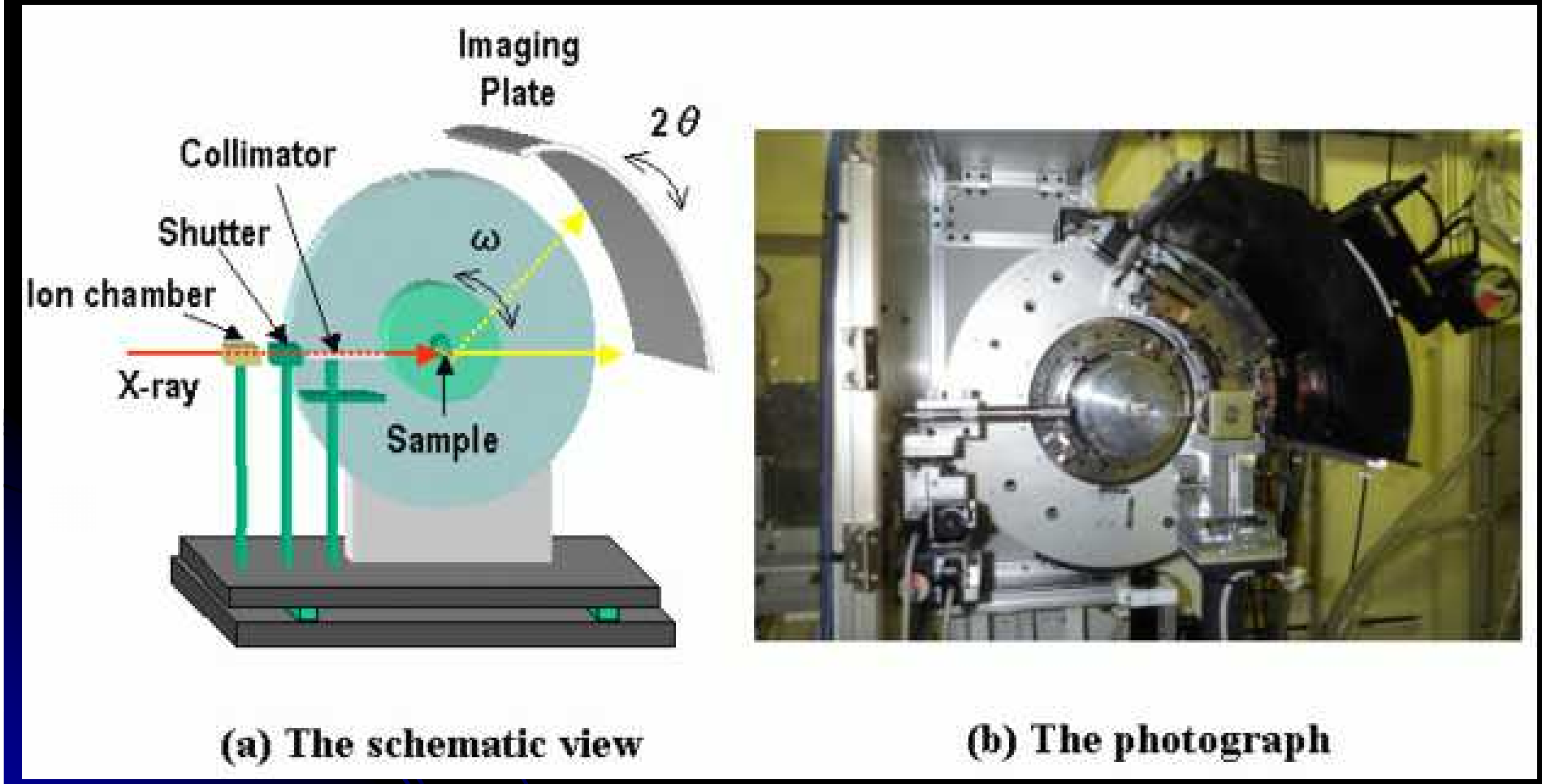
3. PHÖÔNG PHAP CHUP PHIM DEBYE – SHERRER (PHÖÔNG PHAP BOT)

- Khi chieu mot chum tia X vao mau vôi böôc song λ, bao giô cung co nhöng manh tinh the ngau nhien nam theo höôing sao cho mat mang d cua chung thoa ñieu kien Vulf – Bragg $\Rightarrow$ Khi ño no se cho tia nhieu xa. Cac tia nay nam tren ñöôing sinh cua mot non tron xoay co ñænh la mau truc la tia tôi vôi nöa goc ô ñænh la 2θ.
- Öng vôi nhöng ho mat mang d khac cua tinh the ta co cac mat nón tia nhieu xa khac nhau vôi ñieu kien $d \geq \lambda/2$ (ñe $\sin\theta \leq 1$).

$\Rightarrow$ Phöông phap bot cho phep xac ñònh ñöôc goc θ cua tia nhieu xa bôi cac ho mat mang khac nhau.

$\Rightarrow$ Tính ñöôc d qua ñieu kien Vulf – Bragg.

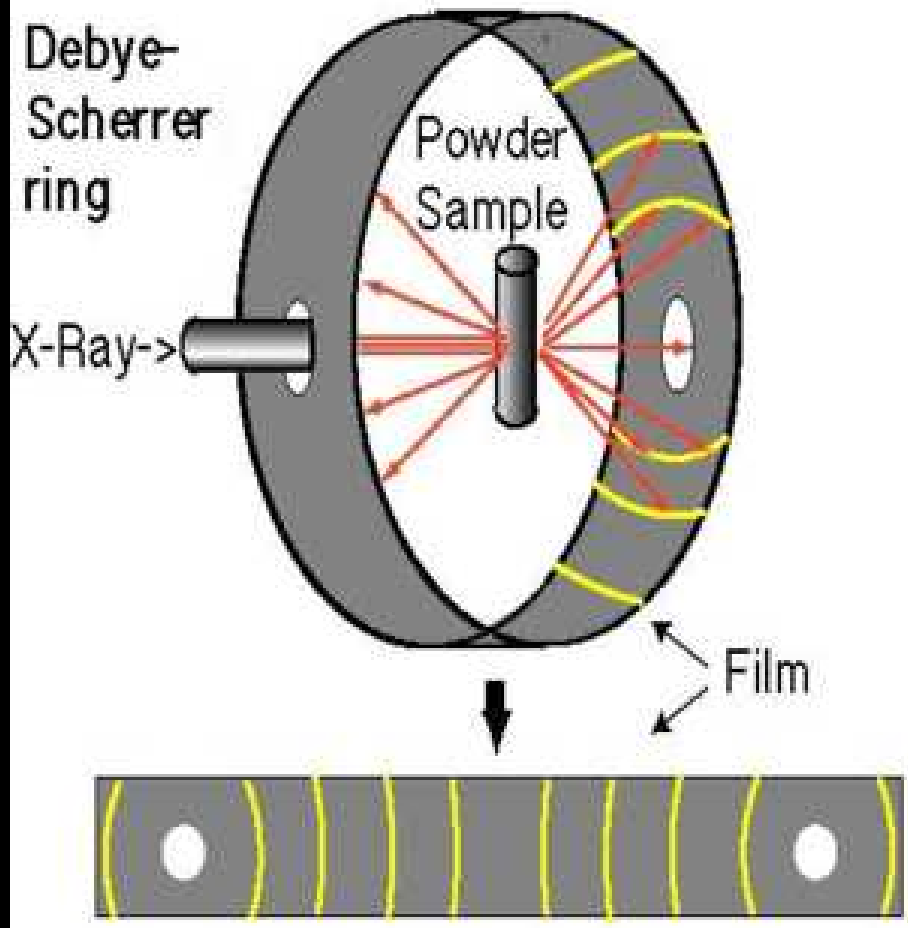
BUONG CHUP TRONG PHÖÔNG PHAP DEBYE-SCHERRY



(a) The schematic view

(b) The photograph

- Buong chup bang kim loai co mot diapham xuyen qua thanh ñe co mot chum tia X song song manh tö ngoai roi vao cot mau.
- Ñoi dien vôi diapham la mot man huynh quang nho ñe ñieu chænh buong chup cho tia X rôi vuong goc mau.
- Mau ña tinh the dang bot hoac mot so lôn cac manh tinh the nho cô 1/100 – 1/1000 mm phan bo hon ñon ñöôc nen thanh khoi, thong thöông co dang mau tru, ñöông kính 5 – 8 mm. Ngoai ra co the dùng mau phang.



Phim ñöôc lap sat thanh trong buong chup va buong chup ñöôc che toi hoan toan.

Vôi cac ho mat mang dhkl thoa ñieu kien Vulf – Bragg ta se thu ñöôc tren phim các tia nhieu xa la cac vach hình tru ñoi xöng qua vet tia tôi.

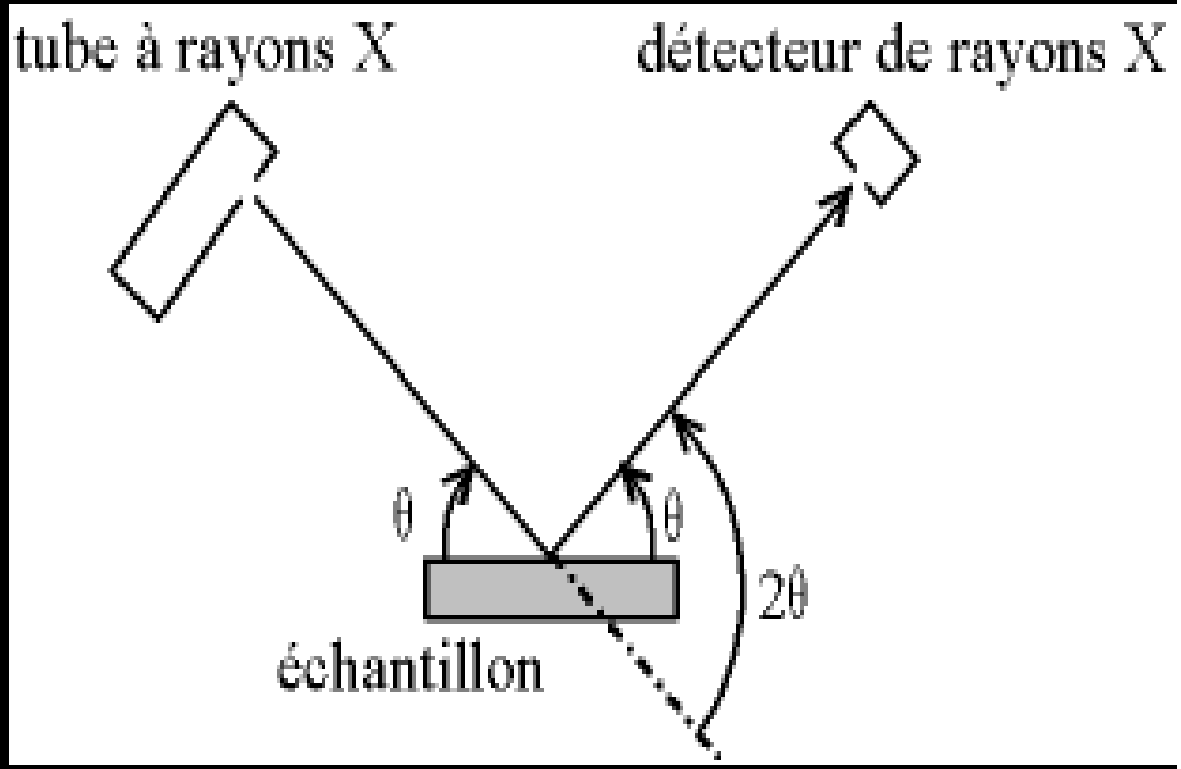
4. PHÖÔNG PHAP NHIEU XA KE (diffractometer) (PHÖÔNG PHAP ÑEM XUNG)

- La phöông phap ghi nhan anh nhieu xa Rôntgen bang cach ñem so löông xung (hoac toc ño tao xung) sinh ra trong ong ñem kieu ion hoa hoac kieu nhap nhay.

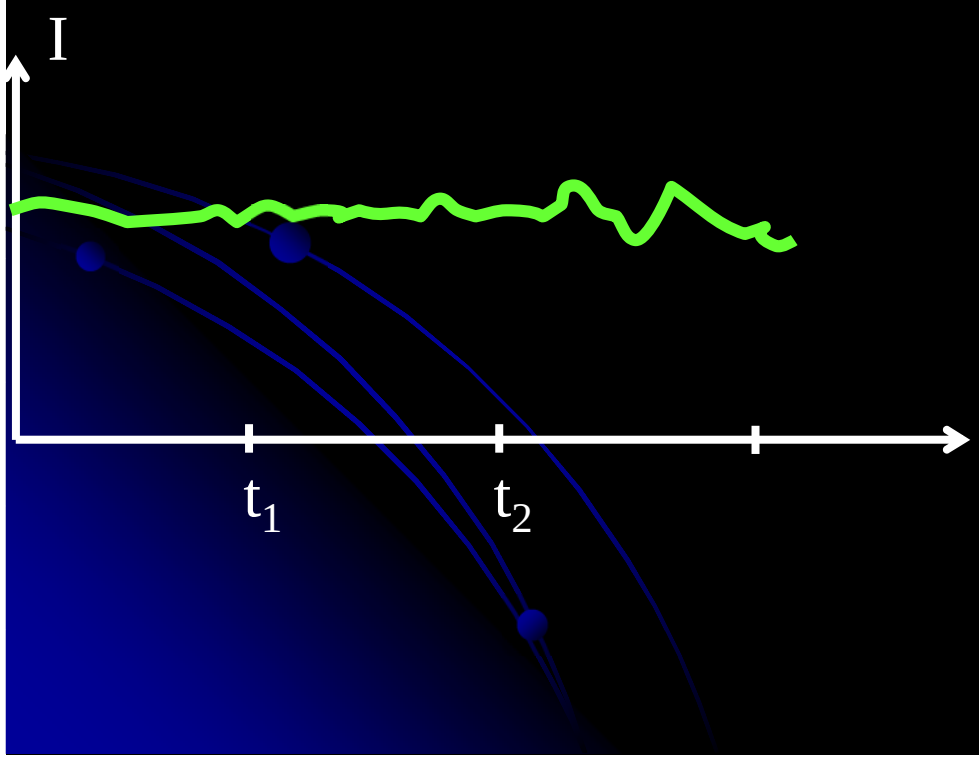
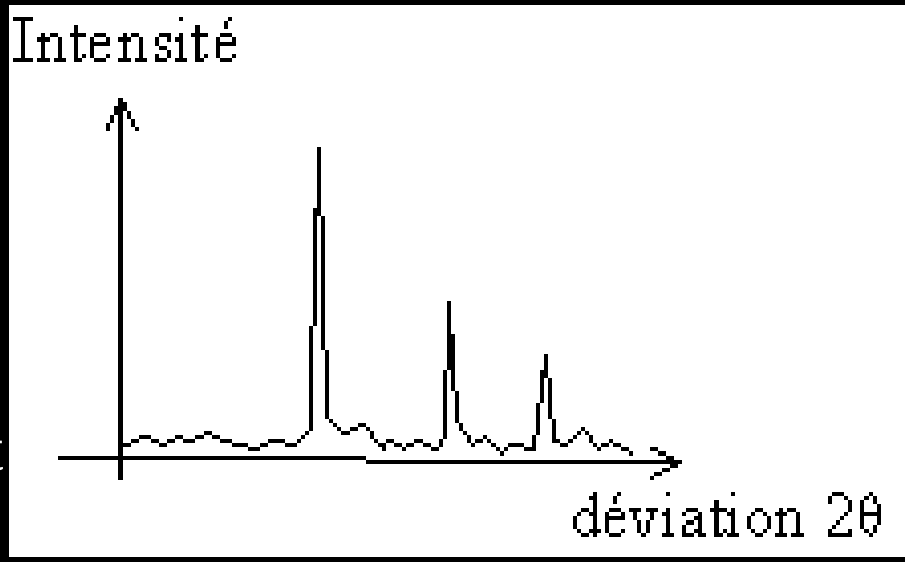
Öu ñiem:

➢ Cho phep trong vong vai chuc phut ghi ñöôc toan bo bieu ño nhieu xa cua vat lieu, trong khi ño theo phöông phap chup anh phai mat vai giô hoac lau hôn.

➢ Qua trình phan tích, gia cong so lieu thöc nghiem cung ñôn gian, nhanh chong va chính xác hôn.



- Mau: coï daïng ñóa phaúng troïn ϕ ~ 2 cm, daøy 1 – 2 mm khi chuïp maãu quay trong maët phaúng quanh truïc cuûa noù.
- Ong ñeám: Taïi vò trí nhaän tia nhieãu xaï.
- Goùc xoay: θ thay ñoåi töø O $\rightarrow$ 90^o, buoàng ion hoùa xoay theo vôùi toác ñoä goùc 2θ.
- Vò trí cuûa ong ñeám coù ñoä chính xaùc tôùi 0,01^o. Vì chæ ghi caùc vaïch nhieãu xaï naèm ôû moät phía tia tôùi neân vò trí goùc O^o phaûi thaät chính xaùc (hieäu chænh goùc O^o döïa vaøo maãu chuaån ñaõ bieát tröôùc.

Dung nhieu xa ke cho phep xac ñònh cöôøng ño tia nhieu xa cua mot vach theo thôi gian.

Bang phöông phap ion hoa, döa vao so löôïng xung tao ra trong mot ñôn vò thôi gian co the ñanh gia ñöôïc cöôøng ño cua tia Rôntgen.