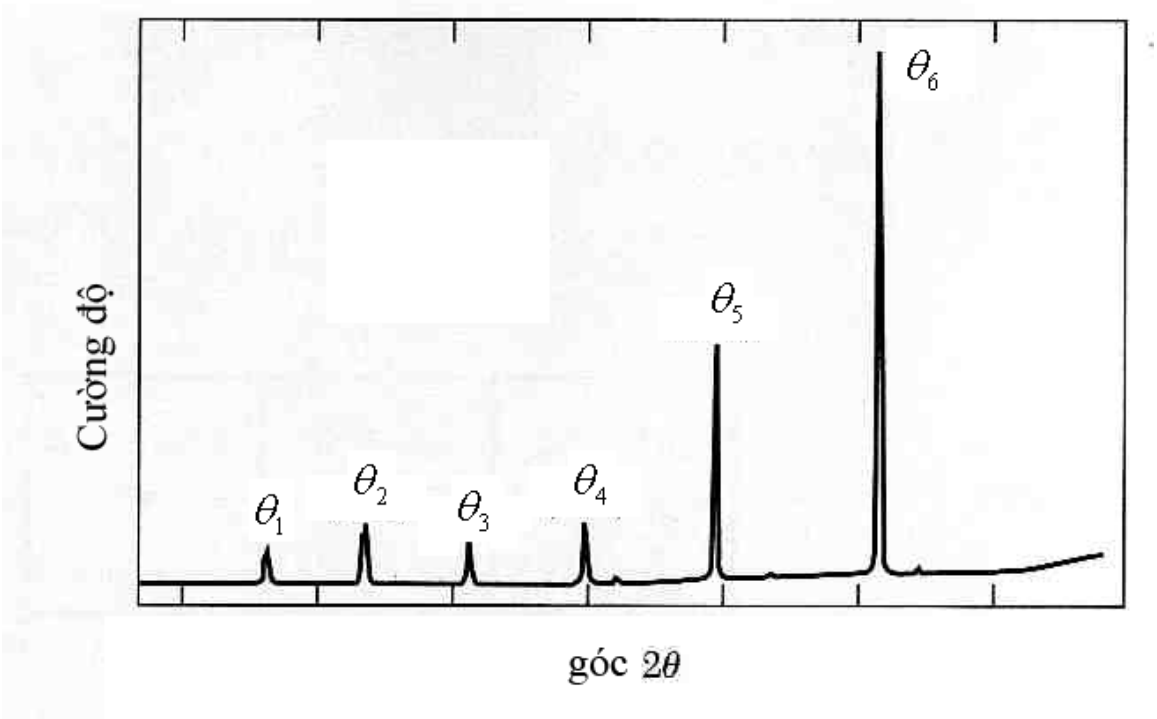
Thắc mắc về nội dung: thanhlam1910_2006@yahoo.com

Bài tập nhiễu xạ tia X dạng I (áp dụng cho hệ tinh thể lập phương).
Cho một ảnh thu được từ phương pháp nhiễu xạ bột tia X như sau:



Xác định chỉ số Miller của các họ mặt cho các vạch nhiễu xạ đó v à hằng số mạng của tinh thể. Chất đang nghiên cứu thuộc loại mạng nào?

Cần biết: 1)Chuỗi $s=h^2+k^2+l^2$ tương ứng với các số h, k, l khác nhau là chuỗi số đặc trưng cho từng loại mạng tinh thể. Cụ thể là:

- ***Mạng lập phương đơn: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 16,…..***
- ***Lập phương tâm khối: 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, ….***
- ***Lập phương tâm mặt: 3, 4, 8, 11, 12, 16,….***
- ***Lập phương kim cương: 3, 8, 11, 16, …..***

2) Mỗi loại mạng có các mặt mạng cho nhiễu xạ cực đại khác nhau.

- ***Mạng lập phương đơn: cho phép tất cả phản xạ từ các mặt (hkl).***
- ***Mạng lập phương tâm khối: chỉ cho phép các phản xạ từ các mặt có tổng chỉ số Miller là số chẵn, tức là h+k+l=2n.***
- ***Mạng lập phương tâm mặt: chỉ cho phép các phản xạ từ các mặt có chỉ số Miller hoặc đều chẵn hoặc đều lẻ.***
- ***Mạng lập phương kim cương: Cho phép các phản xạ từ các mặt có chỉ số Miller hoặc là tất cả đều lẻ hoặc tất cả đều chẵn và tổng của chúng chia hết cho 4.***

Hãy xét một số ví dụ cụ thể:

Ví dụ 1: Đề thi tháng 22-6-2005

Thắc mắc về nội dung: thanhlam1910_2006@yahoo.com

Lập bảng như sau:

	2θ	$\sin^2\theta$	$\sin^2\theta/\sin^2\theta_1$	$s = (h^2+k^2+l^2)$	Chỉ số Miller	$d = \lambda/2\sin\theta$	$a_o = d\sqrt{h^2+k^2+l^2}$	
1	44°22'	0,1426	1,000	3	111	2,040	3,533	
2	51°52'	0,1910	1,339	4	200	1,762	3,524	trung bình
3	78°24'	0,3824	2,682	8	220	1,246	3,524	là 3,531
4	99°24'	0,5209	3,653	11	311	1,067	3,538	
5	99°36'	0,5696	3,994	12	222	1,020	3,533	
6	120°48'	0,7586	5,320	16	400	0,884	3,537	

Chúng ta đã nhân 3 cột $\sin^2\theta/\sin^2\theta_1$ để được chuỗi số s trùng với chuỗi s của mạng lập phương tâm mặt (nhân sao cho được chuỗi gồm các số tròn).

Ví dụ 2: Câu 1, đề thi ngày 27-3-2007

Sau khi dùng thước đo trên ảnh nhiễu xạ, ta xác định được các góc 2 theta và lập bảng như sau:

	2θ	$\sin^2\theta$	$\sin^2\theta/\sin^2\theta_1$	$s = (h^2+k^2+l^2)$	Chỉ số Miller	$d = \lambda/2\sin\theta$	$a_o = d\sqrt{h^2+k^2+l^2}$
1	38,52	0,1088	1,000	3			
2	44,76	0,1450	1,333	4			
3	65,14	0,2898	2,664	8			
4	78,26	0,3983	3,661	11			
5	82,46	0,43444	3,993	12			
6	99,10	0,5794	5,323	16			
7	112,02	0,6876	6,320	19			
8	116,60	0,7239	6,654	20			

Ví dụ này tương tự ví dụ 1.

Ví dụ 3:

3–107 Figure 3–56 shows the results of an x-ray diffraction experiment in the form of the intensity of the diffracted peak versus the 2θ diffraction angle. If x-rays with a wavelength of 0.15418 nm are used, determine (a) the crystal structure of the metal, (b) the indices of the planes that produce each of the peaks, and (c) the lattice parameter of the metal.

Solution: The 2θ values can be estimated from Figure 3–56:

	2θ	$\sin^2\theta$	$\sin^2\theta/0.0077$	Planar indices	$d = \lambda/2\sin\theta$	$a_o = d\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$
1	17.5	0.023	3	(111)	0.5068	0.8778
2	20.5	0.032	4	(200)	0.4332	0.8664
3	28.5	0.061	8	(220)	0.3132	0.8859
4	33.5	0.083	11	(311)	0.2675	0.8872
5	35.5	0.093	12	(222)	0.2529	0.8761
6	41	0.123	16	(400)	0.2201	0.8804
7	45	0.146	19	(331)	0.2014	0.8779
8	46.5	0.156	20	(420)	0.1953	0.8734

The $\sin^2\theta$ values must be divided by 0.077 (one third the first $\sin^2\theta$ value) in order to produce a possible sequence of numbers)

(a) The 3,4,8,11, . . . sequence means that the material is FCC

(c) The average $a_o = 0.8781$ nm

3–108 Figure 3–57 shows the results of an x-ray diffraction experiment in the form of the intensity of the diffracted peak versus the 2θ diffraction angle. If x-rays with a wavelength of 0.0717 nm are used, determine (a) the crystal structure of the metal, (b) the indices of the planes that produce each of the peaks, and (c) the lattice parameter of the metal.

Solution: The 2θ values can be estimated from the figure:

	2θ	$\sin^2\theta$	$\sin^2\theta/0.047$	Planar indices	$d = \lambda/2\sin\theta$	$a_o = d\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$
1	25.5	0.047	1	(111)	0.1610	0.2277
2	36	0.095	2	(200)	0.1150	0.2300
3	44.5	0.143	3	(211)	0.0938	0.2299
4	51.5	0.189	4	(220)	0.0818	0.2313
5	58	0.235	5	(310)	0.0733	0.2318
6	64.5	0.285	6	(222)	0.0666	0.2307
7	70	0.329	7	(321)	0.06195	0.2318
8	75.5	0.375	8	(400)	0.0580	0.2322

(a) The sequence 1,2,3,4,5,6,7,8 (which includes the "7") means that the material is BCC.

(c) The average $a_o = 0.2307$ nm

EXAMPLE 3.17

The results of an X-ray diffraction experiment using X-rays with $\lambda = 0.07107$ nm show that diffracted peaks occur at the following 2θ angles:

Peak	2θ	Peak	2θ
1	20.20	5	46.19
2	28.72	6	50.90
3	35.36	7	55.28
4	41.07	8	59.42

Determine the crystal structure, the indices of the plane producing each peak, and the lattice parameter of the material.

SOLUTION

We can first determine the $\sin^2\theta$ value for each peak, then divide through by the lowest denominator, 0.0308.

Peak	2θ	$\sin^2\theta$	$\sin^2\theta/0.0308$	$h^2+k^2+l^2$	$(h\,k\,l)$
1	20.20	0.0308	1	2	(110)
2	28.72	0.0615	2	4	(200)
3	35.36	0.0922	3	6	(211)
4	41.07	0.1230	4	8	(220)
5	46.19	0.1539	5	10	(310)
6	50.90	0.1847	6	12	(222)
7	55.28	0.2152	7	14	(321)
8	59.42	0.2456	8	16	(400)

When we do this, we find a pattern of $\sin^2\theta/0.0308$ values of 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, and 8. If the material were simple cubic, the 7 would not be present, because no planes have an $h^2 + k^2 + l^2$ value of 7. Therefore, the pattern must really be 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16,... and the material must be body-centred cubic. The (hkl) values listed give these required $h^2 + k^2 + l^2$ values.

We could then use 2θ values for any of the peaks to calculate the interplanar spacing and thus the lattice parameter. Picking peak 8:

$$2\theta = 59.42 \quad \text{or} \quad \theta = 29.71$$

$$d_{400} = \frac{\lambda}{2\sin\theta} = \frac{0.07107}{2\sin(29.71)} = 0.071699 \text{ nm}$$

$$a_0 = d_{400}\sqrt{h^2+k^2+l^2} = (0.071699)(4) = 0.2868 \text{ nm}$$

This is the lattice parameter for body-centred cubic iron.

Thắc mắc về nội dung: thanhlam1910_2006@yahoo.com

Kết luận: Qua một loạt các ví dụ, chúng ta có thể thấy được phương pháp chung để giải bài toán loại này là:

-Bước 1: Tạo một bảng có dạng như sau:

	2θ	$\sin^2\theta$	$\sin^2\theta/\sin^2\theta_1$	$s=(h^2+k^2+l^2)$	Chỉ số Miller	$d=\lambda/2\sin\theta$	$a_o=d\sqrt{h^2+k^2+l^2}$
1		$\sin^2\theta_1$					
2							
3							
4							
5							
6							
7							
8							

-Bước 2: Tính các cột $\sin^2\theta$, $\sin^2\theta/\sin^2\theta_1$ một cách dễ dàng.

-Bước 3: Các phần tử trong cột *s* có thể trùng với các phần tử trong cột $\sin^2\theta/\sin^2\theta_1$ hoặc bằng một bội số nguyên lần chúng. Do đó, khi tính cột $\sin^2\theta/\sin^2\theta_1$, nếu chuỗi số nhận được không trùng với chuỗi số s nào của các loại mạng thì chúng ta phải nhân 2 hoặc 3 chúng để được chuỗi số trùng với chuỗi s của các loại mạng như đã nói ở trên.

-Chỉ số Miller được tính trên cơ sở đã biết *s* và biết các họ mặt nào có khả năng cho tia nhiễu xạ.

Thắc mắc về nội dung: thanhlam1910_2006@yahoo.com

Bảng chỉ số Miller của hệ lập phương

$h^2+k^2+l^2$	hkl			
	Đơn	Tâm mặt	Tâm khối	Kim cương
1	100			
2	110	. . .	110	
3	111	111	. . .	111
4	200	200	200	
5	210			
6	211	. . .	211	
7				
8	220	220	220	220
9	300, 221			
10	310	. . .	310	
11	311	311	. . .	311
12	222	222	222	
13	320			
14	321	. . .	321	
15				
16	400	400	400	400
17	410, 322			
18	411, 330	. . .	411, 330	
19	331	331	. . .	331
20	420	420	420	
21	421			
22	332	. . .	332	
23				
24	422	422	422	422
25	500, 430			
26	510, 431	. . .	510, 431	
27	511, 333	511, 333	. . .	511, 333
28				
29	520, 432			
30	521	. . .	521	
31				
32	440	440	440	440
33	522, 441			
34	530, 433	. . .	530, 433	
35	531	531	. . .	531
36	600, 442	600, 442	600, 442	
37	610			
38	611, 532	. . .	611, 532	
39				
40	620	620	620	620
41	621, 540, 443			
42	541	. . .	541	
43	533	533	. . .	533
44	622	622	622	
45	630, 542			
46	631	. . .	631	
47				
48	444	444	444	444
49	700, 632			

TABLE A13–1 THE ELEMENTS

Element and modification	Type of structure	Lattice parameters (A)		c or axial angle	Temperature for which constants apply	Distance of closest approach (A)
		a	b			
Actinium						
Alabamine	See Francium					
Aluminum	FCC, A1	4.0490	. . .	. . . .	20°C	2.862
Americium						
Antimony	Rhombohedral, A7	4.5064	. . .	57°6.5′	20°C	2.903
Argon	FCC, A1	5.43	. . .	. . . .	−233°C	3.84
Arsenic	Rhombohedral, A7	4.159	. .	53°49′	20°C	2 51
Astatine						
Barium	BCC, A2	5.025	. . .	. . . .	20°C	4.35
Beryllium, α*	HCP, A3	2.2854	. . .	3.5841	20°C	2.225
β (doubtful)	Hexagonal	7.1	. .	10.8	Room	
Bismuth	Rhombohedral, A7	4.7356	. . .	57°14.2′	20°C	3.111
Boron	Rhombohedral	9.45	. . .	23.8	Room	
Bromine	Orthorhombic	4.49	6.68	8.74	−150°C	2.27
Cadmium	HCP, A3	2.9787	. . .	5.617	20°C	2.979
Calcium, α	FCC, A1	5.57	. . .	. .	20°C	3.94
β (300–450°C)						
γ (>450°C)	HCP, A3	3.99	. . .	6.53	460°C	3.95
Carbon, diamond*	Diamond cubic, A4	3.568	. . .	. . .	18°C	1.544
Graphite, α*	Hexagonal, A9	2.4614	. . .	6.7014	20°C	1.42
Graphite, β	Rhombohedral, D^5_{3d}	2.461	. . .	10.064		
Cerium*	FCC, A1	5.140	. . .	. . .	Room	3.64
	FCC, A1	4.82	. . .	. . . .	−180°C	3.40
At 15,000 atm	FCC, A1	4.84	. . .	. . . .	Room	3.42
Cesium	BCC, A2	6.06	. . .	. . . .	−173°C	5.25
Chlorine, α	Tetragonal	8.58	. . .	6.13	−110°C	1.88
Chromium	BCC, A2	2.8845	. . .	. . . .	20°C	2.498
(Transit. at 37°C)	BCC, A2	2.8851	. . .	. . . .	38°C	
Cobalt, α*	HCP, A3	2.507	. . .	4.069	20°C	2.506
β	FCC, A1	3.552	. . .	. . . .	Room	2.511
Columbium	See Niobium					
Copper	FCC, A1	3.6153	. . .	. . . .	20°C	2.556
Dysprosium	HCP, A3	3.585	. . .	5.659	20°C	3.506
Erbium	HCP, A3	3.539	. . .	5.601	20°C	3.466
Europium	BCC, A2	4.582	. . .	. . . .	20°C	2.968
Francium	(Formerly Alabamine)					
Gadolinium	HCP, A3	3.629	. . .	5.759	20°C	3.561
Gallium	One FC orthorhombic, A11	3.526	4.520	7.660	20°C	2.442
Germanium	Diamond cubic, A4	5.658	. . .	. . . .	20°C	2.450
Gold	FCC, A1	4.0783	. . .	. . . .	20°C	2.884
Hafnium	HCP, A3	3.206	. . .	5.087	20°C	3.15
Helium	HCP, A3 (?)	3.58	. . .	5.84	−271.5°C	3.58
Holmium	HCP, A3	3.564	. . .	5.631	20°C	3.487

(cont.)

* Ordinary form of an element that exists (or is thought to exist) in more than one form.

Element and modification	Type of structure	Lattice parameters (A) a	Lattice parameters (A) b	c or axial angle	Temperature for which constants apply	Distance of closest approach (A)
Hydrogen, para	Hexagonal	3.76	. .	6.13	−271°C	
Illinium	See Promethium					
Indium	FC tetragonal, A6	4.594	. . .	4.951	20°C	3.25
Iodine	Orthorhombic	4.787	7.266	9.793	20°C	2.71
Iridium	FCC, A1	3.8389	. .	. . . .	20°C	2.714
Iron, α*	BCC, A2	2.8664	. . .	. . . .	20°C	2.481
γ (extrapolated)	FCC, A1	3.571	. . .	. . . .	20°C	2.525
γ (908 – 1403°C)	. . . . .	3.656	. . .	. . . .	950°C	2.585
δ (> 1403°C)	BCC, A2	2.94	. . .	. . . .	1425°C	2.54
Krypton	FCC, A1	5.69	. . .	. . . .	−191°C	4.03
Lanthanum, α*	HCP, A3	3.762	. .	6.075	20°C	3.74
β	FCC, A1	5.307	. .	. . . .	Room	3.762
Lead	FCC, A1	4.9495	. . .	. . . .	20°C	3.499
Lithium	BCC, A2	3.5089	. . .	. . . .	20°C	3.039
(cold worked)	FCC, A1	4.40	. . .	. . . .	−195°C	3.11
	HCP, A3 (?)	3.08	. . .	4.82	−195°C	3.08
Lutecium	HCP, A3	3.516	. .	5.570	20°C	3.446
Magnesium	HCP, A3	3.2092	. . .	5.2103	20°C	3.196
Manganese, α*	Cubic, A12	8.912	. . .	. . . .	20°C	2.24
β (727 – 1095°C)	Cubic, A13	6.313	. . .	. . . .	Room	2.373
γ (1095 – 1133°C)	FC tetragonal, A6	3.782	. .	3.533	Room	2.587
δ (> 1133°C)						
Masurium	(Technetium)					
Mercury	Rhombohedral, A11	2.006	. . .	70°31.7′	−46°C	3.006
Molybdenum	BCC, A2	3.1466	. . .	. . .	20°C	2.725
Neodymium, α*	HCP, A3 (?)	3.657	. . .	. . . .	20°C	5.902
Neon	FCC, A1	4.51	. . .	. . . .	−268°C	3.21
Neptunium						
Nickel*	FCC, A1	3.5238	. . .	. . . .	20°C	2.491
(unstable, with H_2 or N_2?)	HCP, A3	2.66	. . .	4.32	Room	
(unstable) (?)	Tetragonal, D^{17}_{4h}	4.00	. . .	3.77	Room	
Niobium	BCC, A2	3.3007	. . .	. . . .	. . . . .	2.859
Nitrogen, α	Cubic	5.67	. . .	. . . .	−252°C	1.06
β	Hexagonal	4.04	. . .	6.60	−234°C	
Osmium	HCP, A3	2.7333	. . .	4.3191	. . . . .	2.675
Oxygen, α	Orthorhombic	5.51	3.83	3.45	−252°C	
β	Rhombohedral	6.20	. . .	99.1°	−238°C	
γ	Cubic	6.84	. . .	. . . .	−225°C	
Palladium	FCC, A1	3.8902	. . .	. . . .	20°C	2.750
Phosphorus, white	Cubic	7.18	. . .	. . . .	−35°C	
Black*	Orthorhombic, A16	3.32	4.39	10.52	Room	2.17
Platinum	FCC, A1	3.9237	. . .	. . . .	20°C	2.775
Plutonium						
Polonium, α	Simple cubic	3.345	. . .	. . . .	. . . . .	3.35
β (above 75°C)	Simple rhombohedral	3.359	. . .	98°13′	. . . . .	4.40
Potassium	BCC, A2	5.344	. . .	. . . .	20°C	4.627
Praseodymium, α*	HCP, A3 (?)	3.669	. . .	5.920	20°C	3.640
β	FCC, A1	5.161	. . .	. . . .	Room	3.649
Promethium						
Protactinium						
Radium						
Radon						

(*cont.*)

* Ordinary form of an element that exists (or is thought to exist) in more than one form.

Element and modification	Type of structure	Lattice parameters (A)		c or axial angle	Temperature for which constants apply	Distance of closest approach (A)
		a	b			
Rhenium	HCP, A3	2.7609	. . .	4.4583	20°C	2.740
Rhodium, β*	FCC, A1	3.8034	. . .	. . . .	20°C	2.689
α (electrolytic)	Cubic	9.230	. . .	. . . .	Room	
Rubidium	BCC, A2	5.63	. .	. . . .	−173°C	4.88
Ruthenium, α*	HCP, A3	2.7038	. . .	4.2816	20°C	2.649
Samarium	FC tetragonal (?)					
Scandium, α*	FCC, A1	4.541	. . .	. . . .	20°C	3.2110
β	HCP, A3	3.31	. . .	5.24	Room	3.24
Selenium* (gray, stable, metallic)	Hexagonal, A8	4.3640	. . .	4.9594	20°C	2.32
α (red, metastable)	Monoclinic, $P2_1$.	9.05	9.07	$\begin{cases}\beta = 90°46' \\ 11.61\end{cases}$	Room	2.34
β (red, metastable)	Monoclinic, C^5_{2h} or C^1_{2h} or C^2_2	12.76	8.06	$\begin{cases}\beta = 93°4' \\ 9.27\end{cases}$	Room	
Silicon	Diamond cubic, A4	5.4282	. . .	. . .	20°C	2.351
Silver	FCC, A1	4.0856	. . .	. . . .	20°C	2.888
Sodium	BCC, A2	4.2906	. . .	. . . .	20°C	3.715
Strontium	FCC, A1	6.087	. . .	. . . .	20°C	4.31
Sulfur, α, yellow*	Orthorhombic, A17	10.50	12.94	24.60	20°C	2.12
β	Monoclinic	10.92	11.04	$\begin{cases}\beta = 83°16' \\ 10.98\end{cases}$	103°C	
Tantalum	BCC, A2	3.3026	. . .	. . . .	20°C	2.860
Tellurium	Hexagonal, A8	4.4559	. . .	5.9268	20°C	2.87
Terbium	HCP, A3	3.592	. . .	5.675	20°C	3.515
Thallium, α*	HCP, A3	3.4564	. .	5.531	Room	3.407
β	BCC, A2	3.882	. . .	. . . .	262°C	3.362
Thorium	FCC, A1	5.088	. . .	. . . .	20°C	3.60
Thulium	HCP	3.530	. . .	5.575	20°C	3.453
Tin, α, gray	Diamond cubic, A4	6.47	. . .	. . .	18°C	2.81
β, white*	Tetragonal, A5	5.8311	. . .	3.1817	20°C	3.022
Titanium, α*	HCP, A3	2.9504	. . .	4.6833	25°C	2.89
β	BCC, A2	3.33	. . .	. . . .	900°C	2.89
Tungsten (wolfram), α*	BCC, A2	3.1648	. . .	. . . .	20°C	2.739
β (unstable)	Cubic, A15	5.049	. . .	. . . .	20°C	2.524
Uranium, α* (≤ 665°C)	Orthorhombic, A20	2.858	5.877	4.955	20°C	2.77
β (665–775°C)	Low symmetry					
γ (775–1130°C)	BCC, A2	3.49	. . .	. . . .	800°C	3.02
Vanadium	BCC, A2	3.039	. . .	. . . .	20°C	2.632
Virginium	See Astatine					
Wolfram	See Tungsten					
Xenon	FCC, A1	6.25	. . .	. . . .	−185°C	4.42
Ytterbium	FCC, A1	5.488	. . .	. . . .	. . . .	3.874
Yttrium	HCP, A3	3.670	. . .	5.826	. . . .	3.60
Zinc	HCP, A3	2.664	. . .	4.945	. . . .	2.664
Zirconium, α*	HCP, A3	3.230	. .	5.133	. . . .	3.17
β	BCC	3.62	. . .	. . .	867°C	3.13

* Ordinary form of an element that exists (or is thought to exist) in more than one form.

From *Structure of Metals*, 2nd edition, by Charles S. Barrett (McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1952).