

# 현대물리실험 실험5 보고서

## 전자의 회절 및 XRD

DEPARTMENT OF PHYSICS 202100973 이승엽

June 22, 2023

Date Performed:	May 30, 2023
Partners:	202100969 이규리 202100989 한누리
Instructor:	Professor 이기주
Typesetting:	LaTeX
Datafitting:	OriginLab & Python

## 1 Introduction

1. 전자의 회절 격자에 대해 조사한다.
2. 회절 무늬를 관측하여 흑연의 interplanar spacing을 측정한다.
3. X-선을 사용하여 브래그 각을 측정하고, 그 특성 동 선의 에너지 값을 계산하고, 비교한다.

## 2 Theory

파동으로서의 전자: 운동량  $p$ 를 갖고 있는 전자의 파장은 드브로이 방정식에 의하면

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1)$$

이다. 또 운동량  $p$ 는 전자를 가속한 전압이  $V$ 라 할 때 운동 에너지의 식에서부터 구할 수 있다.

$$K = \frac{p^2}{20} = eV \quad (2)$$

로 두 수식을 연립하면

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meV}} \quad (3)$$

가 된다. 참고로 여기서 사용되는 전압 범위에서는 상대론적 질량과 고전적인 질량의 차이는 0.5% 보다 작다.

회절 무늬: 전자가 구리(금속입자:Cu) grating에 입혀진 다결정 흑연박막에 부딪치면 브레그 조건에 따라 반사된다.  $n$ 이 자연수 1, 2, 3, ...일 때,

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (4)$$

가 된다.

흑연 결정의 구조와 회절격자 사이의 거리는 Fig. 1, 2와 같다

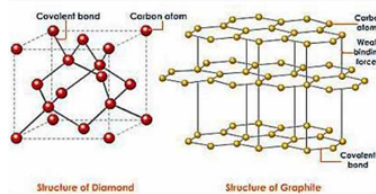


Figure 1: 다이아몬드와 흑연 결정(graphite)의 구조 차이.

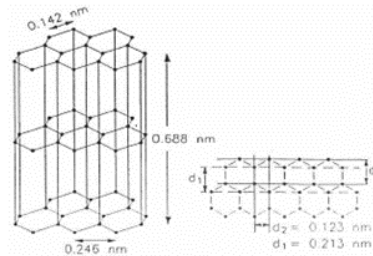


Figure 2: 흑연 격자 간 거리.

다결정 흑연에서는 각각의 층(layer)사시의 결합(bond)이 깨져서 그 방향

이 제멋대로이다. 따라서 전자빔(또는 전자선)은 원뿔모양의 cone처럼 퍼져서 진행하며 회절무늬를 형광판에 원으로 나타낸다. 브래그각  $\theta$ 는 원 모양의 회절 무늬의 반지름에서 측정할 수 있다. (단, Fig. 3에서 원의 특성에 의해  $\alpha = 2\theta$ 임을 알고 있어야 한다.) 따라서

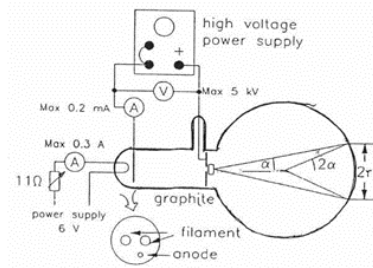


Figure 3: 실험장치의 개략도.

$$\sin 2\alpha = \frac{D_n}{R} \quad (5)$$

이 된다. 여기서  $R$ 은 유리 전구의 반지름으로  $2R = L$ 이다. 만약  $\alpha$ 가 매우 작다면 삼각함수의 특성에 의해

$$D_n = \frac{2Rn\lambda}{d} \quad (6)$$

XRD 분석이란 X-ray를 원하는 시편에 회절시켜 시편의 내부 정보를 그래프로 나타내는 분석법이다. 보통 최종 결과물은 아래의 그림 그래프와 같다. X축은  $2\theta$ 로 Y축은 intensity라는 값으로 그래프로 나타내며 여러 상들의 고유한 각도에서 peak값이 나타나 시편 속에 어떠한 phase로 이루어져 있는지 확인할 수 있는 분석 방법이다.

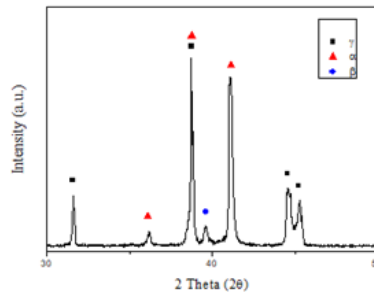


Figure 4

### 3 Experimental Method

#### 실험1. 전자의 회절

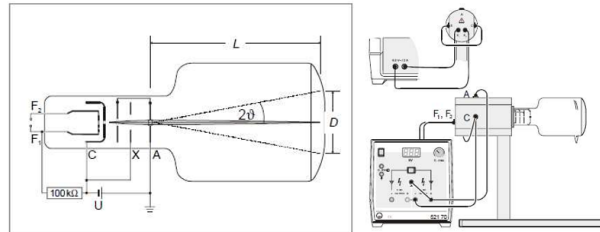


Figure 5

1. F1과 F2를 110V 전용 high-voltage power supply로 10 kV 걸어준다.
2. C와 X 커넥터를 주황색 power supply의 음극에 연결한다.
3. A 커넥터를 주황색 power supply의 양극에 연결한다.
4. 주황색 power supply의 전압을 서서히 올려준다. (이 전압을 accelerating voltage  $U$ 라고 한다.)
5. Accelerating voltage  $U$ 를 2 kV에서 5 kV까지 0.5 kV간격으로 올려주며 스크린에 비춘 원형고리의 지름  $D_1$ 과  $D_2$ 를 버니어 캘리퍼스로 측정한다.

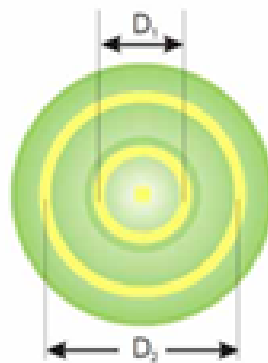


Figure 6

#### 실험2. XRD

1. 셋팅되어 있는 XRD 기기와 데이터 프로그램 measure을 실행한다.

2. 결정립 LiF, KBr을 측정할 것이다.
3. 1:2 coupling mode, Gate time 2 s; angle step width 0.1 degree로 한다.
4. Scanning range from 4 to 55 degree (LiF), and from 3 to 75 degree (KBr).
5. Anode voltage 35 kV; anode current 1 mA.
6. 양자화되어 있는 에너지 준위를 계산한다.

## 4 Result and Discussion

### 실험1. 전자의 회절

Table 1: Accelerating voltage  $U$ 에 따른 회절 지름

$U$ (kV)	$D_1$ (cm)	$D_2$ (cm)
3.5	2.90	4.78
4.0	2.75	4.55
4.5	2.66	4.26
5.0	2.51	4.00
5.5	2.42	3.73
6.0	2.24	3.47
6.5	2.24	3.27

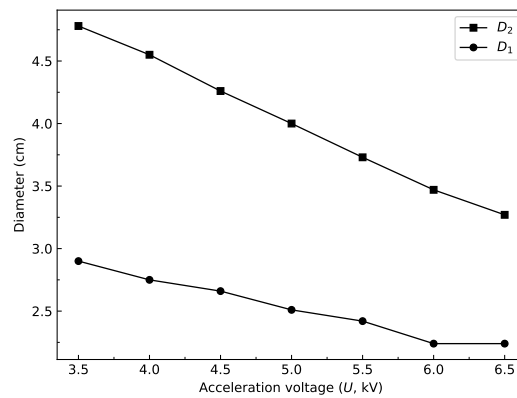


Figure 7

가속 전압이 올라갈수록 회절 지름이 선형적으로 감소함을 보인다. 이때,  $D_2$ 가  $D_1$ 보다 크게 줄어든다.

## 실험2. XRD

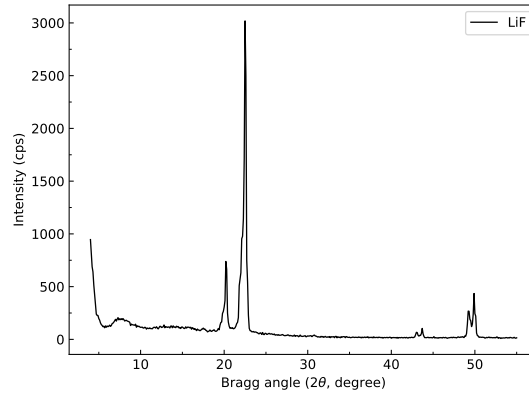


Figure 8

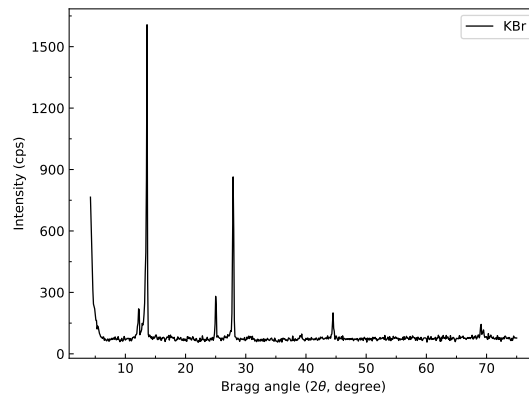


Figure 9

Table 2

LiF		KBr	
2θ (degree)	FWHM	2θ (degree)	FWHM
20.2	0.26981	12.2	0.24536
22.5	0.41468	13.6	0.16384
42.1	2.86019	25.0	0.19983
43.9	6.21849E-4	27.9	0.24018
49.3	0.44567	39.1	0.57649
49.9	0.34325	44.5	0.24495
		69.2	0.71129

Table 2에 따라 에너지 레벨에 맞춰 peak가 생김을 알 수 있다.

## 5 Conclusions

실험1은 에너지에 따라 회절이 많이 됨을 알 수 있다. 실험2는 X-ray를 쏘아 각도에 따라 물질마다 에너지 레벨이 보임을 알 수 있다.

## 6 Source code for Python fitting

```

1 import matplotlib.pyplot as plt
2 import matplotlib.ticker as tck
3 import numpy as np
4 from numpy import genfromtxt
5 from matplotlib.ticker import MultipleLocator, IndexLocator, FuncFormatter,
↳ FormatStrFormatter
6 from matplotlib.dates import MonthLocator, DateFormatter
7 from matplotlib.transforms import Bbox
8
9 # Data1
10 data = genfromtxt('data1.csv', delimiter=',', encoding='UTF8', dtype=float)
11 ## 모든(:) column=0, 1, 2에 대해 row=0, 1, 2을 출력
12 X = data[:, 0]
13 Y1 = data[:, 1]
14 Y2 = data[:, 2]
15
16 # Figure
17 fig, ax = plt.subplots()
18 plt.plot(X, Y2, label='$D_2$', color='k', marker='s', markersize=5,
↳ linestyle='solid', linewidth=1)
19 plt.plot(X, Y1, label='$D_1$', color='k', marker='o', markersize=5,
↳ linestyle='solid', linewidth=1)
20 plt.xlabel('Acceleration voltage ($U$, kV)')
21 plt.ylabel('Diameter (cm)')
22
23 # Place a legend on the Axes. (location=0='best')
24 plt.legend(loc=0)
25
26 # Figure tick setting
27 plt.tick_params(axis='x', labelsize=10, direction='in')
28 plt.tick_params(axis='y', labelsize=10, direction='in')
29 ax.tick_params(axis='x', which='minor', bottom=True, direction='in')
30 ax.tick_params(axis='y', which='minor', left=True, direction='in')
31 ## x값이 n의 배수일 때마다 메인 눈금 표시
32 ax.xaxis.set_major_locator(MultipleLocator(.5))
33 ax.yaxis.set_major_locator(MultipleLocator(.5))
34 ## 메인 눈금이 표시될 형식
35 ax.xaxis.set_major_formatter('{x}')
36 ax.yaxis.set_major_formatter('{x}')
37 ## 서브 눈금은 x값이 n의 배수인 경우마다 표시
38 ax.xaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(.25))
39 ax.yaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(.25))
40
41 # Plot show
42 plt.show()

```

Listing 1: Example from external file



```

1 import matplotlib.pyplot as plt
2 import matplotlib.ticker as tck
3 import numpy as np
4 from numpy import genfromtxt
5 from matplotlib.ticker import MultipleLocator, IndexLocator, FuncFormatter
6 from matplotlib.dates import MonthLocator, DateFormatter
7
8 # Data2-1
9 data = genfromtxt('data2-1.csv', delimiter=',', encoding='UTF8')
10 ## from row=3 to infity, column=0에 대해 row=0을 출력
11 X = data[3:, 0]
12 ## from row=3 to infity, column=1에 대해 row=1을 출력
13 Y = data[3:, 1]
14
15 # Figure
16 fig, ax = plt.subplots()
17 plt.plot(X, Y, label='LiF', color='k', linestyle='solid', linewidth=1)
18
19 # Figure title
20 plt.xlabel('Bragg angle (2$\theta$, degree)')
21 plt.ylabel('Intensity (cps)')
22
23 # figure tick setting
24 plt.tick_params(axis='x', labelsize=10, direction='in')
25 plt.tick_params(axis='y', labelsize=10, direction='in')
26
27 # Place a legend on the Axes. (location=0='best')
28 plt.legend(loc=0)
29
30 # figure minor tick setting
31 ax.tick_params(axis='x', which='minor', bottom=True, direction='in')
32 ax.tick_params(axis='y', which='minor', left=True, direction='in')
33 ## x값이 5의 배수일 때마다 메인 눈금 표시
34 ax.xaxis.set_major_locator(MultipleLocator(10))
35 ax.yaxis.set_major_locator(MultipleLocator(500))
36 ## 메인 눈금이 표시될 형식
37 ax.xaxis.set_major_formatter('{x:.0f}')
38 ax.yaxis.set_major_formatter('{x:.0f}')
39 ## 서브 눈금은 x값이 n의 배수인 경우마다 표시
40 ax.xaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(5))
41 ax.yaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(250))
42
43 # Plot show
44 plt.show()

```

Listing 2: Example from external file

```

1 import matplotlib.pyplot as plt
2 import matplotlib.ticker as tck
3 import numpy as np
4 from numpy import genfromtxt
5 from matplotlib.ticker import MultipleLocator, IndexLocator, FuncFormatter
6 from matplotlib.dates import MonthLocator, DateFormatter
7
8 # Data2-2
9 data = genfromtxt('data2-2.csv', delimiter=',', encoding='UTF8')
10 ## from row=15 to infity, column=0에 대해 row=0을 출력
11 X = data[15:, 0]
12 ## from row=15 to infity, column=1에 대해 row=1을 출력
13 Y = data[15:, 1]
14
15 # Figure
16 fig, ax = plt.subplots()
17 plt.plot(X, Y, label='KBr', color='k', linestyle='solid', linewidth=1)
18
19 # Figure title
20 plt.xlabel('Bragg angle (2$\theta$, degree)')
21 plt.ylabel('Intensity (cps)')
22
23 # figure tick setting
24 plt.tick_params(axis='x', labelsize=10, direction='in')
25 plt.tick_params(axis='y', labelsize=10, direction='in')
26
27 # Place a legend on the Axes. (location=0='best')
28 plt.legend(loc=0)
29
30 # figure minor tick setting
31 ax.tick_params(axis='x', which='minor', bottom=True, direction='in')
32 ax.tick_params(axis='y', which='minor', left=True, direction='in')
33 ## x값이 5의 배수일 때마다 메인 눈금 표시
34 ax.xaxis.set_major_locator(MultipleLocator(10))
35 ax.yaxis.set_major_locator(MultipleLocator(300))
36 ## 메인 눈금이 표시될 형식
37 ax.xaxis.set_major_formatter('{x:.0f}')
38 ax.yaxis.set_major_formatter('{x:.0f}')
39 ## 서브 눈금은 x값이 n의 배수인 경우마다 표시
40 ax.xaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(5))
41 ax.yaxis.set_minor_locator(MultipleLocator(150))
42
43 # Plot show
44 plt.show()

```

Listing 3: Example from external file