

1 温度因子

温度因子 (Thermal parameters), 又称原子位移因子 (Atomic displacement parameters), 用来描述原子的热振动引起原子散射能力的减弱。

晶体中的原子在平衡位置附近不停的振动, 并且振动幅度随着温度的增加而增大。原子热振动幅度越大, 对 X 射线的散射能力就会越弱。德拜首先提出热运动对衍射强度的影响之后, 沃勒又进行了进一步修正, 给出了热振动对衍射强度减弱的系数为 $e^{-2B \sin^2 \theta / \lambda^2}$, 其中 B 就是温度因子。

温度因子 B 与原子振幅 u 的关系为: $B = 8\pi^2 \overline{u^2}$ 。令 $U = \overline{u^2}$, 则有 $B = 8\pi^2 U$, 因此 U 也能够代表温度对原子散射能力的影响。 B 值一般认为在 1.0 \AA^2 左右: 对于金属氧化物中结合比较紧密的原子, 它的典型值约为 0.5 \AA^2 , 然而对于有机分子等结构, 典型值增加到 $3 \sim 5 \text{ \AA}^2$ 。对一个结构良好的化合物, 其中原子的振动接近于各向同性, 因此在 XRD 精修时主要考虑各向同性温度因子 $B_{\text{iso}}/U_{\text{iso}}$ 就足够了。

加入温度对原子散射能力的影响之后, 完整的结构因子可以表达为:

$$F = \sum_n f_n N_n \exp\{2\pi i(hx + ky + lz)\} \exp(-2B \sin^2 \theta / \lambda^2)$$

其中 N_n 表示原子在某个位置的占有率。