附錄

MgB$_2$ 的結構為 hexagonal 結構，其晶格常數與不同的平面間距有以下的關係：

$$\frac{1}{D_{hkl}^2}=\frac{4}{3}\left(\frac{h^2+hk+k^2}{a^2}\right)+\frac{\ell^2}{c^2}$$

若令 $\overline{y_j}=\frac{1}{D_{hkl}^2}$，其中 j 代表任一個 hkl 平面

又令 $x_{1j}=\frac{4}{3}\left(h^2+hk+k^2\right)$，$x_{2j}=\ell^2$，$b_1=\frac{1}{a^2}$，$b_2=\frac{1}{c^2}$，則原式可改寫為：$\overline{y_j}=b_1x_{1j}+b_2x_{2j}$

又由布拉格原理可得 $\frac{1}{d_{hkl}^2}=\frac{4}{\lambda^2}\sin^2\theta$，令 $\frac{1}{d_{hkl}^2}=y_j$

由於實驗儀器不可能完全精準，由繞射角度所求得的平面間距與由平面間距公式求得的平間間距必定有些微差距，因此 y_j 與 $\overline{y_j}$ 的值也不同。根據最小平方法，令 $f(b_1,b_2)=\sum_j\left(y_j-\overline{y_j}\right)^2$，求出 $f(b_1,b_2)$ 極小值，當 $f(b_1,b_2)$ 有極小值時，應滿足 $f(b_1,b_2)$ 對 b_1、b_2 的偏微分皆為零，所以可得到下列二式：

$$\begin{cases}\frac{\partial f}{\partial b1}\Rightarrow\left(\sum_j x_{1j}^2\right)b_1+\left(\sum_j x_{1j}x_{2j}\right)b_2=\sum_j x_{1j}y_j\\[2ex]\frac{\partial f}{\partial b2}\Rightarrow\left(\sum_j x_{1j}x_{2j}\right)b_1+\left(\sum_j x_{2j}^2\right)b_2=\sum_j x_{2j}y_j\end{cases}$$

經由解聯立方程式後可以得到：

$$\begin{cases} b_1 = \dfrac{\left(\sum_j x_{1j} y_j\right)\left(\sum_j x_{2j}^2\right) - \left(\sum_j x_{2j} y_j\right)\left(\sum_j x_{1j} x_{2j}\right)}{\left(\sum_j x_{1j}^2\right)\left(\sum_j x_{2j}^2\right) - \left(\sum_j x_{1j} x_{2j}\right)^2} \\ \\ b_2 = \dfrac{\left(\sum_j x_{2j} y_j\right)\left(\sum_j x_{1j}^2\right) - \left(\sum_j x_{1j} y_j\right)\left(\sum_j x_{1j} x_{2j}\right)}{\left(\sum_j x_{1j}^2\right)\left(\sum_j x_{2j}^2\right) - \left(\sum_j x_{1j} x_{2j}\right)^2} \end{cases}$$

再由 $a = \sqrt{\dfrac{1}{b_1}}$ 、$c = \sqrt{\dfrac{1}{b_2}}$ ，便可以算出算出樣品的晶格常數。

而在 a 、c 誤差的估計上則是利用誤差傳播來計算，由於 $\overline{y_j} = b_1 x_{1j} + b_2 x_{2j}$ ，因此可得到 b_1 、b_2 的誤差為：

$$\sigma_{b_1}^2 = \sum_j \left(\frac{\partial b_1}{\partial \overline{y}_j}\right)^2 s_y^2 \quad , \quad \sigma_{b_2}^2 = \sum_j \left(\frac{\partial b_2}{\partial \overline{y}_j}\right)^2 s_y^2$$

其中

$$\begin{cases} \dfrac{\partial b_1}{\partial \overline{y}_j} = \dfrac{x_{1j}\left(\sum_j x_{2j}^2\right) - x_{2j}\left(\sum_j x_{1j} x_{2j}\right)}{\left(\sum_j x_{1j}^2\right)\left(\sum_j x_{2j}^2\right) - \left(\sum_j x_{1j} x_{2j}\right)^2} \\ \\ \dfrac{\partial b_2}{\partial \overline{y}_j} = \dfrac{x_{2j}\left(\sum_j x_{1j}^2\right) - x_{1j}\left(\sum_j x_{1j} x_{2j}\right)}{\left(\sum_j x_{1j}^2\right)\left(\sum_j x_{2j}^2\right) - \left(\sum_j x_{1j} x_{2j}\right)^2} \\ \\ s_y^2 = \dfrac{\sum_j \left(y_j - \overline{y}_j\right)^2}{N-3} \end{cases}$$

，N 為納入計算的繞射峰數目

再由$\sigma_a^2=\frac{\sigma_{b_1}^2}{4b_1^3}$， $\sigma_C^2=\frac{\sigma_{b_2}^2}{4b_2^3}$，可以求出晶格常數a、c的誤差。

若將角度的誤差△θ考慮進晶格常數誤差的計算中，由布拉格定理

$2d_{hkl}\sin\theta=\lambda$，可得$\overline{y}_j=\frac{1}{d_{hkl}^2}=\frac{4}{\lambda^2}\sin^2\theta$，兩邊微分後可得到：

$\triangle\overline{y}_j=\left(\frac{4}{\lambda^2}\sin 2\theta\right)\triangle\theta$，將$\triangle\overline{y}_j$併入誤差的計算式中，由於不同繞

射面的$\triangle\overline{y}_j$不同，因此此時的$\sigma_{b_1}^2$、$\sigma_{b_2}^2$改為：

$$\sigma_{b_1}^2=\sum_j\left(\frac{\partial b_1}{\partial\overline{y}_j}\right)^2 s_j^2\ ，\sigma_{b_2}^2=\sum_j\left(\frac{\partial b_2}{\partial\overline{y}_j}\right)^2 s_j^2$$

其中$s_j^2=s_y^2+\triangle\overline{\mathrm{y}}_{\mathrm{j}}^2$，如此即可計算出晶格常數的誤差。