



高等院校石油天然气类规划教材

现代分析测试方法

王斌 陈集 饶小桐 编



石油工业出版社
Petroleum Industry Press

高等院校石油天然气类规划教材

现代分析测试方法

王 斌 陈 集 饶小桐 编

石油工业出版社

内 容 提 要

本书较为详细地介绍了 X 射线衍射分析、电子显微分析、热分析、紫外吸收光谱法、红外吸收光谱法、激光拉曼光谱法、核磁共振波谱法、质谱法等的基本原理、仪器结构和实验方法,着重讨论了上述方法在材料组成和结构分析、表面和界面分析以及有机化合物的结构鉴定等方面的应用。本书还扼要介绍了 30 余种常用现代分析测试方法的工作原理和应用特点。

本书可以作为高等院校材料、化学、医药、食品、环境保护、石油、地质、化工等专业本科生和研究生的教材或参考书,也可供涉及分析测试工作的有关人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

现代分析测试方法 / 王斌, 陈集, 饶小桐编.
北京: 石油工业出版社, 2008.9
高等院校石油天然气类规划教材
ISBN 978-7-5021-6452-2

I . 现…

II . ①王…②陈…③饶…

III . ①分析(化学) - 高等学校 - 教材

②测试技术 - 高等学校 - 教材

IV .065 TB4

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2008) 第 001989 号

出版发行: 石油工业出版社

(北京安定门外安华里 2 区 1 号 100011)

网 址: www.petropub.com.cn

编辑部: (010) 64523585 发行部: (010) 64523620

经 销: 全国新华书店

印 刷: 石油工业出版社印刷厂

2008 年 8 月第 1 版 2008 年 8 月第 1 次印刷

787×1092 毫米 开本: 1/16 印张: 22.75

字数: 580 千字

定价: 35.00 元

(如出现印装质量问题, 我社发行部负责调换)

版权所有, 翻印必究

前 言

现代分析测试方法在材料组成和结构分析、表面和界面分析、有机化合物的结构鉴定、试样组分含量的测定、化学反应的机理研究等方面具有极其重要的作用，它们在材料、化学、医药、食品、环境保护、石油、地质、化工等许多领域中的应用日益广泛，已经成为不可缺少的分析研究手段和必须具备的专业基础知识。

为了适应教学、科研工作的需要，我们参阅了一些国内外有关分析测试方法的书籍和文献资料，结合多年教学、科研的经验体会，编写了这本《现代分析测试方法》。本书较为详细地介绍了X射线衍射分析、电子显微分析、热分析、紫外吸收光谱法、红外吸收光谱法、激光拉曼光谱法、核磁共振波谱法、质谱法等的基本原理、仪器结构、实验方法、应用示例，并用较多的谱图、数据和典型示例来说明现代分析测试过程以及谱图解析、数据处理的方法，以利于读者学习和运用。由于篇幅有限，本书立足应用，对涉及的理论仅作了一般论述，避免了繁杂的数学推导（对此有兴趣的读者可参阅有关专著）。

本书还扼要介绍了30余种常用现代分析测试方法，如原子光谱法、X射线荧光光谱法、中子活化分析、电化学分析、可见—紫外吸光光度法、红外吸收光谱法、拉曼光谱法、流动注射分析法、荧光分析法、质谱法、核磁共振波谱法、顺磁共振波谱法、X射线衍射分析、色谱法、毛细管电泳、电子能谱、二次离子质谱、电子显微镜、扫描隧道显微镜、原子力显微镜、X射线技术等方法的工作原理和应用特点。本书的每一章后均提供了一些思考题，以便于读者巩固、加深和运用所学知识。

本书由西南石油大学王斌、陈集、饶小桐、丁武成合编。其中第一章由王斌、丁武成编写；第二、第三章由王斌编写；宋莎莎、李晓旭对第一、第二、第三章做了大量文字、图谱工作；第四章至第八章由陈集编写；第九、第十章由陈集、饶小桐编写。全书由陈集统稿。本书在出版过程中得到了西南石油大学教务处和石油工业出版社的大力支持，在此向他们致以真诚的谢意！

由于编者水平有限，难免有不妥和疏漏之处，恳请读者批评指正。

编 者

2007年8月

目 录

第一章 X 射线衍射分析	1
第一节 X 射线的产生及其物理作用	1
一、电磁辐射基础	1
二、X 射线谱	4
三、X 射线与物质的相互作用	8
四、X 射线的探测与防护	11
思考题	12
第二节 X 射线衍射原理	12
一、晶体学基础	13
二、布拉格方程	18
三、衍射矢量方程	21
四、厄瓦尔德图解	21
五、劳埃方程	22
思考题	24
第三节 X 射线衍射强度	25
一、一个电子对 X 射线的散射	25
二、一个原子对 X 射线的散射	26
三、单胞对 X 射线的散射	27
四、小晶体散射与衍射积分强度	30
五、多晶体衍射积分强度	30
六、衍射强度的影响因素	31
思考题	33
第四节 X 射线衍射方法	34
一、照相法	35
二、衍射仪法	40
思考题	47
第五节 X 射线衍射分析的应用	47
一、物相分析	48
二、点阵常数的精确测定	57
三、宏观应力的测定	62
四、X 射线衍射分析在其他方面的应用	69
思考题	71
第二章 电子显微分析	73
第一节 电子显微分析的发展	73
一、电子显微技术的发展	73

二、电子显微镜的发展	74
第二节 电子光学基础	74
一、光学显微镜的分辨率与局限性	74
二、电子波长的特性	75
第三节 粒子(束)与材料的相互作用	77
一、电子束与材料的相互作用	77
二、电子与固体作用产生的信号	78
三、电子束与材料的其他相互作用	80
四、离子与固体作用产生的信号——溅射与二次离子	81
第四节 电磁透镜	82
一、电磁透镜的聚焦原理	82
二、电磁透镜的结构	83
三、电磁透镜与光学透镜的比较	84
四、电磁透镜的像差	85
五、电磁透镜的分辨能力	87
第五节 透射电子显微镜	88
一、透射电子显微镜的工作原理与构造	89
二、透射电子显微镜样品的制备	92
三、透射电子显微镜在材料研究中的应用	94
第六节 扫描电子显微镜	97
一、扫描电子显微镜的工作原理、特点及构造	97
二、扫描电子显微镜样品的制备	99
三、扫描电子显微镜在材料研究中的应用	100
第七节 电子探针 X 射线显微分析	101
一、电子探针仪的工作原理	101
二、电子探针仪的分析方法	102
三、X 射线荧光能谱分析方法	104
思考题	106
第三章 热分析	108
第一节 热分析技术的分类	108
第二节 差热分析	109
一、差热分析原理	109
二、差热分析仪	110
三、差热分析曲线	111
四、差热分析曲线的影响因素	112
第三节 差示扫描量热法	114
一、差示扫描量热分析的原理	114
二、差示扫描量热曲线	116
三、差示扫描量热法的影响因素	116
四、差示扫描量热法的温度和能量校正	116

第四节 热重分析	117
一、热重分析基本原理	117
二、热重曲线	118
三、影响热重曲线的因素	119
第五节 热膨胀和热机械分析	122
一、热膨胀分析法	122
二、静态热机械分析法	122
三、动态热机械分析	123
第六节 热分析技术的应用及发展趋势	124
一、差热分析及差示扫描量热分析法的应用	124
二、DTA 和 DSC 分析在成分和物性分析中的应用	126
三、DTA 和 DSC 分析在无机材料中的应用	127
四、DTA 和 DSC 分析在高分子材料中的应用	128
五、热重分析的应用	129
六、热膨胀分析的应用	129
七、热机械分析的应用	129
八、热分析技术的发展趋势	130
思考题	130
第四章 紫外吸收光谱法	131
第一节 紫外吸收光谱的基本特点	131
一、紫外光区的波长范围及分类	131
二、分子的能级组成和紫外吸收光谱	131
三、电子跃迁的类型	132
四、生色团与助色团、末端吸收与肩峰	134
五、溶剂及其对紫外吸收光谱的影响	134
第二节 紫外—可见分光光度计简介	136
第三节 无共轭双键的有机化合物的紫外吸收光谱	137
一、饱和化合物	137
二、孤立烯、炔类化合物	137
三、孤立双键上含杂原子的化合物	138
第四节 含共轭双键的有机化合物的紫外吸收光谱	139
一、共轭烯烃的紫外吸收带的计算	139
二、共轭多炔的紫外吸收光谱	142
三、 α 、 β -不饱和羰基化合物的 K 带	142
四、芳香化合物的紫外吸收光谱	145
五、无机化合物的紫外吸收光谱	149
第五节 紫外吸收光谱的应用和发展	150
一、紫外吸收光谱定性鉴定的一般方法	150
二、纯度检查	150
三、结构分析	151

四、紫外吸收光谱法的发展	154
思考题	154
第五章 红外吸收光谱法	156
第一节 红外吸收光谱的基本原理	156
一、红外光谱吸收峰的位置	156
二、分子的基本振动类型和红外吸收峰的数目	157
三、红外吸收峰的强度	158
四、影响峰位的因素	159
第二节 红外吸收光谱仪及实验技术简介	164
一、色散型红外吸收光谱仪	164
二、傅里叶变换红外吸收光谱仪	165
三、实验技术简介	167
第三节 有机化合物的红外吸收光谱	168
一、红外吸收光谱中的七个重要区段	168
二、常见有机化合物的红外吸收光谱举例	175
第四节 高聚物的红外吸收光谱	184
一、高聚物的特征谱带	184
二、几种常见高聚物的红外吸收光谱	185
第五节 无机化合物的红外吸收光谱	188
一、 K_2SiF_6 的红外吸收光谱	188
二、 $NaNO_3$ 、 KNO_3 的红外吸收光谱	188
三、菱锌矿和水锌矿的红外吸收光谱	188
四、氨五氰配铁酸钠铵的红外吸收光谱	189
第六节 红外吸收光谱解析与应用示例	189
一、红外吸收光谱解析的一般程序	189
二、红外吸收光谱解析举例	191
三、红外吸收光谱的应用实例	193
第七节 近红外吸收光谱法	193
一、近红外吸收光谱分析的发展	193
二、近红外吸收光谱的测定原理和特点	194
三、近红外吸收光谱的应用领域	196
第八节 光声光谱法	196
一、光声光谱的产生	196
二、光声光谱的特点	197
三、光声光谱的应用	197
思考题	197
第六章 激光拉曼光谱法	200
第一节 拉曼光谱的原理	200
一、光的散射现象	200
二、产生拉曼散射的原因	200

三、红外活性与拉曼活性的比较	201
第二节 拉曼光谱的特点	201
第三节 拉曼光谱的特征谱带	202
第四节 激光拉曼光谱的应用	203
第五节 激光拉曼光谱仪	204
第六节 拉曼光谱的发展趋势	204
思考题	206
第七章 核磁共振氢谱法	207
第一节 核磁共振基本原理	207
一、原子核的自旋和磁矩	207
二、核在外磁场中的自旋取向	208
三、核磁共振	208
四、弛豫过程	209
第二节 实现核磁共振的方法和仪器	210
一、实现核磁共振的方法	210
二、核磁共振仪	210
第三节 化学位移	211
一、屏蔽效应	211
二、化学位移及其表示方法	212
三、影响化学位移的因素	214
四、各类氢核的化学位移	219
第四节 自旋耦合	225
一、自旋耦合产生的原因	226
二、耦合常数	226
三、核的等价性	227
四、产生自旋干扰的条件	228
五、裂分小峰数和面积比	229
六、自旋耦合图	229
第五节 耦合常数与分子结构的关系	230
一、偕耦	230
二、邻耦	231
三、远程耦合	233
四、芳氢及杂芳氢的耦合	234
五、其他核与 ^1H 的耦合	234
第六节 自旋系统	235
一、耦合系统的分类	235
二、常见的自旋系统简介	236
第七节 简化氢谱的方法	239
一、使用高频核磁共振仪	239
二、自旋去耦技术——双照射法	240

三、重氢交换	240
四、位移试剂	241
第八节 核磁共振氢谱的解析及应用示例	241
一、核磁共振氢谱解析的一般程序	241
二、核磁共振氢谱解析举例	242
三、核磁共振氢谱的应用	243
思考题	244
第八章 核磁共振碳谱法	247
第一节 核磁共振碳谱的特点	247
第二节 化学位移	247
一、屏蔽效应与化学位移	247
二、影响化学位移的因素	247
三、各类碳核的化学位移	249
第三节 核磁共振碳谱的自旋耦合和耦合常数	256
一、 ^1H 与 ^{13}C 的耦合	256
二、 ^2D 与 ^{13}C 的耦合	258
三、 ^{13}C 与 ^{13}C 的耦合	258
四、 ^{19}F 与 ^{13}C 的耦合	258
五、 ^{31}P 与 ^{13}C 的耦合	258
第四节 纵向弛豫时间	259
一、纵向弛豫机制	259
二、纵向弛豫时间的应用	260
第五节 核磁共振碳谱的测量技术	261
一、多次扫描和氘锁	261
二、溶剂	261
三、样品和标准物	262
四、核磁共振碳谱去耦技术	262
第六节 核磁共振碳谱的解析	267
一、核磁共振碳谱解析的一般程序	267
二、核磁共振碳谱解析实例	268
第七节 二维核磁共振谱简介	269
一、二维核磁共振谱的实验方法	270
二、二维核磁共振谱的分类	270
三、二维核磁共振谱的主要表现形式	270
第八节 固体高分辨核磁共振简介	272
第九节 核磁共振成像简介	272
第十节 顺磁共振波谱法简介	273
一、顺磁共振波谱法的基本原理	273
二、顺磁共振波谱法的特点	275
三、顺磁共振波谱法的应用	275

思考题	275
第九章 质谱法	278
第一节 质谱仪及其工作原理	278
一、单聚焦质谱仪的工作原理	278
二、质谱仪的重要性能指标	280
第二节 质谱图	281
第三节 分子离子峰	282
一、分子离子峰的形成	282
二、分子离子峰的强度与结构的关系	283
三、分子离子峰的识别	283
第四节 碎片离子峰	284
一、键开裂的基本知识	284
二、影响键开裂的因素	286
三、键开裂基本类型及开裂规律	287
第五节 常见有机化合物的质谱	293
一、烷烃	293
二、烯烃	294
三、芳烃	295
四、醇	296
五、酚	296
六、醚	296
七、羧酸类	298
八、酯类	298
九、醛、酮类	299
十、胺类	300
十一、酰胺类	300
十二、卤代烃类	302
十三、腈类	302
十四、硝基化合物	302
十五、有机硫化学物	303
十六、杂环类	303
第六节 亚稳离子峰、多电荷离子峰和同位素离子峰	304
一、亚稳离子峰	304
二、多电荷离子峰	305
三、同位素离子峰	305
第七节 有机质谱解析	306
一、相对分子质量的测定	307
二、分子式的确定	307
三、分子结构的推断	309
第八节 质谱在高聚物分析中的应用	311

第九节 无机质谱法简介	311
一、火花源质谱法	312
二、辉光放电质谱法	312
三、二次离子质谱法	312
四、激光微探针质谱法	313
五、电感耦合等离子源质谱法	313
思考题	313
第十章 常用现代分析测试方法应用特点简介	316
第一节 用以测定原子或离子的分析测试方法	316
一、原子发射光谱法	316
二、原子吸收光谱法	317
三、原子荧光光谱法	317
四、X 射线荧光光谱法	317
五、中子活化分析	318
六、电化学分析	318
第二节 用以分析鉴定分子的分析测试方法	318
一、可见—紫外吸光光度法	318
二、红外吸收光谱法	318
三、拉曼光谱法	318
四、流动注射分析法	319
五、荧光分析法	319
六、质谱法	320
七、核磁共振波谱法	320
八、顺磁共振波谱法	320
九、X 射线衍射分析	320
第三节 分离分析方法	321
一、气相色谱法	321
二、高效液相色谱法	321
三、超临界流体色谱法	321
四、高速逆流色谱法	322
五、毛细管电泳	322
第四节 表面和界面分析法	322
一、X 光电子能谱	322
二、紫外光电子能谱	323
三、俄歇电子能谱	324
四、二次离子质谱	324
五、透射电子显微镜	324
六、扫描电子显微镜	325
七、扫描隧道显微镜	325
八、原子力显微镜	327

九、X 射线技术	328
思考题	328
附录 1 分析方法符号及其缩略语	329
附录 2 常用物理常数	331
附录 3 元素的物理性质	332
附录 4 K 系标识谱线的波长、吸收限和激发电压	334
附录 5 元素的质量吸收系数 (μ_m)	336
附录 6 原子散射因子 (f)	338
附录 7 原子散射因子校正因子 (Δf)	341
附录 8 滤波片选用表	342
附录 9 各种点阵的结构因子	343
附录 10 德拜—瓦洛温度因子 $e^{-B \sin^2 \theta / \lambda^2} = e^{-M}$	344
附录 11 从分子离子中丢失的游离基和中性碎片	345
附录 12 有机化合物质谱中一些常见碎片离子 [⊕] (正电荷未标出)	347
参考文献	349

第一章 X 射线衍射分析

1895年11月8日，德国物理学家伦琴在研究真空管高压放电现象时发现了X射线，开辟了物质分析测试方法的新篇章。1908—1911年，巴克拉(C. G. Barkla)发现物质被X射线照射时，会产生次级X射线。次级X射线除与初级X射线有关外，还与被照射物质组成的元素有关。巴克拉将与物质元素有关的射线的谱线称为标识谱。同时，巴克拉还发现不同元素的X射线吸收谱具有不同的吸收限。1912年，劳厄(M. Von Laue)等提出X射线是电磁波的假设，并推测波长与晶面间距相近的X射线通过晶体时，必定会发生衍射现象。该假设被著名物理学家索末菲(A. J. W. Sommerfeld)的助手弗里德利希(W. Friedrich)用实验证实，从此揭开了X射线的电磁波本质，证明了晶体中原子排列的规则性。自此，在探索X射线的性质、衍射理论和结构分析技术等方面都有了飞跃的发展，产生了一门重要的学科——X射线衍射学。

在弗里德利希用实验证实劳厄假设的同时，英国物理学家布拉格(Bragg)父子从反射的观点出发，提出了X射线“选择反射”的观点，认为X射线照射到晶体中一系列相互平行的原子面上，当相邻两晶面的反射线因叠加而加强时发生反射，叠加相消时不能发生反射，并导出了著名的布拉格方程。1913年布拉格根据这一原理，制作出了X射线分光计，并使用该装置确定了巴克拉提出的某些标识谱的波长，首次利用X射线衍射方法测定了NaCl的晶体结构，从此开始了利用X射线进行晶体结构分析的历史。1914年，莫塞莱(H. G. J. Moseley)由实验发现，不同材料同名特征谱线的波长与原子序数间存在定量对应关系，提出了著名的莫塞莱定律，诞生了材料物相快速无损检测分析方法，形成了一门重要的学科——X射线光谱学。

当今，电子计算机控制的全自动X射线衍射仪及各类附件的出现，提高了X射线衍射分析的速率与精度，扩大了其研究领域，也使X射线衍射分析成为确定物质的晶体结构、进行物相的定性和定量分析、精确测定点阵常数、研究晶体取向等的最有效、最准确的方法。此外，还可通过线性分析研究多晶体中的缺陷，应用动力学理论研究近完整晶体中的缺陷，由漫散射强度研究非晶态物质的结构，利用小角度散射强度分布测定大分子的结构及微粒尺寸等。

X射线衍射分析反映出的信息是大量原子散射行为的统计结果，此结果与材料的宏观性能有良好的对应关系。但使用该方法时要注意，X射线衍射分析不可能给出材料内实际存在的微观成分和结构的不均匀性资料，也不能分析微区的形貌、化学成分以及元素离子的存在状态。

第一节 X射线的产生及其物理作用

一、电磁辐射基础

(一) 原子的激发

原子由原子核和核外电子组成。通常原子核外电子按照能量最低原理、泡利不相容原理、洪特规则分布于各能级上，此时系统处于能量最低状态，称之为基态。原子中的一个

或几个电子吸收能量后由基态所处能级跃迁到高能级上时的原子状态称为激发态。原子由基态转变为激发态的过程称为激发；激发时吸收的能量称为激发能，常以电子伏特（eV）表示，称为激发电位；激发能的大小应等于电子被激发前后所处能级的能量差。激发必须具备两个条件：

- (1) 较高能级是空的或未填满，由泡利不相容原理决定；
- (2) 吸收能量等于两能级能量之差。

原子的激发态不稳定，一般存在 $10^{-8} \sim 10^{-10}$ s 后即返回基态。原子中的电子受激发向高能级跃迁或由高能级向低能级跃迁均称为电子（能级）跃迁。电子由高能级向低能级跃迁的过程可分为两种形式：多余能量以电磁辐射形式放出的跃迁称为辐射跃迁；多余能量转化为内能形式的跃迁称为无辐射跃迁。

原子中的电子获得足够的能量就会脱离原子核的束缚，发生电离；使原子电离所需的能量称为电离能，常以电子伏特表示。原子失去一个电子，称为一次电离；再失去一个电子，称为二次电离；依此类推，亦可发生三次以上的电离等。

(二) 辐射的吸收与发射

电磁辐射与物质相互作用时，会产生辐射的吸收、发射等。

1. 辐射的吸收

辐射的吸收是指辐射通过物质时，某些频率的辐射被组成物质的粒子选择性吸收而使辐射强度减弱的现象，其实质是吸收辐射光子能量发生粒子的能级跃迁。电磁辐射的频率与能级的能量的关系如下

$$h\nu = \Delta E = E_2 - E_1$$

式中 h ——普朗克（Planck）常数， $h=6.626 \times 10^{-34}$ J·s 或 $h=4.135 \times 10^{-15}$ eV·s；

ν ——电磁辐射的频率，Hz；

E_2, E_1 ——分别为高低能级的能量。

不同物质因能级跃迁类型不同，对辐射的吸收不同，致使辐射被吸收程度对辐射频率 ν 或波长 λ 的分布——吸收光谱不同。

2. 辐射的发射

跃迁至激发态的粒子不稳定，它在返回基态的同时将以电磁辐射的方式释放出所吸收的能量，这一现象称为辐射的发射。

辐射的发射主要表现为对物质原子中内层电子的激发和随后产生的各种过程，它主要包括光电效应（二次特征辐射）和俄歇效应等。

(1) 光电效应。

当用 X 射线轰击物质时，若 X 射线的能量大于物质原子对其内层电子的束缚力，入射 X 射线光子的能量就会被吸收，从而导致其内层电子（如 K 层电子）被激发，并使高能级上的电子产生跃迁，发射新的特征 X 射线。为与入射的 X 射线相区别，称 X 射线激发的特征 X 射线为二次特征 X 射线或荧光 X 射线。这种以光子激发原子所发生的激发和辐射过程称为光电效应，被击出的电子称为光电子。与上述相同，产生的二次特征 X 射线的波长与激发它们所需的能量取决于物质的原子种类和结构。

(2) 俄歇效应。

在上述的激发与跃迁的过程中，当高能级的电子向低能级跃迁时，除以辐射 X 射线的

形式释放能量外，还可以另一种形式释放能量，即这些能量被周围某个壳层上的电子所吸收，并促使该电子受激发逸出原子成为二次电子。由于这种二次电子原来是在原子的某个壳层上的，因此它具有特定的能量值，可以用来表征这些原子。这种效应是俄歇 1925 年发现的，故称为俄歇效应，产生的二次电子称为俄歇电子。利用该原理制造的俄歇能谱仪主要用于分析材料表面的成分。

物质粒子发射辐射的强度对 λ 或 ν 的分布称为发射光谱，光致发光所得到的光谱则称为荧（磷）光光谱。不同物质具有特定的特征发射光谱；荧光吸收一次光子与发射二次光子的时间很短 ($10^{-8} \sim 10^{-4}s$)，而磷光的时间较长 ($10^{-4} \sim 10s$)。

(三) X 射线的产生原理

原子的内层电子受激发后吸收能量产生电子能级的跃迁，形成 X 射线的吸收光谱。光子激出原子的内层电子，外层电子向空位跃迁产生光激发，形成二次 X 射线，构成 X 射线荧光光谱。X 射线通常利用一种类似热阴极二极管的装置 (X 射线管) 获得，其产生原理如图 1-1 所示。把用一定材料制作的板状阳极 (称为靶，多为纯金属铜、铬、钒、铁、钴，在软 X 射线装置中常用铝靶) 和阴极 (钨丝) 密封在一个玻璃—金属管壳内，给阴极通电加热至炽热，使它放射出热辐射电子。在阳极和阴极间加直流高压 (约数万伏)，则阴极产生的大量热辐射电子 e 将在高压电场作用下高速奔向阳极，在与阳极碰撞的瞬间产生 X 射线。通常仅有 1% 的能量转变为 X 射线能，其余主要转化为热能。因此，X 射线的产生条件为：

- (1) 产生自由电子；
- (2) 使电子做定向高速运动；
- (3) 在运动路径中设置使其突然减速的障碍物。

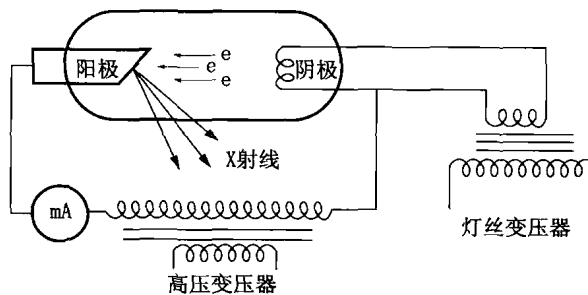


图 1-1 X 射线的产生原理示意图

(四) X 射线管

X 射线管相当于一个真空度为 $10^{-5} \sim 10^{-7}mmHg$ 的大真空二极管，其剖面如图 1-2 所示，它主要由阴极、阳极、窗口、真空罩及冷却系统组成。阴极通常指产生热电子并将电子束聚焦的电子枪，常由钨灯丝和高压变压器组成；阳极亦称靶，主要作用是使电子突然减速，发射 X 射线。为使阴极发射的电子束集中，在阴极灯丝外加上聚焦罩，并使灯丝与聚焦罩之间始终保持 $100 \sim 400V$ 的电位差。窗口是 X 射线从阳极向外辐射的区域，有两个或四个，其材料既要有足够的强度以维持管内的高真空度，又要对 X 射线的吸收较小，常由不吸收 X 射线的金属铍制成，有时也用成分为硼酸铍锂的林德曼玻璃。通常 X 射线管可分为细聚焦 X 射线管和旋转阳极 X 射线管，按灯丝可分为密封式灯丝 X 射线管和可拆式灯丝 X 射线管。

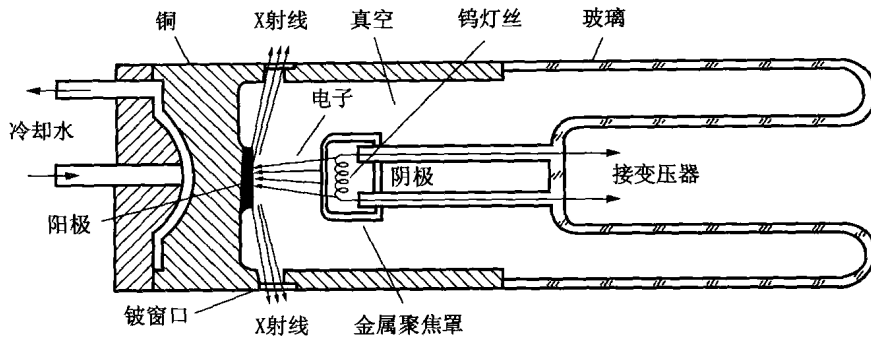


图 1-2 X 射线管剖面示意图

(五) X 射线的基本性质

X 射线是一种可在空间传播的交变电磁场，是电磁波，其在空间的传播服从波动方程，具有反射、折射、干涉、衍射、偏振等特性，属于横波。X 射线的波长很短，仅 $0.01 \sim 10\text{nm}$ ，远小于一般可见光的波长 ($400 \sim 700\text{nm}$)，肉眼看不到，但能使某些荧光物质发光，可使照相底片感光，使部分气体电离。波长在 0.1nm 以下的 X 射线能量高，具有很强的穿透性，称为“硬 X 射线”，常用于无损探伤及金属的物相分析，如对金属器件的内部缺陷（气孔、夹杂、裂纹等）进行无损检查。用于医学的 X 射线能量低，波长较长，穿透力较弱，称为“软 X 射线”。硬 X 射线的波长为 $0.25 \sim 0.05\text{nm}$ 时，与晶体中原子间距较接近，当其照射到晶体上时会产生散射、干涉及衍射现象，与光线的绕射现象类似，常用来进行 X 射线衍射分析，为研究晶体内部结构提供信息。

同可见光一样，X 射线具有波粒二象性，可将其视为“量子微粒”流，具有光电效应；每个 X 射线量子微粒带有一定的能量 (E) 和动量 (P)，可按式计算

$$E=h\nu =hc/\lambda \quad (1-1)$$

$$P=h/\lambda \quad (1-2)$$

式中 ν ——X 射线的频率；
 c ——光速；
 λ ——X 射线的波长。

X 射线穿过不同介质时，几乎毫不偏折地直线传播，折射系数接近于 1；在电磁场中也不发生偏斜，故不能用一般方法使 X 射线会聚发散。由于 X 射线能杀死或破坏生物组织细胞，对有机物质（含人体）有害，因此在与 X 射线接触时一定要采取保护措施，使用能屏蔽 X 射线的铅等进行保护。

二、X 射线谱

对 X 射线管施加不同的电压，再用适当的方法测量由 X 射线管发出的 X 射线的波长和强度，便会得到 X 射线强度与波长的关系曲线，称为 X 射线谱。

(一) 连续 X 射线谱

图 1-3 为钨阳极 X 射线管在不同管电压下的 X 射线谱。由图 1-3 可以看出，管电压低于 20kV 时，曲线呈连续变化，将这种 X 射线谱称为连续 X 射线谱。随着管电压的增高，X 射线强度增大，连续谱峰值所对应的波长向短波端移动。在各种管电压下的连续谱都存在一个最短的波长值 λ_0 ，称为短波限。通常峰值的位置大约在 $1.5\lambda_0$ 处。把这种具有连续谱的 X 射线叫