



“十三五”高等学校专业教材建设工程

材料分析与表征

CAILIAO FENXI YU BIAOZHENG

主 编 齐义辉 于景媛



東北大學出版社
Northeastern University Press



“十三五”高等学校专业教材建设工程

材料分析与表征

主编 齐义辉 于景媛



东北大学出版社

· 沈阳 ·

© 齐义辉 于景媛 2016

图书在版编目 (CIP) 数据

材料分析与表征 / 齐义辉, 于景媛主编. —沈阳: 东北大学出版社, 2016. 5
ISBN 978-7-5517-1265-1

I. ① 材… II. ① 齐… ② 于… III. ① 工程材料—分析方法 IV. ① TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 098855 号

出 版 者: 东北大学出版社

地址: 沈阳市和平区文化路 3 号巷 11 号

邮编: 110819

电话: 024-83687331 (市场部) 83680267 (社务室)

传真: 024-83680180 (市场部) 83680265 (社务室)

网址: <http://www.neupress.com>

E-mail: neuph@neupress.com

印 刷 者: 抚顺光辉彩色广告印刷有限公司

发 行 者: 东北大学出版社

幅面尺寸: 185mm × 260mm

印 张: 12.25

字 数: 305 千字

出版时间: 2016 年 5 月第 1 版

印刷时间: 2016 年 5 月第 1 次印刷

策划编辑: 王兆元

责任编辑: 李 佳

责任校对: 王 宁

封面设计: 刘江扬

责任出版: 唐敏志

ISBN 978-7-5517-1265-1

定 价: 25.00 元

前 言

本书由辽宁工业大学教材出版基金资助出版。

本教材是根据辽宁工业大学材料科学与工程学科硕士研究生培养方案，并参照部分其他院校有关的研究生培养方案而编写的，全书以培养学生的科研能力为出发点，突出基本概念、分析和解决问题的思路，力求精练内容、增大信息量，避免烦琐和不必要的数学推导。

本书以 X 射线衍射分析和电子显微分析为主，介绍了 X 射线衍射和电子显微分析的最新进展。本书第 1 章由马胜男编写，第 2 章和第 3 章由于景媛编写，第 4 章由陈扬编写，第 5 章和第 6 章由齐义辉编写，第 7 章由赵荣达编写，第 8 章由何力佳编写；全书由齐义辉统稿并定稿。本书在编写过程中较广泛地从国内外近期出版的有关材料分析测试的专著和教科书中选材，特别是我国出版的材料分析测试技术著作——《材料 X 射线衍射与电子显微分析》（周玉、武高辉编著）、《电子衍射分析原理与图谱》（黄孝瑛、侯耀永、李理著）、《电子显微分析》（章晓中编著）、《X 射线金属学》（范雄主编）、《金属 X 射线衍射与电子显微分析技术》（李树棠著）等——给予了本书作者诸多启示。本书还选用了参考文献中的一些图和照片，在此向有关作者表示衷心的感谢。

本书具有较高的参考价值，可作为应用物理、材料科学与工程等专业的硕士研究生、本科高年级学生和相关科研人员的学习参考书。

由于时间和水平的限制，书中难免存在不妥和错误之处，恳请读者批评和指正。

作者

2015年12月

目 录

第 1 章 X 射线衍射及多晶体分析	1
1.1 布拉格方程	1
1.1.1 布拉格方程的导出	2
1.1.2 布拉格方程的讨论	2
1.2 X 射线衍射方法	4
1.3 单位细胞对 X 射线的散射与结构因子	5
1.3.1 结构因数公式的推导	6
1.3.2 几种点阵结构因数的计算	7
1.4 洛伦兹数	8
1.4.1 衍射的积分强度	8
1.4.2 参加衍射的晶粒分数	9
1.4.3 单位弧长的衍射强度	9
1.4.4 角因数	9
1.5 多晶体分析方法	10
1.5.1 德拜-谢乐法成像原理	10
1.5.2 德拜相的摄影	10
1.5.3 德拜相机误差与修正	12
1.5.4 立方系物质德拜相的标定	13
1.5.5 相机的分辨率	14
1.6 X 射线衍射仪	15
1.6.1 X 射线测角仪	15
1.6.2 X 射线探测器	16
1.6.3 X 射线衍射的测量方法与实验参数	18

第 2 章 X 射线物相分析	22
2.1 定性分析	22
2.1.1 定性分析的原理和思路	22
2.1.2 定性分析举例	23
2.1.3 物相分析注意事项	24
2.2 定量分析	25
2.2.1 定量分析基本原理	25
2.2.2 几种常见的定量分析方法	26
2.3 衍射线的指标化	30
2.3.1 立方晶系的衍射谱标定	30
2.3.2 四方、六方的标定	32
2.4 点阵参数的精确测定	34
2.4.1 基本原理	34
2.4.2 初始点阵参数的获得	36
2.4.3 点阵参数测量误差	36
2.4.4 精确测定点阵常数的方法	37
2.4.5 实际应用	40
2.5 晶粒尺寸和点阵畸变的测定	43
2.6 全谱拟合精修	45
2.6.1 标准数字参比谱全谱匹配顺序检索法	45
2.6.2 计算谱权重叠加全谱拟合法	47
2.6.3 Rietveld 方法原理	48
2.6.4 Rietveld 精修的模型函数	50
2.6.5 Rietveld 全谱拟合的一般步骤	51
2.6.6 Rietveld 的精修参数分类及精修顺序	51
第 3 章 残余应力的测定	53
3.1 残余应力的种类	53
3.2 X 射线宏观残余应力测定原理	55
3.2.1 弹性应力-应变关系	55
3.2.2 X 射线应力测定原理	56
3.3 X 射线宏观残余应力测定方法	58

3.3.1	X 射线应力仪法	58
3.3.2	X 射线衍射仪法	61
3.4	X 射线宏观残余应力测定实验操作	61
3.4.1	样品处理	61
3.4.2	实验条件	62
3.4.3	数据处理	63
第 4 章	织构测定与分析	66
4.1	晶体取向与晶体学织构	66
4.2	取向与织构的极图表达原理	66
4.3	极图的测绘方法	68
4.3.1	透射法	69
4.3.2	反射法	70
4.3.3	测量结果的校正	71
4.3.4	极图的绘制	72
4.3.5	极图分析	73
4.4	反极图及其测绘	73
4.4.1	反极图的测绘	74
4.4.2	反极图的分析	77
4.5	织构的取向分布函数表示法	77
4.5.1	晶粒取向的欧拉角	77
4.5.2	取向分布函数及其计算原理	79
4.5.3	取向空间的划分	80
4.5.4	取向分布函数分析	80
第 5 章	电子衍射	85
5.1	电子衍射原理	85
5.1.1	布拉格定律	85
5.1.2	倒易点阵与爱瓦尔德球作图法	86
5.1.3	结构因子-倒易阵点的权重	88
5.1.4	晶带定理与零层倒易截面	89
5.1.5	标准零层倒易面	90
5.1.6	偏离矢量与倒易阵点扩展	91

5.1.7	电子衍射基本公式	93
5.2	电子显微镜中的电子衍射	94
5.2.1	磁转角	94
5.2.2	有效相机常数	95
5.2.3	选区电子衍射	95
5.3	单晶体电子衍射花样标定	97
5.3.1	单晶体电子衍射花样的标定程序	97
5.3.2	钢中典型组成相的衍射花样标定	101
5.3.3	电子衍射的计算机分析	103
5.4	多晶电子衍射花样和相机长度标定	104
5.5	其他复杂电子衍射谱	106
5.5.1	单晶、多晶、非晶电子衍射谱和会聚束衍射比较	106
5.5.2	高阶劳厄斑点	107
5.5.3	超点阵斑点	111
5.5.4	二次衍射斑点	112
5.5.5	孪晶斑点	113
5.5.6	菊池衍射花样	116
第6章	衍射衬度像	120
6.1	薄膜样品的制备	120
6.1.1	薄膜样品的基本要求	120
6.1.2	制备过程	121
6.2	衍衬成像原理	123
6.3	衍衬运动学简介	124
6.3.1	基本假设	125
6.3.2	理想晶体的衍射强度	126
6.3.3	消光距离	128
6.3.4	理想晶体衍衬运动学基本方程的应用	129
6.3.5	非理想晶体的衍射衬度	132
6.4	晶体缺陷分析	132
6.4.1	层错	133
6.4.2	位错	135

6.4.3	小角晶界和大角晶界	140
6.4.4	第二相粒子	141
6.5	衍衬运动学理论的局限性	142
第7章	扫描电子显微镜与电子探针显微分析	144
7.1	扫描电子显微镜的工作原理及结构	144
7.1.1	扫描电子显微镜的工作原理及特点	144
7.1.2	扫描电子显微镜的结构	145
7.2	扫描电子显微镜的成像及衍射技术	148
7.2.1	低电压成像技术	148
7.2.2	低真空成像技术	149
7.2.3	环境扫描技术	150
7.2.4	背散射电子成像技术	151
7.3	扫描电子显微镜的应用	152
7.3.1	金属材料方面的应用	152
7.3.2	无机非金属材料方面的应用	153
7.3.3	生物材料方面的应用	154
7.3.4	背散射电子成像技术 (EBSD) 的应用	155
7.4	电子探针显微分析	157
7.4.1	电子探针显微分析的工作原理	157
7.4.2	电子探针显微分析的结构	157
7.4.3	电子探针显微分析的应用	157
7.5	能谱分析	159
第8章	材料测试新方法	161
8.1	扫描隧道显微镜	161
8.1.1	扫描隧道显微镜的基本原理	161
8.1.2	扫描隧道显微镜的特点和应用	162
8.2	原子力显微镜	162
8.2.1	原子力显微镜的工作原理	163
8.2.2	原子力显微镜的应用	164
8.3	离子探针	164
8.3.1	离子探针的结构与工作原理	165

8.3.2 离子探针的特点及应用	166
8.4 原子探针-场离子显微分析	166
8.4.1 场离子显微镜的结构与工作原理	166
8.4.2 原子探针-场离子显微镜的应用	167
8.5 穆斯堡尔谱法	168
参考文献	172
附录1 常见晶体的标准电子衍射花样	175
附录2 钢中相的电子衍射花样标定用数据表	183

第1章 X射线衍射及多晶体分析

1.1 布拉格方程

X射线在传播途中，与晶体中束缚较紧的电子相遇时，将发生经典散射。晶体由大量原子组成，每个原子又有多个电子。各电子所产生的经典散射线会相互干涉，使晶体在某些方向被加强，另一些方向则被削弱。电子散射线干涉的总结果称为衍射。

可以回顾一下波的干涉的概念：振动方向相同、波长相同的两列波叠加，将造成某些固定区域的加强或减弱，如图 1.1 所示。如若叠加的波为一系列平行波，则形成固定的加强和减弱的必要条件是：这些波或具有相同的波程（相位），或者其波程差为波长的整数倍（相当于相位差为 2π 的整数倍）。X射线在晶体中的相干散射也应基本满足这些条件。

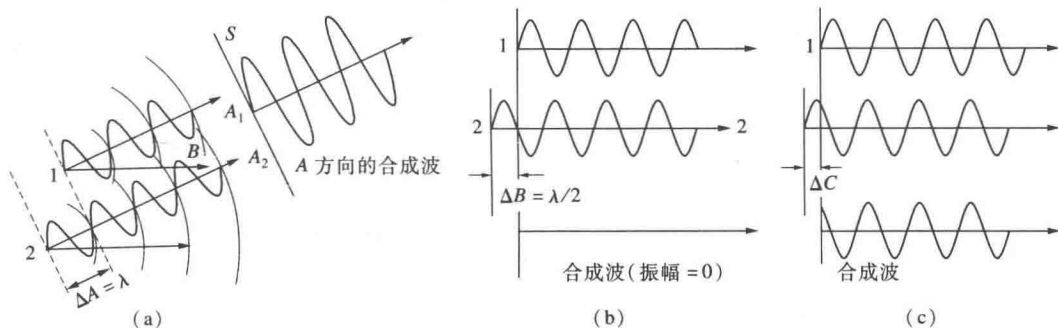


图 1.1 波的合成示意图

当用 X 射线照射晶体，晶体原子内层电子受迫振动产生相干散射，原子内各电子散射波干涉形成原子散射波。晶体内各原子呈周期性排列，故各原子散射波间相位固定，则在某些方向上发生相长干涉，即形成了衍射波。1912 年，德国物理学家劳埃指出：若在某方向获得衍射干涉加强，须满足劳埃方程，即在晶体中三个相互垂直的方向上，相邻原子散射线的波程差为波长的整数倍。衍射方向应同时满足下列方程组：

$$a(\cos \varepsilon_1 - \cos \alpha_1) = H\lambda$$

$$b(\cos \varepsilon_2 - \cos \alpha_2) = H\lambda$$

$$c(\cos \varepsilon_3 - \cos \alpha_3) = H\lambda$$

这就是著名的劳埃方程，其中 a, b, c 分别为三维方向的单位矢量， $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ 为入射 X 射线与三个相互垂直方向的夹角， $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 为衍射线与三个相互垂直方向的夹角。劳埃方程

从本质上解决了 X 射线在晶体中的衍射方向问题，但理论比较复杂，在使用上亦欠方便。从实用角度来看，该理论有简化的必要。

晶体既然可看成由平行的原子面所组成，晶体的衍射线也应当由原子面的衍射线叠加而得。这些衍射线会由于相互干涉而大部分被抵消，只有其中一些可以得到加强。更详细的研究结果表明，能够保留下来的那些衍射线，相当于某些网平面的反射线。按照这一观点，晶体对 X 射线的衍射可视为晶体中某些原子面对 X 射线的“反射”。

将衍射看成反射，是导出布拉格方程的基础。这一方程首先由英国的物理学家布拉格在 1912 年导出。次年，俄国的结晶学家吴里夫 (r. B. B ymф) 也独立地导出了这一方程。

1.1.1 布拉格方程的导出

X 射线在晶体中的相干散射还需做以下近似和假设：X 射线是平行光，且有单一波长（单色），电子皆集中在原子中心，原子不做热振动，即假设原子间距无任何变化。

先考虑同一晶面上的原子的散射线叠加条件。当一束平行 X 射线以 θ 角投射到一原子面上时，其中任意两个原子 A、B 的散射线在原子面反射方向上的光程差为

$$CB - AD = AB\cos\theta - AB\cos\theta = 0$$

光程差为 0，相位相同，是干涉加强方向。因此，同一原子面上所有原子散射线在反射方向上的相位均相同，互相干涉加强。X 射线不仅可照射到晶体表面，而且可以照射到晶体内一系列平行的原子面。如果相邻两个晶面的反射线的相位差为 2π 的整数倍（或波程差为波长的整数倍），则所有平面的反射线可一致加强，从而在该方向上获得衍射。

如图 1.2 所示，一束 X 射线（波长 λ ）以 θ 角投射到面间距为 d 的一组平行、相邻原子面 P_1 、 P_2 上，经 A、B 两原子反射的散射线光程差为

$$EB + BF = d\sin\theta + d\sin\theta = 2d\sin\theta$$

散射线干涉互相加强的条件为

$$2d = n\lambda \quad (n = 1, 2, \dots)$$

这就是著名的布拉格方程，它是 X 射线衍射最基本的定律。其中， n 为整数，称为反射级数； θ 为入射线与衍射晶面的夹角，称为布拉格角或掠射角； 2θ 为入射线与衍射线间的夹角，称为“衍射角”； d 为晶面间距。

当一束单色且平行的 X 射线照射晶体，满足布拉格方程的晶面上所有原子散射线：相位相同，相互干涉，则与入射线成 2θ 角，衍射线振幅加强，称为“相长干涉”。其他方向散射线强度减弱，抵消为零，称为“相消干涉”。

1.1.2 布拉格方程的讨论

将衍射看成反射，是布拉格方程的基础。但衍射是本质，反射仅是为了使用方便的描述方式。X 射线的晶面反射与可见光的镜面反射亦有所不同。镜面可以以任意角度反射可见光，但 X 射线只有在满足布拉格方程的 θ 角上才能发生反射，因此，这种反射也称选择反射。

布拉格方程在解决衍射方向时是极其简单而明确的。波长为 λ 的入射线，以 θ 角投射

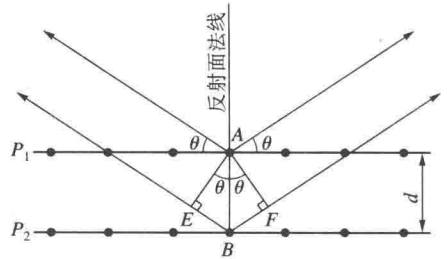


图 1.2 布拉格方程的导出

到晶体间距为 d 的晶面时，有可能在晶面的反射方向上产生反射（衍射）线，其条件为相邻晶面的反射线的波程差为波长的整数倍。下面我们将会看到布拉格方程只是获得衍射的必要条件而非充分条件。

布拉格方程联系了晶面间距 d 、掠射角 θ 角、反射级数 n 和 X 射线波长 λ 四个量。当知道了其中三个量，就可以通过公式求出其余一个量。必须强调的是，在不同的场合下，某个量可能表现为常量或变量，故需仔细分析。

1. 反射级数

在布拉格方程中， n 为整数，称为反射级数，它表示的是衍射线的波程差为入射 X 射线波长的倍数。在使用时， n 并不直接赋予 1, 2, 3 等数值，而用另一种方式。

如图 1.3 所示，假设 X 射线照射到晶体的 (100) 面时，且恰好能发生 2 级反射，则相应的布拉格方程为

$$2d_{100}\sin\theta = 2\lambda$$

设想在每两个 (100) 面中间均插入一个原子分布与之相同的面，此时面间距变为 $1/2$ ，该面指数为 (200)，这样相邻两晶面反射线的波程差只有一个波长 (1λ)，相当于 (200) 晶面发生了一级衍射。此时，布拉格方程变为

$$2d_{200}\sin\theta = \lambda$$

或可写作

$$2\left(\frac{d_{100}}{2}\right)\sin\theta = \lambda$$

即可将 (100) 晶面的二级反射看成 (200) 晶面的一级反射。一般地，可将 (hkl) 晶面的 n 级反射看成 $(nh nk nl)$ 晶面的一级反射。若 (hkl) 晶面间距为 d ，则 $(nh nk nl)$ 晶面为 d/n 。则方程可写成以下形式：

$$2\left(\frac{d}{n}\right)\sin\theta = \lambda$$

有时也可写作

$$2d\sin\theta = \lambda$$

由此可以理解为 (hkl) 晶面的 n 级反射，可看成某种实际存在或不存在的假想晶面的一级反射。

2. 干涉指数

(hkl) 晶面的 n 级反射面 $(nh nk nl)$ ，用“ HKL ”表示，其面指数称为干涉指数。干涉指数与晶面指数的关系为： $H = nh$ ， $K = nk$ ， $L = nl$ 。 (hkl) 是晶体中实际存在的晶面，而 (HKL) 只是为了使问题简化而引入的虚拟晶面。干涉面的面指数称为干涉指数，一般有公约数 n 。当 $n = 1$ 时，干涉指数即变为晶面指数。对于立方晶系，晶面间距与晶面指数的关

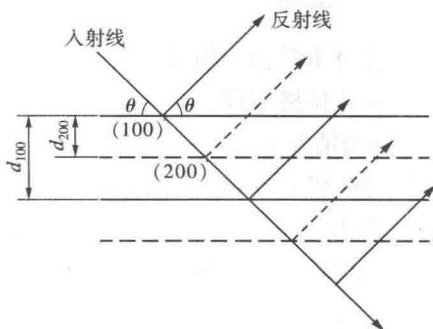


图 1.3 反射级数讨论图

系为

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

干涉面的间距与干涉指数的关系与此类似，即

$$d_{HKL} = \frac{a}{\sqrt{H^2 + K^2 + L^2}}$$

在 X 射线衍射分析中，如无特别声明，所用的面间距一般是指干涉面间距。

3. 掠射角

掠射角是指入射线（或反射线）与晶面的夹角，可表征衍射的方向。

从布拉格方程 $\sin\theta = \lambda/2d$ 可导出两个概念：一个是当 λ 一定时， d 相同的晶面必然在 θ 相同的情况下才能获得反射，当用单色 X 射线照射多晶体时，各晶粒中 d 相同的晶面，其反射线将有着确定的关系，这里所指 d 相同的晶面，当然也包括等同晶面；另一个是当 λ 一定时， d 减小， θ 就要增大，这说明间距小的晶面，其掠射角必须是较大的，否则它们的反射线就无法加强。在考察多晶体衍射时，这一概念非常重要。

4. 衍射极限条件

掠射角的极限范围为 $0 \sim 90^\circ$ ，但过大或过小都会造成衍射的探测困难。由于 $|\sin\theta| \leq 1$ ，使得在衍射中反射级数 n 或干涉面间距 d 都要受到限制。

因为 $n = 2d\sin\theta/\lambda$ ，所以 $n \leq 2d/\lambda$ 。当 d 一定时， λ 减小， n 可增大，说明对同一种晶面，当采用短波 X 射线照射时，可获得较多级数的反射，即衍射花样比较复杂。从干涉面的角度去分析亦有类似的规律。在晶体中，干涉面的划取是有限的，但并非所有的干涉面均能参与衍射，因存在关系 $d\sin\theta = \lambda/2$ ，或 $d \geq \lambda/2$ 。说明只有间距大于或等于 X 射线半波长的那些干涉面才能参与反射。很明显，当采用短波 X 射线照射晶体时，能参与反射的干涉面将会增多。

5. 布拉格方程的应用

布拉格方程在实验上有两种用途，一种是晶体结构分析，利用已知波长的特征 X 射线照射未知结构的晶体，通过测量各晶面衍射线的衍射角 θ ，求出晶体中各晶面间距 d ，从而揭示晶体的结构，此为结构分析。另一种是 X 射线光谱成分分析，用已知晶面间距为 d 的晶体来反射从样品发出的特征 X 射线，通过测量衍射角 θ ，求出未知特征射线波长，从而确定样品的组成元素，即 X 射线光谱学。如 X 射线荧光元素分析、电子探针波谱分析，可定性、定量地分析材料所含的元素。

1.2 X 射线衍射方法

只要满足布拉格方程 $\lambda = 2d\sin\theta$ 时，衍射就有可能发生。无论何种晶体衍射，其中 λ 与 θ 依赖关系是很严格的。应考虑满足布拉格方程的实验方法：一是连续改变 λ ，二是连续改变 θ 。由此可派生出三种主要的衍射方法，即劳埃法、周转晶体法和粉末法。

1. 劳埃法

劳埃法适用于单晶体，即晶体不动，采用连续的 X 射线照射晶体。根据 X 光源、晶体、底片位置不同分为透射法和反射法两种。底片为平板型，与入射线垂直放置。

劳埃法是德国物理学家劳埃在 1912 年首先提出的，是最早的 X 射线分析方法，它用垂直于入射线的平底片记录衍射而得到劳埃斑点。目前劳埃法多用于单晶体取向测定及晶体对称性研究。

2. 周转晶体法

周转晶体法用单色 X 射线照射单晶体。某一晶轴或某一重要的晶向垂直于 X 射线，在单晶体四周围成圆筒形，晶体绕选定的晶向（轴）旋转，转轴与圆筒状底片的中心轴重合。如图 1.4 所示。

周转晶体法的特点是采用单色 X 光，靠旋转单晶体以连续改变各晶面与入射角 θ ，当某组晶面在某瞬间恰好满足布拉格角时，产生衍射，底片上出现一个感光点。衍射花样呈层状分布，周转晶体法主要用途为确定未知晶体的晶体结构，是研究晶体学的主要工具。

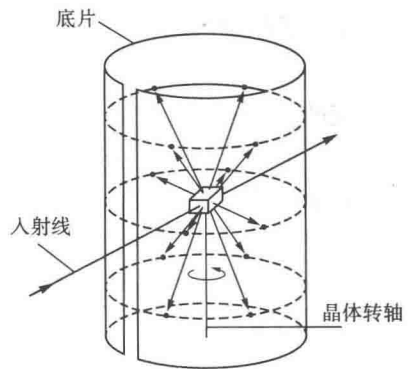


图 1.4 周转晶体法

3. 粉末法

粉末法是衍射分析中最常用的一种方法。

粉末法是用单色 X 射线照射多晶体试样，由数量众多的各微晶粒的不同取向来改变 θ ，以满足布拉格方程。

大多数材料的粉末或其板、丝、块、棒等均可直接用作试样，且其衍射花样又可提供很多的分析资料。粉末法的主要特点是试样获得容易、衍射花样反映晶体的全面信息，可进行物相定性和定量分析、点阵参数测定、应力测定、织构分析、晶粒度测定等。

粉末法是各种多晶体 X 射线分析法的总称，其中以德拜-谢乐法最具典型性，它用窄圆筒底片来记录衍射花样，图 1.5 亦可用平底片来记录，此法惯称针孔法。

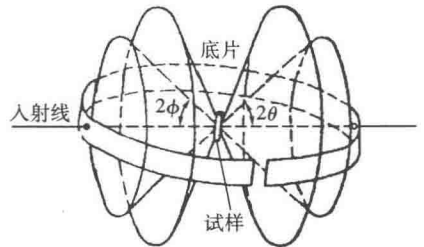


图 1.5 粉末法

1.3 单位晶胞对 X 射线的散射与结构因子

简单点阵只由一种原子组成，每个单胞中只有一个原子，其位于单胞的顶角上，所以简单点阵单胞的散射强度相当于一个原子的散射强度。复杂点阵单胞中含有 n 个相同或不同种类的原子，它们除了占据单胞的顶角外，还可能位于体心、面心或底心位置，所以复杂点阵单胞的散射波振幅为单胞中所有原子散射波的合成振幅。由于衍射线的相互干涉，

某些方向的强度将会有所加强，某些方向的强度将会减弱甚至消失，习惯上将这种现象称为系统消光。研究单胞结构对衍射强度的影响，在衍射分析的理论和应用中都十分重要。

1.3.1 结构因数公式的推导

如图 1.6 所示，取单胞顶点 O 为坐标原点，单胞中第 j 个原子 A 的位置矢量为

$$\vec{OA} = r_j = X_j a + Y_j b + Z_j c$$

式中， a, b, c 是点阵的基本矢量； X_j, Y_j, Z_j 为 A 原子的坐标。

A 原子和 O 原子间散射波的光程差为

$$d_j = r_j k' - r_j k = r_j (k - k')$$

其相应的位相差为

$$f_j = 2\pi(Hx_j + Ky_j + Lz_j)$$

若单胞中各原子的散射波振幅分别为 $f_1 A_e, f_2 A_e, \dots, f_j A_e, \dots, f_n A_e$ (A_e 为一个电子相干散射波振幅，不同种类的原子其 f 不同)，它们与入射波的相位差分别为 $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_j, \dots, \varphi_n$ (原子在单胞中不同位置其 φ 不同)，则所有这些原子散射波振幅的合成就是单胞的散射波振幅 A_b 。

$$A_b = A_1 e^{i\varphi_1} + A_2 e^{i\varphi_2} + \dots + A_n e^{i\varphi_n}$$

$$f_a = \frac{A_a}{A_e} = \frac{\text{一个原子中所有电子相干散射波的合成振幅}}{\text{一个电子相干散射波的振幅}}$$

$$A_b = A_e (f_1 e^{i\varphi_1} + f_2 e^{i\varphi_2} + \dots + f_n e^{i\varphi_n}) = A_e \sum_{j=1}^n f_j e^{i\varphi_j}$$

至此，引入一个反映单胞散射能力的参数——结构振幅 F_{HKL} ，即

$$F_{HKL} = \frac{A_b}{A_e} = \sum_{j=1}^n f_j e^{i\varphi_j} \quad (1.1)$$

将复数展开成三角函数形式，有

$$F_{HKL} = \sum_{j=1}^n f_j [\cos 2\pi(Hx_j + Ky_j + Lz_j) + i \sin(Hx_j + Ky_j + Lz_j)]$$

在 X 射线衍射工作中可测量到的 X 射线的衍射强度 I_{HKL} 与结构振幅的平方 $|F_{HKL}|^2$ 成正比， $|F_{HKL}|^2$ 可表示为

$$|F_{HKL}|^2 = F_{HKL} F_{HKL}^* \quad (1.2)$$

$|F_{HKL}|^2$ 称为结构因数，用以表征单胞中原子种类、数目和位置对 (HKL) 晶面衍射强度的影响。

$$|F_{HKL}|^2 = F_{HKL} F_{HKL}^* = \left[\sum_{j=1}^n f_j \cos 2\pi(Hx_j + Ky_j + Lz_j) \right]^2 + \left[\sum_{j=1}^n f_j \sin 2\pi(Hx_j + Ky_j + Lz_j) \right]^2 \quad (1.3)$$

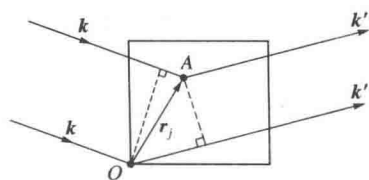


图 1.6 单胞中两原子的相干散射