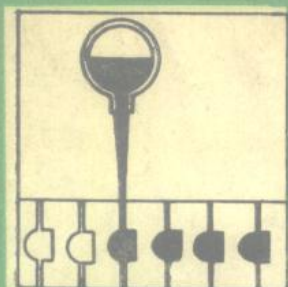
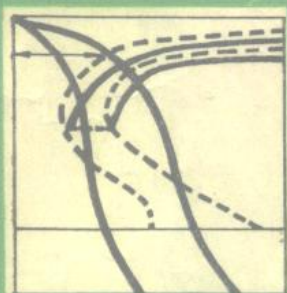


高等学校试用教材



X射线金属学

天津大学范雄 主编



机械工业出版社

高等学校试用教材

X 射线金属学

天津大学范雄 主编



机械工业出版社

X射线金属学

天津大学范维 主编

*

机械工业出版社出版(北京阜成门外百万庄南街一号)

(北京市书刊出版业营业许可证出字第117号)

机械工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行·新华书店经售

*

开本 $787 \times 1092 \frac{1}{16}$ · 印张 18 · 字数 443 千字

1981年9月北京第一版·1981年9月北京第一次印刷

印数 0,001—7,500 · 定价 1.85 元

*

统一书号: 15033 · 5060

前 言

本书系根据 1978 年高等学校第一机械工业部对口专业座谈会的决定而编写的。

虽然有关 X 射线分析的书籍已经不少，但要挑选一本合用的《X 射线金属学》的教科书却还有困难，因为这些书大多是六十年代或者更早一些时候写成的，其中以译本为多，阅读起来不大容易；有些书并非为初学者而写；另一些书其内容又未免过于庞杂。

据此，在编写本书时，既考虑了国内外在 X 射线分析方面比较先进的设备与技术，又照顾到目前国内特别是高等院校的现实状况；既考虑了教学系统的要求，又照顾到实际工作的需要。遵循循序渐进、由浅入深、分散难点的原则。至于内容的取舍，则根据目前热处理专业应用的多寡而定。由于各院校的情况有所差别，在使用本教材时，可针对具体情况对内容作适当的调整。

本书的第一、二、三、八章由哈尔滨工业大学许守廉编写；第四章的前八节、实验一、二及部分附录由哈尔滨工业大学刘国斌编写；其余部分由天津大学范雄编写。全书由范雄主编，许守廉主审。

天津大学的姚蕙荃、蔡文华为本书的实验、图片、附录作了很多工作，清华大学、丹东仪器厂等单位为本书提供了部分照片，在此一并致谢。

由于编者水平有限，缺点和错误之处，请读者批评指正。

编 者

一九八〇年一月于天津大学

目 录

前言		
绪论	1	
第一章 X射线物理学基础	5	
§ 1-1 X射线的产生及其性质	5	
§ 1-2 X射线谱	7	
§ 1-3 X射线的散射	13	
§ 1-4 X射线的衰减	16	
第二章 布拉格方程与粉末照相	20	
§ 2-1 X射线在晶体中的衍射	20	
§ 2-2 布拉格方程	20	
§ 2-3 X射线衍射方法	22	
§ 2-4 粉末照相法	23	
第三章 衍射原理与分析	30	
§ 3-1 晶体学基本知识	30	
§ 3-2 衍射的基本方程式(劳埃方程式)	36	
§ 3-3 简单点阵的衍射分析	41	
§ 3-4 复杂点阵的衍射分析	42	
第四章 衍射强度及衍射仪	51	
X射线衍射强度	51	
§ 4-1 多晶体衍射强度的概念	51	
§ 4-2 结构因数及原子散射因数	52	
§ 4-3 多重性因数	54	
§ 4-4 角因数	55	
§ 4-5 吸收因数	58	
§ 4-6 温度因数	60	
§ 4-7 衍射强度的计算	62	
§ 4-8 衍射强度的测量	64	
X射线衍射仪	65	
§ 4-9 一般介绍	65	
§ 4-10 X射线光学布置	65	
§ 4-11 计数器	67	
§ 4-12 定标器与计数率仪	71	
§ 4-13 衍射线强度的计算与测量	73	
§ 4-14 衍射仪法与照相法的比较	74	
§ 4-15 实验参数的选择	75	
第五章 点阵参数的精确测定	77	
§ 5-1 一般考虑	77	
§ 5-2 误差的来源	79	
§ 5-3 用精密实验方法消除误差	82	
§ 5-4 用图解法消除误差	84	
§ 5-5 用最小二乘方法(柯亨法)消除误差	86	
§ 5-6 其它照相法	88	
§ 5-7 用标准样对比消除误差	92	
§ 5-8 用衍射仪法测定点阵参数	94	
§ 5-9 点阵参数精确测定的应用	95	
第六章 物相分析	98	
§ 6-1 物相定性分析的特点, 荧光X射线分析简介	98	
§ 6-2 定性分析的原理及方法	99	
§ 6-3 定性分析中的一些问题	107	
§ 6-4 定量分析基本原理	110	
§ 6-5 单线条法	111	
§ 6-6 内标法	113	
§ 6-7 K值法及绝热法	114	
§ 6-8 直接对比法	118	
§ 6-9 等强线对法	118	
第七章 宏观应力测定	121	
§ 7-1 引言	121	
§ 7-2 应力测定原理	122	
§ 7-3 测试方法与参数	126	
§ 7-4 应力测定中的其它问题	133	
第八章 晶粒大小及微观应力的测定	139	
§ 8-1 晶粒大小在 $10^{-3} \sim 10^{-2}$ 厘米(10~100微米)时的测定方法	139	
§ 8-2 晶粒大小在 $10^{-5} \sim 10^{-7}$ 厘米范围内的测定方法	141	
§ 8-3 微观应力(第二类内应力)引起线条真实宽化的理论	147	
§ 8-4 测定晶块尺寸与微观应力的实验程序	150	

36170

第九章 倒易点阵与单晶体分析法	163	附录 3 质量吸收系数 μ_i/ρ 及密度 ρ	267
§ 9-1 倒易点阵基础	163	附录 4 滤波片选用表	263
§ 9-2 晶体投影法	170	附录 5 立方晶系的 HKL 和 $\frac{\sin^2 \theta_i}{\sin^2 \theta_1}$ 值	263
§ 9-3 劳埃法	178	附录 6 粉末试样经验冲淡数据	266
§ 9-4 周转晶体法	185	附录 7 原子散射因数 f	267
第十章 织构测定	193	附录 8 原子散射因数在吸收附近 旁的减小值 Δf	269
§ 10-1 引言	193	附录 9 各种点阵的结构因数 F_{HKL}^2	270
§ 10-2 用照相机测定金属丝织构	193	附录 10 粉末法的多重性因数 P_{hkl}	270
§ 10-3 多晶体极图	198	附录 11 角因数 $\frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta}$	271
§ 10-4 用照相机测定金属板织构	200	附录 12 圆柱粉末试样的吸收 因数 $\mu_l R$	272
§ 10-5 用衍射仪法测定金属板织构	204	附录 13 德拜函数 $\frac{\phi(x)}{x} + \frac{1}{4}$ 之值	274
§ 10-6 反极图	207	附录 14 德拜-瓦洛温度因数 $e^{-B \sin^2 \theta / \lambda^2}$ $= e^{-M}$	274
结语	209	附录 15 某些物质的特征温度 Θ	275
实验指导书	212	附录 16 $\cos^2 \theta$ 的数值	275
实验一 X射线晶体分析仪与粉末 照相	212	附录 17 $\frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$ 的数值	276
实验二 立方晶系单相物质粉末相 的指标化 (计算法)	221	附录 18 $\sin^2 \theta$ 的数值	277
实验三 利用 X射线衍射仪进行多 相物质的相分析	231	附录 19 K_α 双重线分离度 ($\theta_{\alpha_2} -$ θ_{α_1})	279
实验四 用直接对比法测定淬火锅 中残余奥氏体含量	239	附录 20 立方系晶面间夹角	280
实验五 淬火锅的宏观应力测定	244	附录 21 元素的物理性质	283
实验六 用劳埃法测定单晶体 的取向	251		
附录	259		
附录 1 物理常数	259		
附录 2 元素的特征发射谱线及吸 收限波长, 埃	259		

绪 论

X 射线分析发展概况

1895年,德国物理学家伦琴(W. K. Röntgen),在研究真空管中的高压放电现象时,发现了一种不可见的射线,这种射线的穿透力很强,能穿透木块、玻璃甚至金属,因为对它了解还甚少,故命名为X射线。X射线的发现,立即引起了科学界的浓厚兴趣,有些人致力于探究其本质,但更多人则在寻找它的实际应用。六个月之后,医学界就已普遍将X射线运用于诊断及医疗。由于人们尚不了解X射线对有机体的危害性,致使早期一些科学家和医生竟成了牺牲者,不过这种牺牲,却也换来了科学的进步。随着时间的进展、X射线器械的改良,X射线用于透射检验的范围也愈来愈广,不过由于早期的X射线管为离子管,功率很小,也很难控制所产生的X射线,不大可能用于金属材料及机械零件的探伤。1913年,美国人库利吉(W. D. Coolidge)发明了热阴极X射线管,使X射线机有了很大的革新,到了本世纪二十年代,X射线探伤仪就已广泛用于冶金厂和机械制造厂。

上述应用是基于X射线对不同密度和厚度的物体有不同穿透能力的性质,后来将这方面的应用称为“X射线照相术”或“X射线透视学”,这种应用是在对X射线的本性无明确理解的情况下发展起来的。而关于X射线本性的揭露,是与人们对晶体结构的研究、对X射线在晶体中衍射的研究分不开的。人们对晶体结构的研究起源很早,到十九世纪的最后十年中,晶体结构的几何理论已经全部完成,但在发现X射线的衍射现象之前,较多的研究还只限于在晶体的外形上。1784年,法国结晶学家阿羽(Haüy),提出晶体结构理论,1848年,法国结晶学家布拉菲(M. A. Bravais),确定了14种空间点阵型式。1830年,德国人赫塞尔(J. Hessel)提出晶体32种宏观对称类型即32种点群,但在几十年之后这才引起了更多人的注意。1885~1890年,俄国结晶学家费多罗夫(E. C. Фёдоров)完成了230种空间群的推导。1891年,德国数学家熊夫利斯(A. Schoenflies)亦导出了230种空间群。由于结晶学家对晶体外形作出了系统的研究,对其微观结构提出了假说,物理学家又对晶体的光学、热膨胀等性能感到兴趣,于是导致了晶体物质的原子规则排列的理论。由于化学及物理学的发展,当时对每克原子物质中的原子数目业已知悉,计算得晶体中原子间距约为 10^{-8} 厘米数量级。在X射线发现以后,一些物理学家的观察指出,X射线可能具有偏振现象,而这个特性为电磁波所具有,只是并未观察到它的衍射现象。根据狭缝的衍射实验结果,德国的索末菲(Sommerfeld)提出X射线的波长约为 4×10^{-9} 厘米。在前人这些成就的启发下,1912年,德国物理学家劳埃(M. von Laue)提出用晶体作为天然光栅来研究X射线的衍射,从事实验研究的夫里德里克(W. Friedrich)及克尼平(P. Knipping)支持了劳埃的设想,用X射线对 $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ 进行了试验,并获得了世界上第一张X射线衍射照片。这一发现,一方面肯定了X射线的本质,另一方面也证实了晶体的结构,为研究物质的微观世界提供了崭新的方法。为了解释衍射图相,劳埃提出了一组方程式。用X射线研究晶体结构的工作称为“X射线晶体学”或“X射线衍射学”,英国的布拉格父子[W. H. Bragg (父)和 W. L. Bragg (子)]对

这门科学进行了开创性的工作。1912年, W. L. 布拉格进行了劳埃的实验, 他认为斑点的产生是射线受到了类似于镜面“反射”的结果, 并指出夫里德里克等的实验中所用的为连续辐射(“白色”X射线)。W. L. 布拉格又从劳埃方程式引出了简单实用的布拉格方程, 并借助于他父亲设计的电离室(电离光谱仪), 轻而易举地使用了特征辐射(单色X射线), 推算出了KCl及NaCl的原子排列方式, 并真正测量了X射线波长。后一工作又直接导致了1913~1914年莫塞莱(H. G. J. Moseley)定律的发现(元素原子序数与发射X射线的频率间的关系定律), 并最终发展成为X射线发射光谱分析(电子探针)及X射线荧光分析。

1914年, W. L. 布拉格用这种新技术研究了第一个金属元素——铜, 所用的为自然生长的单晶体; 1916年, 卫格(L. Vegard)用布拉格的电离光谱仪研究了铅、银和金的原子排列。然而, 对大多数的金属和合金, 因其自然形态为多晶体, 故其结构的确定并不能轻而易举地借助于电离光谱仪, 而只能是在德拜及谢乐(P. Debye及P. Scherrer)发明“粉末法”(1916年)之后。1919年, 德国的喜波尔(Schiebold)倡议用周转晶体法来进行结构分析, 1924年, 德国的魏森堡(K. Weissenberg)设计了在结构分析中应用极广的魏森堡法。

自1913年W. H. 布拉格发明了电离光谱仪之后, 只在早期有过一些应用, 其后的X射线分析工作则主要采用照相方法进行。盖革和弥勒(H. Geiger和W. Müller)首先在1928年描述了用盖革—弥勒计数器来探测X射线, 而商品型的X射线衍射仪, 主要是按富里德曼(H. Fridman)1943年的设计发展起来的, 到本世纪五十年代, 这种衍射仪就相当流行了, 其后又出现了正比计数器及闪烁计数器, 新近又使用了固体计数器, 目前衍射仪已经成为X射线结构分析的最主要仪器。衍射仪的使用, 使得分析速度和准确度都有了很大的提高, 从而使X射线分析进入了新的阶段。自四十年代起, 计算机大大帮助了结构分析工作; 到七十年代, 电子计算机、电视等先进技术与X射线分析相结合, 使这一方法得到了飞速的发展, 衍射的图相已能显示在屏幕上, 物相分析等整个过程已可完全自动化了。

自粉末法问世之后, 合金体系的相图和结构的研究有了蓬勃的发展。维斯特伦(A. Westgren)在1921年从钢铁的结构研究起, 对一系列的合金体系进行了分析; 从1926年布瑞得立(A. J. Bradley)对 γ 黄铜的研究开始, 粉末法的对象已不再局限在简单的结构问题上了; 从1930年起, 哈格(G. Hägg)对一系列间隙金属化合物物相进行了研究。在这一系列工作的基础上, 对金属物相有了新的认识。在金属领域中应用较多的某些X射线分析技术, 大体是在四、五十年代建立起来的。虽然赫尔(A. W. Hull)在1919年就已提出将粉末法用于物质的鉴定, 但系统的物相定性分析方法是建立于1938年。那一年, 哈那瓦特(J. D. Hanawalt)及其合作者编纂了约1000种物质的衍射资料作为档案基础, 并制定出分类和检索方法。1942年, 美国材料试验协会将资料印成标准卡片出版, 当时刊出的约有1300种化合物, 这种资料以后便逐年补充。从1969年起, 又组成国际性组织“粉末衍射标准联合委员会”来负责卡片的搜集工作。至1977年为止, 刊出的物质卡片已约有37000张。至于物相定量分析, 虽然赫尔的研究已预示着这种可能性, 但真正的工作却始于1936年克拉克(G. L. Clark), 又只有在1945年应用了衍射仪之后, 定量分析的应用才渐趋广泛。本世纪七十年代以后, 又发展了一系列定量分析的新方法。

用X射线法测量宏观应力始于1925年, 无需标准样对比的测定方法是1943年巴悦特(C. S. Barrett)提出的, 而目前在应力测量中应用较广的三点抛物线定峰法是1959年凯斯汀纳(D. P. Koistinen)等提出的, 近年来, 宏观应力测量的研究有了很大的发展。

1918年, 谢乐即已提出微粒大小的测定方法, 其后在三、四十年代中由瓦伦(B. E. Warren)、琼斯(F. W. Jones)、斯托斯(A. R. Stokes)等逐渐完善。

金属中晶粒取向(择优取向或织构)的研究虽然很早, 1926年韦佛(F. Wever)即已提出用极图来研究金属板中的织构, 但用衍射仪研究极图的方法到四、五十年代才由狄克(B. D. Decker)、斯克兹(L. G. Schultz)等完成; 而用反极图研究织构则是在五、六十年代由哈里斯(G. B. Harris)、杰塔(L. K. Jetter)、何塔(Horta)等人提出。近年来, X射线分析又有了很多新发展, 关于这些现代研究将在结束语中另作简介。

X射线分析在金属材料及热处理领域中的应用

X射线技术目前在工业和科学技术中的应用主要分三方面: 1. X射线照相术, 即通过X射线的透射情况来研究人体或物体的内部情况, 这方面包括在医学上的诊断和工业X射线探伤; 2. X射线晶体学; 3. X射线光谱学, 通过研究X射线的光谱, 可以研究物质的原子构造, 如电子能级分布、电子云状态等, 又通过研究物质发射的X射线波长可确定物质的元素成分, 这方面应用的例子是X射线荧光光谱分析及电子探针。

“X射线晶体学”或称“X射线结构分析”, 是目前应用最广的一个方面, 它根据X射线照射晶体后所产生的衍射线的方向和强度来确定晶体的结构。除了用它来研究晶体中的原子排列以外, 目前又发展了多种实用科学, 广泛用于冶金、机械、化工、地质、纺织、食品等部门。

“X射线金属学”只是其中一个分支, 是这方面的一个应用。由于X射线衍射可揭示晶体中原子的排列, 而从实践已经知道, 物质的性质和结构之间有着根本性的联系, 因此, X射线衍射的知识给了晶体学以全新的面貌。又因为晶体学是金属学的基础, 故由此而给金属学领域带来的影响也是非常深远的。金属学中有关原子排列等微观的知识, 完全受惠于这门新的科学, 关于这一点, 只要举出几个简单的例子就足够了。我们业已知道, α 铁属于体心立方点阵, γ 铁属于面心立方点阵, 锌和镁为六方点阵, 而渗碳体则为底心斜方点阵; 又已知 α 铁的点阵参数为2.87埃, γ 铁的点阵参数为3.57埃等等, 这些知识和数据就是通过X射线衍射方法测定的。在研究纯铁的相变时, 人们得知通过 A_2 点(768°C)时铁将发生变化, 最初把768~910°C这个区间的铁称为 β 铁。但后来使用了高温X射线衍射法研究, 知道了在 A_2 点前后纯铁的点阵类型并无变化, 即过 A_2 点所发生的并非同素异构转变, 因而 β 铁这个名称也就被取消了。此外, 诸如有关马氏体本质、固态相变及形变中很多基本理论的研究等等, 都是与X射线分析密不可分的。类似的例子还很多, 无法一一细举。

“X射线金属学”的研究内容, 跟其它实用的结构分析方法一样, 它的大量工作并不在于研究未知晶体的结构(即探求其中原子的排列)。其主要的应用简述如下:

1. 物相分析

这方面的应用又可分为定性分析与定量分析两类。定性分析的目的是鉴定待测样由哪些物相组成, 它所指示出的通常是物相而不是元素, 故不同于化学分析或光谱分析。在金属材料及热处理领域中, 很多问题都涉及到这种测试; 例如钢铁中的碳化物、夹杂物, 合金中的析出相, 化学热处理层的物相分析等。定量分析则是求出各物相的相对量, 如淬火钢中的残余奥氏体量的测定。

2. 固溶体分析

它可以确定固溶体的类型、测定固溶体中溶质组元的含量(如马氏体中的含碳量), 又可

以绘制相图，以及研究不平衡状态的固溶体（如研究钢的淬火回火等热处理过程）等。

3. 晶粒大小的测定

可以测定粗晶粒的平均大小，微晶粒的平均晶粒度及微晶粒大小的分布情况。当然也可以测定金属材料的嵌镶块结构，例如金属材料经受塑性变形或固溶体时效时其嵌镶块大小的变化等等。

4. 应力测定

可以测定材料的宏观、显微与超显微的内应力以及原子间结合力。

5. 晶体取向的测定

半导体材料、磁性材料、激光材料的单晶体，其取向可用X射线法测定。在金属学中，可通过晶体取向研究材料的滑移、孪生过程，亦可以测定沉淀相从基体析出时的惯析面。用X射线法可以获得有关织构的最完全的知识。

通过X射线法所获得的信息往往是其它方法所难以代替的，此种方法的普遍优点为：属无损检验，试样用量少，准确度较高；其缺点为设备比较复杂昂贵，要求有一定的专业技能，而且属于间接测试（不能用眼睛“看”到结构）。在实际工作中，必须使X射线法与其它方法配合使用，互相补充。

课程简介

《X射线金属学》是金属材料及热处理专业的一门专业课程，学习本课程的目的，在于使学习者具备X射线分析技术所必须的基础理论、基本知识与基本实验技能，并对合金的相分结构、精细结构、晶体取向等有进一步的了解，为金属材料科学的研究提供理论基础和研究方法。

本教材是按照60学时编写的，其中讲课为48学时，实验为12学时。教材共分十章，大体上前四章着重讨论基础原理，后六章则主要介绍测试方法及应用，当然，二者亦非截然分开，而是互相配合渗透的。所写的六个实验大抵属于最基础和最常用的，能给学习者以X射线分析的基本训练。

《X射线金属学》中一些内容比较抽象，微观概念、空间概念也不易掌握和建立，因此，学习者必须勤于思考，多看模型，必要时可以通过绘画图形和制作简易模型来帮助理解、加深印象，经过多次反复，新的概念就容易建立。《X射线金属学》是实验性很强的课程，要求学生在学习过程中对实验课和分析计算必须予以充分的重视，认真、独立完成基础的X射线衍射实验，重视实验技巧和科学作风的培养。掌握X射线衍射分析的基本实验技术是本课程的一个重要环节。

第一章 X射线物理学基础

§ 1-1 X射线的产生及其性质

1895年德国物理学家伦琴在研究阴极射线时，发现了X射线。后人为了纪念发现者，也称它为“伦琴射线”。

一、X射线的产生条件

实验证明，高速运动着的电子突然被阻止时，伴随着电子动能的消失或转化，会产生X射线。因此，为了获得X射线，需有具备如下条件的仪器，它可以：

1. 产生并发射自由电子（例如加热钨灯丝发射热电子）；

2. 在真空中（一般为 10^{-6} 毫米汞柱）迫使自由电子朝一定方向加速运动，以获得尽可能高的速度；

3. 在高速电子流的运动路程上设置一障碍物（阳极靶），使高速运动的电子突然受阻而停止下来。这样，靶面上就会发射出X射线。

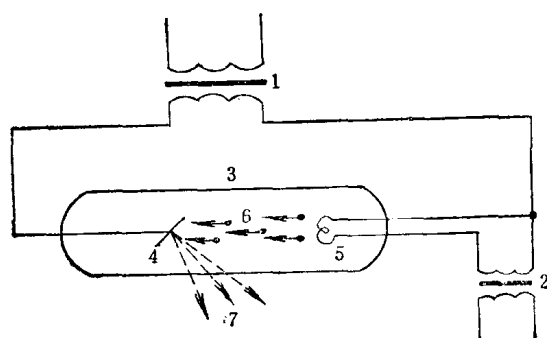


图1-1 X射线产生装置示意图

1—高压变压器 2—灯丝变压器 3—X射线管 4—阳极
5—阴极 6—电子 7—X射线

上述要求构成了X射线发生装置的基本原理，这种发生装置如图1-1所示。其详细构造见实验一。

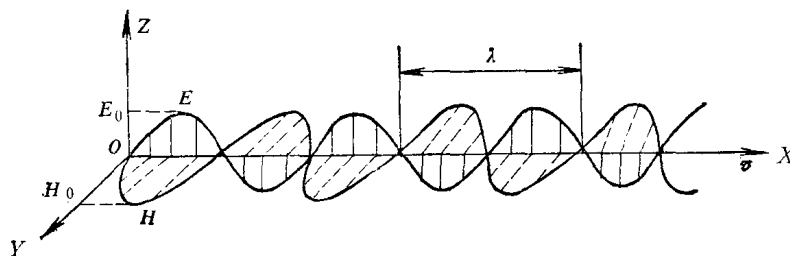


图1-2 电磁波

二、X射线的性质

1. X射线的波动性

X射线是一种本质与可见光完全相同的电磁波或电磁辐射，只不过X射线是由高速带电粒子与物质原子中的内层电子作用而产生的，因此能量大，波长短，穿透物质的能力强；与可见光一样，X射线以光速呈直线传播，在真空中的传播速度是 2.998×10^{10} 厘米/秒。其电场强度矢量 \mathbf{E} 和磁场强度矢量 \mathbf{H} 互相垂直，并位于垂直X射线传播方向的平面上，见图1-2。如果电磁波前进时，其电场完全限制在 XOZ 平面上，则称之为平面一偏振波。

在最简单的情况下，电磁波的传播具有正弦性质，如图 1-2 所示，在 ν 方向的任意一点 x 及时间 t 时，

$$E_{x,t} = E_0 \sin 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \quad (1-1)$$

$$H_{x,t} = H_0 \sin 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \quad (1-2)$$

式中 E_0 ——电场强度的振幅；

H_0 ——磁场强度的振幅， $E_0 = H_0$ ；

λ ——电磁波的波长，即电场强度或磁场强度变化的一个循环周期；

ν ——电磁波的频率 $= \frac{c}{\lambda}$ (c 为光速)；

t ——时间。

实验证明，在光波中能引起各种光学作用的是电场强度 E ，故 E 也称光矢量，而与磁场无关，以后我们不再讨论磁场矢量 H 的问题。

X 射线波长常用的单位是埃，其符号为 \AA ，1 埃 $= 10^{-8}$ 厘米；也有用 kx 单位（晶体单位）的，其换算关系是：

$$1 \text{ kx} = 1.002076 \pm 0.000007 \text{ 埃 (1965 年值)}$$

通常 X 射线的波长范围为 $100 \sim 0.01$ 埃，两边分别与紫外线及 γ 射线相重叠，在由各种波长电磁波构成的电磁波谱中，其位置如图 1-3 所示。在“X 射线金属学”中，常用的 X 射线波长约在 $2.5 \sim 0.5$ 埃之间，用于金属探伤的 X 射线波长约为 $1 \sim 0.05$ 埃或更短，一般波长短的 X 射线称为硬 X 射线，反之则称为软 X 射线，硬软程度表示它的穿透能力的强弱。

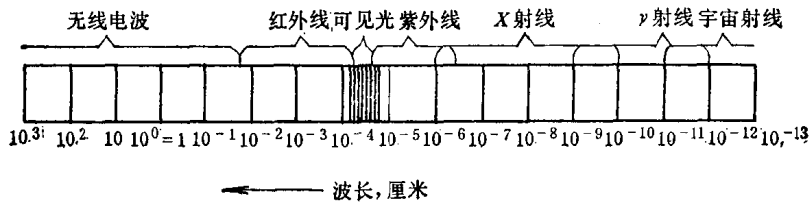


图 1-3 电磁波谱

2. X 射线的粒子性

人们根据 X 射线的干涉和衍射现象，确定了 X 射线具有波动性，通过实验又证实了 X 射线是波长较短的电磁波。然而，波动理论对 X 射线光电效应、荧光辐射等现象则无法解释。实验表明，发生光电效应、荧光辐射的条件不在于入射 X 射线的强度和照射时间，而在于入射 X 射线的频率（或波长）。如果入射线的频率不够高，强度再大、时间再长，也不能激发电效应，更不能激发荧光辐射；反之，如果入射线的频率足够高，即使强度很弱，时间很短（瞬时），上述效应也仍然会发生。这个实验结果恰和波动理论相矛盾，因为按照波动理论，金属中的电子从入射线中吸收能量时，过程是连续的，能量连续积累到一定程度就能放出电子，即入射线愈强，所需能量积累时间愈短；入射线愈弱，则所需能量积累时间也愈长。从波动观点看来，不论入射线的频率如何低，只要入射强度足够大，时间足够长，总会发生光电效应的。

这种矛盾，说明波动性只是反映了 X 射线本性的一个方面。在大量科学实验基础上，人们又认识到 X 射线本性的另一个方面——粒子性或微粒性，即 X 射线在空间传播时，也具有

粒子性。光电效应、荧光辐射等正是 X 射线粒子性的明显表现。

X 射线是由大量以光速运动的粒子（微粒）组成的不连续粒子流。这些粒子叫做光子或光量子，每个光子具有能量为

$$\varepsilon = h\nu \quad (1-3)$$

式中 ν 是 X 射线的频率， h 是普朗克常数，实验测出 $h = 6.626 \times 10^{-34}$ 焦·秒 = 6.626×10^{-27} 尔格·秒。当 X 射线与物质（原子、电子）交换能量时，光子只能整个地被原子、电子所吸收或发射，因此，每个光子的能量 $h\nu$ ，就是该频率的 X 射线的最小能量单元。由此可知，对不同频率的 X 射线，光子的能量是不同的。频率越高，光子的能量就越大。一定频率的 X 射线，其强度大小决定于单位时间内通过与 X 射线传播方向相垂直的单位面积上的光子数目。

产生光电效应时，电子通过吸收入射线的 photons 而获得足够能量，以克服金属中正离子对它的引力而作功，这种功称为电子的逸出功。对于不同的金属，逸出功的大小是不同的，只有当光子能量大于逸出功时，才能有光电子发射出来。当光子能量 $h\nu_0$ 恰等于逸出功 A 时 ($h\nu_0 = A$)，所对应的 ν_0 就是该物质发生光电效应所需的最低频率，频率再低，电子将无法脱离金属，所以不能产生光电效应。不同物质的 ν_0 也不同。

3. 小结

综上所述， X 射线一方面具有波动的性质，有一定频率和波长；另一方面具有粒子性，是具有一定能量光子的粒子流。这种波动性与粒子性相互并存的性质称为 X 射线的波-粒二象性。

波动性反映物质运动的连续性，而粒子性则反映物质运动的分立性。它们都是 X 射线的客观属性，是同时存在的。 X 射线的波长短，频率高，光子能量相对来说比较大，因此它的微粒特性，即呈不连续的粒子流的性质也就比较明显。这种波-粒二象性也是一切微观粒子（原子、中子、电子等）的共同属性。

此外， X 射线具有很强的穿透物质的能力，经过电场和磁场时不发生偏转，当穿过物质时 X 射线可被偏振化，可被吸收而使强度衰减，它能够使空气或其它气体电离，能激发荧光效应，使照相底片感光，并能杀死生物细胞与组织等。

由于 X 射线具有上述一系列特性，使它成为研究晶体结构，进行元素分析，以及医疗透视和工业探伤等多方面问题的有力工具。

§ 1-2 X 射线谱

X 射线强度 I 随波长 λ 而变化的关系曲线称为 X 射线谱。

X 射线谱的系统研究指出，阳极靶发射出来的 X 射线可视作由两部分组成，其一是含有从某一短波限 λ_0 开始，直到波长等于无穷大 λ_∞ 的一系列波长所构成的连续 X 射线谱；另一是具有一定波长的若干特强的 X 射线，叠加于强度连续平滑变化的连续 X 射线谱之上，构成“特征 X 射线谱”。

一、连续 X 射线谱

连续 X 射线是高速运动的电子被阳极靶突然阻止而产生的。图 1-4 是钨阳极 X 射线管所发出的连续 X 射线谱的示意图。

(一) 实验规律

当逐步增加 X 射线管的管电压时, 图 1-4 中的强度曲线 $I(\lambda)$ 有下列变化:

1. 各种波长射线的相对强度一致增高;
2. 最高强度的射线波长逐渐变短 (曲线峰值向左方移动);
3. 短波限 λ_0 逐渐变小, 即 λ_0 向左方移动, 与此同时波谱变宽。

由这些实验规律说明, 管电压既影响连续 X 射线谱的强度, 也影响其波长范围。

(二) 产生机理分析

要解释连续 X 射线谱产生的原因, 需要同时运用经典物理学及近代量子理论的知识。

当 X 射线管中高速运动着的电子到达阳极靶表面突然受到阻止时, 产生了极大的负加速度。按照经典物理学的电动力学理论, 一个带有负电荷的电子在受到这样一种加速度时 (不论是正或负), 电子周围的电磁场将发生急剧的变化, 此时必然要产生一个电磁波, 或者最少一个电磁脉冲。

若管电流强度 i 为 10 毫安, 也就是每秒 0.01 库, 而电子的电荷绝对值 $e = 1.6020 \times 10^{-19}$ 库, 则 1 秒钟内射到阳极上的电子数目 n 应为:

$$n = \frac{i}{e} = \frac{0.01}{1.6020 \times 10^{-19}} = 6.24 \times 10^{16} \text{ (个)} \quad (1-4)$$

显然, 这样极大数量的电子射到阳极靶上的条件和时间不可能是一样的, 因而电磁脉冲也各不相同, 由此形成了具有各种波长的连续 X 射线谱。

上述从波动概念出发的经典理论, 虽然能较圆满地说明了 X 射线谱为什么是连续的, 但无法解释短波限 λ_0 存在的原因。这就需要从量子理论的观点来分析。由灯丝发射出的电子经高压电场加速, 使电场的位能转化为电子的动能, 在到达阳极靶时电子已具有相当大的动能, 其数值为 $\frac{1}{2}mv^2 = eV$, 其中 V 为管电压, e 为电子的电荷。电子被阳极靶突然制止时, 其动能的一部分将转化为一个或几个 X 射线光子, 其余部分将转变为热能。当一个电子的动能毫无损失地全部转化为一个 X 射线光子时, 此光子的能量

$$\epsilon = \frac{1}{2}mv^2 = eV = h\nu_{\text{最大}} = h \frac{c}{\lambda_0} \quad (1-5)$$

即所产生的光子达到了最高的能量, 最大的频率和最短的波长。

由 (1-5) 式可得出, 在一定管电压 V 时, 连续 X 射线谱的短波限 λ_0 为:

$$\lambda_0 = \frac{hc}{eV} \quad (1-6)$$

式中 h ——普朗克常数, 尔格·秒;

c ——X 射线传播速度, 厘米/秒;

e ——电子的电荷, 等于 4.803×10^{-10} 静电单位 (1 静电单位的电压降等于 300 伏);

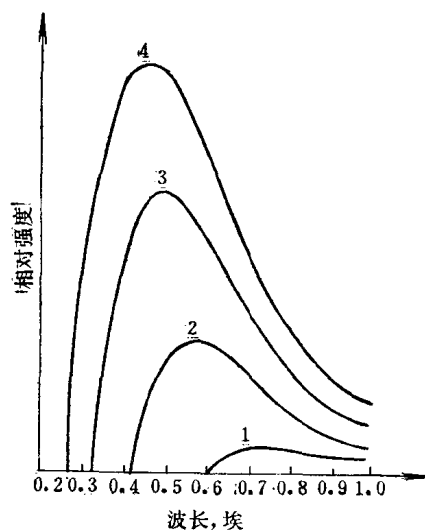


图1-4 在不同管电压下钨阳极发射的连续 X 射线谱示意图
1—20 千伏 2—30 千伏 3—40 千伏 4—50 千伏

V ——电子通过两极时的电压降；

λ_0 ——X射线波长的短波限。

将 h 、 c 、 e 值代入 (1-6) 式，并使 V 的单位为千伏， λ_0 的单位为埃，则得：

$$\lambda_0 = \frac{hc}{eV} = \frac{6.625 \times 10^{-27} \times 3 \times 10^{10}}{4.8 \times 10^{-10} \times \frac{V}{300} \times 10^3} \times 10^8 = \frac{12.4}{V} \quad (\text{埃}) \quad (1-7)$$

根据 (1-7) 式，当通过 X 射线管两极间的电压降分别为 20、30、40、50 千伏时，其所产生的连续 X 射线谱具有下列相应的 λ_0 值：0.62、0.41、0.31、0.25 埃。

这样，应用量子理论不仅简单地说明了连续 X 射线谱短波限 λ_0 存在的原因，并且推导出 λ_0 与管电压 V 成反比的定量关系，所得结果与实验数据完全一致。

但是绝大多数高速电子与阳极靶撞击时，它的部分能量 P 要消耗于阳极靶的各种激发作用（热能、光电子的逸出功等）上，所以转化为 X 射线光子的能量小于高速电子的全部动能，即：

$$\epsilon = h\nu = \frac{1}{2}mv^2 - p = eV - p \quad (1-8)$$

另外，一个电子的能量也可能转化为几个光子或分几次转化，这都说明大部分辐射波长 $\lambda > \lambda_0$ ，即 $\lambda > \frac{12.4}{V}$ 并呈连续的分布，也就是构成了连续 X 射线谱。

(三) 辐射强度

X 射线的强度 I 是指垂直于 X 射线传播方向的单位面积上，在单位时间内所通过的光子数目（单位面积上的光子流率），常用的单位是尔格/厘米²·秒。但其绝对强度的测量比较困难，通常采用照相底片的黑度或衍射线强度曲线的积分面积作为相对比较标准。

由 X 射线管中发出的连续 X 射线的强度在各个方位上并不相等，其分布情况如图 1-5 所示。X 射线最强的方向是与电子束大约成 60° 角的方向，制造一个窗口的倾斜阳极 X 射线管时，就是根据这一事实设计的。具有四个窗口的 X 射线管，被利用的是与电子束约成 96° 方向上的 X 射线，由图 1-5 可看出，在其它条件相同的情况下，这种管子所发出的连续 X 射线的强度要减小 1/2~1/3。

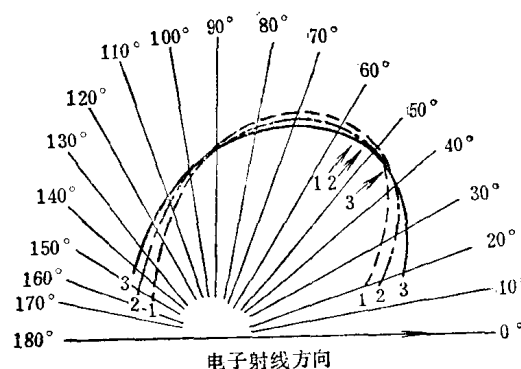


图1-5 在一定管电压 (31千伏) 下，各种波长的 X 射线强度方位分布图

1----- $\lambda = 0.43 \text{ \AA}$ 2-·-·- $\lambda = 0.53 \text{ \AA}$
3—— $\lambda = 0.73 \text{ \AA}$

连续 X 射线谱的总强度，即阳极靶发射的 X 射线总能量为：

$$I_{\text{总}} = \int_{\lambda_0}^{\lambda_{\infty}} I(\lambda) d\lambda = \alpha i Z V^2 \quad (1-9)$$

式中 Z 为阳极靶的原子序数， i 为管电流(毫安)， V 为管电压(千伏)， α 为常数，此条件下测得 $\alpha \approx 1.1 \sim 1.5 \times 10^{-6}$ 。应当指出，阳极靶只能影响连续谱的强度，但不能影响连续谱

波长的分布。

(四) 效率

若输入 X 射线管的功率，也即电子流给予阳极的能量为 iV ，则产生连续 X 射线的效率或称 X 射线管的效率 η 为：

$$\eta = \frac{\text{连续 X 射线总强度}}{\text{X 射线管的功率}} = \frac{\alpha i Z V^2}{iV} = \alpha Z V \quad (1-10)$$

当用钨阳极 ($Z = 74$)，管电压为 100 千伏时，X 射线管效率约为 1% 或者更低。因为管中电子的能量绝大部分在和阳极靶撞击时生成热能而损失，只有极小部分输入的能量转化为 X 射线能，故效率极低。必须设法强烈地冷却阴极，并采用高熔点的钨、钼或导热性好的银、铜等金属作阳极，尽可能施加高电压，以获得较高的效率与较强的 X 射线。

二、特征 (标识) X 射线谱

(一) 特征 X 射线谱的形成

在一定的管电压之内，X 射线强度分布曲线与管电压大小之间的关系如图 1-4 所示。但当管电压超过某一临界值 $V_{\text{激}}$ 后 (如对钨靶超过 20 千伏)，强度分布曲线 $I(\lambda)$ 将产生显著的变化，即在连续 X 射线谱某几个特定波长的地方，强度突然显著地增大，如图 1-6 所示。由于它们的波长反映了靶材料的特征，因此称之为特征 X 射线，并由它们构成了特征 (标识) X 射线谱。

图 1-6 中两个强度特别高的窄峰称为钨的 K 系 X 射线，波长为 0.63 埃的是 K_{β} 射线，波长为 0.71 埃的是 K_{α} 射线。 K_{α} 线又可细分为 K_{α_1} 及 K_{α_2} 两条线，其波长相差约为 0.004 埃， K_{α_1} 和 K_{α_2} 射线的强度比约为 2:1。而 K_{α} 与 K_{β} 的强度比约为 5:1。当用原子序数较高的金属作阳极靶时，除去 K 系射线外，还可得到 L、M 等系的特征 X 射线。在通常 X 射线衍射工作中，一般均采用强而窄的 K_{α} 谱线，例如管电压为 30 千伏时，CuK $_{\alpha}$ 谱线的强度约为连续谱其邻近射线强度的 90 倍，而且半高宽度 < 0.001 埃。

当继续提高管电压时，图 1-6 中各特征 X 射线的强度不断增高，但其波长不变。

(二) 实验规律

系统的实验证明：

1. 产生特征 X 射线所需的最低管电压 (称为激发电压 $V_{\text{激}}$)，对不同的阳极靶是不同的，它由阳极靶的原子序数 Z 所决定 (见附录 2)。
2. 阳极靶不同，所产生的特征 X 射线谱的波长也不同。
3. 当管电压超过 $V_{\text{激}}$ 而进一步升高时，K 系特征 X 射线的波长不变，而强度按 n 次方的规律增大。

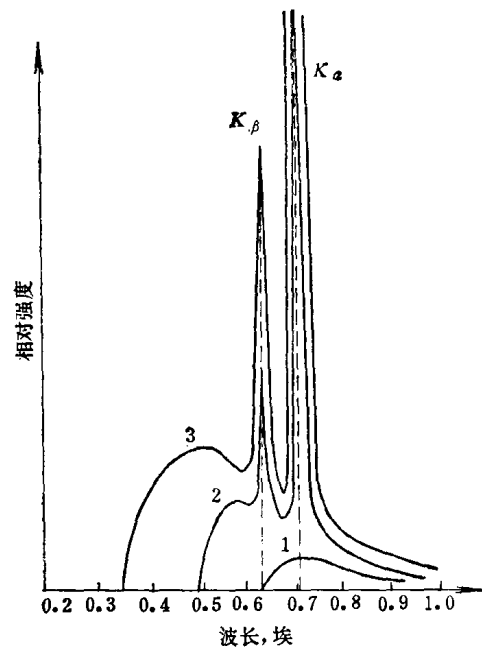


图1-6 钨阳极管发射的 X 射线谱
1—20千伏 2—25千伏 3—35千伏

$$I_{\text{特征}} = ci(V - V_{\text{激}})^n \tag{1-11}$$

式中 i 为管电流； V 为管电压； $V_{\text{激}}$ 为激发电压，由阳极靶所决定； n 为常数，约为1.5~2； c 为比例常数，与特征X射线的波长有关。

4. 特征X射线和连续X射线强度的比率，在X射线管的工作电压 V 为激发电压 $V_{\text{激}}$ 的3~5倍时最大。

(三) 产生机理的分析

上述实验规律说明特征X射线的产生是和阳极靶的原子结构密切相关的。原子是由带正电的原子核与绕核旋转的电子所组成，电子分布在不同能级的电子壳层（轨道）上，距核最近的第一层电子的能量最低，称K层；第二层称L层，具有较高的能量；其外则为M、N、O、P等层。两相邻层能量之差依K、L、M……的次序急剧地减小，K与L层间的能量差最大，见图1-7。每一壳层具有一定的电子数目；K层为2，L层为8，M层为18，N层为32。

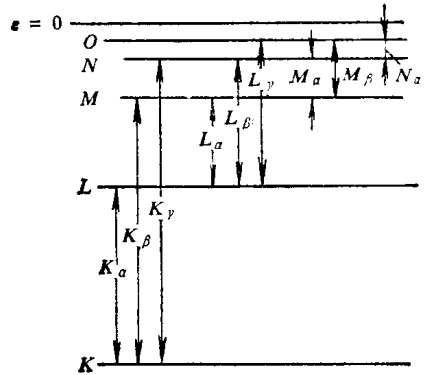


图1-7 原子中电子层的能级分布图

当高速的阴极电子流冲击阳极靶时，可以将阳极靶原子内层的某些电子从其原属的电子壳层击出，转移到能量较高的外部壳层上，或者击出原子系统之外而使原子电离。这样，高速电子就将自身的能量给与了阳极靶原子，并使之受激发而处于高能态。如果是由最内层即K层电子转移到未饱和的最外X层时，则阴极射来的电子的能量 eV 应大于或等于 $\epsilon_x - \epsilon_K$ ，此处 ϵ_x 与 ϵ_K 分别为未饱和的X层与K层上电子的能量。自然，处于激发状态的原子，因其能量高于正常状态，是不稳定的，故必然要向稳定的低能态转化，即原在较外层的电子将跃入内层以填补空位，使原子系统的总能量重新降低而趋于稳定。假定K层被激发后由L层跃迁来一个补充电子，其降低的能量 $\epsilon_L - \epsilon_K$ 将以一个X射线光子的形式辐射出来，辐射的频率由下式决定，也即由原子的能级差决定：

$$\begin{aligned} h\nu_{L \rightarrow K} &= \epsilon_L - \epsilon_K \\ \nu_{L \rightarrow K} &= \frac{\epsilon_L - \epsilon_K}{h} \end{aligned} \tag{1-12}$$

这就是波长一定 $\left(\lambda = c / \nu_{L \rightarrow K} = \frac{hc}{\epsilon_L - \epsilon_K} \right)$ 的特征辐射。

同样，电子也可以由M、N等层跃入缺位的K层，由于各壳层电子能量不同，故辐射出来的特征X射线的波长也各不相同。

由于K层电子被激发，并接着由其它高能级的外壳层电子跃入而产生的特征X射线称为K系射线。其中，电子由L层→K层所产生的称 K_α 射线，由M→K层的称 K_β 射线等等，如图1-8所示。一些金属的K系射线见附录2。

由于L层电子被激发而产生的特征X射线称为L系射线或L系辐射，其它类推。

根据这种理论，很容易解释特征X射线的一般规律，例如为了获得K系射线，必须使高速电子的动能足以把原子中K层电子击出，也就是必须使 $eV \geq \epsilon_x - \epsilon_K$ ，即 $V \geq \frac{\epsilon_x - \epsilon_K}{e} = \frac{h\nu_{K \text{最大}}}{e}$