

高等学校教学参考书

固体X射线学

(一)

黄胜涛 主编

高等教育出版社

53.8192

543

=/

高等学校教学参考书

固体X射线学

(一)

黄胜涛 主编

zk546/01

高等教育出版社

内 容 提 要

本书分(一)、(二)两册出版:《固体X射线学(一)》和《固体X射线学(二)》。

在(一)册中主要包括固体X射线学的基础内容,并尽可能反映本学科发展的新成就。共有十二章,包括晶体几何学基础,X射线物理学基础;X射线衍射的运动学理论;完整晶体衍射的动力学理论;X射线衍射照相术和其他各种常规实验技术及数据处理方法等内容。

在(二)册中包括:晶体结构的测定;非晶态物质的X射线散射分析;衍射动力学理论基础;扩展X射线吸收谱法结构分析等内容。

(一)册可供固体物理、金属物理、材料科学等专业的大学生使用,而(二)册更适合上述专业的研究生作教学用书,也可供这些专业的大学生选用。(一)、(二)册也可供有关专业的科技工作者参考。

高等学校教学参考书

固 体 X 射 线 学

(一)

黄胜涛 主编

*

高等教育出版社出版

新华书店北京发行所发行

顺义小店印刷厂印装

*

开本 850×1168 1/32 印张18.5 字数325,000

1985年7月第1版 1985年7月第1次印刷

印数: 00,001—4,500

书号 13010·01023 定价3.40元

出版者前言

为了适应高等学校固体物理(包括各分支学科)课程教学的需要,高等学校理科物理学教材编审委员会固体物理编审小组和我社组织编写了一套固体物理学科的教学参考书,其中包括固体物理学及其各分支学科的基础理论课程、实验课程用的教学参考书和一部《固体物理学大辞典》。这些书将由我社陆续出版。

本书分(一)、(二)两册出版,一册由武汉大学黄胜涛教授主编,由北京钢铁学院赵伯麟、兰州大学吴宝善审阅。

《固体 X 射线学》序

X射线衍射是探索物质微观结构及结构缺陷等问题的强有力工具。自劳厄于1912年从理论上预测并用实验证实了X射线射到晶体上能发生衍射现象,推导出劳厄衍射方程,从而奠定了X射线衍射学的基础以来,经过70年,在理论、实验方法、设备等方面都得到了广泛深入的发展。目前它不但被用来研究固体,还被用来研究液体,不但应用于晶态物质(单晶体和多晶体),还能应用于非晶态物质以及生物组织等的结构分析。因此,X射线学不但早已是物理学的一个分支,而且是近代物理分析方法中的一个重要环节。

近年来,由于高能量X射线源如高功率旋转阳极X射线发生器、脉冲X射线发生器、电子同步加速器辐射以及高效率辐射探测器如固体探测器、一维及二维位置灵敏正比计数器等的应用,使得X射线的应用范围进一步扩大。过去由于衍射或散射强度太低,因而难以定量研究甚至有意避免的一些现象,现在已经能够顺利地进行实验分析,由此得到了很多新的信息,使得X射线衍射学获得了新的强大生命力。

武汉大学物理系黄胜涛教授等从事X射线衍射学的教学、科研工作多年,积有大量的宝贵经验,他们所编著的《固体X射线学》一书就是这些经验的总结。本书在理论基础及实验方法等方面都有丰富的内容,文字深入浅出,叙述清楚,适于高等学校固体物理、金属物理、材料科学及其它有关专业师生及这些方面的科技工作者参考、教学之用,是国内这一方面有数的著作之一,故乐为之序。

许顺生 1983 年 10 月于上海

编者的话

这本书是在多年来为金属物理专业本科生开设的X射线学课程讲义基础上改写而成的。1963年我按当时综合大学培养目标写成讲义,经过四届学生使用。后来,我和X射线小组的同志们于1980年又按现在培养目标作了修订。这一次增加了一些新技术和有关理论,特别是新加了X射线衍射照相术及其所依据的完整晶体衍射动力学理论,非晶态物质结构分析等三章,以适应科技发展的需要。到目前又有三届本科生用过这本讲义。现在出版的这本书就是在此基础上,根据历年的教学经验,与一些科研单位的研究人员合作,增删改写而成的。

这本书的编写目标主要有下述四方面:

在读者对象上,注意固体物理专业、金属物理专业、材料科学专业本科生以及金相热处理专业的学生和上述各专业的教师及X射线科技工作者的需要;

在内容选择上,尽可能反映最新科学成就,力求理论与实验技术并重,以适应当前国内科技发展的需要;

在内容阐述上,既奠基在综合大学物理系普通物理学知识基础上,又注意深入浅出、概念清楚,便于自学;

在章节编排和叙述上,实验技术与有关理论紧密衔接,并尽量使后面以实验技术为主的六章互相独立,以应对《固体X射线学(一)》的教学和本科生及部分硕士研究生毕业论文的各种不同需要,以便于选学。

尽管我们编写小组在主观上力求达到上述目标,但由于水平和学识所限,必然会有不少部分还不能尽如读者之意。因此我代表编写小组向同行专家和使用这本书的老师们、同学们、科技工作

者们提出一个诚恳的希望,请你们将发现的问题和宝贵意见寄给我们,以便在再版时删节、修改和补充。

本书各章编写人员名单如下:

- | | |
|---------------------|------------------|
| 第一、第二、第三、第五、第八章和第九章 | 黄胜涛 |
| 第四章 | 黄胜涛、王仁卉(武汉大学) |
| 第六章 | 黄胜涛、陆金生(北京钢研总院) |
| 第七章 | 黄胜涛、唐承欢(武汉大学) |
| 第十章 | 魏铭鉴(武汉大学) |
| 第十一章 | 黄胜涛、杨传锋(上海冶金研究所) |
| 第十二章 | 黄胜涛、罗远苏(武汉大学) |

本书在编写和定稿过程中得到魏铭鉴、唐承欢、赵继良、罗远苏等同志的大力协助,梁红同志帮助绘图,特此致谢。

黄胜涛 1983 年 12 月

符 号 表

一、拉丁字母

$A(\theta)$	吸收因数
$\text{\AA}^*$	X 射线波长单位, $\lambda_{\text{W}K\alpha} = 0.2090100 \text{\AA}^*$
a	晶体点阵参数之一
a	晶体点阵基矢之一
a^*	倒易点阵参数之一
a^*	倒易点阵基矢之一
B	温度因数中的德拜参量
B	衍射线实测半峰全宽度
b	晶体点阵参数之一
b	晶体点阵基矢之一
b	位错线的柏氏矢量
b	衍射线仪器半峰全宽度
b^*	倒易点阵参数之一
b^*	倒易点阵基矢之一
C	六方点阵 C 坐标系符号
C	C 面心布喇菲点阵符号
c	晶体点阵参数之一
c	晶体点阵基矢之一
c^*	倒易点阵参数之一
c^*	倒易点阵基矢之一
D	位错密度
d	晶面间距
d	六方点阵第三基矢

F	面心布喇菲点阵符号
$F(s)$	s 方向衍射的结构因数
$F(hkl)$	hkl 衍射的结构因数
f	原子散射因数
f'	反常原子散射因数
f'_K	K 吸收限附近反常与正常散射的实部差值
f''_K	K 吸收限附近反常与正常散射的虚部差值
f_e	电子散射因数
G	奥氏体分析 G 因子
$G(r)$	全约化分布函数
$G_{ij}(r)$	偏约化分布函数
$g(r)$	全双体分布函数
$g_{ij}(r)$	偏双体分布函数
g	倒易矢量
g	单层原子面衍射本领
g_0	单层原子面向前衍射本领
hkl	衍射 (或反射) 指数; 倒易点坐标
(hkl)	反射面指数
$\{hkl\}$	晶面单形指数
h	普朗克常数
I	体心布喇菲点阵符号
$I(s)$	全干涉函数
$I_{ij}(s)$	偏干涉函数
I_0	入射线束强度
I_s	衍射线束强度
I_T	透射线束强度
i	反演中心符号
K	标识谱 K 线系符号

$K\alpha, K\beta$	K 线系 α, β 谱线
K, K_s^j, K_a^j	K 值法定量相分析 K 值
k	晶面指数之一
k	波尔兹曼常数
k	散射波矢 $(k = \frac{2\pi}{\lambda})$
k_0	入射波矢 $(k_0 = \frac{2\pi}{\lambda})$
L	标识谱 L 线系符号
L	晶粒在反射面法线方向的平均线度
LP	洛伦兹-偏振因数
l	晶面指数之一
M	温度因数的指数
m	反映对称元素符号
N_c	单位体积晶胞数
n	多重性因数
n	折射率
P	简单布喇菲点阵符号
P	应力系数
$p(\theta)$	反射面在 θ 方向的衍射本领
Q	单位体积累积反射本领
q	单层原子面的反射本领
q_0	单层原子面的向前衍射本领
R	三方点阵符号
R	晶体点阵结点位矢
R_D	缺陷晶体中晶胞位移矢量
R_i	单层原子面的透过率
RDF	全径向分布函数

r	晶体点阵位矢
r_{mn}	两原子间距离
R_p	由第 p 层原子面反射的射线
s	散射 (衍射) 矢量 ($= k - k_0$)
T_0	入射到晶体上的射线
T_p	入射到第 p 层原子面的射线
uvw [[uvw]]	} 晶体点阵结点坐标
[uvw]	
$\langle uvw \rangle$	晶向指数, 晶带轴指数
$\langle uvw \rangle$	晶向单形指数
$(uvw)^*$	倒易点阵面指数
$\overline{u^2}$	原子热振动均方位移
V_c	多晶材料中微晶体体积
v	入射线偏离 θ_0 角的参量
W_{ij}	散射强度的权重因子

二、希腊字母

α	取用角
α	晶体点阵参数之一
α^*	倒易点阵参数之一
β	衍射线物理半峰全宽度
β	晶体点阵参数之一
β^*	倒易点阵参数之一
γ	原子面的层数
γ	X 射线水平发散角
γ	晶体点阵参数之一
γ^*	倒易点阵参数之一
γ_v	X 射线竖向发散度

δ	折射率参量, $n=1-\delta$
$\xi\eta\zeta$	倒易空间坐标
θ	掠射角
$\theta_B, \theta_0, \theta$	布喇格角
Θ	德拜温度
λ_K	K吸收限波长
μ, μ_0	线吸收系数
$\frac{\mu}{\rho}$	质量吸收系数
$\rho(r)$	电子几率密度函数
$\rho(r)$	原子密度分布函数
$\rho(xyz)$	电子密度分布函数
σ	宏观应力
σ_ϕ	ϕ 方向应力
σ_x, σ_y	主应力
χ	相邻原子面入射振幅比
Ω	正点阵晶胞体积
Ω^*	倒易点阵晶胞体积

目 录

符号表	i
第一章 几何晶体学基础	1
§ 1 晶体的宏观对称	1
§ 2 空间点阵	10
§ 3 倒易点阵	26
§ 4 几种典型的晶体结构及晶体内原子的直径	40
§ 5 微观对称元素和空间群	50
第二章 X 射线物理学基础	56
§ 1 X射线的性质	56
§ 2 X射线谱	57
§ 3 X射线的吸收	67
§ 4 X射线的散射	76
§ 5 X射线源	87
第三章 X 射线衍射的运动学理论(I)	96
§ 1 晶体对X射线的衍射	97
§ 2 结构因数	107
§ 3 用倒易点阵概念表示衍射·厄瓦尔德作图法	114
第四章 研究固体结构和成分的主要仪器和方法	121
§ 1 粉末照相法	122
§ 2 粉末X射线衍射仪	131
§ 3 X射线荧光分析仪	156
§ 4 X射线能量色散谱仪	160
§ 5 转晶照相法	166
§ 6 X射线晶体单色器	170
附录 X射线的防护知识	175

第五章 X 射线衍射的运动学理论(II)	178
§ 1 X 射线衍射强度的资用公式	178
§ 2 吸收对衍射强度的影响	186
§ 3 温度因数	189
§ 4 粉末法累积强度公式及强度计算举例	193
第六章 X 射线物相分析	197
§ 1 粉末衍射卡及其索引简介	198
§ 2 X 射线定性相分析	204
§ 3 X 射线定量相分析方法	214
§ 4 定量相分析的实验工作	224
§ 5 淬火、回火钢的相分析	228
第七章 点阵参数精确测定法及其应用	235
§ 1 粉末衍射仪法	236
§ 2 德拜相法	250
§ 3 单晶法	256
§ 4 点阵参数法在功能材料研制上的应用	259
§ 5 点阵参数法在相图测绘上的应用	261
§ 6 点阵参数法在宏观内应力测定上的应用	264
第八章 晶体的取向和织构	274
§ 1 极射投影法	274
§ 2 劳厄法	282
§ 3 劳厄相法测定单晶取向	287
§ 4 衍射仪法测定单晶取向	296
§ 5 材料中的织构	297
第九章 晶粒度和点阵畸变的测定	308
§ 1 单晶亚结构的劳厄法观测	308
§ 2 晶粒度测定的衍射线宽度法	312
§ 3 形变金属衍射线宽化的理论解释	318
§ 4 微光束技术及其应用	321
第十章 完整晶体衍射的动力学理论	330

§ 1 衍射动力学理论: 对称布喇格情形	331
§ 2 衍射动力学理论: 对称劳厄情形	339
§ 3 镶嵌晶体	347
第十一章 X 射线衍射貌相术	351
§ 1 貌相图的衍衬成象原理	352
§ 2 貌相术的实验方法	355
§ 3 X 射线貌相术的一些应用	372
第十二章 非晶态物质结构的 X 射线分析	377
§ 1 普适散射方程式	378
§ 2 非晶态物质径向分布函数 RDF 的推导	381
§ 3 实验安排和数据处理	391
§ 4 测定 RDF 的过程举例	396
附录一 元素质量吸收系数表	401
附录二 平均原子散射因数表	404
附录三 元素的晶体结构表	407
索 引	412

第一章 几何晶体学基础

这一章讨论晶体内物质的空间分布特性、所遵循的规律及其描述的方法。

§ 1 晶体的宏观对称

大家都知道, 固态物质有两种: 晶质和非晶质。这两者的基本差别在于它们的内部结构是否具有规则性, 即是说, 在内部结构中粒子(原子、离子或分子)的分布是否具有严格的周期性, 凡是有周期性的固态物质, 都称为晶质, 反之为非晶质。氯化钠和石英玻璃分别是这两类固态物质的典型。晶质与非晶质内部的原子分布示意地绘于图 1-1。由图 *a* 可见晶质内部离子分布无论沿哪一个方向都具有周期性, 即有长程序; 由图 *b* 可见非晶质离子分布无周期性, 即无长程序。

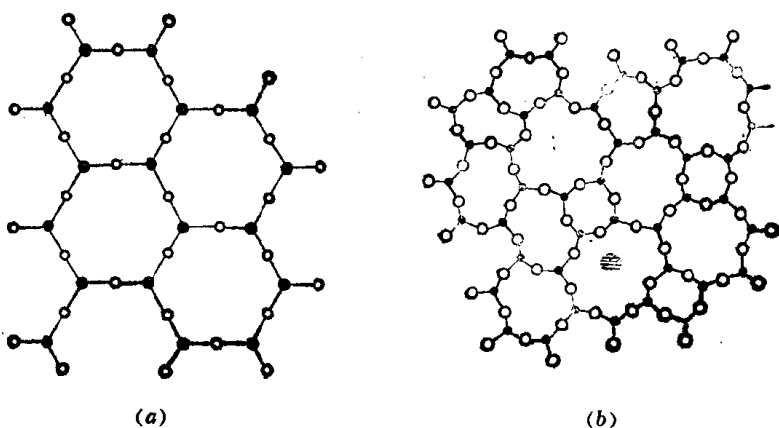


图1-1 化学成分同为 A_2O_3 的两类固体二维原子结构: (a) 晶质;
(b) 非晶质

§ 1-1 晶体的外形

绝大多数晶态物质在适当的生长条件下能够自发地长成多面体的外形。图 1-2 示出氯化钠晶体可能长成的一些多面体外形。但也有些晶态物质,其中主要是金属,不易甚至不能长成天然的多面体外形。

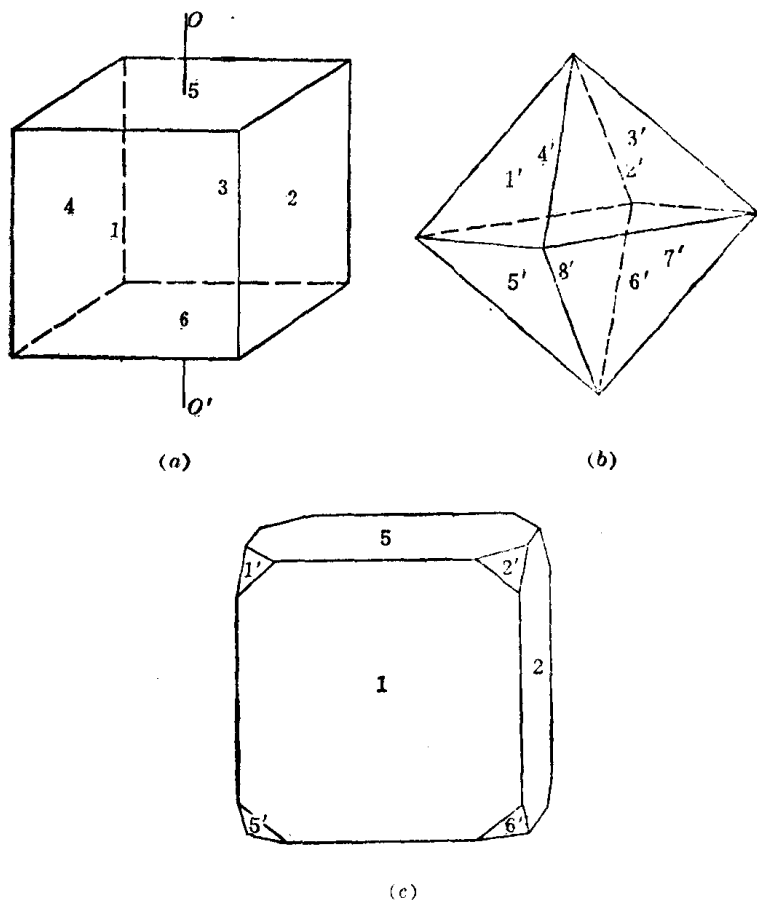


图 1-2 氯化钠可能出现的一些结晶多面体

结晶多面体的面称为晶面;边棱称为晶棱;晶棱的会集点称为顶点。有些晶体常具有解理性,即是说这些晶体常可平行于某一