



科学器材试用教材

仪器仪表部分

第四分册

X射线分析仪器

中国科学院技术条件及进出口局
中国科学院干部进修学院



79.86715

128

c 7

25#

X 射线 分 析 仪 器

江苏工业学院图书馆
藏书章

中国科学院技术条件进出口局

中国科学院干部进修学院

前 言

中共中央〔1981〕10号文件指出，科学院要抓好科研工作的基本建设。抓好器材工作，改善实验手段，是科研工作基本性建设的一个重要组成部分。

为建设一支具有高度文化知识和管理技术的科学器材队伍，适应科技现代化的需要，我院委托浙江大学、成都科技大学，西安光机所等单位编写了这套器材干部学习材料。定名为《科学器材试用教材》。全套书分为：仪器仪表、机械电工、材料、电子测量仪器、科学器材供应与管理五部分。其中：

仪器仪表：包括科学仪器与工业自动仪表，十五个分册，由黄邦达同志主编；

机械电工：包括机械设备和电工器材，两个分册，由赵污、李全铭同志主编；

材料：包括金属材料和非金属材料，九个分册，由董锦川、胡仲培二同志主编；

电子测量仪器：由吴景渊、孙焕根二同志主编；

科学器材供应与管理：由陈东还同志主编；

此教材是根据器材工作的特点和我院常用的科学器材编写的。着重介绍科学器材的基本结构、原理、性能、参数、用途、使用维护技术及国内外发展动态。内容力求深入浅出，通俗易懂。

本材料适合具有一定工作经验的在职器材干部学习，也可作为培训具有高中文化程度的年青的器材干部的试用教材，还可供从事科研、生产、教学等部门实验、计划、管理干部学习参考。

在当今科学发展的情况下，科学器材日新月异，更新的速度也随之加速。此教材仅选择当今科学研究常用的仪器、设备和材料，今后将随着科学技术的发展不断地充实提高。

在教材编写过程中，得到了浙江大学，成都科技大学，厦门大学等单位的大力支持，谨致以衷心的感谢。向所有参加教材编写，修改及讨论工作的教师，科研和器材人员表示衷心的感谢。

这套教材是按照科学器材工作的要求和特点组织编写的，由于缺乏经验，不足之处在所难免，希望读者提出宝贵意见。

中国科学院技术条件及进出口局
中国科学院 干部进修学院

一九八二年六月廿六日

编者话

(X射线分析仪器)的编写工作是在中国科学院技术条件及进出口局的领导下,由中国科学院朱国培、浙江大学黄邦达同志组织审稿和定稿工作。

这本试用教材,适用于在职器材干部的培训和自学;也可供从事科研工作和高等院校教学实验工作者参考。

教材内容要点:

一、同类型仪器概述,重点阐述分类和用途。

二、仪器的主要工作原理,着重阐明组成仪器的方框图、功能和仪器参数的物理概念。力求深入浅出,通俗易懂。

三、在整机介绍中,偏重于先进性、代表性和特殊性。

中国科学院化冶所石笠陶同志、地质所李家驹同志、贵阳地化所陈静渝同志、大连化物所刘振玉同志等参加讨论定稿并协助收集有关资料。浙江大学王锡源同志等帮助出版,进行具体组织工作,在此表示衷心感谢。

鉴于编写者水平有限和缺乏编写此类教材的经验,谬误及不当之处,望读者评批指正。

浙江大学材料系 程锋 钱敏

一九八四年元旦

目 录

第一章 X射线仪的发展概况	
第一节 X射线的发现及发展	1
第二节 X射线仪的分类及其应用	2
第二章 X射线的基本知识	
第一节 X射线的本质	4
第二节 X射线的产生	5
第三节 X射线的强度	5
第四节 X射线谱	6
一、连续光谱	6
二、特征光谱	7
三、单色器	9
第五节 晶体的结构简介	10
一、点阵与晶胞	10
二、对称与晶系	10
三、晶面与晶面指数	11
第六节 X射线的散射衍射与吸收	11
一、X射线的散射	11
二、X射线的衍射	12
三、X射线的吸收	12
第三章 X射线分析仪的主要设备部件	
第一节 X射线源	14
一、X射线管	14
二、高压变压器	17
三、整流电源	17
四、X射线的安全防护	17
第二节 探测系统	18
一、底片感光法	18
二、电离法	18
三、荧光屏法	18
第三节 记录系统	19
一、脉冲高度分析器	19
二、定标器	19
三、计数率仪	19
四、记录仪	19
第四节 测角仪	20
第四章 X射线衍射分析仪	
第一节 照相法	22
一、单晶法	22
二、粉末法	24
第二节 衍射仪法	27
一、衍射仪的结构	28
二、衍射仪法与照相法比较	32
三、扩大衍射仪应用范围附件	32
第三节 小角散射法	32
一、小角散射原理	32
二、小角散射仪结构	33
三、小角散射仪的应用	33
第五章 X射线荧光光谱仪	
第一节 荧光分析的基本原理	34
一、基本概念	34
二、基本原理	36
第二节 X射线荧光光谱仪的结构	37
一、波长色散X射线荧光光谱仪	37
二、能量色散X射线荧光光谱仪	41
三、对X射线荧光光谱仪的评价	41
第三节 荧光分析的应用	42
第六章 X射线吸收分析法	
第一节 多色X射线吸收分析法	44
一、基本原理	44
二、X射线吸收分析仪的结构	45
三、分析方法	46
第二节 单色X射线吸收分析法	46

一、基本原理	46
二、仪器结构	47
三、分析方法	47
四、本方法的优缺点	47
第三节 X射线吸收光谱分析法	47
一、基本原理	47
二、仪器结构	49
三、X射线吸收光谱分析法优缺点	50
第四节 实际应用	50
一、元素的测定	51
二、固体的疏松度测定	51

第七章 X射线应力分析仪

第一节 X射线应力测定原理	52
一、X射线应力测定简述	52
二、X射线应力测定原理	52
第二节 X射线应力测定仪的结构	53
第三节 X射线应力仪的应用	55

一、应力仪操作的主要步骤	55
二、应力仪测量方法概述	56
三、测定应力举例	56

第八章 X射线探伤仪

第一节 X射线探伤原理	57
一、X射线探伤简述	57
二、X射线探伤原理	57
第二节 X射线探伤仪的结构	58
第三节 X射线探伤仪的应用	62
附表、	

1、X射线衍射相机的分类	63
2、X射线衍射显微相机一览表	64
3、国外X射线衍射仪	65
4、国内X射线衍射仪	65
5、国外X射线荧光分析仪	66
6、部份国产及国外X射线探伤机	66
7、国内外X射线探伤机规范	67

第一章 X射线的发展概况

第一节 X射线的发现及其发展

1895年,德国物理学家伦琴(W.K.Rontgen),在研究阴极射线时,发现了一种肉眼看不见的新射线。此种射线可使荧光屏发光,具有很高的穿透能力,亦可使气体发生电离,但不因电磁作用而发生偏折,当时由于对此种新射线本质了解甚少,所以伦琴称此射线为X射线。X射线的发现立即引起了科学界的浓厚兴趣。有些人致力于探求其本质,但更多人则在寻找它的实际应用。六个月后,医学界就已普遍将X射线运用于诊断及医疗。直到1912年劳厄(M.Von.Laue)利用X射线通过胆矾晶体后发生衍射的实验成功以后,X射线本质才最后得到确定。同时开创了X射线结晶学的新领域,1913年布拉格(W.L.Bragg)在研究晶体结构中建立了布拉格方程及莫塞莱(H.G.J.Mosely)建立了X射线光谱分析法,总结出X射线波长与元素原子序数之间存在着简单的数学关系,莫塞莱定律,为X射线光谱分析奠定了理论基础。

1916年,德拜及谢尔(P.Debye及P.Scherrer)发明了“粉末法”之后,粉末法才开始得到应用。1919年喜波耳(Schiebold)倡议用周转晶体法来进行结构分析。1922年哈廷(A.Hadding)首先将X射线光谱明确地应用于化学分析。1924年魏森堡(K.Weissenberg)设计了在结构分析中应用极为广泛的魏森堡法。1925年,赫威希(G.Von.Hevesy)提出了用二次发射的X射线光谱进行定量分析。1928年盖格和米勒(H.Geiger和W.Muller)研制了一种可靠性很高的充气型探测器从而为X射线衍射仪分析打下基础。1939年,霍士曼(R.Hosemann)利用小角散射测定微观粒子大小。1949年卡斯塔和纪尼叶(R.Castaing和A.Guinier)试制成第一台(微区分析)电子探针显微分析仪。

六十年代以来,由于现代科学技术的迅速发展与电子技术、高真空技术探测、计算机、电视等先进技术相结合使X射线仪器向大功率、高稳定性、高灵敏度、自动化、几种仪器联合的方向发展。如大功率的细聚焦管、旋转阳极X射线管,目前已达到几十千瓦的产品,除此之外,尚有同步加速器、同位素作为光源,它具有结构简单,节省电力,可省去昂贵的高压发生器和X射线管。光源稳定,工作时不受水、电的影响,是具有发展前途的X射线激发源。

利用电子计算机进行仪器的自动程序控制,并进行数据的贮存和处理,可以实现X射线分析仪的自动分析。

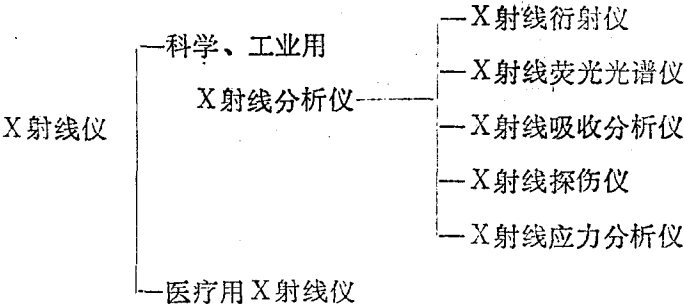
可以期望,微区域分析衍射仪、能量色散衍射仪、自动化衍射仪将得到进一步发展,而

X射线衍射还将进一步与X射线荧光、电子探针、电子衍射、中子衍射等技术相结合，向着多机联用的方向发展。

第二节 X射线仪的分类及其应用

一、X射线仪的分类

X射线仪根据用途不同大致上可分为科学、工业用X射线仪和医疗用X射线仪两大类。见表(1—1)



表(1—1) X射线设备的分类

二、X射线衍射仪的分类

X射线衍射仪根据试样的形态可分为多晶体法(粉末法)、单晶体法和非晶质法三大类。又根据X射线检测方法不同，又可分为使用胶片的摄影法和使用光电计数器的计数法两大类。摄影法主要采用X射线照相机，而计数法则备有计数管、计数率计、脉冲波高分析器、定标器、记录器等等附件。同时还可以使用各种用途的附加装置，应用范围广泛。见表(1—2)。

三、X射线仪的应用

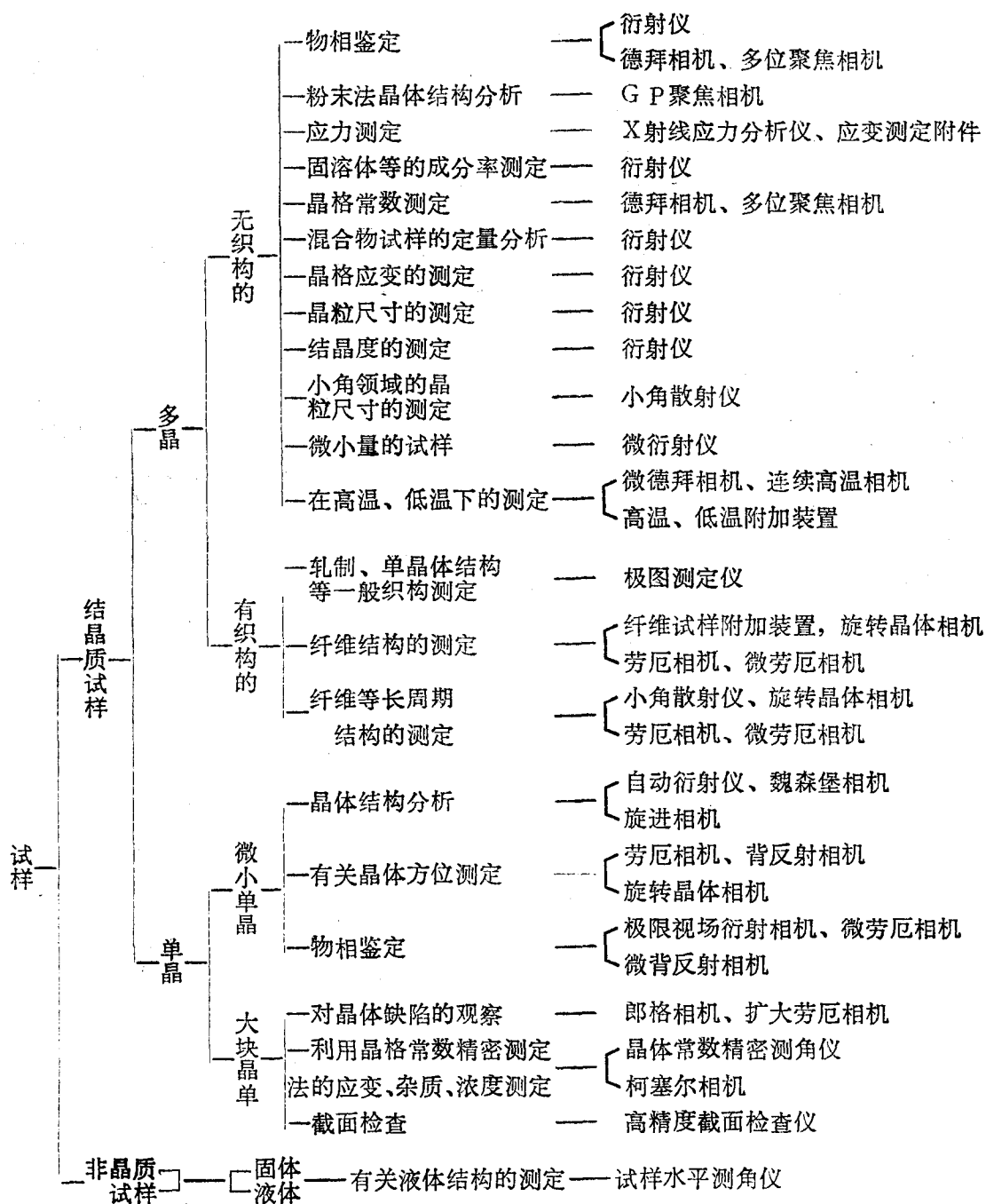
X射线仪是采用X射线法获得信息必不可少的工具，目前在工业和科学技术中已被广泛采用。主要应用分三方面：

(一) X射线吸收，应用于工业X射线探伤、固体松散度的测定、物质厚度测定、汽油中含铅量分析及海关检查等等。

(二) X射线衍射，是目前应用最广的一个方面，测定晶体结构、物相分析、混合物定量分析、晶体粒子尺寸、测定物质内应力及原子间结合力，考古文物研究等等。

(三) X射线荧光，主要应用于对物质元素的定性、定量分析。例如，食品中微量有毒元素的测定。植物叶上杀虫剂的探测等等。

表(1—2) 按试样形状区分的X射线衍射仪的分类



第二章 X射线的基本知识

X射线是德国物理学家伦琴于1895年在研究阴极射线的时候发现的。当时，由于对这种新射线的本质不认识，故称之为X射线。后来人们为了纪念他的发现又称为伦琴射线

第一节 X射线的本质

X射线本质是一种与无线电波、红外线、可见光、紫外线， γ 射线等相同的电磁波（严格说来，应称为电磁辐射）。德国物理学家劳厄于1912年证明了X射线通过晶体发生了衍射现象。进一步的研究证明了X射线是一种波长很短的电磁波。它的波长范围大约在 $0.01\text{\AA} \sim 100\text{\AA}$ 之间。（一埃 $\text{\AA} = 10^{-8}$ 厘米）而通常被用作X射线分析的波长在 $0.1 \sim 10\text{\AA}$ 范围内。如图2—1所示。

X射线以光速直线传播（ $C = 3 \times 10^8$ 米/秒），其传播过程中不发生质量转移，在电场或磁场中不发生偏转。直线传播是X射线准直及聚焦的基础。

X射线在与物质相遇时，根据不同情况，可能毫无影响地穿过物质或者受到物质的反射，折射；或受针孔、狭缝光栏或晶体的衍射；还可能发生偏振、相干或非相干散射、光电吸收。晶体衍射是波长色散的基础，散射是二次光谱中背景的主要来源。光电吸收是X射线二次（荧光）激发的基础。

X射线可以使气体、液体及固体电离，从而改变其电学性质。气体电离是充气型X射线探测器（电离室）——盖格计数器及正比计数器的基础。

X射线能产生光解作用（辐射引起的化学变化），包括物质的暂时性或永久性色泽变化。光解作用在液体样品中能引起气泡及沉淀，并能使固体、压块及粉末标准样品老化。

X射线能引起永久性物理损伤（辐射损伤），如固体的破裂、裂缝、孔洞、剥落等；这种作用能使标准样品老化而影响使用寿命，

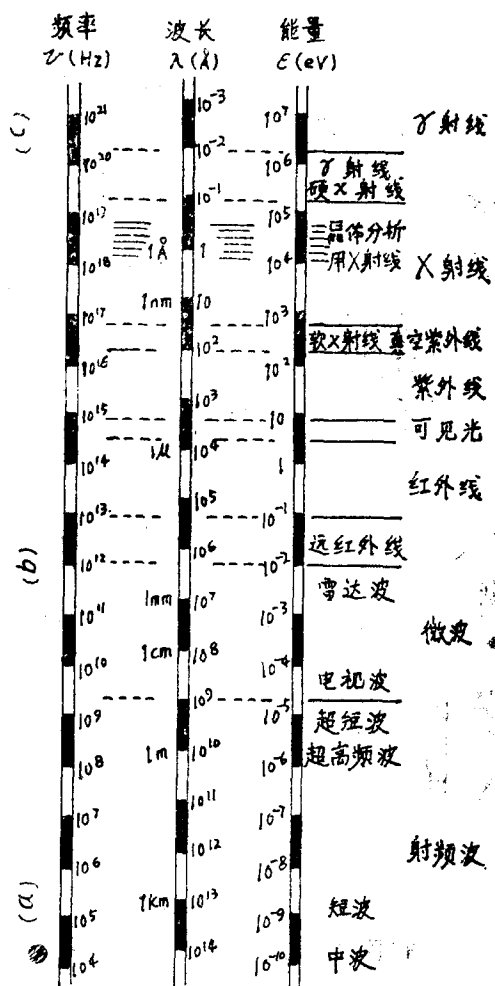


图2—1 电磁波的分类范围

并能使塑料样品槽薄膜和探测器的窗口由于长期使用而变质。

X射线可使感光材料曝光；这是X射线光谱照相记录和软片徽章剂量测定的基础。

X射线激发某些材料时能发出可见光及紫外光；这是闪烁计数器及荧光屏的发光基础。

X射线以非特征的连续光谱或以能表示发射元素特征的线状光谱和带状光谱的形式发射。这些辐射在物质中遭遇到不同的吸收，从而形成特征吸收光谱。X射线管发生的连续光谱主要用于激发特征的二次（荧光）光谱，而由样品散射的连续光谱是X射线荧光光谱背景的主要来源。特征X射线光谱是所有X射线发射光谱分析方法的基础。特征吸收光谱是某些X射线吸收分析方法的基础。

X射线激发物质能发出光子，俄歇电子及康普顿反冲电子。这是作为电子光谱化学分析（ESCA）二种形式或即X射线感生电子光谱及俄歇电子光谱的基础。

X射线可以杀伤，破坏生物组织或引起生物组织的遗传变异，这是X射线危害健康的根源。因为X射线是不可见的。另外，人的器官又无法察觉，所以这种损害是不知不觉的。

X射线表现出以上所述的粒子、波动二重性。其微粒（光子）特性包括光电吸收，非相干散射、气体电离及闪烁发光；其波动性包括光的传播速度、反射、折射、偏振及相干散射。

第二节 X射线的产生

当具有高速运动着的电子或其他具有一定能量的其他高能辐射流如 γ 射线及中子流撞击金属靶以后便能产生X射线。

要产生X射线需要具备如下条件的仪器：

一、能产生并发射自由电子（例如加热钨灯丝发射热电子）的电子源（即阴极）；

二、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。

三、在高速电子流的运动路程上设置一障碍物（即阳极）使高速运动的电子突然受阻而停止，这样靶面上就会发射X射线；

要产生X射线的X射线发生器主要包括：X射线管、高压变压器、整流电流、X射线仪电路控制系统和X射线防护设备等。

可惜的是在以电子撞击靶极，以X射线形式发出的能量非常弱，电子的大部分能量均在靶极转化为热能，这样会很快将靶极熔化，因此要采用流水冷却阳极靶。

由于X射线管产生X射线效率很低，在进行晶体衍射时效率就更低，因此衍射X射线束的强度是很微弱的，在照相时需将底片曝光数十分钟才能探测到衍射图象。目前为了提高X射线源的强度，采用转动阳极靶的方法来提高功率，它比普通焦点固定的管子功率可大五至十倍。

第三节 X射线的强度

X射线强度是指在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）来表示。其单位是尔格/厘米²·秒。

其测定方法与普通光线测定光度相同。将与X射线中心垂直的平面，截取一平方厘米，在一秒钟内一平方厘米面积所通过的X射线总能量，称为X射线强度。

由于X射线强度是与照相底片感光程度，荧光屏发光的亮度以及气体电离的程度有关，因此可以用这些方法来测量X射线的强度。在衍射分析中要测量X射线强度的绝对值是比较困难的，所以基本上都采用相对强度的比较。在采用计数管测量中，通常以单位时间内通过计数管窗口射入的光量子数作为强度的。

特别值得注意的是X射线强度和X射线光子能量是完全不同的两个概念。X射线光子的能量是指单个光子。它与X射线的频率成正比的，也就是与波长成反比的。波长越短X射线能量越大，穿透力越强。在同一波长的X射线束中，所有X射线光子的能量都相等， $\xi = h\nu$ 。而X射线强度是指单位时间内通过单位面积的光子数目，并不受X射线光子的能量所影响。因此强度大的长波X射线并不能穿透较厚的物体。

第四节 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。

由普通X射线管中发出的X射线可视为由两部分组成：一部分是从某一短波限 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，因它与白色光相似，也是各种波长的混合体，所以也称白色X射线或多色X射线；另一部分是具有一定波长的若干特强的X射线迭加于强度连续平滑变化的连续X射线谱之上，构成特征X射线或称标识X射线。这些谱线的波长随着X射线管中阳极靶材料而定。因它与单色可见光相似，所以也称单色X射线。

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。由于大量的电子射到阳极靶上的时间和条件不可能相同，这种射线具有连续的波长，形成一条连续的X射线谱。

当管电流一定时，改变管电压，并用适当的仪器装置测定发出的X射线波长和相应的相对强度，即得到如图2—2所示的连续X射线谱的强度分布图。

从图中可以看出每条曲线在短波方向的波长都有一个极限值 λ_0 。这是由于在大量电子中，有极少数的电子在一次撞击中速度即被制止，并立即释放出其所有能量，并将其全部能量，转化为光子能，所以辐射出的射线具有最高的频率即最短的波长。所以电子所获得能量：

$$eV = \frac{1}{2}mv^2 = h\nu_{\text{最大}} = hc/\lambda_0.$$

$$\therefore \lambda_0 = hc/eV = 12400/V \dots\dots\dots (2 \cdot 1)$$

e ——带电荷的电子 (4.803×10^{-10} 静电单位)

m ——电子质量 (9.11×10^{-28} 克)

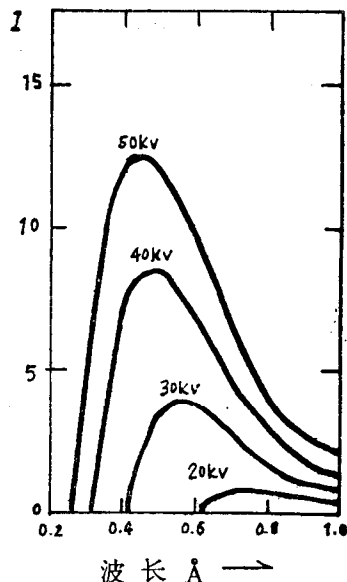


图2—2 在不同管电压时钨靶的连续X射线谱曲线

v —— 电子飞行速度(当电压为30千伏时速度为光速的1/3)

V —— 电子通过两极时的电压降(静电单位)

h —— 普朗克常数 (6.625×10^{-27} 尔格·秒)

ν —— X射线频率 (秒^{-1})

λ_0 —— X射线波长的最短极限(厘米)

由(2-1)式可以看出,波长极限值 λ_0 为工作电压的函数。当电压从20、30、40、50千伏增加时,曲线向左移动,其相应的 λ_0 值也逐渐减少,当管电压逐渐增高,各曲线的各波长射线的相对强度也相应增高,最高强度射线的波长逐渐变短,这些变动的原因是由于每秒钟所产生的光子数及每个光子的平均能量随着电压的增加而增高之故。

在工作中如需获得较高的强度的连续X射线时必须采用原子序数较大的重金属靶(一般为钨靶)、较大的X光管的管电流及施加尽可能高的X光管电压。

$$I = AiZV^2 \quad (2 \cdot 2)$$

$\therefore I$ —— 连续X射线的总强度

A —— 比例常数

i —— X光管的管电流(毫安)

Z —— 原子序数

V —— X光管的管电压(千伏)

连续X射线谱中短波限只与X光管电压有关而与靶的材料无关。如图2-3所示,虽然靶元素不同,但X光管电压相同,均为10千伏,所以根据式(2-1)其短波限均为1.24埃。此即表明在连续X射线谱中,只要X光管电压一样,不同靶元素的X光管所辐射出最强X射线光量子的能量是一样的。

在X射线荧光分析中,一般以连续X射线作为激发手段,希望能量较高。根据连续X射线谱的性质,在工作中通常采用重金属材料作靶极的X光管,例如钨靶、钼靶等,并尽可能在高的管电压下操作。

二、特征X射线谱

在一定的管电压之内,X射线分布曲线与管电压大小之间的关系图如图2-4所示。对钼靶X射线管来说,当电压低于20千伏时,只能产生连续X射线谱;当管电压高于20千伏时,除了产生连续X射线谱外,还在波长0.63 Å及0.71 Å处出现了两条强度特别高的谱线。(图2-4);当电压再增高时,这两条谱线强度都增加,但它们的位置和强度比不变。这两条谱线统称为钼的K系特征X射线。波长为0.71 Å的是 K_α 辐射线,波长为0.63 Å的是 K_β 辐射线。

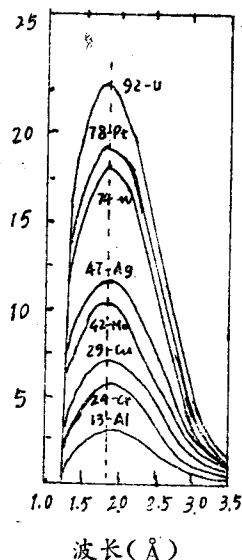


图 2-3

某些元素的连续X射线
(管电压均为10千伏)

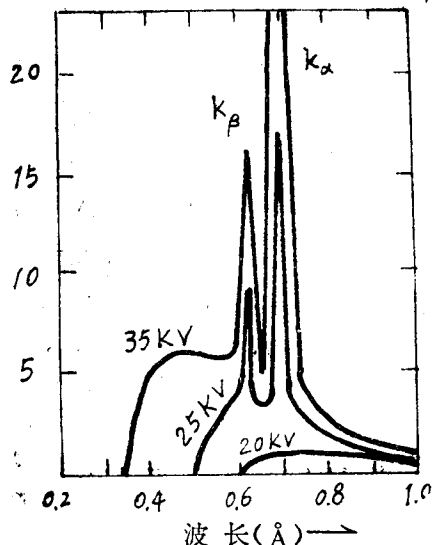


图2-4 由钼阳极射线管中发出的
射线强度曲线(示意图)

特征X射线产生的原因可以解释如下：在高电压的作用下，X射线管阴极电子流以很高的速度冲击阳极，当管电压达到某一临界值 V_K （ V_K 是K系特征谱线的激发电压）时，电子的动能就足以将阳极物质原子深层的某些电子击出其原属的电子壳层，迁移到能量较高的外部壳层；或者将该电子击出此原子系统而使原子电离（也就是外来电子将它的能量给与这个原子），而使这个原子的总能量升高；这时原在较外层的电子便跃入内层填补空位，使这个原子系统的总能量重行降低而趋于稳定。根据波尔的原子理论，原子中这种电子位置的转换将同时产生光子，发出X射谱线，它们具有一定的波长及频率，其能量根据普朗克及爱因斯坦的理论应为：

$$h\nu_{n_2 \rightarrow n_1} = \varepsilon_{n_2} - \varepsilon_{n_1} = RhC (Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (2 \cdot 3)$$

n_2, n_1 ——分别为电子转换开始及终了的电子层数。

$\varepsilon_{n_2}, \varepsilon_{n_1}$ ——分别表示此原子系统开始和终了时的能量。

$$\varepsilon_n = -\frac{2\pi^2 mc^4 (Z - \sigma)^2}{h^2 n^2}$$

R ——里德伯常数 $= 1.097373 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$

C ——光速。

Z ——原子序数。

σ ——屏蔽常数。

当产生特征X射线时其频率为：

$$\lambda = \frac{\varepsilon_{n_2} - \varepsilon_{n_1}}{h} = RC(Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (2 \cdot 4)$$

如果原子最内层（即K层 $n=1$ ）一个电子被击出至外围壳层，而由邻近的L层（ $n=2$ ）一个电子跃入填补时，则辐射出 $K\alpha$ 特征谱线。其频率 $\nu_{K\alpha}$ 由（2·4）式决定，而其波长 $\lambda_{K\alpha} = \frac{C}{\nu_{K\alpha}}$ 。如果电子由M层（ $n=3$ ）或N层（ $n=4$ ）分别跃入K层，则分别产生 $K\beta$ 和 $K\gamma$ 辐射， $K\alpha, K\beta, K\gamma, \dots$ 共同构成K系特征X射线谱。由（2·4）式看出 $\nu_{K\beta} > \nu_{K\gamma} > \nu_{K\alpha}$ ，而 $\lambda_{K\beta} < \lambda_{K\gamma} < \lambda_{K\alpha}$ ， $\varepsilon_{K\alpha} > \varepsilon_{K\beta}$ ，与实验相符合。同时N层、M层跃入K层的几率较由L层跃入K层的几率为小，所以 k_β, k_γ 辐射的强度比 k_α 辐射要低得多。同样如果L层电子被击出而由M、N……等层电子跃补则产生L系辐射，这样，K系、L系、M系……的辐射又共同构成这原子的特征X射线谱。因为L系、M系特征X射线的波长较长，容易被物质吸收，所以在衍射工作中主要应用K系特征X射线。图2—5为特征X射线谱线产生的示意图。

图2—6清楚表示了产生K系谱线的电子跃迁选择规则。因为原子的能级结构相当复杂，各个主能级都分别由若干子能级构成，L能级由 L_1, L_2, L_3 三个子能级构成，M能级由五个子能级构成，而N能级则由七个子能级构成……，电子各个能级间的跃迁必须服从一定的选择规则。从图中可见 $k\alpha_1$ 和 $k\alpha_2$ 是电子分别由 L_2, L_3 子能级移到K能级填充了空位而产生的，由于 L_2, L_3 子能级上电子的能量差别很小，因此产生的 $k\alpha_1$ 和 $k\alpha_2$ 的波长很接近，一般不易分辨，常以 $k\alpha$ 来代表它们。并以 $k\alpha_1$ 和 $k\alpha_2$ 为辐射波长的平均值作为 $k\alpha$ 辐射波长。由于 $k\alpha_1$ 和 $k\alpha_2$ 辐射的强度比约为2:1，故取

$$\lambda_{k\alpha} = \frac{2}{3} \lambda_{k\alpha_1} + \frac{1}{3} \lambda_{k\alpha_2}$$

作为 $k\alpha$ 辐射的波长。

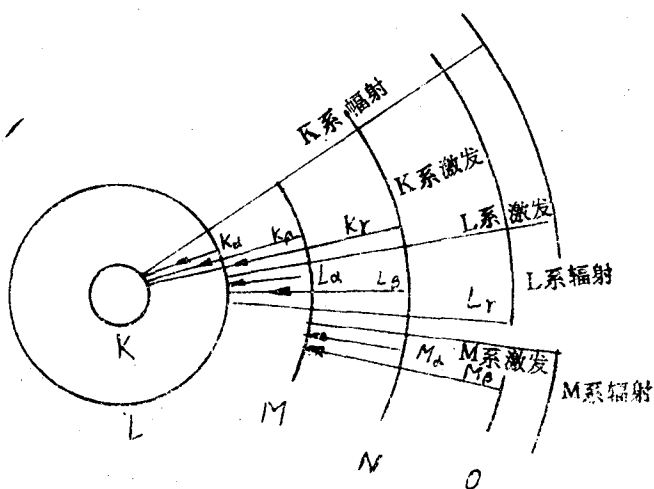


图2—5 特征X射线谱

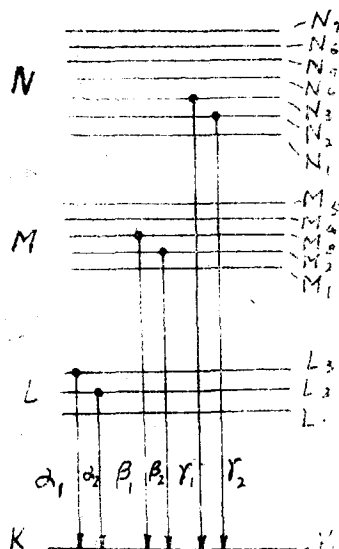


图2—6 能级图的一个部分
产生K系谱线的电子跃迁

电子在各个能级之间的跃迁几率决定了所产生的特征X射线的相对强度，K层空位可以被外层中的任何一个电子所填充。填入K层的电子，可能来自L层，也可能来自M层，但是K层空位被L层电子填充的几率则较被M层电子所填充的为大，因此产生的 $k\alpha$ 辐射强度 $I_{k\alpha}$ 大于辐射强度 $I_{k\beta}$ ，根据实验测定： $I_{k\alpha} : I_{k\beta} : I_{k\gamma} \approx 100 : 50 : 22$ 。特征X射线强度比同时产生的邻近波长连续X射线的强度大许多倍。如铜靶在30千伏下操作时，其 $k\alpha$ 谱线强度比其紧邻连续谱线强度大90倍左右。

特征X射线的绝对强度随管电流 i 和管电压 V 的增大而增大。对K系谱线而言，有下列的近似关系：

$$I_k = Bi (V - V_k)^n \dots\dots\dots (2 \cdot 5)$$

B —— 比例常数

i —— 管电流

V_k —— k 系的激发电压

n —— 常数（其值约=1.5）

由上式可以看出，提高管电压可以提高特征X射线谱线的强度。但应当注意的是特征X射线强度随着管电压的增加而增加，同时产生的连续X射线强度也随之而增加，这对需要单色X射线的工作是不利的。特征X射线与连续X射线比率，以工作电压 V 为激发电压 V_k 的3~5倍时为最大。

为了获得严格的单色光，需采用单色器来解决。

各种元素不同系的X射线波长均已被精确测定，因此，测定未知样品受激而发射的特征X射线的波长，就能推断出该样品所含的元素即是X射线光谱分析方法。

一般晶体的点阵常数在1~10Å数量级，若在相同数量级波长的X射线照射下，则能产生光栅对可见光衍射作用相似的衍射效应即是X射线衍射分析法。因为通常作X射线管阳极材料的原子序数 Z 在24—47之间。

三、单色器

为了获得严格的单色 X 射线, 采用晶体单色器是最好的方法。单色器能把连续光谱消除干净, 如果再和波高分析器配合使用, 还可以将 $K\alpha$ 的谐波成份 ($\frac{\lambda}{2} \cdot \frac{\lambda}{3} \dots$) 去掉, 采用单色器可以使峰背比提高几倍到几十倍, 而强度却只降低十分之几。因此, 采用高功率 X 射线管, 特别是采用旋转靶阳极的 X 射线源上, 使用单色器是非常好的。

目前单色器上用的晶体有平晶和弯晶两种, 平晶单色器发散性大、强度弱, 而采用弯晶的单色器可以使反射线聚集, 而使强度增大, 是目前使用最多的。

第五节 晶体的结构简介

一、点阵与晶胞

晶体内部构造最基本的特点是质点在三度空间作有规律的周期性重复。为了便于理解起见, 我们暂时不管晶体中实际存在的质点 (原子、离子或原子群), 仅设想在空间存在着一系列等距离的平行平面, 它们和另一组等距离平行平面相交而得出许多相互平行的交线, 它们再和第三组等距离平行平面相交产生许多等价的交点, 这些交点在空间的位置具有一定的几何规则, 上述的三个平面组将空间划分成为一系列的平行六面体, 每个平行六面体的形状, 大小完全相同, 并且相应紧密地排列在一起, 形成了所谓的点阵 (空间点阵)。三个平面组的交点则称为点阵或称结合点, 如果每个结合点为同样的质点所占有, 即成了晶体点阵 (图 2-7)。

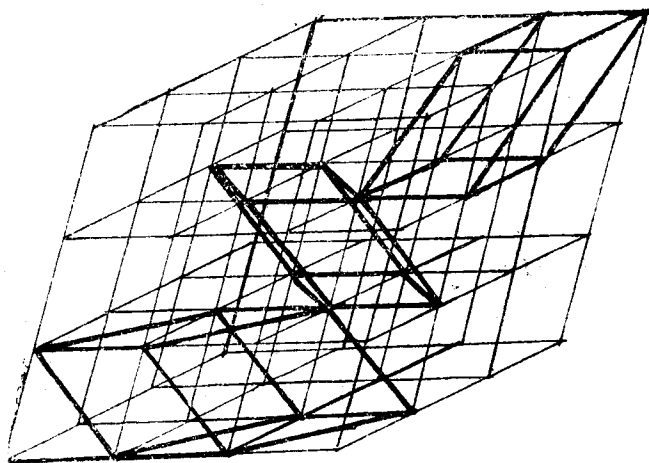


图2-7 晶体点阵

点阵中的平行六面体称为晶胞 (单位晶胞), 这样的平行六面体可以由点阵中不同的结点连接, 而成为形状、大小不同的几种晶胞 (图 2-7 中粗线指几种可能的元晶胞)。晶胞是构成晶体的基体。为了方便起见, 我们常选取与宏观晶体有同样对称的平行六面体作为晶胞。晶胞的三个相交于一点的棱线称为晶轴, 用 X、Y、Z 轴来表示, 在 X、Y、Z 轴方向上的单位矢量长度 a 、 b 、 c 及与 X、Y、Z 轴的夹角 α 、 β 、 γ 这六个参数称点阵常数, 或点阵参数。

二、对称与晶系

晶体结构的另一特点是具有对称性。晶体结构对于某一种几何要素进行一定的动作以后, (如反映、旋转、倒演等) 整个晶体结构能够复原, 这种性质称为晶体的对称。在进行对称操作时所应用的辅助几何要素 (点、线、面) 称为对称要素。 (如对称面、对称轴及对称中心)。

在用三种平面分割时, 随着平面排列的不同, 当然可以形成各种形状单位晶胞。根据晶胞的六个参数, 可以将晶体分为七个晶系,

(一) 三斜晶系: $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

(二) 单斜晶系: $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$

(三) 六方晶系: $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma = 120^\circ$

(四) 菱形晶系 (三方): $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

(五) 斜方晶系 (正交): $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

(六) 四方晶系 (正方): $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

(七) 等轴晶系 (立方): $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

三、晶面与晶面指数

在晶体中, 由许多质点组成的一个平面称为晶面。

晶面指数 (或称米勒指数或晶面符号) 是代表晶面在空间方位的符号, 以 h, k, l 表示, 它表示着晶面的取向, 以晶面与三度空间 X, Y, Z 轴相交的单位长度的倒数。

例如: (100) 即表示此晶面与 Y 轴及 Z 轴平行与 X 轴相交于一单位长度处的晶面。

第六节 X射线的散射、衍射与吸收

一、X射线的散射

当 X 射线与物质相遇时, 则会产生散射现象。这种散射可以在任何方向进行。散射又可分为相干散射和不相干散射。

(一)、相干散射:

当 X 射线照射到晶体上时, X 射线便与晶体中的原子相互作用, 迫使原子中带有电荷的电子和原子核跟随着 X 射线电磁波周期变化的磁场而作振动。由于原子核的质量比电子大得多, 原子核的振动可以忽略不计, 因此主要是原子中的电子跟着一起作周期振动。这些原子就成了新的电磁波波源, 以球面波方式, 向四面八方散射出波长和相位与入射 X 射线相同的电磁波, 这种现象就称为相干散射, 如图 2—8 所示。原子散射的能力和原子中所含的电子数目有关, 即原子序数愈大的元素, 其散射能力也愈强。

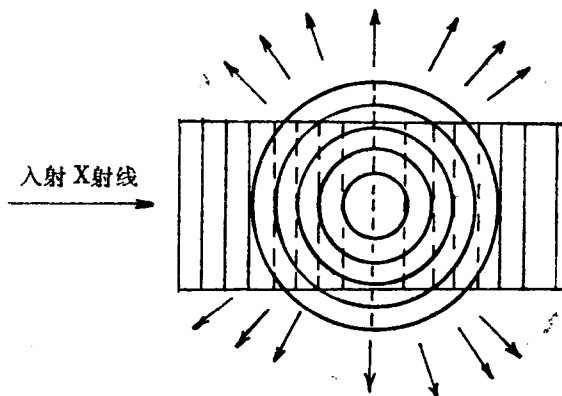


图2—8 X射线的平面波与电子散射的球面波

相干散射或称古典散射或汤姆逊散射, 是 X 射线在晶体中产生衍射现象的基础。

(二) 不相干散射

不相干散射也称量子散射或称康普顿——吴有训散射。由于 X 射线与原子中束缚力较弱的电子作用后, 产生非弹性碰撞, 电子被撞向一边, 成为反冲电子, 而 X 射线光子也被撞偏了一个角度如图 2—9 所示, 此时有一部分光量子的

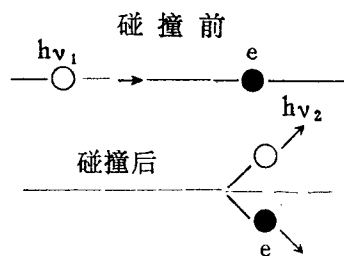


图2—9 光子与电子的碰撞