

高等學校交誼叢刊

金屬 X 射綫学

上 冊

И·В·亞伏爾斯基著



中国工业出版社

高等学校交流用

金屬 X 射綫学

上 册

И·В·亚伏尔斯基 著

田 玉 譯

中国工业出版社

本书原名“X射线学基础”(И. В. Яворский 著, 田玉译), 由地质出版社1959年出版, 现将其绪论及附录部分删去, 作为“金属X射线学”(上册)出版, 但为了保持原纸型完整, 页码不予相应改动。

本书共分三部分, 其内容是介绍利用X射线方法分析多晶体金属; 书中较详细地叙述了晶体学的基本概念和X射线的物理基础。

本书作为高等学校机械制造系、金属与热处理专业的交流讲义, 亦可作为从事X射线结构分析工作者参考。

金属X射线学

上册

田玉译

(根据地质出版社纸型重印)

*

中国工业出版社出版 (北京佳园路零四号)

(北京市书刊出版事业许可证出字第110号)

机工印刷厂印刷

新华书店科技发行所发行·各地新华书店经售

*

开本 $850 \times 1168 \frac{1}{32}$ · 印张 $6 \frac{15}{16}$ · 插页 3 · 字数 240,000

1959年4月北京第一版

1961年9月北京新一版·1961年9月北京第一次印刷

印数 00,001—02,413 · 定价(10)1.20元

统一书号: 15165·195(一机-13)

高等學校交誼叢刊

金屬X射綫学

上 冊

И. В. 亞伏爾斯基著



中国工业出版社

高等学校无线电讲义

金属 X 射线学

上册

И·В·亚伏尔斯基著

田 玉 译

中国工业出版社

本书原名“X射线学基础”(И. В. Яворский 著, 田玉译), 由地质出版社1959年出版, 现将其绪论及附录部分删去, 作为“金属X射线学”(上册)出版, 但为了保持原纸型完整, 页码不予相应改动。

本书共分三部分, 其内容是介绍利用X射线方法分析多晶体金属; 书中较详细地叙述了晶体学的基本概念和X射线的物理基础。

本书作为高等学校机械制造系、金属与热处理专业的交流讲义, 亦可作为从事X射线结构分析工作者参考。

金属 X 射线学

上 册

田 玉译

(根据地质出版社纸型重印)

*

中国工业出版社出版 (北京佳园路零四号)

(北京市书刊出版事业许可证出字第110号)

机工印刷厂印刷

新华书店科技发行所发行·各地新华书店经售

*

开本 $850 \times 1168 \frac{1}{32}$ · 印张 $6 \frac{15}{16}$ · 插页 3 · 字数 240,000

1959年4月北京第一版

1961年9月北京新一版·1961年9月北京第一次印刷

印数 00,001—02,413 · 定价(10)1.20元

统一书号: 15165·195(一机-13)

原书缺页

原书缺页

原书缺页

原 书 缺 页

目 次

第一部分 晶体学基础	11
第一章 空間格子	11
§ 1. 空間格子, 单胞, 单胞形状, 晶系	11
§ 2. 晶体中的平面和直綫, 晶体学指数	15
§ 3. 晶体学公式, 周期, 单胞体积, 平面間距 d_i , 平方公式 $[d=f(a,b,c,\alpha,\beta,\gamma,h,k,l)]$	26
第二章 晶体的对称性, 复杂晶格	33
§ 1. 晶体的对称性, 对称元素, 32种对称类型, 230种空間群	33
§ 2. 复杂晶格, 单胞基元, 布拉維格子	41
第三章 密堆积的理論基础	46
§ 1. 相等球体的堆积, 堆积的空間利用率, 配位数, 最簡 单的晶体的空間格子	46
§ 2. 对不同直徑球体堆积一般理論的概念, 矿物結構的特 征, 描述晶体結構的最新方法	53
第二部分 X射綫物理基础	58
第一章 X射綫	58
§ 1. X射綫的發現, X射綫的性质; X射綫的本質, X射 綫的应用范围	58
§ 2. 連續X射綫譜和特征, X射綫譜的发生	64
第二章 X射綫学技术	77
§ 1. X射綫的获得, X射綫仪	77
§ 2. X射綫管和整流管	81
第三章 X射綫与物质的相互作用	88
§ 1. X射綫与物质的相互作用, X射綫的衰减, 衰减系数	88
§ 2. 計算衰减系数, 吸收系数, 射綫的选择, 选择濾波器, X射綫对照象底片的作用	93
第四章 X射綫的散射	101
§ 1. X射綫的干涉和衍射	101
§ 2. 劳埃方程式和布拉格方程式	106

第五章 散射X射线的强度	116
§ 1. X射线结构分析的基本方法, 由一个电子所散射的射线强度	116
§ 2. 晶体散射的X射线强度, 强度因子; 结构因子, 原子因子, 罗伦兹因子, 温度因子, 多重化因子	120
第三部分 研究多晶体的X射线结构分析方法	132
第一章 摄取粉末照象方法的概论	132
§ 1. 德拜法, 衍射圆锥的形成, 德拜法的运用	132
§ 2. 摄取德拜照象的原理, 德拜照象机的构造, 照象机各部件用途描述, 配制样品的方法	136
§ 3. 辐射的选择, X射线相的衍射线数, X射线照象机的分辨率	142
§ 4. 德拜照象的衍射强度和衍射线形状, 被研究样品最合适的大小, 曝光时间, 测量德拜照象上线条位置时产生系统误差的根源	147
第二章 用X射线研究多晶体粉末	155
§ 1. 立方晶系粉末X射线相的计算	155
§ 2. 在特殊情况下确定立方晶系X射线相上的指数	168
§ 3. 用图解法(贺耳表和巴恩表)计算中级晶系的多晶体X射线粉末相, 立方晶系、四方晶系和六方晶系粉末相(确定结构常数)	173
§ 4. 菱形晶系粉末相的计算	184
第三章 用X射线构造研究多晶体粉末的某些特殊方法	193
§ 1. 计算由数种物质所组成的混合物的粉末照相, 粉末法的灵敏度	193
§ 2. 精确测定结构参数, 系统误差的根源, 求得准确结果的方法, 科根法(Koren法), 采用精确测量的 d 值	203
§ 3. X射线分析金属丝中的择优取向(织构)	220

第一部分 晶体学基础

第一章 空間 格子

§ 1. 空間格子 單胞 單胞形狀 晶系

在晶体中有晶稜和晶面的存在，即說明在晶体中原子是沿直綫和平面排列的，在这个基础上可以作出原子排列的模型(圖 1)。

取晶体中任一直綫“ OA ”，并令結点“ O ”上有一原子，我們將这一原子看作是原点的原子，而結点“ A_1 ”上的原子則为位于直綫“ OA ”上距 O 点最近的原子，在这种情况下，在直綫“ OA ”上在等距离 $OA_1=a$ 上將有其它原子。

若取另一直綫“ OB ”，令 $OB_1=b$ ——为該直綫上相鄰原子間的距离，則晶体的其它原子將分布在能为“ OB_1 ”，所除尽的距离上。

在直綫“ OC ”上，我們也將同样的得到原子有規則的排列，令其相鄰原子間的距离为 $OC_1=c$ 。

对于任何一条联接晶体中两个原子的直綫，我們都將得到相似的结果。

通过晶体中原子的直綫將为距离相等的原子所布满，原子分布最密的方向从几何学观点和物理学观点来看是最重要的方向。直綫上相鄰的相同原子間距称为直綫的周期，一般以符号“ J ”来表示(坐标軸的周期以 a 、 b 、 c 来表示)。

晶体的原子結構模型繪在圖 1 上，这种模型称之为簡單的空間格子。

今后所述均將根据下列基础，即晶体是按空間格子建造的。

虽然由于原子間距相当小,仅等于几个埃 ($1\text{\AA}=10^{-8}$ 厘米),直接采用一般的方法对材料作研究和試驗不能發現有晶体的空間格子存在,但是空間格子的假說与很多实验事实相符,且在 X 射綫結構分析發生前即被提出。X 射綫分析也証明了这一假說的正确性,而且从那时起該假說便成为大家所公認的理論了。

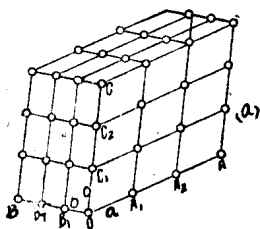


圖 1

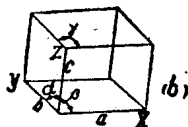


圖 2

建立晶体空間格子,需知道沿三个坐标軸相鄰原子間相等列距 a, b, c (圖 1) 之長及軸間夾角大的小—— α, β, γ (圖 2), 列距 a, b, c 称为平移。这六个数值($a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$)一般綜合称为單胞的参数。

一般情况下單胞是为具有已知参数值的斜角平行六面体。

晶体的空間格子可以用單胞的相互平行結合的方法而获得;換言之,晶体的單胞具有最小的体积。由这种体积的空間重复而形成一完整的晶体,在單胞中所排列的原子数是能除尽化学分子式中的原子数的^①。例如,在 NaCl 晶体的單胞中有 4 个 Cl 离子和 4 个 Na 离子(4 个 NaCl“分子”)。

晶体的單胞或多或少地可任意选择,因为可取各种不同的綜合数值($a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$)来描述已知晶体中原子的同一种相互排列。

一般应选择这样的單胞,其体积尽可能是最小的,而單胞形狀最能明显地标志出晶体的对称元素。后一要求是最重要的。

在圖 1 的空間格子中原子仅排列在單胞的角上。类似的格子称

^①这里所談的是極普通的情况,也就是說复杂的晶格要在以后講。

为簡單格子或原始型格子，如果形成格子的原子不仅排列在單胞的角上，而且排列在單胞内部或在其稜上及面上，这些格子則称之为复杂空間格子。

对复杂空間格子中重要类型的描述方法以后將有論述。

空間格子是以單胞的形狀而有所区别。为了推导出各种形狀的平行六面体，可以举最有对称性的單胞①——等軸單胞为例（圖3）。大多数金屬例如銅、鉄、鋁、銀、金等都具有类似形狀的單胞。

使等軸單胞变形可得到七种不同类型、各以其对称性相区别的平行六面体。

將立方体沿着其中一个稜延伸或压縮則得到以正方形为底的（四方柱狀体，圖4）長方形平行六面体。四方晶体如（金屬）白錫， γ -錳，馬丁体等具有这种單胞。

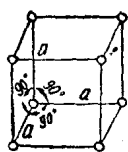


圖 3

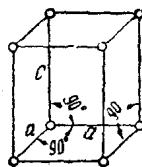


圖 4

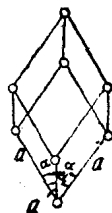


圖 5

將立方体沿对角綫延伸得一菱面体（圖5），該菱面体的各稜相等，相互間的夾角也相等（例如：砷；鉍等等）。

沿正方形的对角綫將四方單胞挤压，使其中一角等于 120° ，則得到六方晶体的單胞（圖6-a）。由三个上列这种單胞可堆迭成六方柱（圖6-b），很多物質例如鋅、鎂、石墨等亦具有相似的單胞。將四方單胞沿正方形的任一边延伸，得到不等边的長方形柱狀体（圖7）。正交晶体如重晶石(BaSO_4)有一这种單胞。

沿一个側面上的对角綫將正交晶胞挤压，則得到單斜單胞

①現有的七种不同形狀的平行六面体可以精确地以数学方法証明出来，但是对于了解以后的講課內容，在这里沒有必要这样作。

(圖 8)。單斜晶体例如石膏($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$)有这种單胞。

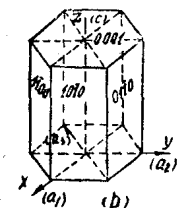
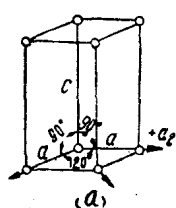


圖 6

圖 7

圖 8

將單斜單胞變形以使所有坐標角不相等，則得出最普遍的具有斜角的平行六面體（圖 2）形狀的三斜單胞。這種晶胞是三斜晶体($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$)的結構元素。

將晶体按單胞形狀分成七大類來研究，是與將晶体分成七大晶系相符的。

我們可選擇一定的坐標系用來描述晶体，該坐標系與已知晶体空間格子是有机地相聯系着的。空間格子中三個方向可以作為這種坐標系的軸^①。用這種方法所選出的坐標系稱之為晶系。在空間格子中可選擇不只一個而是無數個晶系，但這些坐標系並不完全相同。因為用斜角坐標系描述具有某種對稱程度的晶体感到

七大晶系單胞特征

表 1

晶 系	單 胞 特 征		獨立參數的數目	
			晶 軸 (a, b, c)	晶軸夾角 (α, β, γ)
三斜晶系	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$	3	3
單斜晶系	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	3	1
正交晶系	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	3	0
菱形晶系	$a = b = c$	$\alpha = \gamma = \beta \neq 90^\circ$	1	1
六方晶系	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma = 120^\circ$	2	0
四方晶系	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	2	0
立方晶系	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	1	0

①這三個方向不能位於同一平面。