



普通高等教育“十一五”国家级规划教材



普通高等教育“十五”国家级规划教材



面向21世纪课程教材

材料分析方法

第3版

● 哈尔滨工业大学 周玉 主编



获2002年全国普通高等学校优秀教材一等奖

 机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS



普通高等教育“十一五”国家级规划教材
普通高等教育“十五”国家级规划教材
面向 21 世纪课程教材

材料分析方法

第 3 版

主 编 周 玉
参 编 漆 璿 范 雄 宋晓平
孟庆昌 饶建存 魏大庆
主 审 刘文西 崔约贤



机械工业出版社

本书主要包括材料 X 射线衍射分析和材料电子显微分析两大部分。书中介绍了用 X 射线衍射和电子显微技术分析材料微观组织结构的原理、设备及试验方法。其内容包括: X 射线物理学基础、X 射线衍射方向与强度、多晶体分析方法、物相分析及点阵参数精确测定、宏观残余应力的测定、多晶体结构的测定、电子光学基础、透射电子显微镜、电子衍射、晶体薄膜衍射成像分析、高分辨透射电子显微术、扫描电子显微镜、电子背散射衍射分析技术、电子探针显微分析、其他显微结构分析方法及实验指导。书中的实例分析注重引入了材料微观组织结构分析方面的新成果。

本书可以作为材料科学与工程学科的本科生和研究生教材或教学参考书,也可供材料成形及控制工程等其他专业师生和从事材料研究及分析检测方面工作的技术人员学习参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

材料分析方法/周玉主编. —3 版. —北京:机械工业出版社, 2011.6
普通高等教育“十一五”国家级规划教材. 普通高等教育“十五”国家级规划教材. 面向 21 世纪课程教材

ISBN 978-7-111-34230-4

I. ①材… II. ①周… III. ①工程材料—分析方法—高等学校—教材
IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2011) 第 084459 号

机械工业出版社 (北京市百万庄大街 22 号 邮政编码 100037)

策划编辑:冯春生 责任编辑:冯春生 韩冰

版式设计:霍永明 责任校对:李秋荣 责任印制:乔宇

北京机工印刷厂印刷 (三河市南杨庄国丰装订厂装订)

2011 年 6 月第 3 版第 1 次印刷

184mm×260mm·22 印张·2 插页·546 千字

标准书号:ISBN 978-7-111-34230-4

定价:42.00 元

凡购本书,如有缺页、倒页、脱页,由本社发行部调换

电话服务

网络服务

社服务中心:(010)88361066

门户网:<http://www.cmpbook.com>

销售一部:(010)68326294

教材网:<http://www.cmpedu.com>

销售二部:(010)88379649

读者购书热线:(010)88379203

封面无防伪标均为盗版

第3版前言

本书第1版曾获2002年全国普通高等学校优秀教材一等奖,并被列入普通高等教育“十五”国家级规划教材。第2版再版时被评定为“面向21世纪课程教材”。2009年入选普通高等教育“十一五”国家级规划教材。本书第3版是在第2版的基础上进行编写的,对第2版的内容进行了部分修改,并增加了一部分新内容。

本书第2版主要包括材料X射线衍射分析和材料电子显微分析两大部分内容。本次修订仍然以这两部分为主,在第二篇材料电子显微分析部分增加了“电子背散射衍射分析技术”一章,在“其他显微结构分析方法”一章中,增加了“红外光谱”、“激光拉曼光谱”、“紫外-可见吸收光谱”、“原子发射光谱”、“原子吸收光谱”、“核磁共振”、“电子能量损失谱”和“扫描透射电子显微镜”等八节,并对其他章节的部分内容及图片进行了适当的修改和补充。

本书从内容上力求简明扼要,从分析仪器的结构和工作原理出发,介绍分析方法的原理和适用范围,针对具体分析实例并与实践教学相结合,注重培养学生利用现代分析方法解决实际问题的能力。书中一些实例是编者亲身科研工作的成果,部分照片是编者亲自利用电子显微镜拍摄的。“材料分析方法”是材料、冶金学科必修的公共技术基础课之一,也是机械学科中材料成形及控制工程专业的技术基础课之一,还可作为物理、化学、生物、生命科学、精密加工与特种加工及新兴交叉学科的纳米技术等学科专业选修课之一。因此,本教材在诸多学科专业有着广泛的使用。

科学技术的飞速发展对材料的分析手段不断提出新的要求,新的分析方法随之不断涌现。由于目前我国高校教学参考书的种类与发达国家相比尚不够多,因此本书在第2版的基础上又增加了一些新内容,其内容的总学时数多于本课程的学时数,并附有实验指导,以供学生自学参考和不同学校或学科专业选择。

本次修订,第一、六、七章及实验三、四由上海交通大学漆璿编写,第二、三、四、五章及实验一、二由广东工业大学范雄编写,第八、九章由西安交通大学宋晓平编写,第十、十一(一至五节及第七节)、十三、十五、十六(一至六节)章及附录由哈尔滨工业大学周玉编写,第十一章第六节及实验五、六、七、十由哈尔滨工业大学孟庆昌编写,第十二章由哈尔滨工业大学饶建存编写,第十四、十六(七至十四节)章及实验八、九由哈尔滨工业大学魏大庆编写。全书由周玉统稿并担任主编,由天津大学刘文西教授、哈尔滨工业大学崔约贤教授担任主审。本次修订中,漆璿和孟庆昌分别对第2版中材料X射线衍射分析和材料电子显微分析部分的内容进行核对及局部修改。

由于编者水平有限,加之时间仓促,书中若有不当之处,敬请读者批评指正。

编者

第2版前言

本书列入普通高等教育“十五”国家级规划教材,并被评定为教育部“面向21世纪课程教材”。本书是在普通高等教育“九五”部级重点教材《材料分析方法》的基础上进行修订出版的,本书第1版获2002年全国普通高等学校优秀教材一等奖。

第1版包括X射线衍射分析、电子显微分析和物理性能分析三大部分内容。本次修订,将物理性能分析部分去掉,只包括X射线衍射分析和电子显微分析两大部分,并在X射线衍射部分增加了“多晶体结构测定”一章,在电子显微分析部分中增加了“高分辨电子显微分析”一章和“衍射动力学”及“背散射电子衍射”两节,并对其余的内容及有关图片进行适当的补充与修改。

随着新一轮专业目录的实施及进一步发展改革趋势,全国高校都本着加强专业基础,拓宽专业口径的原则,加大一级学科中公共专业基础课与技术基础课的比例,减少专业课的比例,或将有此方向专业课列为选修课。与此相适应,教材的建设也必须适应高等教育的改革与发展的需要。

“材料分析方法”是材料、冶金学科必修的公共技术基础课之一,也是机械学科中材料成形及控制工程专业的技术基础课之一。物理、化学、生物、生命科学、精密加工与特种加工及新兴交叉学科的纳米技术等学科专业,也将“材料分析方法”作为其选修课之一。因此,该教材有较广的使用范围。

本书从内容上力求简明扼要,抓住本质与精华,讲清基础原理与常用方法。尽量增加一些用该方法解决具体问题的典型范例。注重培养学生应用分析方法解决具体问题的能力,让学生在解决实际问题的实践中掌握常用的分析方法。书中有些实例是编者亲身科研工作的成果,一些照片是编者亲自在电子显微镜上拍摄的。

随着科学技术的飞速发展,新的分析方法不断涌现。本书第十五章介绍了扫描隧道显微镜(STM)、原子力显微镜(AFM)、X射线光电子能谱仪(XPS)、离子探针显微分析(IPMA)、场离子显微镜(FIM)和原子探针(ATOM, PROBE)、俄歇电子能谱仪(AES)和其他分析方法。

考虑到目前我国高校教学参考书种类与发达国家相比尚不够多。因此,本书编入的内容较丰富,其内容的总学时数多于本课程的学时数,并附有实验指导书,以供学生自学参考和不同学校或学科的选择。

本次修订,第一、六、七章及实验三、四由上海交通大学漆璿编写,第二、三、四、五章及实验一、二由广东工业大学范雄编写。第八、九章由西安交通大学宋晓平编写,第十、十一章,十三章第一、二、三、四、五节,第十四、十五章及附录由哈尔滨工业大学周玉编写。第十二章由哈尔滨工业大学饶建存编写,第十一章第六节、第十三章第六节及实验五、六、七、八由哈尔滨工业大学孟庆昌编写。全书由周玉统稿并担任主编,由天津大学刘文西教授担任主审。

由于编者水平所限,加之时间关系,书中恐有不当之处,敬请读者批评指正。

编者

第1版前言

本书是根据1996年9月在贵阳召开的金属材料及热处理教学指导小组第二届第一次会议精神立项投标,并通过1996年12月在北京清华大学召开的材料工程类教学指导委员会评审,按照原机械部“九五”教材编写出版要求编写的,是部属重点教材。

随着新专业目录的实施,各高校都本着加强专业基础、拓宽专业口径的原则,加大学科内公共专业基础课与技术基础课的比例,减小专业课的比例。与此相适应,教材建设也必须符合专业目录调整的需要。

“材料分析方法”是材料、冶金等学科必修的公共技术基础课之一,也是机械学科的材料成形与控制工程专业技术基础课之一,物理、化学、生物及机械学科中精密加工与特种加工等相关领域的学生也将“材料分析方法”作为其选修课之一,因此该教材具有较广的使用范围。

《材料分析方法》内容包括:材料X射线衍射分析、材料电子显微分析、材料物理性能分析三大部分。国外同类专业也有相应的参考书和教材,但所涉及的材料范围早已扩展到整个材料的领域,而国内这方面现有的教材无论是从名称还是从内容上看,都基本局限于金属材料,这显然不适应当前材料科学与工程学科发展的需要。本教材的编写就是将其研究对象在原来金属材料的基础上,又扩充了无机非金属的范例,并适当引入新的分析方法,以便与国际接轨。

本书从内容上力求简明扼要,抓住本质与精华,讲清基本原理与常用方法,尽量增加用该方法解决具体问题的范例。不局限于就方法而讲方法,注重培养学生应用分析方法解决具体问题的能力,让学生在解决实际问题的实践中逐渐掌握常用的分析方法。

根据本科生的层次要求删去已往教材中部分内容较深、且使用较少的旧内容。X射线部分只讲到宏观应力测定,织构测定、晶块尺寸测定及单晶体衍射分析及衍射动力学等没有编入;电子显微分析部分除讲述了透射电镜(TEM)、扫描电镜(SEM)与电子探针(EPMA)外,还介绍了扫描隧道显微镜(STM)、原子力显微镜(AFM)、X射线光电子能谱(XPS)等新的分析方法。

本课程授课学时为60学时,但考虑到目前我国教学参考书种类有限,因此本教材编入的内容较广,内容的总含量多于上课时数,以供学生自学参考和不同学校的选择,最后并附有实验指导。

本书第一、六章及实验三由上海交通大学漆曙教授编写,第二、三、四、五章及实验一、二由广东工业大学范雄教授编写,第七、八章由西安交通大学宋晓平教授编写,第九、十、十一、十二、十三章及附录由哈尔滨工业大学周玉教授编写,第十四、十五章由大连理工大学陈琲瑕教授编写,第十六、十七、十八章及实验八、九、十由哈尔滨工业大学宋学孟教授编写,实验四、五、六、七由哈尔滨工业大学孟庆昌副教授编写。全书由周玉教授担任主编,天津大学刘文西教授担任主审。

由于编者水平有限,加之时间仓促,书中恐有不当之处,敬请读者批评指正。

目 录

第3版前言	
第2版前言	
第1版前言	
绪论	1
第一篇 材料 X 射线衍射分析	3
第一章 X 射线物理学基础	5
第一节 X 射线的性质	5
第二节 X 射线的产生及 X 射线谱	6
第三节 X 射线与物质的相互作用	9
习题	15
第二章 X 射线衍射方向	17
第一节 晶体几何学简介	17
第二节 布拉格方程	22
第三节 X 射线衍射方法	28
习题	29
第三章 X 射线衍射强度	31
第一节 多晶体衍射图相的形成	31
第二节 单位晶胞对 X 射线的散射与结构因数	32
第三节 洛伦兹因数	35
第四节 影响衍射强度的其他因数	36
第五节 多晶体衍射的积分强度公式	38
习题	38
第四章 多晶体分析方法	40
第一节 德拜-谢乐法	40
第二节 其他照相法简介	45
第三节 X 射线衍射仪	47
习题	54
第五章 物相分析及点阵参数精确测定	55
第一节 定性分析	55
第二节 定量分析	59
第三节 点阵参数的精确测定	62
第四节 非晶态物质及其晶化过程的 X 射线衍射分析	66
习题	70
第六章 宏观残余应力的测定	71
第一节 物体内应力的产生与分类	71
第二节 X 射线宏观应力测定的基本原理	72
第三节 宏观应力测定方法	75
第四节 X 射线宏观应力测定中的一些问题	80
习题	84
第七章 多晶体结构的测定	85
第一节 极射赤面投影法	85
第二节 结构的种类和表示方法	89
第三节 丝织构指数的测定	95
第四节 极图的测定	96
第五节 反极图的测定	100
习题	102
第二篇 材料电子显微分析	103
第八章 电子光学基础	105
第一节 电子波与电磁透镜	105
第二节 电磁透镜的像差与分辨率	108
第三节 电磁透镜的景深和焦长	111
习题	112
第九章 透射电子显微镜	113
第一节 透射电子显微镜的结构与成像原理	113
第二节 主要部件的结构与工作原理	117
第三节 透射电子显微镜分辨率和放大倍数的测定	119
习题	121
第十章 电子衍射	122
第一节 概述	122
第二节 电子衍射原理	123
第三节 电子显微镜中的电子衍射	131
第四节 单晶体电子衍射花样标定	135
第五节 复杂电子衍射花样	137
习题	140
第十一章 晶体薄膜衍射成像分析	141

第一节 概述	141	第一节 离子探针显微分析	232
第二节 薄膜样品的制备方法	141	第二节 低能电子衍射分析	234
第三节 衍射衬度成像原理	144	第三节 俄歇电子能谱分析	238
第四节 消光距离	146	第四节 场离子显微镜与原子探针	243
第五节 衍衬运动学	147	第五节 扫描隧道显微镜与原子力显微镜	248
第六节 衍衬动力学简介	154	第六节 X 射线光电子能谱分析	254
第七节 晶体缺陷分析	157	第七节 红外光谱	257
习题	165	第八节 激光拉曼光谱	264
第十二章 高分辨透射电子显微术	166	第九节 紫外-可见吸收光谱	268
第一节 高分辨透射电子显微镜的结构特征	166	第十节 原子发射光谱	272
第二节 高分辨电子显微像的原理	167	第十一节 原子吸收光谱	276
第三节 高分辨透射电子显微镜在材料科学中的应用	176	第十二节 核磁共振	279
习题	183	第十三节 电子能量损失谱	285
第十三章 扫描电子显微镜	184	第十四节 扫描透射电子显微镜	288
第一节 电子束与固体样品作用时产生的信号	184	习题	289
第二节 扫描电子显微镜的构造和工作原理	186	实验指导	291
第三节 扫描电子显微镜的主要性能	189	实验一 单相立方系物质 X 射线粉末相计算	291
第四节 表面形貌衬度原理及其应用	190	实验二 用 X 射线衍射仪进行多晶体物质的相分析	292
第五节 原子序数衬度原理及其应用	195	实验三 宏观残余应力的测定	296
习题	198	实验四 金属板织构的测定	300
第十四章 电子背散射衍射分析技术	199	实验五 透射电子显微镜结构原理及明暗场成像	303
第一节 概述	199	实验六 选区电子衍射与晶体取向分析	306
第二节 电子背散射衍射技术相关晶体学取向基础	199	实验七 扫描电子显微镜的结构原理及图像衬度观察	311
第三节 电子背散射衍射技术硬件系统	209	实验八 电子背散射衍射技术的工作原理与菊池花样观察及标定	315
第四节 电子背散射衍射技术原理及花样标定	211	实验九 电子背散射衍射技术的数据处理及其分析应用	318
第五节 电子背散射衍射技术成像及分析	215	实验十 电子探针结构原理及分析方法	321
第六节 电子背散射衍射技术数据处理	220	附录	324
习题	224	附录 A 物理常数	324
第十五章 电子探针显微分析	225	附录 B 质量吸收系数 μ_i/ρ	324
第一节 电子探针仪的结构与工作原理	225	附录 C 原子散射因数 f	325
第二节 电子探针仪的分析方法及应用	229	附录 D 各种点阵的结构因数 F_{hkl}^2	326
习题	231	附录 E 粉末法的多重性因数 P_{hkl}	326
第十六章 其他显微结构分析方法	232	附录 F 角因数 $\frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta}$	327

附录 G	德拜函数 $\frac{\phi(x)}{x} + \frac{1}{4}$ 之值	329	附录 L	常见晶体标准电子衍射花样	336
附录 H	某些物质的特征温度 Θ	329	附录 M	立方与六方晶体可能出现的反射	340
附录 I	$\frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right)$ 的数值	330	附录 N	特征 X 射线的波长和能量表	341
附录 J	应力测定常数	332	参考文献		343
附录 K	立方系晶面间夹角	333			

绪 论

本课程是一门试验方法课，主要介绍采用 X 射线衍射和电子显微镜来分析材料的微观组织结构与显微成分的方法。

一、材料的组织结构与性能

1. 组织结构与性能的关系

结构决定性能是自然界永恒的规律。材料的性能（包括力学性能与物理性能）是由其内部的微观组织结构所决定的。不同种类材料固然具有不同的性能，即使是同一种材料经不同工艺处理后得到不同的组织结构时，也具有不同的性能（例如：同一种钢淬火后得到的马氏体硬，而退火后得到的珠光体软）。有机化合物中同分异构体的性能也各不相同。

2. 微观组织结构控制

在我们认识了材料的组织结构与性能之间的关系及显微组织结构形成的条件与过程机理的基础上，我们则可以通过一定的方法控制其显微组织形成条件，使其形成预期的组织结构，从而具有所希望的性能。例如：在加工齿轮时，预先将钢材进行退火处理，使其硬度降低，以满足容易车、铣等加工工艺性能要求；加工好后再进行渗碳淬火处理，使其强度、硬度提高，以满足耐磨损等使用性能要求。

二、显微组织结构的内容

材料的显微组织结构所涉及的内容大致如下：①显微化学成分（不同相的成分，基体与析出相的成分，偏析等）；②晶体结构与晶体缺陷（面心立方、体心立方、位错、层错等）；③晶粒大小与形态（等轴晶、柱状晶、枝晶等）；④相的成分、结构、形态、含量及分布（球、片、棒、沿晶界聚集或均匀分布等）；⑤界面（表面、相界与晶界）；⑥位向关系（惯习面、孪生面、新相与母相）；⑦夹杂物；⑧内应力（喷丸表面、焊缝热影响区等）。

三、传统的显微组织结构与成分分析测试方法

1. 光学显微镜

光学显微镜是最常用的也是最简单的观察材料显微组织的工具。它能直观地反映材料样品的微观组织形态（如晶粒大小，珠光体还是马氏体，焊接热影响区的组织形态，铸造组织的晶粒形态等）。但由于其分辨率低（约 200nm）和放大倍率低（约 1000 倍），因此只能观察到 100nm 尺寸级别的组织结构，而对于更小的组织形态与单元（如位错、原子排列等）则无能为力。同时由于光学显微镜只能观察表面形态而不能观察材料内部的组织结构，更不能对所观察的显微组织进行同位微区成分分析，而目前材料研究中的显微组织结构分析已深入到原子的尺度，因此光学显微镜已远远满足不了当前材料研究的需要。

2. 化学分析

采用化学分析方法测定钢的成分只能给出一块试样的平均成分（所含每种元素的平均含量），并可以达到很高的精度，但不能给出所含元素分布情况（如偏析，同一元素在不同相中的含量不同等）。光谱分析给出的结果也是样品的平均成分。而实际上元素在钢中的分布不是绝对均匀的，即在微观上是不均匀的。恰恰是这种微区成分的不均匀性造成了微观组

织结构的不均匀性，以致带来微观区域性能的不均匀性，这种不均匀性对材料的宏观性能有重要的影响作用。例如在淬火钢中，未溶碳化物附近的高碳区形成硬脆的片状马氏体，而含碳量较低的区域则形成强而韧的板条马氏体。片状马氏体在承载时往往易形成脆性裂纹源，并逐渐扩展而造成断裂。

四、X 射线衍射与电子显微镜

1. X 射线衍射 (X-Ray Diffraction, XRD)

XRD 是利用 X 射线在晶体中的衍射现象来分析材料的晶体结构、晶格参数、晶体缺陷 (位错等)、不同结构相的含量及内应力的方法。这种方法是建立在一定晶体结构模型基础上的间接方法，即根据与晶体样品产生衍射后的 X 射线信号的特征去分析计算出样品的晶体结构与晶格参数，并可以达到很高的精度。然而由于它不是像显微镜那样直观可见地观察，因此也无法把形貌观察与晶体结构分析微观同位地结合起来。由于 X 射线聚焦的困难，所能分析样品的最小区域 (光斑) 在毫米数量级，因此对微米及纳米级的微观区域进行单独选择性分析也是无能为力的。

2. 电子显微镜 (Electron Microscope, EM)

EM 是用高能电子束作光源，用磁场作透镜制造的具有高分辨率和高放大倍数的电子光学显微镜。

1) 透射电子显微镜 (Transmission Electron Microscope, TEM)。TEM 是采用透过薄膜样品的电子束成像来显示样品内部组织形态与结构的。因此它可以在观察样品微观组织形态的同时，对所观察的区域进行晶体结构鉴定 (同位分析)。其分辨率可达 10^{-1} nm ，放大倍数可达 10^6 倍。

2) 扫描电子显微镜 (Scanning Electron Microscope, SEM)。SEM 是利用电子束在样品表面扫描激发出来代表样品表面特征的信号成像的。最常用来观察样品表面形貌 (断口等)。分辨率可达 1 nm ，放大倍数可达 2×10^5 倍。还可以观察样品表面的成分分布情况。

3) 电子探针显微分析 (Electron Probe Micro-Analysis, EPMA)。EPMA 是利用聚焦得很细的电子束打在样品的微观区域，激发出样品该区域的特征 X 射线，分析其 X 射线的波长和强度来确定样品微观区域的化学成分。将扫描电镜与电子探针结合起来，则可以在观察微观形貌的同时对该微观区域进行化学成分同位分析。

五、本课程内容及要求

1. 内容

本课程主要讲授 X 射线衍射分析的基本原理、试验方法及应用，透射电子显微镜、扫描电子显微镜、电子探针显微分析的基本原理与方法及应用。

2. 要求

掌握基本原理、了解常用的试验方法，在实际工作中能正确地选用本课程中介绍的试验方法，并能与专门从事 X 射线衍射与电子显微分析工作的人员共同制订试验方案与分析试验结果。

第一篇

材料 X 射线衍射分析

- 第一章 X 射线物理学基础
- 第二章 X 射线衍射方向
- 第三章 X 射线衍射强度
- 第四章 多晶体分析方法
- 第五章 物相分析及点阵参数精确测定
- 第六章 宏观残余应力的测定
- 第七章 多晶体织构的测定

第一章 X射线物理学基础

1895年德国物理学家伦琴（W. C. Röntgen）在研究阴极射线时发现了一种新型的辐射，它们是肉眼看不见的，但可使照相底片感光，并有很强的穿透力，由于当时尚不了解这种辐射的性质，故称其为X射线。而今，X射线的性质、它与物质相互作用的基本原理已被深入研究，并在科学研究、医疗与技术工程上获得广泛应用，相应的设备和方法也在不断地发展中。

第一节 X射线的性质

X射线是一种波长很短的电磁波，这是1912年由劳埃（M. von Laue）指导下的著名衍射实验所证实的。晶体衍射实验的成功，还揭示了物质内部原子规则排列的特征。在电磁波谱上，X射线处于紫外线与 γ 射线之间（图1-1），测量其波长的单位是纳米（nm， $1\text{nm} = 10^{-9}\text{m}$ ）。X射线的波长在 $0.01 \sim 10\text{nm}$ 范围内，用于衍射分析的X射线波长范围为 $0.05 \sim 0.25\text{nm}$ 。本质为电磁波的X射线，其磁场分量在与物质的相互作用中效应很弱，所以只考虑它的电场分量 A 。一束沿 y 轴方向传播的波长为 λ 的X射线波的方程为

$$A = A_0 \cos 2\pi \left(\frac{y}{\lambda} - \nu t \right) \quad (1-1)$$

式中， A_0 为电场强度振幅； ν 为频率（ c/λ ）； c 为光速； t 为时间。

若以 ϕ 表示其相位，即 $\phi = 2\pi \frac{y}{\lambda} - \omega t$ ，令 $\omega = 2\pi\nu$ ，则式（1-1）可写成

$$A = A_0 \cos(\phi - \omega t) \quad (1-1a)$$

其指数式 $A = A_0 e^{i(\phi - \omega t)} \quad (1-1b)$

当 $t=0$ 时， $A = A_0 e^{i\phi}$ ， $e^{i\phi}$ 称为相位因子。

与所有的基本粒子一样，X射线具有波粒二相性，由于其波长较短，它的粒子性往往表现突出，故X射线也可视为一束具有一定能量的光量子流。每个光量子的能量 E 和动量 P 分别为

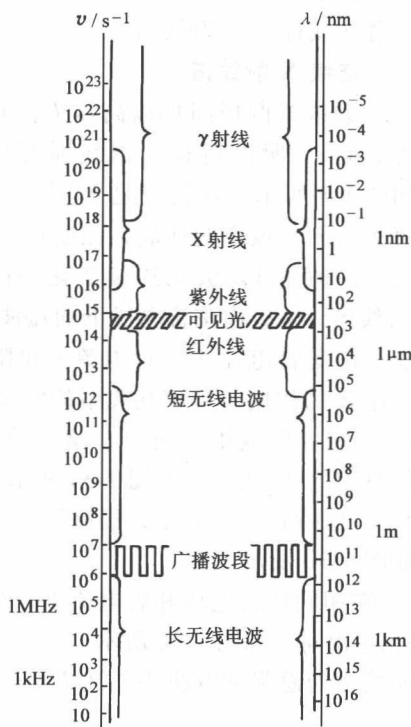


图 1-1 电磁波谱

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (1-2)$$

$$P = \frac{h}{\lambda} = \frac{h\nu}{c} \quad (1-3)$$

式中, h 为普朗克常量 (Planck's constant), $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ 。

第二节 X射线的产生及X射线谱

通常获得 X 射线是利用一种类似热阴极二极管的装置, 用一定材料制作的板状阳极 (A, 称为靶) 和阴极 (C, 灯丝) 密封在一个玻璃-金属管壳内, 阴极通电加热, 在阳极和阴极间加以直流高压 U (数千伏至数十千伏), 则阴极产生的大量热电子 e 将在高压电场作用下飞向阳极, 在它们与阳极碰撞的瞬间产生 X 射线。产生 X 射线的基本电气线路如图 1-2 所示。用仪器检测此 X 射线的波长, 发现其中包含两种类型的波谱, 即连续 X 射线谱和特征 X 射线谱 (或标识 X 射线谱)。

一、连续 X 射线谱

在 X 射线管两极间加以高压 U , 并维持一定的管电流 i , 所得到的 X 射线强度与波长的关系如图 1-3 所示, 其特点是 X 射线波长从一最小值 λ_{SWL} 向长波方向伸展, 强度在 λ_m 处有一最大值。这种强度随波长连续变化的谱线称连续 X 射线谱。 λ_{SWL} 称该管电压下的短波限。

连续谱受管电压 U 、管电流 i 和阳极靶材的原子序 Z 的作用, 其相互关系的实验规律如下:

1) 当提高管电压 U 时 (i 、 Z 不变), 各波长 X 射线的强度都提高, 短波限 λ_{SWL} 和强度最大值对应的 λ_m 减小, 如图 1-3a 所示。

2) 当保持管电压一定, 提高管电流 i , 各波长 X 射线的强度一致提高, 但 λ_{SWL} 和 λ_m 不变, 如图 1-3b 所示。

3) 在相同的管电压和管电流下, 阳极靶材的原子序数 Z 越高, 连续谱的强度越大, 但 λ_{SWL} 和 λ_m 相同, 如图 1-3c 所示。

连续谱的总强度取决于上述 U 、 i 、 Z 三个因素, 即

$$I_{\text{连}} = \int_{\lambda_{\text{SWL}}}^{\infty} I(\lambda) d\lambda = K_1 i Z U^2 \quad (1-4)$$

式中, K_1 为常数。

当 X 射线管仅产生连续谱时, 其效率 η 为

$$\eta = \frac{I_{\text{连}}}{iU} = K_1 Z U$$

可见管电压越高, 阳极靶材的原子序越大, X 射线管的效率越高。但由于常数 K_1 是个很小的数 [$(1.1 \sim 1.4) \times 10^{-9} \text{ V}^{-1}$], 故即使采用钨阳极 ($Z = 74$), 管电压为 100kV 时, 其

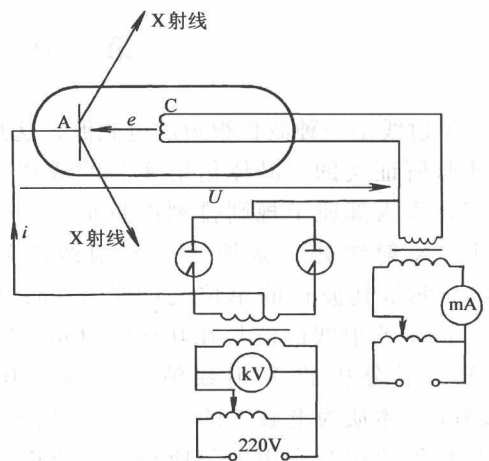


图 1-2 产生 X 射线的基本电气线路

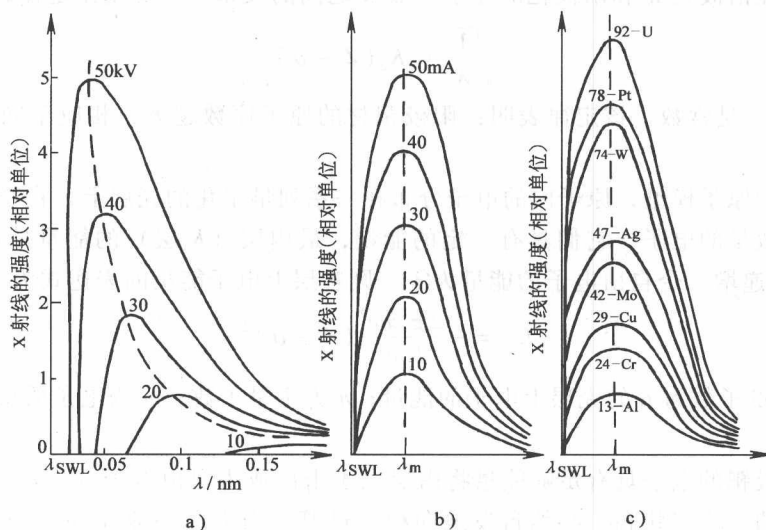


图 1-3 管电压、管电流和阳极靶的原子序对连续谱的影响

a) 管电压的影响 b) 管电流的影响 c) 阳极靶原子序的影响

效率仍很低, $\eta \approx 1\%$ 。碰撞阳极靶的电子束的大部分能量都耗费在使阳极靶发热, 所以阳极靶多用高熔点金属制造, 如 W、Ag、Mo、Cu、Ni、Co、Fe、Cr 等, 且 X 射线管在工作时要一直通水使靶冷却。

用量子力学的观点可以解释连续谱的形成以及其何以存在短波限。在管电压 U 作用下, 电子到达阳极靶时的动能为 eU , 若一个电子在与阳极靶碰撞时, 把全部能量给予一个光子, 这就是一个光子所可能获得的最大能量, 即 $h\nu_{\max} = eU$, 此光量子的波长即为短波限 λ_{SWL} , 即

$$\nu_{\max} = \frac{eU}{h} = \frac{c}{\lambda_{\text{SWL}}}$$

所以

$$\begin{aligned} \lambda_{\text{SWL}} &= \frac{hc}{eU} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \times 2.998 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}}{1.602 \times 10^{-19} \text{ C} \cdot U} = \frac{12.4 \times 10^{-7} \text{ m}}{U} \\ &= \frac{1240 \text{ nm}}{U} \end{aligned} \quad (1-5)$$

其中, U 的单位为 V (伏特), e 的单位为 C (库伦)。

绝大多数到达阳极靶面的电子经多次碰撞消耗其能量, 每次碰撞产生一个光子, 故其能量均小于短波限, 而产生的波长大于 λ_{SWL} 的不同波长的辐射, 构成连续谱。

二、特征 X 射线谱

当加于 X 射线管两端的电压增高到与阳极靶材相应的某一特定值 U_k 时, 在连续谱的某些特定的波长位置上, 会出现一系列强度很高、波长范围很窄的线状光谱, 它们的波长对一定材料的阳极靶有严格恒定的数值, 此波长可作为阳极靶材的标志或特征, 故称为特征谱或标识谱 (图 1-4)。特征谱的波长不受管电压、管电流的影响, 只取决于阳极靶材元素的原子序。布拉格 (W. H. Bragg) 发现了特征谱, 莫塞莱 (H. G. J. Moseley) 对其进行了系统

研究, 得出特征谱波长 λ 和阳极靶的原子序数 Z 之间的关系——莫塞莱定律, 即

$$\sqrt{\frac{1}{\lambda}} = K_2(Z - \sigma) \quad (1-6)$$

式中, K_2 和 σ 都是常数。该定律表明: 阳极靶材的原子序数越大, 相应于同一系的特征谱波长越短。

按照经典的原子模型, 原子内的电子分布在一系列量子化的壳层上, 在稳定状态下, 每个壳层有一定数量的电子, 它们具有一定的能量, 最内层 (K 层) 的能量最低, 然后按 L 、 M 、 N ... 的顺序递增。令自由电子的能量为零, 则各层上电子能量的表达式为

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m e^4}{h^2 n^2} (Z - \sigma)^2 \quad (1-7)$$

式中, E_n 为主量子数为 n 的壳层上电子的能量; n 为主量子数; m 为电子质量; 其他符号同前。

当冲向阳极靶的电子具有足够能量将内层电子击出成为自由电子 (二次电子), 这时原子就处于高能的不稳定状态, 必然自发地向稳态过渡。当 K 层出现空位, 原子处于 K 激发态, 若 L 层电子跃迁到 K 层, 原子转变到 L 激发态, 其能量差以 X 射线光量子的形式辐射出来, 这就是特征 X 射线。 L 层 \rightarrow K 层的跃迁发射 K_α 谱线, 由于 L 层内尚有能量差别很小的亚能级, 不同亚能级上电子的跃迁所辐射的能量小有差别而形成波长较短的 $K_{\alpha 1}$ 谱线和波长稍长的 $K_{\alpha 2}$ 谱线。若 M 层电子向 K 层空位补充, 则辐射波长更短的 K_β 谱线。特征谱的发射过程示意如图 1-5 所示。所辐射的特征谱频率的计算公式为

$$h\nu = w_{n_2} - w_{n_1} = (-E_{n_2}) - (-E_{n_1}) \quad (1-8)$$

式中, w_{n_2} 、 w_{n_1} 分别为电子跃迁前后原子激发态的能量。

将式 (1-7) 代入式 (1-8) 得

$$h\nu = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2} (Z - \sigma)^2 \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \quad (1-9)$$

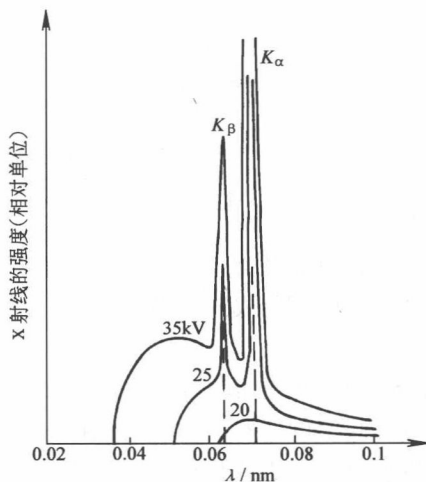


图 1-4 特征谱

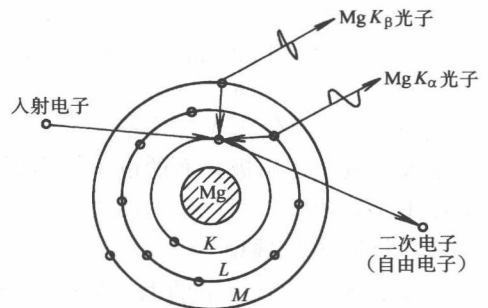


图 1-5 特征谱的发射过程示意图