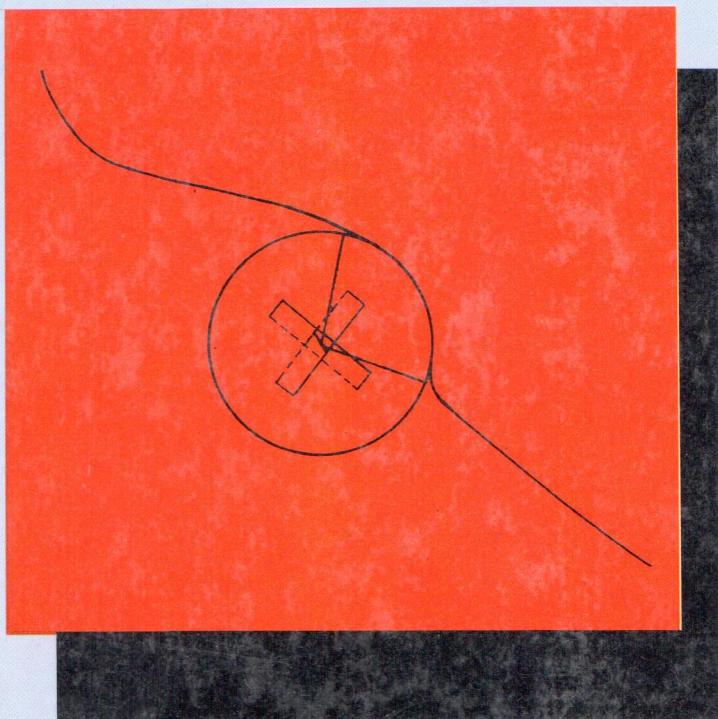


多晶二维 X 射线衍射

丛秋滋 著



科学出版社

0721

49354

5丛

B

多晶二维 X 射线衍射

丛秋滋 著

赠阅

1997.8



科学出版社

1997

内 容 简 介

X 射线晶体学已经发展成为一门独立的分支学科，同时它又是许多学科（如数学、物理学、化学、地学、冶金学、生物学、药学、生命科学、材料科学及工程技术科学、纤维工艺学等）的实验基础。它所研究、分析的对象主要是多晶体，还包括单晶体、纤维及非晶态物质等。

本书论述了多晶二维 X 射线衍射技术的基本原理及其在研究各种固体物质微观结构上的应用。该书的特点是，首次将一个 α 角引进通用二圆衍射仪中，建立一套集布拉格方程、衍射线强度方程、方位角方程和各种扫描模式通式等四位一体的多功能数学模型，奠定了多晶二维 X 射线衍射分析的理论基础；进而应用于实践，统一了多晶材料 X 射线衍射定性、定量、剖面及取向分析等多种方法，并推广到表面反射和透过反射的各种情形中，从而实现一机多能，简化测试、数据处理过程，分析结果直观。

本书可供有关金属、薄膜材料以及化学和物理等专业的科研人员、技术人员以及教师、研究生和大学高年级学生参考。

图书在版编目(CIP)数据

多晶二维 X 射线衍射 / 丛秋滋著 . —北京 : 科学出版社, 1997
ISBN 7-03-005655-8

I . 多… II . 丛… III . 多晶 - 二维 - X 射线衍射 IV . 0721

中国版本图书馆 CIP 数据核字(96)第 17587 号

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码：100717

北京科地亚印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1997 年 8 月第 一 版 开本：850×1168 1/32

1997 年 8 月第一次印刷 印张：9 3/4

印数：1—1 300 字数：251 000

定 价：28.00 元

序

在 X 射线发现(1895 年)100 余年和 X 射线衍射问世(1912 年)80 多载之际,科学出版社适时地出版《多晶二维 X 射线衍射》一书,这对我国从事材料微观组织和晶体结构研究、多晶 X 射线衍射理论和方法的研究以及衍射仪生产部门的广大科技工作者来说,无疑是一件值得欢呼和庆幸之事。

本书作者丛秋滋先生多年来一直从事 X 射线衍射分析和科学研究工作,有深厚的理论基础和丰富的实践经验。在融汇贯通前人 100 年来衍射理论和方法的基础上,根据布拉格衍射定律,创造性地将一个 α 角引进通用二圆衍射仪中,建立了一套集布拉格方程、衍射线强度方程、方位角方程和各种扫描模式通式等四位一体的多功能数学模型,从而奠定了多晶二维 X 射线衍射分析的理论基础。将这一模型和理论应用于自己的实践,统一了多晶材料 X 射线衍射定性、定量、剖面及取向分析等多种方法,并推广到表面反射和透过反射的各种情形中,使许多问题迎刃而解,从而使一台普通衍射仪变成具有多种新功能的设备,实现了一次装样可测得多个衍射数据进而联立求解的目的。本书构思新颖独特,给多晶 X 射线衍射分析展现了广阔的前景。

本书在内容编排上,采用理论和方法并重、循序渐进、层层展开、深入浅出。对各领域科技工作者需要掌握的各种 X 射线衍射分析方法的原理有较详细地论述,并给出了一些可直接采用的方法和技巧,这是一般讲述 X 射线衍射分析的同类书中较少涉及的。

本书可供有关金属、材料、电子、半导体、化学和物理等专业的科技人员利用 X 射线衍射方法进行研究工作时参考,也可供大专院校有关专业的教师、研究生和高年级学生参考,其他领域从事

X 射线衍射的工作者以及从事衍射仪生产的技术人员查阅时也会有所裨益。

遵作者之嘱，谨此为序。

裴光文

1996年8月于天津

前　　言

多晶 X 射线衍射分析是研究材料微观组织和晶体结构的主要方法,也是材料科学研究中心最重要的手段之一。随着高新科学技术的发展,要求衍射设备实现一机多能,以便适应各种新兴材料结构的研究。目前提供的 X 射线衍射术就力图实现这一愿望。

为了使 X 射线衍射术更有效地服务于多晶材料结构研究,本书在布拉格衍射定律的基础上,将一个 α 角引进通用二圆衍射仪中,建立了一套四位一体的多功能数学模型。该数学模型中,除布拉格方程以外,还包括衍射线强度方程、方位角方程和各种扫描模式通式,从而奠定了多晶二维 X 射线衍射分析理论基础,进而推广到表面反射和透过反射的各种情形中。这套数学模型具有高度概括性、普适性和逻辑性强的特点。据此,很容易解决常规衍射分析方法难于解决的诸如物相纵向深度分析和取向分析等问题。

本书除绪论外共分 18 章。第 1—4 章是多晶 X 射线衍射基础,其中第 1,2 章分别介绍 X 射线的性质和晶体学知识,第 3 章引进二维衍射及相关设备、方位角等新概念,第 4 章在指出多晶体衍射 X 射线服从光的叠加原理,并以此为依据导出衍射线强度方程。第 5—7 章讲述常规的定性、定量分析基础理论和方法,其中包括物相纵向深度(取向)分析和新法推导相定量强度方程式以及误差分析表达式。第 8—13 章,在讲述不对称布拉格反射理论的基础上,通过实例介绍偶合和非偶合扫描模式在薄膜厚度、三维立体 XRD 谱以及宏观应力测定等方面的应用;其中第 10 章利用几何光学方法计算了衍射 X 射线谱的宽度和形状。在第 14—17 章中讲述剖面分析方法,为此引进一新概念——“加权应变宽度”,并将它与劳厄强度积分宽度相结合,以期实现双宽化剖面的数学分离的同时,使仪器几何宽化效应自动得到校正,通过典型实例以作验

证。第 18 章是本书的最后一章，在总结多晶二维 X 射线衍射普遍性规律的基础上，归纳出一套五位一体的数学方程组，以便适应将要开发的三维 X 射线衍射术的需要。

目前已普遍采用 SI 单位制，本书也予以全面使用。不过，尚保留“ \AA ”（许多基本文献仍在使用）单位作为 X 射线波长和晶胞大小等的长度单位。本书所附的物理常数，包括了 SI 单位制的简要解释和一些重要的常数。

本书系作者根据多年 X 射线衍射分析和科学的研究工作的实践，融汇现代许多衍射方法的精华为一体撰写而成。在内容编排上，采用理论与方法并重，循序渐进，层层展开，力求深入浅出，即使非专业人员也能较快地了解和掌握有关的理论知识和实验分析技能。本书可供有关金属、薄膜材料、化学和物理专业的科学技术人员、教师、研究生和大学高年级学生参考。

本书在编写过程中，丛芳曾参与光路计算和部分方程式的推导工作，翁立军提供了大部分固体薄膜试样；在定稿过程中，何荔协助绘图和校对，还有冯淑娟和欧阳明安等也参加了部分工作；此外，J. I. Langford [英国伯明翰大学博士，副编辑 (J. Appl. Cryst.)] 对本书曾提出宝贵意见，特此致谢。

裴光文教授对本书大力支持并代为作序，特致谢忱。

本书在成书和出版过程中得到国家自然科学基金委员会和中国科学院兰州化学物理研究所固体润滑开放研究实验室的资助，还有部分课题曾得到中国科学院大型仪器功能开发基金委员会资助，深表谢意。由于时间紧，如有不妥之处，请指正。

本书谨为纪念 W. C. 伦琴发现 X 射线 100 周年 (1895—1995) 而作！

目 录

绪论——实空间多晶 X 射线衍射术概要	1
第 1 章 X 射线基础	8
1.1 X 射线的产生条件	8
1.2 X 射线的性质	9
1.3 X 射线谱	12
1.4 X 射线的散射	16
1.5 X 射线的衰减	20
1.6 X 射线的防护	25
第 2 章 晶体学基本知识	26
2.1 空间点阵的概念	26
2.2 结点、晶向、晶面表示方法	29
第 3 章 布拉格定律和二维 X 射线衍射设备	36
3.1 X 射线在晶体中的衍射	36
3.2 布拉格(Bragg)方程	36
3.3 方位角方程	39
3.4 二维衍射设备的几何学特点	40
3.5 X 射线衍射设备	45
3.6 试样的测定	51
第 4 章 X 射线的波动性理论和衍射线强度	53
4.1 引言	53
4.2 X 射线的波动性理论——叠加原理	53
4.3 多晶 X 射线衍射强度	56
4.4 X 射线衍射谱(花样)的形状	57
4.5 实用强度方程	63
第 5 章 X 射线相分析基础	66

5.1	X 射线相分析原理	66
5.2	衍射 X 射线的强度	66
5.3	相分析方法概要	74
第 6 章	相定性分析及其他	78
6.1	相的识别	78
6.2	二维 X 射线衍射技术的发展及应用	80
6.3	X 射线衍射谱的其他特性及应用	89
第 7 章	相定量分析	97
7.1	引言	97
7.2	新法推导相定量强度方程	98
7.3	定量分析中的相对分析误差	104
7.4	相定量分析方法	109
7.5	写在相分析之后	117
第 8 章	不对称布拉格反射理论基础	121
8.1	不对称布拉格反射基本方程	121
8.2	各种扫描模式的关联	128
8.3	影响衍射线强度的各种因素	130
8.4	应用举例	132
8.5	TMCBD 模式的例外	135
第 9 章	测角仪各种扫描模式及其关联	137
9.1	各种扫描模式的特点	137
9.2	各种扫描模式的功用	138
9.3	表面扫描模式间的关联	142
9.4	方位角函数作图法	144
第 10 章	测角仪的聚焦和几何光路计算	147
10.1	引言	147
10.2	准聚焦几何光学原理	148
10.3	光路计算	154
10.4	初级剖面的描述	160
10.5	仪器系统宽化的改善	167

10.6 理想不完善晶体.....	168
第 11 章 深度(取向)分辨的立体 XRD 谱	170
11.1 引言.....	170
11.2 物相纵向分析基础理论.....	171
11.3 三维立体 XRD 谱测定举例	175
11.4 三维立体 XRD 谱的意义	177
11.5 STD 模式的其他应用方法举例	180
第 12 章 薄膜厚度的测定	185
12.1 引言.....	185
12.2 膜厚测定的基本原理.....	185
12.3 膜厚测定的数学近似方法.....	188
12.4 计算机模拟薄膜厚度.....	189
12.5 微束 X 射线超薄膜反射和能量色散衍射(EDD) 理论.....	196
第 13 章 残余内应变(应力)的测定	200
13.1 引言.....	200
13.2 测定原理.....	200
13.3 应力测量公式的推导.....	202
13.4 应力测定.....	204
13.5 (准)聚焦几何光学原理.....	211
13.6 等倾法和侧倾法.....	213
13.7 织构试样的应力测定.....	214
第 14 章 晶粒大小测定原理	220
14.1 引言.....	220
14.2 谢乐方程的布拉格推导方法.....	222
14.3 广义谢乐方程的推导.....	225
14.4 广义强度方程及其意义.....	228
14.5 晶粒大小测定举例.....	229
14.6 关于几何宽化.....	232
第 15 章 微观应变测定原理	234

15.1	引言	234
15.2	微观应变表达式的推导	235
15.3	微观应变测定举例	240
15.4	新旧推导方法的比较	244
第 16 章	仪器几何宽化的评价	248
16.1	引言	248
16.2	衍射谱宽化机理	249
16.3	额外强度的表征	257
16.4	额外宽化的评价	258
16.5	归纳	261
第 17 章	双宽化剖面分析(直接法)	263
17.1	引言	263
17.2	基本关系式	264
17.3	应用举例	270
17.4	剖面分析归纳和总结	275
第 18 章	二维 X 射线衍射总结——三维实空间 X 射线衍射基础	278
18.1	引言	278
18.2	X 射线多功能(XMF)数模的构成	279
18.3	XMF 模型的重要作用	284
18.4	三维实空间球极坐标系的构成	288
18.5	五位一体的多功能数学模型——三维 X 射线衍射基本方程	290
18.6	三维 X 射线衍射技术的应用	291
18.7	结语	292
附录	294	
附录一	元素的质量吸收系数 [μ^* ($\text{cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}$)]	294
附录二	物理常数	299