

此晶面的衍射线就正好聚焦而穿过接收狭缝, 进入探测器, 因此看到反射线. 而其它与试样表面不平行的晶面由于不满足布拉格定律而观察不到衍射线. 如果想看到其它晶面的衍射线, 应该转动转盘, 就会依次扫过各晶面的衍射线, 接收到各晶面的衍射线, 实际测量中会使试样转动、平移或振动, 增加衍射的晶粒数.

9. 补充: $AlNi_3$ 有序-无序转变.

退火前, 完全无序 FCC. 每个晶胞四个格点, 每个格点 $(\frac{1}{4}Al + \frac{3}{4}Ni)$

$$F_h = f_{Al} [1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(k+l)} + e^{i\pi(l+h)}] = \begin{cases} f_{Al} + 3f_{Ni} & h, k, l \text{ 全为偶数} \\ 0 & h, k, l \text{ 有奇偶混杂} \end{cases}$$

表现为 FCC 消光规律.

退火后, 完全有序 $Al: (000) \quad Ni: (\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0) (\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}) (0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$

$$F_h = f_{Al} + f_{Ni} [e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(k+l)} + e^{i\pi(l+h)}] = \begin{cases} f_{Al} + 3f_{Ni} & h, k, l \text{ 全为偶数} \\ f_{Al} - f_{Ni} & h, k, l \text{ 有奇偶混杂} \end{cases}$$

$\therefore (hkl)$ 面的衍射线均出现, 不消光.

10. 衍射仪法中误差的来源? 以及精确测量点阵常数时, 国外推荐减小误差的原理.

答: 1. 测量仪引起的误差: ① 2 θ 的 0° 误差 ② 2 θ 刻度误差 ③ 试样表面磨轴误差

$$\frac{\Delta d}{d} = \frac{s}{R} \cdot \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} \quad \text{④ 垂直发散误差: } \frac{\Delta d}{d} = \frac{\Delta^2}{24} (\cot^2 \theta - 1)$$

2. 试样引起的误差: ⑤ 试样透明度误差 $\frac{\Delta d}{d} = \frac{\cos^2 \theta}{2\mu R}$ ⑥ 试样平面性误差:

$$\frac{\Delta d}{d} = \frac{\alpha}{24} \cot^2 \theta$$

3. 其他误差: ⑦ 弯曲因素误差 ⑧ 折射误差 ⑨ 温度误差.

⑩ 晶粒大小误差 ⑪ 特征辐射非绝对单色引起的误差.

国外推荐减小误差的原理:

在精确测量晶体点阵常数的过程中, 试验方法和试样均会引起一些误差.

$$\text{如衍射仪测量误差为: } \frac{\Delta d}{d} = -\cot \theta \Delta \theta + \frac{s}{R} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{2\mu R} + \frac{1}{24} \alpha \cot^2 \theta$$

+ $\frac{\Delta^2}{12} \cot^2 \theta$ 这些误差绝大部分均随 θ 角的增大而减小. 至 90° 时最小.

但实际试验无法实现 90° 测量, 所以通常测量一系列高角度线, 外推至 90°, 获得较精确的点阵常数.