

一 X射线的物理学基础

- 1、X射线的本质是什么？它与可见光、紫外线等电磁波的主要区别何在？用哪些物理量描述？
- 2、产生X射线需具备什么条件？
- 3、什么叫“X射线谱”、“X射线强度”、“短波限”、“特征X射线谱”、“激发电压”“K系激发”、“ $K\alpha$, $K\beta$ 谱线”？
- 4、连续谱是怎样产生的？其短波限 λ_0 与某物质的吸收限 λ_k 有何不同？
- 5、为什么 $K\alpha$ 谱线比 $K\beta$ 谱线波长长而强度高？
- 6、莫塞莱定律
- 7、在X射线多晶体衍射中，为什么常利用 $K\alpha$ 谱线作辐射源？
- 8、什么叫“相干散射”、“非相干散射”、“荧光辐射”、“光电效应”、“吸收限”、“俄歇效应”？
- 9、特征X射线与荧光X射线的产生机理有何异同？某物质的K系荧光X射线波长是否等于它的K系特征X射线波长？
- 10、X射线与物质有哪些相互作用？规律如何？对X射线分析有何影响？光电子和俄歇电子有何不同？

二 晶体学基础

- 1、倒易点阵的定义
- 2、什么是倒易结点和倒易矢量？
- 3、倒易矢量的基本性质是什么，试推导之。

三 衍射方向

- 1、劳厄和布喇格处理X-射线衍射的方法有什么不同？
- 2、布拉格定律及其推导。
- 3、什么是“反射级数”、“干涉指数”、“掠射角”、“衍射角”？
- 4、X光衍射和可见光反射有哪几方面的本质区别？
- 5、产生衍射的（极限）条件是什么？
- 6、立方系衍射线方向（衍射花样）与晶体结构的关系公式。
- 7、衍射矢量及衍射矢量方程？
- 8、什么是反射球、倒易球
- 9、厄瓦尔德图解原理是什么？

四 衍射强度

- 1、什么是汤姆逊公式，并讨论之（偏振因子）。
- 2、原子散射因子、结构因子、点阵消光的定义？。
- 3、结构因数表达式的推导。
- 4、结构因数决定于哪些量？
- 5、试推导简单点阵、底心点阵、面心点阵和体心点阵的结构因子。
- 6、四种基本点阵（简单、底心、面心和体心）的消光规律。
- 7、决定粉末衍射强度的因素有哪些？对于同一个物质，不同的衍射峰相对强度如何确定？

五 多晶体X射线衍射分析方法

- 1、使用厄瓦尔德图解释粉末法成像原理（倒易球、衍射圆锥）。
- 2、X射线衍射仪的主要组成部分有哪些？
- 3、德拜照相法原理
- 4、简述单色器的工作原理

六 物相分析

- 1、定性分析的基本原理和判据是什么？
- 2、什么是三强线法？
- 3、K值法与直接比较法原理

七 点阵常数的精确测定

- 1、点阵参数精确测定的原理是什么？

八 X射线法应力的测定

- 1、三种应力及其与衍射谱的关系
- 2、单轴应力的测试原理？

九 微晶尺寸与晶格畸变度的确定

- 1、决定衍射峰宽度的因素有那些？什么是物理宽化，包含哪些方面？
- 2、晶粒细化宽化与微观应力宽化的区别
- 3、应用厄瓦尔德图解说明衍射峰的宽化
- 4、谢乐公式是什么，应用谢乐公式时应注意哪些方面？

(4) 衍射级数

思路：面间距是晶面间距的 $1/n$ 。有可能给你晶面指数，也有可能没有晶面指数。

(a)从体心立方结构铁的(110)平面来的X-射线反射的布喇格角为 22° ，X-射线波长 $\lambda=1.54\text{\AA}$ ，试计算铁的立方晶胞边长；(b)从体心立方结构铁的(111)平面来的反射布喇格角是多少？(c)已知铁的原子量是55.8，试计算铁的密度。

$$(1) \quad d(110) = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{1.54}{2 \sin 22^\circ} = 2.056$$

于是求得点阵常数为

$$a = \sqrt{2}d(110) = 2.91$$

(2)，(111)平面的面间距为

$$d(111) = \frac{a}{\sqrt{3}} = 1.68$$

于是(111)平面反射的布喇格角为

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2d(111)} = 0.458$$

$$\theta = \arcsin(0.458) = 27.28^\circ$$

(3) 固体密度的公式为

$$\rho = \frac{ZM}{a^3}$$

其中 a 是立方晶胞边长， Z 是立方晶胞中的原子数，对体心立方铁， $Z=2$ ， M 为原子的质量，

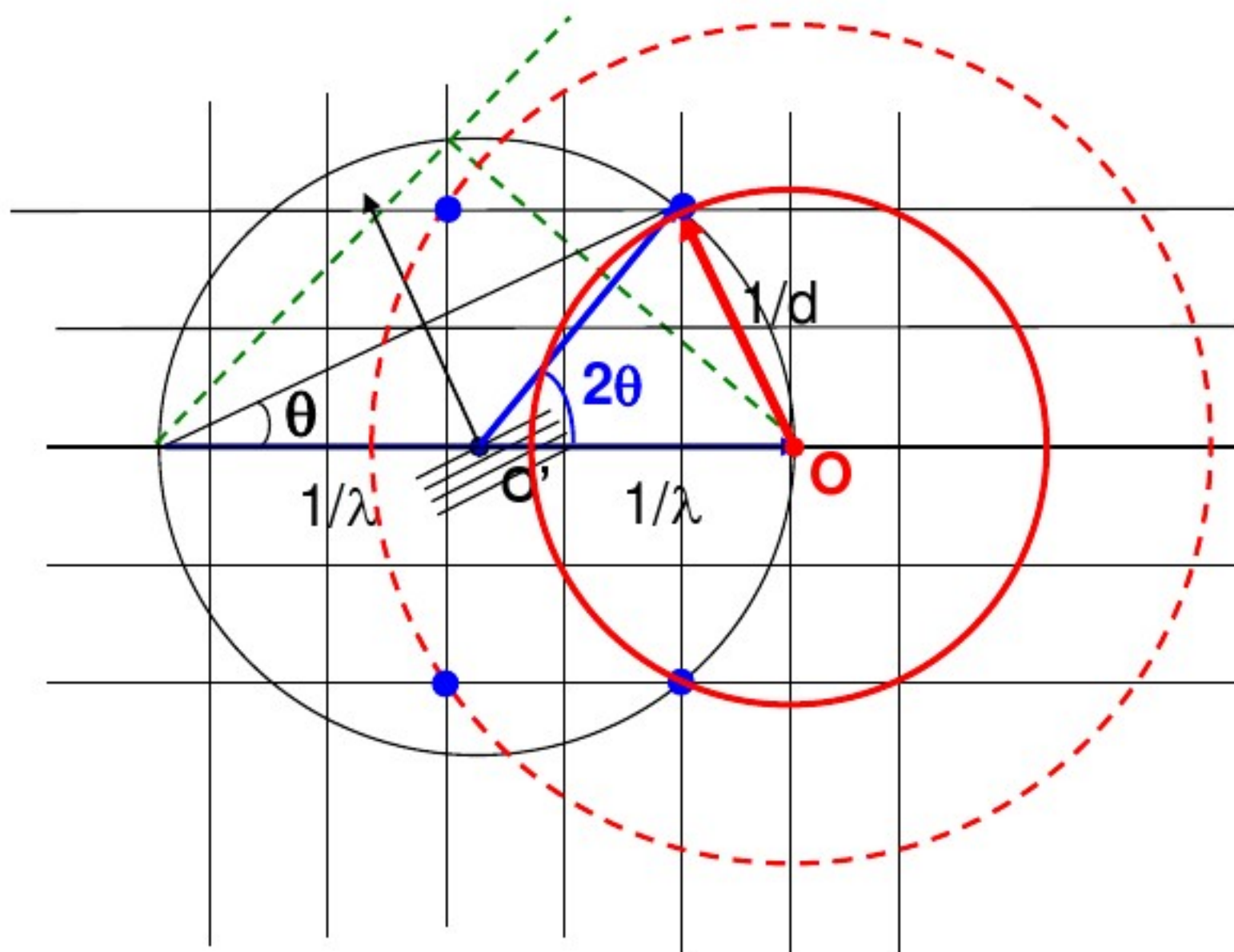
$$M = \frac{55.8 \times 10^{-3}}{6.02 \times 10^{23}} = 9.27 \times 10^{-26} \text{ kg}$$

将这些数值代入到密度的表达式中，得到

$$\rho = 7.52 \times 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$$

(1) 反射球与倒易球

$$2d \sin \theta = \lambda \quad \longrightarrow \quad \frac{1/d}{2/\lambda} = \sin \theta$$



反射球

倒易球

(2) 衍射条件

正空间：晶面的反射需要满足布拉格方程。

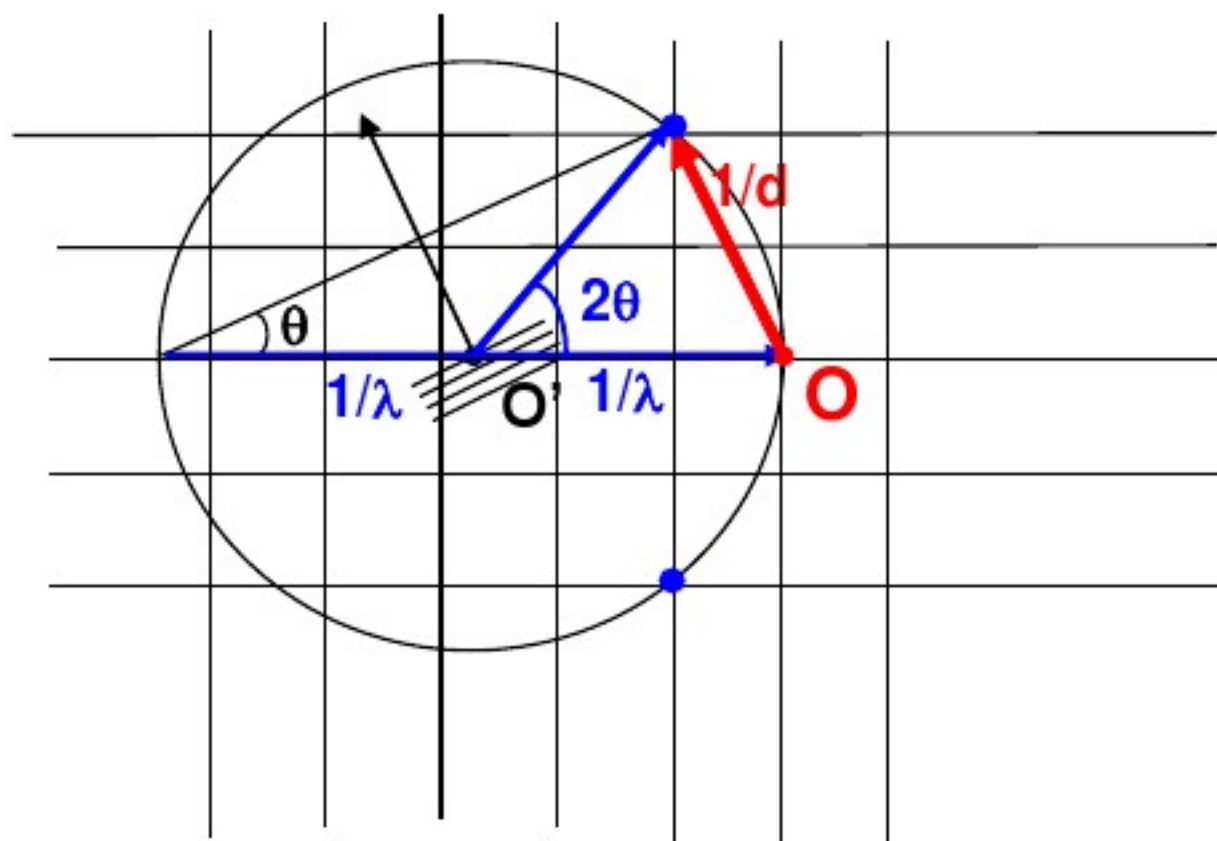
d (晶面间距)

θ (反射角、入射角)

λ (入射光波长)

$$2d \sin \theta = \lambda$$

倒空间：反射球与倒易点相交。



(3) 反射级数

(A) 引入反射级数的原因:

形成反射的物质基础是**实际晶面**。当实际晶面的面间距（**d**值）足够大时，从相邻两晶面上反射波的光程差在某个方向上可能为波长的整数倍。

$$2d_n \sin \theta = n\lambda$$

引入**虚拟晶面**。如果把虚拟晶面也看作是晶面的话，都是一级反射

$$2d \sin \theta = \lambda$$

★讨论属于几级反射，是针对实际晶面而言的。

★对于个实际晶面，要观察到其多级反射，要求晶面间距值足够大。所以一些面间距很小的晶面很少有多级反射。例如（511）等。

(B) 如何判断属于几级反射？

根据d值判断。衍射面面间距是晶面间距的 $1/n$ ，就是几级反射。

根据晶面指数判断。

(4) 倒易点与倒易球

物质基础	单晶	多晶粉末
表现形式	倒易点	无限多个倒易点构成 倒易球
衍射形成条件	倒易点与反射球相交	倒易球与反射球相交
实验方法	劳厄法	德拜法