



中南大学

X射线衍射分析技术

X射线衍射学原理

材料科学与工程学院

艾 延 龄

E-mail: ylai@mail.csu.edu.cn

主要内容

历史背景

第一章 X射线的物理学基础

第二章 X射线的晶体学基础

第三章 X射线的衍射原理

第四章 X射线的强度

第五章 X射线衍射实验方法和点阵常数测定

第六章 物相分析

第七章 晶粒尺寸和点阵畸变度的测定



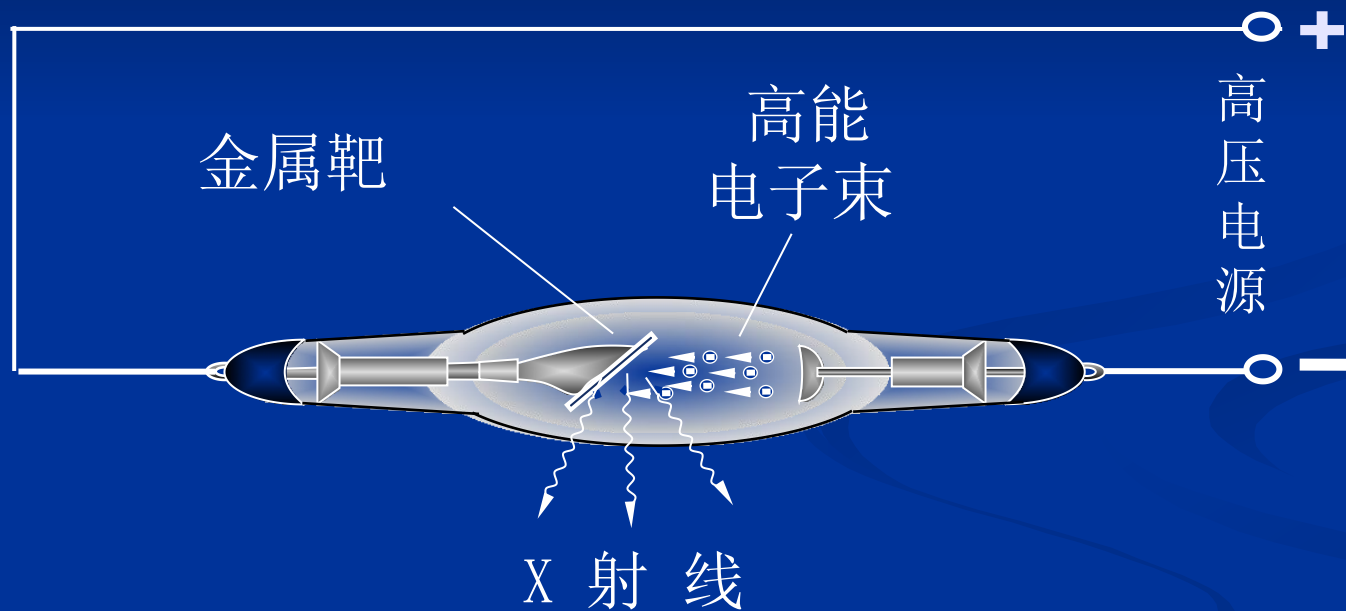
中南大学

与X射线有关的 历史背景

材料科学与工程学院

艾 延 龄

1895年，德国物理学家伦琴在研究阴极射线管的过程中，发现了一种穿透力很强的射线。



由于未知这种射线的实质（或本性），将它称为 X 射线。



伦琴
(W. K. Röntgen,
1845-1923)



历史上第一张X射线
照片，就是伦琴拍摄
他夫人的手的照片。

X射线不仅是第一种被发现的以射线命名的物质，它的发现直接导致了元素放射性的发现！

X射线发现后，人们以为用太阳光照射荧光物质就能产生X射线。1896年，贝克勒尔对此展开研究，他用铀的氧化物作为荧光物质，放在太阳下暴晒，确实让底片感光了，当他进一步验证的时候，乌云遮住了太阳，一连几天都是阴天，但当他将底片洗出来之后，非常吃惊的发现底片曝光要比在太阳下强上百倍。最终导致了元素放射性的发现，打开了通往原子内部的大门。

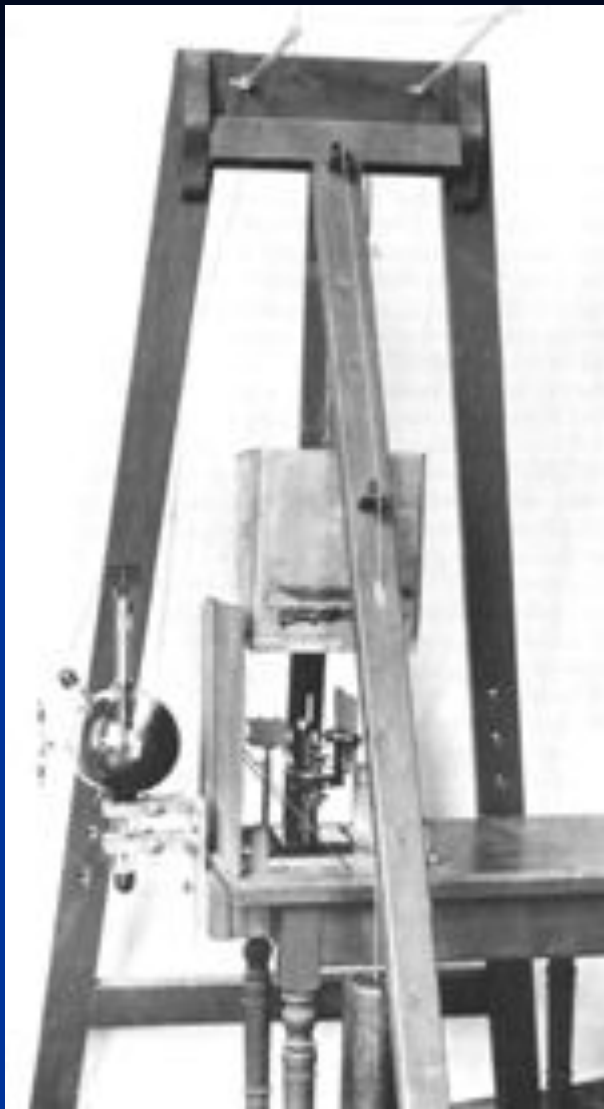
由于X射线的发现具有重大的理论意义和实用价值，伦琴于1901年获得首届诺贝尔物理学奖！



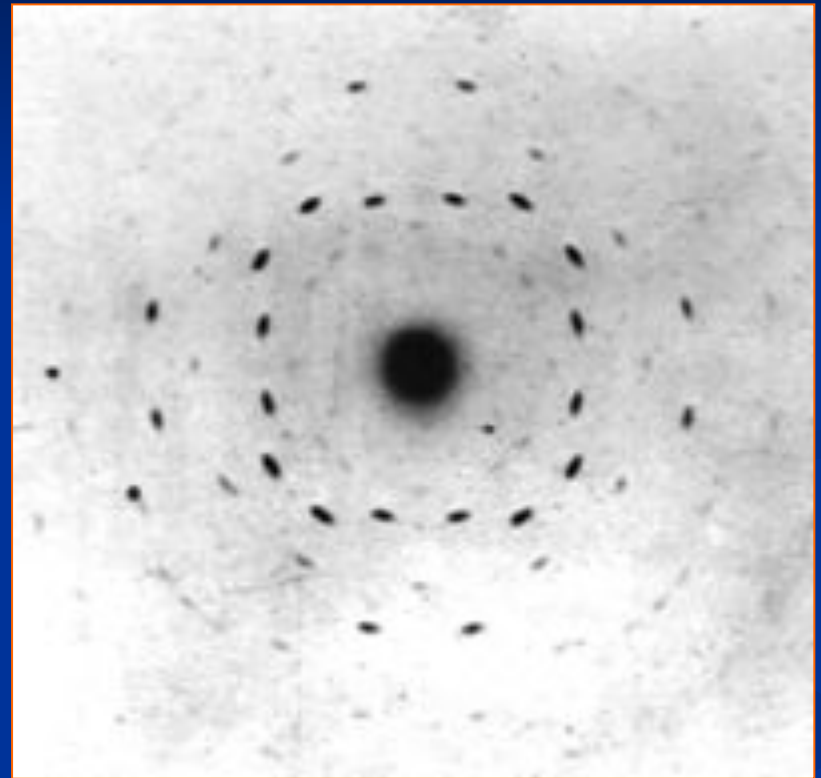
劳埃,1904年博士毕业于柏林大学,导师是普朗克,1905年留在柏林大学做普朗克的助教,1909年转到慕尼黑大学在索末菲手下做讲师。当时对X射线究竟是粒子还是波存在争议,但索末菲和劳埃倾向于波。

1912年2月,索末菲的博士研究生埃瓦尔德向劳埃请教与晶体有关的光学问题,劳埃反复询问了晶格振子之间的距离。

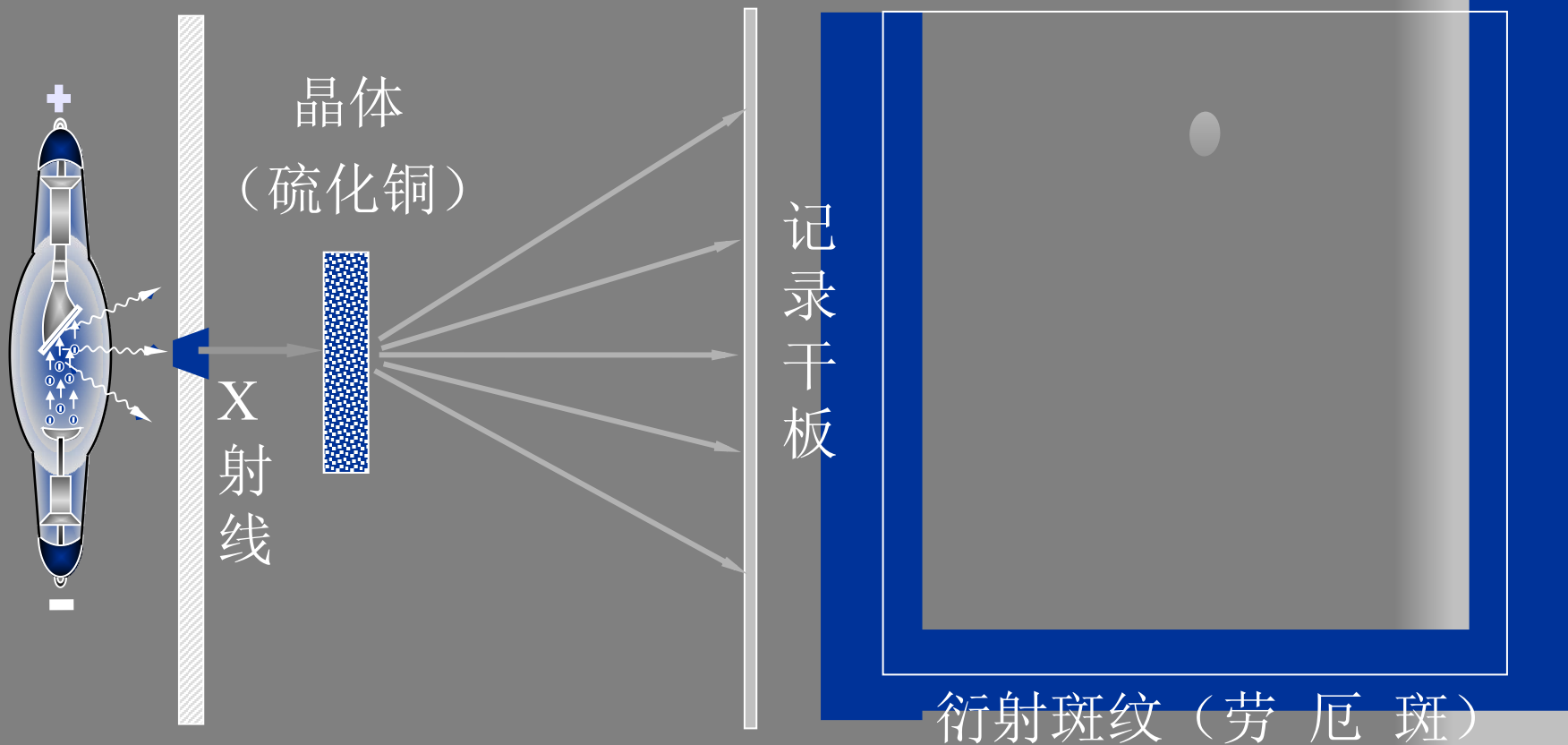
1912年4月劳埃、索末菲的助教弗里德里希和伦琴的博士研究生尼平进行了晶体X射线衍射实验,经过多次失败终于得到了清晰的衍射花样。



弗里德利希和尼平的实验装置



底片上显出有规则的斑点





康普顿效应

1922年，康普顿在研究X射线被自由电子散射的时候，发现一个奇怪的现象：散射出来的X射线分成两部分，一部分和原来的入射线波长相同，而另一部分则比原来的波长要长，具体的大小和散射角存在着函数关系。康普顿在引入光量子的基础上推导出了波长变化和散射角的关系式，和实验结果符合得非常好。

康普顿效应是量子理论最重要的实验依据之一，康普顿也因此获得1927年的诺贝尔物理学奖！

■ 与X射线及晶体衍射有关的部分诺贝尔奖获得者名单

年 份	学 科	得奖者	内 容
1901	物理	伦琴Wilhelm Conral Rontgen	X射线的发现
1914	物理	劳埃Max von Laue	晶体的X射线衍射
1915	物理	亨利. 布拉格Henry Bragg	晶体结构的X射线分析
		劳伦斯. 布拉格Lawrence Bragg.	
1917	物理	巴克拉Charles Glover Barkla	元素的特征X射线
1924	物理	卡尔. 西格班Karl Manne Georg Siegbahn	X射线光谱学
1937	物理	戴维森Clinton Joseph Davisson	电子衍射
		汤姆孙George Paget Thomson	
1954	化学	鲍林Linus Carl Panling	化学键的本质
1962	化学	肯德鲁John Charles Kendrew	蛋白质的结构测定
		帕鲁兹Max Ferdinand Perutz	
1962	生理医学	Francis H. C. Crick、JAMES d. Watson、 Maurice h. f. Wilkins	脱氧核糖核酸DNA测定
1964	化学	Dorothy Crowfoot Hodgkin	青霉素、B12生物晶体测定
1985	化学	霍普特曼Herbert Hauptman	直接法解析结构
		卡尔Jerome Karle	
1986	物理	鲁斯卡E. Ruska	电子显微镜
		宾尼希G. Binnig	扫描隧道显微镜
		罗雷尔H. Rohrer	
1994	物理	布罗克豪斯 B. N. Brockhouse	中子谱学
		沙尔 C. G. Shull	中子衍射

X射线的 应用

利用X射线的穿透能力得到透视照片。如医用X光照片，材料内部无损探伤等；

利用X射线衍射测定晶体的结构和对称性，晶格常数；测定晶粒尺寸，宏观应力和织构等；

利用X射线的光谱学来得到材料的成分等微观信息。如各种能谱仪。

七十年代发展起来的X射线吸收精细结构（X-ray Absorption Fine Spectroscopy, XAFS）。其中XAFS不但能得到材料的成分信息，而且能得到离子的价键、离子间的距离以及离子或原子的配位数等结构信息。