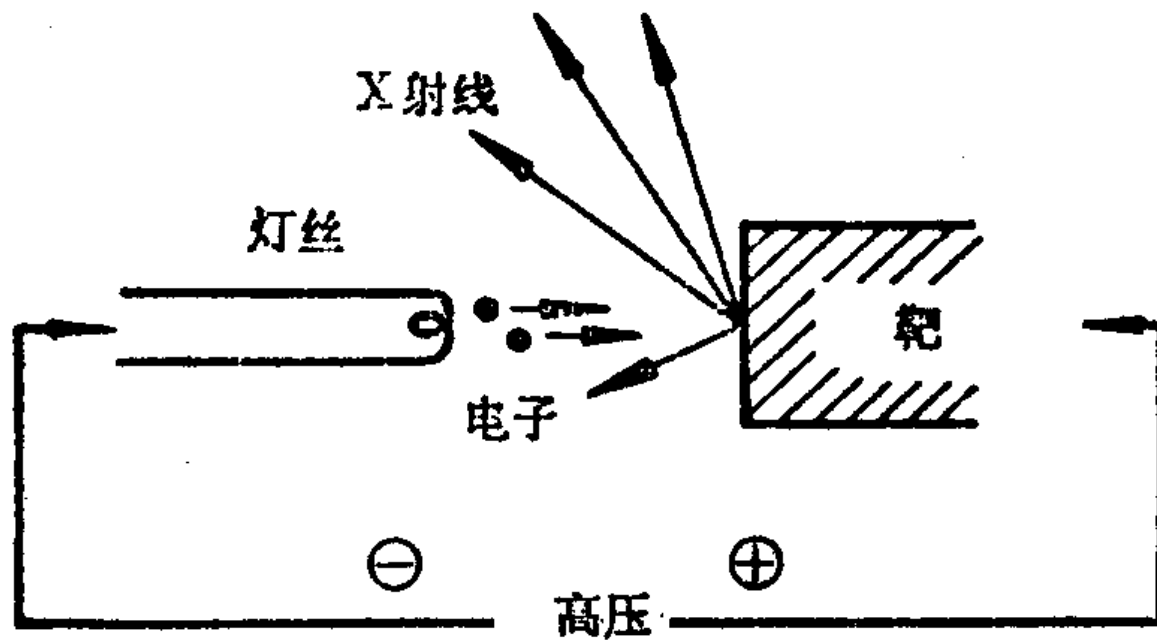


X光粉末衍射在催化材料研究中的应用

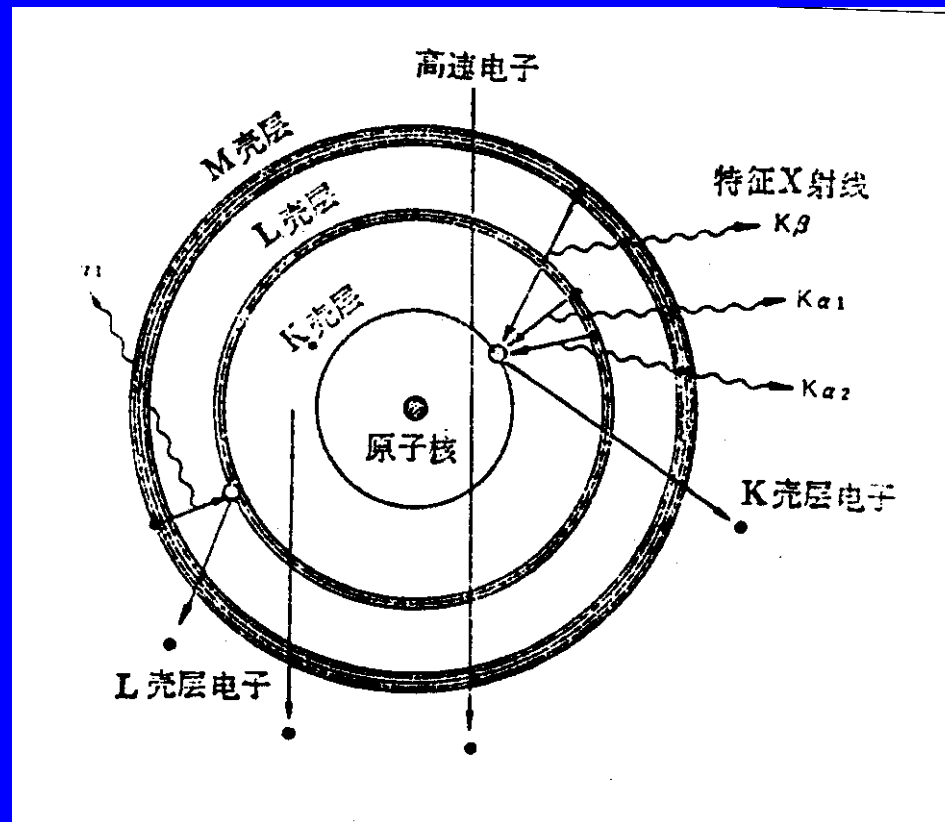
一 X射线的基础

- X射线的性质：波粒二重性，感光作用，荧光作用，电离作用，无折射，衍射现象，穿透能力强
- X射线的强度：单位时间通过的光子数的多少
- X射线的发生：真空中极高速度运动的电子碰撞阳极时产生X射线
- X射线谱：特征X射线的波长，激发电压
- X射线的吸收：当X射线通过物质时，转变成其他形式的能量，只有一小部分穿过。

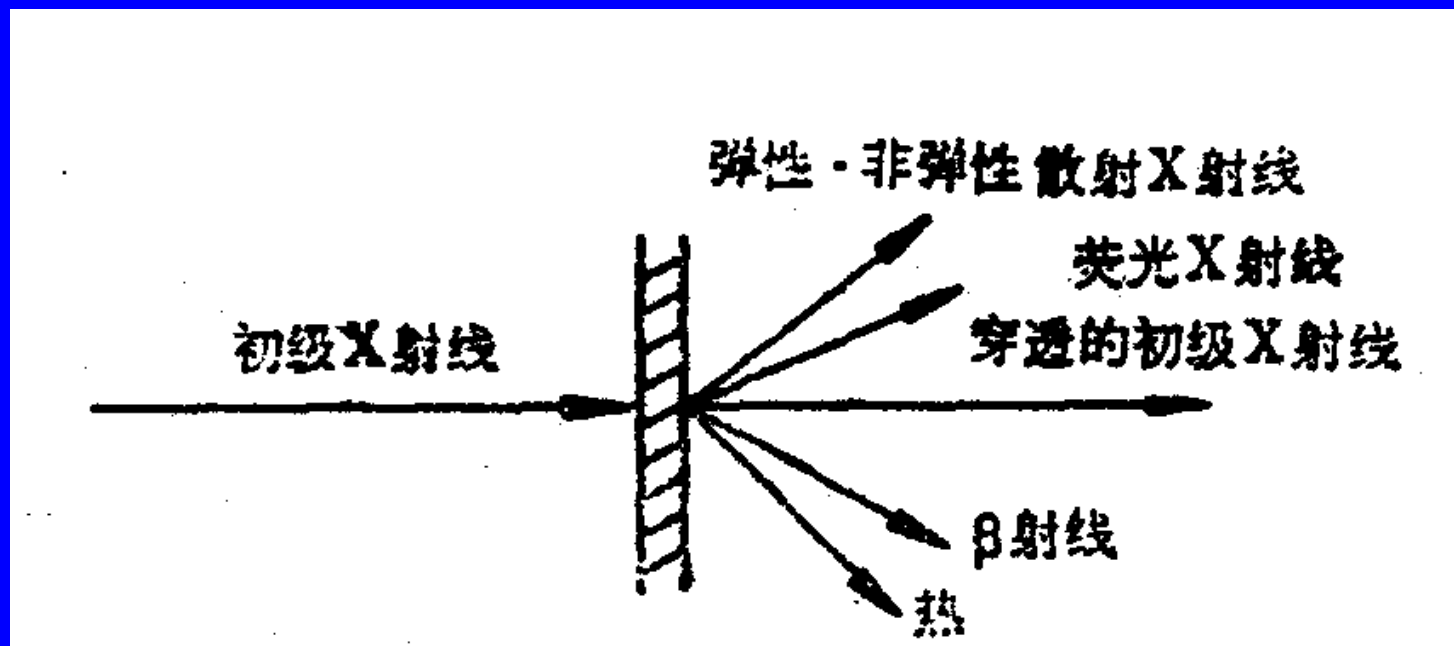
X射线的发生



特征X射线激发机理



X射线能量转换



- X射线的散射：当X射线通过物质时入射X射线被吸收并散射。散射X射线有列几种
- 与入射X射线波长相同的X射线
- 比入射X射线波长稍长的X射线
- 光电效应产生的荧光X射线

二 晶体结构

- 晶体的定义：具有各向异性物化性质的均匀固态物质
- 点阵、单位点阵、点阵常数
- 晶系：按对称分类
- 密勒指数：
- 多重性因子
- 晶面间距

点阵和单位点阵

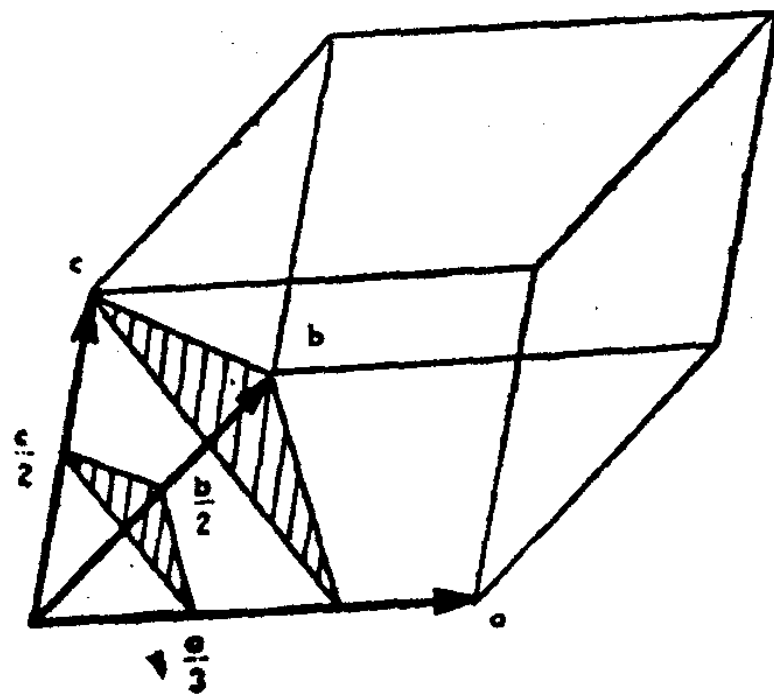
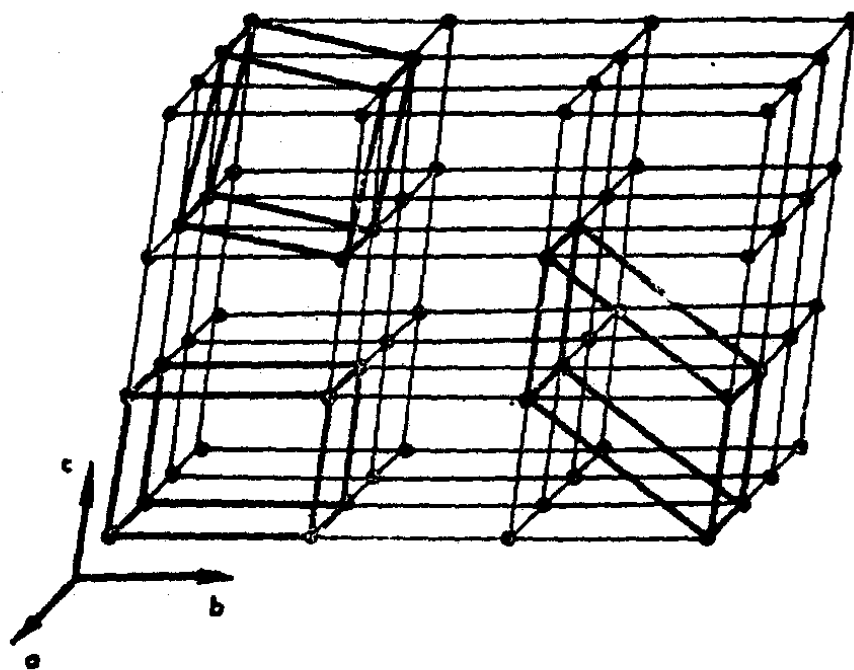
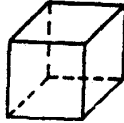
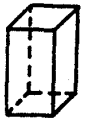
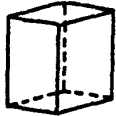

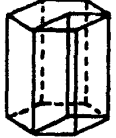
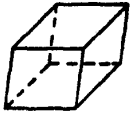
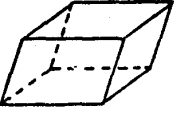


表1.7.1 晶系和布拉菲点阵

晶系	晶轴	布拉菲点阵记号	反映特点的图形
立方晶系 (cubic)	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单 体心 面心 P I F	
正方晶系 (tetragonal)	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单 体心 P I	
斜方晶系 (orthorhombic)	$a \neq b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单 体心 底面心 P I C E	
菱方晶系 (rhombohedral or trigonal)	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	简单 P	
六方晶系 (hexagonal)	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ$ $\gamma=120^\circ$	简单 P	
单斜晶系 (monoclinic)	$a \neq b \neq c$ $\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$	简单 底面心 P C	
三斜晶系 (triclinic)	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	简单 P	

多重性因子

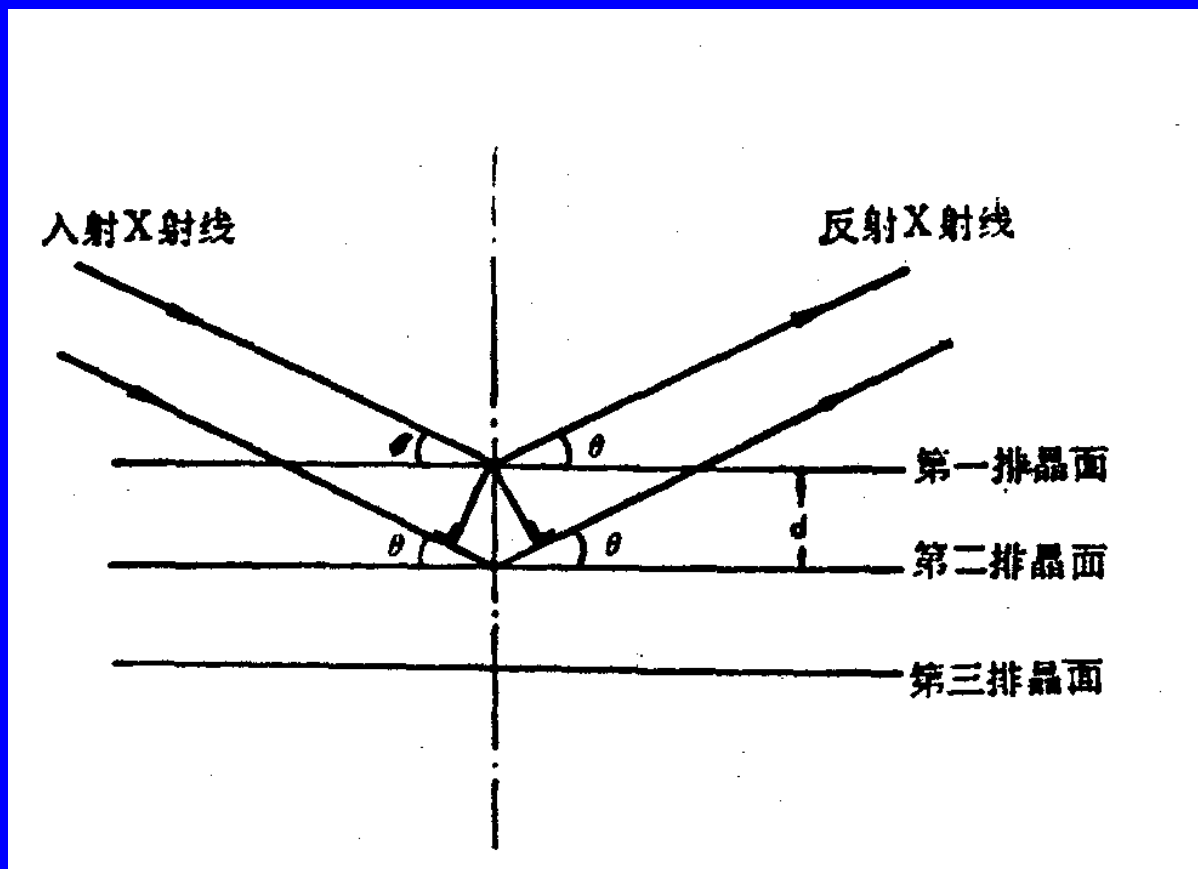
表1.7.2 晶面的多重性因子

晶系	多重性因子						
立方晶系	$\{hkl\}$ 48*	$\{hhl\}$ 24	$\{hk0\}$ 24*	$\{hh0\}$ 12	$\{hhh\}$ 8	$\{h00\}$ 6	
正方晶系	$\{hkl\}$ 16*	$\{hhl\}$ 8	$\{h0l\}$ 8	$\{hk0\}$ 8*	$\{hh0\}$ 4	$\{h00\}$ 4	$\{00l\}$ 2
六方晶系, 菱方晶系	$\{hkl\}$ 24*	$\{hhl\}$ 12*	$\{h0l\}$ 12*	$\{hk0\}$ 12*	$\{hh0\}$ 6	$\{h00\}$ 6	$\{00l\}$ 2
斜方晶系	$\{hkl\}$ 8	$\{h0l\}$ 4	$\{hk0\}$ 4	$\{0kl\}$ 4	$\{h00\}$ 2	$\{0k0\}$ 2	$\{00l\}$ 2
单斜晶系	$\{hkl\}$ 4	$\{h0l\}$ 2	$\{h00\}$ 2				
三斜晶系	全部晶面：2						

三多晶体的X射线衍射

- 晶体的衍射现象： $2d\sin\theta = n\lambda$
- 粉末法的X射线衍射强度
- 多晶体的X射线衍射

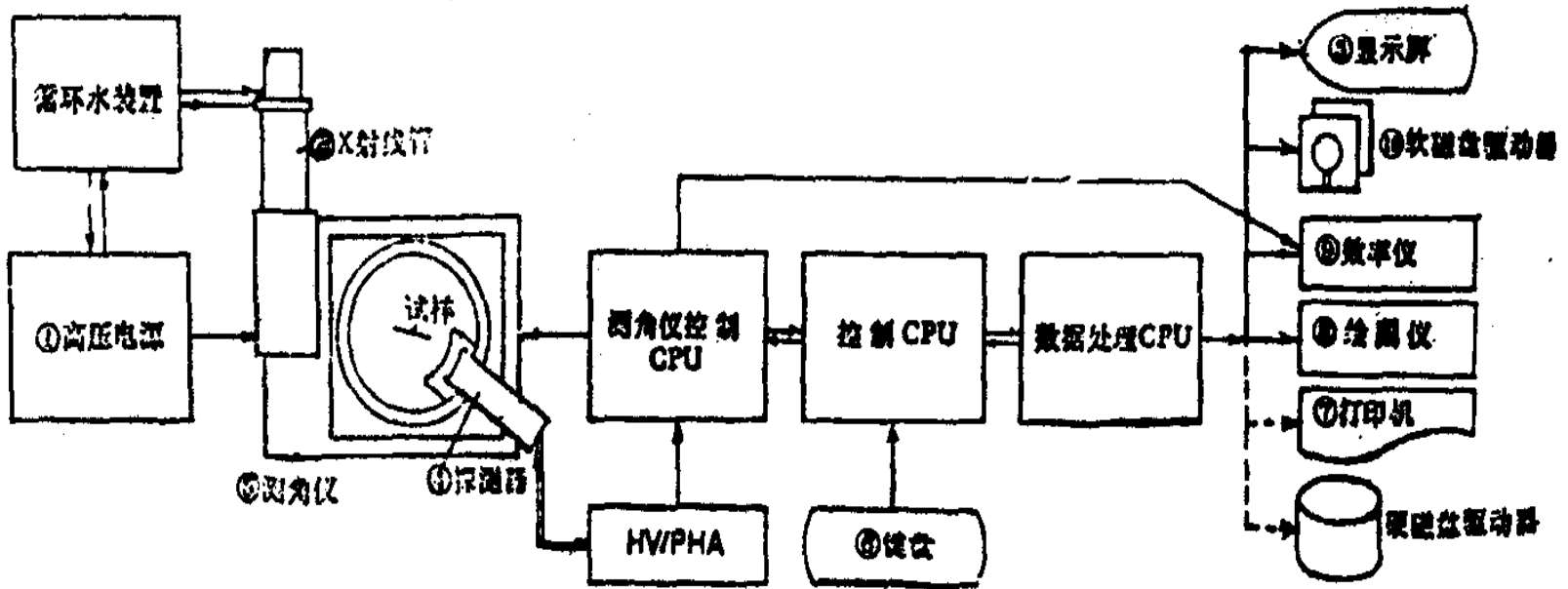
布拉格衍射条件



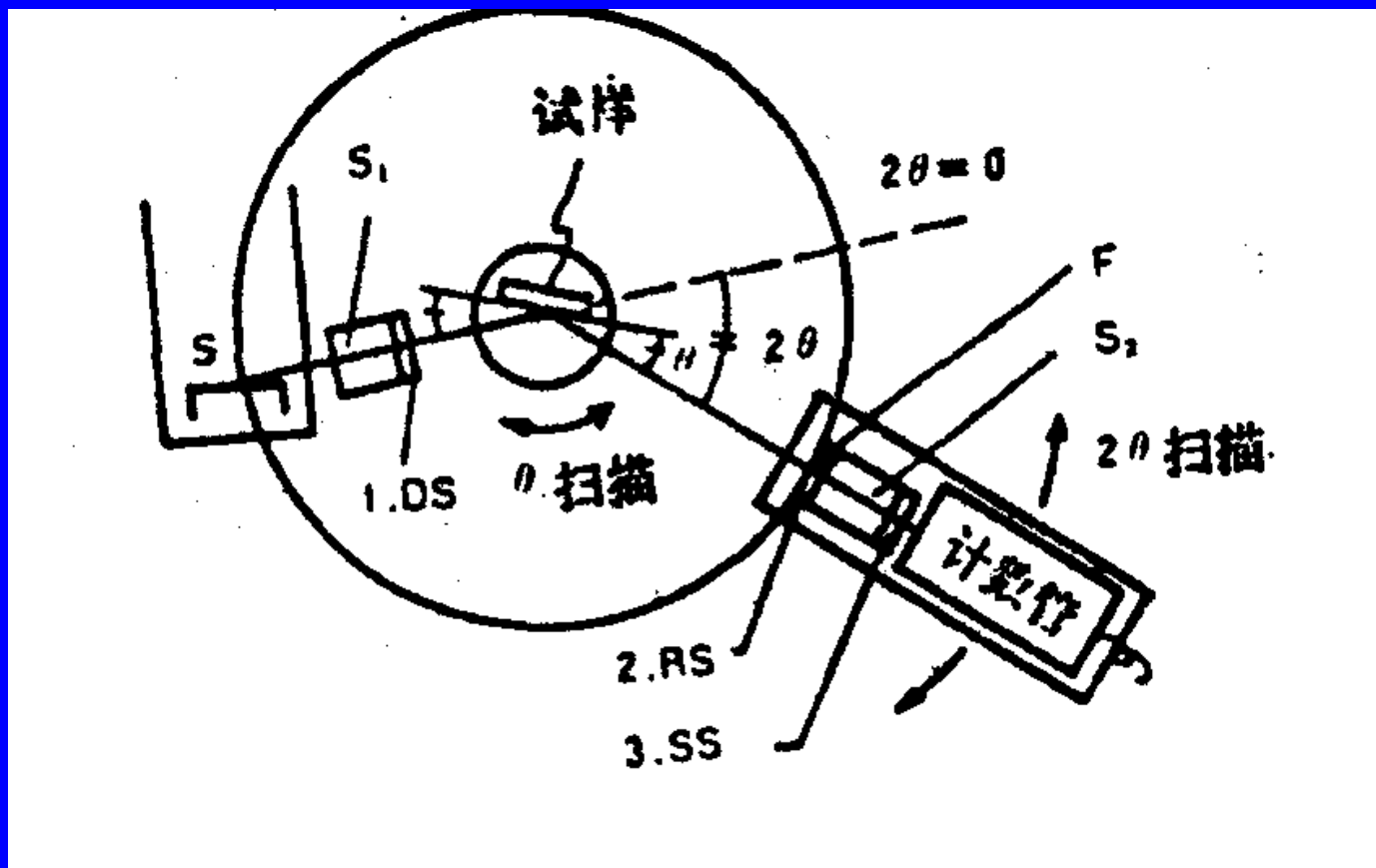
四 X射线衍射装置

- X射线发生装置： X射线管， 高压发生器
- 测量角度 2θ 的测角仪
- 测量X射线强度的计数装置
- 控制计算装置

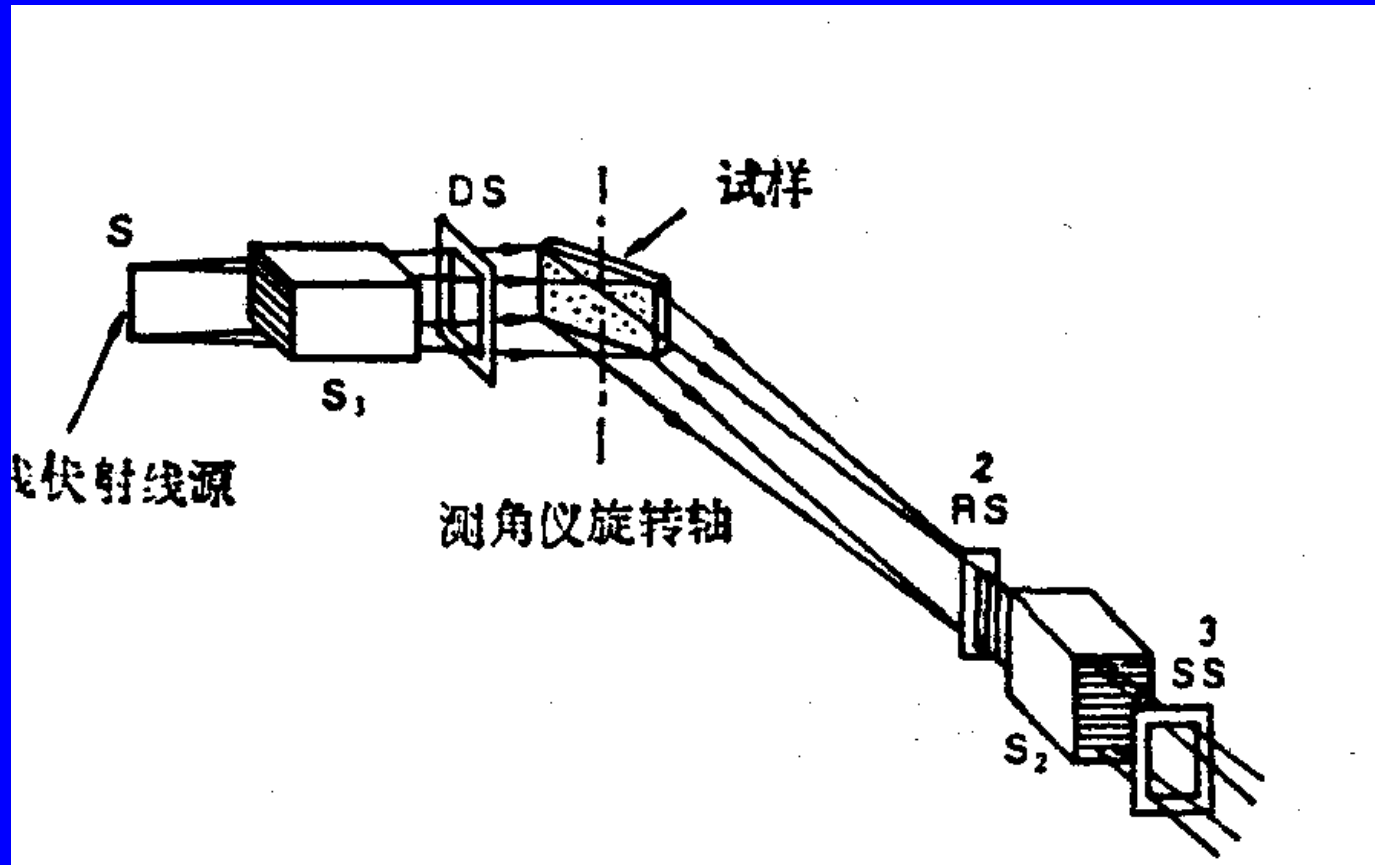
衍射仪方框图



测角仪的基本结构



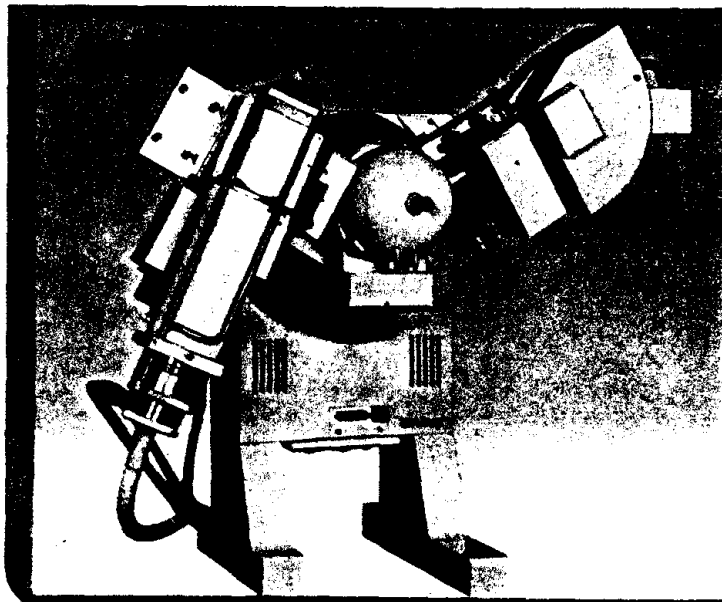
X射线光学系统



日本理学D/MAX型X光衍射仪

X射线衍射仪D/max2000系列

- 是以工作站为主计算机,自动化,多功能的仪器
- 实现了光学系统的自动调整,系统误差的自动测量和校正,偏计量的自动测量和校正
- 实现了标准数据处理自动化
- 采用了无皮带式旋转阳极
- 备有3KW,12KW,18KW等多种X射线发生器
- 可配用多种附件



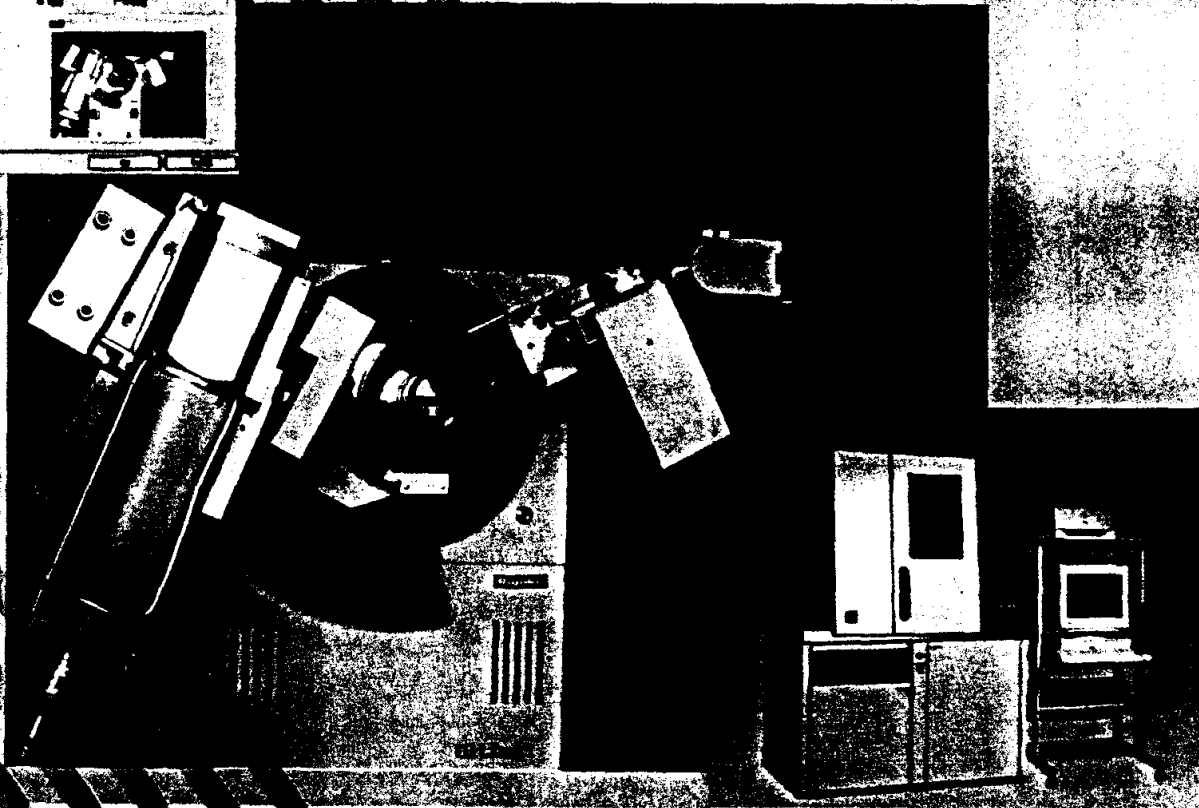
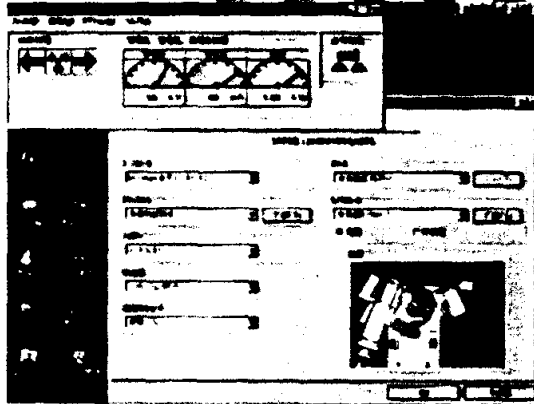
X射线衍射仪D/max2000-Ultima+

- 可方便进行样品水平,垂直,卧式系列变更
- 实现了光学系统的自动调整,系统误差的自动测量和校正,偏计量的自动测量和校正
- 世界上首先采用了非对称集中光学系统(已申请专利),能实现高分辨率测量
- 可在入射端加入弯曲型单色器(选件)
- 最小扫描步径为 0.0001° (选件),可测量回摆曲线
- 测角仪半径可由185mm~285mm连续变化

D/MAX-2000/PC

理学 / 自动 X 射线衍射仪

X-ray Diffractometer D/MAX2000/PC Series



面对急速发展着的计算机PC化和网络化，理学所拿出的答卷是D/max-2000/PC系列。

