



材料研究方法

X-射线技术

X-射线的历史

- 1895年，德国物理学家伦琴发现了X-射线。
- 1912年，德国物理学家劳厄等人发现X-射线在晶体中的衍射现象，证明X-射线是一种电磁波。
- 1912年，英国物理学家布拉格父子利用X-射线衍射测定了NaCl晶体结构。

X-射线的产生

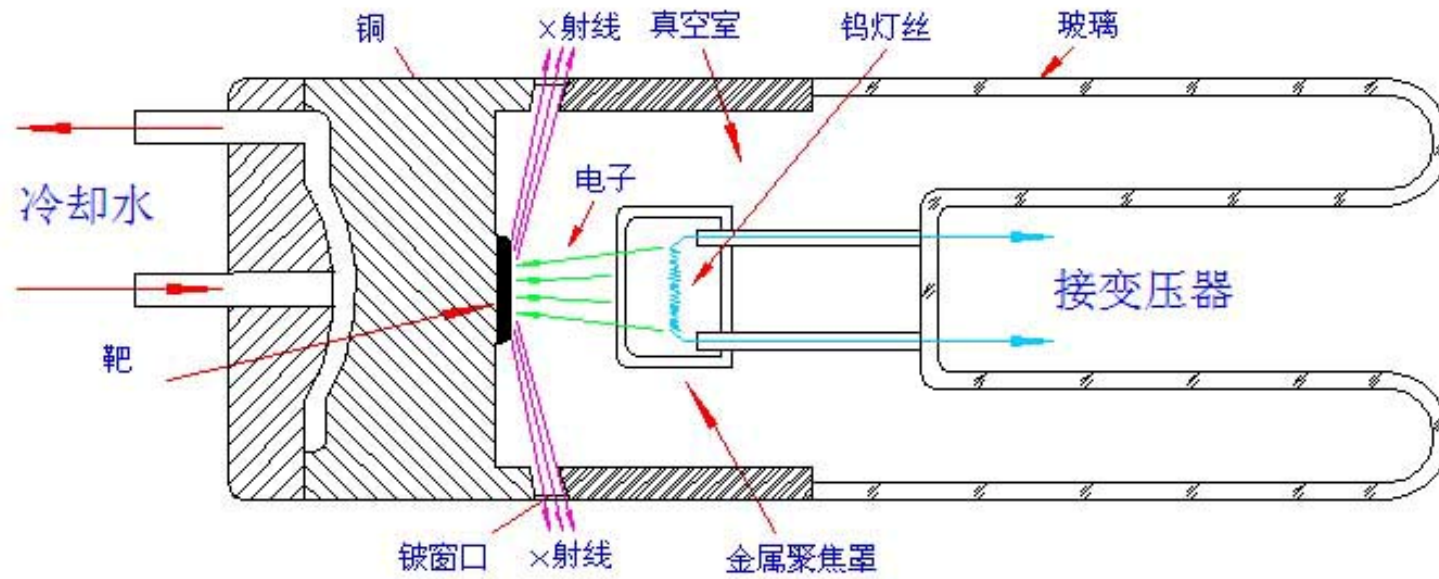
- 高速运动的电子或其它高能辐射流减速产生的一种电磁辐射。
- 原子内层电子跃迁产生的短波电磁辐射。

X-射线的产生可以用X-射线源、同步辐射源、放射性X-射线源。

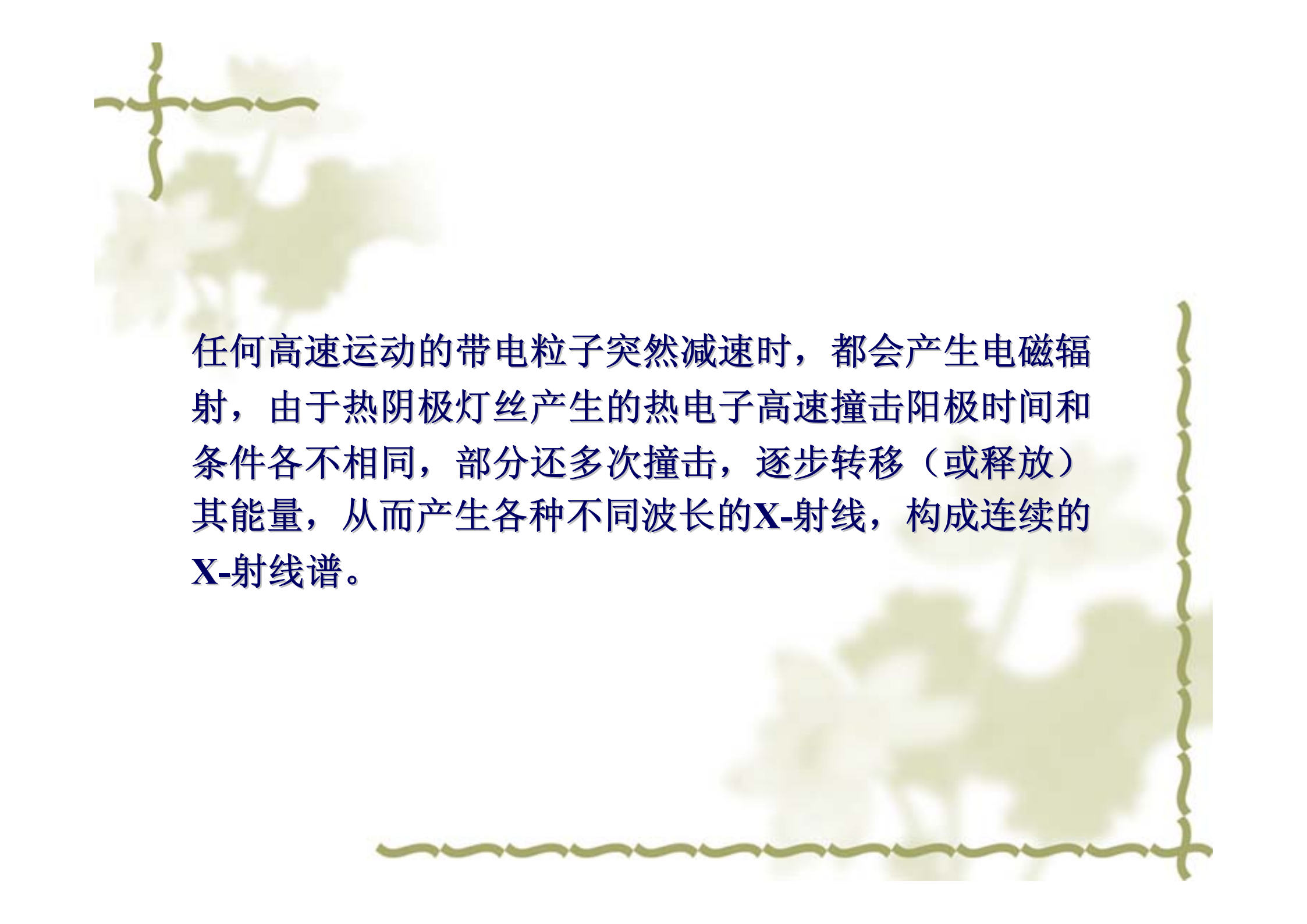
X-射线管：最广泛的是封闭式热阴极X射线管，包括一个热阴极（绕成螺线形的钨丝），一个阳极（靶）和窗口三个主要组成部分；管内高真空（ 10^{-7}Torr ）。

阳极：铜质底座上镶以阳极靶材料（**W、Ag、Mo、Cu、Ni、Co、Fe、Cr**等）产生不同的特征X射线。

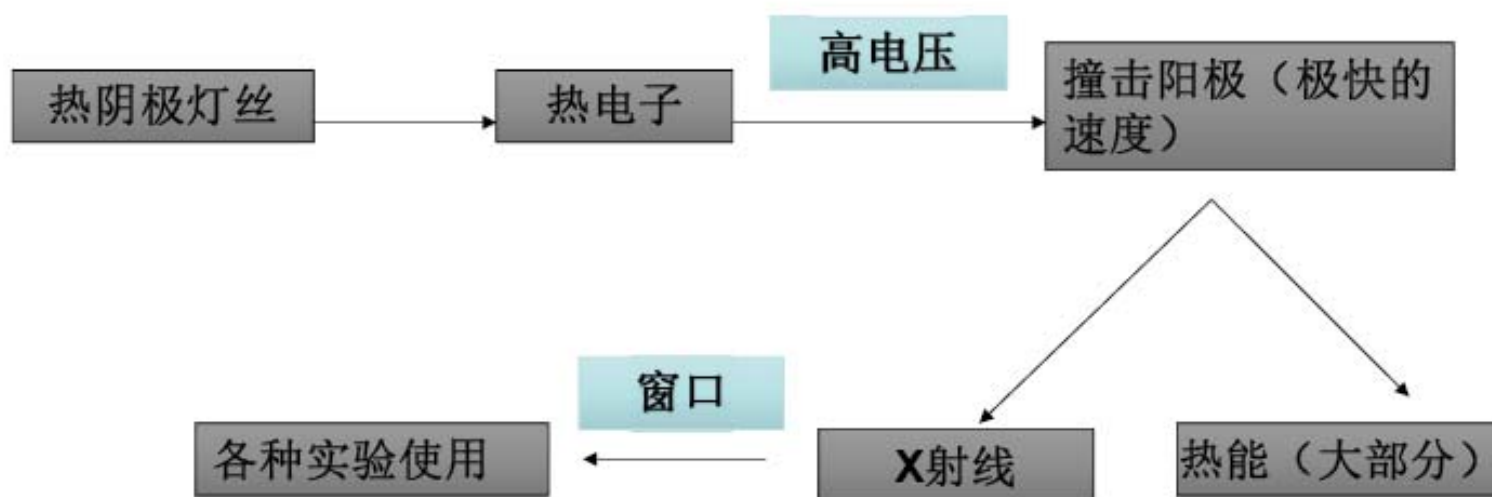
窗口：使用对X射线吸收极少的材料，如**Be、Al**、轻质玻璃等制成。



X-射线管



任何高速运动的带电粒子突然减速时，都会产生电磁辐射，由于热阴极灯丝产生的热电子高速撞击阳极时间和条件各不相同，部分还多次撞击，逐步转移（或释放）其能量，从而产生各种不同波长的X-射线，构成连续的X-射线谱。



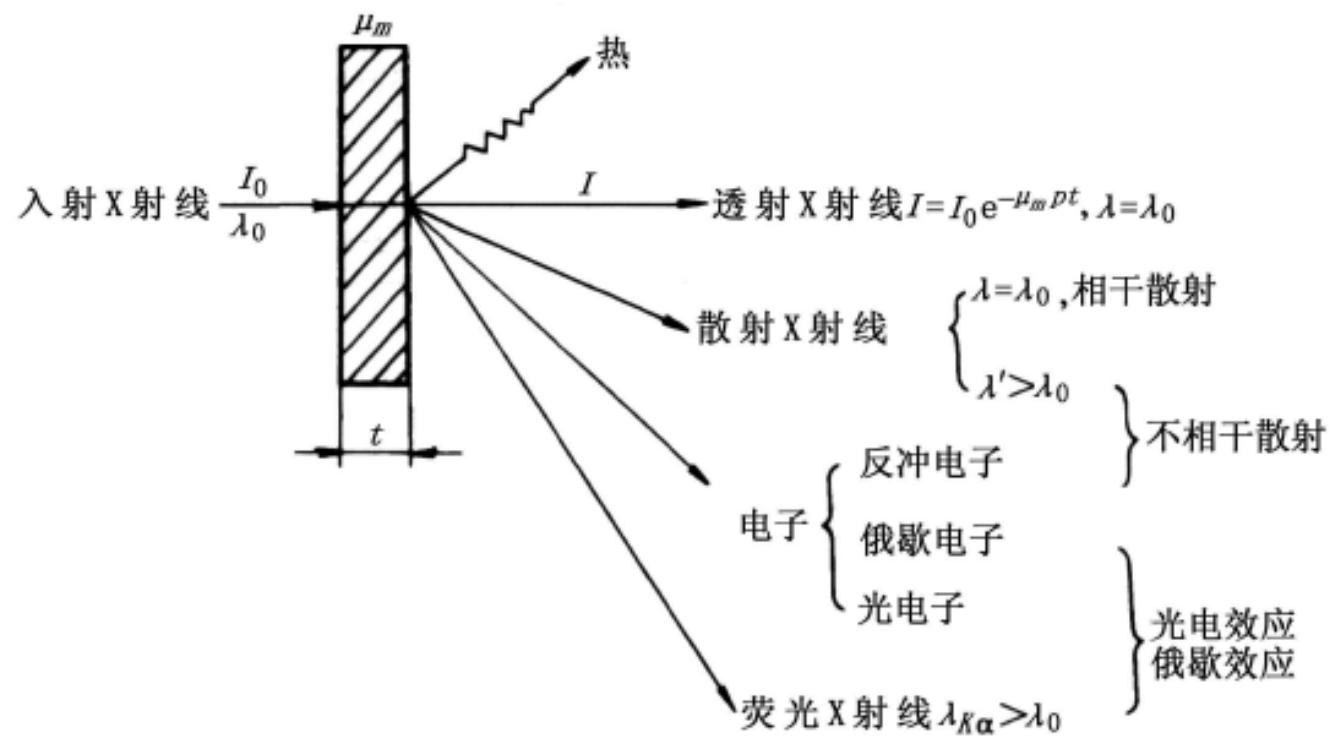
X射线的产生

X射线的强度与阴阳极之间的电压及管电流有关。

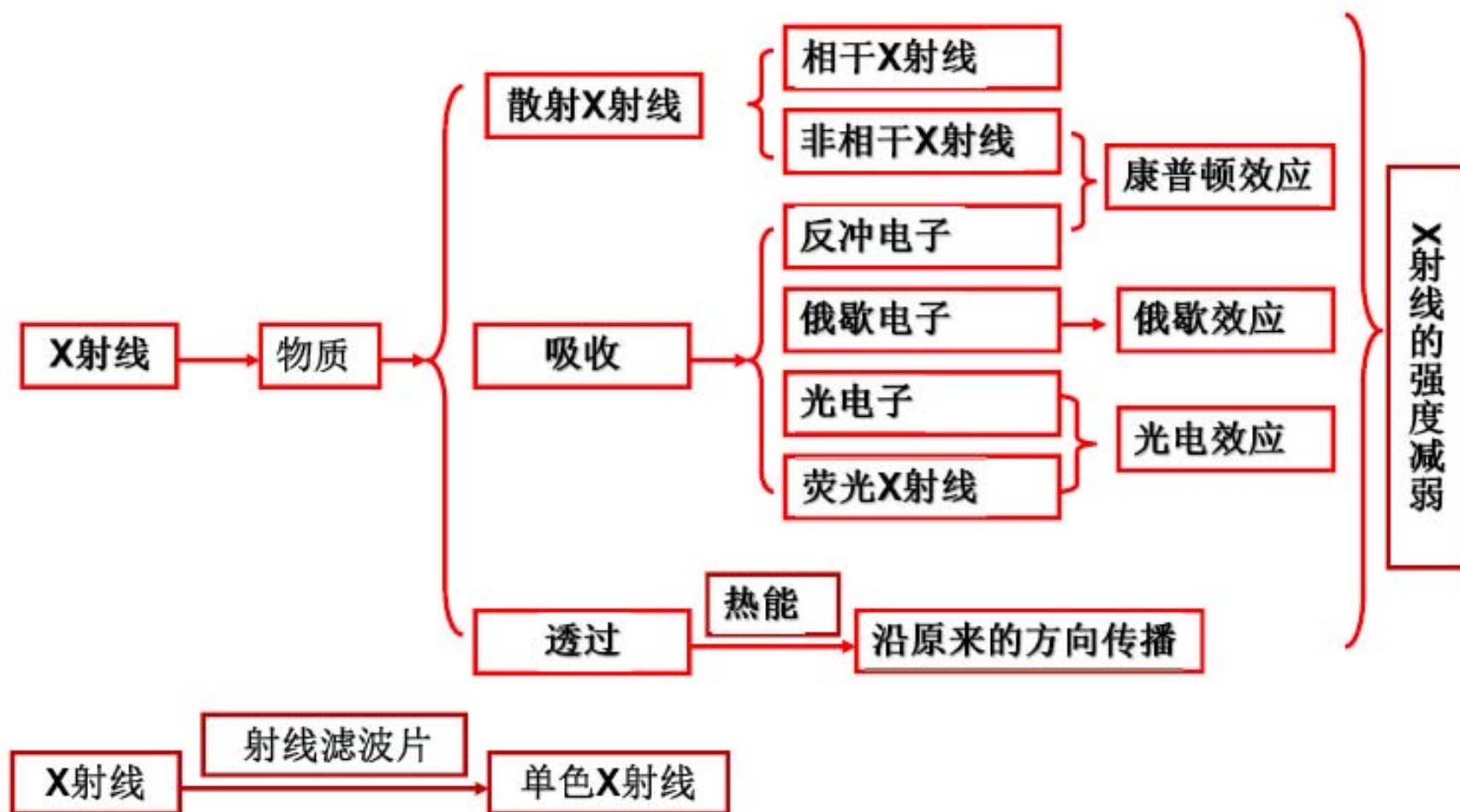
X-射线与物质的相互作用

- 光子与电子或原子核相遇，运动方向发生改变，称为散射。
- 入射光子在散射前后的能量（频率、波长）不变、只改变方向的散射称为相干散射。
- 如果散射光是相干的，在偏离入射光线方向上所观察到的光称为衍射光。

相干散射是X-射线在晶体中产生衍射现象的基础。



X-射线与物质的相互作用



X-射线的性质

- X-射线具有很强的穿透能力；
- X-射线沿直线传播，即使存在电场和磁场，也不能使其传播方向发生偏转；
- X-射线肉眼不能观察到，但可使照相底片感光。通过一些物质时，使原子中外层电子发生跃迁发出可见光；
- X-射线能够杀死生物细胞和组织，人体组织在受到X射线辐射时，会产生一定的生理反应。

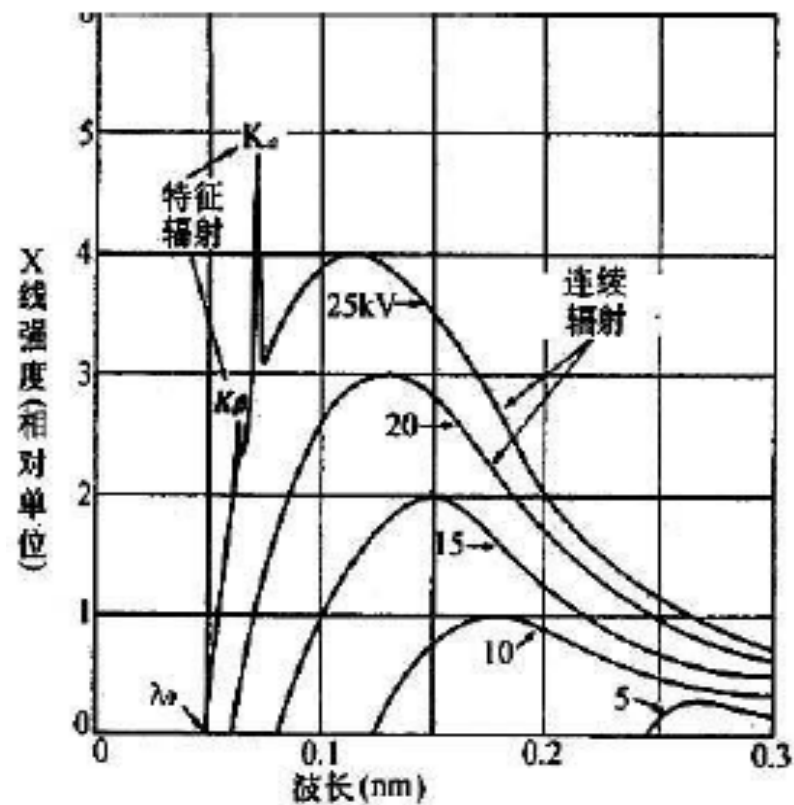
X-射线技术的特点

- 非破坏性、大面积上的平均性；
- 对结构和缺陷的灵敏性；
- 对成分、组成、结构和缺陷等单一对应性和可定量测量性；
- 制样简单，且代表实际材料的真实性。

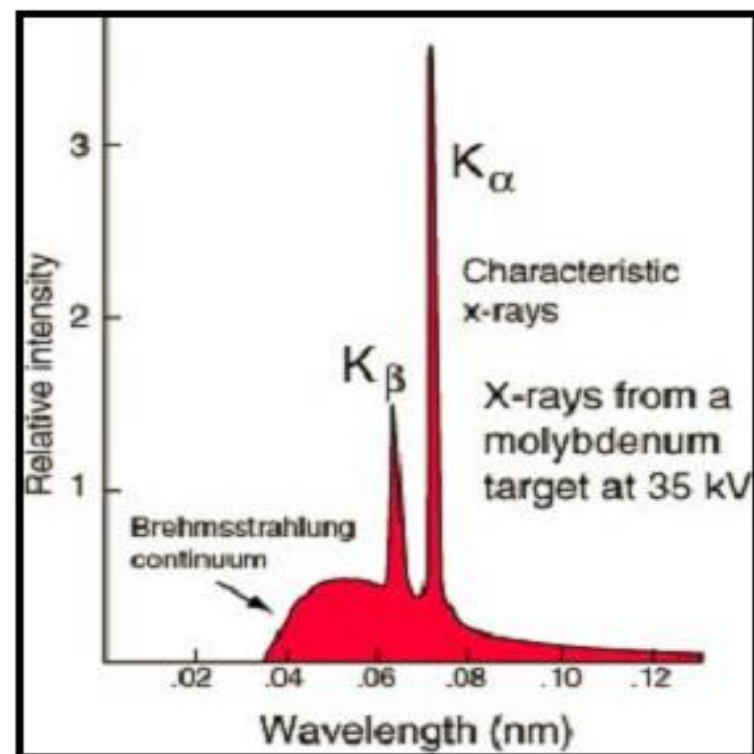
X-射线谱

X-射线强度与波长 λ 的关系曲线称为X-射线谱，分为连续X-射线和特征X-射线。

- 管压很低时（小于20 kv）的曲线是连续变化的，称为连续X-射线谱。
- 管电压超过某临界值时，特征谱才出现，该临界电压称为激发电压。
- 管电压增加时，连续谱和特征谱强度都增加，但特征谱对应的波长保持不变。



连续X-射线谱



钼靶X-射线管在35KV电压下的谱线，其特征X射线分别位于 0.63\AA 和 0.71\AA 处，这两条谱线称钼的K系。

特征X-射线产生的机理

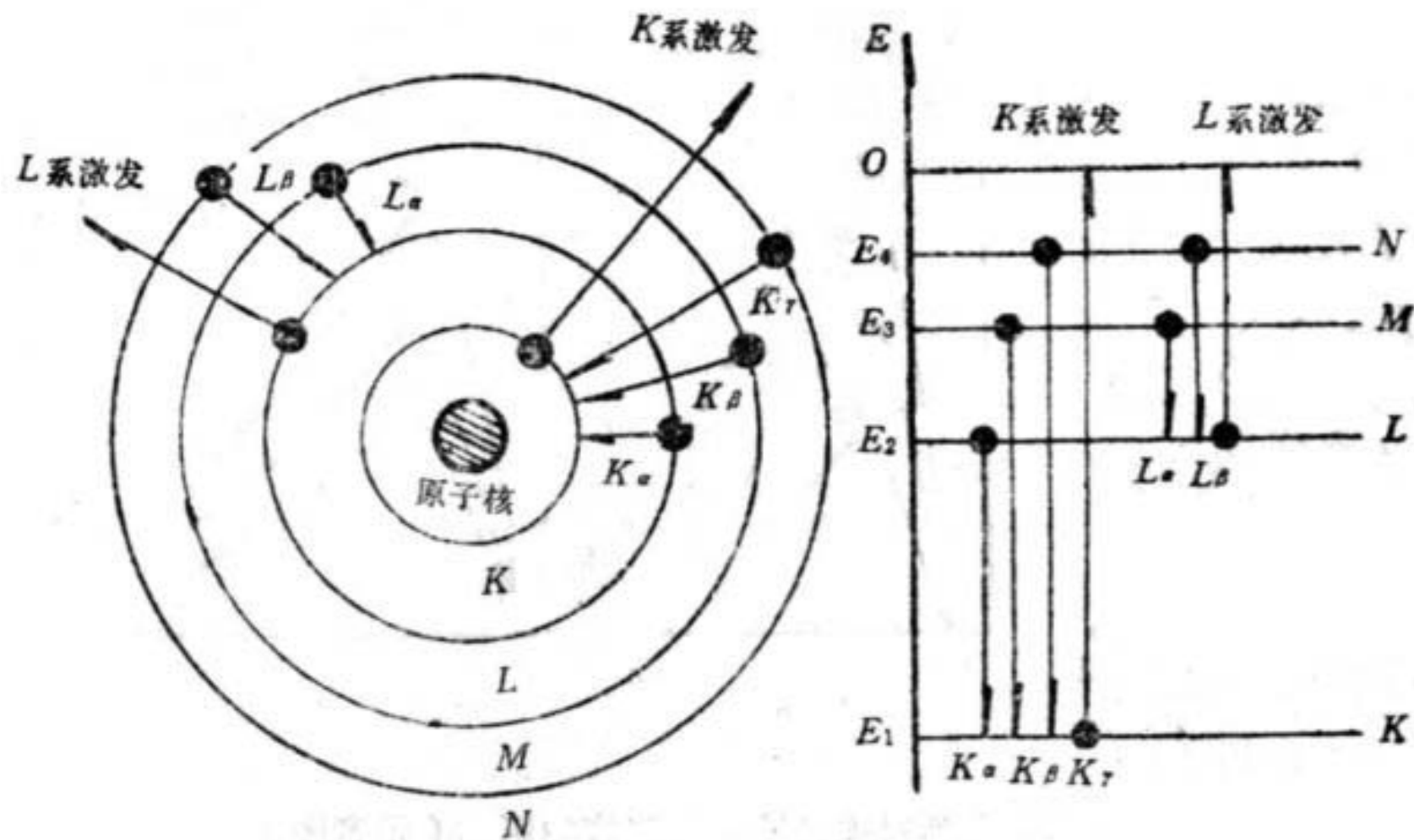
原子壳层按其能量大小分为数层，通常用K、L、M、N等字母代表它们的名称。当管电压达到或超过某一临界值时，阴极发出的电子在电场加速下，可以将靶物质原子深层的电子击到能量较高的外部壳层或击出原子外，使原子电离。如果K层电子被击出K层，称K激发，L层电子被击出L层，称L激发，其余各层依此类推。

特征X-射线的命名方法

当K电子被打出K层时，若L层电子填充K空位，则产生 K_{α} 辐射。

从L，M，N……壳层中的电子跃入K壳层空位时所产生的X射线，分别称之为 K_{α} 、 K_{β} 、 K_{γ} ……谱线，共同构成K系标识X射线。

除L、M、N……各层中电子跃入K层空位时发出的 K_{α} 、 K_{β} 、 K_{γ} 谱线外，还有L系、M系等标识X射线，共同构成该原子的标识X射线谱，但L系、M系等标识X-射线波长很长，强度弱，易被物质吸收，主要使用的是K系X-射线。



X-射线的能量为电子跃迁前后两能级的能量差，即：

$$h\nu_{K\alpha} = W_K - W_L = h\nu_K - h\nu_L$$

X-射线衍射 (XRD)

X-射线衍射可归结为两方面的问题

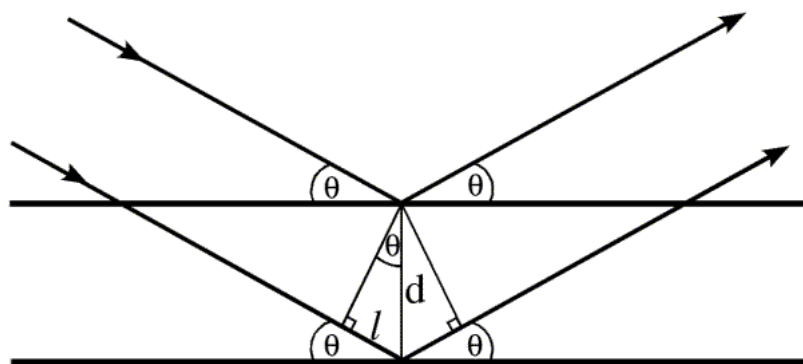
- 衍射方向 (空间分布规律)
- 衍射强度

衍射方向

- X-射线研究晶体结构主要通过X-射线在晶体中产生的衍射现象。
- X-射线在晶体中的衍射现象实质上是大量原子散射波互相干涉的结果。
- 衍射线的方向与晶体的点阵参数（晶胞大小和形状）、入射线的方位及X-射线波长有关。

布拉格定律:

→ X-射线有强的穿透能力，晶体的散射线来自若干层原子面，各原子面的散射线之间会发生干涉。两个相邻原子面的散射波的光程差为：



$$\delta = 2d \sin \theta$$

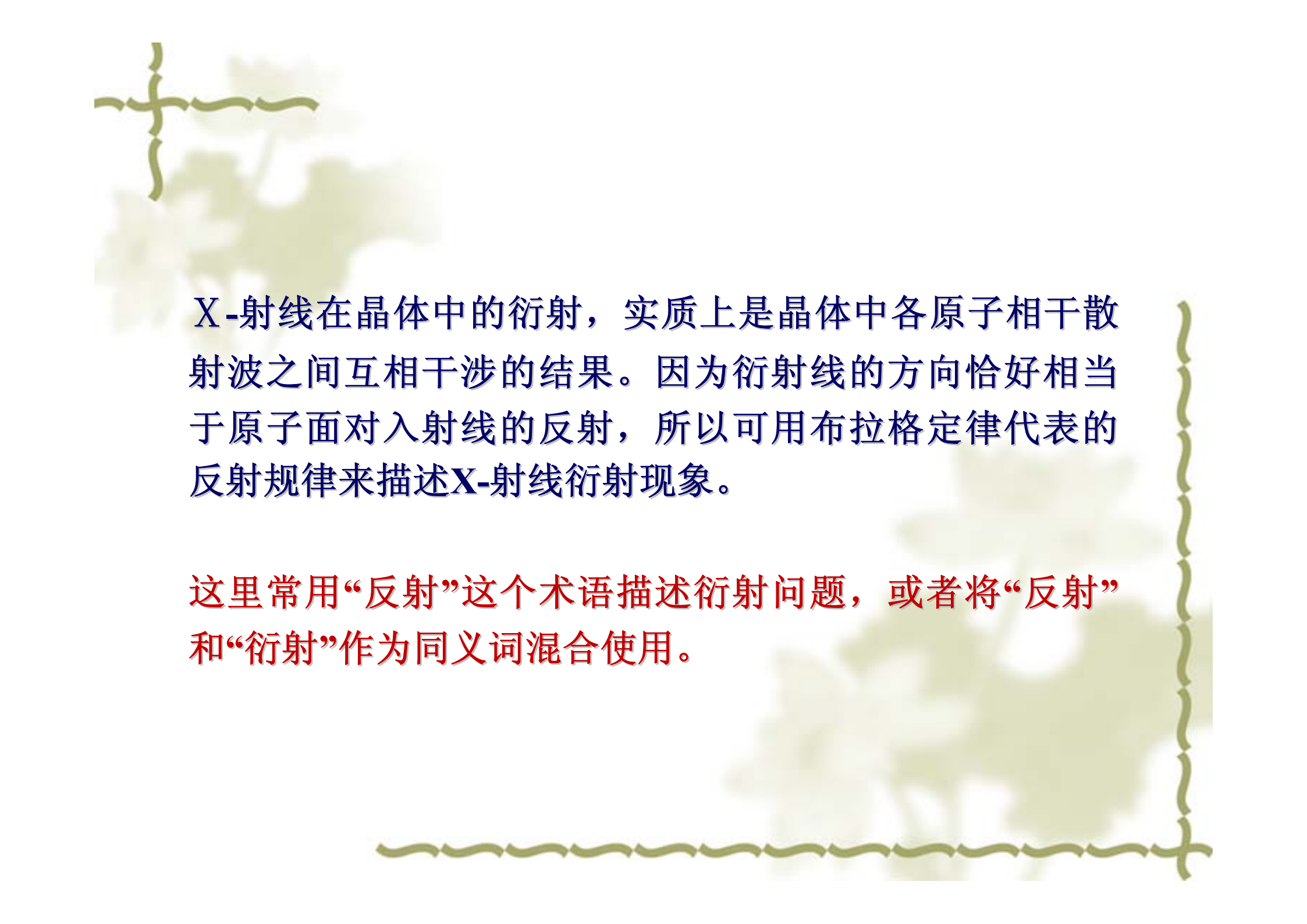
单一原子面的反射

→ 当光程差等于波长的整数倍时，两列散射波的相位相同、发生相长干涉，散射波强度加强，即干涉加强条件为：

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

布拉格方：1912年，英国物理学家布拉格父子发现。

n:衍射级数，**2 θ**：衍射角，**d**:晶面距



X-射线在晶体中的衍射，实质上是晶体中各原子相干散射波之间互相干涉的结果。因为衍射线的方向恰好相当于原子面对入射线的反射，所以可用布拉格定律代表的反射规律来描述X-射线衍射现象。

这里常用“反射”这个术语描述衍射问题，或者将“反射”和“衍射”作为同义词混合使用。

● Bragg定律讨论 (1) --选择反射

- ➔ X-射线从原子面的反射与可见光的镜面反射不同，X-射线的晶面反射是有选择地反射，其选择条件为布拉格定律。一束可见光以任意角度投射到镜面上时都可以产生反射，即反射不受条件限制。
- ➔ X-射线晶面反射的选择性，是晶体内若干原子面的反射线相长干涉的结果。

• Bragg定律讨论 (2) --衍射极限条件

布拉格公式： $2d\sin\theta=n\lambda$ ， $\sin\theta=n\lambda/2d$ ，因 $\sin\theta<1$ ，故 $n\lambda/2d <1$ 。为使物理意义更清楚，考虑 $n=1$ （即1级反射）的情况，此时 $\lambda/2<d$ ，就是能产生衍射的限制条件。表明用波长为 λ 的X-射线照射晶体时，晶体中只有面间距 $d>\lambda/2$ 的晶面才能产生衍射。

• Bragg定律讨论 (3) --干涉面和干涉指数

布拉格方程 $2d\sin\theta=n\lambda$ 中， n 取正整数， $n=1$ 为1级衍射， $n=2$ 为2级衍射……，但这样处理问题不方便，为简单起见，布拉格公式常写为：

$$2\frac{d_{hkl}}{n}\sin\theta = \lambda$$

令 $d_{HKL} = \frac{d_{hkl}}{n}$ $2d_{HKL}\sin\theta = \lambda$

(HKL)称为衍射面的衍射指数或干涉指数。

把(hkl)晶面的n级反射看成与(hkl)晶面平行、面间距为(nh, nk, nl) 晶面的一级反射。面间距为 d_{HKL} 的晶面并不一定是晶体中的原子面，而是为简化布拉格方程所引入的反射面。这样的反射面称为干涉面，干涉面的面指数称为干涉指数。

● 布拉格方程应用

布拉格方程是X-射线衍射分析中最重要的基础公式，可归结为两方面的应用：

(1) 已知 λ ，测 θ 角，计算 d （X-射线衍射学）；

(2) 已知 d 的晶体，测 θ 角，得到特征辐射波长 λ ，确定元素，X-射线荧光分析的基础（X-射线光谱学）。

衍射强度

X-射线通过晶体材料后衍射线的强度，主要与晶体结构（包括晶胞中原子的种类、数目及排列方式）、晶体的完整性及参与晶体的体积有关。根据衍射线束强度的测量和分析，可以得到与晶体结构及点阵畸变，多相混合物中各物质的相对含量等有关的信息。

XRD的研究方法

- 劳厄法 (λ 变, θ 不变)

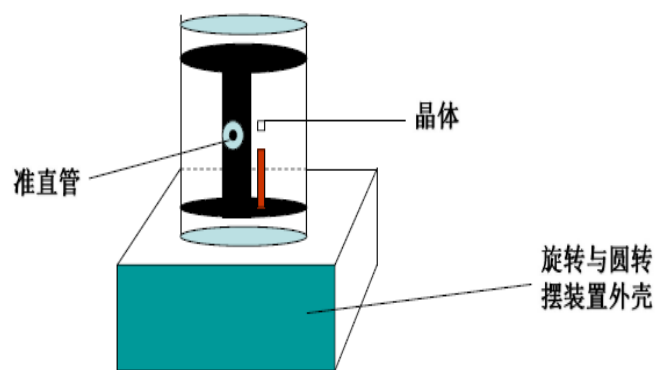
利用连续的X-射线照射固定的单晶体, 产生衍射的方法, 应用最早, 实验装置简单。

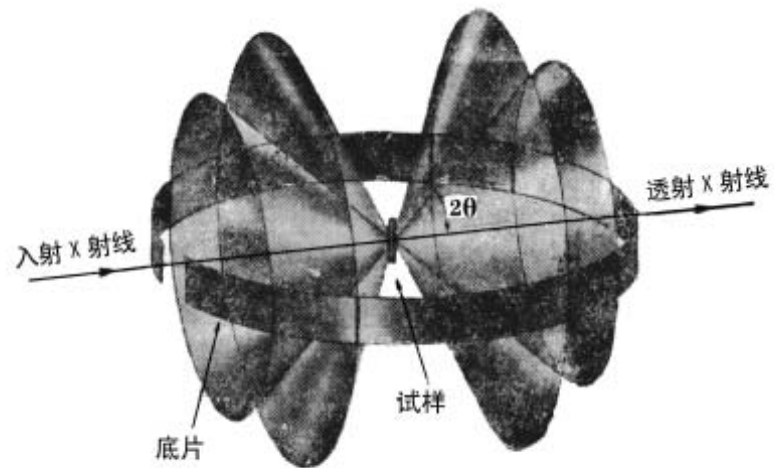
主要用来测晶体的取向, 晶体的对称性, 鉴定晶体是否为单晶及粗略观察晶体的完整性。

- 粉末照相法（粉末法或粉晶法）（ λ 不变， θ 变）

粉末照相法是将一束近平行的单色X-射线投射到多晶样品上，用照相底片记录衍射线的位置、强度和线型。照相法的实验装置为粉末照相机(德拜照相机)，又称德拜-谢勒法（**Dybye-P. Scherrer**）。

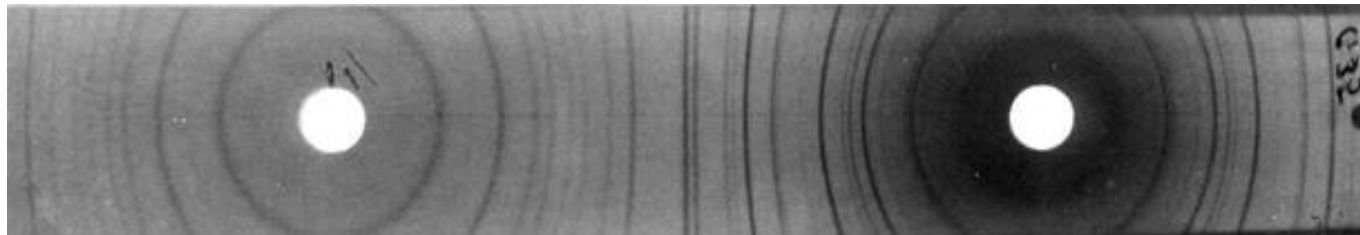
- 转动晶体法（转晶法）（ λ 不变， θ 部分变化）
- 利用单色X-射线照射转动单晶体的衍射方法，测量时把晶体的某一晶轴方向调节为与圆筒的轴一致，以便解释衍射花样。主要用来测定单晶体的晶胞常数；观察晶体的系统消光规律，以确定晶体的空间群。





特点：所需样品少，所有从试样发出的衍射线，几乎全部记录在同一张底片上，便于保存。

其它照相法：针孔法、聚焦法
(晶体单色器和聚焦相机)

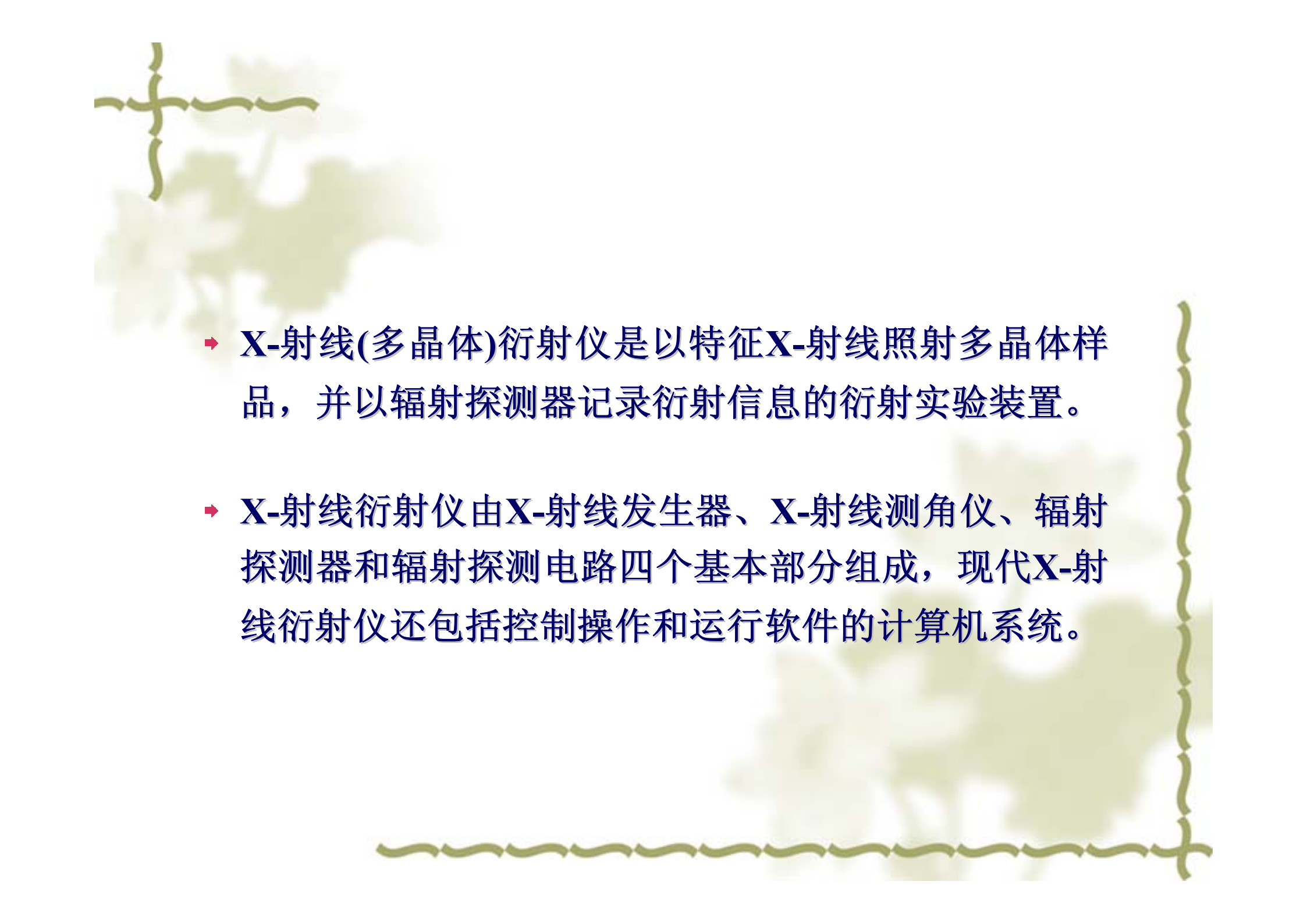


德拜照相法

- 衍射仪法（ λ 不变， θ 变化）

常用粉末衍射仪的结构与德拜相机相类似，只是用一个绕轴转动的探测器代替照相底片；其核心部件为测角仪。

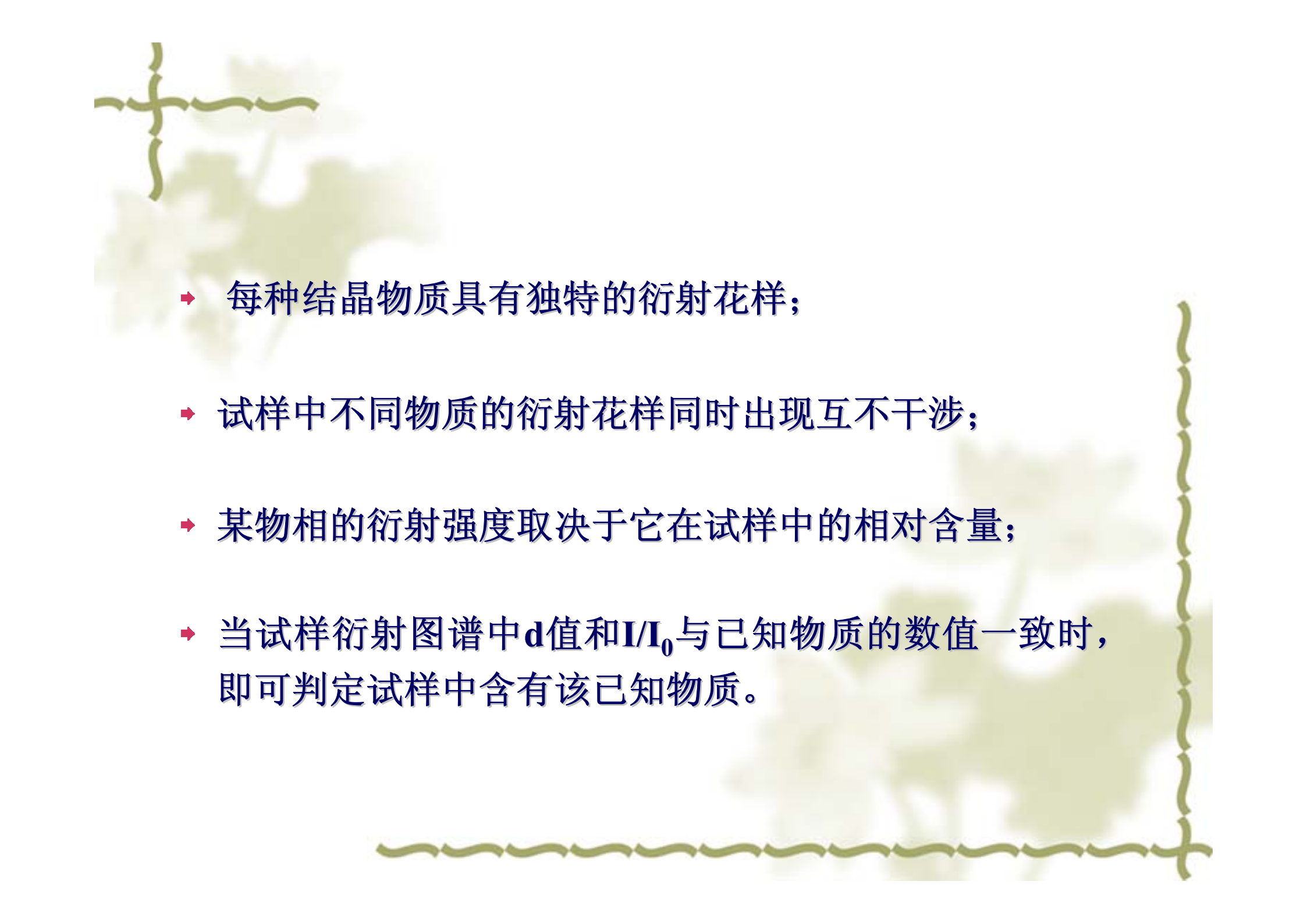
布拉格父子设计的X-射线衍射装置是衍射仪的早期雏形，目前衍射仪已经是广泛使用的X-射线衍射装置。

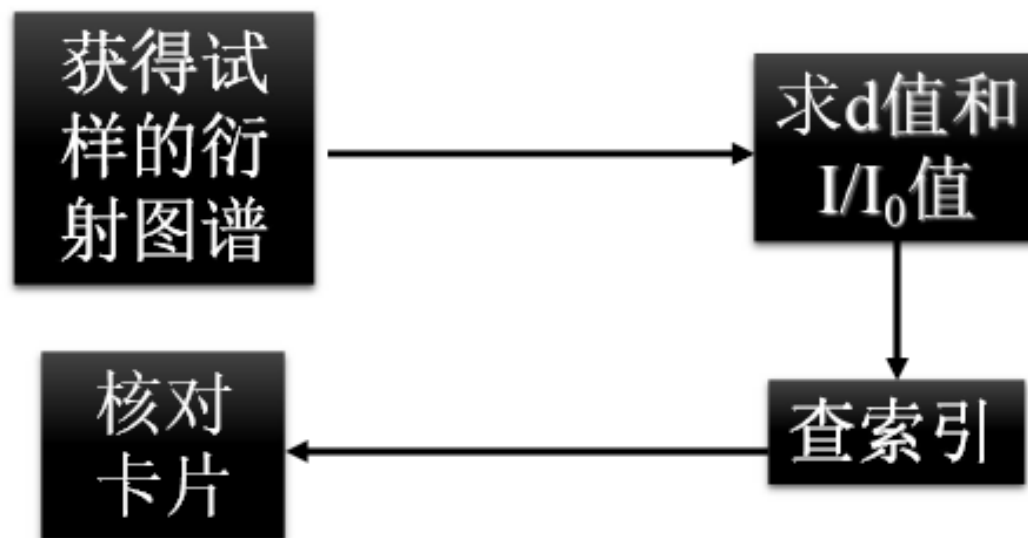
- 
- ➔ **X-射线(多晶体)衍射仪**是以特征**X-射线**照射多晶体样品，并以辐射探测器记录衍射信息的衍射实验装置。
 - ➔ **X-射线衍射仪**由**X-射线发生器**、**X-射线测角仪**、辐射探测器和辐射探测电路四个基本部分组成，现代**X-射线衍射仪**还包括控制操作和运行软件的计算机系统。

X-射线衍射技术的应用

● X-射线物相分析

材料中一种结晶物质称为一个相。利用X-射线衍射的方法确定材料中包括哪几种结晶物质或某种物质以何种结晶状态存在，就是物相分析。

- 
- ➔ 每种结晶物质具有独特的衍射花样；
 - ➔ 试样中不同物质的衍射花样同时出现互不干涉；
 - ➔ 某物相的衍射强度取决于它在试样中的相对含量；
 - ➔ 当试样衍射图谱中 d 值和 I/I_0 与已知物质的数值一致时，即可判定试样中含有该已知物质。



字母索引 (Alphabetical Index)
哈那瓦特法 (Hanawalt method)
芬克索引 (Fink method)

索引

→ **Alphabetical Index:** 该索引是按物相英文名称的字母顺序排列。在每种物相名称的后面，列出化学分子式，三根最强线的d值和相对强度数据，以及该物相的粉末衍射PDF卡号。如果已知物相的名称或化学式，能利用此索引方便地查到该物相的PDF卡号。

→ **Hanawalt Index:** 该索引是按强衍射线的 d 值排列。选择物相八条强线，用最**强**三条线 d 值进行组合排列，同时列出其余五强线 d 值，相对强度、化学式和PDF卡号。


整个索引将 d 值按大小划分为51组，每一组的 d 值范围均列在索引中。在每一组中，其 d 值排列方法是：第1个 d 值按大小排列后，再按大小排列第2个 d 值，最后按大小排列第3个 d 值。

→ **Fink Index:** 当被测物质含有多种物相时，由于各物相的衍射线会产生重叠，强度数据不可靠。此外，由于试样对X-射线的吸收及晶粒的择优取向，导致衍射线强度改变，从而采用字母索引和哈那瓦尔特索引检索卡片会比较困难。为克服这些困难，芬克索引以八根最强线的 d 值为分析依据，将强度作为次要依据进行排列。

→ 芬克索引中，每一行对应一种物相，按 d 值递减列出该物相的八条最强线 d 值、英文名称，PDF卡片号及微缩胶片号，假若某物相的衍射线少于八根，则以0.00补足八个 d 值。

卡片

- 1938年，哈那瓦特（**J.D.Hanawalt**）收集和摄取已知物质的衍射花样，将其衍射数据进行科学整理和分类。
- 1942年，美国材料试验协会（**The American Society for Testing Materials → ASTM**）整理出版了最早的一套晶体物质衍射数据标准卡，共**1300**张卡片，称为**ASTM卡**。

- 
- 1969年，组建“粉末衍射标准联合委员会”（**The Joint Committee on Powder Diffraction Standards, JCPDS**），专门负责收集、校订各种物质的衍射数据，并将这些数据统一分类和编号，编制成卡片出版。这些卡片被称为**PDF卡**（**The Powder Diffraction File**），有时也称其为**JCPDS卡片**。为便于查找，还出版了集中检索手册。

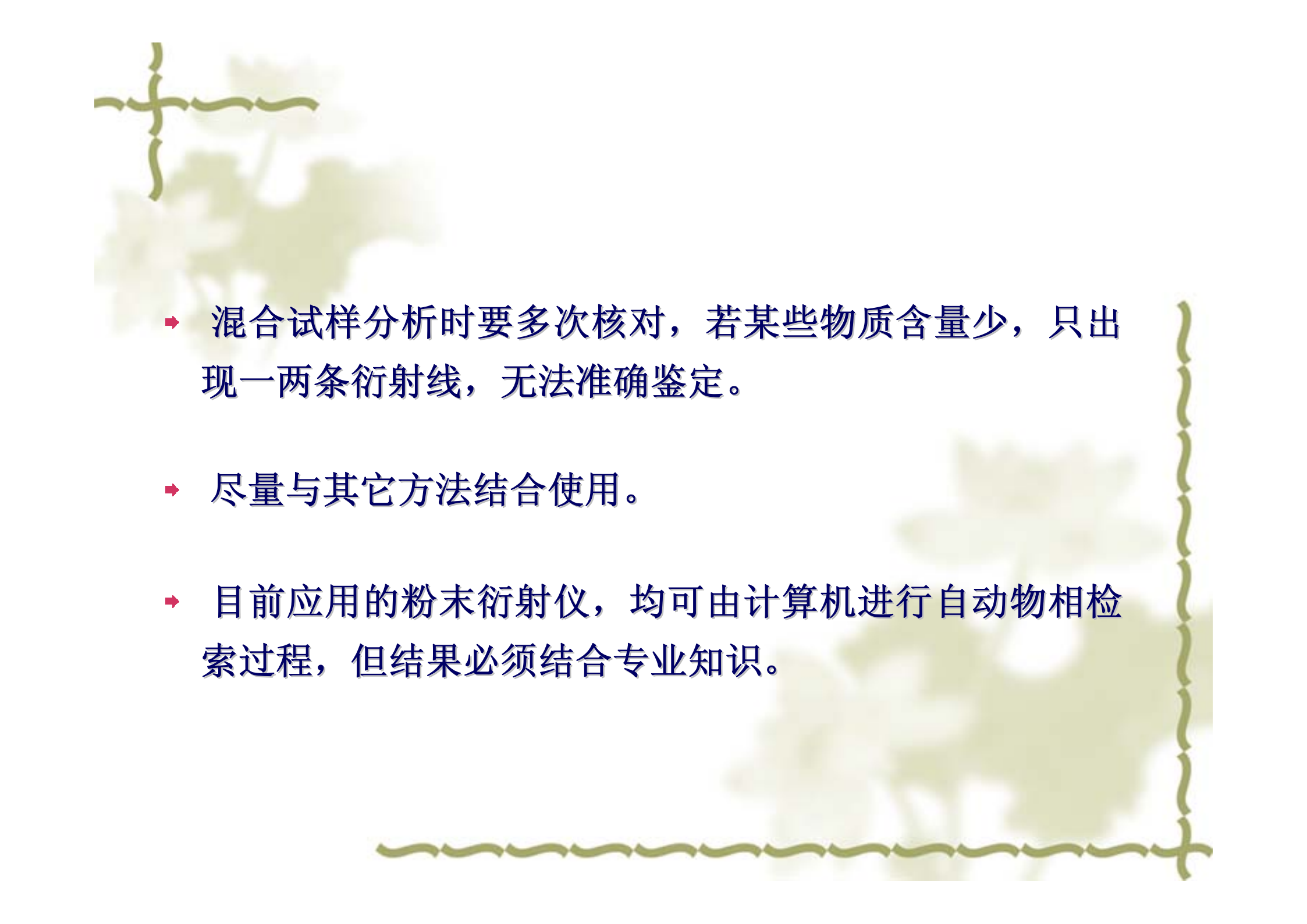
小结

基于X-射线衍射结果，可以很快做出如下判断：

- 晶态还是非晶态，非晶态衍射是漫散的“晕环”，晶态为有确定 d 值的锐衍射峰。
- 一般有机材料晶胞比较大，衍射线多在低衍射角区出现，由于晶体对称性比较低，衍射线条较少。
- 高聚物材料一般是晶态和非晶态共存，有非晶漫散射，也有锐衍射峰；也可以是某种程度的有序。

数据分析注意事项

- **d**值的数据比相对强度的数据重要，**d**值一般要到小数点后第二位才允许有误差。
- 低角度区域的数据比高角度区域的数据重要。
- 了解试样的来源、化学成分和物理特性对作出正确结论十分有帮助。

- 
- 混合试样分析时要多次核对，若某些物质含量少，只出现一两条衍射线，无法准确鉴定。
 - 尽量与其它方法结合使用。
 - 目前应用的粉末衍射仪，均可由计算机进行自动物相检索过程，但结果必须结合专业知识。



● 定量分析

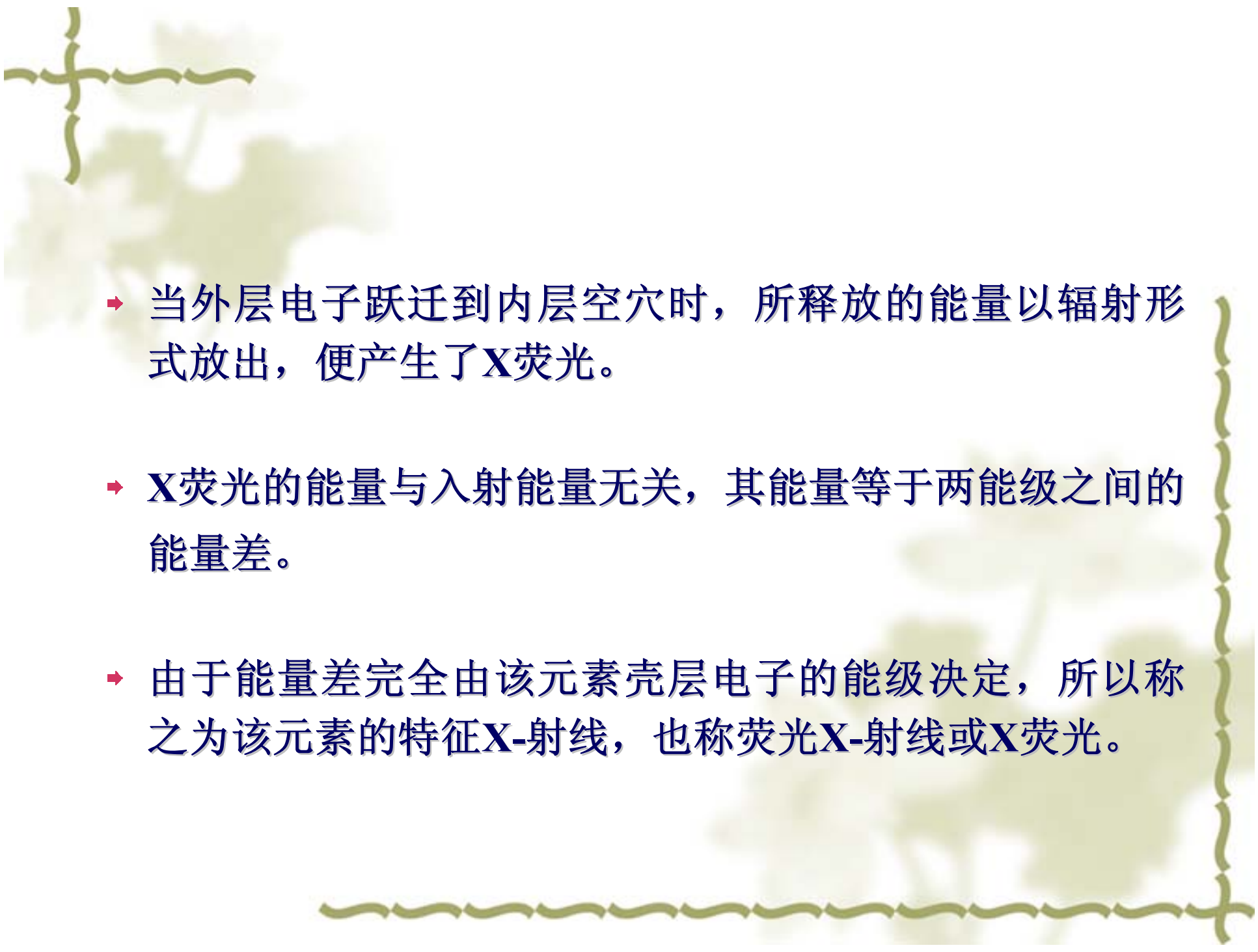
根据混合相试样中各相物质的衍射线强度确定各物质的相对含量，其理论基础是物质的衍射强度与该物质参与衍射的体积成正比。

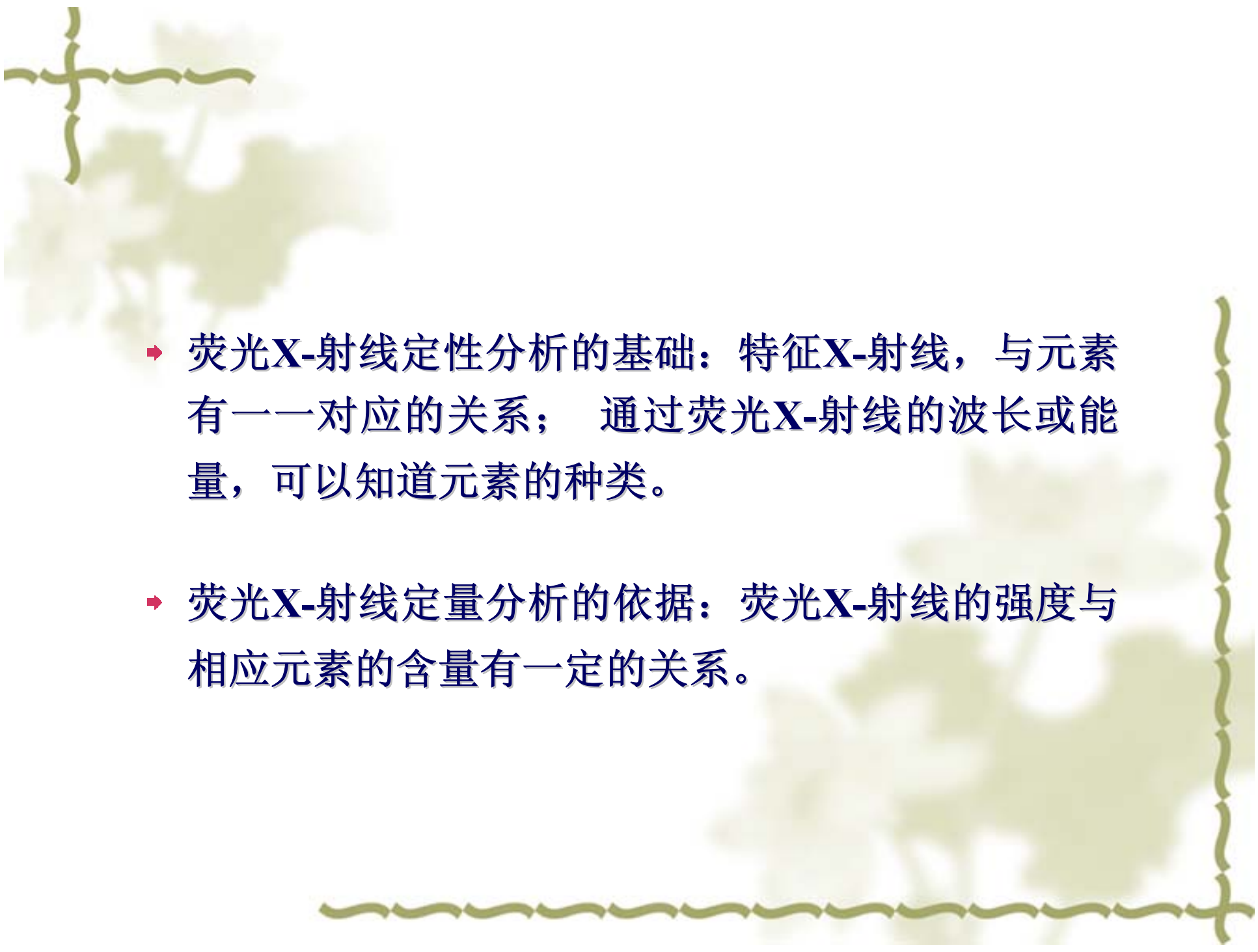
X-射线衍射理论所要解决的中心问题：在衍射现象与晶体结构之间建立起定性和定量的关系。

X-射线荧光光谱(XRF)

X-射线荧光光谱分析的基础

- 一束高能粒子与原子相互作用时，若其能量大于或等于原子某一轨道的电子结合能，将逐出该轨道的电子，形成一个空穴，使原子处于激发态。K层电子被击出称为K激发态，L层电子被击出为L激发态。
- 激发态不稳定，外层电子向空穴跃迁使原子恢复到平衡态。当空穴产生在K层，不同外层电子（L、M、N等）向空穴跃迁时释放的能量各不相同，产生K系标识X-射线。

- 
- 当外层电子跃迁到内层空穴时，所释放的能量以辐射形式放出，便产生了X荧光。
 - X荧光的能量与入射能量无关，其能量等于两能级之间的能量差。
 - 由于能量差完全由该元素壳层电子的能级决定，所以称之为该元素的特征X-射线，也称荧光X-射线或X荧光。

- 
- 荧光X-射线定性分析的基础：特征X-射线，与元素有一一对应的关系；通过荧光X-射线的波长或能量，可以知道元素的种类。
 - 荧光X-射线定量分析的依据：荧光X-射线的强度与相应元素的含量有一定的关系。

利用x射线荧光进行元素定性、定量分析工作，需要以下三方面基础知识。

莫塞莱定律

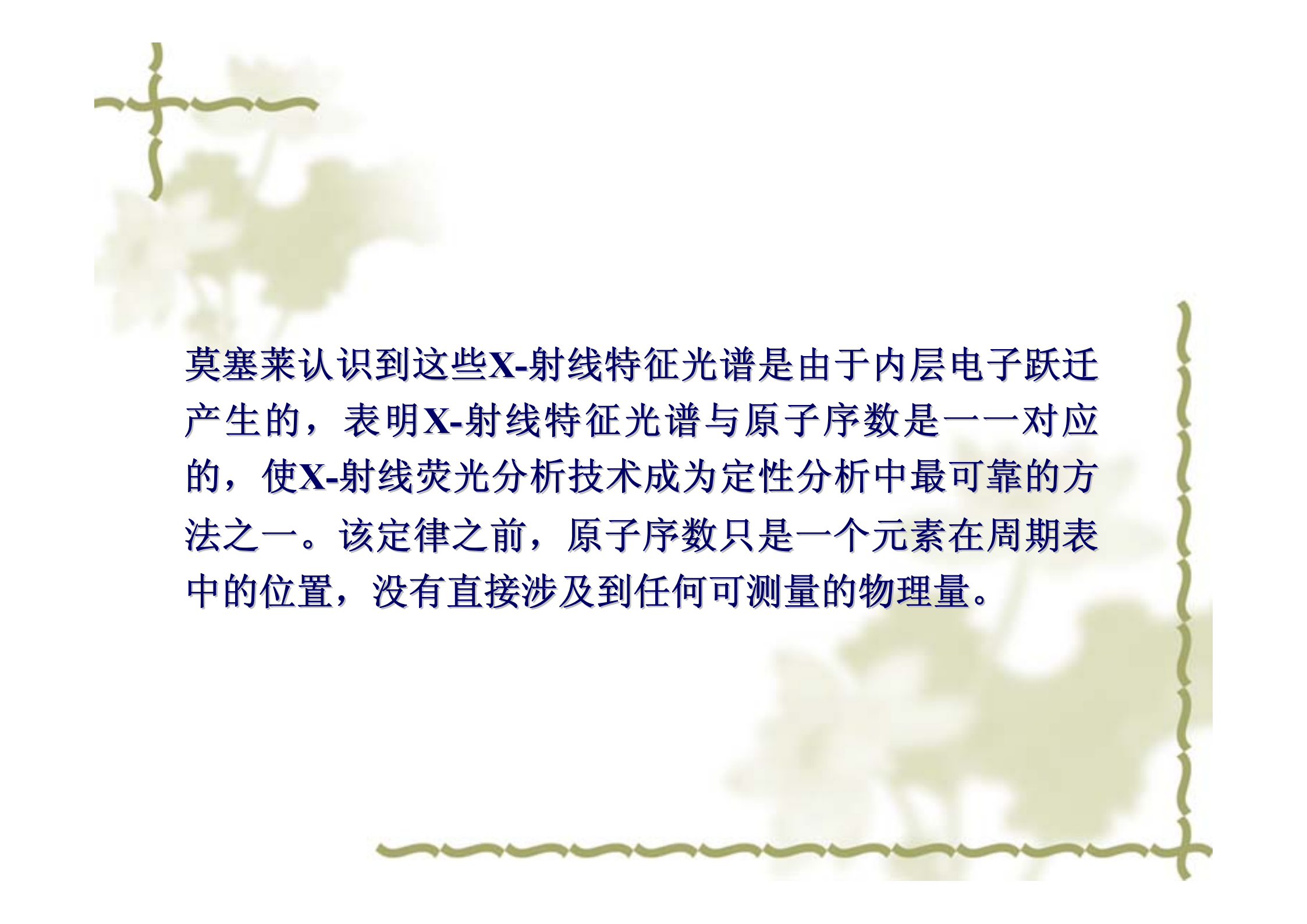
布拉格定律

朗伯比尔定律

● 莫塞莱定律(Moseley'Law)

谱线频率的平方根与元素在周期表中排列的序号呈线性关系。

1913年H. G. J. 莫塞莱研究从铝到金的38种元素的X-射线特征光谱的K和L线，得出的反映各元素X-射线特征光谱规律的实验定律。



莫塞莱认识到这些X-射线特征光谱是由于内层电子跃迁产生的，表明X-射线特征光谱与原子序数是一一对应的，使X-射线荧光分析技术成为定性分析中最可靠的方法之一。该定律之前，原子序数只是一个元素在周期表中的位置，没有直接涉及到任何可测量的物理量。

• 布拉格定律 (Bragg)

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

该定律是波长色散型X-射线荧光仪的分光原理，使不同元素不同波长的特征X荧光完全分开，使谱线处理工作变得简单。

● 朗伯-比尔定律

当X-射线穿过物质时，由于物质产生光电效应，康普顿效应及热效应等，X-射线强度会衰减，这个过程称为吸收。朗伯-比尔定律反应了样品的吸收状况，涉及到理论X-射线荧光相对强度的计算问题。

X-射线荧光光谱仪

X-射线照射试样时，试样被激发出各种波长的荧光X-射线，需要把混合的X-射线按波长（或能量）分开，分别测量不同波长（或能量）X-射线的强度，以进行定性和定量分析，使用的仪器叫X-射线荧光光谱仪。

两种基本类型：波长色散型和能量色散型。

波长色散型X-射线荧光光谱分析仪

- X-射线管;
- 分光系统: 晶体分光器, 通过晶体衍射现象把不同波长的X-射线分开;
- 检测记录系统。

能量色散型X-射线荧光光谱分析仪

利用荧光X-射线具有不同能量的特点，将其分开，不使用分光晶体，依靠半导体探测器完成。

特点

- 同时测定样品中几乎所有的元素；
- 分析速度快；
- 没有光谱仪复杂的机械结构、工作稳定，仪器体积小；
- 缺点是能量分辨率差，探测器须在低温下保存；对轻元素检测困难。

X-射线荧光光谱的定性与定量分析

测试样品的要求

- 固态样品：表面不平的样品要打磨抛光；粉末样品研磨至200~400目；压成圆片后测定，也可放入样品槽中测定。
- 液态样品：可滴在滤纸上，蒸干水份后测定，也可密封在样品槽中测定。

- 
- 注意成份偏析产生的误差。

合金中各组成元素在结晶时分布不均匀的现象称为偏析。

- 所测样品不能含有水、油和挥发性成分，更不能含有腐蚀性溶剂。

定性分析

- 根据荧光X-射线的波长或能量可以确定元素的组成。
- 如元素含量过低或存在元素间的谱线干扰时，需人工鉴别。
- 在分析未知谱线时，要考虑到样品的来源，性质等因素。
- 不同行业所采用的软件不同，分析元素种类不同。

定量分析

- 定量分析的依据是元素的荧光X-射线强度 I_i 与试样中该元素的含量 W_i 成正比。
- 采用标准曲线法、增量法、内标法等进行定量分析，借助于计算机进行分析。

X-射线荧光分析的特点

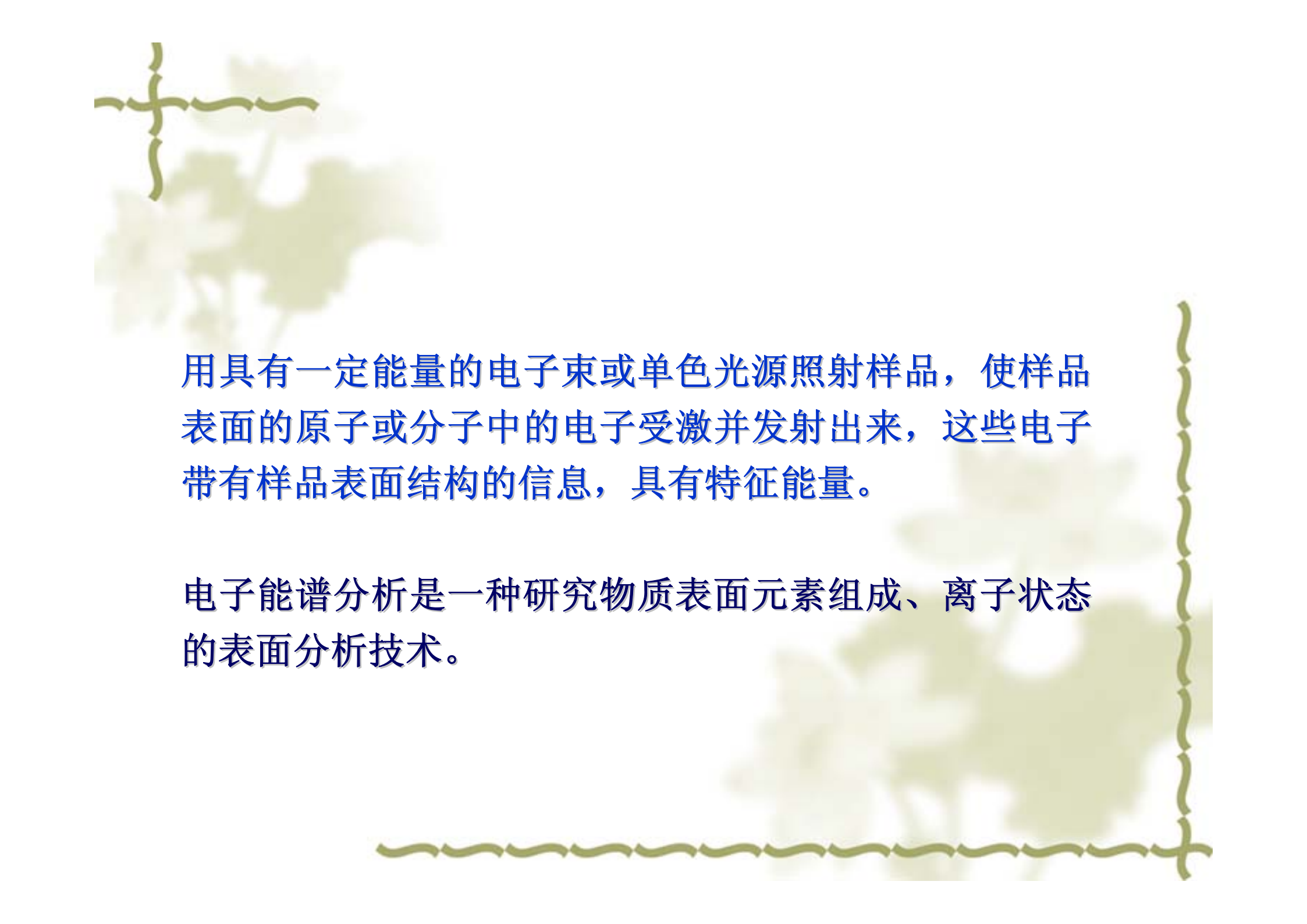
- 分析元素范围广，从 ${}^4\text{Be}$ 到 ${}^{92}\text{U}$ 均可测定；
- 谱线简单，相互干扰少，样品不必分离；
- 分析浓度范围较宽，从常量到微量都可分析；
- 分析样品不被破坏，分析快速，准确，便于自动化。

X-射线光电子能谱(XPS)

X-射线光电子能谱法 (X-ray Photoelectron Spectroscopy)，最初以化学领域应用为主要目标，又称为**化学分析电子能谱 Electron Spectroscopy for Chemical Analysis (ESCA)**。

第一本论著：1967年 K. Siegbahn等著。

商品化仪器：七十年代中期，是一门比较新的谱学。



用具有一定能量的电子束或单色光源照射样品，使样品表面的原子或分子中的电子受激并发射出来，这些电子带有样品表面结构的信息，具有特征能量。

电子能谱分析是一种研究物质表面元素组成、离子状态的表面分析技术。

主要优点:

- 用量小，不需前处理，避免引入或丢失元素造成的误差。
- 表面灵敏度高，一般信息深度<10 nm。
- 可给出原子序数3-92的元素信息，且可多元素同时测定。
- 可以给出元素化学态信息，分析元素的化学态或官能团。
- 样品不受导体、半导体、绝缘体的限制。
- 非破坏性分析方法，结合离子溅射，可作深度剖析。

基本原理

能量为 $h\nu$ 的X-射线或紫外线照射到样品上，表面原子的内壳层电子会脱离原子核的束缚逸出固体表面，形成光电子，测量其动能 E_k 。基于下式求出原子内壳层电子的结合能 E_b 。

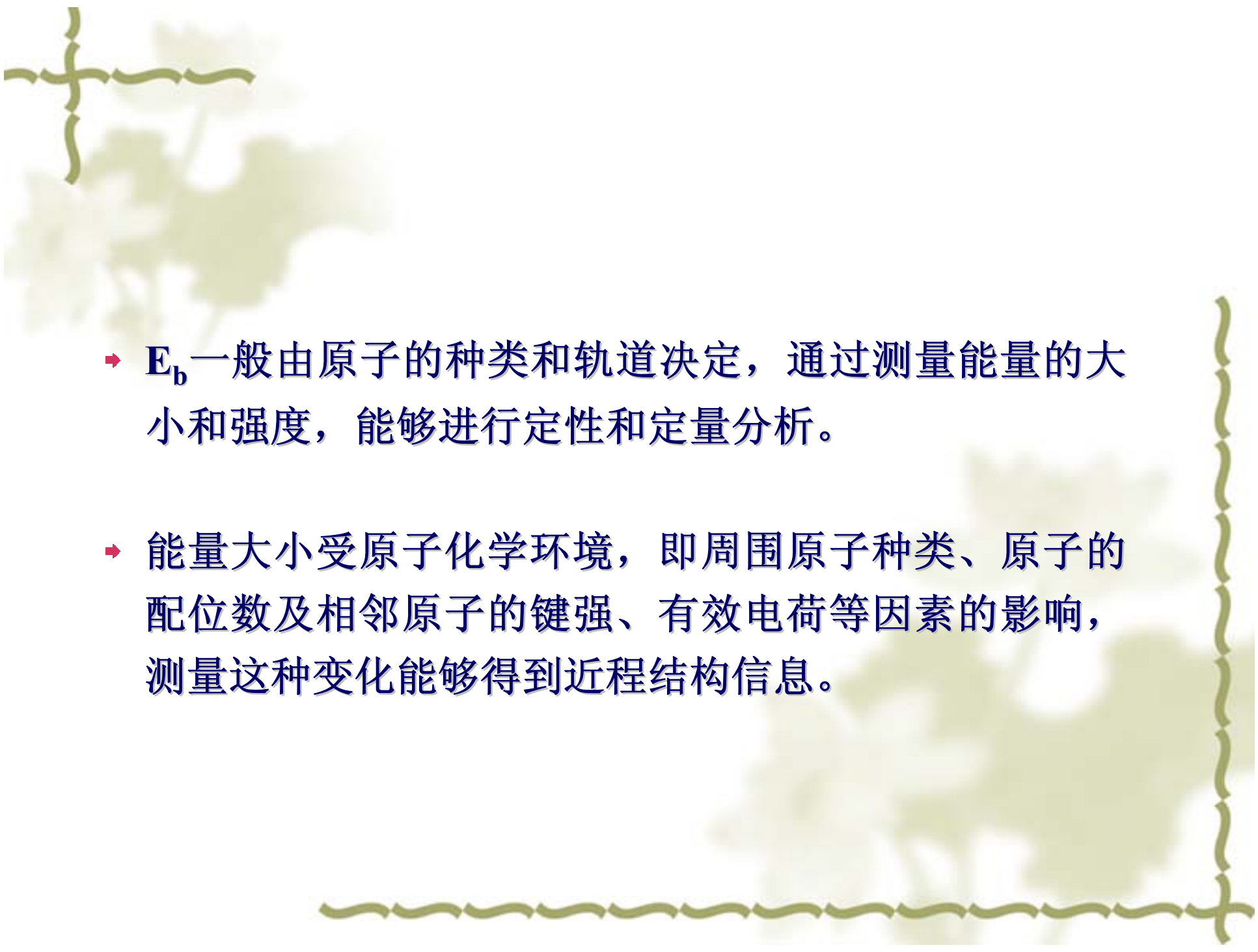
$$E_k = h\nu - E_b - \varphi$$

$h\nu$ —— 入射光子能量（已知值）

E_k —— 光电过程中发射的光电子的动能（测定值）

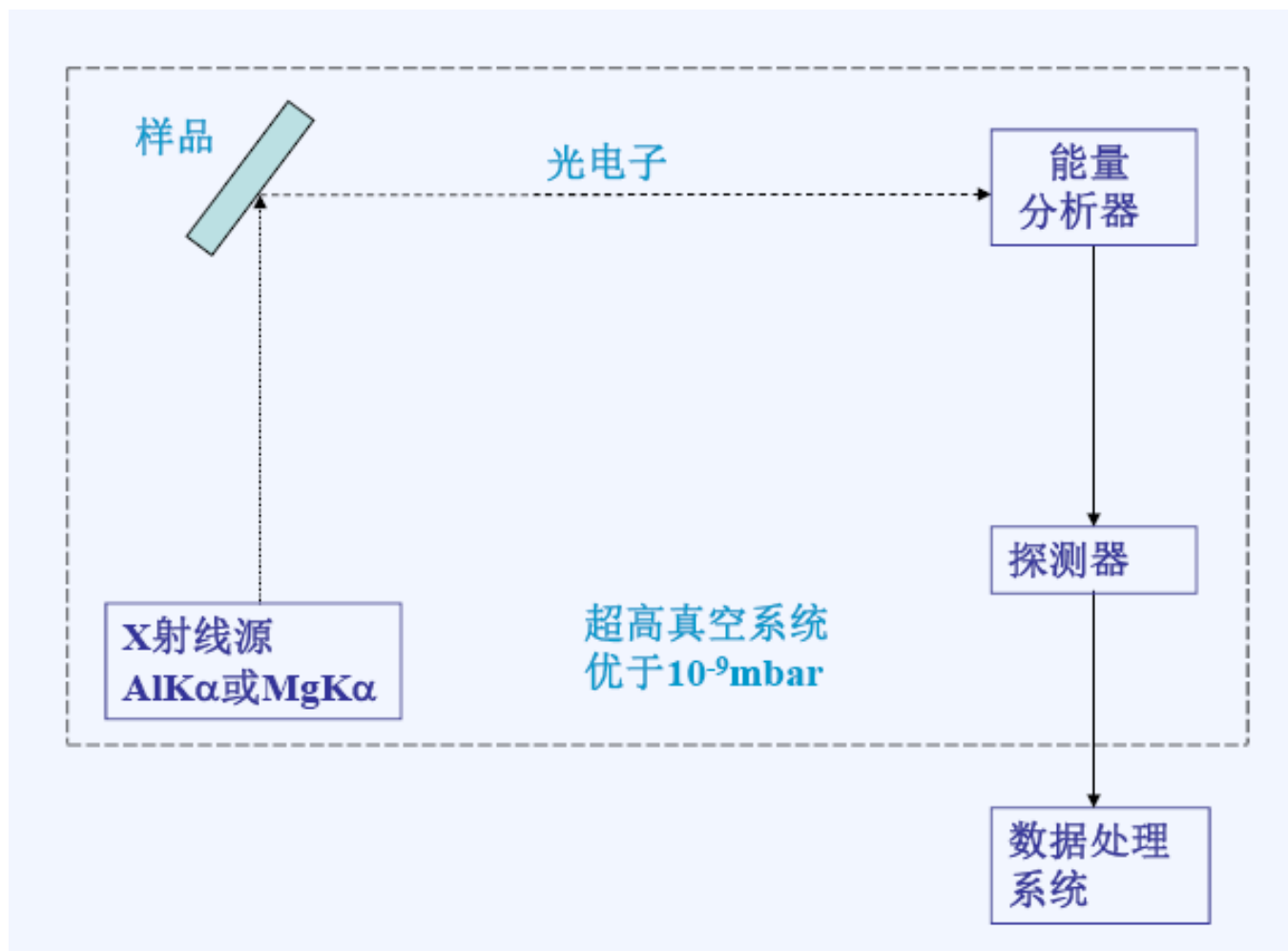
E_b —— 内壳层束缚电子的结合能（计算值）

φ —— 谱仪的功函数（已知值）

- 
- E_b 一般由原子的种类和轨道决定，通过测量能量的大小和强度，能够进行定性和定量分析。
 - 能量大小受原子化学环境，即周围原子种类、原子的配位数及相邻原子的键强、有效电荷等因素的影响，测量这种变化能够得到近程结构信息。

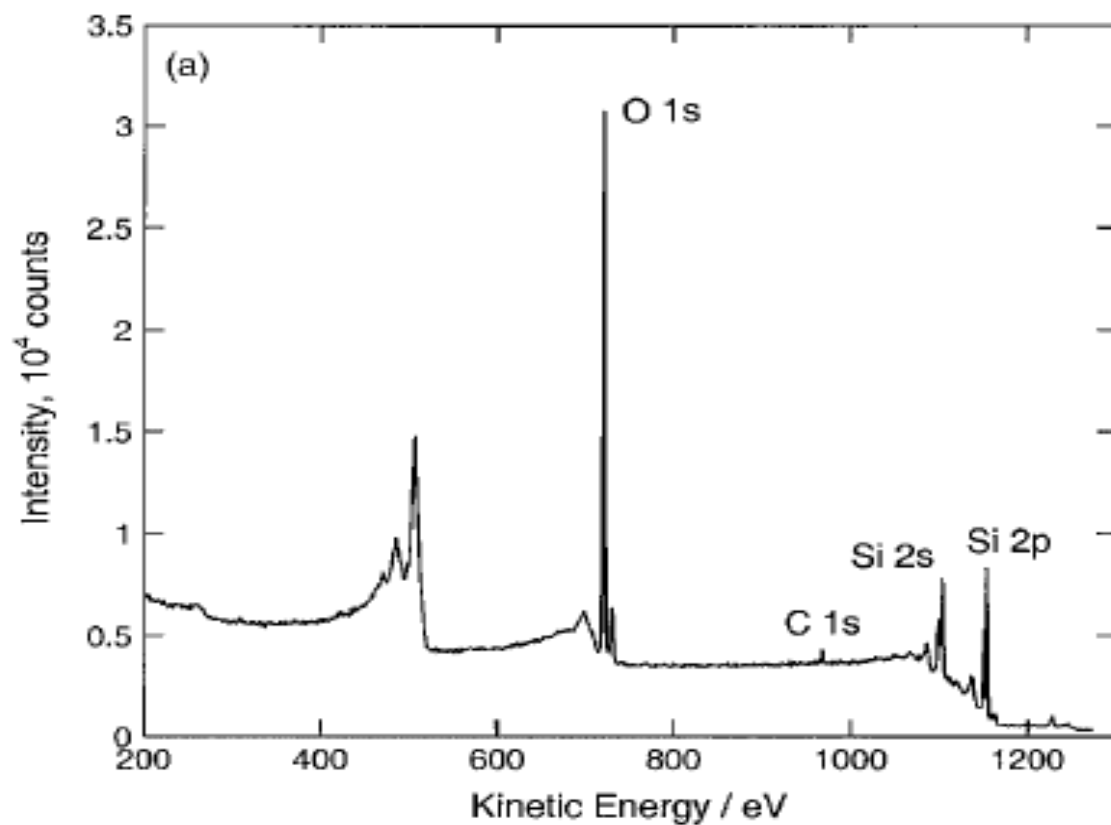
结合能(Binding Energy): 原子能级中电子的结合能, 其值等于把电子从所在的能级转移到Fermi能级所需的能量。

化学位移(Chemical shift): 原子的内壳层电子结合能随原子周围化学环境变化的现象。



X-射线光电子能谱仪的基本构造

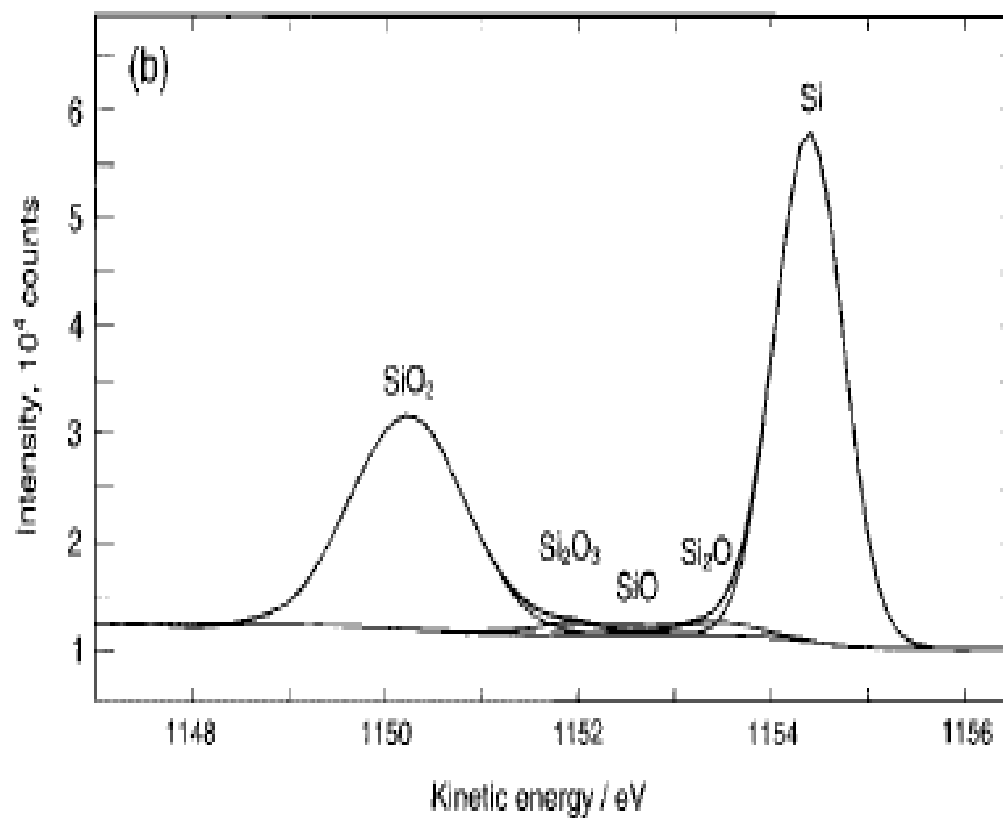
X-射线光电子能谱的应用

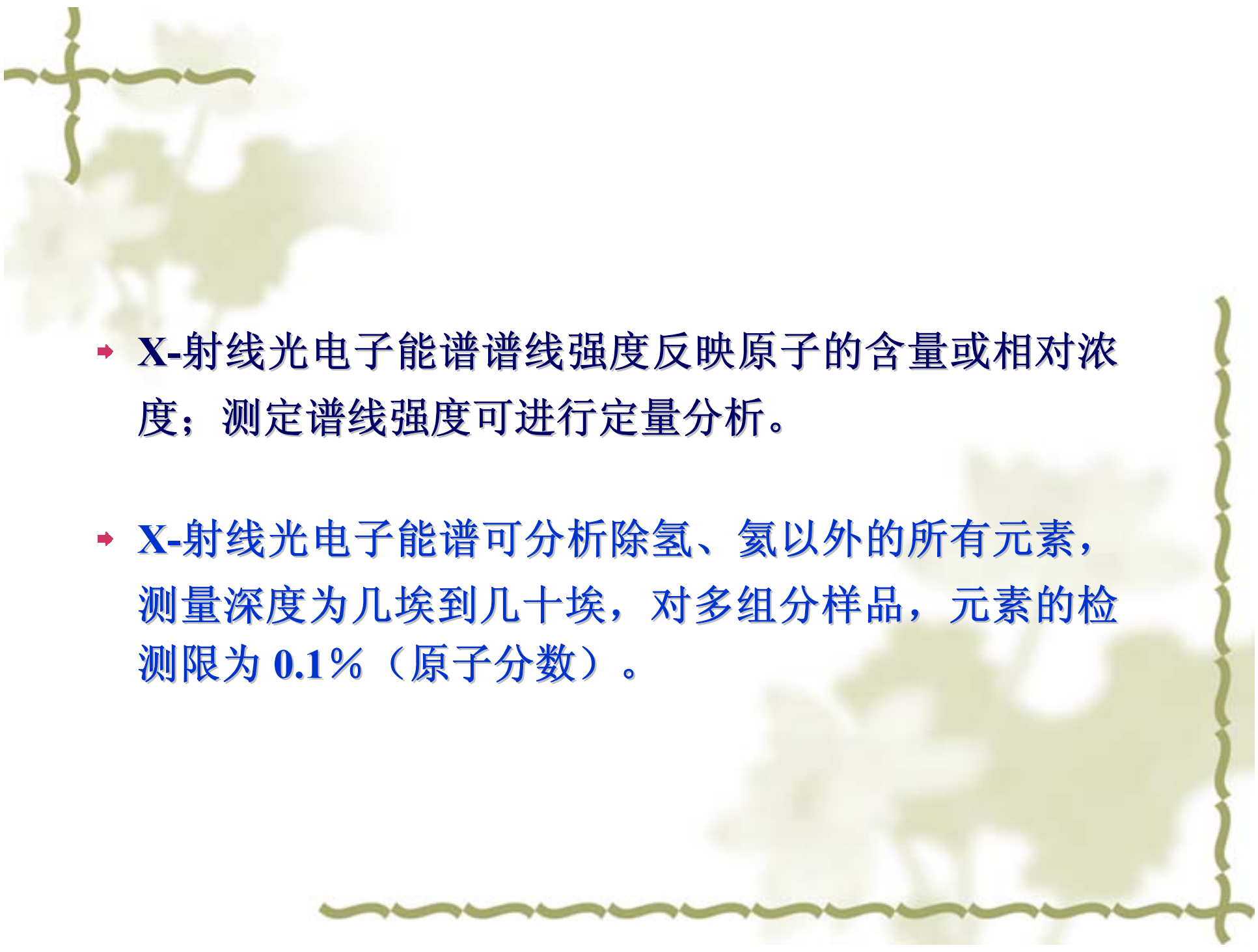


元素定性分析：
根据谱峰的位置
(结合能) 鉴定
元素种类。

元素化学态分析:

同一元素，化学环境不同，谱峰出现化学位移。



- 
- **X-射线光电子能谱谱线强度反映原子的含量或相对浓度；测定谱线强度可进行定量分析。**
 - **X-射线光电子能谱可分析除氢、氦以外的所有元素，测量深度为几埃到几十埃，对多组分样品，元素的检测限为 0.1%（原子分数）。**

光电子能谱分析过程中的相关概念

● 谱峰分裂

能谱峰分裂有**多重态分裂**与**自旋-轨道分裂**等。

如果原子、分子或离子价(壳)层有未成对电子存在，则内层能级电离后会发生能级分裂，导致光电子谱峰分裂，称之为多重分裂。

s壳层不发生自旋分裂 \longrightarrow 谱图上是单峰

p,d,f壳层分裂成两个能级 \longrightarrow 在谱图上出现双峰

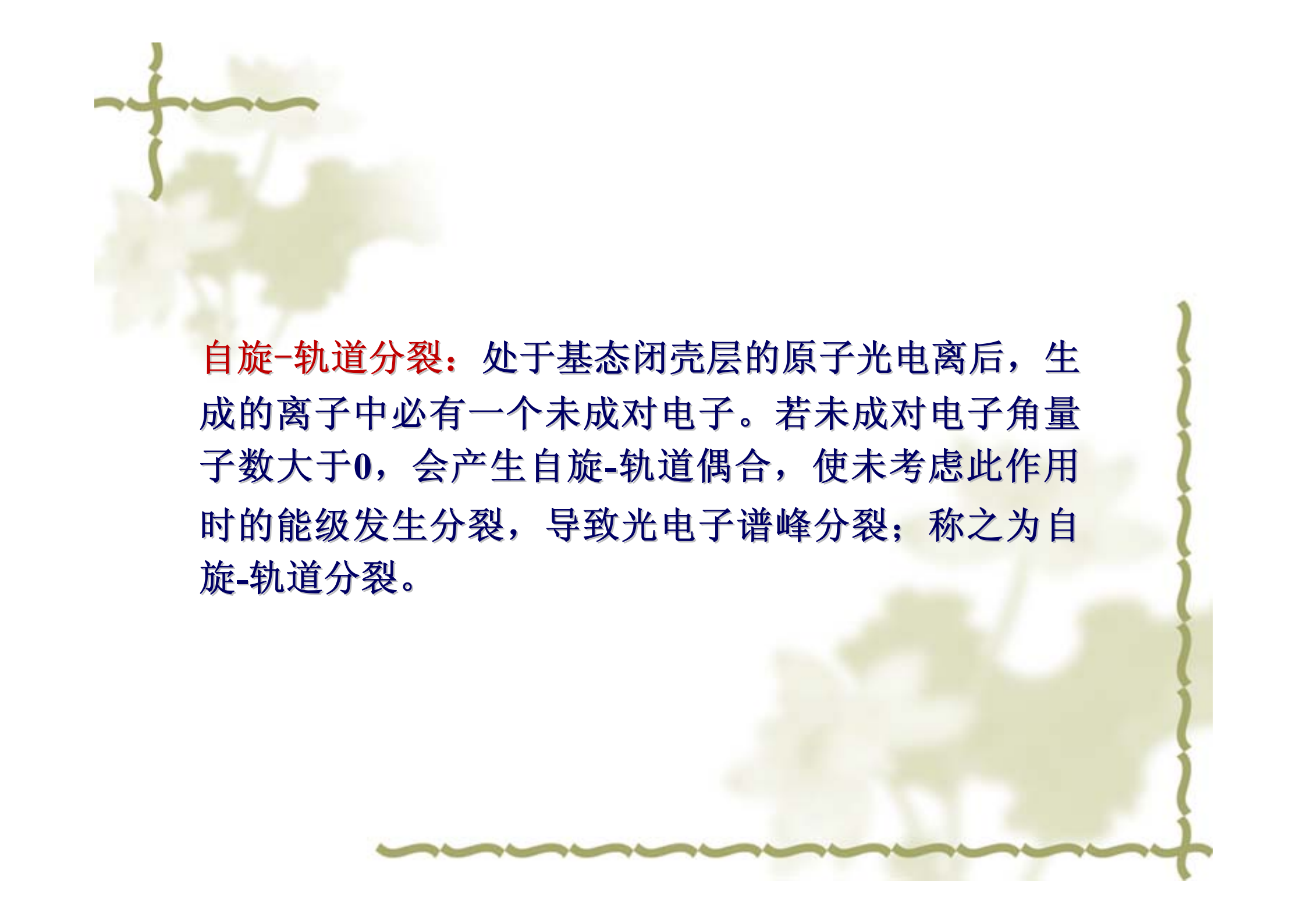


两峰的面积比一般为

$$2p_{1/2} : 2p_{3/2} = 1 : 2$$

$$3d_{3/2} : 3d_{5/2} = 2 : 3$$

$$4f_{5/2} : 4f_{7/2} = 3 : 4$$



自旋-轨道分裂：处于基态闭壳层的原子光电离后，生成的离子中必有一个未成对电子。若未成对电子角量子数大于0，会产生自旋-轨道耦合，使未考虑此作用时的能级发生分裂，导致光电子谱峰分裂；称之为自旋-轨道分裂。

● 伴峰

能谱中出现的非光电子峰称为伴峰。

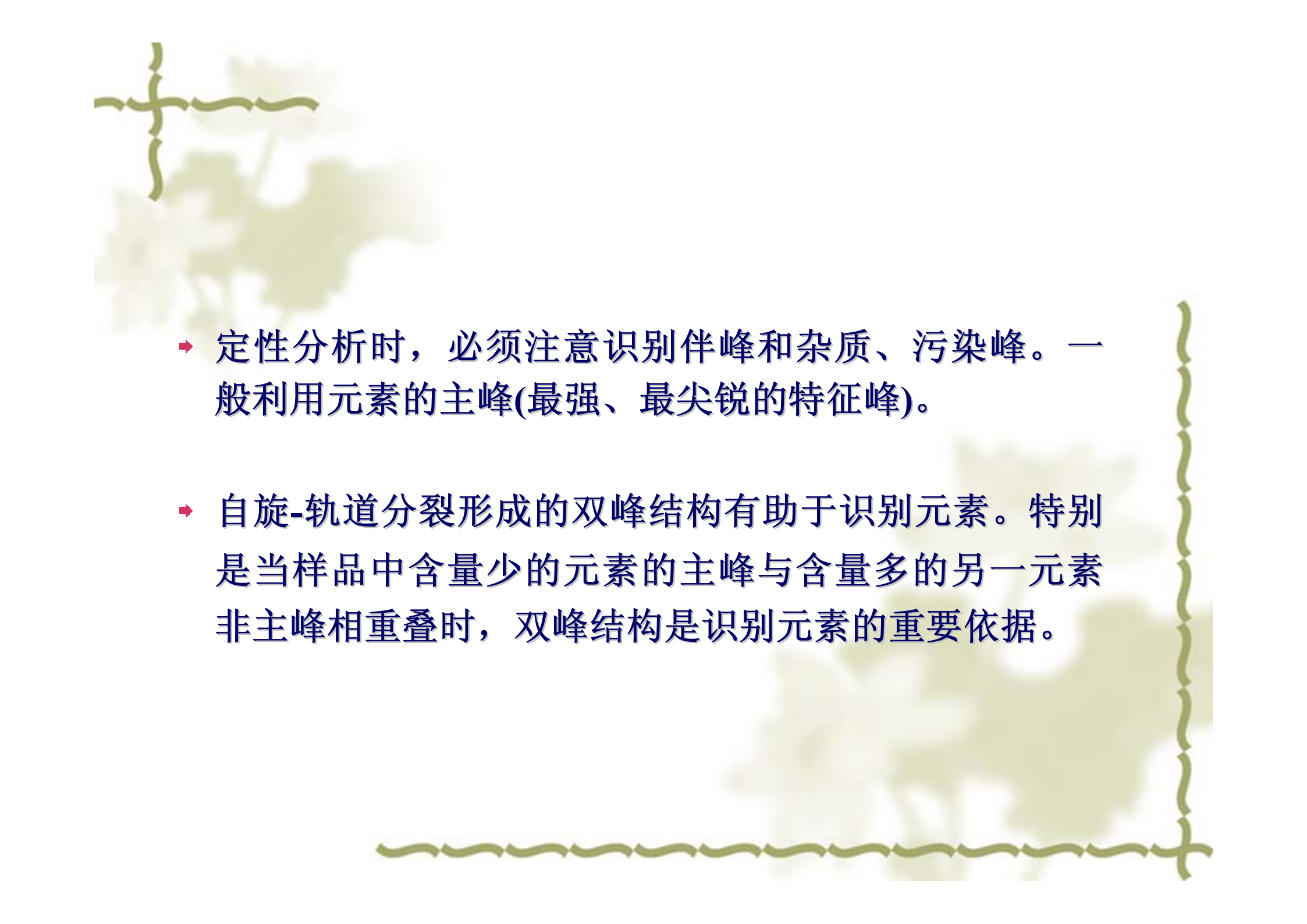
X-射线电离后的激发态离子是不稳定的，可以通过多种途径产生退激发。最常见的退激发过程就是产生俄歇电子跃迁，X-射线激发俄歇谱是光电子谱的必然伴峰。

X-射线光电子能谱分析方法小结

- 定性分析

以实测光电子谱图与标准谱图相对照，根据元素特征峰位置(及其化学位移)确定样品(固态样品表面)中存在哪些元素。常用Perkin-Elmer公司的X-射线光电子谱手册。

定性分析原则上可鉴定除氢、氦以外的所有元素。

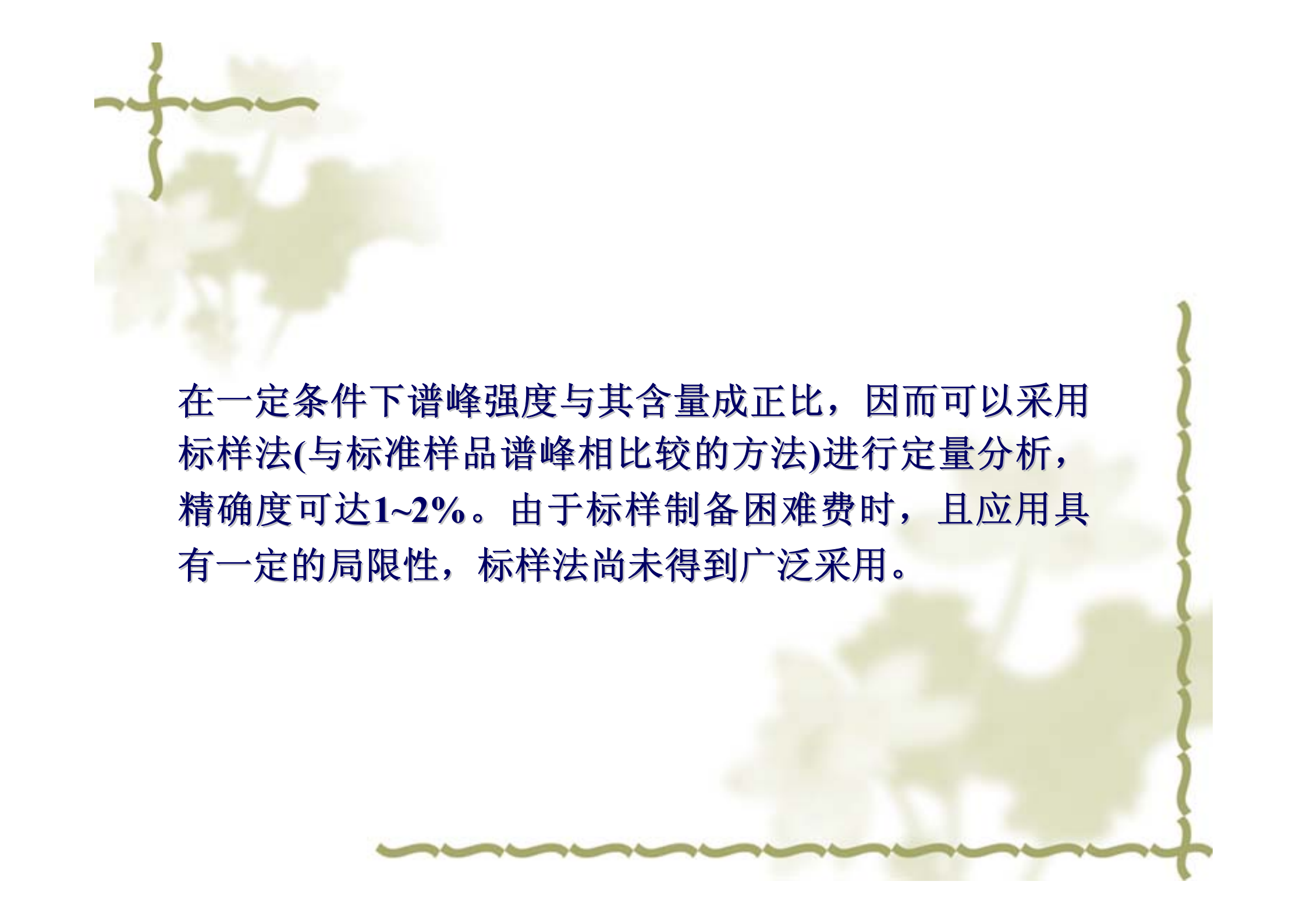
- 
- ➔ 定性分析时，必须注意识别伴峰和杂质、污染峰。一般利用元素的主峰(最强、最尖锐的特征峰)。
 - ➔ 自旋-轨道分裂形成的双峰结构有助于识别元素。特别是当样品中含量少的元素的主峰与含量多的另一元素非主峰相重叠时，双峰结构是识别元素的重要依据。



● 定量分析

理论模型法、灵敏度因子法、标样法等。

应用最广的是灵敏度因子法。定量结果的准确性比俄歇能谱相对灵敏度因子法定量好，一般误差不超过**20%**。



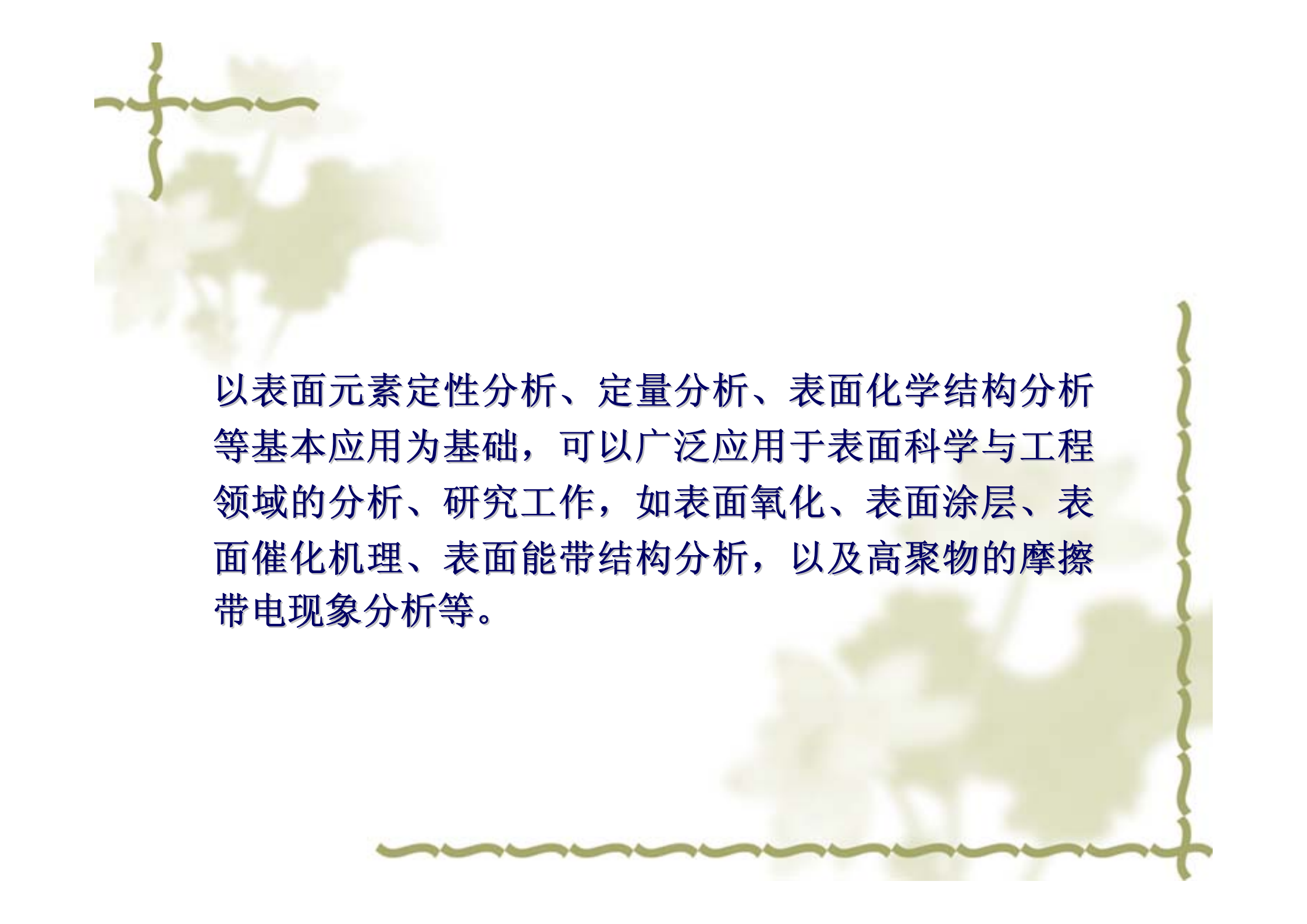
在一定条件下谱峰强度与其含量成正比，因而可以采用标样法(与标准样品谱峰相比较的方法)进行定量分析，精确度可达1~2%。由于标样制备困难费时，且应用具有一定的局限性，标样法尚未得到广泛采用。

● 化学结构分析

通过谱峰化学位移的分析不仅可以确定元素原子存在于何种化合物中，还可以研究样品的化学结构。

● 在固体研究方面的应用

对于固体样品，X-射线光电子平均自由程只有0.5~2.5 nm (对于金属及其氧化物)或4~10 nm (对于有机物和聚合材料)，因而X-射线光电子能谱法是一种表面分析方法。



以表面元素定性分析、定量分析、表面化学结构分析等基本应用为基础，可以广泛应用于表面科学与工程领域的分析、研究工作，如表面氧化、表面涂层、表面催化机理、表面能带结构分析，以及高聚物的摩擦带电现象分析等。