

2013年

1. ① $\text{Te}_{2d_{5/2}}$ 峰: 表示 Te 元素 $2d_{5/2}$ 轨道发射的光电子峰, 表示该样品中含有 Te 元素。

② Te(MVV) 峰: 表示 Te 元素 MVV 系列俄歇电子峰。

2. ① X 射线源是 $\text{Mg}_{K\alpha}$ 射线

② 谱图中出现了 Te_{2d} 峰, Cd_{2d} 峰, Ag_{2d} 峰, Hg_{4f} 峰, 说明样品中含有 Te, Cd, Ag, Hg 四种元素, 其中 Te_{2d} 峰强度最高, 说明样品表面 Te 元素浓度最大。

③ 从右上角的扩展谱中可以看出 Te_{2d} 和 Te 峰出现峰位位移 (左移, 结合能增大), 说明 Te 样品在制备过程中发生氧化。

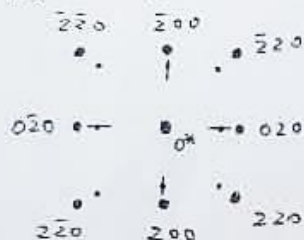
④ 谱图中存在 C_{1s} 峰, 说明样品可能被 CO_2 等污染。

3. ① 用 TEM 判断是否存在非晶态, 若样品的电子衍射花样存在漫散的衍射圆环, 则说明样品中存在非晶态。

② 利用 XRD 分析晶粒尺寸, $\beta = k\lambda / D \cos \theta$, D : 垂直于反射晶面 (hkl) 的晶粒平均厚度。

4. (a) 图中显示的是位错衬度明显 (b) 图中位错像消失。

$\alpha = 2\pi \vec{g} \cdot \vec{R}$, 当 $\alpha = 0$ 时位错衬度像消失, 即当 $\vec{g} \perp \vec{R}$ 时, 位错不能成像, 出现图 (b) 中的现象。



① 样品表面S: 发生氧化, 氧化层厚度可根据 $\lambda = \lambda_m \cos \theta$ 判断。

$$F = \sum_{j=1}^4 f_j \exp 2\pi i (h x_j + k y_j + l z_j) \quad (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$$

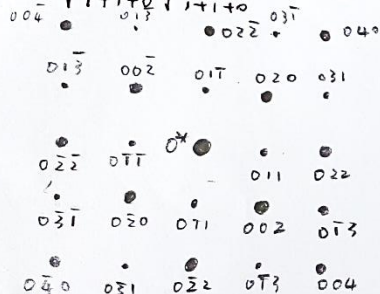
$$= f_{A1} + \int_{\omega_1} (\exp^{\pi i(h+k)} + \exp^{\pi i(k+l)} + \exp^{\pi i(h+l)})$$

当 h, k, l 同奇同偶时 $F = f_{A1} + 3f_{A2}$
当 h, k, l 奇偶混杂时 $F = f_{A1} - f_{A2}$ } 无消光现象

$(01\bar{1})(011)$ 属于 $[100]$ 晶带轴, 则 $h_{011}^* k_{011}^*$ 必位于 $(100)^*$ 面上.

$$\frac{|r_{011}^*|}{|r_{011}^*|} = \frac{\frac{1}{d_{011}}}{\frac{1}{d_{011}}} = \frac{\sqrt{0+1^2+(-1)^2}}{\sqrt{0+1^2+1^2}} = 1$$

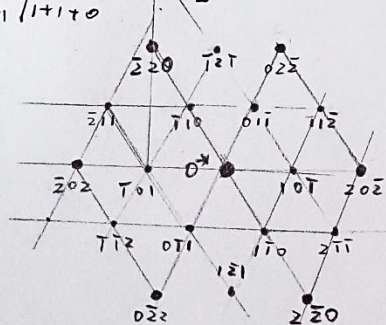
$$\cos \theta = \frac{0 \times 0 + 1 \times 1 + (-1) \times 1}{\sqrt{1+1+0} \sqrt{1+1+0}} = 0 \quad \theta = 90^\circ \text{ 即 } \vec{r_{011}}^* \text{ 与 } \vec{r_{011}} \text{ 夹角为 } 90^\circ$$



② $[111]$ 方向
($\bar{1}01$) ($\bar{1}10$) 属于 $[111]$ 晶带, 则倒易点 h_{101}^* 和 h_{110}^* 必位于倒易面 $(111)^*$ 面上.

$$\frac{|k_{101}^*|}{|k_{110}^*|} = \frac{\frac{1}{d_{101}}}{\frac{1}{d_{110}}} = \frac{\sqrt{1^2 + 0^2 + 1^2}}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}} = 1$$

$$\cos \theta = \frac{\vec{r}_{101} \cdot \vec{r}_{110}}{|\vec{r}_{101}| |\vec{r}_{110}|} = \frac{1}{2} \quad \theta = 60^\circ \quad \text{即 } \vec{r}_{101}^* \text{ 与 } \vec{r}_{110}^* \text{ 夹角为 } 60^\circ$$



3. (1) ①判断是否为非晶体 采用 XRD, TEM 测试方法.

XRD原理:衍射谱上没有或只形成很宽的山峰.

TEM原理: ①高分辨率TEM成像 晶体原子排列有序, 为格子像、条纹像, 非晶体原子无序排列, 不出

③ TEM斑点像, 非晶体为圆环.

② 测试晶化的温度, 采用 DSC/DTA 测试方法

FDSC/DTA原理：发生晶化、该物质的比热容、热膨胀系数等发生突变，反映在DSC/DTA曲线上具有

放热峰

③ 判断晶化程度的方法，采用XRD、TEM

XRD原理：根据晶体和非晶体的衍射强度来测定它们的含量。

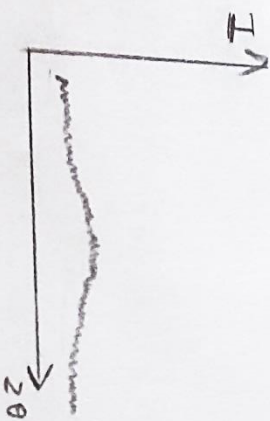
HR-TEM原理：高分辨成像的格纹像来观察晶化程度。

④ 分析晶粒的大小，采用XRD

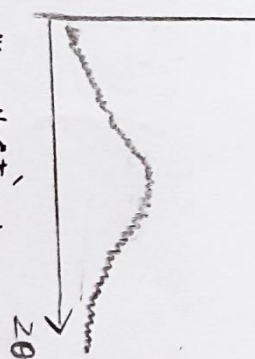
XRD原理：XRD峰宽信息可以估算晶粒的大小。

⑤ 相组成 — XRD 相形系统 — SEM 元素价态 XPS AES SIMS

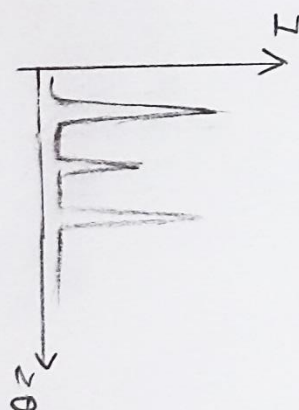
<2> 原始状态



晶化初期



结晶



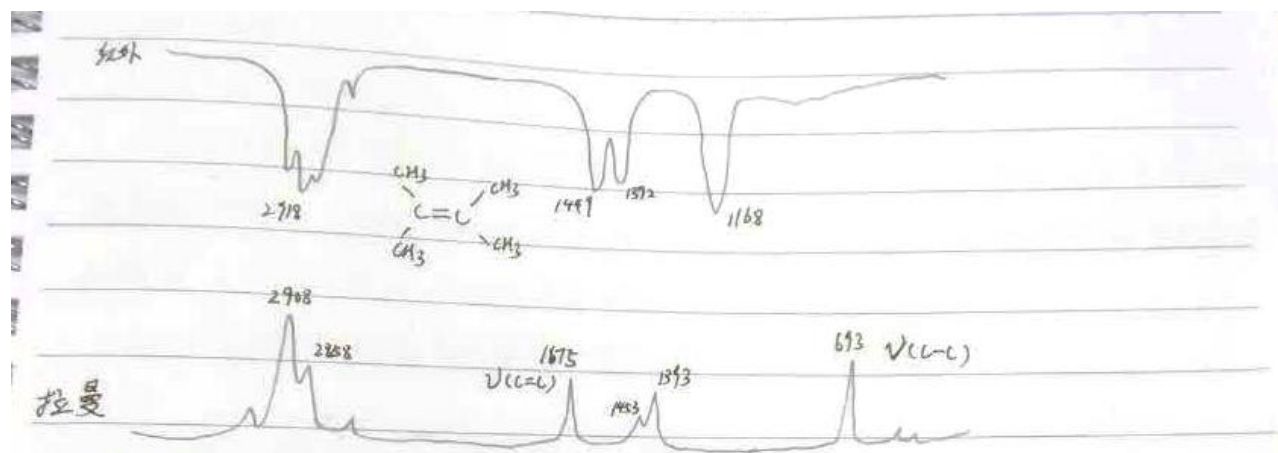
<3> 根据非晶态径向分布函数曲线

可获得①最近邻原子的平均距离

②原子的平均位移

③配位数

④有序尺寸



(1) 1675cm^{-1} 峰为一弱的拉曼光谱峰，而在红外吸收光谱上没有出现，此峰是：烯键 ($\text{C}=\text{C}$) 的特征峰，由于 $\text{C}=\text{C}$ 只有 ~~对称~~ 伸缩振动，当 $\text{C}=\text{C}$ 两侧所接基团对称时，整个分子是对称的， $\text{C}=\text{C}$ 的 ~~对称~~ 伸缩振动不会引起偶极矩的变化，但会引起极化率的变化，因此该分子中，含有 $\text{C}=\text{C}$ ，而且 $\text{C}=\text{C}$ 两侧所连接基团对称。

(2) 红外 2918cm^{-1} 和拉曼 2908cm^{-1} 对应 C-H 的非对称伸缩振动

拉曼 2858cm^{-1} 对应 C-H 的对称伸缩振动

但没有出现 $3000-3100\text{cm}^{-1}$ 的峰，说明不存在 $=\text{C-H}$ 中 C-H 键的伸缩振动

也没有出现 $800-1000\text{cm}^{-1}$...

弯曲振动

表明 $\text{C}=\text{C}$ 上不连接 H 原子。