

1 X 射线衍射强度

由于实际晶体不具有理想的完整性，同时入射 X 射线也不可能完全平行和单色，因此测量晶体某一 (hkl) 晶面的某一位置时的衍射强度对于晶体结构的测定未必有意义。对于多晶衍射，通常所测量的是某一衍射面 (hkl) 的积分衍射强度 I_{Σ} 。对于取向完全随机的粉末试样，其衍射峰如图1所示。图中的阴影部分表示积分强度。

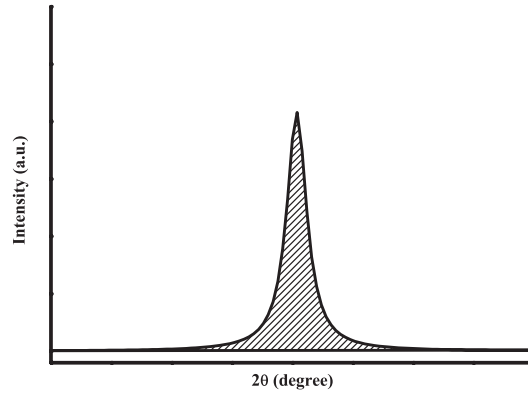


图 1: 粉末衍射峰示意图，阴影面积为积分强度

多晶 X 射线衍射的积分强度表达式为：

$$I_{\Sigma} = \frac{N^2 e^4 \lambda^3}{32\pi R m_0^2 c^4} I_0 v \cdot M \cdot L_P \cdot F^2 \cdot e^{-2B \sin^2 \theta / \lambda^2} \cdot A^*(\theta) \cdot (PO)$$

式中：

| | | | |
|-------|---------------|---------------|----------------------|
| N | 单位体积内的晶胞数 | λ | X 射线波长 |
| R | 照相机（或衍射仪）半径 | M | 多重性因子 |
| e | 电子电荷量 | L_P | 洛伦兹偏振因子 |
| m_0 | 电子静质量 | F | 结构因子 |
| c | 光速 | B | 热学参数 |
| v | 受 X 射线照射的试样体积 | $A^*(\theta)$ | 吸收因子 $A(\theta)$ 的倒数 |
| I_0 | 入射 X 射线的强度 | (PO) | 择优取向因子 |

令 $K = \frac{N^2 e^4 \lambda^3}{32\pi R m_0^2 c^4} I_0 v$ ，在同一实验室条件下 K 为常数，衍射的相对积分强度 I 的表达式为：

$$I = M \cdot L_P \cdot F^2 \cdot e^{-2B \sin^2 \theta / \lambda^2} \cdot A^*(\theta) \cdot (PO)$$