

第二章 X射线衍射方向

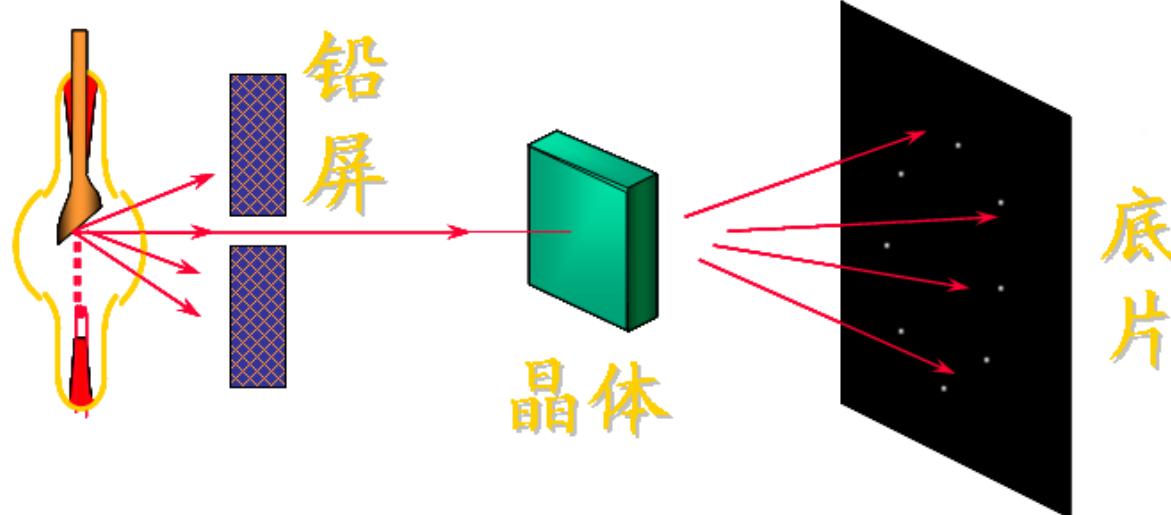
本章主要内容

- ▶ 第一节 晶体几何学简介
- ▶ 第二节 布拉格方程
- ▶ 第三节 X射线衍射方法



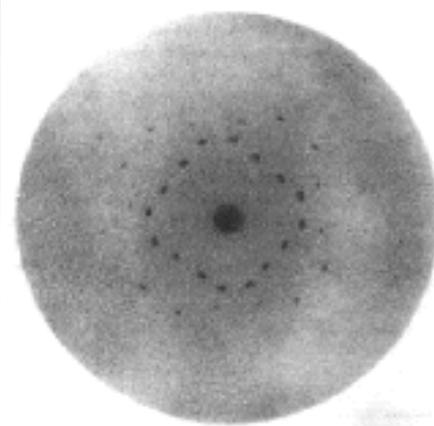
引言

X射线管

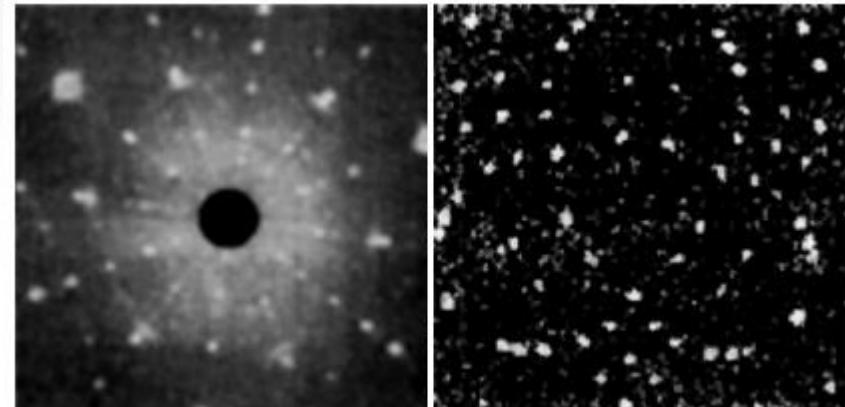


晶体点阵

衍射花样



$\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$
世界上第一张X射线衍射照片



(a)

(b)

X射线通过红宝石晶体(a)和硅单晶体(b)所拍摄的劳厄斑照



➤ 问题提出：衍射花样与晶体结构之间有什么样的关系。

衍射？

衍射——指相干波产生干涉时互相**加强**的结果。最大程度加强的方向为衍射方向。

X射线衍射原理？

晶体具有周期性的结构。X射线是一种电磁波。X射线入射晶体产生周期性变化的电磁场。原子中电子受激而同步振动，作为新的光源产生波长、位相与入射光相同的次生X射线（相干散射波），次生X射线相互干涉加强而产生衍射。

另外，晶体中周期性排列的面网间距与入射X射线波长具有相同的数量级，晶体可以作为X射线的衍射光栅。

所以，X射线入射晶体可以产生衍射。



- X射线在晶体中的衍射现象，实质上是大量的原子散射波互相干涉的结果。

- 晶体所产生的衍射花样反映出晶体内部的原子分布规律。

X射线衍射现象？

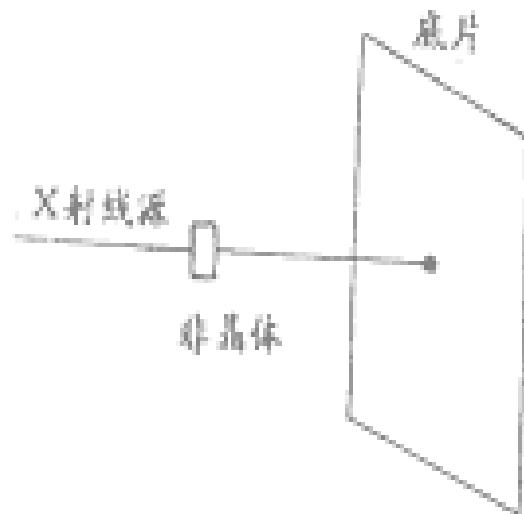
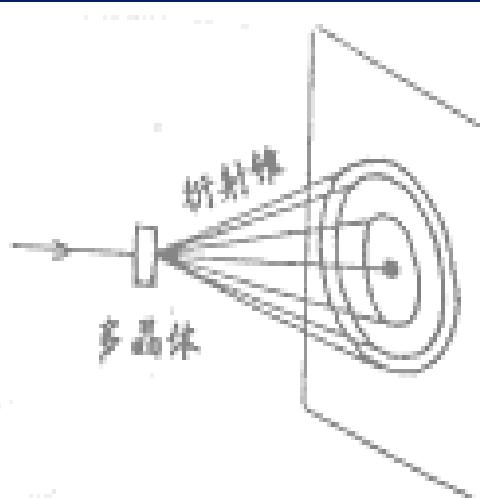
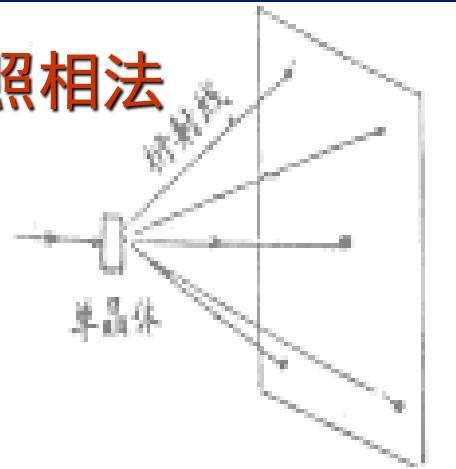
照相法：使胶片感光，留下相应的衍射花样
(衍射光斑、光环或线条)；

衍射仪法：衍射花样为一系列衍射峰：
晶体结晶程度越高，衍射峰越明锐。
非晶体不产生衍射，只出现散射。
(近程有序，远程无序)

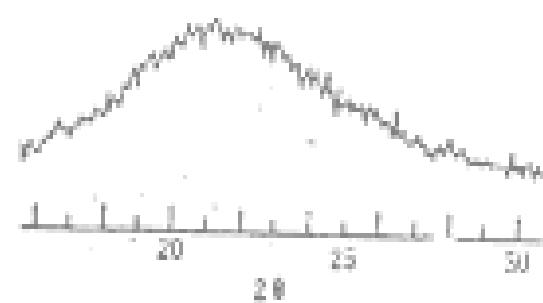
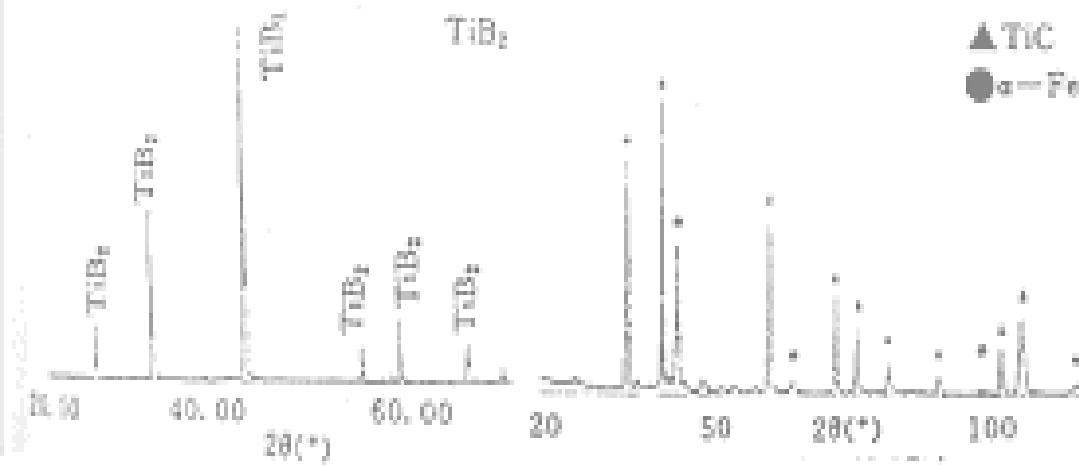
可见，衍射现象与晶体的有序结构有关，即
衍射花样规律性反映了晶体结构的规律性。

晶体衍射和非晶体散射效应

照相法



衍射仪法



石英玻璃(SiO_2)的衍射图

衍 射 现 象

| 样品 | 照 相 法 | | 衍射仪法 |
|-----|---------------|------|-----------------------|
| | 平板底片 | 条状底片 | |
| 单晶 | 有规律的斑点 | 对称弧线 | 明锐的衍射峰 |
| 多晶 | 衍射环 | 对称弧线 | 多种物相的衍射峰（结晶程度越高，峰越明锐） |
| 玻璃体 | 单一斑点（透射线）及弥散晕 | 弥散弧线 | 弥散峰 |



➤ 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。



➤ 一个衍射花样的特征，可以认为由两个方面的内容组成：

**一方面是衍射线在空间的分布规律，
(称之为衍射几何)，衍射线的分
布规律是晶胞的大小、形状和位向
决定；**

**另一方面是衍射线条的强度，衍射强
度则取决于原子的种类和它们在晶
胞中的位置。**



1. 1895年伦琴发现X射线后，认为是一种波，但无法证明。
2. 当时晶体学家对晶体构造（周期性）也没有得到证明。

1912年劳厄将X射线用于CuSO₄晶体衍射同时证明了这两个问题，从此诞生了X射线晶体衍射学

爱因斯坦曾称此实验为“物理学最美的实验”



劳厄用X射线衍射同时证明了 这两个问题

1. 人们对可见光的衍射现象有了确切的了解：光栅常数($a+b$)只要与点光源的光波波长为同一数量级，就可产生衍射，衍射花样取决于光栅形状。
2. 当时晶体学家和矿物学家对晶体的认识：晶体是由原子或分子为单位的共振体（偶极子）呈周期排列的空间点阵，各共振体的间距大约是 10^{-8} - 10^{-7} cm，M. A. Bravais已计算出14种点阵类型。

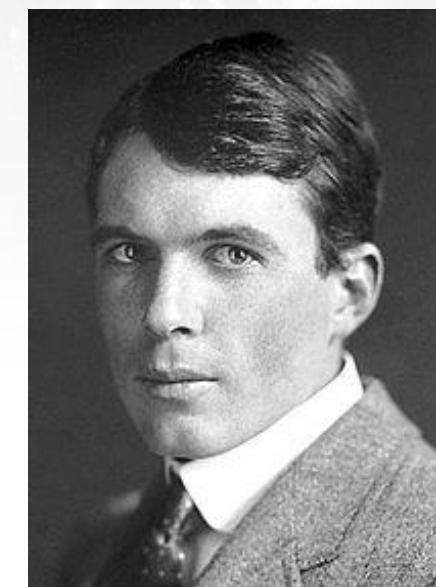
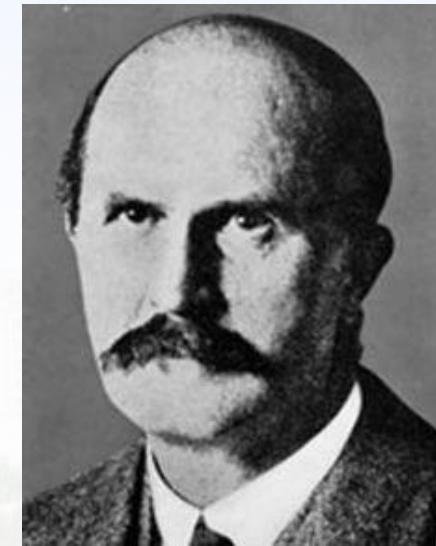


➤ 1912年劳埃（M. Van. Laue,德国物理学家，因发现晶体中X射线的衍射现象而获得1914年诺贝尔物理学奖)用X射线照射五水硫酸铜 $(\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O})$ 获得世界上第一张X射线衍射照片，并由光的干涉条件出发导出描述衍射线空间方位与晶体结构关系的公式（称劳埃方程）。





➤ 随后，布拉格父子
(W. H. Bragg与W. L. Bragg)
类比可见光镜面反射安排实验，
用X射线照射岩盐 (NaCl)，并依
据实验结果导出**布拉格方程**。
1915年与其父子一同获得诺贝尔
物理学奖。 W. L. Bragg成为历
史上最年轻的诺贝尔奖获得者，
这个纪录至今仍未被打破，年仅
25岁。（1890年3月31日—1971
年7月1日）





第一节 晶体几何学简介

- 1、晶体与非晶体的区别？
- 2、空间点阵与晶体结构的区别？
- 3、点阵常数（晶胞参数）指的是什么？
- 4、七大晶系（英文）的点阵常数特点是什么？
- 5、格子的类型有哪些？可以用什么字母代表？
- 6、14种布拉菲（Bravais）格子在七大晶系中是怎么分布的？
- 7、如何确定晶向指数与晶面指数？



第一节 晶体几何学简介

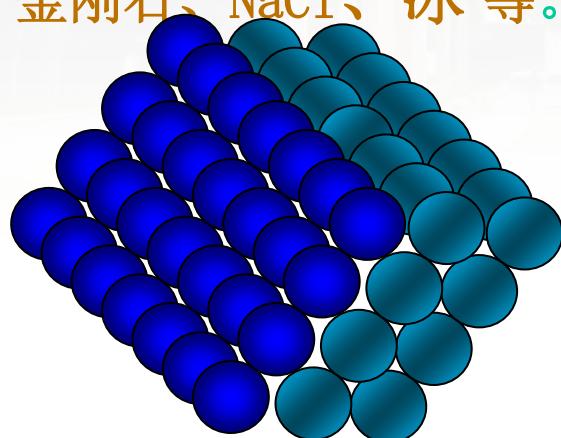
晶体与晶体学

晶体：是内部质点在三维空间成周期性重复排列的固体，即晶体是具有格子构造的固体。

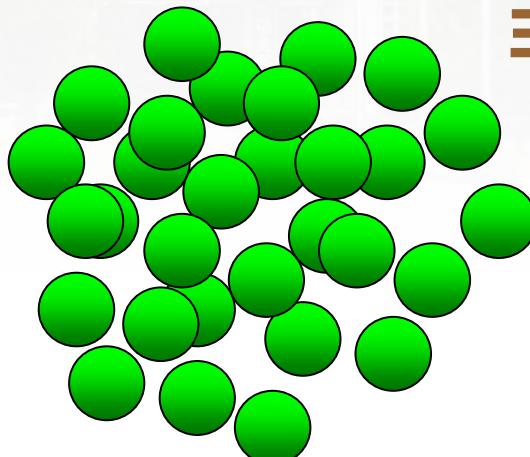
非晶体：原子无规则堆积，也称为“过冷液体”。

晶体

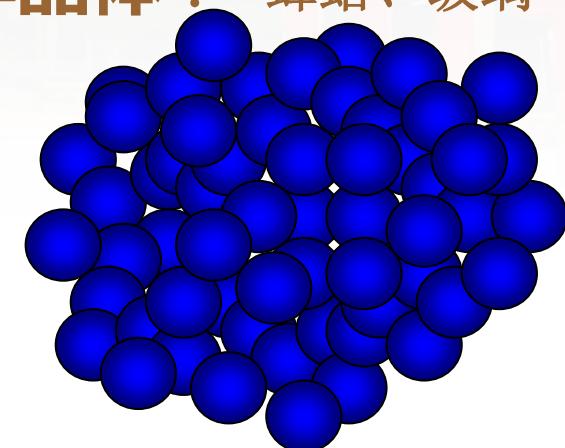
金刚石、NaCl、冰 等。

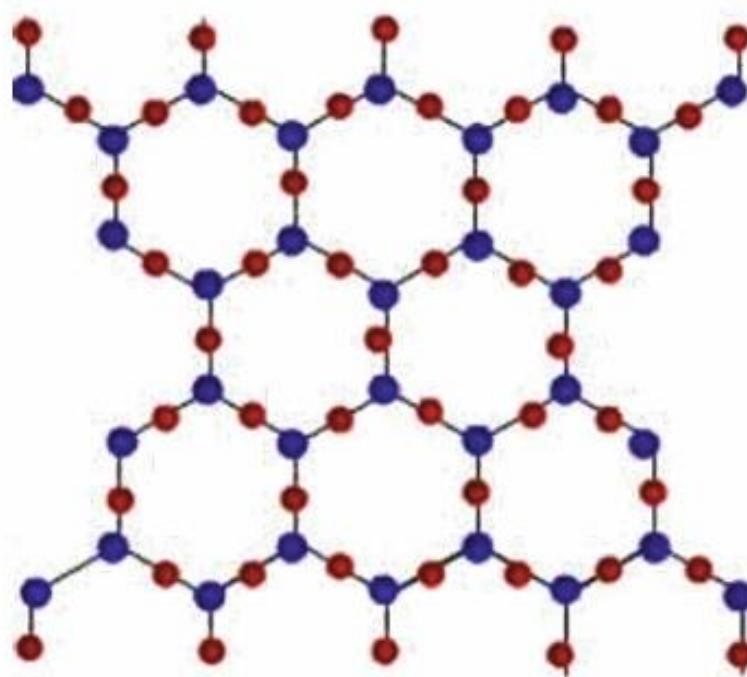


液体

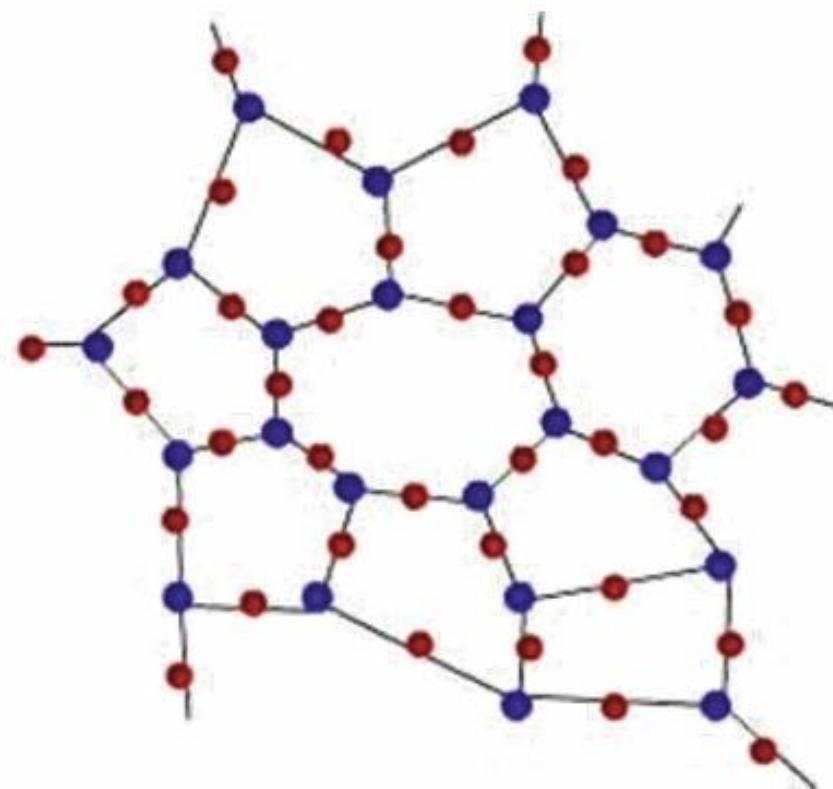


非晶体：蜂蜡、玻璃 等。





(a)石英晶体

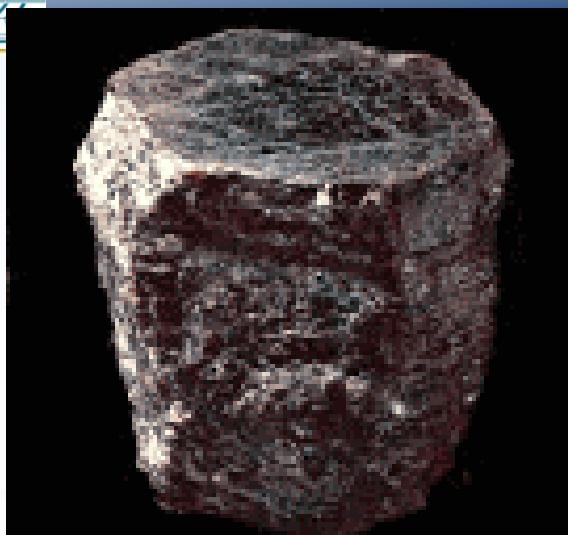


(b)石英玻璃



特征：

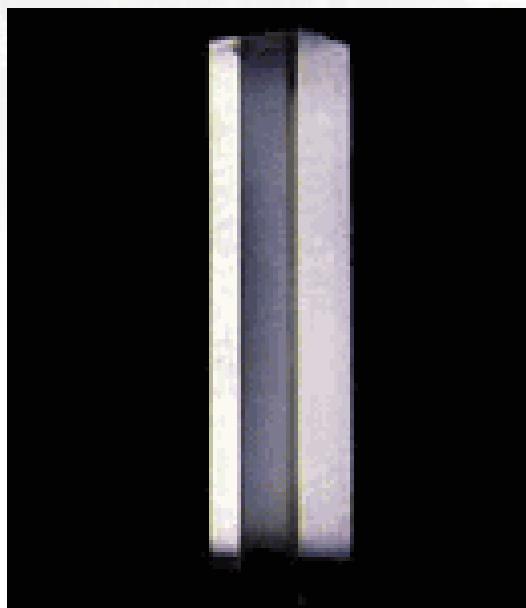
- 均匀性：晶体内部各个部分的宏观性质是相同的。（比如一个晶体，切成几块，每块的物理化学性质都是一样的，每块也表现出各向异性）
- 各向异性：晶体在不同的方向上具有不同的物理性质。
- 固定熔点：晶体具有周期性结构，熔化时，各部分需要同样的能量。
- 规则外形：理想环境中生长的晶体应为凸多边形。
- 对称性：晶体的理想外形和晶体内部结构都具有特定的对称性。



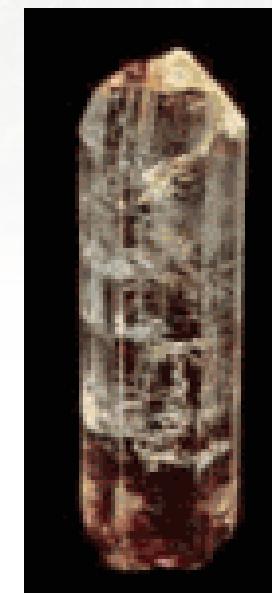
刚玉



邻苯二甲酸氢



锗酸铋





晶体点阵与空间点阵

基本概念

结构基元：晶体中的质点如原子，分子，离子或**原子集团**。

结点（阵点）：质点的中心位置称为晶格的结点。结点仅具有几何意义，并不真正代表任何质点。

空间点阵：把晶体中质点的中心用直线联系起来构成的空间格架。

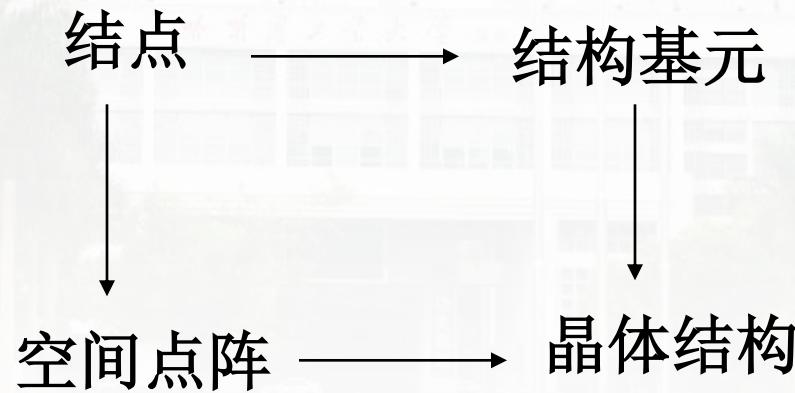
晶体结构：组成晶体的结构基元依靠一定的结合键结合后，在三维空间有规律周期性的重复排列方式。



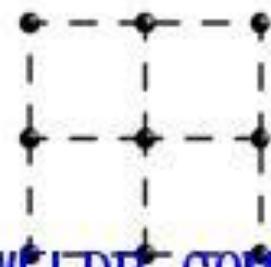
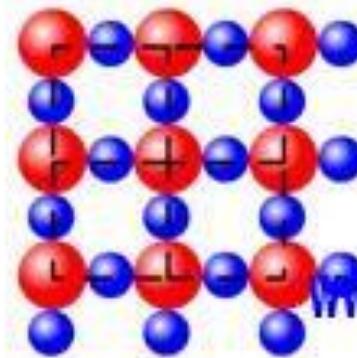
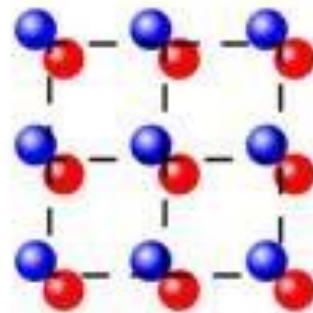
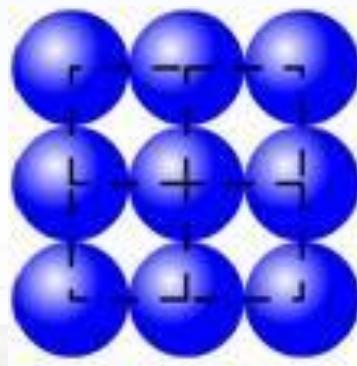
晶体结构和空间点阵的区别：

空间点阵：质点排列的几何学抽象只有14种类型

晶体结构：实际质点的排列是无限的



不同晶体结构可以有相同的空间点阵



WWW.WELDR.COM

不同的晶体结构和相同的空间点阵

晶体结构 = 空间点阵 + 结构单元

第一节 晶体几何学简介

一、14种布喇菲点阵

- 晶体中原子在三维空间规则排列的抽象图形称空间点阵。
空间点阵中的阵点不限于原子
- 由基本矢量 a 、 b 、 c 构成的平行六面体称为单位晶胞，如图2-1所示
- 布喇菲晶胞的选择原则：
最能反映点阵对称性；
 a 、 b 、 c 相等数目最多；
 α 、 β 、 γ 尽可能是直角

布喇菲晶胞的特点是几何关系和计算公式最简单

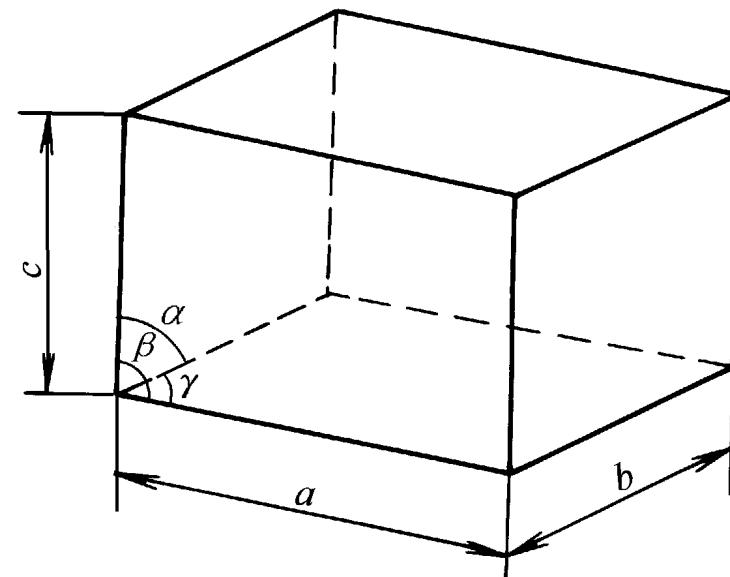
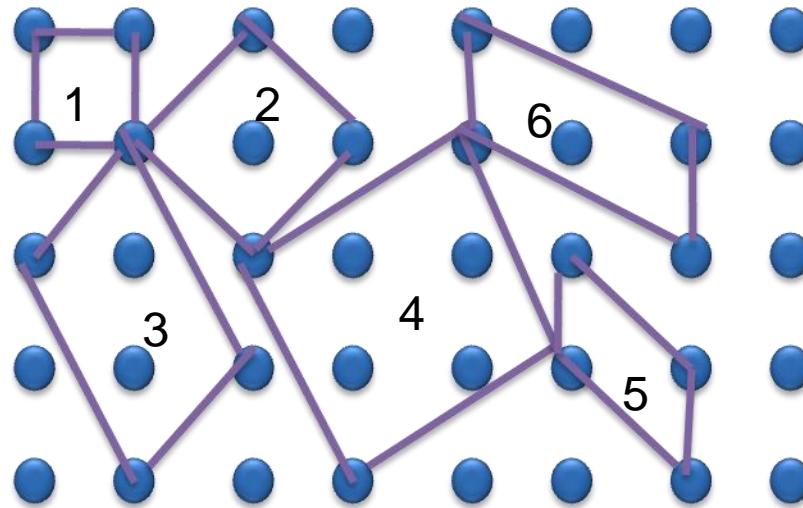


图2-1 单位晶胞

选取晶胞的原则：

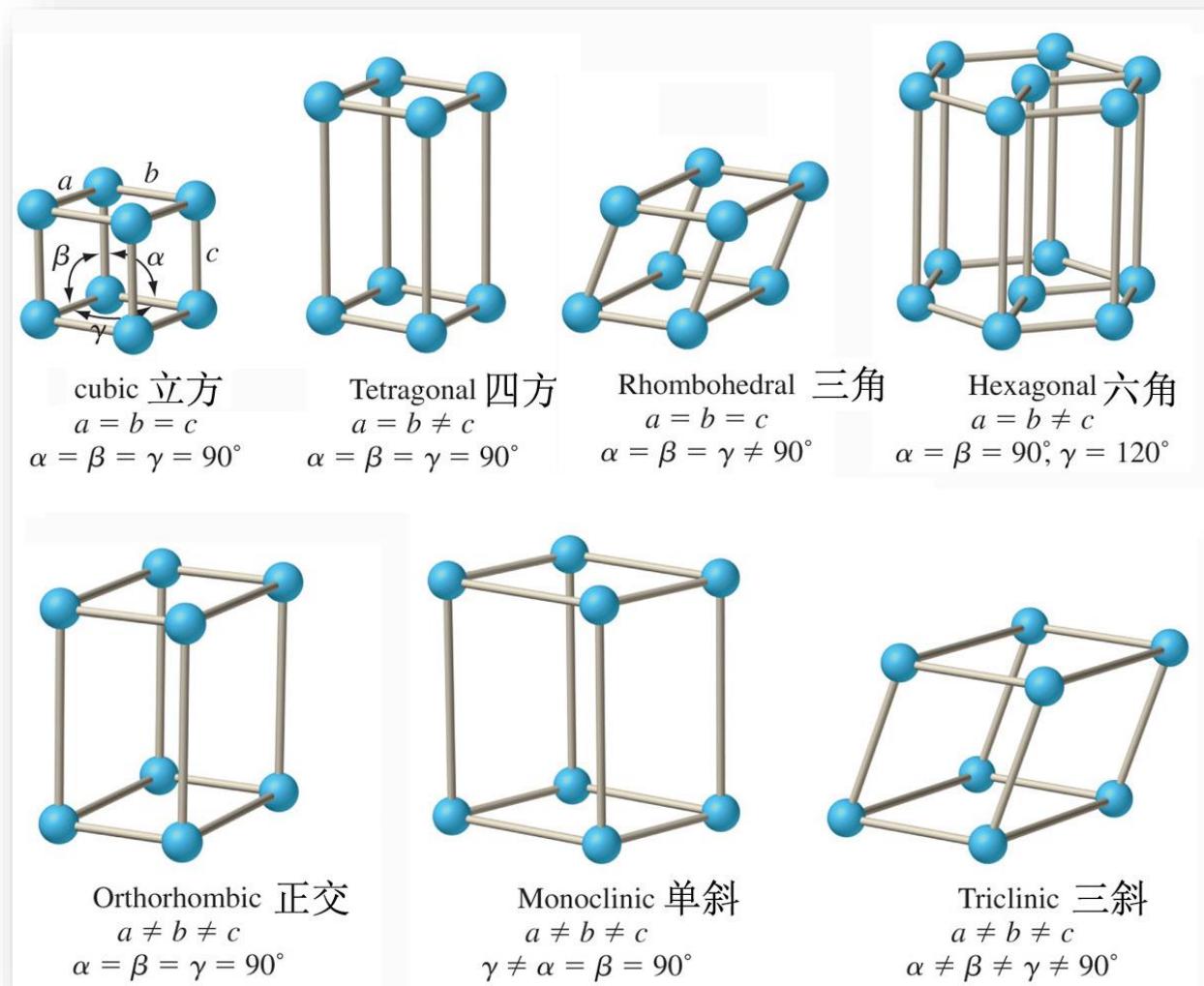
1. 要能充分反映整个空间点阵的周期性和对称性；
2. 在满足1的基础上，单胞要具有尽可能多的直角，
a、b、c 相等数目最多；
3. 在满足上条件，晶胞应具有最小的体积。



晶体学选取晶胞的原则

七大晶系

根据空间点阵的对称性，即晶胞的特点将晶体分为**七大晶系**



晶胞的分类

简单晶胞：只在平行六面体的8个顶点上有结点。
复合晶胞：除结点外，在体心，面心，底心等位置有结点。

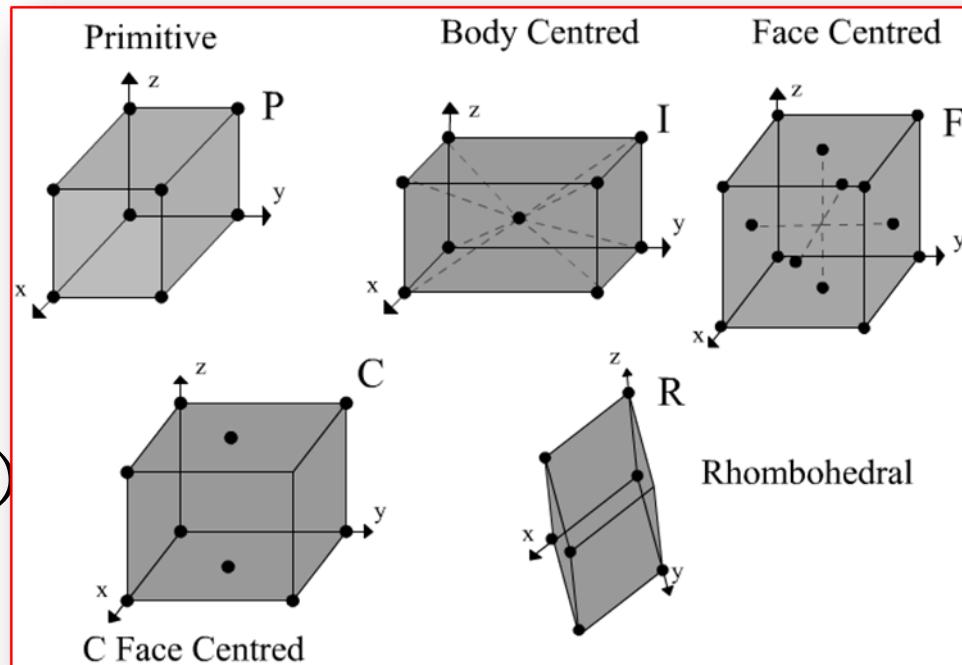
简单晶胞 (P)

体心晶胞 (I)

面心晶胞 (F)

底心晶胞 (A, B, C)

菱面体格子 (R)



菱面体格子实际是一种简单，只在三角晶系中存在。

布拉菲点阵

空间点阵到底有多少种排列形式？按照“每个阵点的周围环境相同”的要求，在这样一个限定条件下，法国晶体学家布拉菲（A. Bravais）曾在**1848**年首先用数学方法证明，空间点阵只有**14**种类型。这**14**种空间点阵以后就被称为**布拉菲点阵**。为了纪念奥古斯特·布拉菲在固态物理学的贡献命名的。三维布拉菲晶格只有**14**种可能，可以再分成**7**种晶系。常见的布拉菲点阵列表如下：



奥古斯特·布拉菲

七个晶系，14个布拉菲点阵

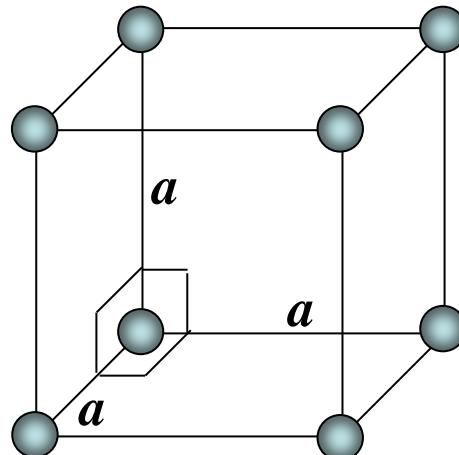
| 晶系 | 晶胞参数关系 | 点阵名称 | 阵点坐标 |
|--------------------------|---|------------------------------|---|
| 三斜 (triclinic) | $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ | 简单三斜 | [0, 0, 0] |
| 单斜 (monoclinic) | $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ | 简单单斜 底心单斜 | [0, 0, 0] [0, 0, 0] [1/2, 1/2, 0] |
| 斜方(正交) (orthorhombic) | $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ | 简单斜方 体心斜方 底心斜方 面心斜方 | [0, 0, 0] [0, 0, 0] [1/2, 1/2, 1/2] [0, 0, 0] [1/2, 1/2, 0] [0, 0, 0] [1/2, 1/2, 0] [1/2, 0, 1/2] [0, 1/2, 1/2] |
| 四方(正方) (tetragonal) | $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ | 简单四方 体心四方 | [0, 0, 0] [0, 0, 0] [1/2, 1/2, 1/2] |
| 立方 (cubic) | $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ | 简单立方 体心立方 面心立方 | [0, 0, 0] [0, 0, 0] [1/2, 1/2, 1/2] [0, 0, 0] [1/2, 1/2, 0] [1/2, 0, 1/2] [0, 1/2, 1/2] |
| 三方(菱方) (rhombohedral) | $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ | 简单三方 | [0, 0, 0] |
| 六方 (hexagonal) | $a = b = d \neq c$ ($a = b \neq c$) $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$ | 简单六方 | [0, 0, 0] |

第一节 晶体几何学简介

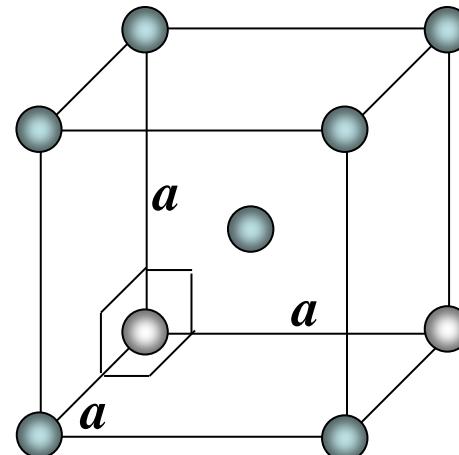
一、14种布喇菲点阵

自然界的晶体可划分为 7个晶系，每个晶系中最多有 4种点阵，在 7 大晶系中只有 14 种布喇菲点阵

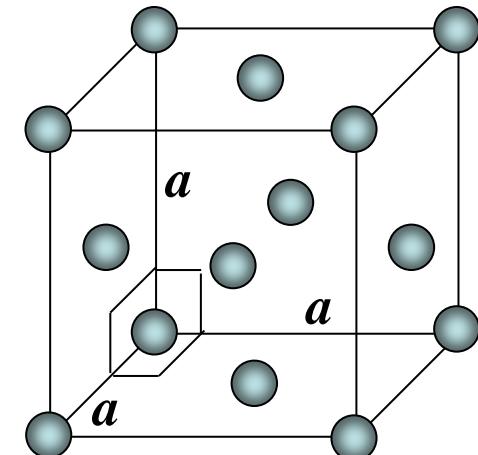
1. 立方晶系 $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ (Cubic)



简单立方



体心立方



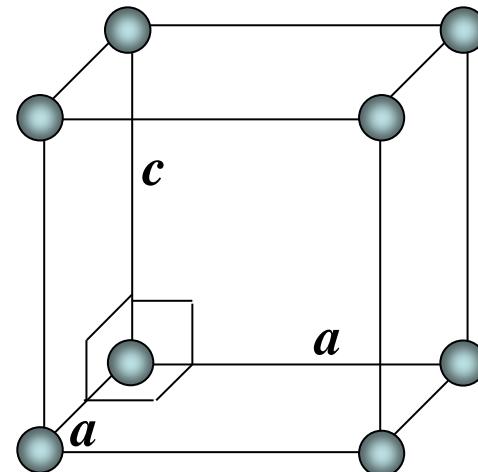
面心立方

图2-2 晶系及布喇菲点阵

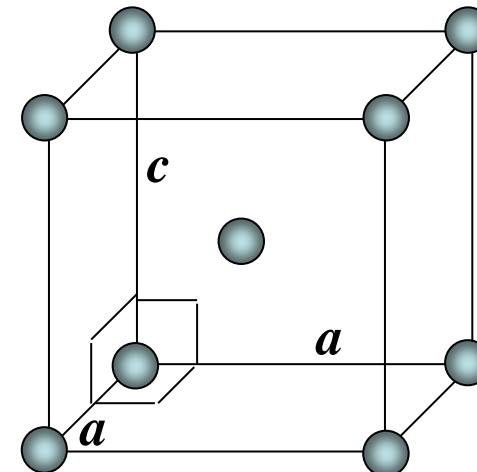
第一节 晶体几何学简介

一、14种布喇菲点阵

2. 正方晶系 $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ (tetragonal)



简单正方



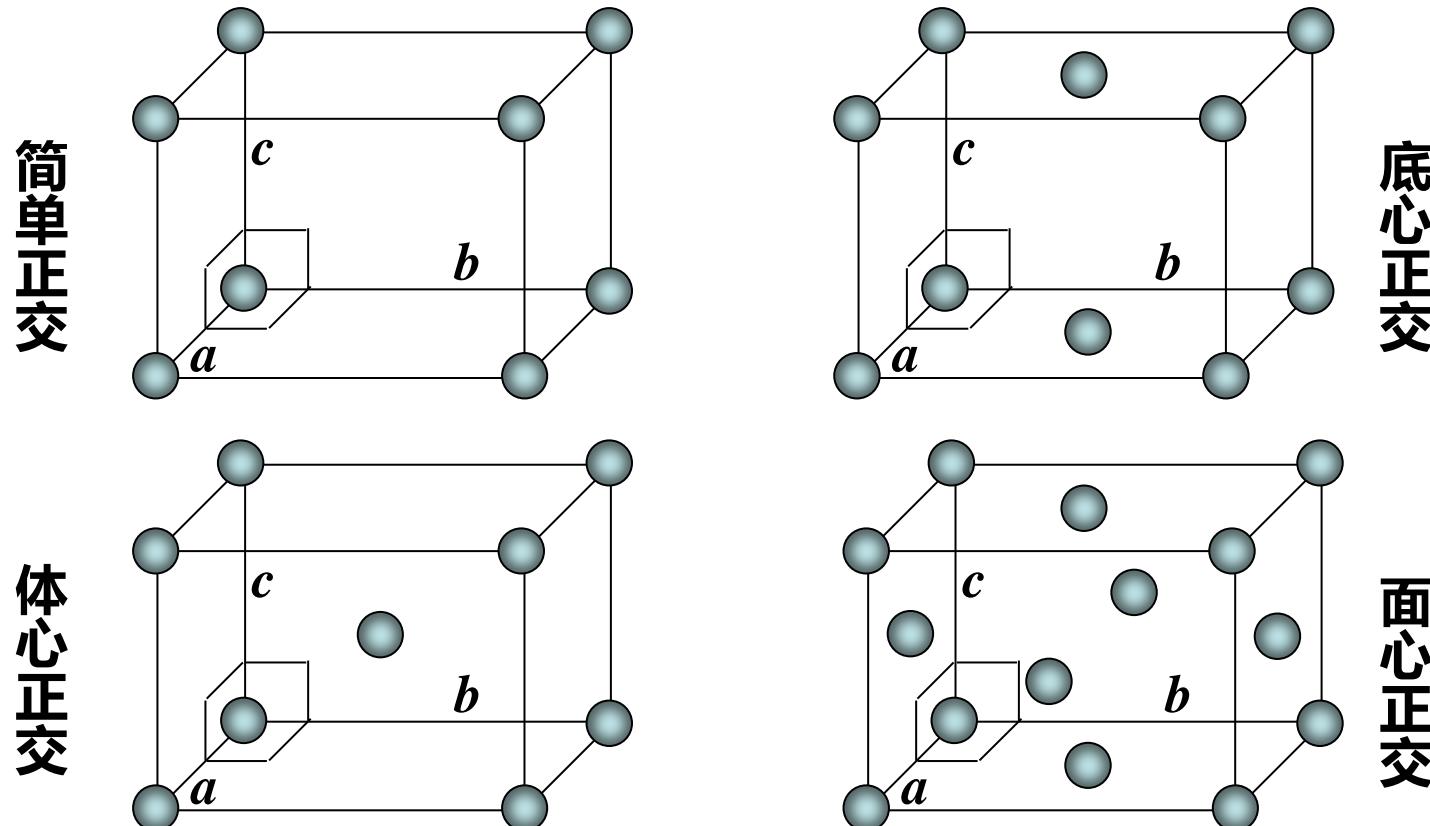
体心正方

续图2-2 晶系及布喇菲点阵

第一节 晶体几何学简介

一、14种布喇菲点阵

3. 正交晶系 $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ (orthorhombic)



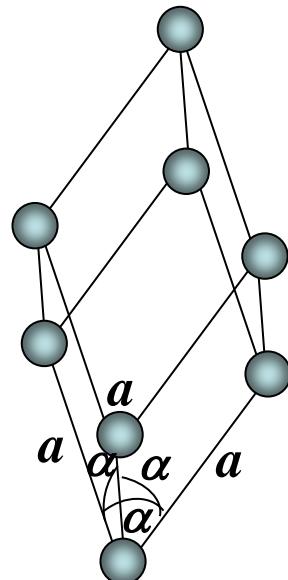
续图2-2 晶系及布喇菲点阵

第一节 晶体几何学简介

一、14种布喇菲点阵

4. 菱方晶系 (rhombohedral)

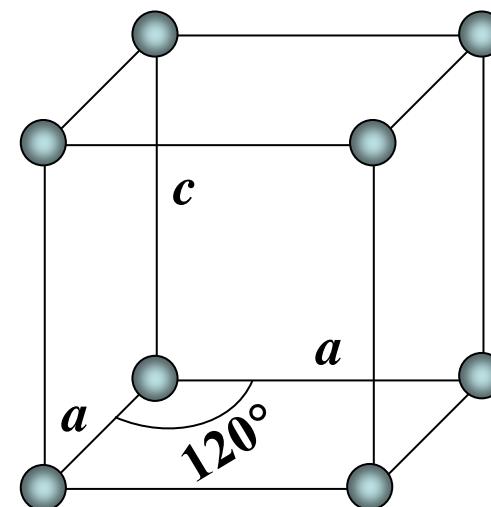
$$a=b=c, \alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$$



简单菱方

5. 六方晶系 (hexagonal)

$$a=b \neq c, \alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$$



简单六方

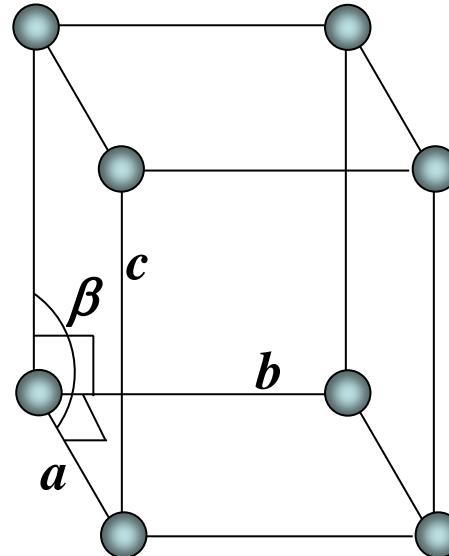
续图2-2 晶系及布喇菲点阵

第一节 晶体几何学简介

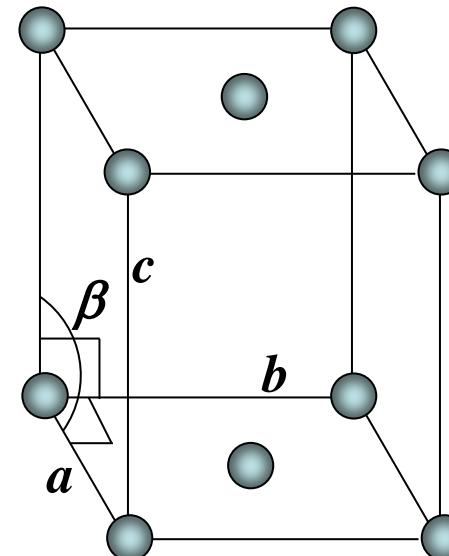
一、14种布喇菲点阵

6. 单斜晶系(monoclinic)

$$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$



简单单斜



底心单斜

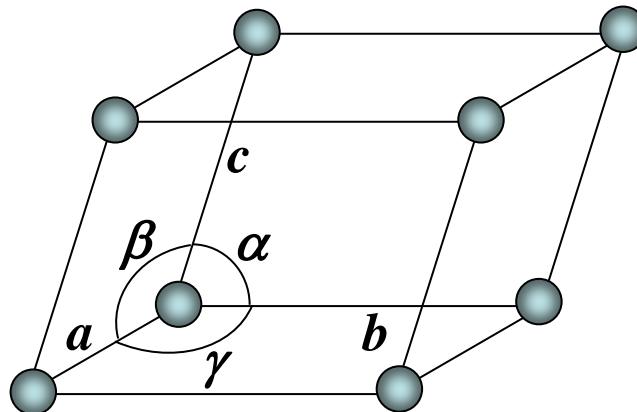
续图2-2 晶系及布喇菲点阵

第一节 晶体几何学简介

一、14种布喇菲点阵

6.三斜晶系(triclinic)

$$a \neq b \neq c, \alpha \neq \gamma \neq \beta \neq 90^\circ$$



简单三斜

续图2-2 晶系及布喇菲点阵

思考题

- 根据7种晶系和4种点阵，应当有28种不同的组合，为什么只有14种不同的点阵？
• (1) 不符合晶系对称性
• (2) 可以转化为体积更小的其它类型

第一节 晶体几何学简介

二、晶体学指数

1. 晶向指数

晶体点阵中的阵点按一定周期排列，可将点阵分解为任意方向上的、且相互平行的结点直线簇，阵点等距分布在这些直线上。用晶向指数 $[uvw]$ 表示一族直线，其确定方法如图2-3所示。若已知直线上任意两点坐标分别为，

$(X_1 Y_1 Z_1)$ 和 $(X_2 Y_2 Z_2)$

则有

$$(X_2 - X_1):(Y_2 - Y_1):(Z_2 - Z_1) = u:v:w$$

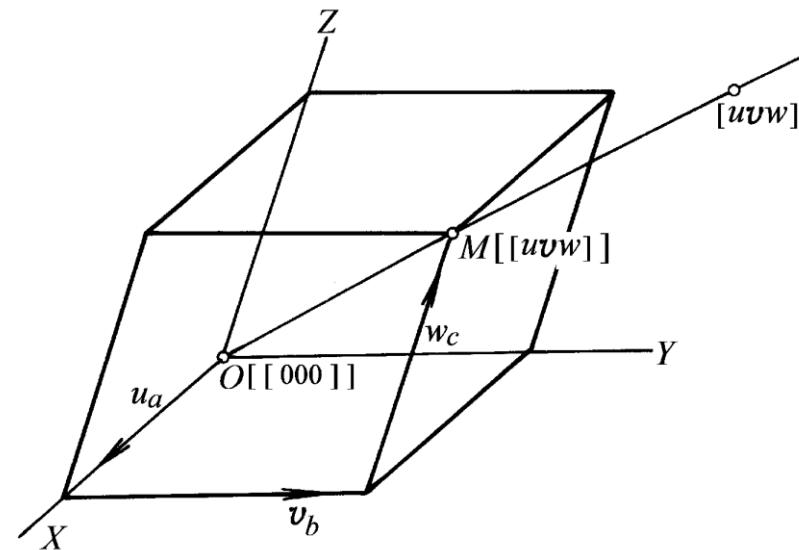


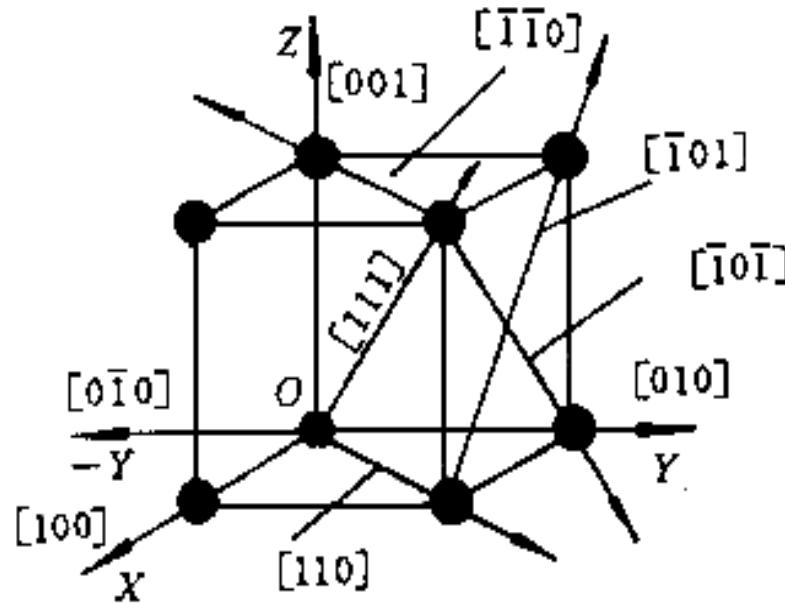
图2-3 晶向指数的确定

晶向指数的特点

- (1) 与原点位置无关；每一符号代表一组在空间相互平行且方向一致的所有晶向。
- (2) 若晶向所指的方向相反，则晶向数字相同符号相反。

[110] 与 $[\bar{1}\bar{1}0]$

平行的晶向，方向相反。



立方晶格中的晶向及指数

第一节 晶体几何学简介

二、晶体学指数

2. 晶面指数

可将点阵分解为任意取向的、相互平行的结点平面簇，不同取向的平面簇具有不同特征。用晶面指数(hkl)表示一族平面， $h k l$ 为其在3个坐标轴上截距倒数比(见图 2-4)，即

$$h:k:l = \frac{1}{m_2} : \frac{1}{n_2} : \frac{1}{p_2} = \frac{1}{m_1} : \frac{1}{n_1} : \frac{1}{p_1}$$

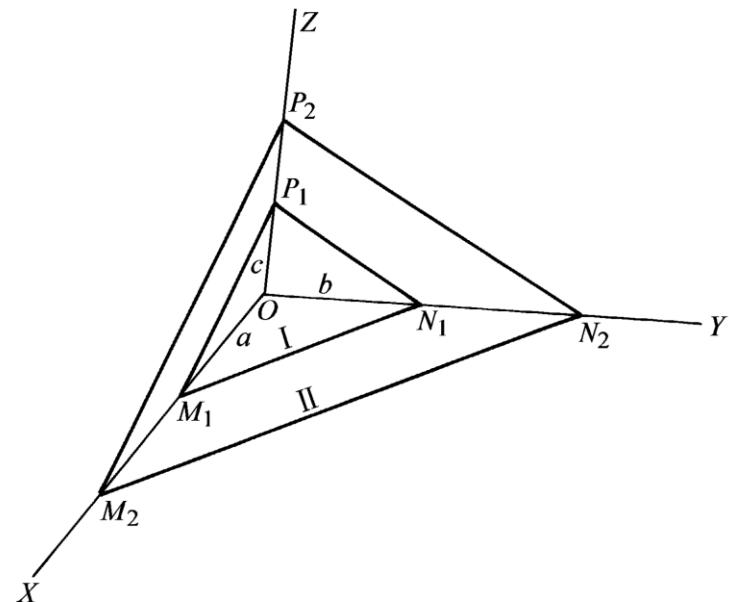
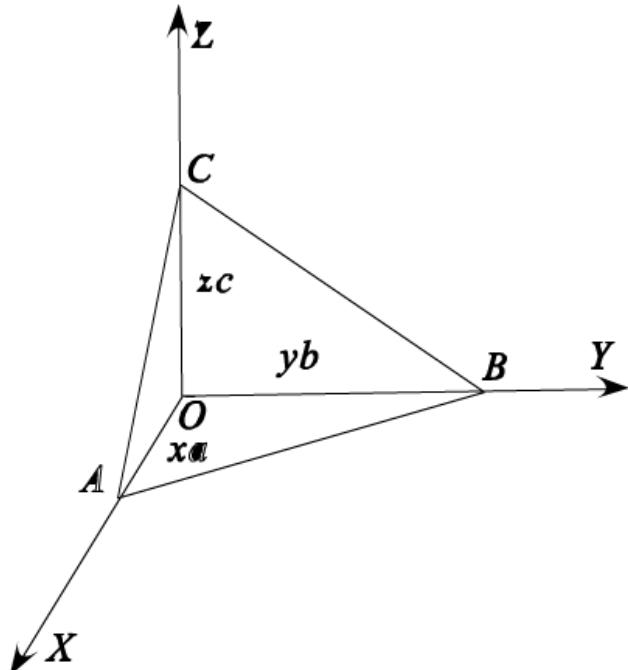


图2-4 晶面指数的确定

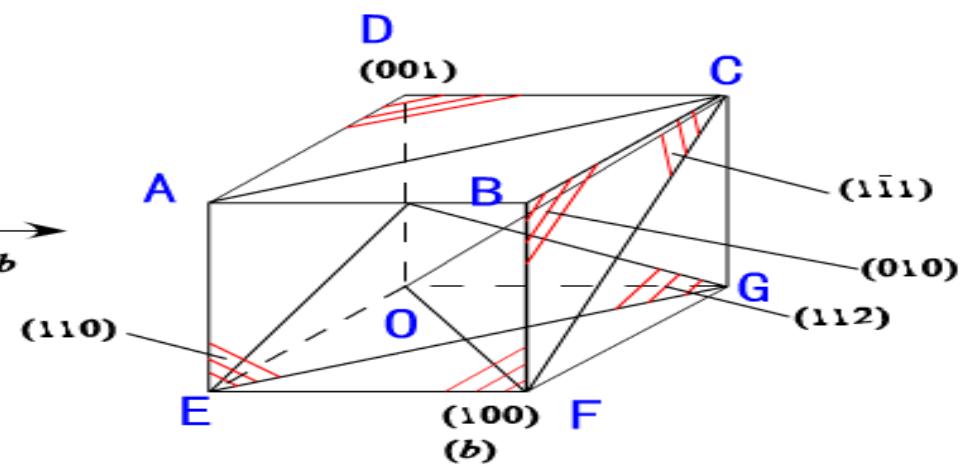
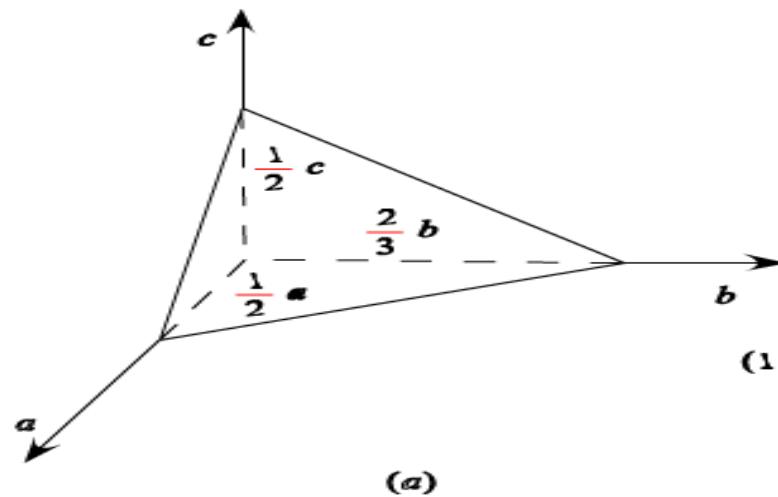
2.1.3.1 晶面指数



确定晶面指数 (hkl) 的步骤如下

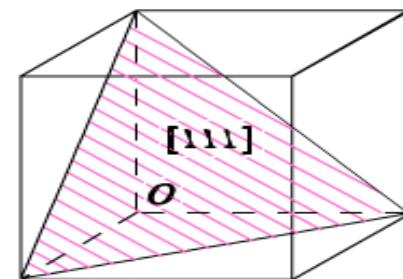
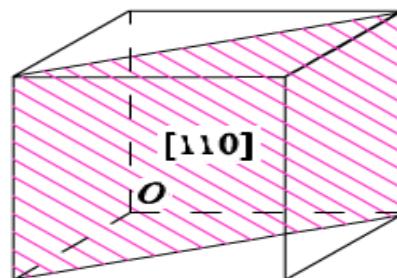
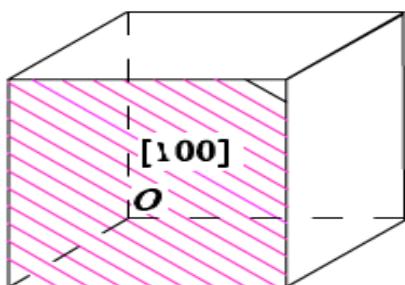
- 1. 设坐标:** 原点设在待求晶面以外。
- 2. 求截距:** 求晶面在三个轴上的截距
- 3. 取倒数**
- 4. 化整数:** h 、 k 、 l
- 5. 加括号:** (hkl) ，如果所求晶面在晶轴上截距为负数则在指数上加一负号。

例：晶面指数的标注



截距——取倒数——化整数

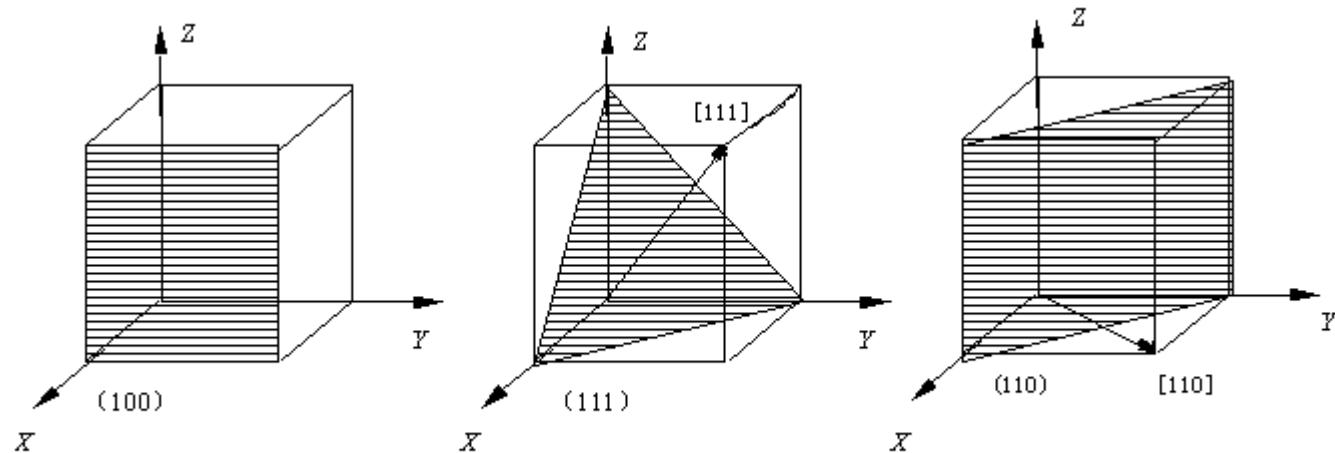
例：立方晶系晶面指数的标注



立方晶系晶向与晶面的关系

立方晶系中：相同指数（指数和符号均相同）的晶向和晶面互相垂直，即同指数的晶向是晶面的法线方向。如：[111] \perp (111)、[110] \perp (110)、[100] \perp (100)。

晶面 (hkl) 的法线与晶向 [hkl] 的方向平行，这就是晶面指数的几何意义。



立方晶格中的三种重要晶面

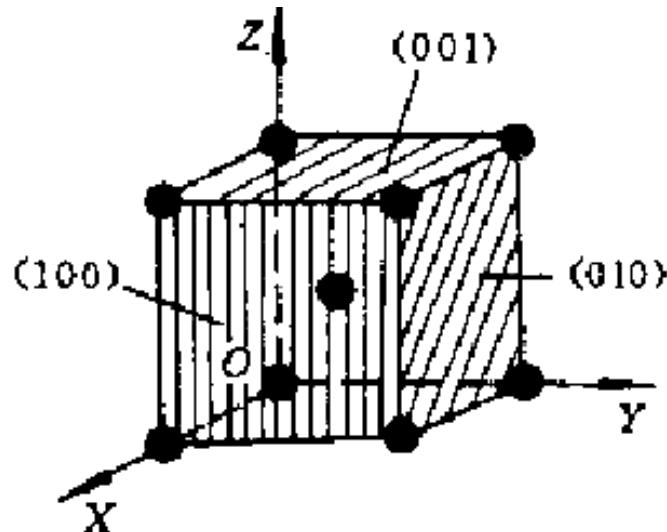
晶面族：晶体结构中原子排列状况相同但不平行的两组以上的晶面，构成一个晶面族。常存在对称性高的晶体（如立方晶系）中。

晶面族指数（符号）：通常用晶面族中某个最简便的晶面指数填在大括号{ }内，称为晶面族指数，用符号 $\{hkl\}$ 表示。

将 $\{hkl\}$ 中的 $\pm h$ 、 $\pm k$ 、 $\pm l$ ，改变符号和顺序，进行任意排列组合，就可构成这个晶面族所包括的所有晶面的指数。 $\{111\} = (111) + (\bar{1}\bar{1}1) + (1\bar{1}\bar{1}) + (\bar{1}\bar{1}\bar{1}) + (\bar{1}1\bar{1}) + (1\bar{1}\bar{1}) + (\bar{1}\bar{1}\bar{1}) + (11\bar{1})$
同一晶面族各平行晶面的面间距相等。

晶面族

晶面族表示方法：用花括号 $\{hkl\}$ 表示。它代表由对称性相联系的若干组等效晶面的总和。如 $\{100\}$ 包括 (100) 、 (010) 、 (001) 、 $(\bar{1}00)$ 、 $(0\bar{1}0)$ 、 $(00\bar{1})$ 。

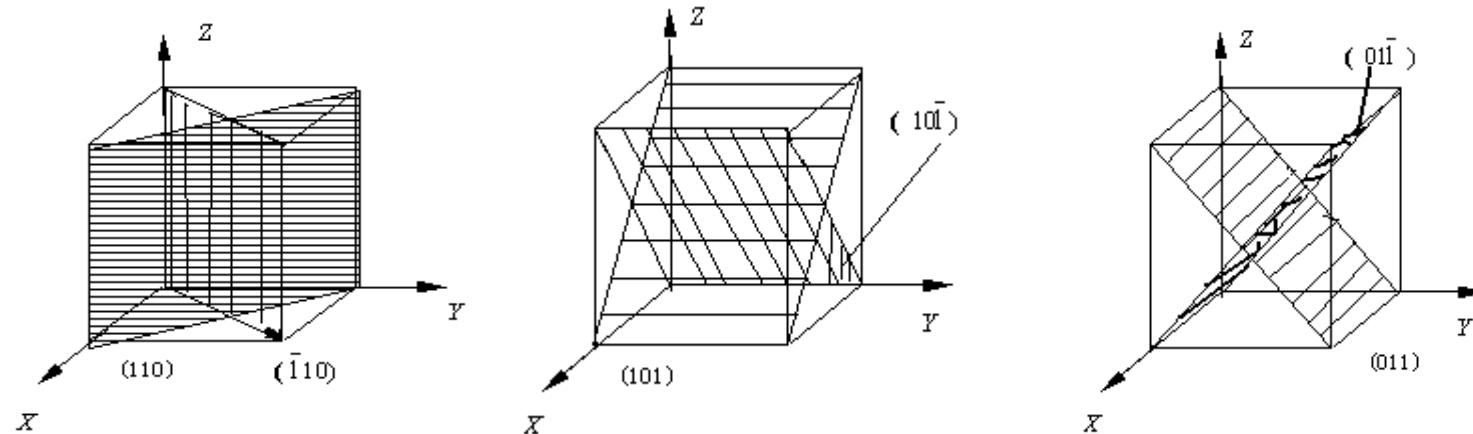


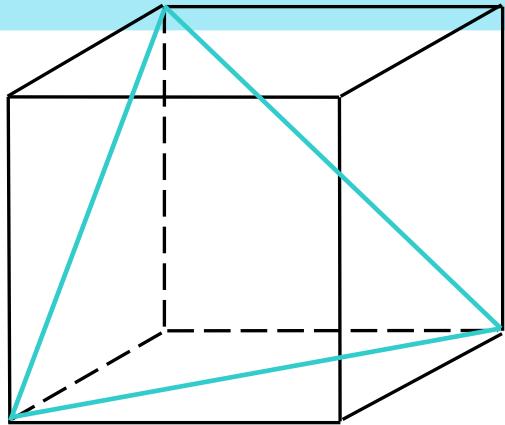
晶面族：等价晶面

立方 晶系 晶体 $\{110\} = (110) + (101) + (011) + (\bar{1}10) + (1\bar{1}0) + (\bar{1}01) + (10\bar{1}) + (0\bar{1}1) + (01\bar{1}) + (\bar{1}\bar{1}0) + (\bar{1}0\bar{1}) + (0\bar{1}\bar{1})$
Total: 12

晶面族：任意交换指数的位置和改变符号后的所有结果。

晶面族中等价晶面的个数用于多晶x射线衍射中多重性因子的表示。

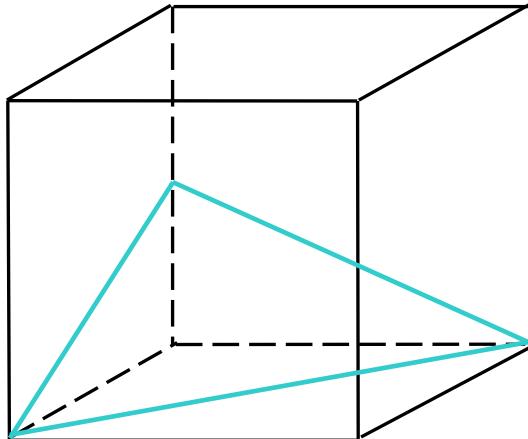




立方晶系:

$$\{111\} = (111) + (\bar{1}\bar{1}1) + (1\bar{1}\bar{1}) + (11\bar{1}) + (\bar{1}\bar{1}\bar{1}) + (1\bar{1}1) + (\bar{1}1\bar{1}) + (\bar{1}\bar{1}1)$$

Total: 8

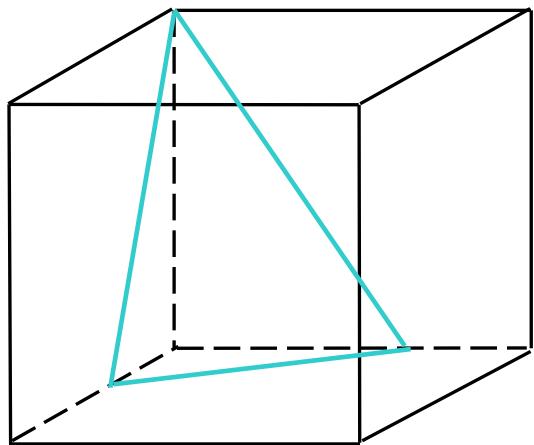


立方晶系:

$$\{112\} = (112) + (\bar{1}12) + (1\bar{1}2) + (11\bar{2}) + (121) + (\bar{1}21) + (1\bar{2}1) + (12\bar{1}) + (211) + (\bar{2}11) + (2\bar{1}1) + (21\bar{1})$$

再加上以上各指数均取相反数的符号。

Total: 24



$$\{123\} = (123) + (\bar{1}23) + (1\bar{2}3) + (12\bar{3}) + (132) + \\ (\bar{1}32) + (1\bar{3}2) + (13\bar{2}) + (231) + (\bar{2}31) + \\ (2\bar{3}1) + (23\bar{1}) + (213) + (\bar{2}13) + (2\bar{1}3) + \\ (21\bar{3}) + (312) + (\bar{3}12) + (3\bar{1}2) + (31\bar{2}) + \\ (321) + (\bar{3}21) + (3\bar{2}1) + (32\bar{1})$$

再加上以上各指数均取相反数的符号。

Total: 48

在其他晶系中，晶面指数的数字相同绝对值相同的晶面就不一定都属于同一晶面族。如在正方晶系中， $\{100\}$ 包括 (100) 、 (-100) 、 (010) 、 $(0-10)$ 四个晶面， $\{001\}$ 包括 (001) 、 $(00-1)$ 二个晶面。如在三斜晶系中， $\{100\}$ 包括 (100) 、 (-100) 二个晶面， $\{010\}$ 包括 (010) 、 $(0-10)$ 二个晶面， $\{001\}$ 包括 (001) 、 $(00-1)$ 二个晶面。

在立方结构中若晶面指数和晶向指数的指数和符号相同，则该晶向与晶面必定是互相垂直。如： $[111] \perp (111)$ 、 $[110] \perp (110)$ 、 $[100] \perp (100)$ 。但在其他晶系中，此关系不存在。

二、晶体学指数

3.六方晶系指数

用三指数表示六方晶系的晶面和晶向时，其缺点是不能直观地显示等同晶面和等同晶向关系。如 $(1\ 0\ 0)$ 、 $(0\ 1\ 0)$ 和 $(\bar{1}\ 1\ 0)$ 是等同三个柱面， $[1\ 0\ 0]$ 、 $[0\ 1\ 0]$ 、 $[1\ 1\ 0]$ 实际上是等同晶向

上述晶面和晶向若用四指数可分别表示为， $(1\ 0\ \bar{1}\ 0)$ 、 $(0\ 1\ \bar{1}\ 0)$ 、 $(\bar{1}\ 1\ 0\ 0)$ ，和 $[2\ \bar{1}\ \bar{1}\ 0]$ 、 $[\bar{1}\ 2\ \bar{1}\ 0]$ 、 $[1\ 1\ \bar{2}\ 0]$ ，它们则具有明显的等同性，可分别归属为 $\{1\ \bar{1}\ 0\ 0\}$ 晶面族和 $\langle1\ 1\ \bar{2}\ 0\rangle$ 晶向族，见图2-5

第一节 晶体几何学简介

二、晶体学指数

3.六方晶系指数

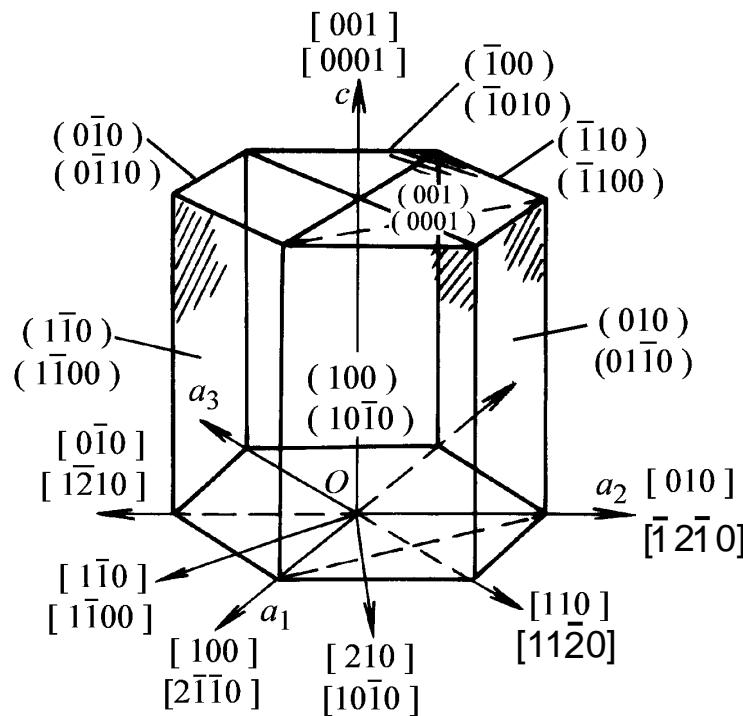


图2-5 六方晶系的晶体学指数

若晶面用三指数表示时为
(hkl)，则相应的四数指
为($hkil$)，四指数中前三
个指数只有两个是独立的，
它们之间的关系为

$$i = - (h + k)$$

有时将*i*略去，表示为

$$(hkl)$$

第一节 晶体几何学简介

二、晶体学指数

3.六方晶系指数

四轴晶向指数确定方法见图2-6。三指数 [UVW] 和四指

数[$uvtw$]之间的按以下关
系互换

$$U = u - t, V = v - t, W = w$$

$$u = (2U - V)/3$$

$$v = (2V - U)/3$$

$$t = - (u + v)$$

$$w = W$$

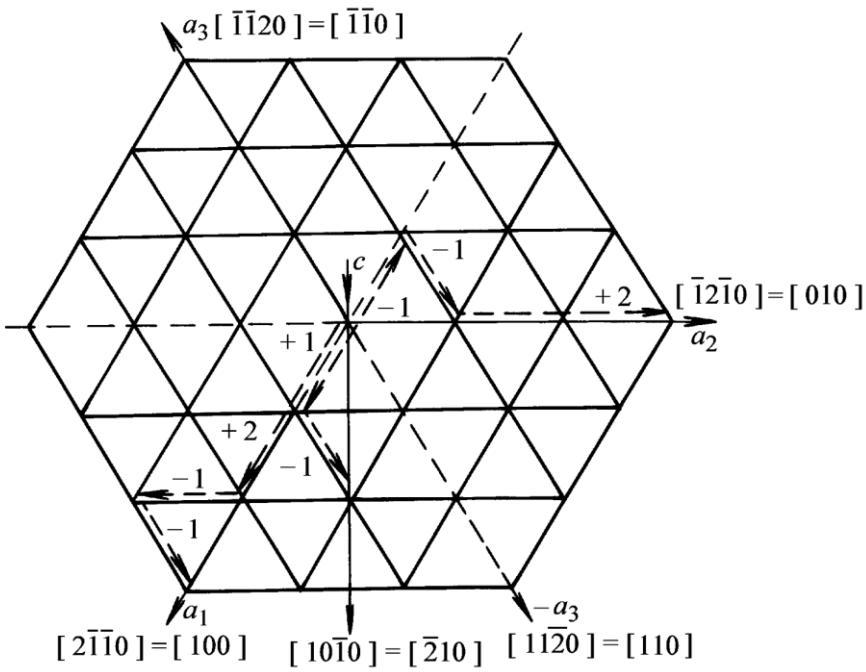


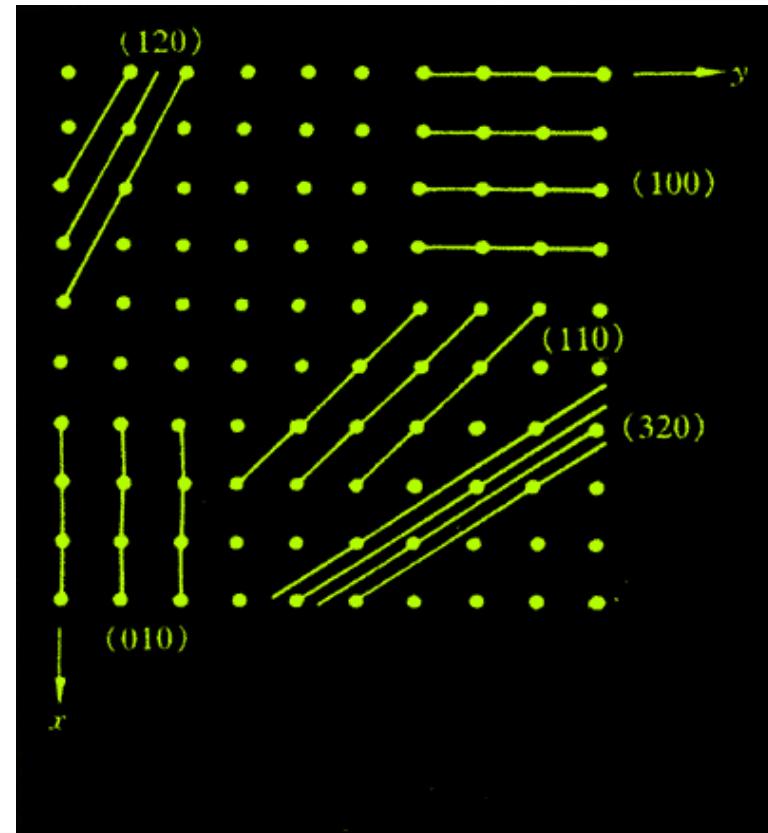
图2-6 六方晶系的晶向指数

晶面间距 (interplanar spacing)

晶面间距是指两个相邻的平行晶面间的垂直距离，用 d_{hkl} 或简写d来表示。用 d_{hkl} 表示从原点作 $(h k l)$ 晶面的法线，则法线被最近的 $(h k l)$ 面所交截的距离即是。

通常，低指数的面间距较大，而高指数的晶面间距则较小

晶面间距愈大，该晶面上的原子排列愈密集；
晶面间距愈小，该晶面上的原子排列愈稀疏。
低指数晶面在X射线衍射具有较大重要性



实际晶体的晶面常常平行网面结点密度最大的面网，这就是**布拉维法则**

第一节 晶体几何学简介

三、简单点阵的晶面间距公式

1. 正交晶系

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{h^2/a^2 + k^2/b^2 + l^2/c^2}} \quad (2-3)$$

2. 正方晶系

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{(h^2 + k^2)/a^2 + l^2/c^2}} \quad (2-4)$$

3. 立方晶系

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (2-5)$$

4. 六方晶系

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2 + hk + k^2)/a^2 + l^2/c^2}} \quad (2-6)$$



二晶面间夹角 ϕ 的计算

晶面夹角可以用晶面法线间的夹角表示。

对立方晶系

$$\cos \phi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

例如 (100) 与 (110) 晶面的之间的夹角

$\phi = \arccos 1/\sqrt{2} = 45^\circ$; (100)与(111)晶面的之间的夹

角 $\phi = \arccos 1/\sqrt{3} = 54.7^\circ$ 。

对正方晶系

$$\cos \phi = \frac{\frac{h_1 h_2 + k_1 k_2}{a^2} + \frac{l_1 l_2}{c^2}}{\sqrt{\frac{h_1^2 + k_1^2}{a^2} + \frac{l_1^2}{c^2}} \sqrt{\frac{h_2^2 + k_2^2}{a^2} + \frac{l_2^2}{c^2}}}$$

例如 (100) 与 (210) 晶面的之间的夹角
 $\phi = \arccos 1/\sqrt{5} = 19.11^\circ$ 。

对六方系

$$\cos \phi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + \frac{1}{2} (h_1 k_2 + h_2 k_1) + \frac{3a^2}{4c^2} l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + h_1 k_1 + \frac{3a^2}{4c^2} l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + h_2 k_2 + \frac{3a^2}{4c^2} l_2^2}}$$

例如 (100) 与 (210) 晶面的之间的夹角

$$\phi = \arccos 2.5/\sqrt{7} = 19.11^\circ.$$

晶面(hkl)的法线与某方向[uvw]的夹角 η 的计算

对立方系

$$\cos \eta = \frac{uh + vk + wl}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

(hkl)晶面与[hkl]方向的夹角: $\cos\eta=1$, $\eta=0^\circ$, 即

晶面法线与同名的方向一致。

而 (110) 晶面法线与 [100] 方向的夹角 :

$$\eta=\arccos 1/\sqrt{2}=45^\circ$$

☆ 晶带和晶带定律

在晶体结构和空间点阵中同时平行于某一轴向 $[uvw]$ 的所有晶面构成一个晶带，这些晶面叫**晶带面**，而这个轴向 $[uvw]$ 称为这一晶带的**晶带轴**。

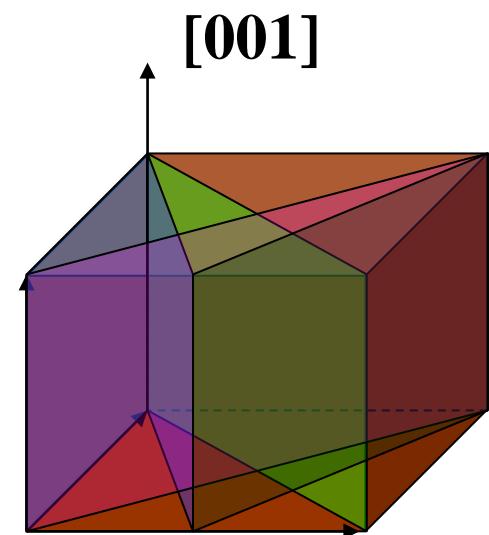
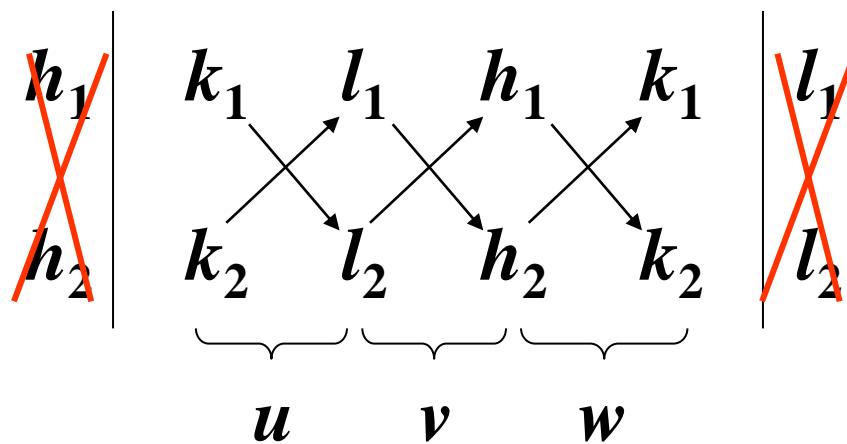
凡属于 $[uvw]$ 晶带的晶面，它的晶面指数 (hkl) 都必然符合关系式：

$$hu + kv + lw = 0$$

这个关系式就称为晶带定律。

☆ 若已知某晶带中任意两个晶面的面指数 $(h_1 k_1 l_1)$ 和 $(h_2 k_2 l_2)$ 时，可以根据晶带定律计算出晶带轴的指数 $[uvw]$ ：

$$\begin{cases} h_1 u + k_1 v + l_1 w = 0 \\ h_2 u + k_2 v + l_2 w = 0 \end{cases}$$



晶带定理

相交于同一直线（或平行于同一直线）的所有晶面的组合称为**晶带**，该直线称为**晶带轴**。

同一晶带轴中的所有晶面的**共同特点**：所有晶面的法线都与晶带轴垂直。

晶带轴 $[u \ v \ w]$ 与该晶带的晶面 $(h \ k \ l)$ 之间存在以下关系

$$hu + kv + lw = 0 \quad \text{——晶带定律}$$

凡满足此关系的晶面都属于以 $[u \ v \ w]$ 为晶带轴的晶带

• 晶带定理的应用

已知晶带中任意两个晶面 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$, 可求该晶带的晶带轴方向【uvw】

$$u = k_1 l_2 - k_2 l_1$$

$$v = l_1 h_2 - l_2 h_1$$

$$w = h_1 k_2 - h_2 k_1$$

已知某晶面同属于两个晶带【 $u_1v_1w_1$ 】和【 $u_2v_2w_2$ 】，可求的晶面指数(hkl)

$$h = v_1 w_2 - v_2 w_1$$

$$k = w_1 u_2 - w_2 u_1$$

$$l = u_1 v_2 - u_2 v_1$$

本节的基本要求

一、需掌握的概念和术语：

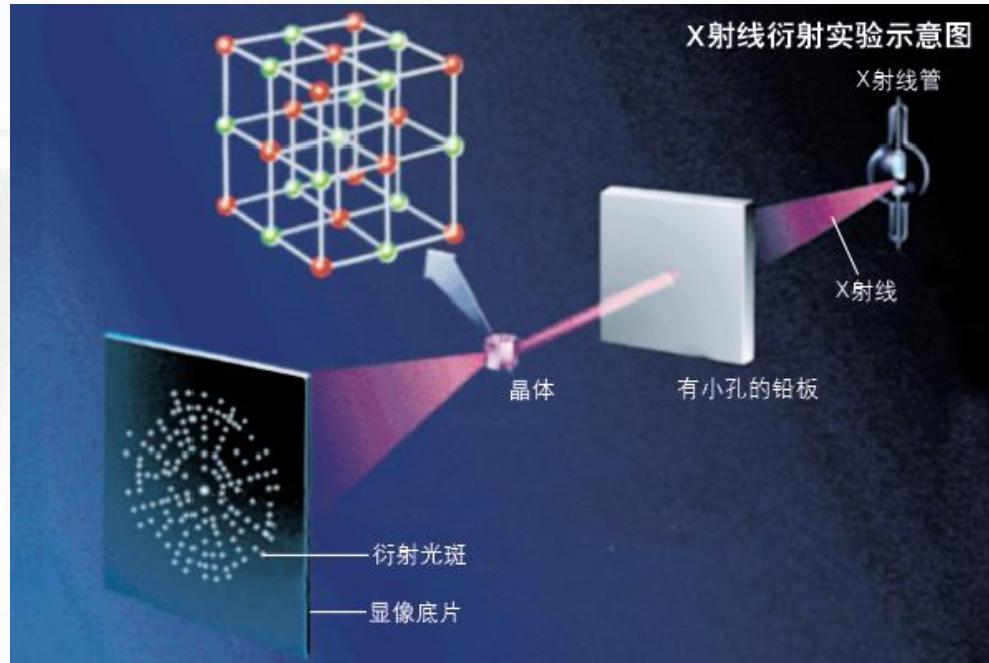
1. 晶体与非晶体的区别
2. 空间点阵、晶格、晶胞、晶系（七个），布拉菲点阵（14种）
3. 掌握晶面指数、晶向指数
4. 了解晶面间距 $d_{(hkl)}$ 、了解晶带定理的表达式

二、几个常用的公式

1. 指数相同的晶向和晶面必然垂直。如 $[111] \perp (111)$
2. 当一晶向 $[uvw]$ 位于或平行某一晶面 (hkl) 时，则必然满足： $h \cdot u + k \cdot v + l \cdot w = 0$
3. 晶面间距： $d_{(hkl)}$ 的求法



第二节：布拉格方程



- 布拉格方程怎样描述X射线的衍射

X射线衍射原理？

晶体具有周期性的结构。X射线是一种电磁波。X射线入射晶体产生周期性变化的电磁场。原子中电子受激而同步振动，作为新的光源产生波长、位相与入射光相同的次生X射线（相干散射波），次生X射线相互干涉加强而产生衍射。

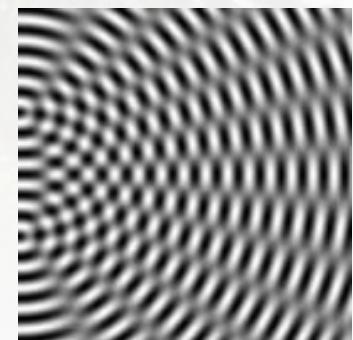
另外，晶体中周期性排列的面网间距与入射X射线波长具有相同的数量级，晶体可以作为X射线的衍射光栅。

所以，X射线入射晶体可以产生衍射。



波的合成

- 同频率的两波源在同种介质中产生的两列波，波长相同。这两列波的波峰和波峰（波谷和波谷）相遇处，振动加强；波峰和波谷相遇处振动减弱。因此可得：若介质中某质点到两波源的距离之差为波长的整数倍，则该质点的振动是加强的；若某质点到两波源的距离之差是半波长的奇数倍，则该质点的振动是减弱的。

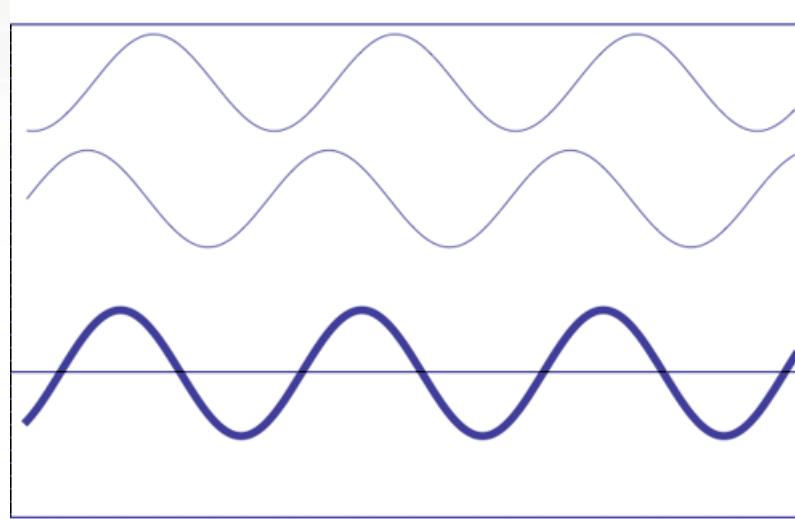




干涉与衍射

- 干涉是相干波的干扰而在屏上出现明暗相间的条纹的现象。
- 衍射是波绕过与该波波长大小差不多的障碍物的现象。

光的干涉是两个频率相同的相干光波之间的简单叠加，衍射是无数条光波的复杂叠加

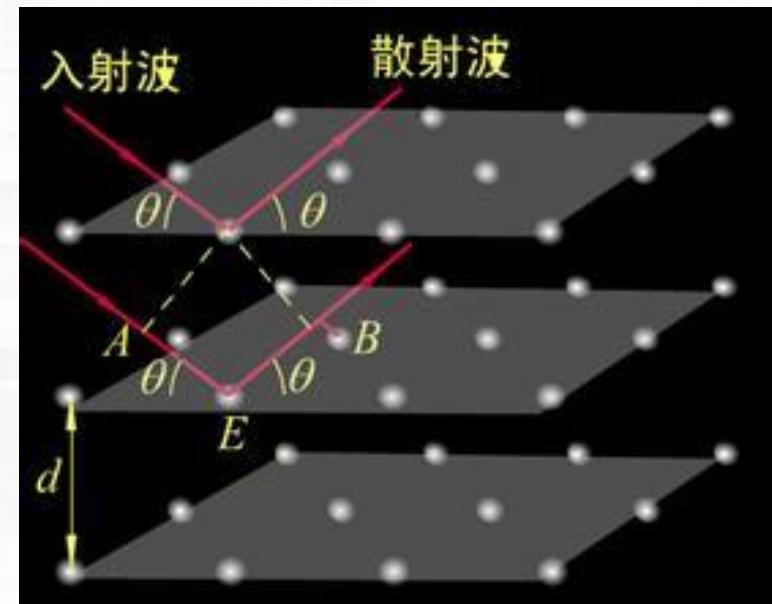




X射线的散射

◆ X 射线与原子内受束缚较紧的电子相遇时产生的相干散射波，在某些方向相互加强，而在某些方向相互减弱，称这种散射波干涉的总结果为衍射

- ◆ 可以把晶体中每个原子都看作一个新的散射波源，它们各自向空间辐射与入射波同频率的电磁波。
- ◆ 由于这些散射波之间的干涉作用，使得空间某些方向上的波则始终保持相互叠加，于是在这个方向上可以观测到衍射线，而另一些方向上的波则始终是互相抵消的，于是就没有衍射线产生。





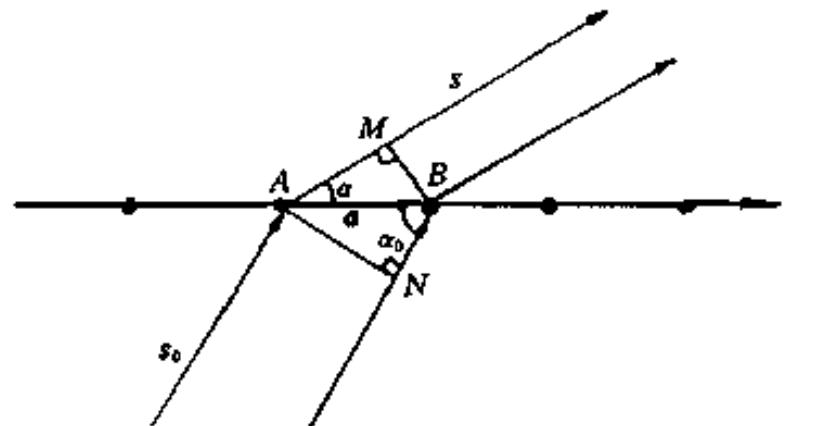
X射线衍射方向？

- 晶体必须满足适当的几何条件才能产生衍射。
- 决定晶体衍射方向的基本方程有劳埃 (Laue) 方程或布拉格 (Bragg) 方程。
- 衍射线的**方向与晶胞大小和形状有关**。



劳埃方程

劳厄方程 —— 把空间点阵看作互不平行又相互贯穿的三组直线点阵，从研究直线点阵衍射条件出发得到了立体点阵结构产生衍射的条件



一维劳埃方程的导出

设 s_0 及 s 分别为入射线及任意方向上原子散射线单位矢量， a 为点阵基矢， α_0 及 α 分别为 s_0 与 a 及 s 与 a 之夹角，则原子列中任意两相邻原子（A与B）散射线间光程差 (δ) 为

$$\delta = AM - BN = a \cos \alpha - a \cos \alpha_0$$



- 散射线干涉一致加强的条件为 $\delta=H\lambda$, 即

$$a(\cos\alpha - \cos\alpha_0) = H\lambda$$

- 式中: H ——任意整数。
- 此式表达了单一原子列衍射线方向 (α) 与入射线波长 (λ) 及方向 (α_0) 和点阵常数的相互关系, 称为一维劳埃方程。



三维劳埃方程

晶体中原子是在三维空间上排列的，所以为了产生衍射，必须同时满足

$$a(\cos\alpha - \cos\alpha_0) = H\lambda$$

$$b(\cos\beta - \cos\beta_0) = K\lambda$$

$$c(\cos\gamma - \cos\gamma_0) = L\lambda$$



布拉格方程

- 用劳厄方程描述x射线被晶体的衍射现象时，入射线、衍射线与晶轴的六个夹角不易确定，用该方程组求点阵常数比较困难。所以，劳厄方程虽能解释衍射现象，但使用不便。1912年英国物理学家布拉格父子（Bragg, W. H. & Bragg, W. L.）从x射线被原子面“反射”的观点出发，推出了非常重要和实用的布拉格定律。
- 可以说，劳厄方程是从原子列散射波的干涉出发，去求X射线照射晶体时衍射线束的方向，而布拉格定律则是从原子面散射波的干涉出发，去求x射线照射晶体时衍射线束的方向，两者的物理本质相同。

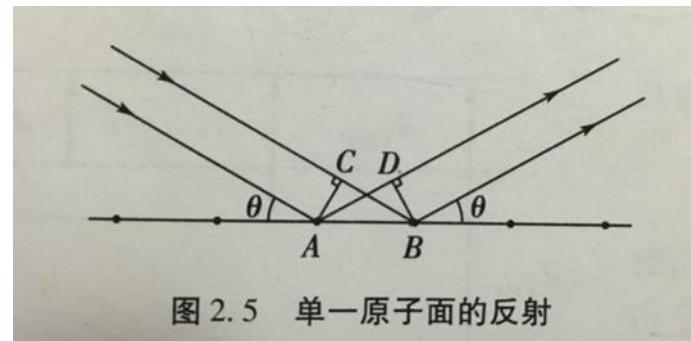


图 2.5 单一原子面的反射



布拉格方程的推导

模型的简化：

- ① 晶体结构的周期性，可将晶体视为由许多相互平行且晶面间距 (d) 相等的原子面组成；
- ② X射线具有穿透性，可照射到晶体的各个原子面上；
- ③ 光源及记录装置至样品的距离比 d 数量级大得多，故入射线与反射线均可视为平行光。

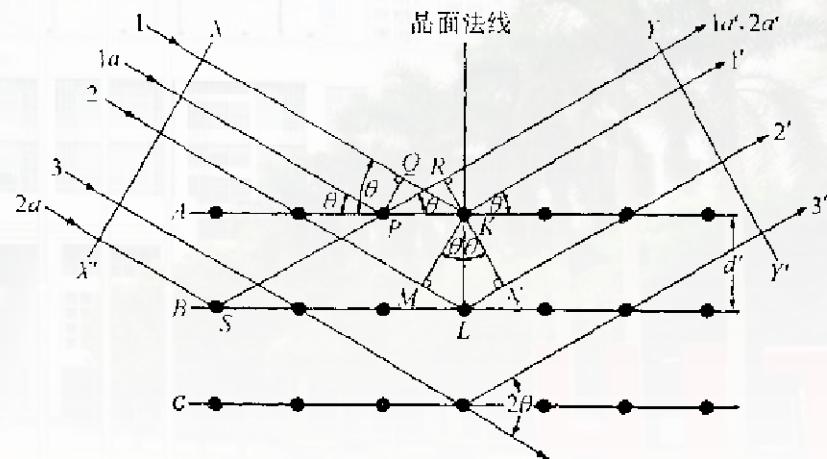
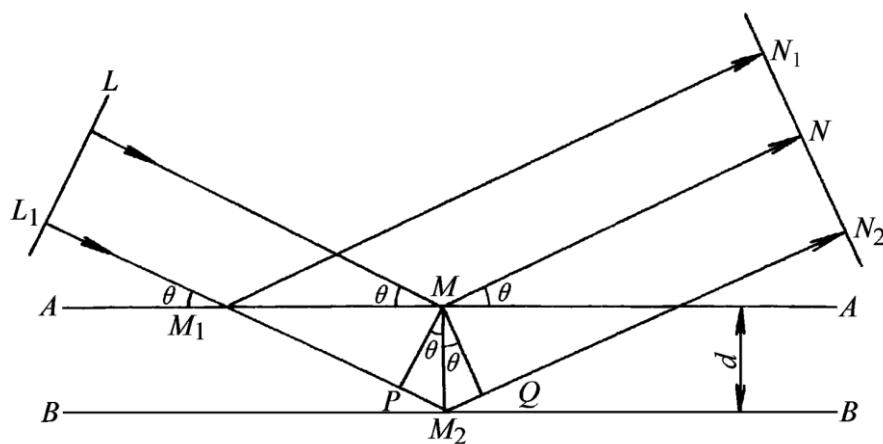


图 2-11 晶体对 X 射线的衍射

第二节 布拉格方程

一、布拉格方程的导出

如图2-7，在 LL_1 处为同相位的一束单色平行X射线，以 θ 角照射到原子面AA上，在反射方向到达 NN_1 处为同光程；入射线 LM 照射到AA晶面的反射线为 MN ，入射线 L_1M_1 照射到相邻晶面BB的反射线为 M_2N_2 ，它们到达 NN_1 处的光程差



$$\delta = PM_2 + QM_2 = 2ds\sin\theta$$

若X射线波长为 λ ，则相互加强的条件为

$$2ds\sin\theta = n\lambda \quad (2-7)$$

此式即为著名的布拉格方程

图2-7 布拉格方程的导出

第二节 布拉格方程

二、布拉格方程的讨论

- 布拉格方程 $2d\sin\theta = n\lambda$ 中，入射线(或反射线)与晶面间的夹角 θ 称为掠射角或布拉格角；入射线和衍射线之间的夹角 2θ 称为衍射角； n 称为反射级数
- 将衍射看成反射是布拉格方程的基础。X射线的晶面衍射和光的镜面反射有所不同，X射线只有在满足布拉格方程的 θ 方向才能反射，因此称选择反射
- 布拉格方程简单明确地指出获得X衍射的必要条件和衍射方向，给出了 d 、 θ 、 n 和 λ 之间的关系

第二节 布拉格方程

二、布拉格方程的讨论

1. 反射级数

如图2-8，若X射线照射到晶体的(100)时，恰好能发生2级反射，则有 $2d_{100}\sin\theta = 2\lambda$ ；设想在(100)面中间均插入与其完全相同的(200)面，可以把(100)的2级反射看作是(200)的1级反射，则

布拉格方程为 $2d_{200}\sin\theta = \lambda$ ；又可写成， $2(d_{100}/2)\sin\theta = \lambda$ ，即

$$2\frac{d}{n}\sin\theta = \lambda$$

或 $2d \sin\theta = \lambda$ (2-10)

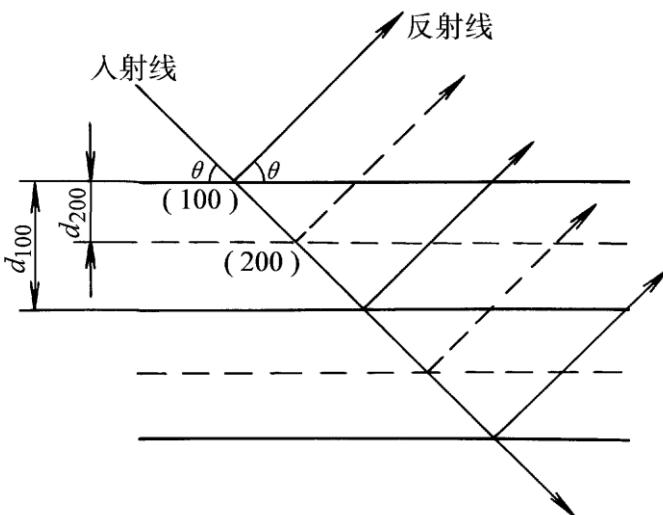


图2-8 2级反射示意图

二、布拉格方程的讨论

2. 干涉面指数

- 把晶面 (hkl) 的 n 级反射面 $n(hkl)$ 用符号 (HKL) 表示，称为反射面或干涉面
- (hkl) 是晶体中实际存在的晶面， (HKL) 只是为了简化问题而引入的虚拟晶面
- 干涉面指数称为干涉指数， $H=nh$, $K=nk$, $L=nl$, 当 $n=1$ 时，干涉面指数即为晶面指数
- 在X射线结构分析中，一般使用干涉面的面间距

第二节 布拉格方程

二、布拉格方程的讨论

3.掠射角

- 猎射角 θ 是入射线(或反射线)与晶面间夹角，一般用于表征衍射方向
- 当 λ 一定时， d 相同的晶面必然在 θ 相同的方向才能获得反射。用单色X射线照射多晶体时，各晶粒 d 相同的晶面，其反射方向(θ)相同
- 当 λ 一定时， θ 随 d 值减小而增大，说明间距较小的晶面对应于较大的掠射角，否则其反射线就无法加强

第二节 布拉格方程

二、布拉格方程的讨论

4. 衍射极限条件

- 猥射角 θ 极限范围是 $0\sim90^\circ$ ，但过大和过小均会造成衍射观测的困难。由于 $|\sin\theta|\leq 1$ ，使得反射级数 n 或干涉面间距 d 受到限制
- 当 d 一定时， n 随 λ 较小而增大，采用短波长X射线照射，可获得较高级数的反射
- 因 $d\sin\theta=\lambda/2$ ，故 $d\geq\lambda/2$ ，说明只有间距大于或等于X射线半波长的干涉面才能参与反射，采用短波长的X射线照射时，参与反射的干涉面将会增多



布拉格定律的讨论——

衍射的限制条件

- 例如的一组晶面间距从大到小的顺序： 2.02\AA , 1.43\AA , 1.17\AA , 1.01\AA , 0.90\AA , 0.83\AA , 0.76\AA当用波长为 $\lambda_{k\alpha}=1.94\text{\AA}$ 的铁靶照射时, 因 $\lambda_{k\alpha}/2=0.97\text{\AA}$, 只有四个d大于它, 故产生衍射的晶面组有四个。如用铜靶进行照射, 因 $\lambda_{k\alpha}/2=0.77\text{\AA}$, 故前六个晶面组都能产生衍射。

第二节 布拉格方程

二、布拉格方程的讨论

5. 应用

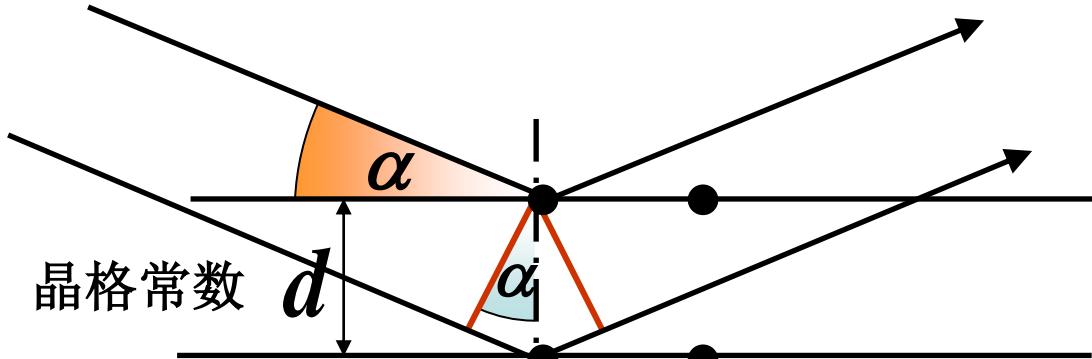
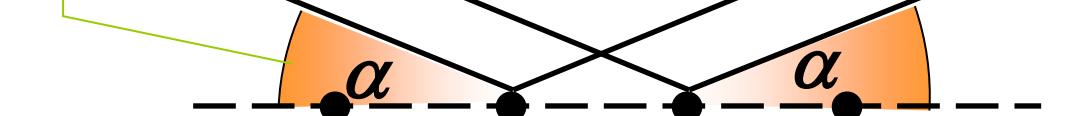
- 布拉格方程是X射线衍射分析中最重要的基础公式，能简单方便地说明衍射的基本关系
- 用已知波长 λ 的X射线照射晶体，通过衍射角 2θ 的测量计算晶体中各晶面的面间距 d ，这就是X射线结构分析
- 用已知面间距 d 的晶体反射样品激发的X射线，通过衍射角 2θ 的测量计算X射线的波长 λ ，这就是X射线光谱分析

掠射角

布拉格实验（1913年）

原子受迫振动
发出电磁波。

只有一层原子，反
射方向必加强。



布拉格公式

$$2d \sin \alpha = n\lambda \quad (n = 1, 2, 3 \dots)$$

$$d \rightarrow \lambda$$

伦琴射线
波谱学

$$\lambda \rightarrow d$$

晶体结
构分析

什么是X射线衍射

What is X-ray Diffraction?

Bragg's Law & X-ray Diffraction Animation



第二节 布拉格方程

三、倒易空间的衍射方程及爱瓦尔德图解

图2-9表明，入射线与衍射线的单位矢量与之差垂直于衍射面，且其绝对值为： $|k' - k| = 2 \sin \theta$ ，代入布拉格方程得

$$|k' - k| = \frac{\lambda}{d_{hkl}} \quad (2-11)$$

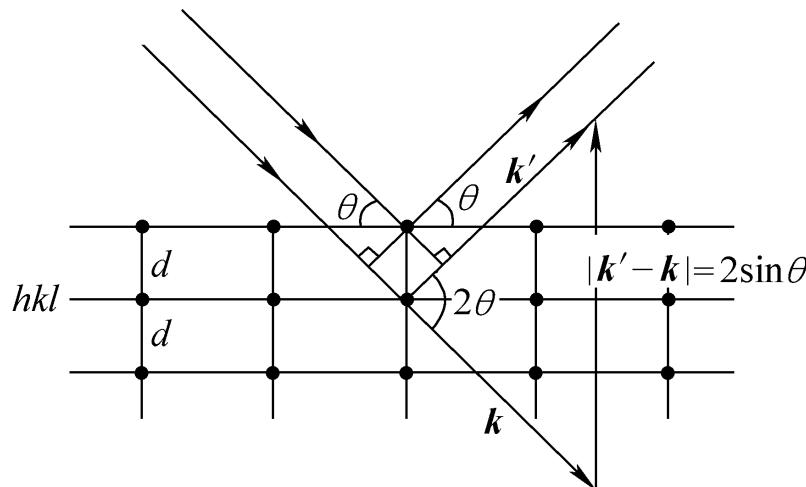


图2-9 入射矢量 k 与衍射矢量 k' 的关系

即矢量 $g_{hkl} = k' - k$ 垂直于衍射面 (hkl)，且绝对值等于晶面间距的倒数，这一结果把我们引入一个解决衍射问题的矢量空间——倒易空间

第二节 布拉格方程

三、倒易空间的衍射方程及爱瓦尔德图解

(一) 倒易点阵的定义和性质

- 通常把晶体点阵（正点阵）所占据的空间称为正空间。所谓倒易点阵，是指在倒空间(量纲为 $[L]^{-1}$)内与某一正点阵相对应的另一个点阵
- 倒易点阵是爱瓦尔德在1924年建立的一种晶体学表达方法
- 正点阵和倒易点阵是在正、倒两个空间内相互对应的统一
体，它们互为倒易而共存
- 倒易点阵十分巧妙地、正确地反映晶体点阵周期性的物理
本质，是解析晶体衍射的理论基础，是衍射分析工作不可
缺少的工具

Ewald与倒易点阵

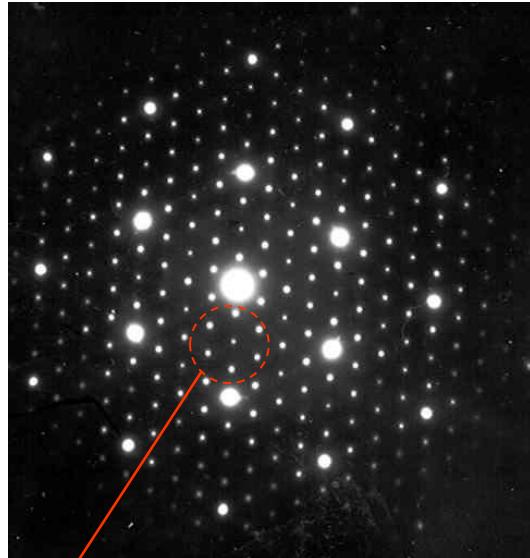


1912年提出了倒易点阵
及图示解释了劳厄衍射
斑点。



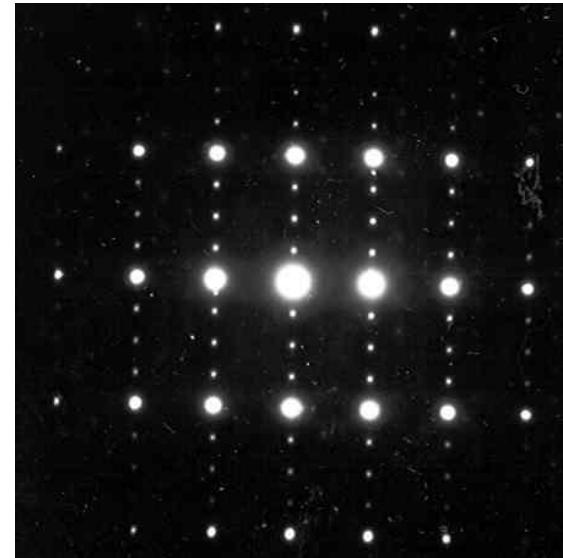
- Paul Peter Ewald, FRS (January 23, 1888 in Berlin, Germany – August 22, 1985 in Ithaca, New York) was a German-born U.S. crystallographer and physicist, a pioneer of X-ray diffraction methods.

倒易点阵



Superlattice spots

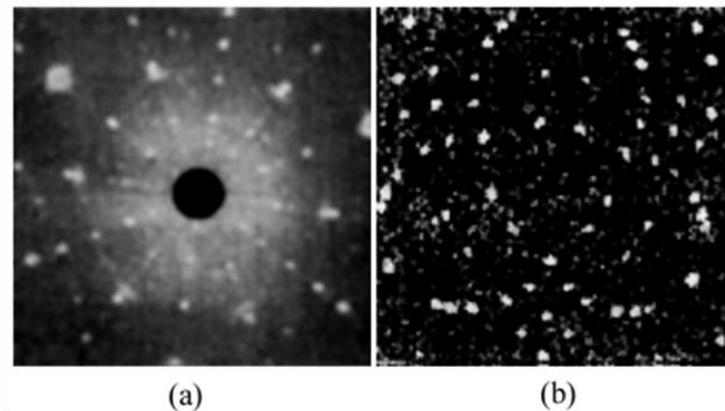
[111]



[112]

晶体的衍射结果是一些有规则排列的点，这些点正好和倒易点阵中的点相对应。因此衍射要引入倒易点阵。

SAD patterns from a BCC phase ($a = 10.7 \text{ \AA}$) in as-cast $\text{Mg}_4\text{Zn}_{94}\text{Y}_2$ alloy showing important zones



(a)

(b)

X射线通过红宝石晶体(a)和硅单晶体(b)所拍摄的劳尼斑照

为什么要引入倒易点阵？

因为晶体的衍射结果形成的点阵和倒易点阵相一致，因此要引入倒易点阵。

通过倒易点阵及厄瓦尔德反射球能更好的理解衍射的方向及衍射结果。

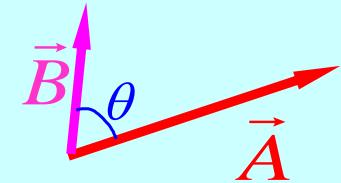
矢量的点乘与叉乘

矢量的标积（点积）

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = AB \cos \theta$$

$\vec{A} \cdot \vec{B} = \vec{B} \cdot \vec{A}$ ——矢量的标积符合交换律

$$\vec{A} \perp \vec{B} \implies \vec{A} \cdot \vec{B} = 0 \quad \vec{A} // \vec{B} \implies \vec{A} \cdot \vec{B} = AB$$



矢量 \vec{A} 与 \vec{B} 的夹角

(4) 矢量的矢积(叉积)

$$\vec{A} \times \vec{B} = \vec{e}_n AB \sin \theta$$

用坐标分量表示为

$$\vec{A} \times \vec{B} = \vec{e}_x (A_y B_z - A_z B_y) + \vec{e}_y (A_z B_x - A_x B_z) + \vec{e}_z (A_x B_y - A_y B_x)$$

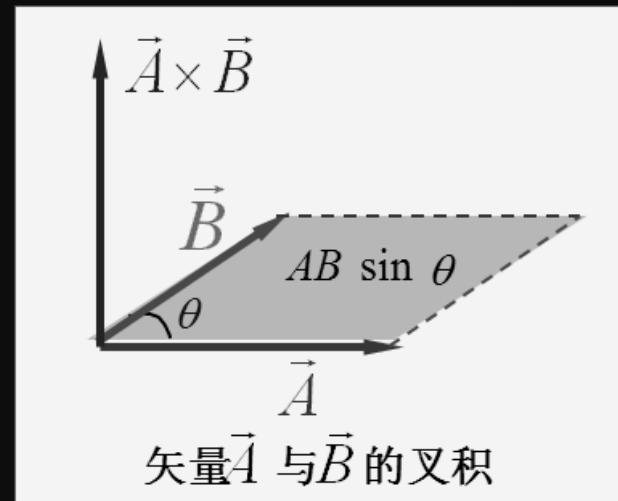
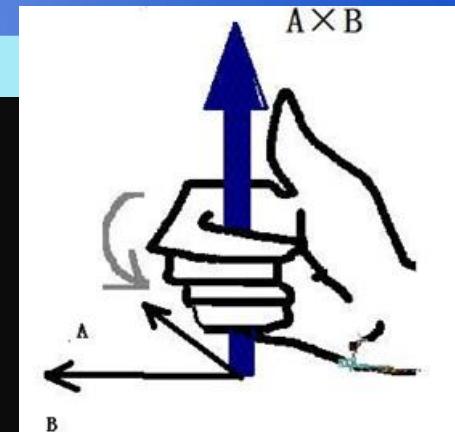
写成行列式形式为

$$\vec{A} \times \vec{B} = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix}$$

$$\vec{A} \times \vec{B} = -\vec{B} \times \vec{A}$$

若 $\vec{A} \perp \vec{B}$ ，则 $|\vec{A} \times \vec{B}| = AB$

若 $\vec{A} \parallel \vec{B}$ ，则 $|\vec{A} \times \vec{B}| = 0$



第二节 布拉格方程

三、倒易空间的衍射方程及爱瓦尔德图解

(一) 倒易点阵的定义和性质

1. 倒易点阵的定义

设正点阵的基本矢量为 a 、 b 、 c ，定义相应的倒易点阵基本矢量为 a^* 、 b^* 、 c^* ，则有

$$a^* = \frac{b \times c}{V}, \quad b^* = \frac{c \times a}{V}, \quad c^* = \frac{a \times b}{V} \quad (2-12)$$

式中， V 是正点阵单胞的体积，

$$V = a \cdot (b \times c) = b \cdot (c \times a) = c \cdot (a \times b)$$

第二节 布拉格方程

三、倒易空间的衍射方程及爱瓦尔德图解

(一) 倒易点阵的定义和性质

2. 倒易点阵的性质

1) 倒易点阵基本矢量

$$a^* \cdot b = a^* \cdot c = b^* \cdot a = b^* \cdot c = c^* \cdot a = c^* \cdot b = 0 \quad (2-13)$$

正倒点阵异名基矢点乘积为0，由此可确定倒易点阵基本矢量的方向

$$a^* \cdot a = b^* \cdot b = c^* \cdot c = 1 \quad (2-14)$$

正倒点阵同名基矢点乘积为1，由可确定倒易点阵基本矢量的大小，即

$$a^* = \frac{1}{a \cos(a^*, a)}, \quad b^* = \frac{1}{b \cos(b^*, b)}, \quad c^* = \frac{1}{c \cos(c^*, c)} \quad (2-15)$$

第二节 布拉格方程

三、倒易空间的衍射方程及爱瓦尔德图解

(一) 倒易点阵的定义和性质

2. 倒易点阵的性质

2) 倒易点阵矢量

在倒易空间内，由倒易原点 O^* 指向坐标为 hkl 的阵点矢量称倒易矢量，记为 g_{hkl}

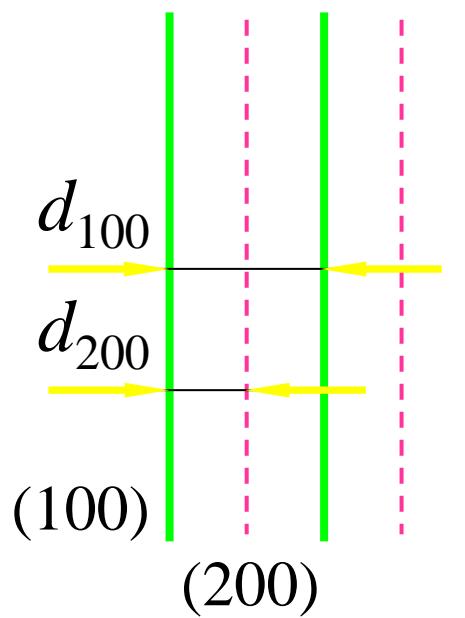
$$g_{hkl} = ha^* + kb^* + lc^* \quad (2-16)$$

倒易矢量 g_{hkl} 与正点阵中的 (hkl) 晶面之间的几何关系为

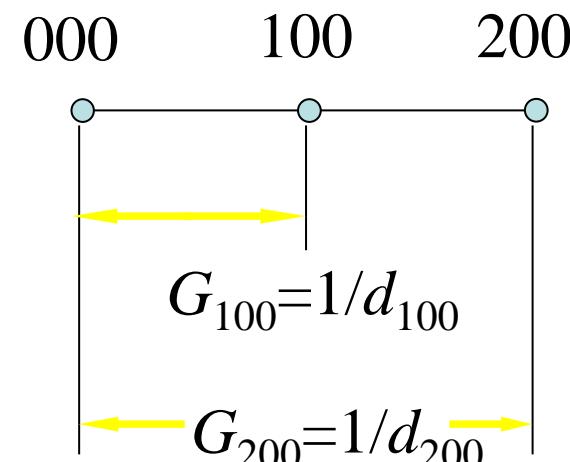
$$g_{hkl} \perp (hkl), \quad g_{hkl} = \frac{1}{d_{hkl}} \quad (2-17)$$

倒易矢量 g_{hkl} 可用以表征正点阵中的 (hkl) 晶面的特性(方位和晶面间距)

晶面与倒易矢量（倒易点）的对应关系



晶面



倒易结点

晶带与倒易点阵面

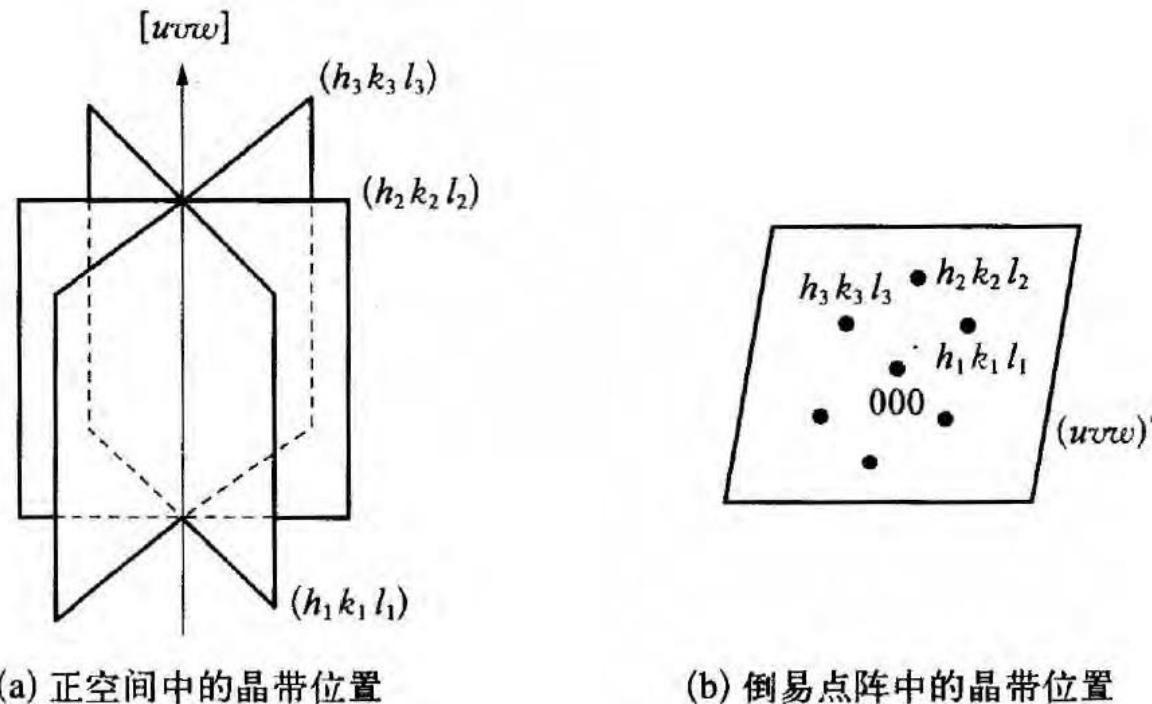


图 2-11 晶带位置

根据晶带的定义 $(h_i k_i l_i) // [uvw]$, 所以 $[h_i k_i l_i]^* \perp [uvw]$

第二节 布拉格方程

三、倒易空间的衍射方程及爱瓦尔德图解

(一) 倒易点阵的定义和性质

2. 倒易点阵的性质

3) 倒易球(多晶体倒易点阵)

- 单晶体的倒易点阵是由三维空间规则排列的阵点所构成，它与相应正点阵属于相同晶系
- 多晶体由无数取向不同的晶粒组成，其倒易点阵是由一系列不同半径的同心球面而构成
- 多晶体同族 $\{hkl\}$ 晶面的倒易矢量在三维空间任意分布，其端点的倒易阵点将落在以 O^* 为球心、以 $1/d_{hkl}(g_{hkl})$ 为半径的球面上

第二节 布拉格方程

三、倒易空间的衍射方程及爱瓦尔德图解

(二) 爱瓦尔德图解

由(2-11)式可得,

$$\frac{k' - k}{\lambda} = g_{hkl} \quad (2-18)$$

此式即为倒易空间的衍射方程

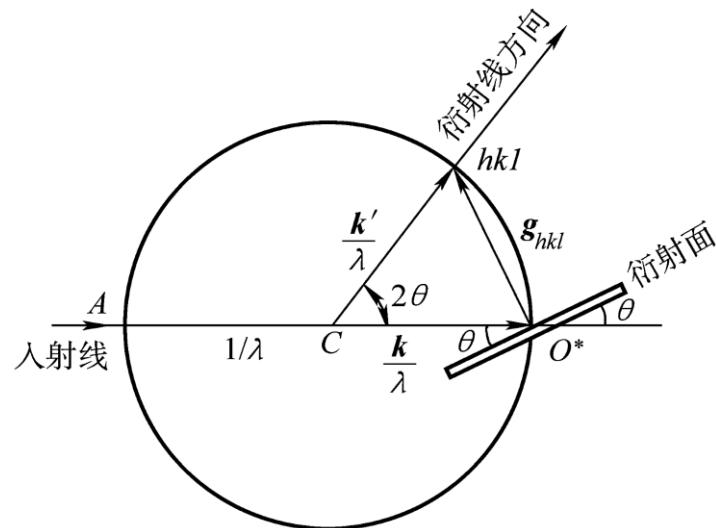
- 容易证明它与布拉格方程是等效的
- 当(hkl)面发生衍射时, 其倒易矢量 g_{hkl} 的 λ 倍等于入射线与衍射线的单位矢量之差 $k' - k$
- 矢量式(2-18)的几何图形表达形式, 即为爱瓦尔德图解

第二节 布拉格方程

三、倒易空间的衍射方程及爱瓦尔德图解

(二) 爱瓦尔德图解

如图2-10，入射矢量的端点指向倒易原点 O^* ，以入射方向上的C点作为球心，半径为 $1/\lambda$ 作球，球面过 O^* ，此即为爱瓦尔德(或反射球)



若某倒易点 hkl 落在反射球面上，该晶面将发生衍射，衍射线的方向由反射球心指向该倒易点

爱瓦尔德图解可直观地说明(hkl)晶面能否发生衍射、以及衍射线的方向

图2-10 爱瓦尔德图解

- 厄瓦尔德图解法的步骤：
- ① 作晶体的倒易点阵。 O^* 为倒易点阵的原点。
- ② 以 O^* 为末端，沿入射线方向作 OO^* ，且令 $\vec{OO^*} = S_0/\lambda$ 。（晶体位于 O 处）
- ③ 以 O 为球心，以 $1/\lambda$ 为半径画一球，即反射球。
- ④ 落在球面上的倒易点(如 G 点)对应的晶面就是可以产生衍射的晶面；
- ⑤ 连接反射球心 O 和 G 的矢量方向（即 OG 方向）就是产生的衍射线的方向。

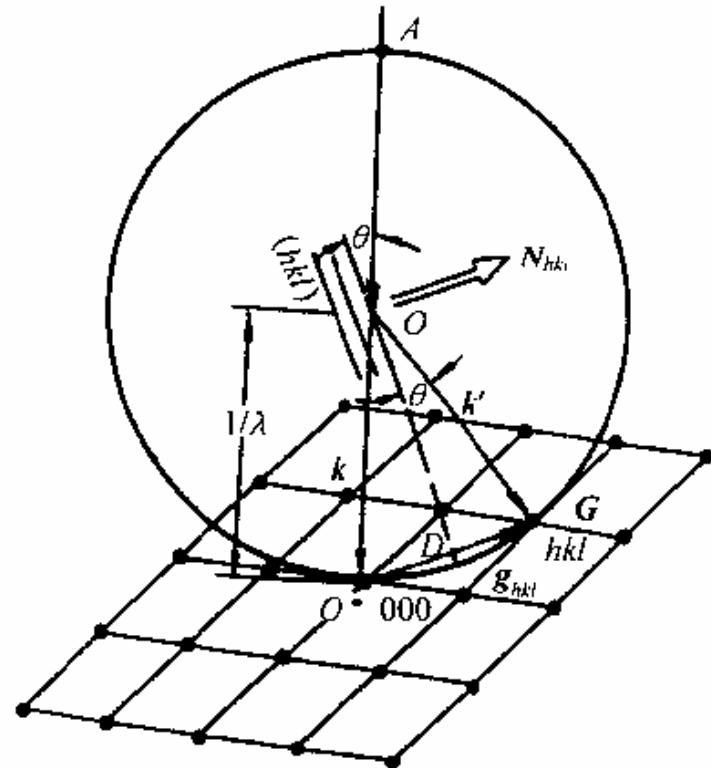


图 爱瓦尔德球作图法

Ewald sphere

Colorado School of Mines
Physics Department



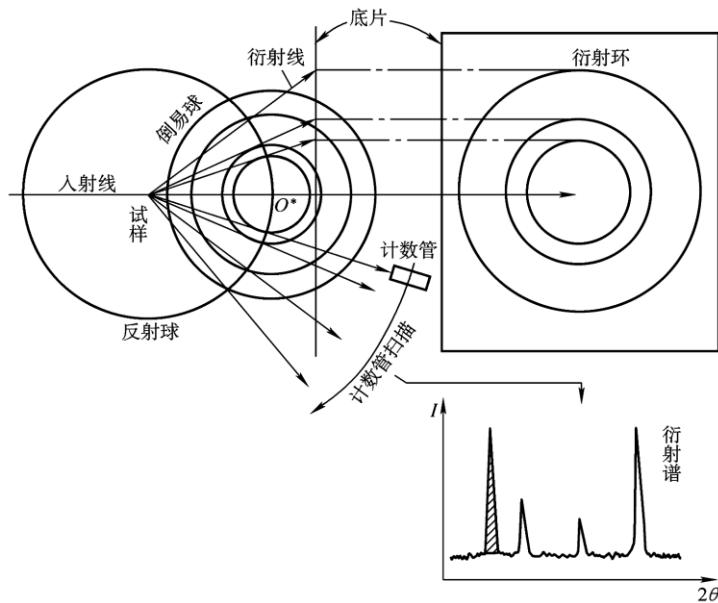
第二节 布拉格方程

三、倒易空间的衍射方程及爱瓦尔德图解

(三) 晶体衍射花样的特点

1) 单晶体衍射花样

用垂直于入射线放置的感光底片记录，单晶体衍射花样由规则排列的衍射斑点组成



2) 多晶体衍射花样

如图2-11，用垂直于入射线的底片记录，为一系列同心的衍射环；若用围绕试样的条形底片记录，为一系列衍射弧段；用绕试样扫描的计数管接收信号，则为一系列衍射谱线

图2-11 多晶体衍射花样的形成

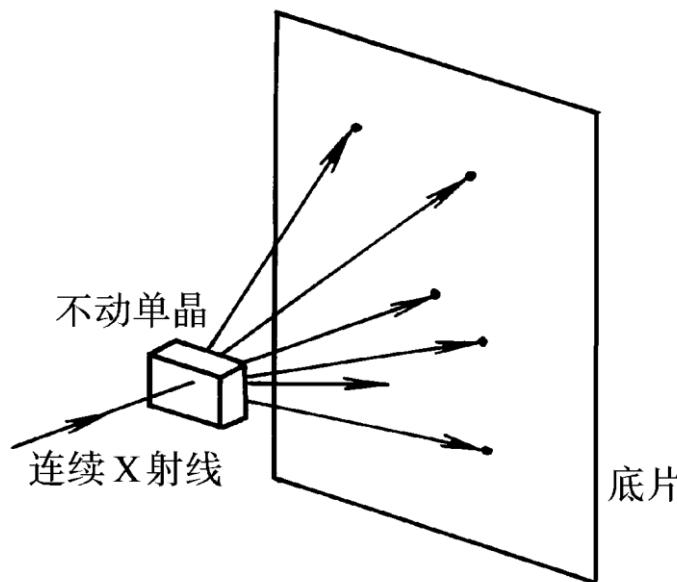


第三节 X射线衍射方法

一、劳埃法

劳埃法是最早的X射线衍射方法，采用连续X射线照射不动的单晶体，用垂直于入射线的平底板记录衍射线而得到劳

埃斑点，见图2-12。连续谱的波长范围为 $\lambda_0 \sim \lambda_m$ ，其中波长满足布拉格条件晶面将发生衍射



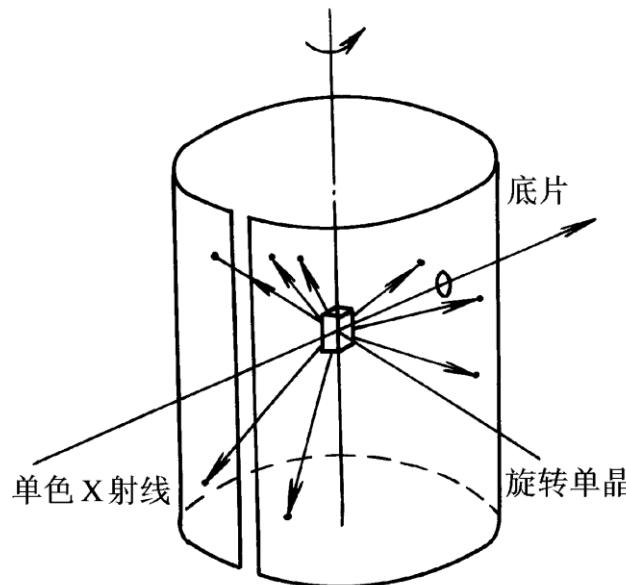
主要用于单晶取向测定及晶体对称性研究

图2-12 劳埃法

第三节 X射线衍射方法

二、周转晶体法

周转晶体法采用单色X射线照射转动的单晶体，并用以晶体旋转轴为轴线的圆筒形底板记录衍射花样，见图2-13。



晶体转动时，某晶面与 X 射线间夹角 θ 将连续变化，而在某些特定位臵满足布拉格条件而产生衍射斑点，衍射花样呈层线分布

主要用于单晶取向测定及晶体对称性研究

图2-13 周转晶体法

第三节 X射线衍射方法

三、粉末法

粉末法用单色X射线照射多晶试样，见图 2-14。粉末法是衍射分析中最常用的方法，可以用粉末试样或块状样品，其衍射花样能提供多种信息

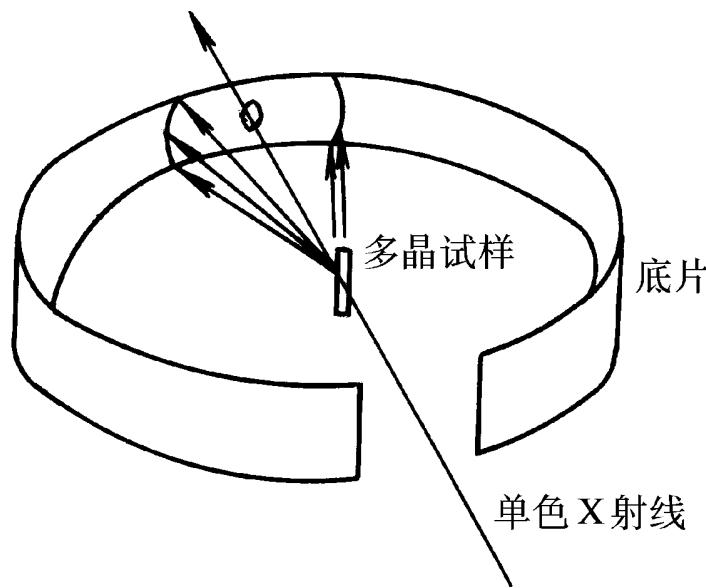


图2-14 粉末法示意图

可用于晶体结构测定、物相定性和定量分析、精确测定点阵参数、以及材料内应力、织构、晶粒尺寸等测定

粉末法是各种多晶体X射线分析的总称，其中德拜-谢乐最具典型性
目前最实用的方法是X射线衍射仪法



X射线衍射方法

| 方法 | 晶体 | λ | θ |
|-------|-----|-----------|----------|
| 劳埃照相法 | 单晶体 | 变化 | 不变化 |
| 周转晶体法 | 单晶体 | 不变化 | 变化 |
| 粉末法 | 多晶体 | 不变化 | 变化 |