



第二、三节

倒易点阵及X射线 衍射几何条件

X射线晶体衍射学的发展历程

■ 1895年伦琴发现X射线后，认为是一种波，但无法证明。

当时晶体学家对晶体构造（周期性）也没有得到证明。

■ 1912年劳埃和他学生厄瓦尔德产生了用晶体作为光栅的想法。

同年，劳埃将X射线用于 CuSO_4 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。

■ 布拉格父子首先利用X射线衍射测定了NaCl晶体的结构，提出更简洁的Bragg方程。

研究X射线衍射可归结为两方面的问题：

- ❖ 衍射方向和衍射强度。
- ❖ 衍射方向问题是依靠布拉格方程（或倒易点阵）的理论导出的；
- ❖ 衍射强度主要介绍多晶体衍射线条的强度，将从一个电子的衍射强度研究起，接着研究一个原子的、一个晶胞的以至整个晶体的衍射强度，最后引入一些几何与物理上的修正因数，从而得出多晶体衍射线条的积分强度。

主 要
内 容

倒易点阵

X射线衍射几何条件

X射线衍射方法

复习内容

- 晶体特性
- 晶体结构与空间点阵
- 倒易点阵

1. 晶体性质

- ❖ **均匀性**：晶体内部各个部分的宏观性质是相同的。
- ❖ **各向异性**：晶体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，各部分需要同样的温度。
- ❖ **规则外形**：理想环境中生长的晶体应为多边形。
- ❖ **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。

2. 14种布喇菲点阵

➤ **晶体(crystal)**: 原子在三维空间中规则排列而成的固体。

➤ **空间点阵 (Lattice)**: 在研究晶体结构时, 用几何点代替原子或原子团, 这种几何点构成与晶体中原子排布完全相同的骨架, 即为空间点阵。

注:

空间点阵上的阵点不只限于原子, 也可以是离子、分子或原子集团。

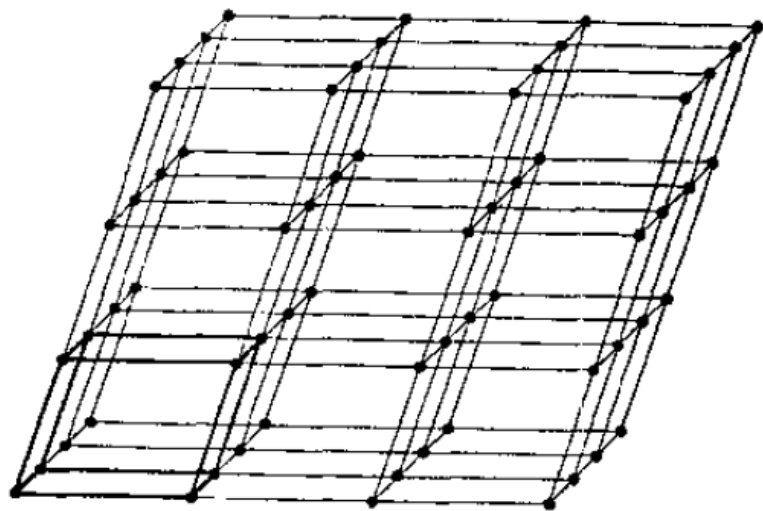


图 2-1 空间点阵示意图

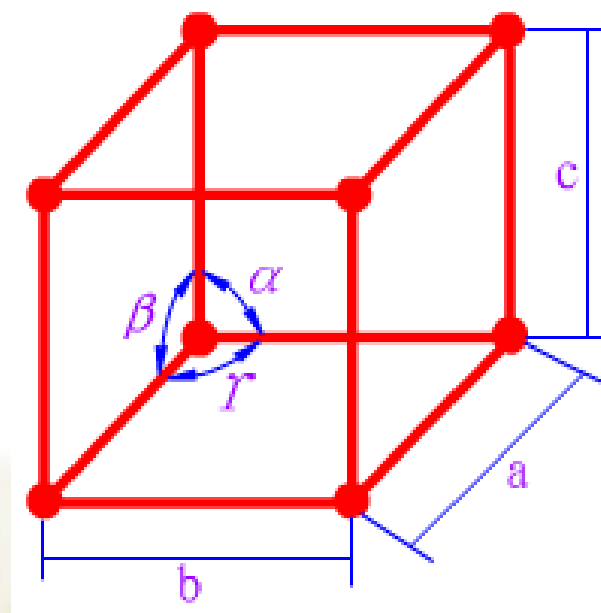
空间点阵可由单胞重复排列而得

❖ **单位晶胞 (Unit Cell)** : 在三个方向上的重复周期矢量 a 、 b 、 c 称为基本矢量。由基本矢量构成的平行六面体称为单位晶胞。其在三个方向上重复即可建立整个空间点阵。

选择依据:

- (1) 晶胞应最能反映出点阵的对称性;
- (2) 基本矢量长度 a 、 b 、 c 相等的数目最多; 三个方向的夹角应尽可能是直角;
- (3) 单胞体积最小。

根据这些条件选择出来的晶胞, 其几何关系、计算公式均最简单, 称为**布喇菲晶胞**。



单位晶胞

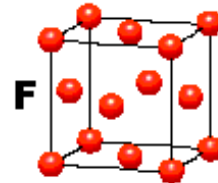
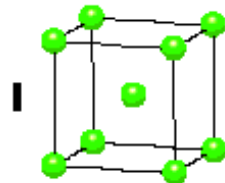
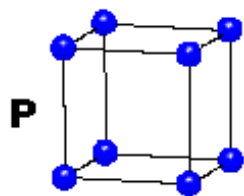
布喇菲晶胞:

The 14 possible BRAVAIS LATTICES

立方

CUBIC

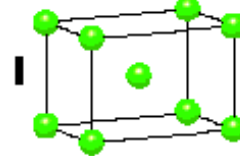
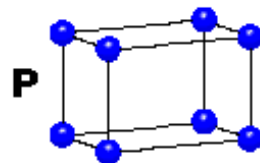
$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



正方

TETRAGONAL

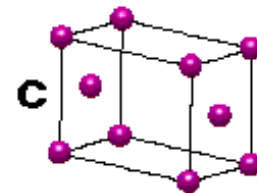
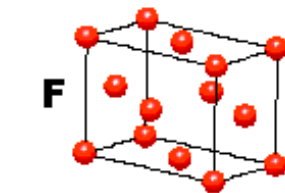
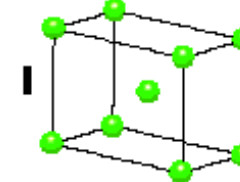
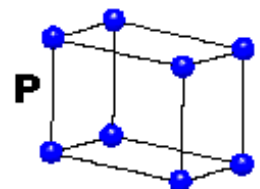
$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



斜方

ORTHORHOMBIC

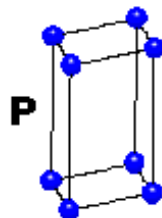
$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



六方

HEXAGONAL

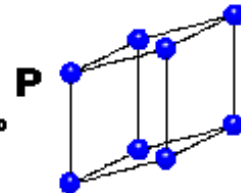
$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$
$$\gamma = 120^\circ$$



菱方

TRIGONAL

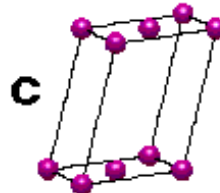
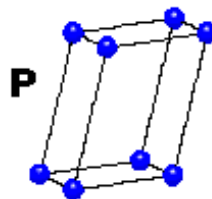
$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



单斜

MONOCLINIC

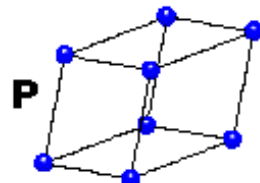
$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$
$$\beta \neq 120^\circ$$



三斜

TRICLINIC

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



4 Types of Unit Cell

P = Primitive

I = Body-Centred

F = Face-Centred

C = Side-Centred

+

7 Crystal Classes

→ **14 Bravais Lattices**

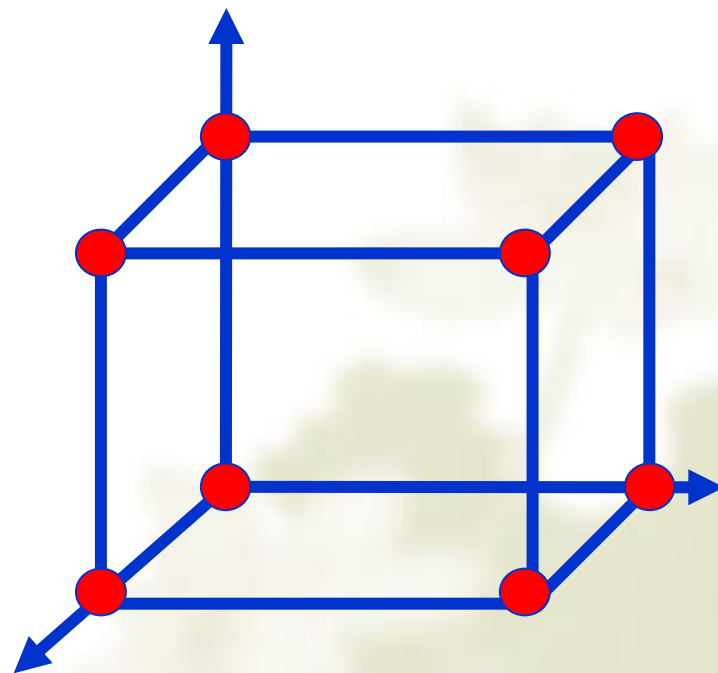
3. 点阵类型

◆ 阵点的坐标表示

● 以任意顶点为坐标原点，以与原点相交的三个棱边为坐标轴，分别用点阵周期（ a 、 b 、 c ）为度量单位。

◆ 四种点阵类型

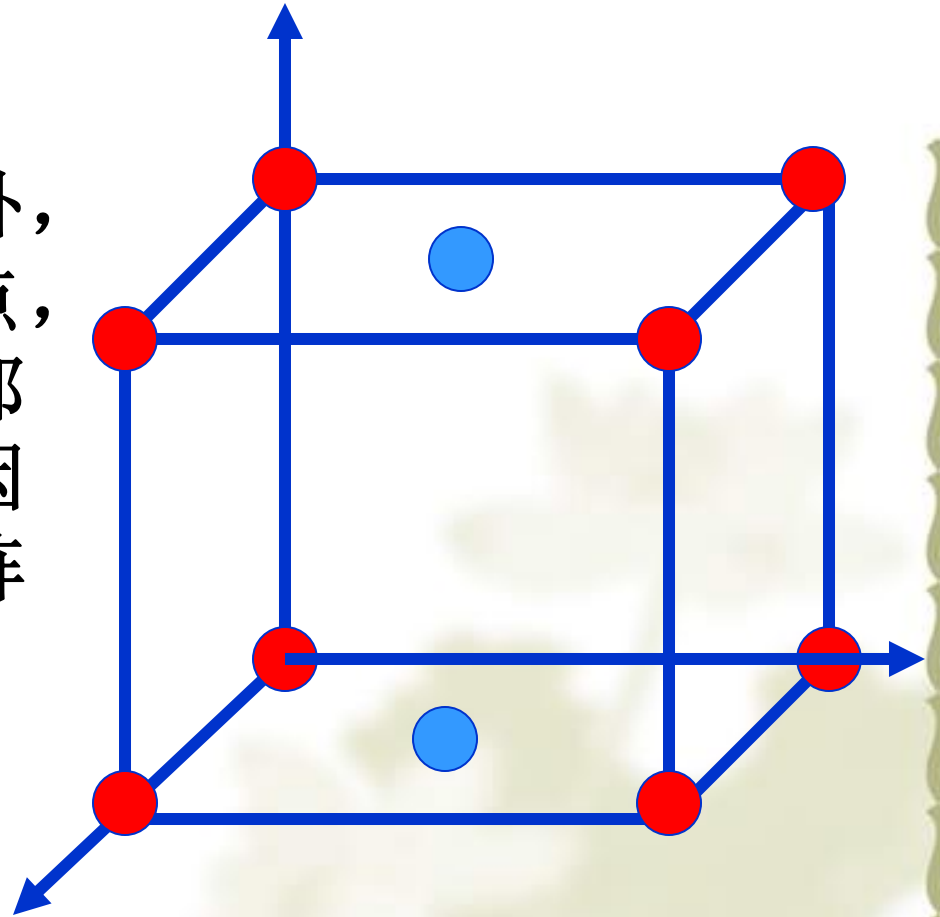
- 简单(**P**:primitive)
- 底心(**C**:side-centred)
- 体心(**I**:body-centred)
- 面心(**F**:face-centred)



◆ 简单点阵的阵点坐标为 $[000]$

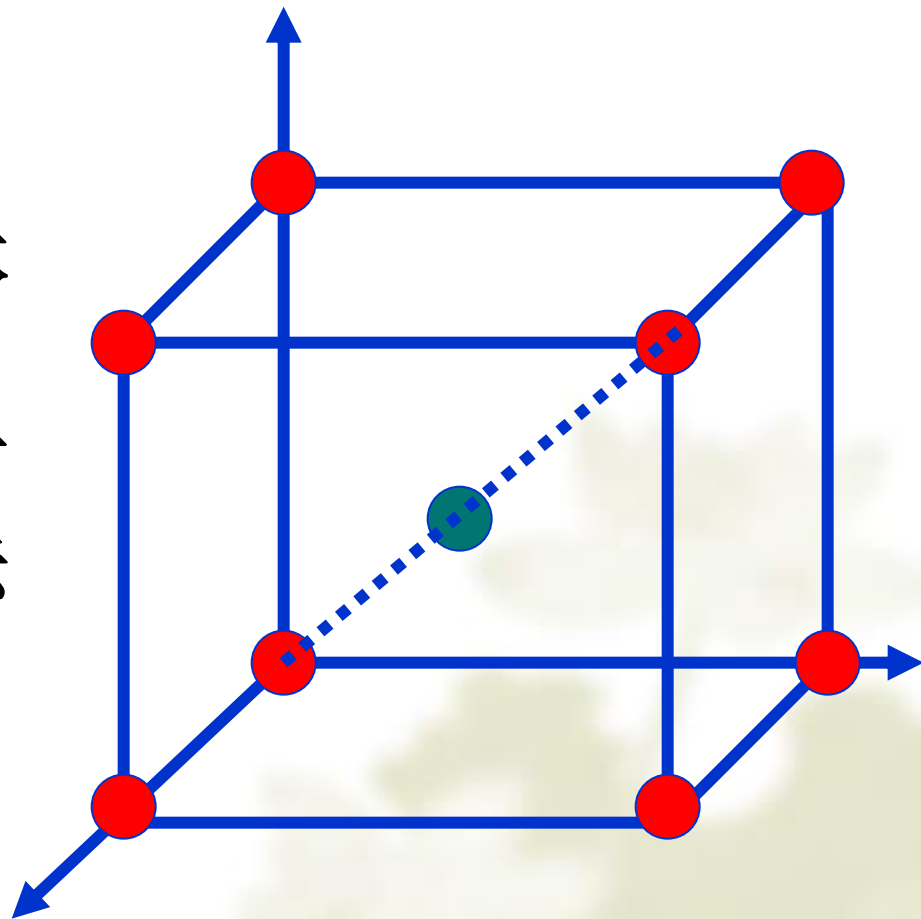
◆底心点阵C

除八个顶点上有阵点外，两个相对的面心上有阵点，面心上的阵点为两个相邻的平行六面体所共有。因此，每个阵胞占有两个阵点。阵点坐标为 $[000]$ ， $[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0]$



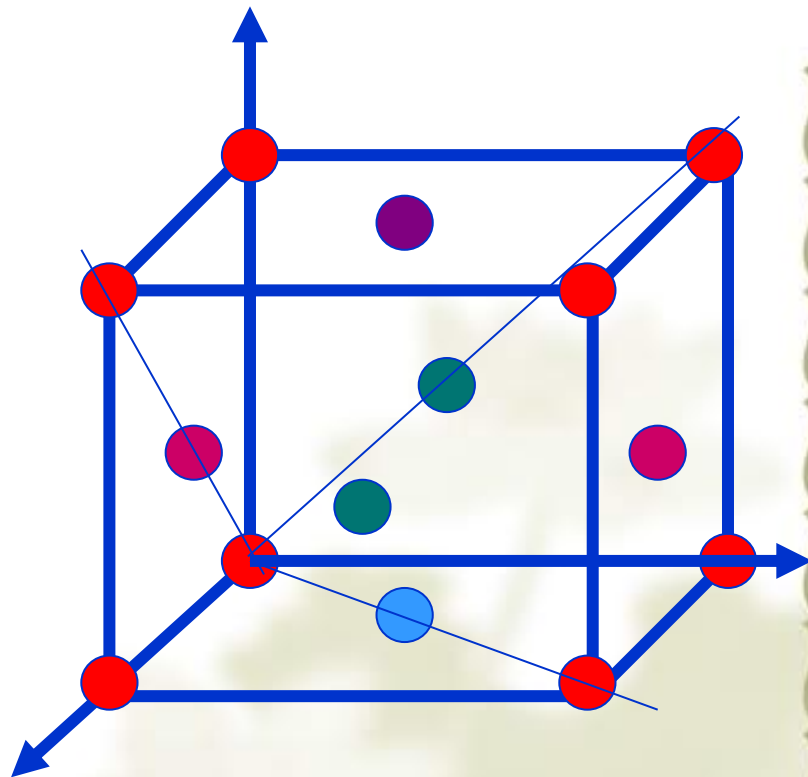
◆体心点阵I

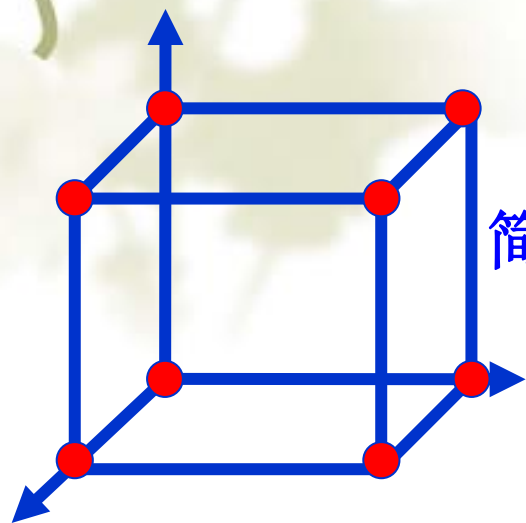
除8个顶点外，体心上还有一个阵点，因此，每个阵胞含有两个阵点，阵点坐标为 $[000]$ ， $[\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}]$



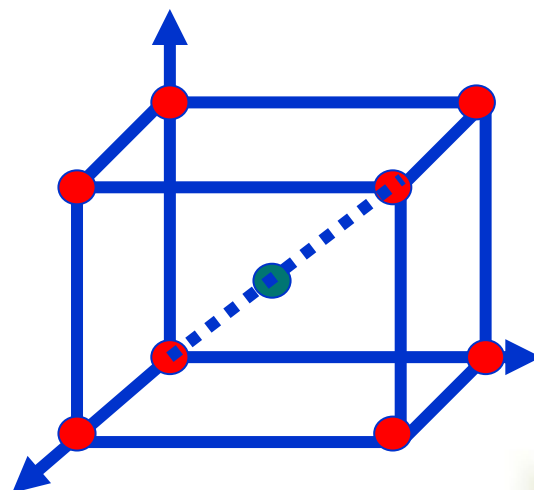
◆面心点阵F

除8个顶点外，每个面心上有一个阵点，每个阵胞上有4个阵点，其坐标分别为 $[000]$ ， $[1/2 \ 1/2 \ 0]$ ， $[1/2 \ 0 \ 1/2]$ ， $[0 \ 1/2 \ 1/2]$ 。

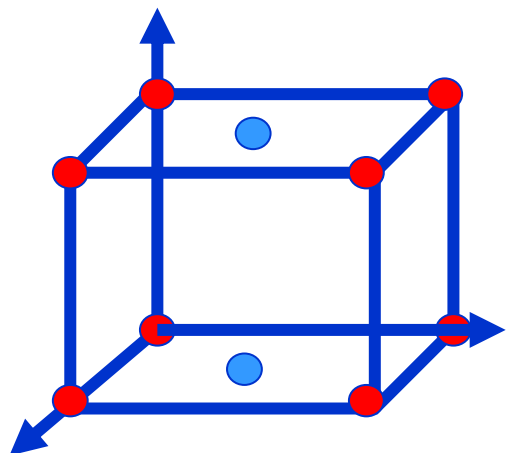




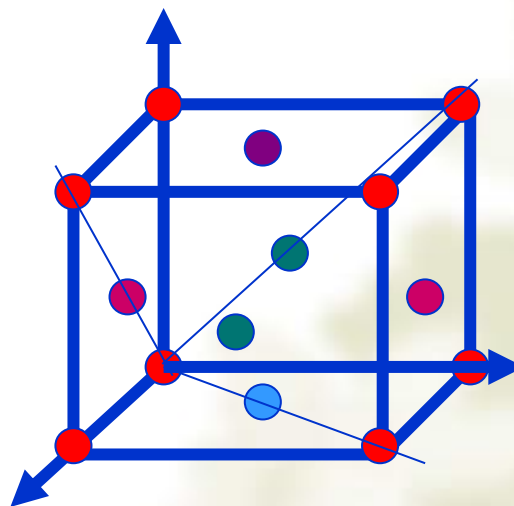
简单点阵(P)



体心点阵(I)



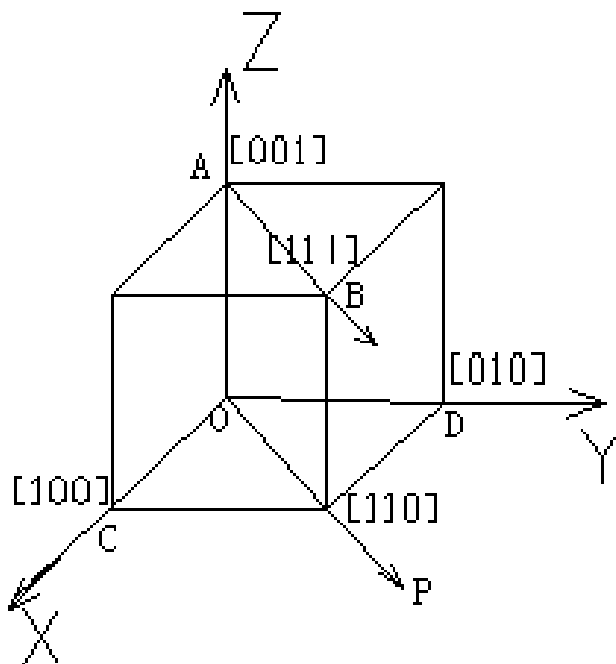
底心点阵(C)



面心点阵(F)

4. 晶体学指数—晶向指数

- ❖ (1) 通过坐标原点引一直线，使其平行于所求的晶向；
- ❖ (2) 求出该直线上任意一点的三个坐标值；
- ❖ (3) 将三个坐标值按比例化为最小整数，加一方括号，即为所求的晶向指数，其一般形式 $[uvw]$ 。



如：**AB**的晶向指数：过**O**作一平行直线**OP**，其上任一点的坐标**[110]**，这样所求**AB**的晶向指数即为**[110]**；

OB：本身过原点不必作平行线，其上任一点的坐标**[111]**，其晶向指数**[111]**；

OC：其上任一点**C**的坐标**[100]**，其晶向指数**[100]**。

同理：**OD**晶向指数**[010]**，**OA**为**[001]**。

晶向指数具有如下规律：

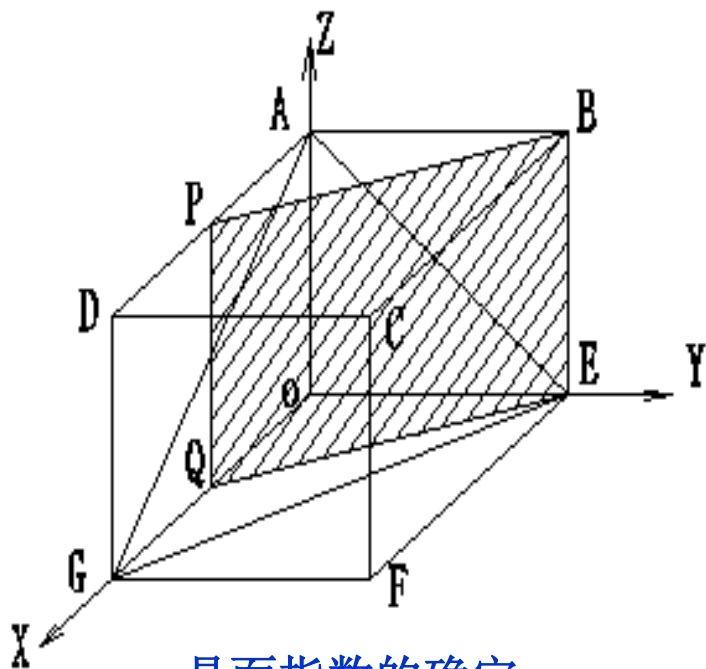
❖ 由于晶体的对称性，有些晶向上原子排列情况相同，因而性质也相同。晶体中原子排列情况相同的一组晶向称为**晶向族**，用 $\langle uvw \rangle$ 表示。

❖ 例如：

立方晶系中 $[111]$ ， $[-111]$ ， $[1-11]$ ， $[11-1]$ ， $[-1-11]$ ， $[1-1-1]$ ， $[-11-1]$ ， $[-1-1-1]$ 八个晶向是立方体中四个体对角线的方向，它们的原子排列完全相同，属于同一晶向族，用 $\langle 111 \rangle$ 表示。

5. 晶体学指数—晶面指数

❖ (1) 如图设晶格中，某一原子为原点，通过该点平行于晶胞的三棱边作 OX 、 OY 、 OZ 三坐标轴，以晶格常数 a 、 b 、 c 分别作为相应的三个坐标轴上的度量单位，求出所需确定的晶面在三坐标轴上的截距；



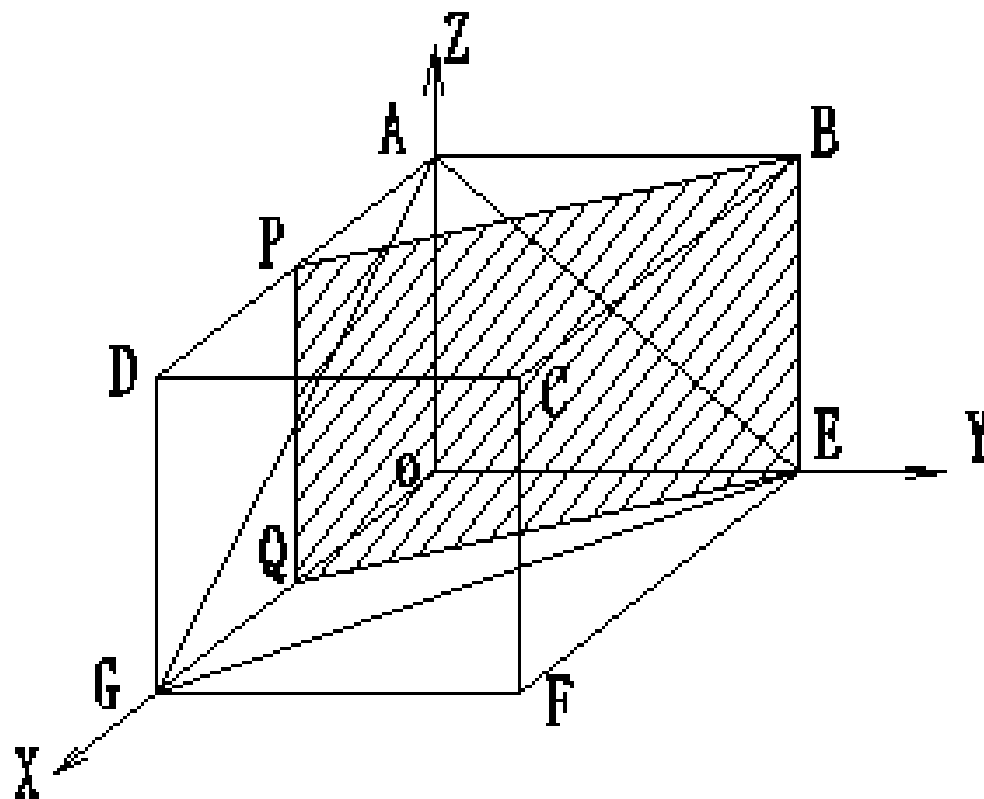
晶面指数的确定

(2) 将所得三截距之值变为倒数；
(3) 再将这三个倒数按比例化为最小整数并加上一圆括号，即为晶面指数。

一般表示形式： (hkl) 。

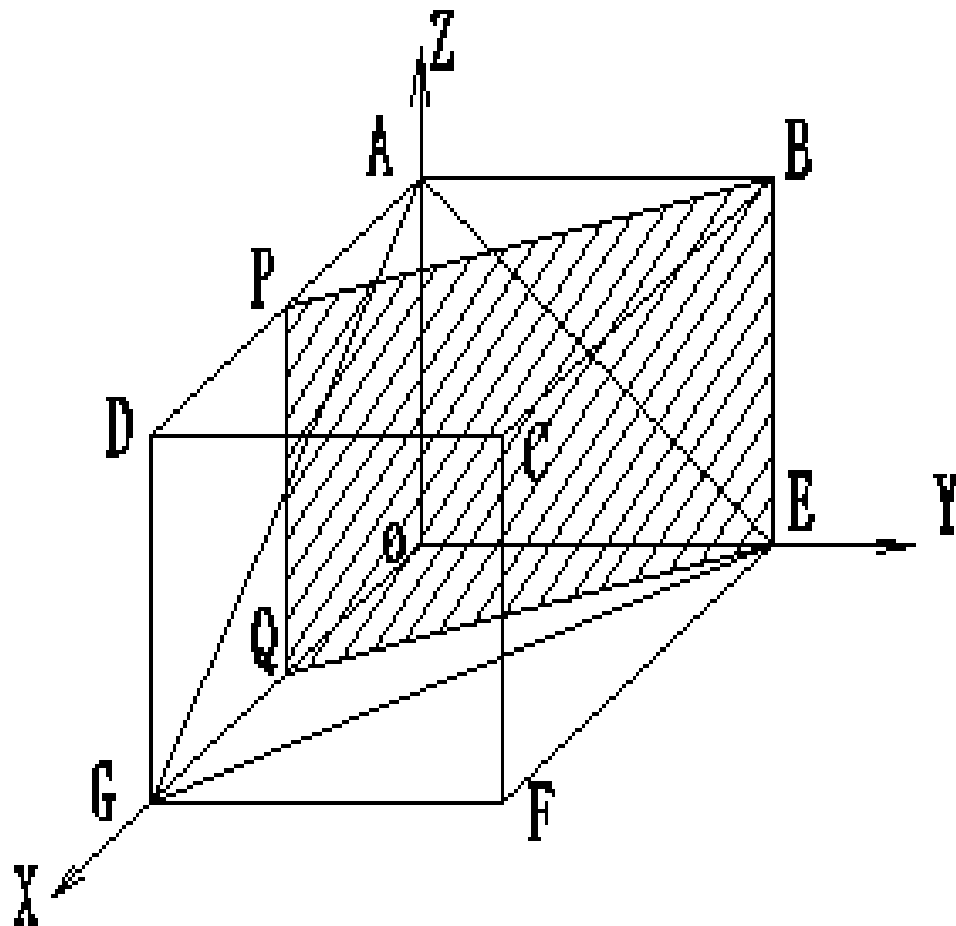
❖ 1. AGE面:
截距1, 1, 1;
倒数1, 1, 1,
晶面指数 (111)

❖ 2. PBEQ面:
截距是1/2, 1, ∞ ;
截距倒数是2, 1, 0;
晶面指数 (210)



❖ 3. DBEG面：
截距1, 1, ∞ ;
倒数 1, 1, 0,
晶面指数 (110)

❖ 4. DCFG面：
截距1, ∞ , ∞ ;
倒数1, 0, 0;
晶面指数 (100)



晶面指数具有如下规律：

- ❖ **晶面指数**，并非仅指一晶格中的某一个晶面，而是泛指该晶格中所有那些与其**相平行的位向相同的晶面**。
- ❖ 在一种晶格中，如果某些晶面，虽然它们的位向不同，但原子排列相同。如 (100) 、 (010) 及 (001) 等，这时若不必要予以区别时，可把这些晶面统一用 $\{100\}$ 表示。

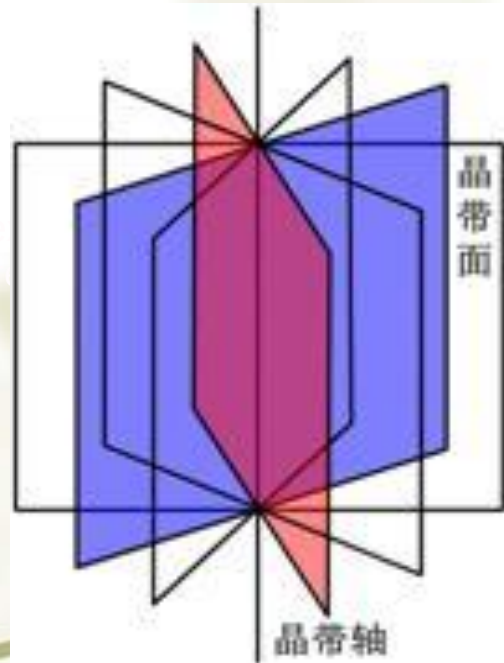
6. 晶带定律

- 在空间点阵中，所有平行于某一直线的一组晶面的组合称为一个晶带。或者说交线相互平行的一组晶面的组合称为一个晶带，这一直线就称为晶带轴。
- 已知一个晶面 (hkl) 和它所属的晶带轴指数 $[uvw]$ ，则由矢量代数可以证明晶带轴 $[uvw]$ 与该晶带的任一晶面 (hkl) 之间均具有下列关系：

$$hu + kv + lw = 0,$$

通常把这个关系式称为晶带定律。

注意，晶面指数与其法线的晶向指数实际上是一样的。



晶带定律的应用

在实际晶体中，立方晶系最为普遍，因此晶带定理有非常广泛的应用。

(1) 可以判断空间两个晶向或两个晶面是否**相互垂直**；

(2) 可以判断某一晶向是否在某一晶面上（或**平行**于该晶面）；

(3) 若已知晶带轴，可以判断**哪些晶面**属于该晶带；

(4) 若已知两个晶带面为 $(h_1 \ k_1 \ l_1)$ 和 $(h_2 \ k_2 \ l_2)$ ，则可用晶带定律求出**晶带轴**；

(5) 已知两个不平行的晶向，可以求出过这两个晶向的晶面；

(6) 已知一个晶面及其面上的任一晶向，可求出在该面上与该晶向垂直的另一晶向；

(7) 已知一晶面及其在面上的任一晶向，可求出过该晶向且垂直于该晶面的另一晶面。

晶带定律: $hu+kv+lw=0$

(1) 已知某晶带中任意两个晶面 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$, 则可通过下式求出该晶带的晶带轴方向 $[uvw]$:

$$\begin{cases} h_1u+k_1v+l_1w=0 \\ h_2u+k_2v+l_2w=0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} u &= k_1l_2 - k_2l_1 \\ v &= l_1h_2 - l_2h_1 \\ w &= h_1k_2 - h_2k_1 \end{aligned}$$

晶带定律: $hu+kv+lw=0$

(2) 已知某晶面同属于两个晶带 $[u_1v_1w_1]$ 和 $[u_2v_2w_2]$, 则可通过下式求出该晶面的晶面指数 (hkl) :

$$\begin{cases} hu_1 + kv_1 + lw_1 = 0 \\ hu_2 + kv_2 + lw_2 = 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} h &= v_1w_2 - v_2w_1 \\ k &= w_1u_2 - w_2u_1 \\ l &= u_1v_2 - u_2v_1 \end{aligned}$$

7. 晶面间距的计算

晶面间距：指相邻两个平行晶面之间的距离。

斜方(正交)晶系 $\Rightarrow d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$

正方晶系 $\Rightarrow d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$

立方晶系 $\Rightarrow d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$

六方晶系 $\Rightarrow d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2 + hk + k^2)/a^2 + l^2/c^2}}$

8. 晶面夹角的计算

同理可以得到晶面夹角的计算公式。

立方晶系的晶面夹角的计算公式：

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

倒易点阵

随着晶体学的发展，为了更清楚的说明衍射现象和晶体物理学方面的问题，**厄瓦尔德**在**1902**年首次引入了倒易点阵的概念。

倒易点阵是在晶体点阵的基础上按一定对应关系建立起来的空间几何图形，是晶体点阵的另一种表达形式，是一种**虚拟的数学工具**。

1. 定义式

2. 倒易点阵与正点阵的倒易关系

3. 倒易点阵参数:

$$a^*、b^*、c^*;$$

$$\alpha^*、\beta^*、\gamma^*$$

4. 倒易点阵矢量的性质

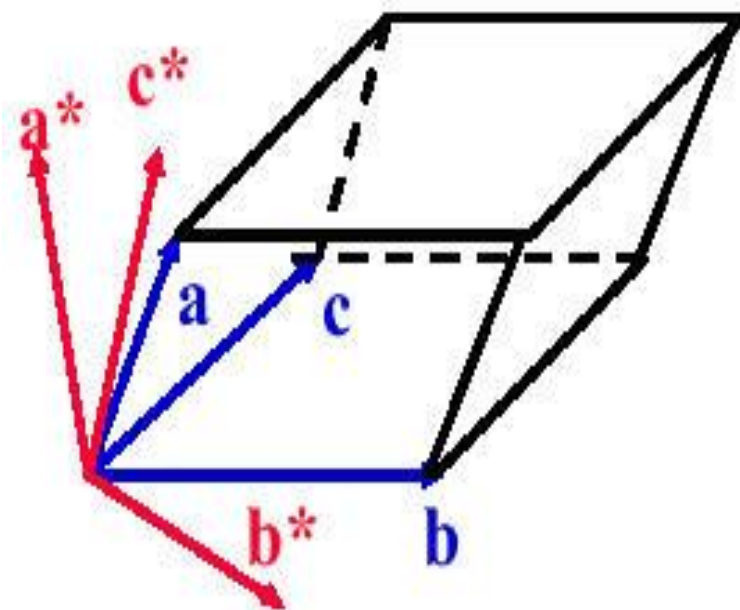
定义

设正点阵的原点为 O ，基矢为 a 、 b 、 c ；倒易点阵的原点为 O^* ，基矢为 a^* 、 b^* 、 c^* 。如有：

$$a^* = \frac{b \times c}{V}, b^* = \frac{c \times a}{V}, c^* = \frac{a \times b}{V}$$

式中： V 为点阵中的单胞体积。

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



倒易点阵与正点阵的倒易关系

- ◆ 正点阵基矢与倒易点阵基矢之间的关系：

$$a \cdot a^* = b \cdot b^* = c \cdot c^* = 1$$

$$a \cdot b^* = a \cdot c^* = b \cdot a^* = b \cdot c^* = c \cdot a^* = c \cdot b^* = 0$$

- ◆ 正倒点阵异名基矢点乘为0，同名基矢点乘为1。

- ◆ 正点阵的晶胞体积 $V = a (b \times c)$ 和倒易点阵晶胞基体 $V^* = a^* (b^* \times c^*)$ 具有互为倒数的关系：

$$V = 1/V^*$$

倒易点阵与正点阵的倒易关系

$$\left\{ \begin{array}{l} a^* = \frac{bc \sin \alpha}{V^*} \\ b^* = \frac{ca \sin \beta}{V^*} \\ c^* = \frac{ab \sin \gamma}{V^*} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \cos \alpha^* = \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\sin \beta \sin \gamma} \\ \cos \beta^* = \frac{\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta}{\sin \alpha \sin \gamma} \\ \cos \gamma^* = \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\sin \alpha \sin \beta} \end{array} \right.$$

倒易点阵的重要性质

- 在倒易点阵中，由倒易阵原点 O^* 指向任意坐标为 (hkl) 的阵点的矢量，称为倒点阵矢量 R_{hkl} 为：

$$R_{hkl} = ha^* + kb^* + lc^*$$

- 倒易矢量 R_{hkl} 垂直于正点阵中相应 (hkl) 晶面，或平行于它的法向 N_{hkl} 。
- 倒易点阵中的每一个倒易点代表正点阵中一个同指数的一组晶面，此面的法线为该倒易点矢量。

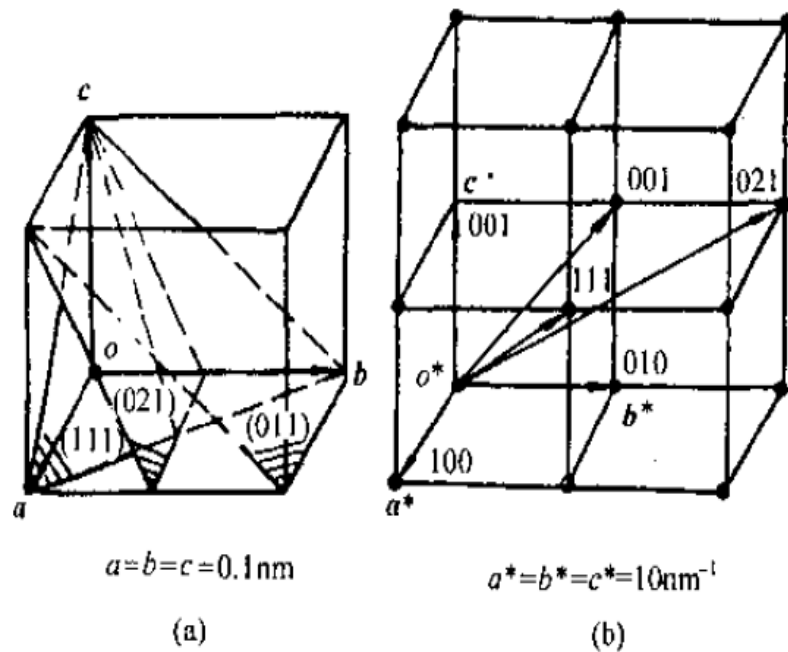


图 10-3 正点阵和倒易点阵的几何对应关系

- 倒易矢量的长度等于正点阵中相应晶面间距的倒数，即：

$$R_{hkl} = 1/d_{hkl}$$

- 对正交点阵有：

$$a \parallel a^*, b \parallel b^*, c \parallel c^*,$$

$$a^* = 1/a, b^* = 1/b, c^* = 1/c$$

- 只有在立方点阵中，晶面法向和同指数的晶向是重合（平行的），即：

$$R_{hkl} \parallel [hkl]$$

X射线衍射几何条件

(1) 底片上除存在连续的背景和透射光束造成的斑点外，存在其他的斑点；

(2) 该斑点的存在不在入射X射线方向上；

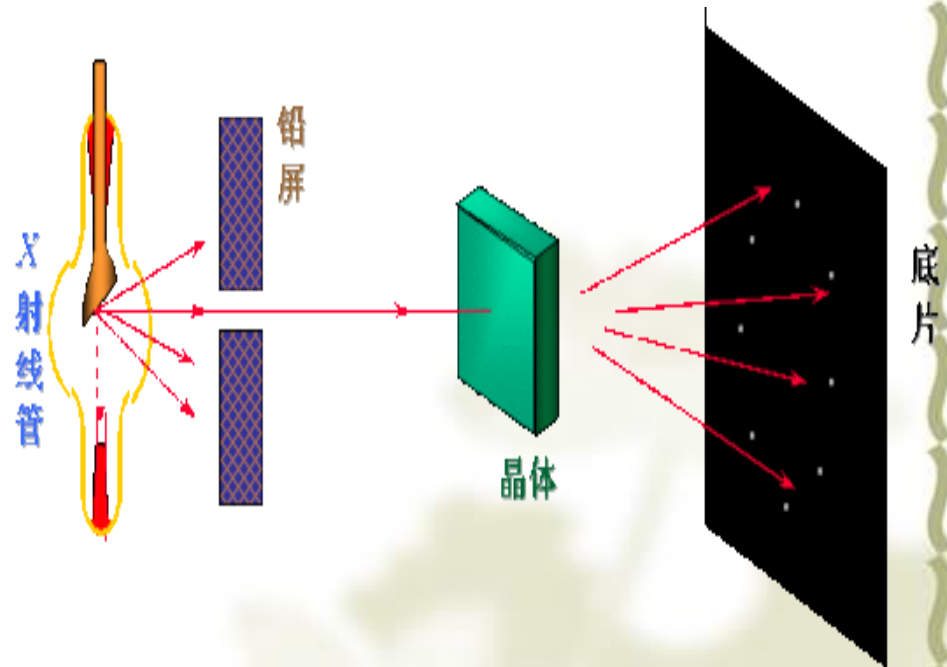
(3) 衍射方向决定于晶胞的大小和形状；

(4) 确定衍射方向的几种方法：

劳厄 (Laue) 方程；

布拉格 (Bragg) 方程；

厄瓦尔德 (Ewald) 作图法。

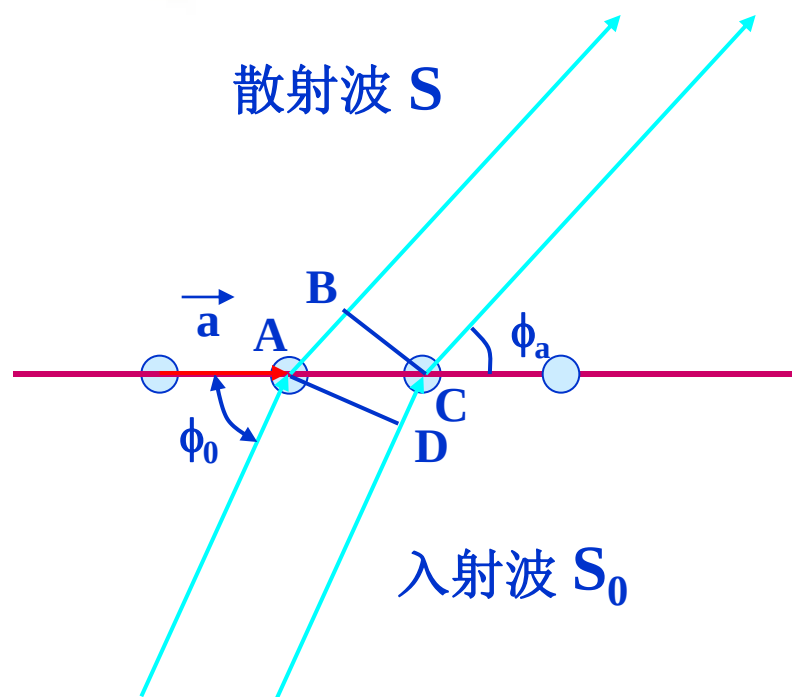


三点假设

- ❖ (1) 入射线与衍射线都是平面波。一般情况下，由于晶体与衍射线源及观察地点的具体远比原子间距大，因此实际上球面波可以近视的看成平面波。
- ❖ (2) 晶胞中仅一个原子，即晶胞是简单的。
- ❖ (3) 原子尺寸忽略不计，原子中各电子发出的相干散射是由原子中心发出的。

Laue方程

一维点阵的单位矢量为 a （即周期为 $|a|$ ），入射X光单位矢量为 S_0 ，散射单位矢量为 S ，两相邻散射线发生增强干涉现象的条件为光程差是波长的整倍数：



一维原子列的衍射

$$\delta = AB - DC = AC(\cos\phi_a - \cos\phi_0) = H\lambda$$

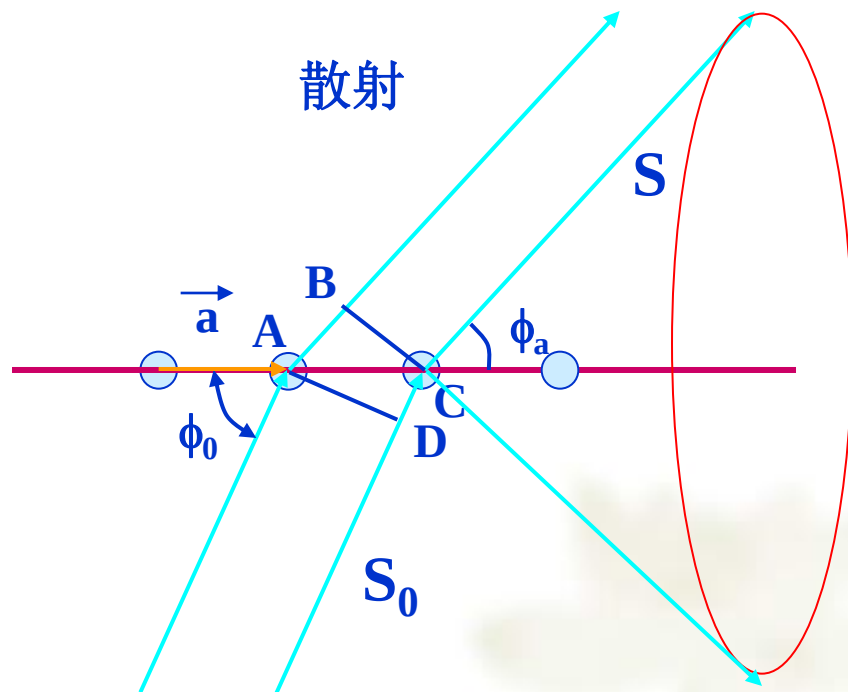
δ 为光程差， H 为衍射级数，其值为**0**， **± 1** ， **± 2**

Laue方程

$$AC (\cos\varphi_a - \cos\varphi_o) = H\lambda$$

$$a (\cos\varphi_a - \cos\varphi_o) = H\lambda$$

$$\cos\varphi_a = \cos\varphi_o + H\lambda/a$$



因此，只要 φ_a 角度满足上式便能产生衍射，衍射线将分布在以原子列为轴，以 φ_a 为半顶角的一系列圆锥面上，每一个 H 值对应一个圆锥。

三维Laue方程:

$$\begin{cases} a \cdot (\cos \phi_a - \cos \phi_{a0}) = H\lambda \\ b \cdot (\cos \phi_b - \cos \phi_{b0}) = K\lambda \\ c \cdot (\cos \phi_c - \cos \phi_{c0}) = L\lambda \end{cases}$$
$$\cos^2 \phi_a + \cos^2 \phi_b + \cos^2 \phi_c = 1$$

上式即为著名的Laue方程，是由Laue于1912年首先提出的，是确定衍射线方向的基本方程。

对于给定的一组 H 、 K 、 L 而言，上述方程组为由四个方程决定了三个变量，一般说来不一定有解。因此，只有选择适当的波长或选取适当的入射方向才能使方程得以满足。

重要结论

(1) 衍射如果发生，要求入射波长 λ ，入射角度 ϕ ，晶格参数 a, b, c 及晶面指数 (hkl) 之间相吻合。

(2) 衍射如果发生，衍射线的方向必定在入射线的反射方向，即可把衍射视为反射。

Bragg方程



布拉格
父子

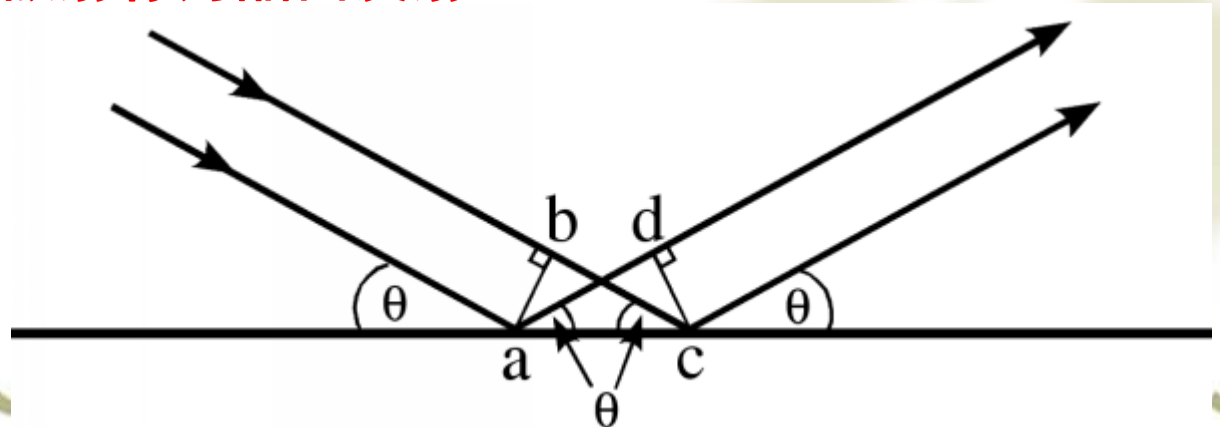
- **1912年**，布拉格父子（Bragg W. H. & Bragg W. L.）依照光在镜面反射规律出发，提出非常重要且更为实用的**布拉格定律**。
- 布拉格定律是从原子面散射波的干涉出发，去求X射线照射晶体时衍射线束的方向。

布拉格定律的推证

❖ 当 X 射线照射到晶体上时，考虑一层原子面上散射 X 射线的干涉。当 X 射线以角 θ 入射到原子面并以角 β 散射时，相距为 a 的两原子散射 X 射的光程差为：

$$\delta = a(\cos \theta - \cos \beta)$$

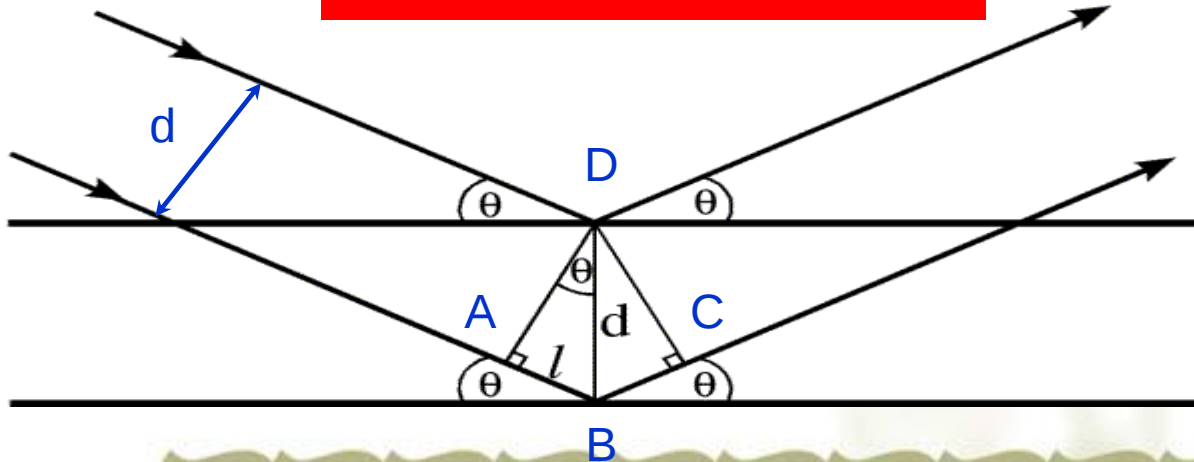
❖ 当光程差等于**波长的整数倍** ($n\lambda$) 时，在角方向散射干涉加强。即光程差 $\delta=0$ ，此时 $\theta = \beta$ 。即是说，当**入射角与散射角相等**时，一层原子面上所有散射波**干涉将会加强**。与可见光的反射定律相类似， X 射线从一层原子面呈镜面反射的方向，就是散射线干涉加强的方向，因此，常将这种**散射称为晶面反射**。



布拉格定律的推证

❖ x射线有强的穿透能力，在x射线作用下晶体的散射线来自若干层原子面，除同一层原子面的散射线互相干涉外，各原子面的散射线之间还要互相干涉。这里只讨论两相邻原子面的散射波的干涉。过D点分别向入射线和反射线作垂线，则AD之前和CD之后两束射线的光程相同，它们的光程差 $\delta = AB + BC = 2d \sin \theta$ 。当光程差等于波长的整数倍时，相邻原子面散射线干涉加强，即干涉加强条件为：

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



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

式中： θ —Bragg角或掠射角（衍射半角）

n —整数，衍射级数

实际工作中所测的角度不是 θ 角，而是 2θ 。
 2θ 角是入射线和衍射线之间的夹角，习惯上称 2θ 角为衍射角，称 θ 为Bragg角，或衍射半角。

- ❖ 第 n 级衍射的衍射角由下式决定：

$$\sin\theta_n = n\lambda/2d$$

- ❖ 此时，布拉格方程可以改写为： $2(d_{hkl}/n)\sin\theta=\lambda$

- ❖ 由晶面指数定义可知，指数为 (nh, nk, nl) 的晶面为与 (hkl) 面平行且面间距为 d_{hkl}/n 的晶面族。所以，方程可改写为：

$$2d_{nh, nk, nl}\sin\theta=\lambda$$

指数 (nh, nk, nl) 称为衍射级数。这样，我们仅要考虑的是一级衍射，Bragg方程可以改写为：

$$2d \sin q = \lambda$$

关于Bragg方程的几点讨论

(1) X射线衍射与可见光反射的差异

■ 相同点：

- ① 两角相等
- ② 三线共面

■ 不同点：

① 可见光的反射仅限于物体的表面；而x-ray的反射实际上是受X射线照射的所有原子（包括晶体内部）的散射线干涉加强而形成的；

②可见光是反射的结果，强度与入射波相当；X-ray：散射线干涉，强度很弱；

③可见光以任意角度入射都可进行反射；而x-ray只有特殊角度才能进行反射，称为x-ray的“选择反射”。

(2) 产生衍射的极限条件

❖ 波长: $\sin\theta = \frac{n\lambda}{2d} \leq 1 \quad \lambda \leq 2d$

❖ 晶面间距: $d \geq \frac{\lambda}{2}$

❖ 衍射级数: $n \leq \frac{2d}{\lambda}$

这实际上限定了能对晶体结构进行分析的光源的波长范围。

❖ 例：一组晶面间距从大到小的顺序： $2.02\text{\AA}$ ， $1.43\text{\AA}$ ， $1.17\text{\AA}$ ， $1.01\text{\AA}$ ， $0.90\text{\AA}$ ， $0.83\text{\AA}$ ， $0.76\text{\AA}$

问：

(1) 用波长为 $\lambda_{\text{K}\alpha}=1.94\text{\AA}$ 的铁靶照射时，因 $\lambda/2=0.97\text{\AA}$ ，产生衍射的晶面组有4个。(哪4个？)

(2) 用铜靶进行照射，因 $\lambda/2=0.77\text{\AA}$ ，6个晶面组能产生衍射。(哪6个？)

(3) 布拉格方程是X射线在晶体产生衍射的必要条件而非充分条件。有些情况下晶体虽然满足布拉格方程，但不一定出现衍射线，即所谓系统消光。

(4) 布拉格方程应用

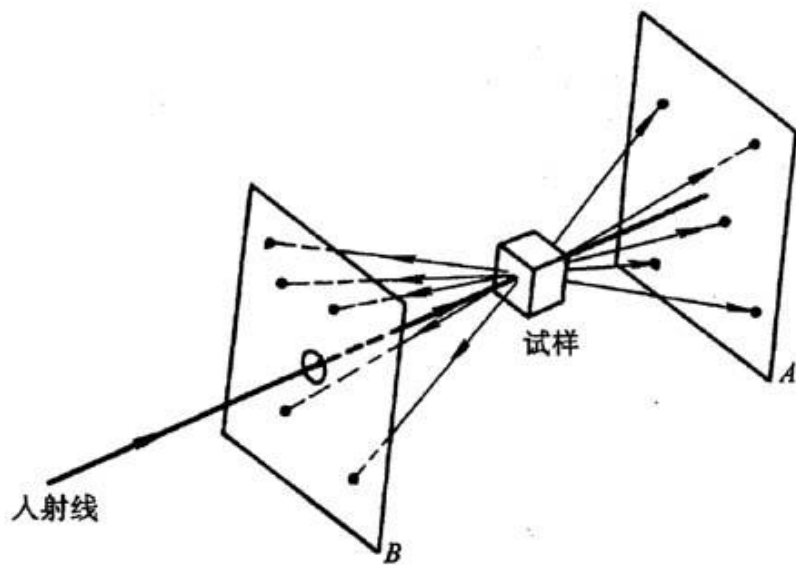
- ❖ 布拉格方程是X射线衍射分布中最重要的基础公式，它形式简单，能够说明衍射的基本关系，所以应用非常广泛。从实验角度可归结为两方面的应用：
- ❖ **结构分析**：用已知波长 λ 的X射线去照射晶体，通过衍射角的测量求得晶体中各晶面的面间距 d ，从而揭示晶体结构----- **X射线衍射学**；
- ❖ **X射线光谱学**：用一种已知面间距 d 的晶体来反射从试样发射出来的X射线，通过衍射角的测量求得X射线的波长 λ 。该法除可进行光谱结构的研究外，从X射线的波长还可确定试样的组成元素。电子探针就是按这原理设计的。

X-射线衍射方法

(一) 劳埃法

劳埃法是德国物理学家劳埃在1912年首先提出的，是最早的X射线分析方法，它用垂直于入射线的平底片记录衍射线而得到劳埃斑点。采用**连续X射线照射固定的单晶体**。

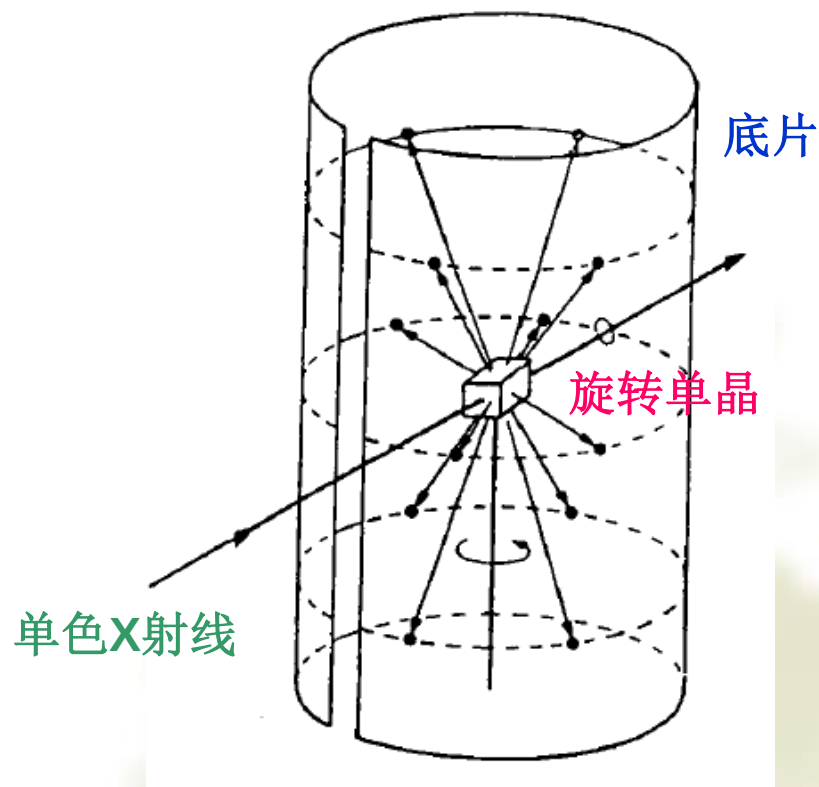
目前多用于**单晶体取向测定及晶体对称性的研究**。



图中A为透射相，B为背射相。

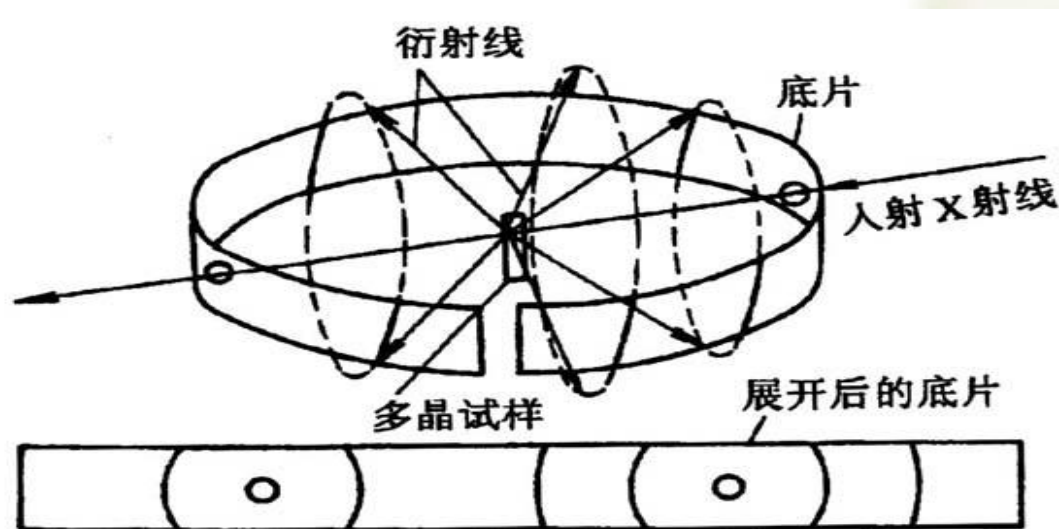
(二) 周转晶体法

采用单色X射线照射转动的单晶体，并用一张以旋转轴为轴的圆筒形底片来记录。也即是固定X射线的波长，通过旋转晶体，不断地改变晶面与X射线的夹角，使某些晶面在一定的角度时，能满足布拉格方程，而产生衍射。

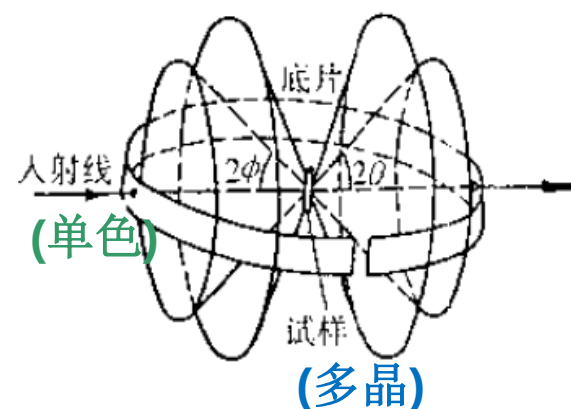
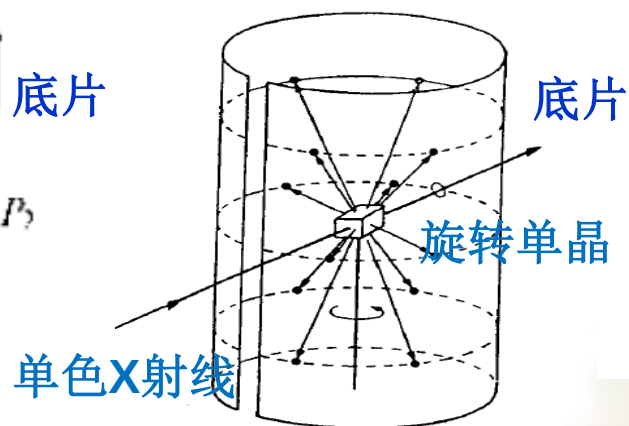
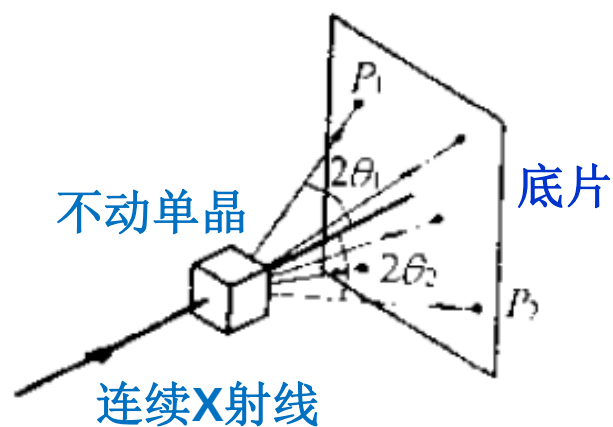


(三) 粉晶法

采用单色X射线照射多晶体样品来产生衍射。当波长一定的X射线照射多晶体时，虽然样品本身是固定的，但由于样品中有无数个晶体，且每个晶体的取向是不同的，总可以找到一些颗粒中的某个晶面，与X射线的夹角恰好满足布拉格方程，而产生衍射。通过测定衍射角，可以计算出该晶面的晶面间距，从而测定样品的物相组成。



方法	晶体	λ	θ
劳埃照相法 (Laue method)	单晶体	变化	不变化
周转晶体法 (rotating-crystal method)	单晶体	不变化	变化(部分)
粉末法 (powder method)	多晶体	不变化	变化



知识要点

- ❖ 1 . 点阵的类型（正点阵、倒易点阵）
- ❖ 2 . 阵点、晶向、晶面指数的标定
- ❖ 3 . 晶带定律
- ❖ 4. 布拉格方程
- ❖ 5. X-射线衍射方法

End

作业

- ❖ 1、是 hkl 值大的还是小的晶面容易出现衍射？
- ❖ 2、要使某个晶体的衍射数量增加，你选长波的X射线还是短波的？
- ❖ 3、简述什么叫x射线衍射？
- ❖ 4、依据布拉格方程，简述获得晶体衍射的几种实验方法及其应用？
- ❖ 5、下列物质哪些晶面能对 Cu K_α 产生衍射？
食盐（F、 $a=0.564\text{nm}$ ）
100, 111, 200, 221, 120, 332, 420, 555。