



石家莊鐵道大學
SHIJIAZHUANG TIEDAO UNIVERSITY

在线开放课程

X射线衍射技术

X射线衍射原理
(劳埃方程)

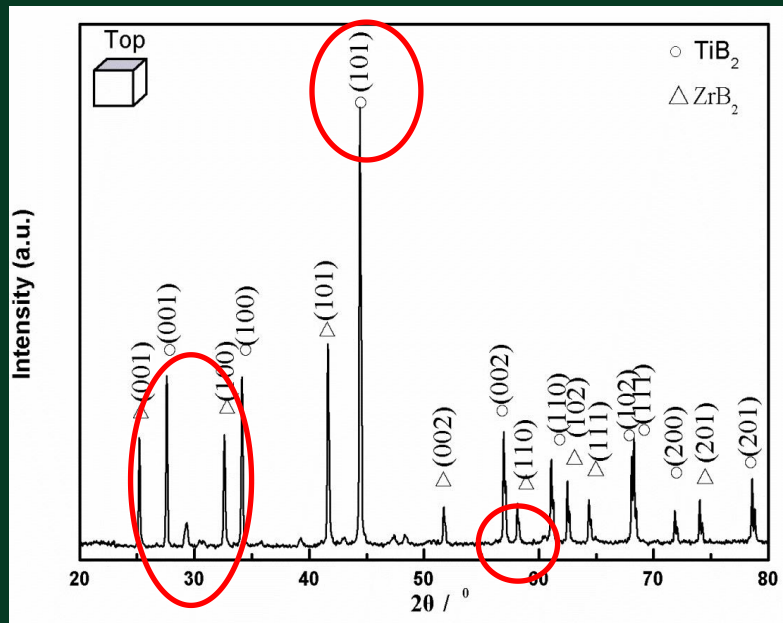
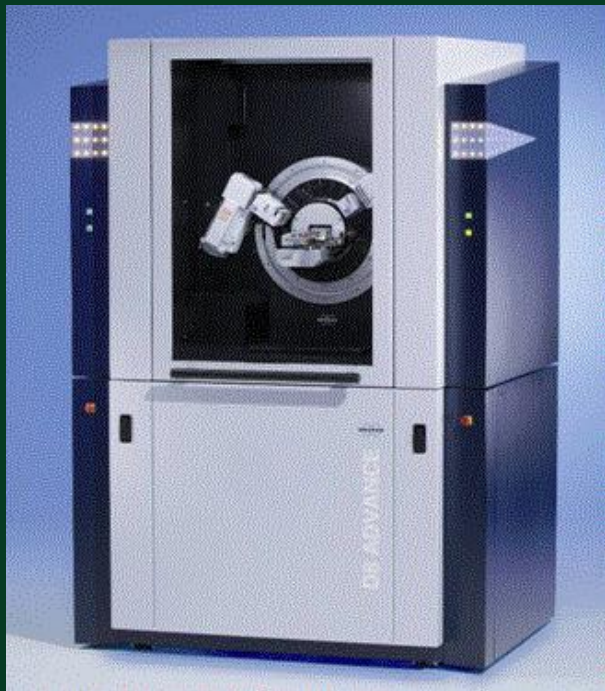
主讲：杨治刚

目录



在线开放课程

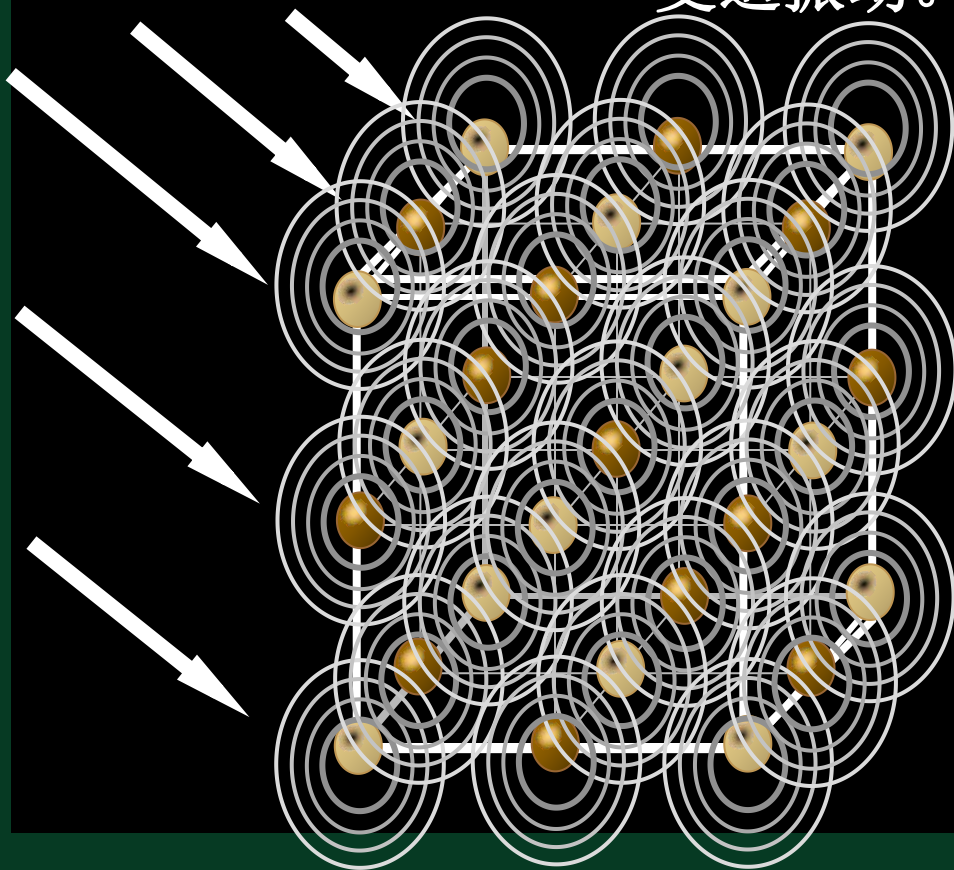
- 晶体衍射要素
- 劳埃方程



多相物质

衍射角度即方向，衍射强度即高度问题，衍射晶面（特定晶面产生衍射峰），产生衍射的条件？

原子或离子中的电子——
——受迫振动。



振动着的电子
成为次生X射
线的波源，向
外辐射与入射
X射线同频率
的电磁波，称
为散射波。

晶体的衍射

使用X射线研究晶体的结构及其相关问题，主要是利用X射线在具体晶体中产生的衍射现象

晶体的X射线衍射：透射束斑

衍射花样本质：相干散射波在空间发生干涉的结果

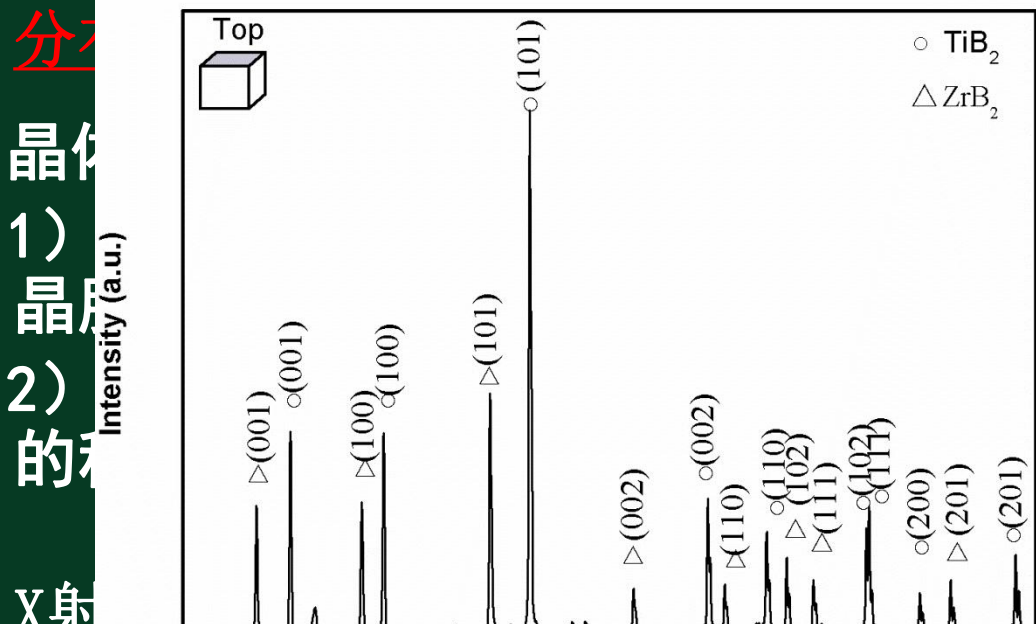
增强条件：散射波同位相或光程差为0或光程差为
波长整数倍

衍射现象 是大量的原子散射波

互相干涉的结果。

晶体衍射的两个要素

晶体所产生的衍射花样都反映出晶体内部的原子



分布规律，由
(1)。
取决于原子

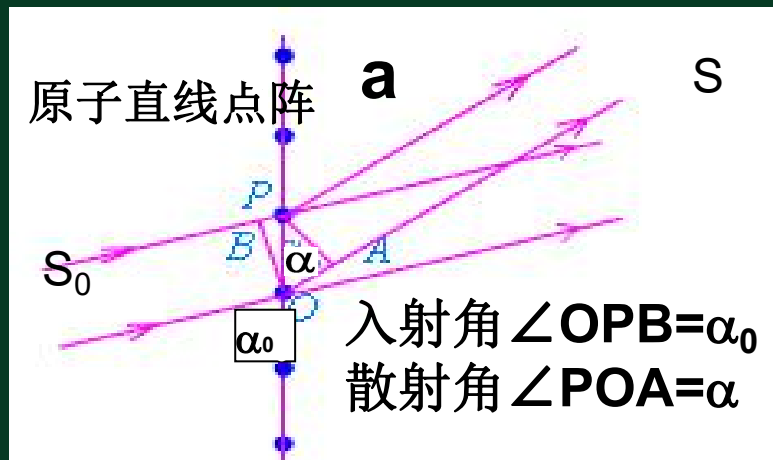
在衍射现
系，这
巨。

相干散射时才产生X射线，光程差是波长的整数倍时才产生衍射。

劳埃方程

(1) 直线点阵的衍射方向（衍射条件）

设有原子组成的直线点阵，相邻两原子间的距离为 a ，如图所示，X射线入射方向 S_0 与直线点阵的交角为 α_0 。



若在与直线点阵交成 α 角的方向S发生衍射，
则相邻波列的光程差 Δ 应为波长 λ 的整数倍，

$$\text{即 } \Delta = OA - PB = h\lambda,$$

h 为整数 ($h=0, \pm 1, \pm 2, \dots$)。

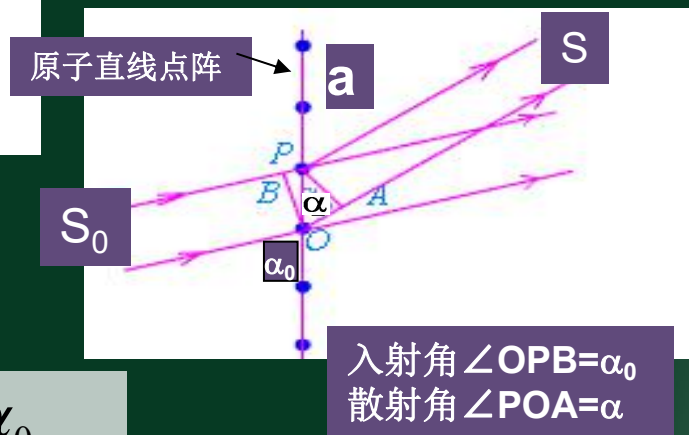
因为：

$$\begin{aligned} OA &= a \cos \alpha \\ PB &= a \cos \alpha_0 \end{aligned}$$

于是，

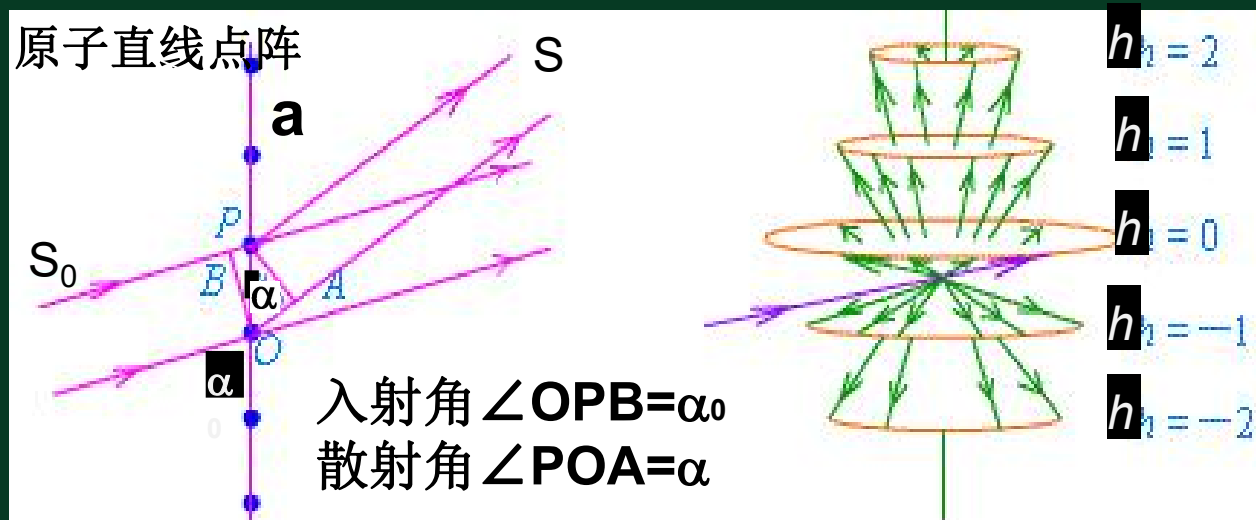
$$\begin{aligned} \Delta &= a \cos \alpha - a \cos \alpha_0 \\ &= a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = h\lambda \end{aligned}$$

这就是原子直线点阵产生衍射的条件！



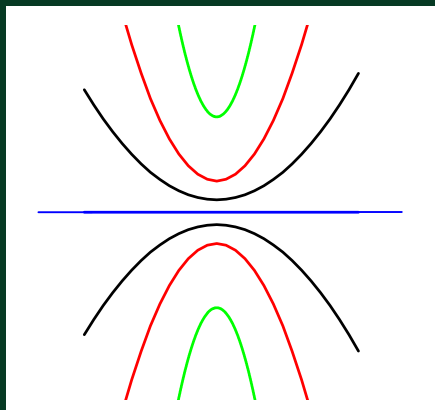
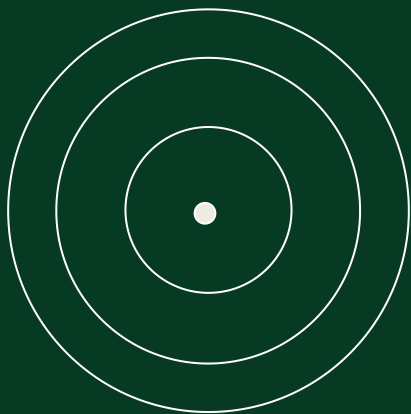
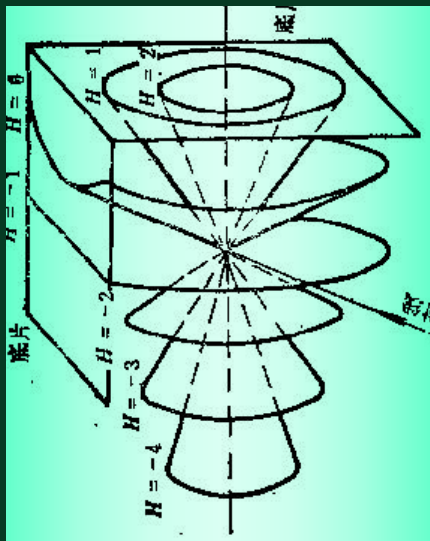
直线点阵衍射线形状

因为由次生波原发出的X射线为球面电磁波，故与直线点阵交角为 α 的方向的轨迹是以直线点阵为轴的圆锥面。



(a) 若放置照像板与直线点阵垂直，所得到的是一些同心圆。

(b) 若放置照像板与直线点阵平行，在一般情况下所得到的是一些曲线，在 $\alpha_0=90^\circ$ 时所得到的是一组双曲线。



(2) 三维空间点阵衍射的条件

设空间点阵的三个平移向量为 \mathbf{a} , \mathbf{b} 和 \mathbf{c} , 入射的X射线与它们的交角分别为 α_0 , β_0 和 γ_0 。衍射方向与它们的交角分别为 α , β 和 γ 。根据上述讨论可知, 衍射角 α , β 和 γ 在 x , y , z 三个轴上应满足以下条件:

$$\mathbf{a}(\cos\alpha - \cos\alpha_0) = h\lambda$$

$$\mathbf{b}(\cos\beta - \cos\beta_0) = k\lambda$$

$$\mathbf{c}(\cos\gamma - \cos\gamma_0) = l\lambda$$

$h, k, l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ 称为衍射指数。

讨论

劳埃方程中，对于每组 hkl ，可得到三个衍射圆锥，只有同时满足劳厄方程组才能出现衍射，衍射方向是三个圆锥面的共交线。另外， α ， β ， γ 不是完全彼此独立，这三个参数直接还存在着一个函数关系：

$$\cos^2\alpha_0 + \cos^2\beta_0 + \cos^2\gamma_0 = 1$$

$$\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1$$

α ， β ， γ 共计三个变量，但要求它们满足上述的五个方程，这在一般情况下很难办到，因而得不到衍

射图。

小结



在线开放课程

- X射线衍射的要素：方向与强度
- 劳埃方程