

晶体衍射

§ 3.1 倒格子 Reciprocal lattice

倒格子的概念及其应用在固体物理学中是十分重要的。在前面，我们在坐标空间里讨论晶体结构的周期性，由此引入了坐标空间的布拉菲格子概念。实际上，晶体结构的周期性，也可以在波矢空间里进行描述。如果前者称为正格子，后者就称为这个正格子的倒格子。这样以来，描述一种晶体结构的周期性可以利用两种类型的格子：一种是正格子，它是晶体结构在坐标空间的数学表现形式；一种是倒格子，它是晶体结构在波矢空间的数学表现形式。由坐标空间变换到波矢空间，对处理周期性结构中的波动过程、X 射线衍射等问题是非常方便的。

3.1.1 波矢空间

前面我们研究晶体结构的周期性，无论是采用直角坐标系还是晶胞坐标系，都是在坐标空间里进行的。格点的位置或某点的位置都是用位矢 \mathbf{R}_l 或 \mathbf{r} 来表示，其量值单位是“米”。晶体结构的周期性在坐标空间里的数学形式用布拉菲格子来表示，如果把坐标空间称为“实空间”或“正空间”，那么坐标空间里的布拉菲格子就可以称为正格子。

在固体物理学的研究中，还需要另外一种空间形式。例如，在晶体的 X 射线衍射过程中，晶体作为衍射光栅，X 射线通过晶体在照相底片形成一些斑点。这些斑点和晶体中的晶面族有着一一对应的关系。对这些斑点的分布情况进行分析，就可以了解作为衍射光栅的那个晶体的结构情况。从衍射斑点并不能直接看出晶体的结构，需要进行傅里叶变换，这里就需要引入波矢空间的概念。另外，计算固体的能带结构和电子状态也要用到波矢空间。

（李商隐：庄生晓梦迷蝴蝶。《庄子·齐物论》说，庄子曾梦化为蝴蝶，醒后弄不清楚是自己变成蝴蝶了，还是蝴蝶变成庄周了。庄周先生在两个空间——真实空间和梦幻空间——里转化。蝴蝶成为庄周先生在梦幻空间里的化身。）

波矢空间又称状态空间，在波矢空间中同样可以建立直角坐标系，三个方向的单位矢量分别记为 \mathbf{e}_x 、 \mathbf{e}_y 、 \mathbf{e}_z 。与坐标空间相类似，波矢空间中的矢量 \mathbf{K} 可以表示为 $\mathbf{K} = \mu\mathbf{e}_x + \nu\mathbf{e}_y + \xi\mathbf{e}_z$ ，其中 (μ, ν, ξ) 就成为波矢 \mathbf{K} 在波矢空间中的坐标。波矢空间的长度单位为“米⁻¹”，是坐标空间长度单位“米”的倒数，因而又可以把波矢空间叫做坐标空间的倒易空间或倒空间。晶体的 X 射线衍射在照相底片上形成斑点的过程，其实就是晶体结构从坐标空间变换到波矢空间的过程。因而要了解晶体结构，就需要进行上述变换的逆变换，即通过

傅里叶变换把衍射斑点反映的信息再重新变换为晶体结构的信息，这个过程就是从波矢空间到坐标空间的变换过程。

3.1.2 倒格子基矢

晶体结构的周期性在坐标空间中的表现形式用布拉菲格子来表示，称为**正格子**。晶体结构的周期性在波矢空间（即倒空间）中同样可以用布拉菲格子来表示，这样的格子称为**倒格子 Reciprocal lattice**。倒格子是倒易空间中的布拉菲格子，它也是由基元在倒易空间的三个方向重复堆积而成，这个基元就是倒格子的原胞，它是平行六面体，原胞相邻的三个边矢量称为**倒格子基矢 Reciprocal lattice vectors**。如果已知倒格子基矢，就可以作出倒格子原胞，进而能够得到整个倒格子点阵。

倒格子基矢的定义——如果某晶体结构的正格子原胞的基矢为 \vec{a}_1 、 \vec{a}_2 、 \vec{a}_3 ，相应的倒格子原胞的基矢为 \vec{b}_1 、 \vec{b}_2 、 \vec{b}_3 。则有如下关系：

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)} \\ \vec{b}_3 = \frac{2\pi(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}{\vec{a}_3 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)} \end{cases} \quad (3.1.1)$$

利用上述公式，可以计算一些常见布拉菲格子的倒格子基矢。计算结果表明，简立方的倒格子仍然是简立方，体心立方的倒格子是面心立方，面心立方的倒格子是体心立方，简单六角的倒格子仍然是简单六角。总之，**正格子和它的倒格子属于同一晶系，具有相同的对称性**。

有了倒格子基矢以后，我们可以采用讨论空间点阵时的做法来确定**倒易点阵**中结点的位置。选取倒格子中任一格点为原点，则倒易点阵中任一格点的位置可由下式给出：

$$\vec{K}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3, \quad (3.1.2)$$

\vec{K}_h 称为**倒格矢**。因而倒格子也可以这样定义，**倒格子**是倒易空间中周期性分布着的由倒格矢 \vec{K}_h 所确定的点子组成的点阵。

附：几种晶体结构的倒格子基矢

a、简单立方

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} \vec{i} \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} \vec{j} \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{a} \vec{k} \end{aligned}$$

b、面心立方

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} (\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} (\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{a} (\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \end{aligned}$$

c、体心立方

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} (\vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} (\vec{i} + \vec{k}) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{a} (\vec{i} + \vec{j}) \end{aligned}$$

d、简单六角

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} \left(\frac{\sqrt{3}}{3} \vec{i} + \vec{j} \right) \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} \left(-\frac{\sqrt{3}}{3} \vec{i} + \vec{j} \right) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{c} \vec{k} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= \frac{\sqrt{3}}{2} a \vec{i} + \frac{a}{2} \vec{j} \\ \vec{a}_2 &= -\frac{\sqrt{3}}{2} a \vec{i} + \frac{a}{2} \vec{j} \\ \vec{a}_3 &= c \vec{k} \end{aligned}$$

3.1.3 倒格子与正格子之间的关系

(1) 倒格子基矢和正格子原胞基矢之间的关系

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi & i=j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (3.1.3)$$

(2) 倒格子原胞体积和正格子原胞体积之间的关系

正格子原胞的体积： $\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ ，倒格子原胞的体积： $\Omega^* = \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)$ ，两者之间的关系为 $\Omega \Omega^* = (2\pi)^3$ 。

(3) 倒格矢和正格矢之间的关系

正格矢 $\vec{R} = h_1 \vec{a}_1 + h_2 \vec{a}_2 + h_3 \vec{a}_3$ 和倒格矢 $\vec{K} = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$ 之间可以通过傅里叶变换相联系。

由于晶体结构的周期性，晶体中某一点的性质也具有同样的周期性。设晶体中 \vec{r} 点处的物理量为 $\Gamma(\vec{r})$ ，则有 $\Gamma(\vec{r}) = \Gamma(\vec{r} + \vec{R}_1)$ ，把此周期函数式作傅里叶展开，有

$$\Gamma(\vec{r}) = \sum_{\mathbf{h}} F(\vec{K}_{\mathbf{h}}) e^{i\vec{K}_{\mathbf{h}} \cdot \vec{r}}, \quad (3.1.4)$$

其中傅里叶系数为

$$F(\vec{K}_{\mathbf{h}}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \Gamma(\vec{r}) e^{-i\vec{K}_{\mathbf{h}} \cdot \vec{r}} d\vec{r}. \quad (3.1.5)$$

同样的，有

$$\Gamma(\vec{r} + \vec{R}_1) = \sum_{\mathbf{h}} F(\vec{K}_{\mathbf{h}}) e^{i\vec{K}_{\mathbf{h}} \cdot (\vec{r} + \vec{R}_1)}. \quad (3.1.6)$$

其中傅里叶系数为

$$F(\vec{K}_{\mathbf{h}}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \Gamma(\vec{r} + \vec{R}_1) e^{-i\vec{K}_{\mathbf{h}} \cdot \vec{r}} d\vec{r}. \quad (3.1.7)$$

引入 $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{R}_1$ ，上式化为

$$F(\vec{K}_{\mathbf{h}}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \Gamma(\vec{r}') e^{-i\vec{K}_{\mathbf{h}} \cdot \vec{r}'} d\vec{r}' e^{i\vec{K}_{\mathbf{h}} \cdot \vec{R}_1}. \quad (3.1.7)'$$

将(3.1.7)式和(3.1.5)相比较，得到

$$F(\vec{K}_{\mathbf{h}}) [e^{i\vec{K}_{\mathbf{h}} \cdot \vec{R}_1} - 1] = 0. \quad (3.1.8)$$

在(3.1.8)中，对于所有的 $\vec{K}_{\mathbf{h}}$ ， $F(\vec{K}_{\mathbf{h}}) \neq 0$ ，否则 $\Gamma(\vec{r}) = 0$ ，不是我们想要的结果。因而只有

$$e^{i\vec{K}_{\mathbf{h}} \cdot \vec{R}_1} = 1, \quad (3.1.9)$$

或者

$$\vec{K}_{\mathbf{h}} \cdot \vec{R}_1 = 2\pi n, \quad n \text{ 为整数}. \quad (3.1.10)$$

正格矢和倒格矢之间是互为傅里叶变换的关系。

$$\vec{K}_{\mathbf{h}} \cdot \vec{R}_1 = (h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3) \cdot (l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3) = 2\pi(h_1 l_1 + h_2 l_2 + h_3 l_3) = 2\pi n$$

因此，正格矢和倒格矢恒满足(3.1.10)反之，如果两矢量满足(3.1.10)式，而其中一个正格矢，则另一个必为倒格矢。

(4) 正格子中一族晶面 $(h_1 h_2 h_3)$ 和倒格矢 $\vec{K}_{\mathbf{h}} = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$ 垂直。

晶面族 $(h_1 h_2 h_3)$ 中最靠近原点的晶面 ABC 在基矢 \vec{a}_1 、 \vec{a}_2 、 \vec{a}_3 的截距为 a_1/h_1 、 a_2/h_2 、 a_3/h_3 ，如图 3.1.1 所示。由图可知，矢量

$$\vec{CA} = \vec{OA} - \vec{OC} = \vec{a}_1/h_1 - \vec{a}_3/h_3, \quad \vec{CB} = \vec{OB} - \vec{OC} = \vec{a}_2/h_2 - \vec{a}_3/h_3,$$

都在 ABC 面。因此，如果能证明：

$$\vec{K}_h \cdot \vec{CA} = 0 \text{ 和 } \vec{K}_h \cdot \vec{CB} = 0,$$

则 \vec{K}_h 和晶面族 $(h_1 h_2 h_3)$ 正交。事实上，因为 $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ ，所以

$$\begin{aligned} \vec{K}_h \cdot \vec{CA} &= \left[h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3 \right] \cdot \left[\frac{\vec{a}_1}{h_1} - \frac{\vec{a}_3}{h_3} \right] \\ &= h_1 \vec{b}_1 \cdot \frac{\vec{a}_1}{h_1} - h_3 \vec{b}_3 \cdot \frac{\vec{a}_3}{h_3} = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \vec{K}_h \cdot \vec{CB} &= \left[h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3 \right] \cdot \left[\frac{\vec{a}_2}{h_2} - \frac{\vec{a}_3}{h_3} \right] \\ &= h_2 \vec{b}_2 \cdot \frac{\vec{a}_2}{h_2} - h_3 \vec{b}_3 \cdot \frac{\vec{a}_3}{h_3} = 0. \end{aligned}$$

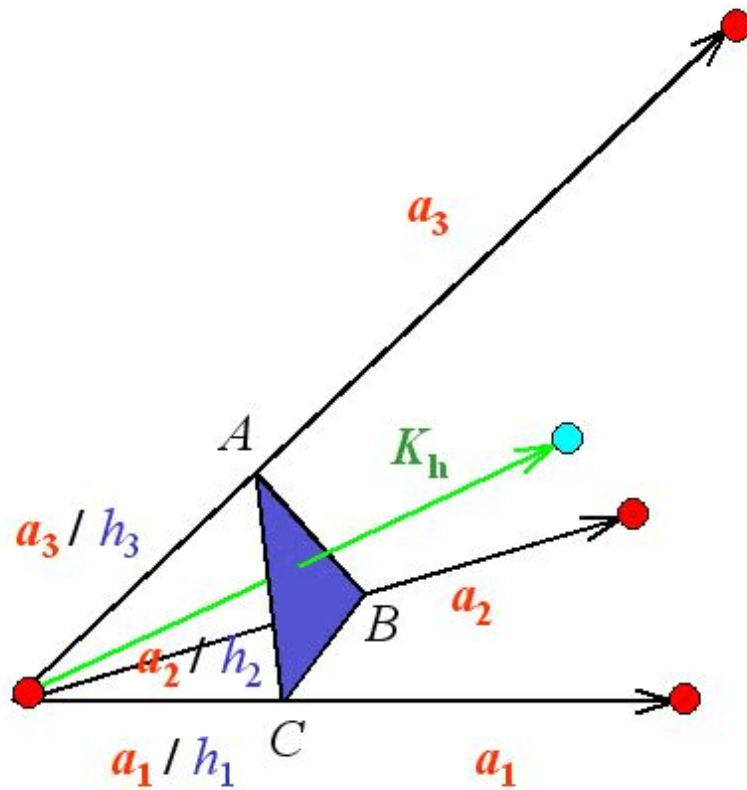


图 3.1.1 晶面 ABC 和倒格矢关系图

可以知道，晶面族 $(h_1 h_2 h_3)$ 的法线方向和倒格矢 \vec{K}_h 方向相同。

(5) 晶面间距公式

图 3.1.1 中的 ABC 面是晶面族 $(h_1 h_2 h_3)$ 中靠近原点最近的晶面，因此这族晶面的面间距 $d_{h_1 h_2 h_3}$ 就等于原点到 ABC 面的距离。则晶面间距为

$$d_{h_1 h_2 h_3} = \frac{|\vec{a}| \cdot |\vec{K}_h|}{h_1 |\vec{K}_h|} = \frac{|\vec{a}| \cdot (h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3)}{h_1 |h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3| |\vec{K}_h|} = \frac{2\pi}{|\vec{K}_h|}. \quad (3.1.11)$$

因而求晶体结构某一晶面族的面间距的问题就转化为求倒格矢的问题。

假设 \vec{r} 为晶面 $(h_1 h_2 h_3)$ 上的任意点的位矢，则有

$$\vec{r} \cdot \frac{\vec{K}_h}{|\vec{K}_h|} = \mu d \quad \mu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.1.12)$$

称为**晶面方程**。该晶面应是从原点数起的第 μ 个晶面。

3.1.4 二维倒格矢

与三维情形一样，二维倒格子也由其基矢 \vec{b}_1 、 \vec{b}_2 确定，而 \vec{b}_1 、 \vec{b}_2 也是由二维坐标空间原胞基矢 \vec{a}_1 、 \vec{a}_2 确定的。根据定义，有

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= 2\pi(\vec{a}_2 \times \vec{n}_0) / \vec{S} \\ \vec{b}_2 &= 2\pi(\vec{n}_0 \times \vec{a}_1) / \vec{S} \end{aligned}$$

式中 \vec{n}_0 为垂直于二维平面的无量纲单位矢量， $\vec{S} = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|$ 为二维原胞的面积。

二维倒格矢为 $\vec{K}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2$ 。

3.1.5 布里渊区 Brillouin zone

布里渊区——在波矢空间中，以倒格矢 $\vec{K}_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$ 作倒格点，选取一个倒格点作为原点，作由原点到各个倒格点连线的垂直平分面，这些平面所围成的区域就称为布里渊区。这些垂直平分面把倒格子空间分成了许多部分，我们把从原点出发不跨过任何垂直平分面的点的集合称为**第一布里渊区**，又称为**简约布里渊区**，它是倒空间中的 **Wigner-Seitz** 原胞。从原点出发只跨过一个垂直平分面的点的集合称为**第二布里渊区**。从原点出发跨过两个垂直平分面的点的集合称为**第三布里渊区**。**第 n 布里渊区**就是从原点出发跨过(n-1)个垂直平分面的点的集合。布里渊区是固体物理学中一个重要的概念，讨论晶格振动以及电子的状态都要在布里渊区里进行。

这里我们首先以二维正方格子为例阐述布里渊区的特点。假设二维正方格子原胞边长为 a ，则其倒格子也为正方格子，原胞边长为 $\frac{2\pi}{a}$ 。如图 3.1.2 所示，画出了二维正方格子的第一、

第二、第三布里渊区。红色的正方形区域就是第一布里渊区，它的面积为 $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$ ；黄色的区

域就是第二布里渊区，它是由四块面积相等的等腰直角三角形组成，四块的面积加起来正好等于红色正方形的面积；蓝色的区域就是第三布里渊区，它是由八块面积相等的等腰直角三角形组成，八块的面积加起来也正好等于红色正方形的面积。以此类推，我们可以画出它的

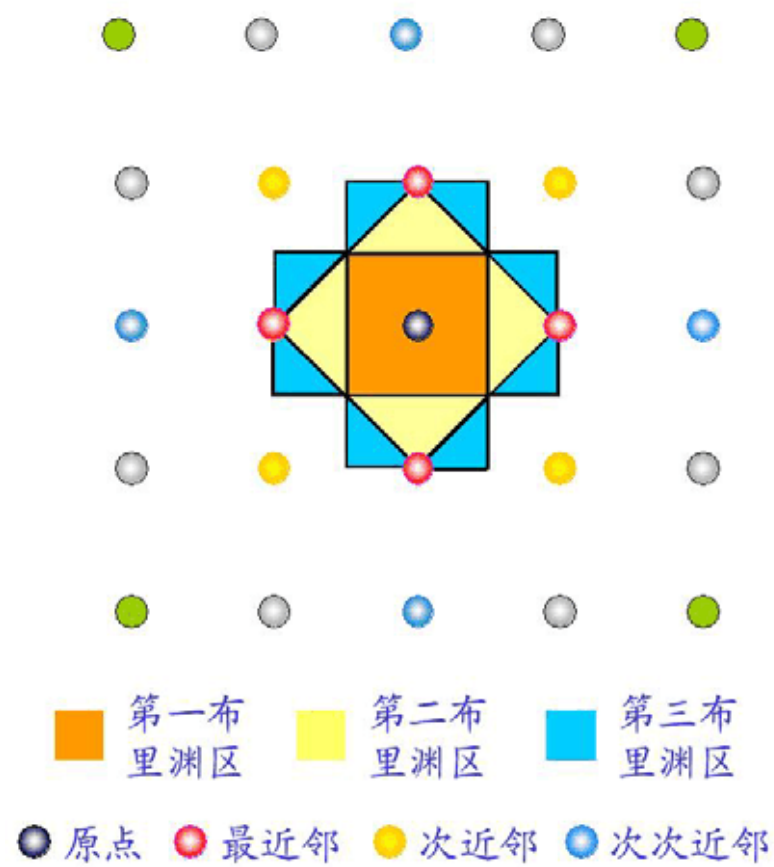


图 3.1.2 二维正方格子的布里渊区

第四、第五布里渊区等等。

从上面对二维正方格子布里渊区的讨论中我们可知，各个布里渊区的形状虽然不同，但它们的体积（面积）是相同的，都等于倒格子原胞的体积。而且第二布里渊区和第三布里渊区经过适当的平移，平移量正好是倒格矢，完全可以组合成第一布里渊区的形状，既无空隙，也无重叠。晶格的振动状态或者晶体中电子的运动状态在各个布里渊区里的表现都是相同的，这正是倒格子周期性的体现，因而在后面我们讨论此类问题的时候，只需关心第一布里渊区的情况。从第一布里渊区的情况通过平移倒格矢就可以知道其它布里渊区的情况。

图 3.1.3 所示，为面心立方晶格和体心立方晶格的第一布里渊区。由图可知，面心立方第一布里渊区是截角八面体，由 14 个面围成，有八个正六边形，六个正方形，分别是

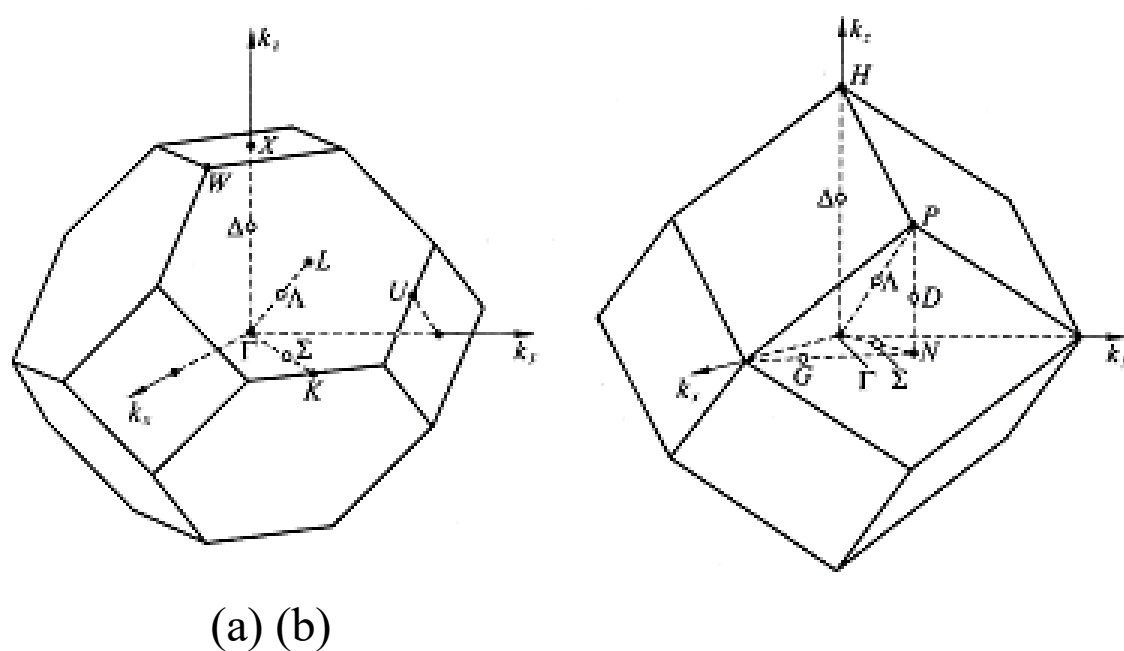


图 3.1.3 面心立方晶格(a)和体心立方晶格(b)的第一布里渊区

八个最近邻和六个次近邻倒格点的垂直平分面。它的体积为 $\Omega^* = \frac{(\frac{2}{a}\pi)^3}{\Omega} = 4(\frac{2}{a}\pi)^3$ 。体心立方第一布里渊区是菱形十二面体，这十二个面是从原点到十二个最近邻的倒格点的垂直平分面。它的体积为 $\Omega^* = 2(\frac{2}{a}\pi)^3$ 。表 3.1.1 和 3.1.2 分别给出了面心立方晶格和体心立方晶格第

表 3.1.1 面心立方布里渊区中的高对称点

名称	Γ	Δ	X	Λ	L	Σ	K
坐标	$\frac{2\pi}{a}(0, 0, 0)$	$\frac{2\pi}{a}(\delta, 0, 0)$	$\frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$	$\frac{2\pi}{a}(\lambda, \lambda, \lambda)$	$\frac{2\pi}{a}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$\frac{2\pi}{a}(\sigma, \sigma, 0)$	$\frac{2\pi}{a}(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0)$

其中, $0 < \delta < 1, 0 < \lambda < \frac{1}{2}, 0 < \sigma < \frac{3}{4}$

表 3.1.2 体心立方布里渊区中的高对称点

名称	Γ	Δ	H	Λ	P	Σ	N
坐标	$\frac{2\pi}{a}(0, 0, 0)$	$\frac{2\pi}{a}(\delta, 0, 0)$	$\frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$	$\frac{2\pi}{a}(\lambda, \lambda, \lambda)$	$\frac{2\pi}{a}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	$\frac{2\pi}{a}(\sigma, 0, 0)$	$\frac{2\pi}{a}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$

其中, $0 < \delta < 1, 0 < \lambda < \frac{1}{2}, 0 < \sigma < \frac{1}{2}$

一布里渊区中的一些高对称点。

§ 3.2 X-射线衍射 X-Ray Diffraction

1912年，劳厄指出，晶体中粒子周期性的排列可以作为波长与晶格周期数量级相当的X射线的衍射光栅，根据衍射图样就可以推断出晶体结构。1913年，布拉格父子研究X射线衍射，提出了布拉格方程。X射线结晶学迅速发展成熟，在20世纪上半叶已经完满地解决了体相晶体结构的测定。后来人们又相继发展了电子衍射和中子衍射方法，以及直接观察原子排列和晶格结构的方法，如高分辨电子显微术，场离子显微术和扫描隧穿显微镜等。本节首先对确定晶体结构的实验方法作一个一般性的介绍，之后重点讨论X射线衍射的内容。

3.2.1 晶体衍射的一般性介绍

晶格的周期性特征决定了晶格可以作为波的衍射光栅，因为晶体中原子的间距的数量级为 a ，即 10^{-10} m，所用波的波长应小于 a 即 10^{-10} m。从这儿可以看出，可见光不能用于晶体衍射中，因为可见光的波长为 4.0×10^{-7} m，是晶体中原子间距的1000倍。而X射线的波长在 10^{-10} m (0.1 nm)量级，与晶体中的原子间距相同，晶体可以成为X射线的衍射光栅。X射线是由被高电压 V 加速了的电子，打击在靶极物质上而产生的一种电磁波。最大的光子能量 $h\nu_{\max}$ 等于电子的能量 eV ，所以X射线的最短波长限

$$\lambda_{\min} = \frac{ch}{eV} \approx \frac{1.24 \times 10^4}{V}, \quad (3.2.1)$$

式中的 V 以伏为单位，波长以埃 \AA 为单位。在晶体衍射工作中，通常用 $V \sim 40$ kV，所产生的 $\lambda_{\min} \sim 0.3$ \AA 。此时，X光子的能量在 10^4 eV量级，对材料的穿透深度在几个 μm 左右，从而可以提供材料体相结构的信息。

从量子力学中波粒二象性的基本原理出发，我们可以知道电子也具有波动性，电子束也可以用在晶体衍射中。电子衍射是以电子束直接打在晶体上而形成的。这些电子的德布罗意(de Broglie)波的波长 $\lambda = h/p$ ，以及 $p^2/2m = eV$ ，其中 V 是电子的加速电压。则有

$$\lambda = \frac{h}{(2meV)^{\frac{1}{2}}} \approx \frac{150}{V} \text{\AA}。 \quad (3.2.2)$$

可见，150 V的加速电压即能产生波长为1 \AA 的电子波。电子波的能量很低，穿透能力很弱，一般为几十埃左右，所以低能电子衍射(Low Energy Electron Diffraction, LEED)主要用于观察表面或薄膜的结构。

中子束也可以用于晶体衍射中。中子的质量约为电子质量的2000倍，如果能量和电子束

$1/2000) \frac{h}{2}$ 。所以对于中子束，只需 0.1 eV 的中子，就可以产生 1 \AA 的波。中子主要受原子核的散射，轻的原子，例如氢、碳对于中子的散射也很强，所以常用来决定氢、碳在晶体中的位置。此外，中子还有磁矩，尤其适合研究磁性结构。

3.2.2 几点假设

- a、只考虑弹性散射的情形，即入射波和散射波的波数或波长相同；
- b、入射束和散射束均为平行光，由于通常样品的线度和 X 射线束斑的线度同样品到 X 射线源及探测器的距离相比甚小，可以近似地这样认为；
- c、入射的 X 射线为单色光，即入射的 X 射线为单一频率的光子。

3.2.3 布拉格反射

布拉格对 X 射线在晶体中的衍射现象提出了一个简单的解释。他把晶体点阵看成是由一组等距离的平面点阵所组成。这族平面的面指数若为 $(h_1 h_2 h_3)$ ，晶面间距为 d_h 。布拉格假设入射 X 射线在晶体中被由原子组成的平行晶面所反射，反射波出现衍射峰的条件是：**(a)** X 射线被平行原子晶面作镜面反射；**(b)** 一系列平行晶面产生的反射束发生相长干涉。可以把晶面想像成一面面镀银的镜子，每个平面只反射很少一部分 X 射线，各平面的反射线相长干涉就会在某些方向上出现衍射峰。

如图 3.2.1 所示，一束 X 射线，入射角为 θ ，相邻两平面的反射线的波程差为 $2d_h \sin \theta$ ，当波程差是 X 射线波长 λ 的整数倍的时候，发生相长干涉，出现加强衍射峰

$$2d_h \sin \theta = m \lambda, \quad m \text{ 为整数}, \quad (3.2.3)$$

上式称为布拉格反射公式， m 代表衍射级次。

从上式来看，对于一定波长的 X 射线，衍射极大出现的方向（ θ 角）与晶面间距有关，因而也就依赖于晶面族的面指数。面指数低的晶面，面间距大，对应一个小的掠射角 θ 。反之，面指数高的晶面，面间距小，对应一个大的掠射角 θ 。 θ 越大，光的透射能力就越强，反

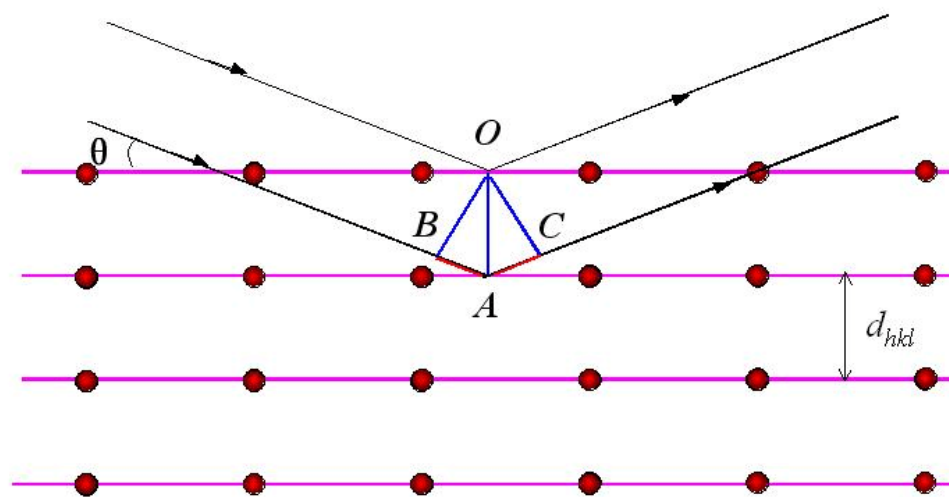


图 3.2.1 布拉格反射示意图

3.2.4 劳厄方程

劳厄把晶体对 X 射线的衍射归结为晶体内每个原子对 X 射线的弹性散射。当所有原子的散射发生相长干涉时，便产生加强的衍射峰。显然，这与布拉格的假设不同，他没有作晶面反射的假定。

如图 3.2.2 所示，设 \vec{S}_0 和 \vec{S} 分别为入射线和衍射线方向上的单位矢量。这里只讨论布拉菲格子，取 O 为原点，晶格中任一点 A 的位矢为 $\vec{R} = l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3$ 。

自 A 作 $AC \perp \vec{S}_0$ 及 $AB \perp \vec{S}$ ，从图中可以看出，波程差为 $CO+OB$ ，因 $CO = \vec{R} \cdot \vec{S}_0$ ， $OB = \vec{R} \cdot \vec{S}$ ，则衍射加强的条件为

$$\vec{R} \cdot (\vec{S} - \vec{S}_0) = \mu \lambda \quad \mu \text{ 为整数。} \quad (3.2.4)$$

此即称为劳厄方程。这是矢量的形式，包括基矢方向的三个方程。

把劳厄方程用 X 射线的波矢来表示。因为 $\vec{k}_0 = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{S}_0$ 和 $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{S}$ ，故而

$$\vec{R} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) = 2\pi \mu \quad \mu \text{ 为整数。} \quad (3.2.5)$$

因为 \vec{R} 是正格矢，依据正格矢和倒格矢的关系，可知 $\vec{k} - \vec{k}_0$ 相当于倒格矢。这里从衍射加强条件出发所得的结果同前面傅里叶变换的结果一致，其根本原因在于所讨论的衍射过程遵守傅里叶变换关系。

令

$$\vec{k} - \vec{k}_0 = \mathbf{n} \vec{K}_h, \quad \mathbf{n} \text{ 为整数。} \quad (3-2-6)$$

此式是倒格子空间的衍射方程。它代表的意义是：当衍射波矢和入射波矢相差一个或几个倒格矢时，就满足衍射加强条件。这里 \mathbf{n} 称为衍射级数， $(h_1 h_2 h_3)$ 是面指数，而 $(nh_1 nh_2 nh_3)$ 称为

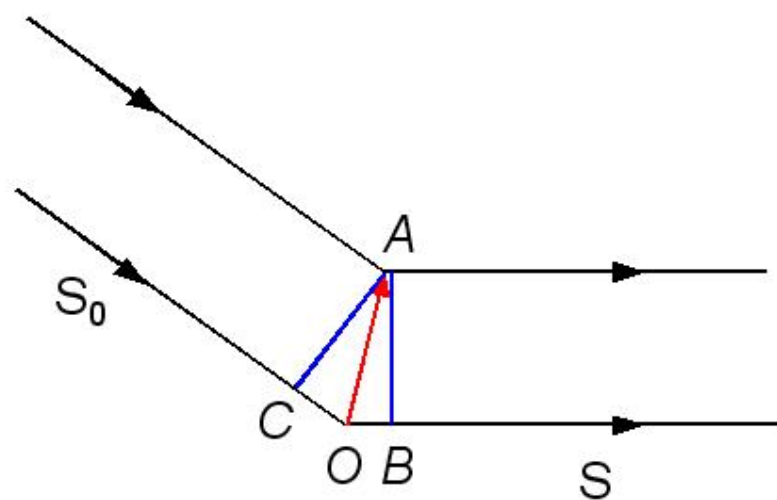


图 3.2.2 X 射线衍射的劳厄公式示意图

3.2.5 布拉格反射公式和劳厄方程的一致性

(1) 布拉格平面

习惯上，人们是利用入射波矢 \vec{k}_0 来表示劳厄条件的。由于倒格子也是布拉菲格子，因而在衍射级数 $n=1$ 的情况下，式(3.2.6)写成 $\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{K}_h$ ，就有

$$\vec{k} = \vec{k}_0 + \vec{K}_h,$$

两边平方得

$$k^2 = k_0^2 + 2\vec{k}_0 \cdot \vec{K}_h + K_h^2.$$

考虑弹性散射， $k=k_0$ ，上式化为

$$\vec{k}_0 \cdot \vec{K}_h = \frac{1}{2} K_h^2, \quad (3.2.6)$$

或者 $\vec{k}_0 \cdot \frac{\vec{K}_h}{|\vec{K}_h|} = \frac{1}{2} |\vec{K}_h|$ ，即 $\vec{k}_0 \cdot \vec{K}_h = \frac{1}{2} |\vec{K}_h|^2$ 。

由上式可知，一旦入射波矢 \vec{k}_0 沿倒格矢方向上的分量是 \vec{K}_h 长度的一半时，该 X 射线波矢的改变就一定等于倒格矢，就会产生相长干涉。这就是说，当且仅当入射波矢 \vec{k}_0 的末端落在波矢空间原点至倒格点连线的垂直平分面上时，就会产生相长干涉。这样的垂直平分面称

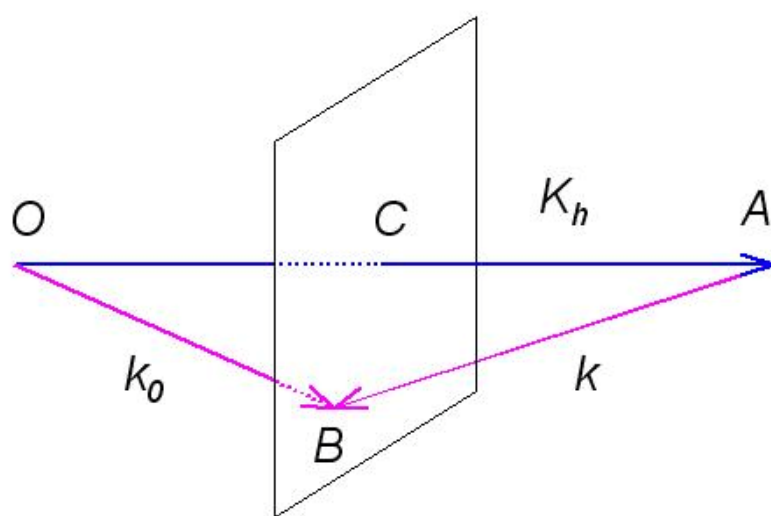


图 3.2.3 布拉格平面示意图

为布拉格平面。如图 3.2.3 所示。

(2) 两个条件的一致性

布拉格反射公式是晶体衍射在坐标空间的几何图像，而劳厄方程是晶体衍射在波矢空间中的几何图像。晶体 X 射线衍射发生相长干涉的两个判据是等价的。

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/495202042134011104>