



## 学科导航4.0暨统一检索解决方案研讨会

### 晶体X射线衍射

<http://www.fristlight.cn> 2007-02-02

[作者] 大唐网

[单位] 大唐网

[摘要] X射线在晶体中发生的衍射现象。晶体具有点阵结构，点阵结构的周期（即晶胞边长， $b$ ， $c$ ）与X射线的波长属于同一数量级，X射线衍射现象是一种基于波叠加原理的干涉现象，干涉的结果随不同而有所不同（ $\Delta$ 为波程差； $\lambda$ 为波长）。为整数的方向，波的振幅得到最大程度的加强，称为衍射，对应的方向为衍射方向，而为半整数的方向，波的振幅得到最大程度的抵消。因此，X射线通过晶体之后，在某些方向（衍射方向）X射线的强度增强，而另一些方向X射线强度却减弱甚至消失，如果在晶体的背后放置一张感光底片，将会得到X射线的衍射图形。

[关键词] 晶体X射线衍射;波叠加原理

晶体X射线衍射 X-ray diffraction by crystals X射线在晶体中发生的衍射现象。晶体具有点阵结构，点阵结构的周期（即晶胞边长， $b$ ， $c$ ）与X射线的波长属于同一数量级，X射线衍射现象是一种基于波叠加原理的干涉现象，干涉的结果随不同而有所不同（ $\Delta$ 为波程差； $\lambda$ 为波长）。为整数的方向，波的振幅得到最大程度的加强，称为衍射，对应的方向为衍射方向，而为半整数的方向，波的振幅得到最大程度的抵消。因此，X射线通过晶体之后，在某些方向（衍射方向）X射线的强度增强，而另一些方向X射线强度却减弱甚至消失，如果在晶体的背后放置一张感光底片，将会得到X射线的衍射图形。利用X射线衍射原理制造的X射线衍射仪，是测定晶体结构的最主要仪器。根据衍射的方向可以测定晶格参数或晶胞的大小和形状。根据衍射线强度分布能够测定原子在晶胞中的坐标，因此X射线衍射法也是测定分子空间构型的主要方法。产生晶体X射线衍射的条件可用劳厄方程来描述，劳厄方程的标量表达式如下： $(\cos\alpha - \cos\alpha_0) = h\lambda/b$   $(\cos\beta - \cos\beta_0) = k\lambda/c$   $(\cos\gamma - \cos\gamma_0) = l\lambda/a$ 式中、 $b$ 、 $c$ 为晶胞边长； $\alpha_0$ 、 $\beta_0$ 、 $\gamma_0$ 是入射线与晶胞基向量的夹角； $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 是衍射线与晶胞基向量的夹角； $h$ 、 $k$ 、 $l$ 是三个正整数，称为衍射指数； $\lambda$ 是X射线的波长。描述X射线衍射条件，还可以用布拉格方程： $2d\sin\theta = n\lambda$ 式中 $d$ 为相邻两个晶面之间的距离； $\theta$ 为入射线或反射线与晶面的交角； $\lambda$ 为X射线波长； $n$ 为正整数。布拉格方程与劳厄方程虽然表达方式不同，但其实质是相同的。当X射线的波长与入射线方向以及晶体方位确定以后，劳厄方程中的 $\lambda$ 、 $a$ 、 $b$ 、 $c$ 、 $\alpha_0$ 、 $\beta_0$ 、 $\gamma_0$ 都已确定，只有 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 是变量，它们必须满足劳厄方程，但是， $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 3个变量不是独立的，例如在直角坐标中应满足： $\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1$ 这就是说，3个变量、 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 应同时满足4个方程，这在一般条件下是不可能的，因而得不到衍射图。为了解决这个问题，必须再增加一个变数，有两种办法可供选择：①晶体不动（ $\alpha_0$ 、 $\beta_0$ 、 $\gamma_0$ 固定），改变波长 $\lambda$ ，即采用白色X射线，这种方法称为劳厄法；②波长不变，即用单色X射线，让晶体绕某晶轴转动，即改变 $\alpha_0$ 、 $\beta_0$ 、 $\gamma_0$ 。这样可在某些特定的晶体方位得到衍射图，这种方法叫做转动晶体法。以上两种方法都是对单晶体而言的。如果晶体是多晶，每个小单晶体在空间的取向是随机的，劳厄方程总可以得到满足，这就是粉末法的基础。

[我要入编](#) | [本站介绍](#) | [网站地图](#) | [京ICP证030426号](#) | [公司介绍](#) | [联系方式](#) | [我要投稿](#)

北京雷速科技有限公司 Copyright © 2003-2008 Email: [leisun@fristlight.cn](mailto:leisun@fristlight.cn)

