

上讲回顾

- 引入了倒(动量)空间的一些概念
 - * 数学上, 正、倒空间只是一个Fourier变化
 - * 倒格子
 - # 倒格子基矢、倒格矢
 - # Brillouin区
 - † 倒空间Wigner-Seitz原胞=第一Brillouin区

本讲目的：观测晶体结构的基础是什么？

1. 用衍射方法确定晶体结构的理论根据？
→ von Laue条件
2. 能不能观察到衍射极大还有什么条件？
→ 结构因子

第10讲、晶体结构衍射理论

1. 晶体衍射实验是一个重要的里程碑
2. Bragg定律
3. von Laue方程
4. 散射强度和结构因子

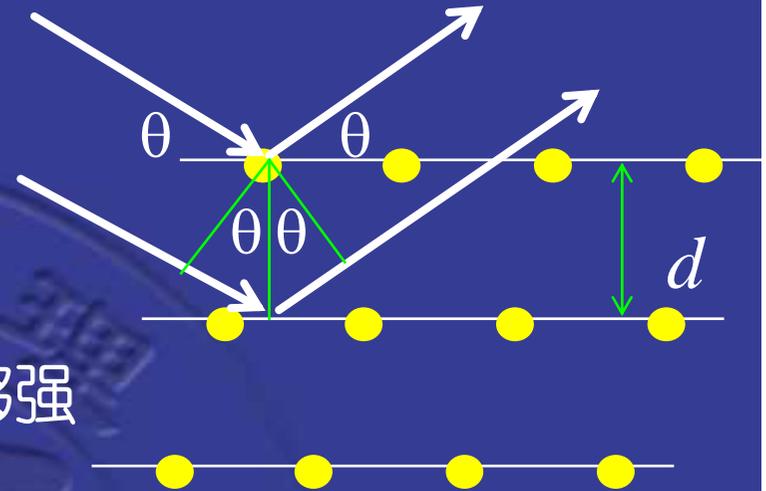
1、一个重要的里程碑

- 1912年von Laue把硫酸铜晶体作为光栅，试图测X射线波长，却得到了晶体结构衍射图象！
- 虽然现也有直接观察技术，但测量晶体结构，还是用衍射技术，因为它对周期结构最灵敏
 - * 直接观察晶体结构技术，如TEM、STM、FIM，但这些技术是观察点缺陷、位错、台阶、表面和界面的理想方法，因为可以直接反映这类结构的特征；
 - * 而晶体内部周期性结构的观察，还是靠衍射技术
- 晶体的衍射实验可以用X射线，以及粒子波长合适的实物粒子如中子、电子等作入射束
 - # X射线和电子作入射束，主要是被晶体中的电子散射，而中子则是被原子核散射

建立晶体衍射与结构的关系→衍射理论

- ~1912年→解释X射线晶体衍射的理论是经典的
 - * 后来，这些理论被推广到研究实物粒子衍射也是有效的，仅需用到量子力学中的**粒子波概念**
 - * 适合于X射线和非破坏性的高能电子弹性散射
- **运动学近似散射理论**，它假定
 - * 入射束仅被单次散射；散射时原子位置保持刚性固定；并且是弹性散射，**没有能量损耗**
 - * 理论给出的衍射极大条件，但并不一定能观察到衍射极大，因为条件仅对格点有效，格点代表的是基本结构，因此，还要看具体结构。von Laue在1912年得到的是衍射极大的必要条件，不是充分条件
- **动力学理论需要量子力学**，30'由von Laue建立

2、Bragg定律

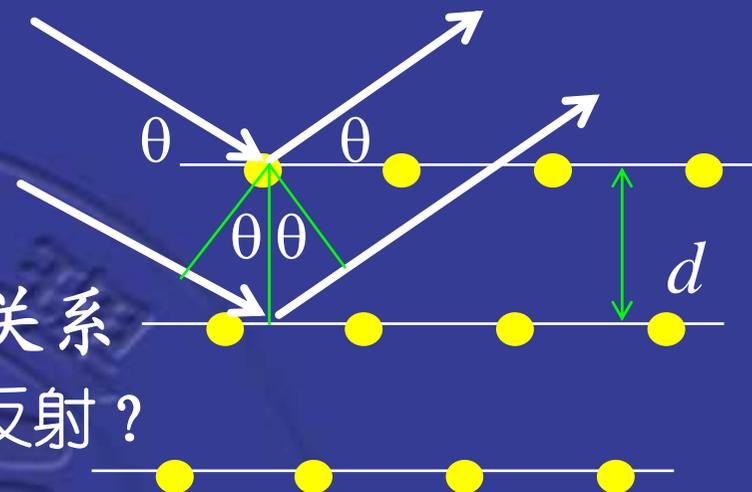


- 根据光的反射定律
 - * 入射角等于反射角，反射足够强
- Bragg因此假设
 1. 入射波从原子平面作镜面反射
 2. 对于可见光来说，可得足够强的反射光束；但对于X射线，透射率极大，而反射率极小，实际情况是只有入射的 $10^{-3} \sim 10^{-5}$ 部分被反射。所以Bragg又假定：每个平面只反射很小部分（另外部分穿透）
- 当反射波发生相长干涉时，就出现衍射极大
 - * 两个面间光程差：光程差： $2d \sin \theta$
 - * 加强条件：层与层之间的光程差为波长的 n 倍时，衍射极大 \rightarrow Bragg定律（Bragg反射公式）

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

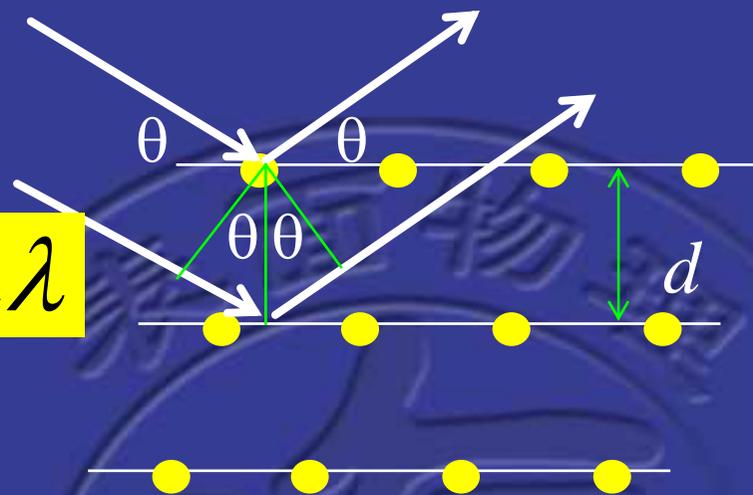
分析

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



- 定律确定的是波长与面间距关系
 - * 即满足什么条件才发生Bragg反射？
- 不能用可见光！
 - * 因为只有 $\lambda < 2d$ 才能发生Bragg反射
 - * 对同一簇反射面，要求 θ 和 λ 相匹配，因此，反射受严格限制，只有 θ 和 λ 的特殊耦合才会有同相位相加效应，产生衍射斑点
 - * 对于X射线，大部穿透，有足够多的原子平面参与

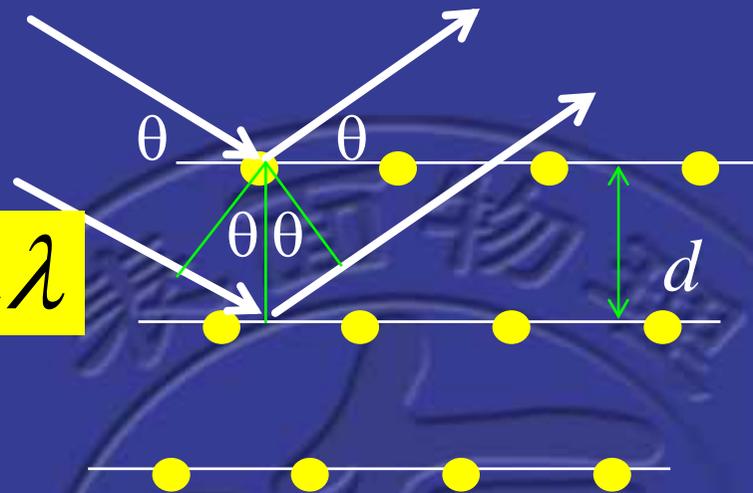
$$2d \sin \theta = n\lambda$$



质疑 → Bragg假定X射线被原子平面镜面反射，不同原子面反射波相长干涉，产生衍射极大。如是原子平面，那它们的面间距都相等，都等于 d 吗？

显然不是！

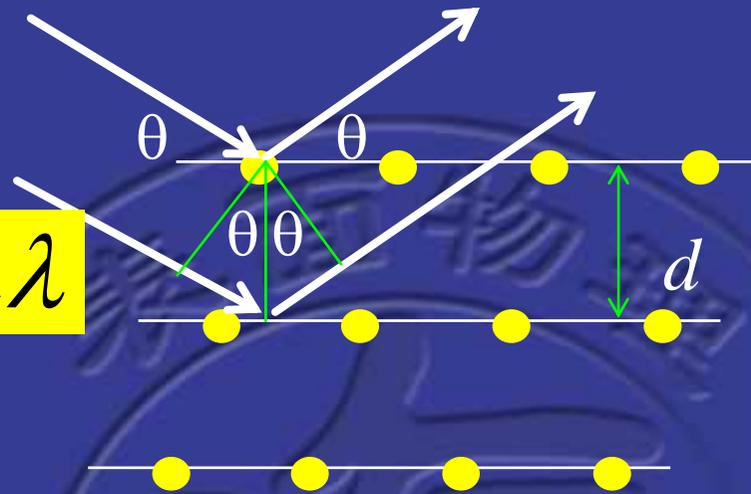
$$2d \sin \theta = n\lambda$$



质疑→原子面在什么情况下才能被看作镜面反射？这时波长与原子间距应该取什么关系？

波长应大于大于原子间距！但这与入射束波长 $\lambda < 2d$ 的限制显然矛盾！

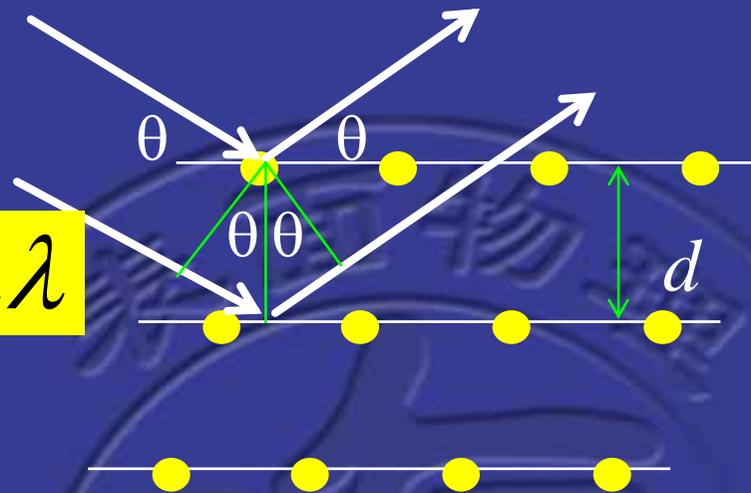
$$2d \sin \theta = n\lambda$$



质疑→为绕过原子镜面反射的困难，
Bragg假设不是全反射→那全反射还有
没有衍射图象？

有！但不是X射线作入射束。比如高能
电子衍射就利用全反射。全反射并不是
入射波长 \gg 原子间距所引起，而是采用
掠入射。主要用于探测表面周期结构

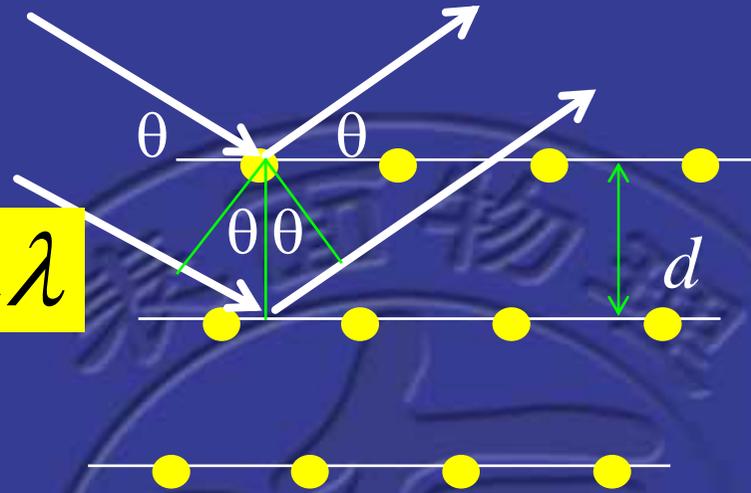
$$2d \sin \theta = n\lambda$$



思考：如果假定Bragg定律中的反射面不是原子平面而是晶面，前面几个困难就迎刃而解了吗？

但晶面只是数学抽象，不是真实存在的实物平面！

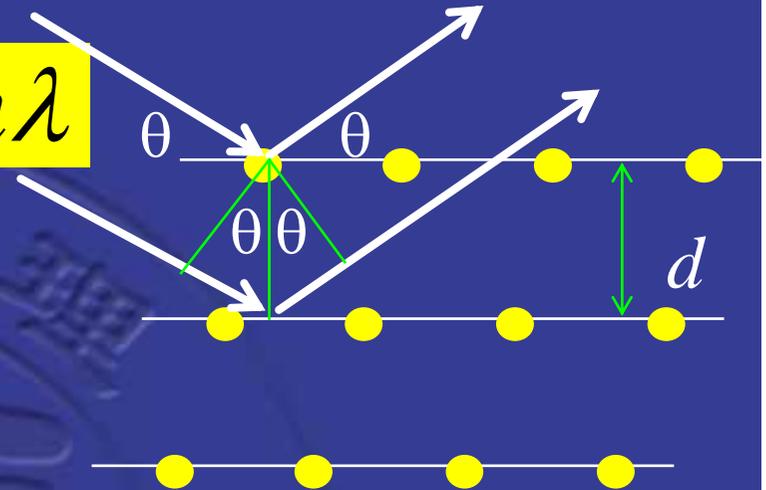
$$2d \sin \theta = n\lambda$$



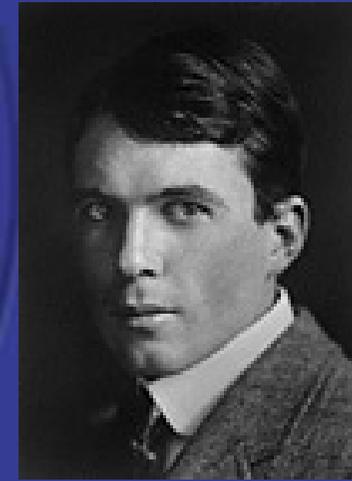
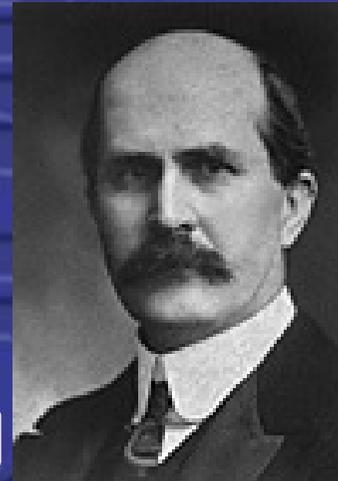
思考：Bragg定律的问题究竟出在什么地方？

- 恰恰是在究竟被什么东西反射这一关键问题上，Bragg是模糊的，不清楚的！
- 被基元中的原子及电子，其代表是格点！这是von Laue早于Bragg得到的。Bragg画蛇添足，试图简化解释，不止把问题弄复杂，连物理都错了

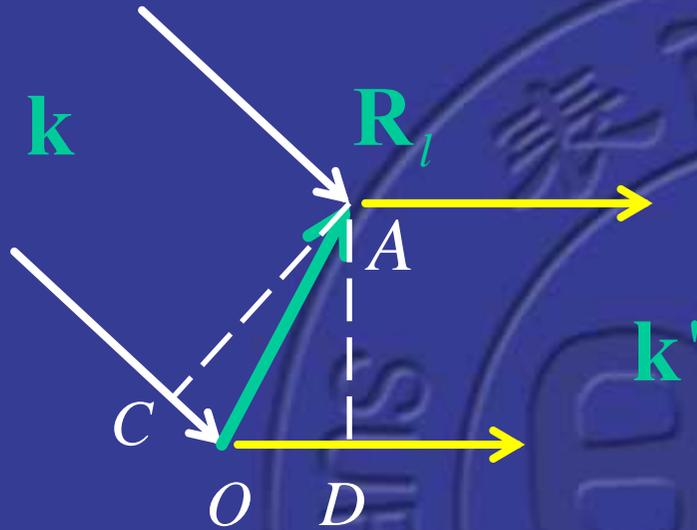
但结论正确 $2d \sin \theta = n\lambda$



- 虽然物理图象模糊不清，但 Bragg 的结论正确，因为恰巧是 von Laue 公式的特例
- Bragg 定律借鉴了光的反射定律和薄膜干涉，或受启发
 - * 初衷是解释 von Laue 衍射条件，简化实验测量
 - * 但物理上是有问题的，所以用一些假定来绕过这些问题
- Bragg 父子在 1915 年因 Bragg 定律而得诺贝尔物理学奖



3、von Laue方程



$$\hat{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}}{k}$$

$$\hat{\mathbf{k}}' = \frac{\mathbf{k}'}{k'}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

- 本质：晶体衍射是入射的X射线与原子核外电子作用的结果；设仅受电子的弹性散射
- * \mathbf{R}_l 是格矢
- 光程差： $\mathbf{CO} + \mathbf{OD}$

$$\mathbf{CO} = -\mathbf{R}_l \cdot \hat{\mathbf{k}}$$

$$\mathbf{OD} = \mathbf{R}_l \cdot \hat{\mathbf{k}}'$$

由此得加强条件：

$$\mathbf{R}_l \cdot (\hat{\mathbf{k}}' - \hat{\mathbf{k}}) = \mu\lambda$$

$$\mathbf{R}_l \cdot (\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = 2\pi\mu$$

von Laue条件

- 光程差满足加强条件

$$\mathbf{R}_l = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3$$

$$\mathbf{K}_h = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 + h_3 \mathbf{b}_3$$

$$\mathbf{R}_l \cdot (\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = 2\pi\mu$$

$$\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{R}_l = 2\pi n$$

$$\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{K}_h$$

von Laue 条件：
波矢改变等于倒格矢时，满足衍射加强的条件

讨论: Bragg和von Laue条件的等价关系

$$d = \frac{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{K}_h}{h_1 |\mathbf{K}_h|} = \frac{2\pi}{|\mathbf{K}_h|}$$



$$|\mathbf{K}_h| = \frac{2\pi}{d}$$

- 从von Laue条件即可得Bragg反射公式

$$|\mathbf{K}_h| = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}| = 2k \sin \theta$$

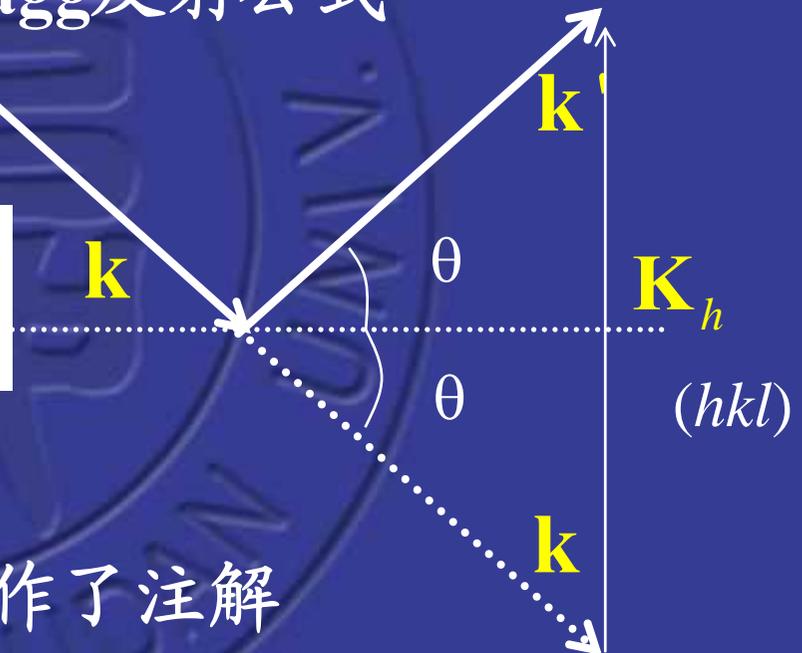
$$2\pi / d = 2(2\pi / \lambda) \sin \theta$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

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

- 这为 \mathbf{K}_h 与晶面方向的关系作了注解

* $n\mathbf{K}_h$ 也满足



讨论： von Laue方程与Bragg定律的图象

- Bragg定律的所有疑问在von Laue方程中全无疑问，或在此基础上全都可以解决
 - * 而Bragg定律实际上只是von Laue方程中满足衍射极大的条件特例
- 注意：当时量子力学还未完全建立，但是von Laue方程物理图象就是在今天看来也是正确的
 - * X射线被电子在各个方向散射
 - * 由于原子核的周期性排列的，围绕着原子核的电子也可以被认为是周期性分布的
 - # 所以在某些方向上，散射波相消干涉；在某些方向上，散射波相长干涉，产生衍射极大

幸运总是眷顾有准备的脑袋



- von Laue的初衷并非晶体结构衍射
 - * 初衷是测量X射线的波长——因为用普通光栅衍射来测X射线波长不行，X射线波长太短
- 得益于一个向他请教问题的博士生
 - * Sommerfeld的博士生Ewald因研究晶体双折射图象，向von Laue请教晶体中偶极子与电磁波作用问题。von Laue这才得知，晶体中的原子间距是1Å数量级。他意识到这是X射线的天然光栅！结果所得比初衷还要丰厚。von Laue随后得到了硫酸铜晶体的衍射斑点，并给出了正确的理论解释
 - * 从此揭开了晶体分析的序幕，也为固体物理学奠定了基础，这个事件是固体物理学发展史上的重要里程碑。1914年得到了诺贝尔物理学奖

这件事说明

1. 研究要干净，分析要透彻；
2. 不要轻易放过任何不明白的现象；
3. 学生也是老师的老师

→视野拓展→由von Laue条件看B区边界

- 由von Laue条件, $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{K}_h$

* 可以得到

$$\mathbf{k} - \mathbf{K}_h = \mathbf{k}' \Rightarrow (\mathbf{k} + \mathbf{K}_h)^2 = \mathbf{k}'^2$$

* 因弹性散射 $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{K}_h = \frac{1}{2} \mathbf{K}_h^2$$

* 因此, von Laue条件可写成

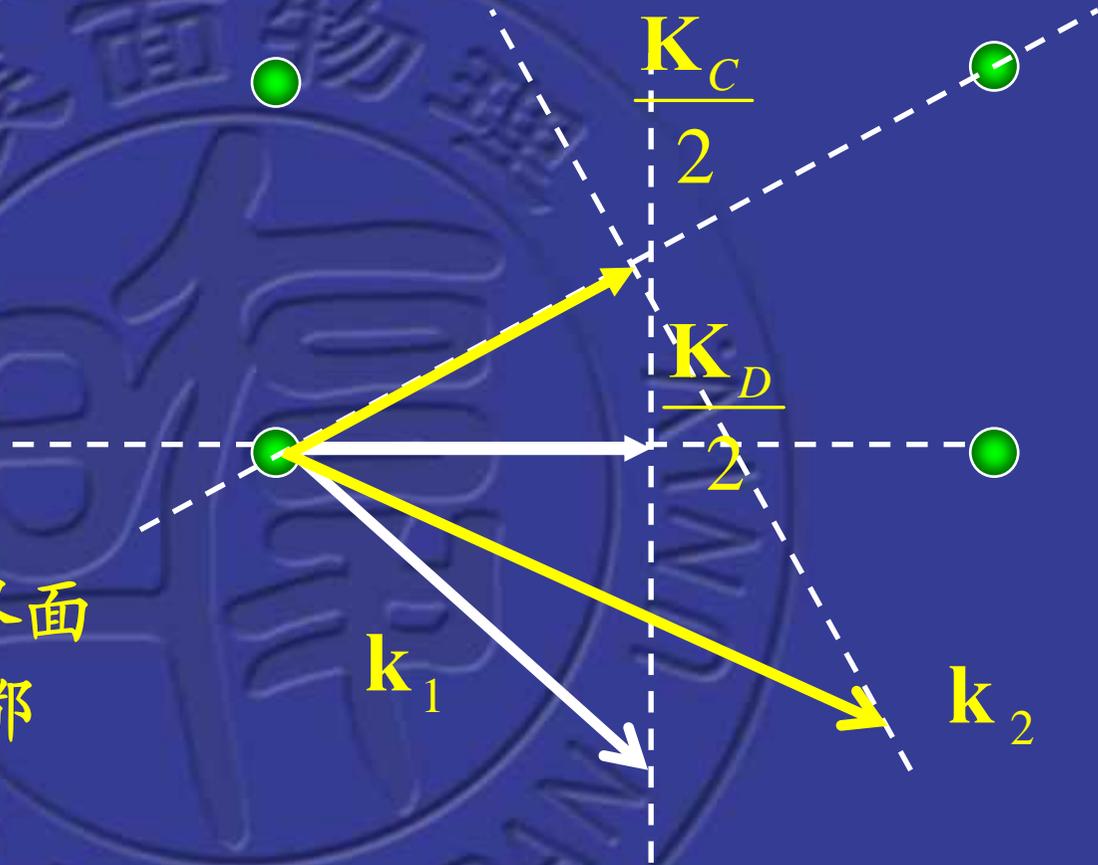
$$\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{K}_h}{2} = \left(\frac{\mathbf{K}_h}{2} \right)^2$$

→视野拓展→由von Laue条件看B区边界

- 由改写的von Laue条件

$$\mathbf{k} \cdot \left(\frac{\mathbf{K}}{2} \right) = \left(\frac{\mathbf{K}}{2} \right)^2$$

- 从原点出发到Brillouin区边界面上的任何矢量都满足衍射条件!



→视野拓展→由von Laue条件看B区边界

- Brillouin区边界面上的任何矢量都满足衍射极大这个条件→重要性质

→能隙：该能量区域内无电子！

- * 在电子不受原子作用(比如自由电子，因而无晶格也因而无Brillouin区边界)时，电子能量 $E(\mathbf{k})$ 是连续的
- * 在电子受原子作用时(因而有晶格也因而存在Brillouin区边界)，电子受Brillouin边界的散射，连续能级会形成一个与 \mathbf{k} 有关的能隙→在某些能量区域内，电子不允许存在！
- * 能隙将原来连续分布的能量分割→即所谓能带
- * →能带理论

设问： Bragg条件和von Laue方程仅给出衍射极大的条件，满足衍射条件是不是一定看得见衍射光斑？

这是一个与散射强度有关的问题。散射强度如果由于某些原因而等于零当然也看不到光斑。那么，散射强度与什么有关？

4、散射强度和结构因子

- 衍射束(光斑)的强度由什么来决定?
- von Laue方程也给出了物理原因: 受电子散射
 - * 衍射强度由此得到
 - * X射线与晶体的相互作用, 实际上是晶体中每个原子中电子分布对X射线的散射
 - * Bravais格子的结构决定了衍射极大的条件
- 一个原子中所有电子对X射线的散射总和可以归结为以这个原子为中心的散射

散射强度与哪些因素有关？

- 晶胞内原子具体位置决定了散射的位相（热振动对此有影响）
 - 几何结构因子
- 每个原子中电子的数目和分布决定了该原子的散射能力
 - 原子形成因子

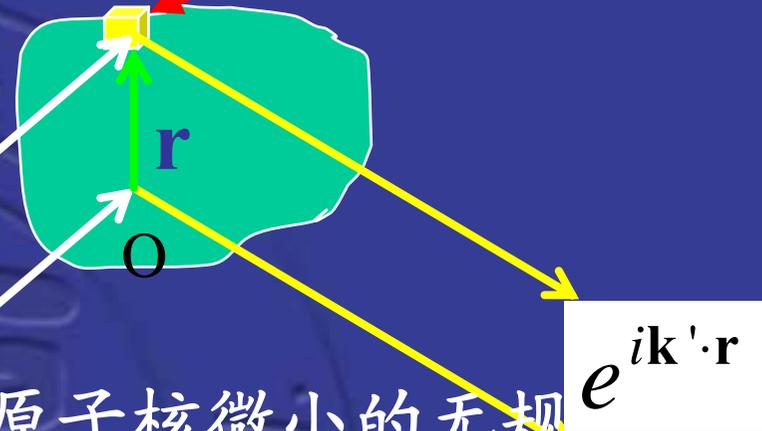
散射强度

- 散射束位相差 ← 点电荷
- * 考虑分布, 则散射振幅为

$$F = \int \rho(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

$$e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}$$

$$\rho(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$



- 与快速运动的电子相比, 对原子核微小的无规则热振动作平均后, 电子分布仍可视作有周期性

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$



$$\rho(\mathbf{r}) = \sum \rho(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$$

- 散射振幅于是可写为

$$F = \sum \rho(\mathbf{K}) \int e^{i[\mathbf{K}-(\mathbf{k}'-\mathbf{k})]\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

- 求和号中的积分只有在 $\mathbf{k}'-\mathbf{k} = \mathbf{K}$ 才不为零
- * 这才是衍射极大的 von Laue 条件严格推导, 前面导出 von Laue 方程时只考虑了光程差位相条件

电荷分布的Fourier展开

- 前面直接给出了因为电荷分布具有平移周期性，所以可作Fourier展开

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum \rho(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$$

- 展开系数是

$$\rho(\mathbf{K}) = V^{-1} \int \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

- 因为周期性，可把积分局限在原胞内，即

$$\rho(\mathbf{K}) = \Omega^{-1} \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \Omega^{-1} S_{\mathbf{K}}$$

- 于是

$$S_{\mathbf{K}} = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

* 这就是几何结构因子

几何结构因子

$$S_{\mathbf{K}} = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^s \rho_j(\mathbf{r} - \boldsymbol{\tau}_j)$$

$$S_{\mathbf{K}} = \sum_j \int_{\Omega} \rho_j(\mathbf{r} - \boldsymbol{\tau}_j) e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \sum_j e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_j} \int_{\Omega} \rho_j(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \sum_j f_j e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_j}$$

$$S_{\mathbf{K}} = \sum_j f_j e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_j}$$

$$f_j = \int_{\Omega} \rho_j(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

- **几何结构因子**：原胞内所有原子的散射波，在所考虑的方向上的振幅与一个电子作为点电荷的散射振幅之比
 - * 几何结构因子反映原胞内原子的具体分布对散射的影响

原子形成因子

$$f_j = \int \rho_j(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

$$\mathbf{K} \rightarrow 0$$

$$f_j = \int \rho_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = Z_j$$

- 原子形成因子：原子 j 的电荷分布对散射的影响

散射强度——消光条件

- 几何结构因子

$$S_{\mathbf{K}_h} = \sum_j f_j e^{-i\mathbf{K}_h \cdot \boldsymbol{\tau}_j}$$

$$\mathbf{K}_h = h\mathbf{u} + k\mathbf{v} + l\mathbf{w}$$

$$\boldsymbol{\tau}_j = x_j\mathbf{a} + y_j\mathbf{b} + z_j\mathbf{c}$$

$$\mathbf{K}_h \cdot \boldsymbol{\tau}_j = 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)$$

(hkl) : Miller指数, 用晶胞
 x_j, y_j, z_j : 分数

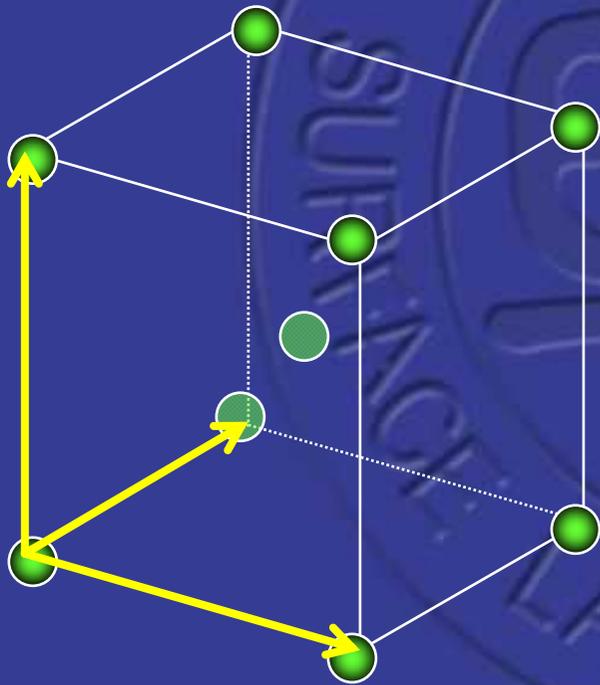
散射强度

$$I_{hkl} \propto |S_{hkl}|^2 = S_{hkl} S_{hkl}^*$$

结构因子有可能使von Laue条件允许的某些衍射斑点消失!

如何确定几何结构因子举例

- bcc结构因子



$$\boldsymbol{\tau}_j : (0.0, 0.0, 0.0); \\ (0.5, 0.5, 0.5)$$

$$\boldsymbol{\tau}_j = x_j \mathbf{a} + y_j \mathbf{b} + z_j \mathbf{c}$$

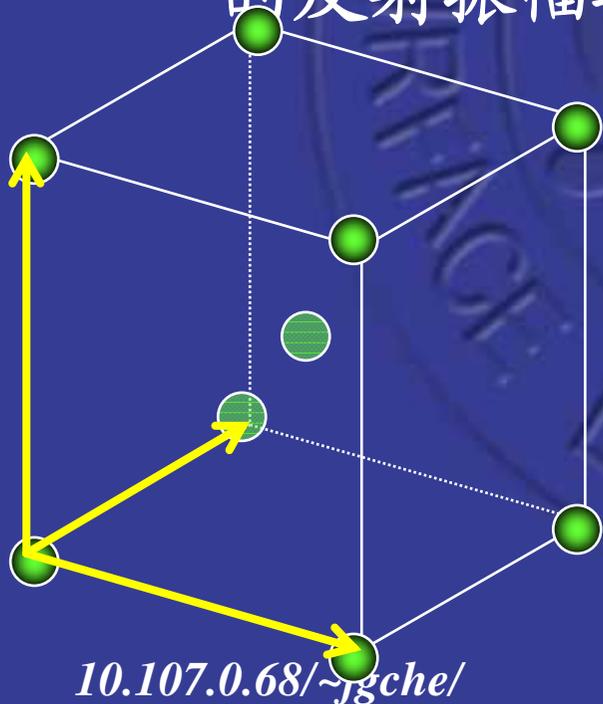
$$S_{\mathbf{K}_h} = \sum_j f_j e^{-i\mathbf{K}_h \cdot \boldsymbol{\tau}_j}$$

$$\mathbf{K}_h \cdot \boldsymbol{\tau}_j = 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)$$

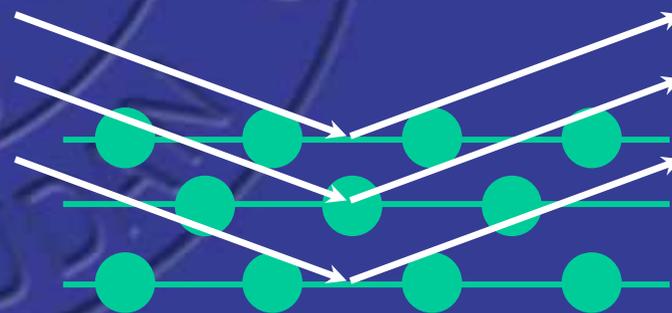
$$S_{\mathbf{K}_h} = f(1 + e^{-i\pi(h+k+l)}) \\ = \begin{cases} 0 & h+k+l = \text{奇数} \\ 2f & h+k+l = \text{偶数} \end{cases}$$

思考： $h+l+k=$ 奇数， $S_{\mathbf{K}}=0$ ，衍射光斑消失！比如(001)面，bcc结构(001)这个晶面(不是这个晶面方向的晶面族)衍射斑点消失？为什么？物理图象？

相邻晶面产生相位差都是 π ，所以产生的反射振幅之和为零，不产生衍射光斑



$$1 + e^{-i\pi} = 1 - 1 = 0$$



例：fcc结构因子

$$\boldsymbol{\tau}_j : (0.0,0.0,0.0); (0.0,0.5,0.5); \\ (0.5,0.5,0.0); (0.5,0.0,0.5)$$

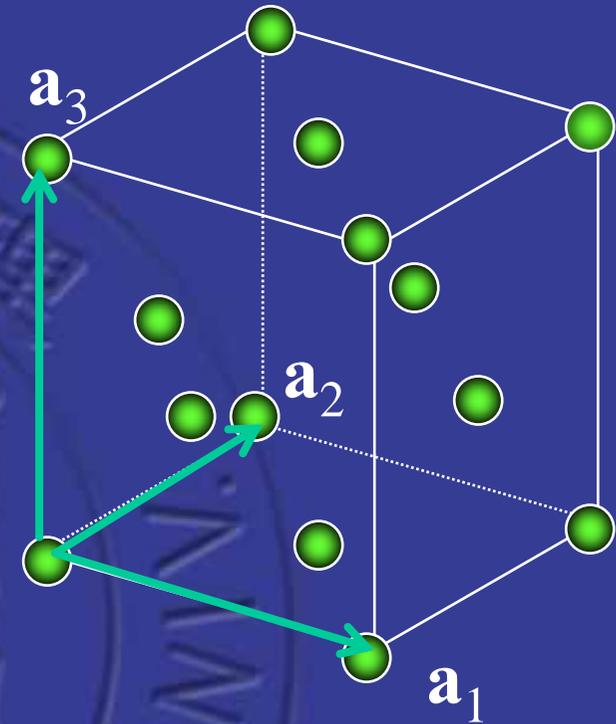
$$\boldsymbol{\tau}_j = x_j \mathbf{a} + y_j \mathbf{b} + z_j \mathbf{c}$$

$$S_{\mathbf{K}_h} = \sum_j f_j e^{-i\mathbf{K}_h \cdot \boldsymbol{\tau}_j}$$

$$\mathbf{K}_h \cdot \boldsymbol{\tau}_j = 2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)$$

$$S_{\mathbf{K}_h} = f(1 + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(h+k)})$$

$$S_{\mathbf{K}_h} \neq 0 \quad h, k, l \text{ 全为奇数或偶数}$$



也许要问：这里的消光的例子都是晶胞！如不用密勒指数，而用晶面指数，还会有消光吗？消光在这里的真实含义是什么？

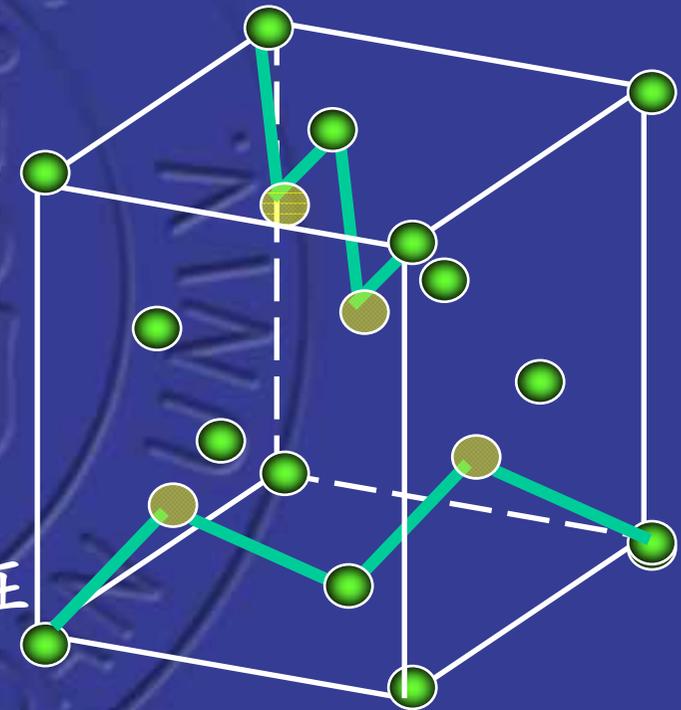
晶胞可以包含一个以上的格点。如果把晶胞看作基本结构，也可用一个点来代表，我们把它叫做结点，以区分格点。那么，结点也满足平移对称性。在正空间，结点数等于或小于格点数；但是，在倒空间，倒结点数就大于等于倒格点数！倒格点代表晶面，密勒指数对应倒结点。这两个例子的消光，就是消除所有不是格点的结点

也许再问：不用密勒指数，而用晶面指数，就不存在消光现象了？

如果原胞内只有一个原子，是的！但是原胞内可能并不止一个原子。所以，有两类消光，一类是指密勒指数对应的消光现象，我们前面说了，对应的是结点，另一类请看下面金刚石结构的例子

例：金刚石结构的几何结构因子

- 基矢： $a=ai$, $b=aj$, $c=ak$
- 晶胞含8个原子：(用基矢表示)
- 8个顶角由8个晶胞共享，各1/8，只计1个
 $(0,0,0)$
- 3对面心，每个面由2个晶胞共享，各1/2，计3个
 $(0,0.5,0.5)$; $(0.5,0,0.5)$; $(0.5,0.5,0)$
- 另外有4个在完全在晶胞内，在4条对角线上(四面体中心)
 $(0.25,0.25,0.25)$; $(0.75,0.75,0.25)$;
 $(0.75,0.25,0.75)$; $(0.25,0.75,0.75)$



- 立方晶系，基矢： $\mathbf{a}=a\mathbf{i}$, $\mathbf{b}=a\mathbf{j}$, $\mathbf{c}=a\mathbf{k}$ ，所以

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{a} (h\hat{\mathbf{i}} + l\hat{\mathbf{j}} + k\hat{\mathbf{k}})$$

- 结构因子为

$$S_{\mathbf{K}} = \sum_i f_i e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_i}$$

- 晶胞内位矢为

$$\begin{aligned} &(0,0,0); (0,0.5,0.5); (0.5,0,0.5); (0.5,0.5,0); \\ &(0.25,0.25,0.25); (0.75,0.75,0.25); \\ &(0.75,0.25,0.75); (0.25,0.75,0.75) \end{aligned}$$

- 几何结构因子

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{K}} = f &(1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+l+k)/2} \\ &+ e^{-i\pi(3h+l+3k)/2} + e^{-i\pi(h+3l+3k)/2} + e^{-i\pi(3h+3l+k)/2}) \end{aligned}$$

- 金刚石的结构因子也可以写成两项的乘积，一项是面心立方的相因子

$$(1 + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+k)})$$

- 另一项可由面心立方结构沿对角线移动1/4的对角线长度得到，这个因子是由这样两个原子，即一个在原点，一个在对角线1/4长度距离的相位差，相当于(0,0,0)和(0.25,0.25,0.25)的相因子

$$(1 + e^{-i\pi(h+l+k)/2})$$

- 这两个相因子的乘积就是金刚石结构的几何结构因子，消光条件就容易判断

$$S_{\mathbf{K}} = f(1 + e^{-i\pi(h+l+k)/2})(1 + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)} + e^{-i\pi(h+k)})$$

金刚石结构的属面心立方格子。它的结构因子可以分成两个因子的乘积：其中面心立方格子相因子给出的消光条件，消除的是立方晶胞对应的倒结点，相对于面心立方格子的倒格子所多余的倒结点；而沿对角线移动 $1/4$ 对角线长度所得的相因子就导致另一类消光：是原胞内原子分布结构引起的相干散射而产生的消光

本讲小结：兼答本讲目的所提问题

- 晶体结构衍射理论

- * 衍射极大条件

- # Bragg定律

- # von Laue方程 → 布里渊区边界

- * 散射强度

- # 几何结构因子

$$S_{\mathbf{K}} = \sum_j f_j e^{-i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\tau}_j}$$

- # 原子形状因子

$$f_j = \int \rho_j(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

- 两种不同类型的消光

1. 与晶胞所导致的多余的倒结点有关的消光

2. 与原胞内原子分布引起的相干散射有关的消光

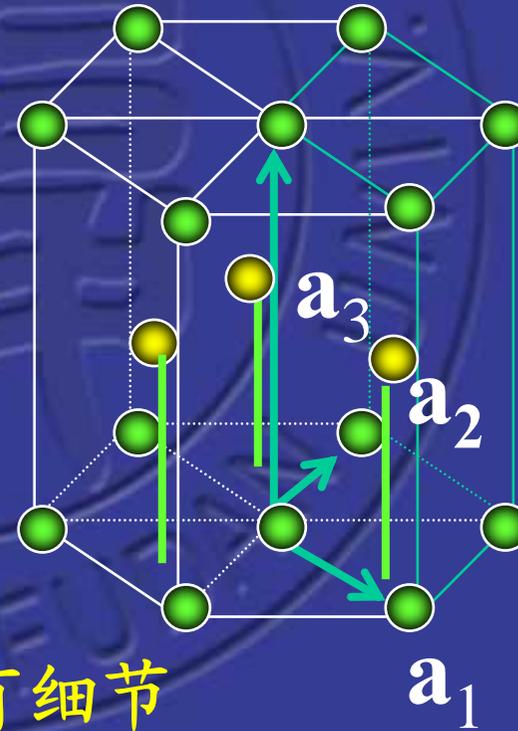
新引入概念

- 衍射极大条件
 - * Bragg反射面
 - * von Laue条件
- 散射振幅
 - * 几何结构因子
 - * 原子形成因子

习题:

10. 六角密堆积结构, 试确定

- ① 晶胞、基矢、晶胞内原子位矢;
- ② 倒格子基矢;
- ③ 几何结构因子;
- ④ 讨论其消光条件。



要能够独立完成, 熟记所有细节

课堂讨论题

- 衍射理论依赖于晶格的平移周期性，但衍射理论假定之一是假定原子刚性固定。如果温度升高，原子作热振动，即使是微小的振动，也偏离了平衡位置，平移周期性必被破坏。设问：这时，衍射极大条件还满足吗？
 - * 实验指出，微小的热振动只影响散射强度，而不影响衍射束宽度！
- 这是为什么？

偏离平衡位置的是原子核，而X射线主要是受电子散射！与快速运动的电子相比，对原子核微小的无规偏移作热平均后即可得这个结论。散射是受电子的散射。