



中南大学

X射线衍射分析技术

X射线衍射原理

材料科学与工程学院

艾延龄

E-mail: ylai@mail.csu.edu.cn

内容

3-1 劳埃方程

3-2 布拉格方程

3-3 衍射的矢量方程与厄瓦尔德球

3-4 总结

X射线衍射的产生机理：

当一束X射线照射到晶体上时，将发生经典散射，这时可以将晶体中的每一个原子看成一个新的散射波源；这些散射波之间由于相互干涉，使得合成波之间的强度随着方向不同而出现增加和减弱。为了探求晶体的衍射规律，劳埃从最简单的一维衍射开始，建立起了劳埃方程式。

一维衍射

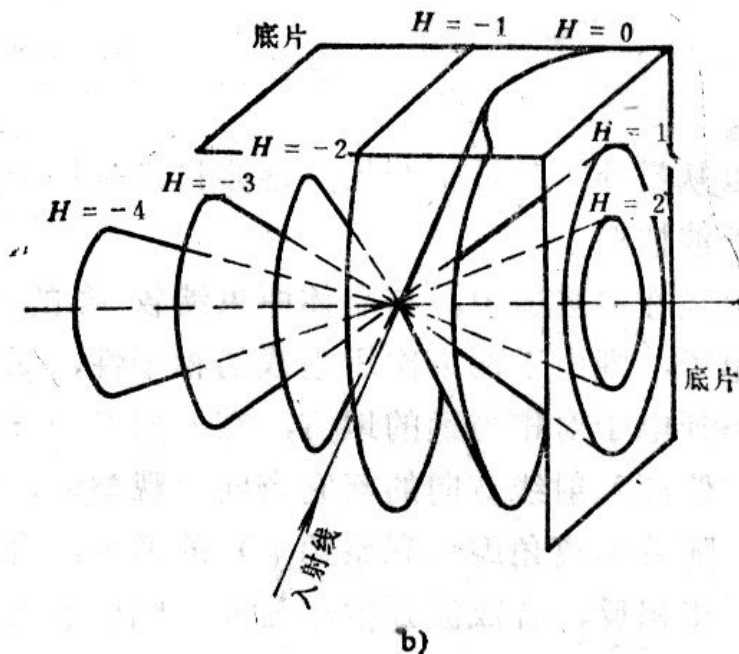
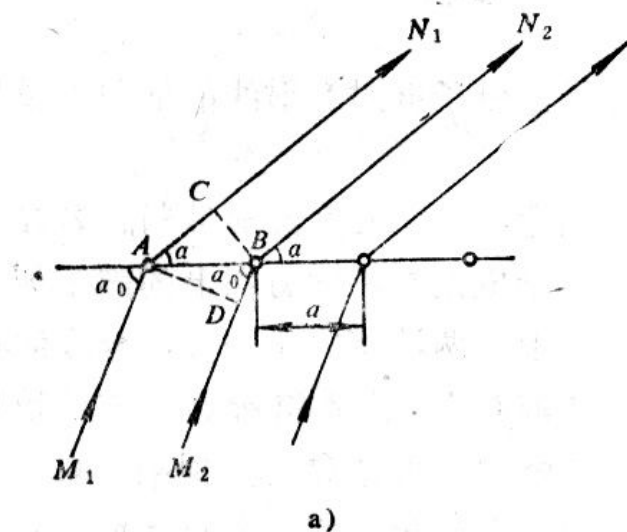


图2-8 原子列的衍射
a) 衍射条件 b) 衍射圆锥

其中 α_0 是入射X射线与原子列的夹角， α 是衍射线与原子列的夹角。

假设在垂直入射方向上所有的X射线光线是同光程的，则在垂直于散射线方向，相邻两原子在该方向上引起的光程差是： $\delta = AC - DB$ ；由图可知：

$$\delta = AC - BD = a(\cos \alpha - \cos \alpha_0)$$

因此在 N_1 、 N_2 方向上，散射线加强的条件是：

$$a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = H\lambda$$

这就是劳埃第一方程式。

H 称为劳埃第一干涉指数，可取： $0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

但它的取值不是无限的，因为入射方向确定以后， $\cos \alpha$ 的值只能取到 -1 到 $+1$ 。每一个 H 值对应一个衍射圆锥。

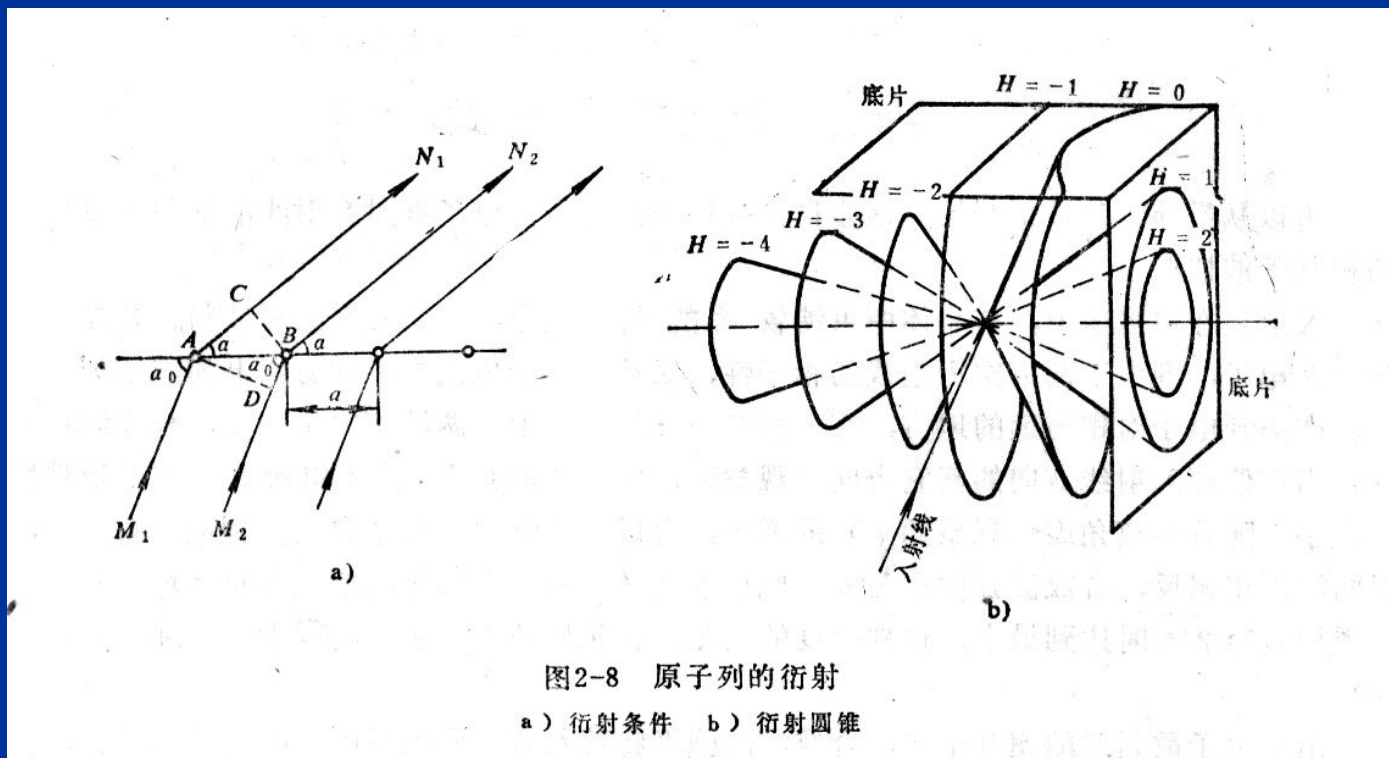


图2-8 原子列的衍射

a) 衍射条件 b) 衍射圆锥

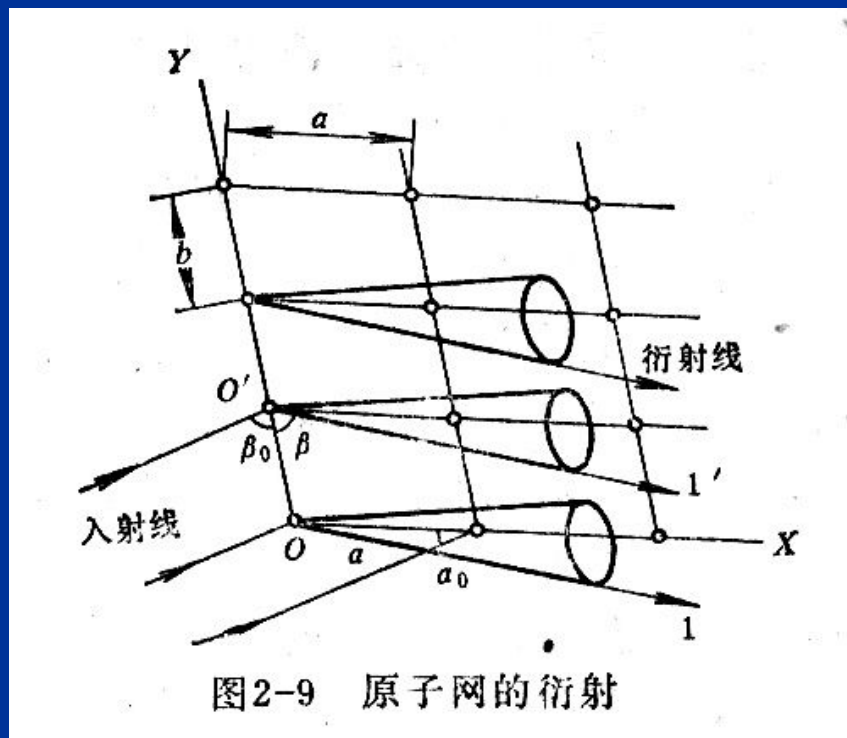
上式表明X射线衍射线分布在一个圆锥面上，锥面的顶角为 2α 。由于 H 可以取若干个数值，故当单色X射线照射原子列时，衍射线分布在一簇同轴圆锥面上，这个轴就是原子列。可以想象，如果在垂直于原子列的方向放上底片，则应该得到一系列的同心圆，如果底片平行原子列，则衍射花样将会是一系列双曲线。

二维衍射

劳埃第二方程式

$$b(\cos \beta - \cos \beta_0) = K \lambda$$

K 为第二干涉指数。



其中 β_0 是入射X射线与原子列的夹角，
 β 是衍射线与原子列的夹角。

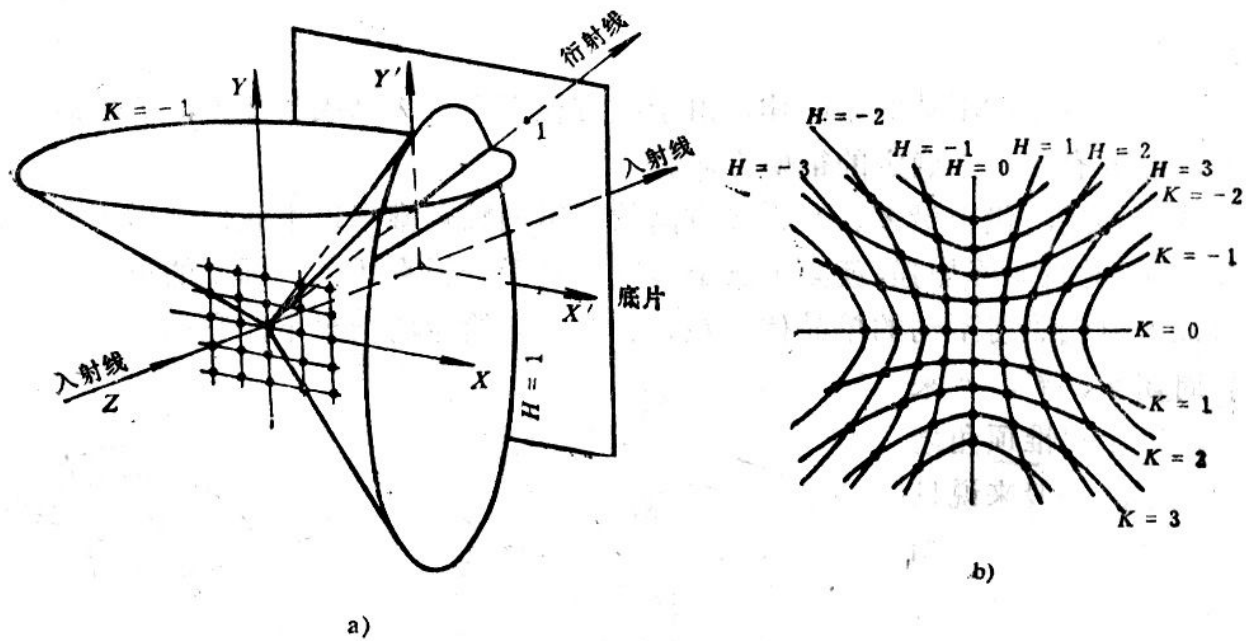


图 2-10

a) 一对衍射圆锥及交线 b) 原子网的衍射图相

$$\begin{cases} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = H \lambda \\ b(\cos \beta - \cos \beta_0) = K \lambda \end{cases}$$

三维衍射

$$\begin{cases} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = H\lambda \\ b(\cos \beta - \cos \beta_0) = K\lambda \\ c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = L\lambda \end{cases}$$

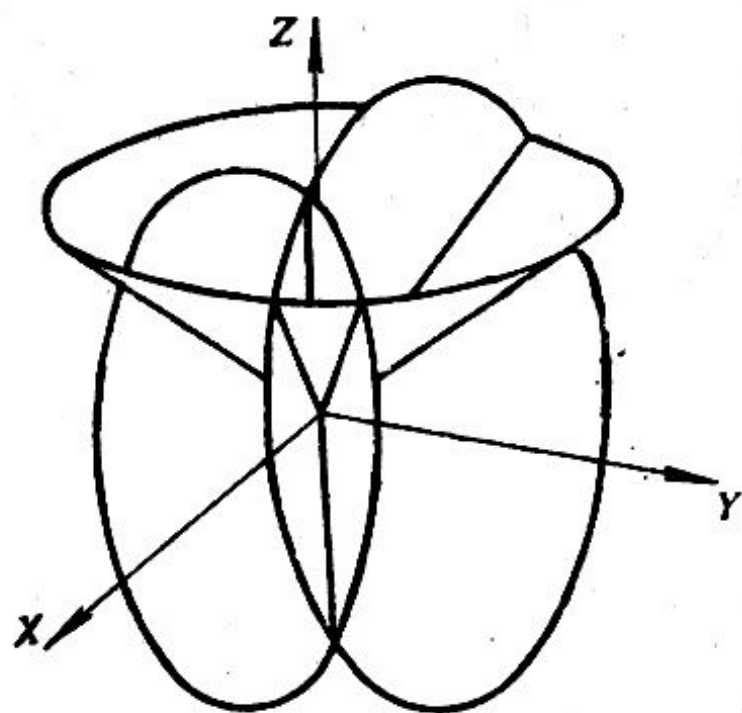
其中 γ_0 是入射X射线与原子列的夹角， γ 是衍射线与原子列的夹角。

最后一个方程式称为劳埃第三方程式， L 为第三干涉指数。

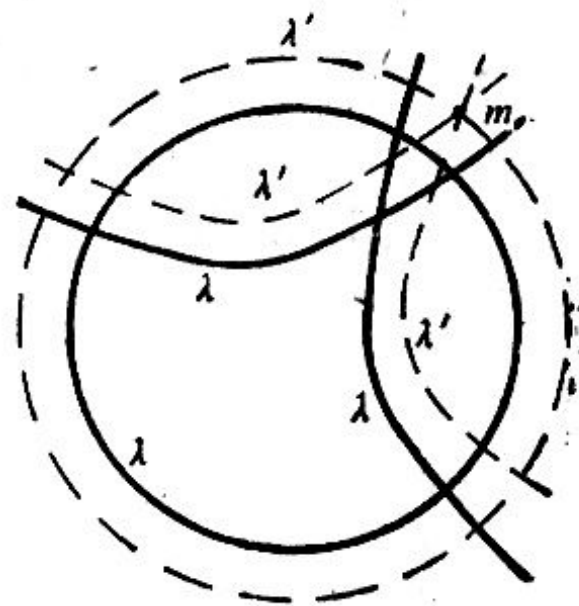
三个方程中，除了 α 、 β 、 γ 外，其余各量均为常数，似乎方程组有唯一解，但其实 α 、 β 、 γ 之间还有一个约束条件。对于直角坐标系，这个条件满足方程式：

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

要从四个方程中解出三个未知数，一般是不可能的，这就意味着用单色X射线照射不动的单晶体，一般不可能获得衍射！



a)



b)

图2-11 三维衍射时的三个衍射圆锥相交

- a) 三个衍射圆锥无公共母线 b) 一般交线情况 (虚线表示采用连续X射线时, 有可能选出一特定波长 λ' 而使三个圆锥相交)

由劳埃方程组可以看到，为了获得X射线衍射花样，必须在方程组中引入第四个变量。用以下的方法可以达到目的：

一、劳埃法

用连续X射线照射不动的单晶体，以得到确定的衍射花样的方法称为劳埃法。劳埃法引入了变量 λ ，四个变量四个方程，方程有唯一的解。

$$\begin{cases} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = H\lambda \\ b(\cos \beta - \cos \beta_0) = K\lambda \\ c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = L\lambda \\ \cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1 \end{cases}$$

■优点：可以用于测定晶体的取向和对称性，分析起来比较简单；

■特点：衍射花样中，同一晶带轴的衍射斑点所构成的形状，取决于晶带轴与入射X射线间的夹角，当夹角小于 45° 时，同晶带斑点围成椭圆，当夹角等于 45° 时，同晶带花样成抛物线，夹角大于 45° 时，同晶带花样成双曲线，当夹角为 90° 时，反射线在底片上留下的是一根过中心斑的直线。

■缺点：衍射花样中反射级不能分辨；斑点强度难以确定。

二、周转晶体法

$$\begin{cases} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = H\lambda \\ b(\cos \beta - \cos \beta_0) = K\lambda \\ c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = L\lambda \end{cases}$$
$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1$$

以晶体某一经过测定的点阵直线作为旋转轴，入射X射线与之相垂直。晶体在旋转过程中，对应这一直线（原子列）入射角总为直角，其它两个入射角虽不断变化，但它们之间总存在确定的关系，实际上只为方程提供了一个新变量，故方程也会有确定的解。

三、粉末法

用单晶X射线照射多晶体（多晶粉末）时，由于多晶试样中的各个微晶取向均不相同，故其效果与周转晶体法十分类似，但数学原理是不相同的。

由于晶体的取向是任意的，使得劳埃方程中本来是已知量的 α_0 、 β_0 、 γ_0 都成为了未知量，初看起来成了四个方程6个未知量，但 α_0 、 β_0 、 γ_0 之间也要满足一定的关系，所以应该是五个方程六个未知量。这说明对应确定的 H 、 K 、 L 值和确定的X射线波长，方程组会有无穷多解（对于每一个晶面，会有无穷个衍射斑点）。

$$\begin{cases} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = H\lambda \\ b(\cos \beta - \cos \beta_0) = K\lambda \\ c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = L\lambda \end{cases}$$

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

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

小结

- 劳埃方程是利用衍射几何原理，利用晶体在三维空间中周期排列的特点推导出来的一组方程；
- 劳埃方程中只有三个未知量，但实质上它包括四个方程式，因此一般情况下是无解的；这意味着当用单色X射线照射不动的单晶体时，一般不可能获得衍射；
- 获得衍射的方法有劳埃法、旋转晶体法和粉末法；其中用劳埃方程组可以计算劳埃法获得的衍射花样，但是不能确定衍射的级和衍射斑的强度。

内容

3-1 劳埃方程

3-2 布拉格方程

3-3 衍射的矢量方程与厄瓦尔德球

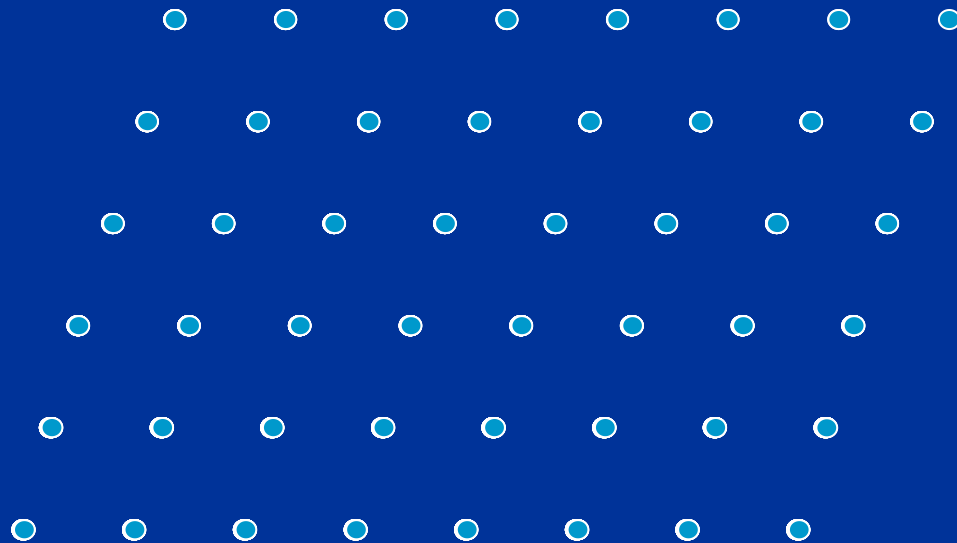
3-4 总结

在推导布拉格方程之前，先讨论两个问题：

问题一：

一束平行光（垂直于入射方向同光程）照在一个原子面上之后发生散射，如果在某个散射方向散射束中的任意两支光线仍然是同光程的（或者说入射光经原子面散射后光程差不发生改变），试证明该原子面一定处于入射光和散射光的反射面位置。

问题二



如果将上述几何点在空间无限扩展，则从中间的任意一点向任意方向作直线是不是都能交到其它的几何点？

布拉格方程的思路：

劳埃方程从理论上解决了X射线在晶体中的衍射这个问题，但在实际应用中并不方便，从实用角度来看，理论有简化的必要。

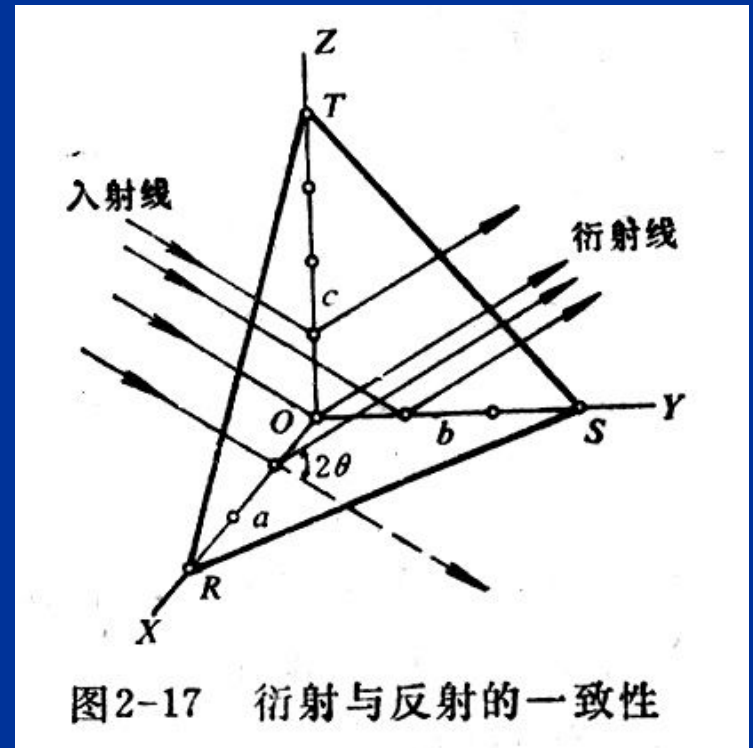
从劳埃方程可以看出，当用单色X射线照射固定的单晶体时，一般情况下是不会发生衍射的，因为四个方程三个未知数一般没解；但是在比较特殊的情况下，比如四个方程中有两个是互成比例的（在某些特殊的入射角度下可能会出现这种情况），就相当于三个未知数三个方程，这时候就会产生衍射。问题是：

在这种情况下衍射会有什么特点???

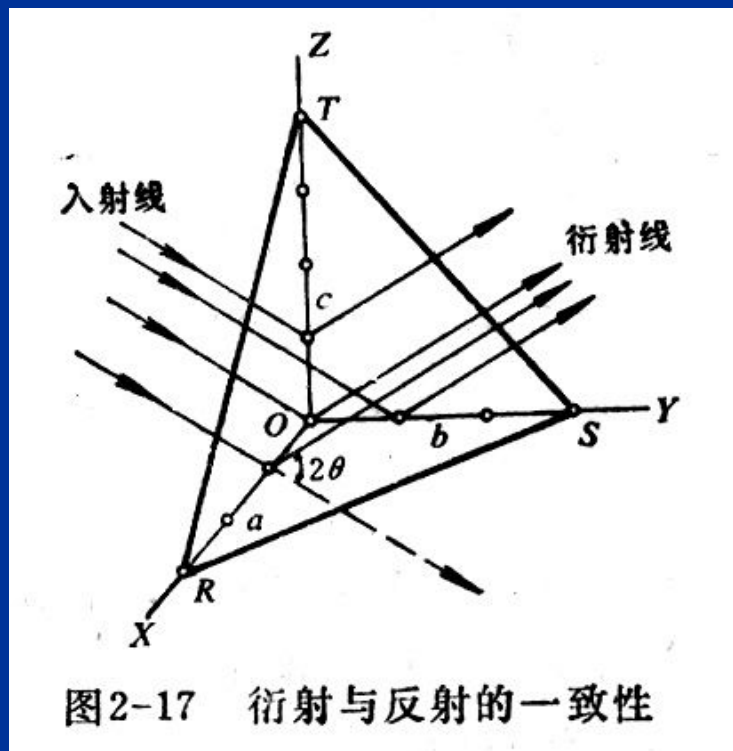
当单色X射线照射到重复周期为 a 、 b 、 c 的单晶体上并且产生衍射时，必定满足以下方程：

$$\begin{cases} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = H\lambda \\ b(\cos \beta - \cos \beta_0) = K\lambda \\ c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = L\lambda \end{cases}$$

方程组表示，在重复周期为 a 、 b 、 c 的结点列上，在 a 原子列上相邻原子散射线在衍射方向上的程差为 $H\lambda$ ，在 b 原子列上相邻原子的程差为 $K\lambda$ ，而在 c 原子列上相邻原子的程差为 $L\lambda$ 。



在X方向寻找一个原子R，使得 $OR=(K^*L)a$ ，于是O与R原子在衍射线方向上的程差为： $(H^*K^*L)\lambda$ ；同样，可以在Y方向寻找到一个原子S，使 $OS=(H^*L)b$ ，在Z方向上找一原子T，使 $OT=(H^*K)c$ 。这样就能使得R、S、T点与O点的程差均为 $(H^*K^*L)\lambda$ ，即从R、S、T点发出的散射线，在散射方向上是同光程的！



结合之前的讨论可知， R 、 S 、 T 三个结点构成的晶面，正好处于入射线和反射线的镜面位置。

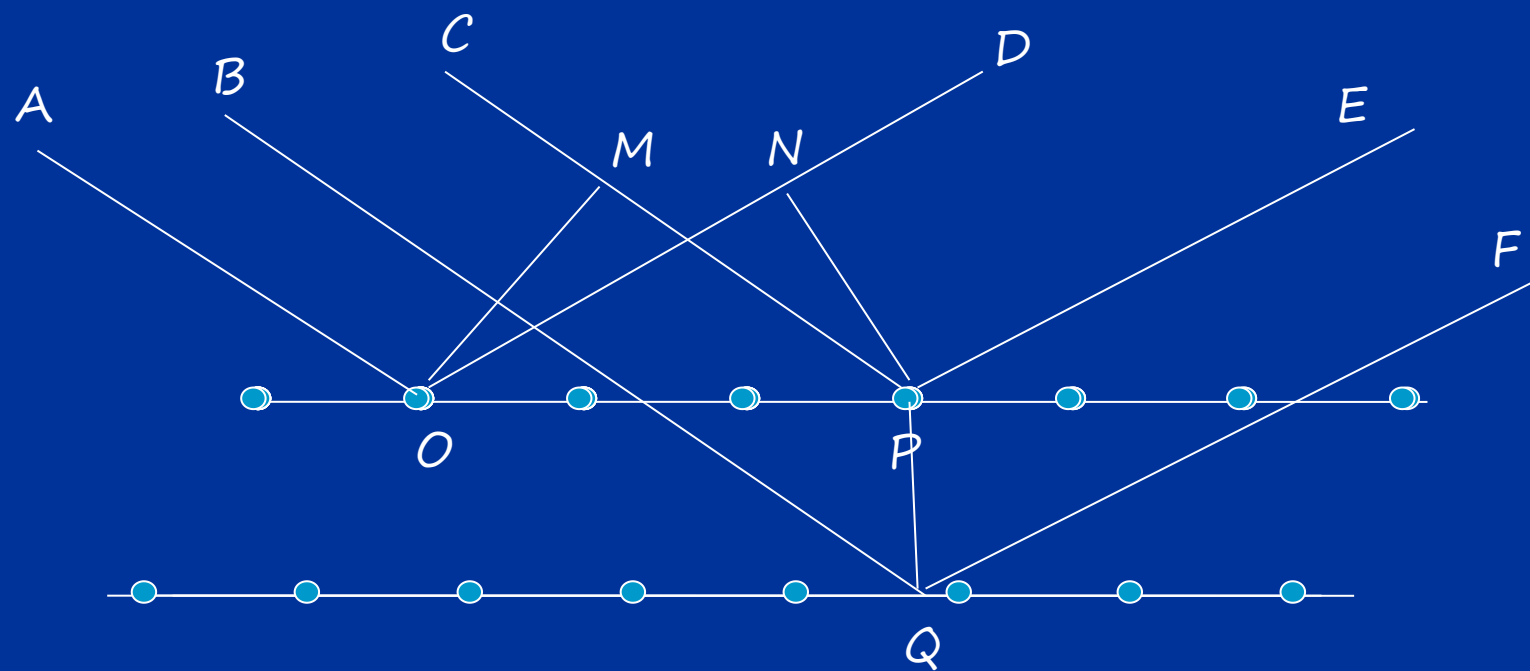
这就证明了，当晶体能产生指数为 H 、 K 、 L 的衍射线时，就必然存在一个实际的晶面，使得这个晶面正好成为入射线和反射线的反射平面！这个平面的指数正好为 (HKL) ，（为什么？）

前面已经证明，当X射线照射单晶体时，只要产生衍射，则必然存在一个实际的晶面，使得这个晶面正好成为入射线和反射线的反射平面。因此可以将衍射问题看成衍射束能不能在某晶面的反射位置得到加强的问题。

晶体可以看成是由平行的原子面堆垛而成，所以晶体的衍射线也应当是由这些原子面的衍射线叠加而得。因此问题变为，晶体在某些方向能否产生衍射，取决于处于反射面位置的晶面能否使反射线方向的X射线互相加强的问题。

既然出现衍射时，一定会有一个实际存在的晶面，正好处于入射线和反射线的反射平面位置；那么反过来，当用单色X射线照射固定的单晶体时，能不能产生衍射，取决于晶体中所有晶体学平面在反射线位置能否加强，如果有加强的，就有可能产生衍射（还要考虑消光）。

而对于某一个平面来讲，能否产生衍射，取决于各层原子面在它的反射方向能否加强。



原子面的入射束和反射束具有如下的特点：

- 同光程的入射束经原子面反射以后，仍然是同光程的；
- 晶体要在反射方向产生衍射，只需要相邻的两层原子面中任意两支光线的程差等于X射线波长的整数倍即可。

为了引入原子面间距这个参量，我们选择垂直于原子面直线上的、分别位于相邻原子面上的点来确定晶体在反射方向的光程差。

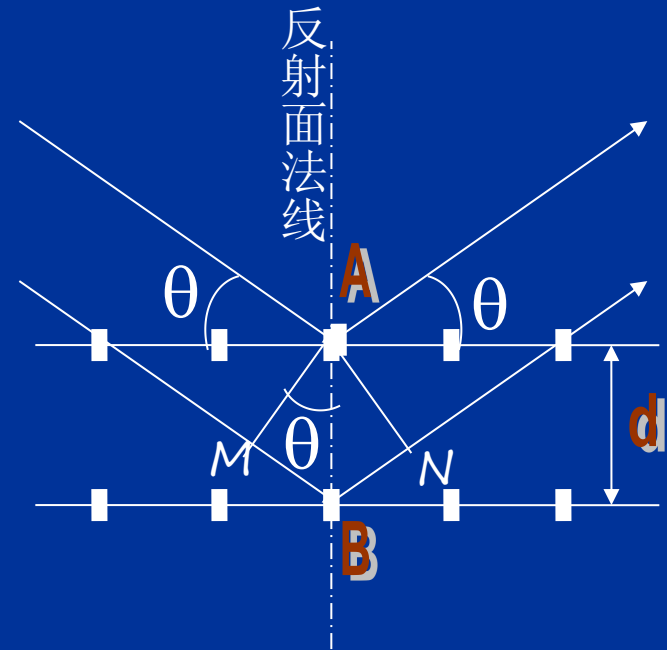
由示意图可知，这时的光程差为：

$$\delta = BM + BN = d \sin \theta + d \sin \theta$$

$$= 2d \sin \theta$$

要在散射方向互相加强，程差应该是波长的整数倍，因此在晶体产生衍射的条件是：

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



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

这就是著名的布拉格方程，它表示不同晶面的反射线若要加强，必要的条件是相邻晶面反射线的程差为波长的整数倍。

式中的 θ 为入射线（或反射线）与晶面的夹角，称为掠射角或者反射角；入射线与衍射线之间的夹角为 2θ ，称为衍射角； d 为晶面间距， λ 为X射线的波长， n 为反射的级。

布拉格方程的讨论：

A 选择反射

将衍射看成是某个晶面的反射，是布拉格方程的基础，但衍射才是本质，反射仅是为了方便描述。

X射线的晶面反射与可见光的镜面反射是完全不同的概念。镜面可以任意角度反射可见光，但X射线只有在满足布拉格条件时才能衍射加强（这时看起来出现了反射）。因此，我们将X射线这种只有在特定角度下才出现的反射（衍射），称之为选择反射。

布拉格方程的讨论：

B 布拉格方程是产生衍射的必要条件而非充分条件

即使是满足布拉格方程，有时候也不会出现衍射，因为晶体中某些晶面由于点阵消光（系统消光）和结构消光等原因，是不可以产生衍射的。因此满足布拉格方程，不一定会出现衍射，但是如果出现了衍射，则其必定满足布拉格方程。

布拉格方程的讨论：

C 反射级数

布拉格方程中的 n 称为反射级数，它表示相邻两个晶面反射出的X射线束，其波程差用波长去度量所得的整数份数。

使用布拉格方程时，一般这样处理：

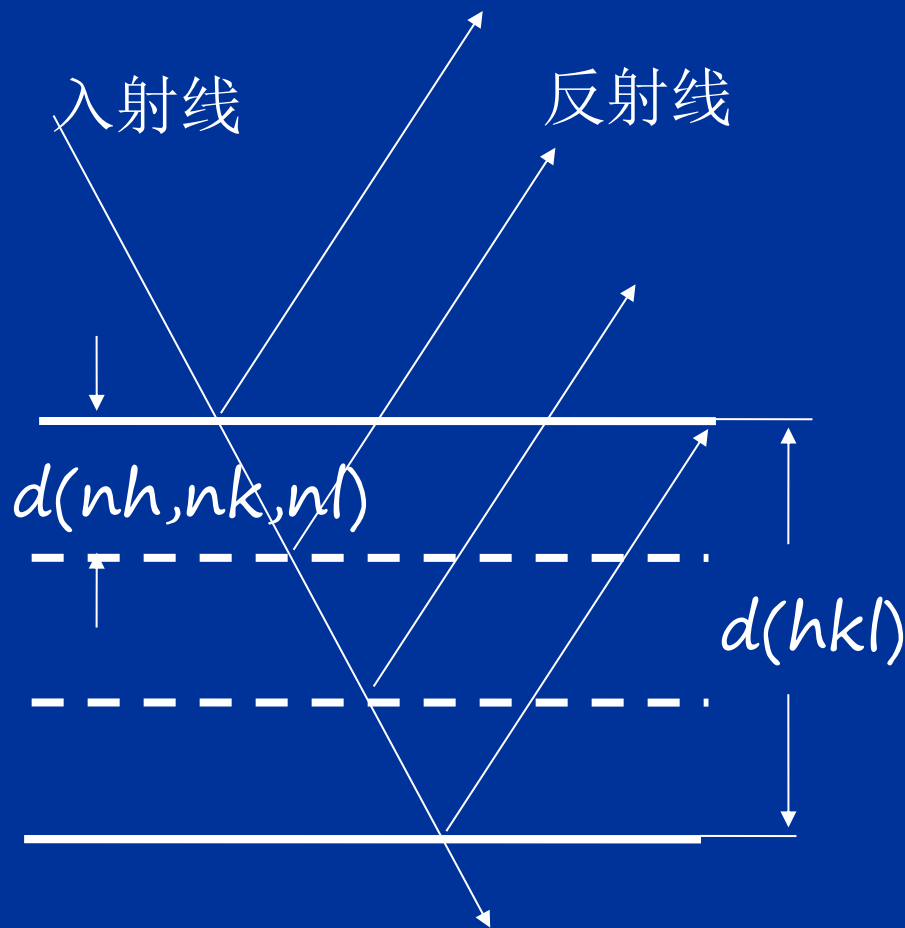
当 (hkl) 原子面产生 n 级反射时，我们就假设在这个原子面中间插入 n 个原子分布与之完全相同的虚拟的原子面，这时相邻原子面间距就为原来面间距的 $1/n$ ，其衍射方向的程差便只有一个波长。虚拟晶面的指数一般写为 (nh, nk, nl) 。

上面的处理方式
可以用如下的公
式来表达：

$$2d_{(hkl)} \sin \theta = n\lambda \Leftrightarrow$$

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

$$\text{其中 } \frac{d_{(hkl)}}{n} = d_{(nh,nk,nl)}$$



如果我们不考虑晶面是否是虚拟的，则布拉格方程可以统一写成如下的形式：

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

这种形式的布拉格方程，在使用上极为方便，它可以认为反射级数永远等于1，因为反射级数已经包含在晶面间距 d 之中。

这种布拉格形式不仅使用方便，而且和倒易点阵以及我们最终得到的实验结果都符合得非常好！

D 干涉面指数

晶面 (hkl) 的 n 级反射面 (nh, nk, nl) , 可以表示成 (HKL) , 称为反射面或者干涉面, 其中 $H=nh$, $K=nk$, $L=nl$; 干涉面的面指数称为干涉指数。 (hkl) 是晶体中实际存在的晶面, (HKL) 则是为了使问题简化而引入的虚拟晶面。

在X射线结构分析中, 如无特别声明, 所用的面间距一般指干涉面间距; 在实际应用中, 一般感觉不到干涉面指数和实际的晶面指数的区别, 比如说在晶面间距的计算中, 干涉面间距和实际晶面的计算方法没有任何区别!

E 掠射角

布拉格方程中， θ 角是入射线或者反射线与晶面的夹角，称为掠射角，它可以表征衍射的方向。将布拉格方程变形后有：

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2d}$$

包含两方面的内容：

- 1、当 λ 一定时， d 相同的晶面，必定在掠射角相同的情况下产生衍射；
- 2、当 λ 一定时， d 减小， θ 增大；即晶面间距较小的晶面，一定会在掠射角较大的方向产生衍射。

F 衍射产生的极限条件

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2d} \rightarrow |\sin \theta| \leq 1$$

包含两方面的内容：

1、当 λ 一定时，只有晶面间距大于或者等于 $\lambda/2$ 的反射面才能产生衍射，当晶面的间距小于 $\lambda/2$ 时，连一级衍射都不能产生；

2、当晶面间距一定时， λ 减小，则掠射角减小的同时，反射的级 n 会增加；当 λ 增加时，反射的级会减小，当 X 射线的半波长大于晶体中的最大晶面间距时，衍射便不能产生。

讨论

假设有这样一个原子面（晶体当然可以看作是由它堆垛而成），当用波长为 λ 的X射线照射晶体时，如果对于该原子面而言，掠射角从0度到90度变化时，在相应的反射方向都不能产生衍射，能否说明该晶体在该波长的X射线照射下都不能产生衍射？为什么？

有关劳埃方程和布拉格方程的讨论

试比较劳埃方程和布拉格方程的异同点。

从以下几个方面考虑：

- 推导两个方程的出发点和思路；
- 公式适用的范围和所受的限制；
- 在使用这两个公式时分别应注意的问题；

小结

■在劳埃方程组的基础上，布拉格证明了在晶体中只要能产生衍射，则必定会有一个实际存在的晶体学平面位于入射束和反射束的反射面位置；因此可以将晶体中的衍射问题看作是各原子面的散射能否在反射方向互相加强的问题；由此推导出了著名的布拉格方程；

■由布拉格方程可知，如果某一个晶面要产生衍射，则其晶面间距必须大于或者等于X射线的半波长，否则连一级衍射都不能产生；反过来，当晶体中的最大晶面间距小于X射线的半波长时，整个晶体将不能产生衍射。

内容

3-1 劳埃方程

3-2 布拉格方程

3-3 衍射的矢量方程与厄瓦尔德球

3-4 总结

衍射的矢量方程

先来看波长为 λ 的X射线，照射到单位矢量为 a 、 b 、 c 的晶体时，看它在什么条件下能产生衍射。

图中：

S_0 : 入射线方向的单位矢量；

S : 衍射线方向的单位矢量；

O : 晶体中的一个原子，可以取作原点；

A : 晶体中除 O 以外的任一原子；

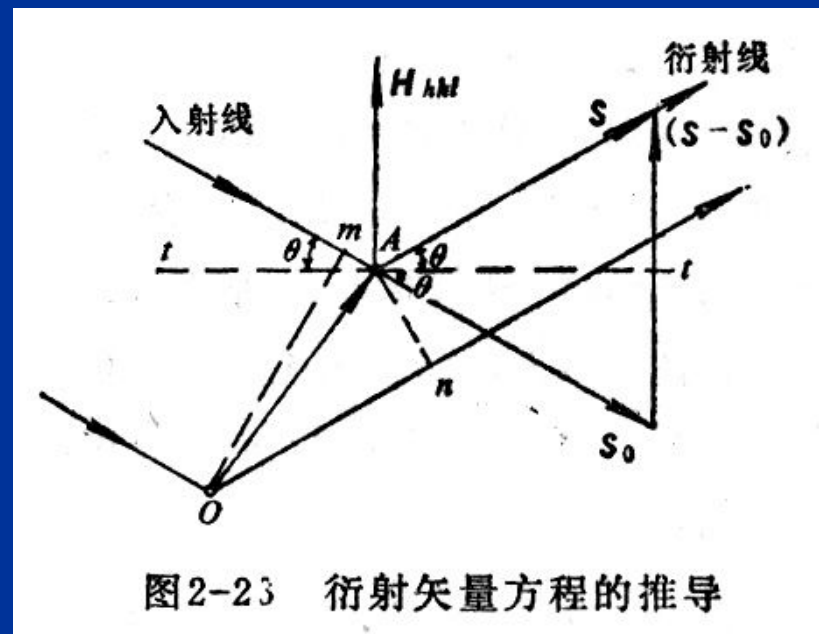


图2-23 衍射矢量方程的推导

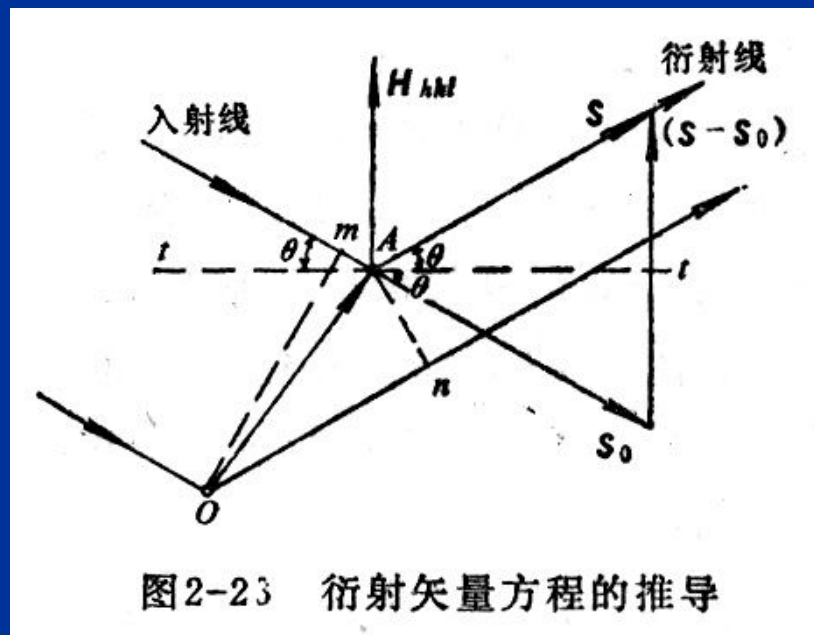
OA : 原子 A 所在位置处的位矢。

在衍射方向两支光线的波程差可以表示为：

$$\begin{aligned}\delta &= OA \cdot n - Am \\ &= OA \cdot S - OA \cdot S_0 \\ &= OA(S - S_0)\end{aligned}$$

相应的周相差为：

$$\Phi = \frac{2\pi}{\lambda} \delta = 2\pi \left(\frac{S - S_0}{\lambda} \right) \cdot OA$$



$$\Phi = \frac{2\pi}{\lambda} \delta = 2\pi \left(\frac{S - S_0}{\lambda} \right) \cdot \mathbf{OA}$$

上式中 \mathbf{OA} 是正空间中原子 A 的位矢，所以可以将其表示为：

$\mathbf{OA} = p\mathbf{a} + q\mathbf{b} + r\mathbf{c}$ ；其中 p 、 q 、 r 均为整数；如果这时我们将 $(S - S_0)/\lambda$ 表示成倒易空间中的一个矢量，就可以将 X 射线衍射条件同正、倒空间点阵同时联系起来。将其写成倒空间的矢量形式就有：

$$(S - S_0)/\lambda = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*； \quad (h, k, l \text{ 暂时为任意值})$$

这时的周相差可以表示为：

$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{2\pi}{\lambda} \delta = 2\pi \left(\frac{S - S_0}{\lambda} \right) \cdot \mathbf{OA} \\ &= 2\pi (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) \cdot (p\mathbf{a} + q\mathbf{b} + r\mathbf{c}) \\ &= 2\pi (hp + kq + lr) \end{aligned}$$

只有当周相差为 2π 的整数倍时，衍射束才能加强，因此 $(hp+kq+lr)$ 必须为一整数才能产生衍射。

由于A是晶体中的某一个原子，而要产生衍射实际上要求晶体中的任意一个原子与原点处的原子周相差都应该是 2π 的整数倍，所以要求 $(hp+kq+lr)$ 中的 p 、 q 、 r 在取遍所有整数时， $(hp+kq+lr)$ 等于整数都能成立，因此 h 、 k 、 l 必定同时为整数。

由以上分析可知，产生衍射的必要条件是：

矢量 $(S-S_0)/\lambda$ 等于倒易矢量中代表某一晶面的倒易矢量。

可以表示成：

$$(S - S_0) / \lambda = ha^* + kb^* + lc^* = \mathbf{H}_{hkl}$$

$$(\mathbf{S} - \mathbf{S}_0) / \lambda = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* = \mathbf{H}_{hkl}$$

上式就是X射线的矢量方程。

劳埃方程和布拉格方程均可由矢量方程推导出来。

将衍射矢量方程的两边同时点乘晶体的三个点阵矢量得：

劳埃方程的
矢量形式：

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{S} - \mathbf{S}_0) / \lambda = a(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) = h$$

$$\mathbf{b} \cdot (\mathbf{S} - \mathbf{S}_0) / \lambda = b(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) = k$$

$$\mathbf{c} \cdot (\mathbf{S} - \mathbf{S}_0) / \lambda = c(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) = l$$

直接可以写成：

$$\begin{cases} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = H\lambda \\ b(\cos \beta - \cos \beta_0) = K\lambda \\ c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = L\lambda \end{cases}$$

由矢量方程导出布拉格方程

由于矢量 $(S-S_0)/\lambda$ 与倒易矢量 H_{hkl} 平行，所以 $(S-S_0)/\lambda$ 必定垂直于正空间的晶面 (hkl) 。由图可知，该晶面必为入射束与衍射束的反射面，因此有如下几何关系：

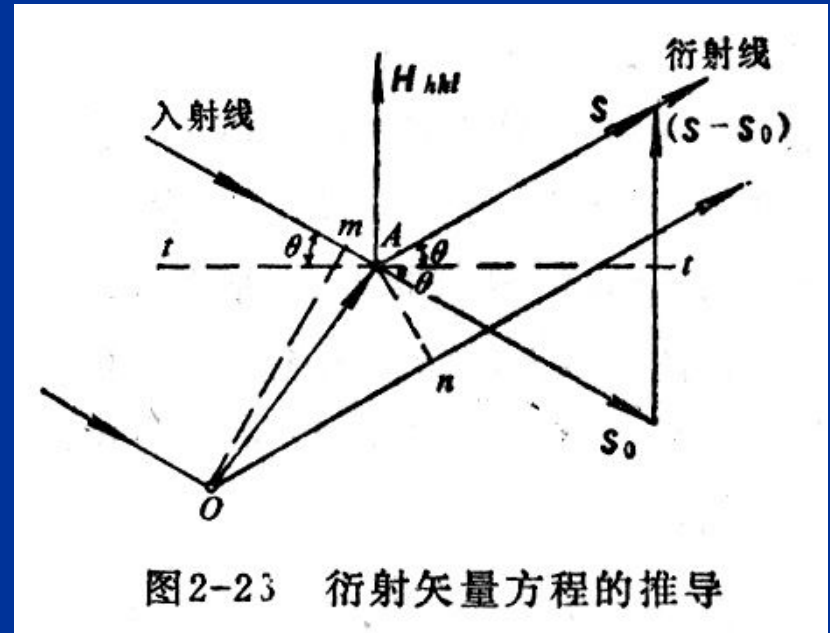
$$(S-S_0) = S \sin \theta + S_0 \sin \theta$$

S 与 S_0 都是单位矢量，有：

$$(S-S_0) = 2S \sin \theta$$

$$\begin{aligned} \text{从而有：} \quad 2 \sin \theta / \lambda &= (S-S_0) / \lambda \\ &= H = 1/d \end{aligned}$$

于是得到布拉格方程： $2d \sin \theta = \lambda$

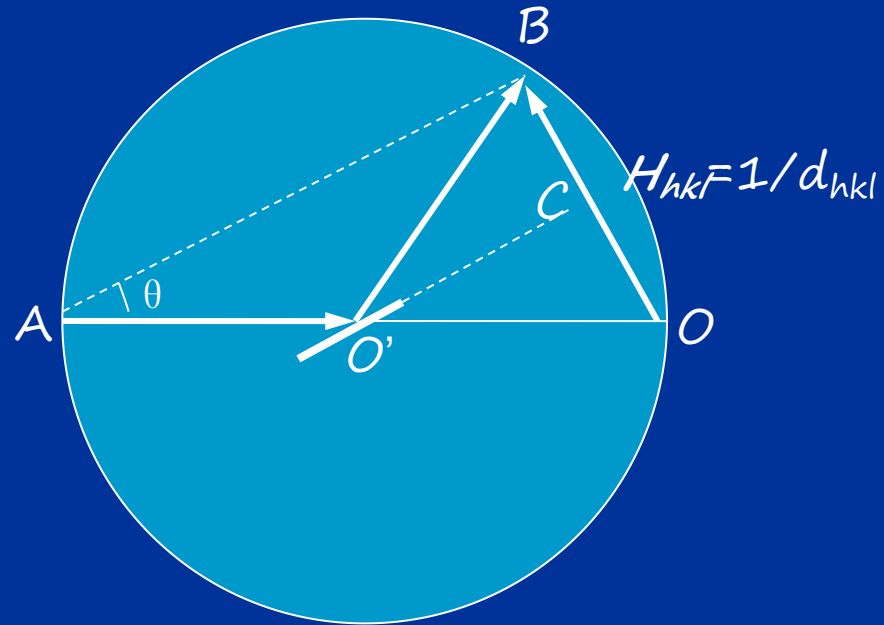


厄瓦尔德球

布拉格方程可以写成：

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2d_{hkl}} = \frac{1}{2\left(\frac{1}{\lambda}\right)}$$

右图即为一反射球，又称之为厄瓦尔德球。



如果以厄瓦尔德球中的 O 点作为与晶体对应的倒易点阵的原点，则只要倒易阵点（对应正空间中的原子面）落在厄瓦尔德球上，则对应的晶面一定满足布拉格条件，从而能产生衍射。

利用厄瓦尔德球可以形象地解释常用的三种X射线衍射方法。

A 劳埃法

该法采用连续X射线照射不动的单晶体。连续谱的波长有一个范围，对应的反射球也会处于两个球面之间，处于这两个球面内的倒易阵点，均会在一定的波长下会满足布拉格条件，从而产生衍射。

B 旋转晶体法

该法采用单色X射线照射转动的单晶体。在晶体转动的过程中，相当于处于O点的倒易点阵绕某个轴旋转，在某一瞬间总会有某一倒易阵点与厄瓦尔德球相交，相交的瞬间，与该倒易阵点对应的晶面就会产生衍射。

C、粉末法

该法采用单色X射线照射多晶试样。相当于位于O点的倒易阵点中，任意位向的阵点都有，则其中总会有与厄瓦尔德相交的，与该套倒易阵点对应的晶粒中，与厄瓦尔德球相交的晶面就能产生衍射。

小结

- 从X射线的入射方向和衍射方向的单位矢量与晶体中原子的位矢之间的关系出发，可以推导出晶体X射线衍射的矢量方程；由矢量方程可以推导出劳埃方程和布拉格方程；
- 以X射线的波长分之一为半径作一个球，以X射线穿过球心后与球的交点为晶体的倒易原点，这时倒易阵点中与晶体中原子面对应的阵点如果落在球面上，则必定满足布拉格方程；这个球称之为反射球，又叫做厄瓦尔德球；用厄瓦尔德球可以形象而方便地解释晶体中的衍射几何问题。

总结

- 劳埃方程是利用衍射几何原理，利用晶体在三维空间中周期排列的特点推导出来的一组方程；
- 劳埃方程中只有三个未知量，但实质上它包括四个方程式，因此一般情况下是无解的；这意味着当用单色X射线照射不动的单晶体时，一般不可能获得衍射；
- 获得衍射的方法有劳埃法、旋转晶体法和粉末法；其中用劳埃方程组可以计算劳埃法获得的衍射花样，但是不能确定衍射的级和衍射斑的强度。
- 在劳埃方程组的基础上，布拉格证明了在晶体中只要能产生衍射，则必定会有一个实际存在的晶体学平面位于入射束和反射束的反射面位置；因此可以将晶体中的衍射问题看作是各原子面的散射能否在反射方向互相加强，由此推导出了著名的布拉格方程；

■由布拉格方程可知，如果某一个晶面要产生衍射，则其晶面间距必须大于或者等于X射线的半波长，否则连一级衍射都不能产生；反过来，当晶体中的最大晶面间距小于X射线的半波长时，整个晶体将不能产生衍射；

■从X射线的入射方向和衍射方向的单位矢量与晶体中原子的位矢之间的关系出发，可以推导出晶体X射线衍射的矢量方程；由矢量方程可以推导出劳埃方程和布拉格方程；

■以X射线的波长分之一为半径作一个球，以X射线穿过球心后与球的交点为晶体的倒易原点，这时倒易阵点中与晶体中原子面对应的阵点如果落在球面上，则必定满足布拉格方程；这个球称之为反射球，又叫做厄瓦尔德球；用厄瓦尔德球可以形象而方便地解释晶体中的衍射几何问题。