

立方晶系单晶电子衍射谱的特征 矩形及边长比规律

张 家 春

提 要 本文向读者展现出立方晶系单晶电子衍射谱的两个重要特征, 它们是:

1. 立方晶系中, 不论何种晶带的电子衍射谱, 均可找到无心或有心的矩形斑点分布;

2. 矩形的邻边比, 具有简单的确定的数学关系。

应用衍射谱的这两个特征, 进行衍射花样的标定, 较之传统方法简单得多。

前 言

根据晶体学知识, 三维晶体共有十四种布拉菲点阵, 而晶体的正空间只有五种平面布拉菲点阵, 倒空间里相应的也只有五种平面布拉菲点阵, 他们是: 矩形(或称长方形)、有心矩形、四方晶系、平行四边形和六角形。在电子衍射谱中出现最多的低对称性斑点配置的平行四边形, 其对应的晶系最不确定, 七大晶系都可能出现这种排列, 对称性愈高的倒易阵点配置, 相应晶系的对称性也愈高^[1]。

立方晶系的对称性是七大晶系中最高者, 尽管入射方向各种各样, 但就其衍射谱的对称性而言, 它应比其他任何晶系都高。

为了研究立方晶系单晶电子衍射谱的标定, 不可不将其花样特点做一探讨, 现将初步结果分述如下。

一、矩 形 规 律

在立方晶系中, 由于晶胞的六个晶格参数 $a_1 = a_2 = a_3 = a$; $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$, 这种高度对称的晶体排列关系, 致使其任意晶面的晶面指数($h k l$)均与该晶面的法线方向指数 $[u v w]$ 相一致, 这样, 便可以找到在同一晶带中晶面间存在一个十分可贵的性

质，即：只要该晶带上存在一个晶面 $(h_1k_1l_1)$ ，则在该晶带上，也一定存在一个晶面 $(h_2k_2l_2)$ 与 $(h_1k_1l_1)$ 相垂直。

譬如，面心立方晶体的 $[1\ 2\ 2]$ 晶带，根据晶带定律（又称垂直公式^[2]） $uh+vk+wl=0$ ，晶面 $(0\ 2\ \bar{2})$ 必在该晶带上，可以找出无数个晶面均在该晶带上。当然，根据几何原理，垂直于 $(0\ 2\ \bar{2})$ 晶面的晶面也有无数个。那么，是否一定存在一个晶面既垂直于 $(0\ 2\ \bar{2})$ 又在 $[1\ 2\ 2]$ 晶带上呢？

因为立方晶系的晶面指数和其法线方向指数相一致，故晶带轴 $[1\ 2\ 2]$ 就是垂直于晶面 $(1\ 2\ 2)$ 的法线。这样，只要找到了既垂直于 $(0\ 2\ \bar{2})$ 晶面，又垂直于 $(1\ 2\ 2)$ 晶面的晶面，这个晶面就是既垂直于 $(0\ 2\ \bar{2})$ 晶面，又在 $[1\ 2\ 2]$ 晶带上的晶面。这个晶面可以用叉乘法求解如下：

$$\begin{array}{r} 1 \vdots 2\ 2, \ 1\ 2 \vdots 2 \\ 0 \vdots 2\ \bar{2}, \ 0\ 2 \vdots \bar{2} \\ \hline \bar{8}\ 2\ 2 \end{array}$$

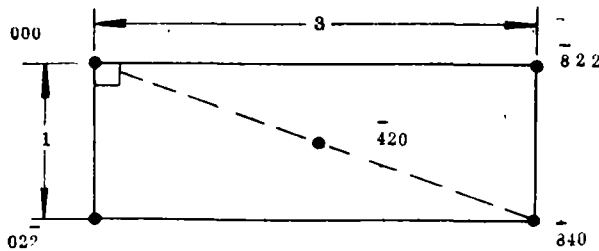


图 1 面心立方 $[1\ 2\ 2]$ 晶带矩形图的建立

晶面 $(\bar{8}\ 2\ 2)$ 即所求。如果将其画在倒易面上，如图 1 所示。

由图 1 可见，将透射斑点 $(0\ 0\ 0)$ 、任选的第一个斑点 $(0\ 2\ \bar{2})$ 、叉乘出来的第二个斑点 $(\bar{8}\ 2\ 2)$ 以及由 $(0\ 2\ \bar{2})$ 和 $(\bar{8}\ 2\ 2)$ 矢量相加得到的第三个斑点 $(\bar{8}\ 4\ 0)$ 连接起来，便构成一个矩形。再添上一个不消光的 $(\bar{4}\ 2\ 0)$ ，则构成一个有心矩形。

以此类推，立方晶系各种晶带的衍射花样中，都存在着这种矩形关系，我们可以利用这种关系快速绘制出立方晶系标准单晶电子衍射谱^[3]。将图 1 按二维方向平移，便得一幅完整的面心立方晶体的 $[1\ 2\ 2]$ 晶带的标准单晶电子衍射谱。如图 2 所示。

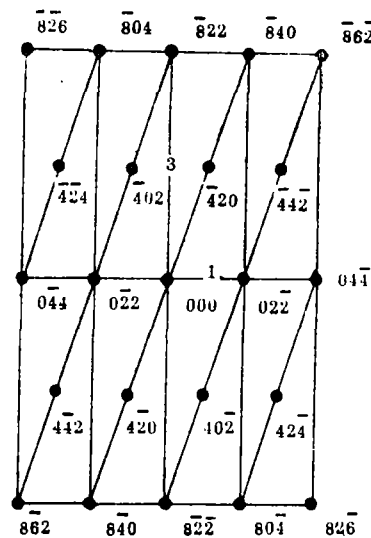


图 2 面心立方 $[1\ 2\ 2]$ 晶带标准单晶电子衍射谱

二、矩形边长比规律

如前所述,在标准电子衍射谱中,垂直第一个晶面 $(h_1k_1l_1)$ 的第二个晶面 $(h_2k_2l_2)$ 是由矢量叉乘法确定的,所以,它不仅确定第二个晶面的晶面指数(即方向关系),而且也可以确定矩形的边长比(即数量关系)。这种关系是:

$$r_2/r_1 = \frac{n}{m} \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$$

式中 u, v, w —晶带指数; $r_1 = \sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}$ — $[u v w]$ 晶带上任意一个晶面 $(h_1k_1l_1)$ 的衍射斑点到透射斑点 $(0 0 0)$ 间的距离; $r_2 = \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}$ — $[u v w]$ 晶带上垂直于 $(h_1k_1l_1)$ 晶面的晶面 $(h_2k_2l_2)$ 的衍射斑点到透射斑点 $(0 0 0)$ 间的距离。

m, n 均为包括1的非零整数,1, 2, 3, ..., 但大部分为1。

这个公式的证明是很简单的,不在这里赘述。作者称此公式为矩形边长比公式。由此公式可以看出:

1. 矩形的长短边长之比,就是该晶带的方向指数的平方和的平方根;
2. 按 $u v w$ 由小到大的次序,矩形长短边长之比依次应为: $\sqrt{1}, \sqrt{2}, \sqrt{3}, \sqrt{4}, \sqrt{5}, \sqrt{6}, \sqrt{8}, \dots, \sqrt{18}, \sqrt{19}, \dots$,而不会出现 $\sqrt{7}, \sqrt{15}, \sqrt{23}, \dots$, [4]
3. 长短边长之比的平方永远是整数 [4];
4. 晶带轴指数越低,矩形的长短边越接近,当 $[u v w] = [0 0 1]$ 时,矩形变成了正方形;
5. 晶带轴指数越高,矩形的长短边之比越大(因设短边 r_1 为分母),矩形越窄长。

三、图表及讨论

按照立方晶系 N 值递增顺序, $u v w$ 均取正值且不换位,列出面心立方及体心立方单晶电子衍射谱的矩形参数和示意图,如附表1,附表2所示,其中

$$N = u^2 + v^2 + w^2 [5]$$

其他符号的意义同前。

1. 因为 $[u v w]$ 中三指数的位置调换或添加正负号,都不影响 $\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$ 的值,所以,矩形边长比不变。由此说明附表1、附表2包括了 $N = 29$ 以内面心立方和体心立方所有晶带的单晶电子衍射谱图形样式;

2. 附表1及附表2中的 $(h_1k_1l_1)$ 均按离 $(0 0 0)$ 最近的斑点标定,所以,对应于每一 N 值的图形是确定的, $|h_1|, |k_1|, |l_1|, |h_2|, |k_2|, |l_2|$ 也是确定的;

3. 除面心立方的 $[0 1 1], [1 1 2], [1 2 3], [1 1 4], [1 3 4]$ 及体心立方的 $[0 1 3], [1 2 4], [0 1 5]$ 晶带,由于 $(h_2k_2l_2)$ 消光现象等原因使 r_2/r_1 要扩大或缩小2或3倍外,其余的晶带的矩形边长比 r_2/r_1 均等于 \sqrt{N} ;

4. 因 $[0 0 2], [0 0 3], [0 0 4], [0 0 5]$ 晶带就是 $[0 0 1]$ 晶带; $[0 2 2],$

[0 3 3]晶带就是[0 1 1]晶带; [2 2 2]、[3 3 3]晶带就是[1 1 1]晶带; [0 2 4]、[2 2 4]晶带就是[0 1 2]、[1 1 2]晶带, 所以, N 值不会出现4, 8, 12, 16, 20, 24等。

参 考 文 献

- [1] 黄孝瑛, 透射电子显微学(电子衍射部分), 钢铁研究总院, 103—104页。
- [2] 杨国力, 艾宝瑞著, 单晶高压电子衍射分析方法——特征基本平行四边形分析法, 科学出版社, 19—21页, 1979年3月, 北京。
- [3] 张家春, 快速绘制标准单晶电子衍射谱的方法——矩形法, 国防科技大学学报, 1984年, 第2期, 87—90页。
- [4] [美], B·D·柯列迪著, 冯根源译, X射线金属学, 中国工业出版社, 1965年3月, 第一版, 204页。
- [5] 陈世朴, 王永瑞合编, 金属电子显微分析, 机械工业出版社, 1982年7月, 北京第一版, 第68页。

面心立方晶体单晶电子衍射谱的矩形参数及示意图

附表 1

N	$[uvw]$	$(h_1k_1l_1)$	$(h_2k_2l_2)$	r_2/r_1	r_2/r_1 之 近似值	矩 形 示 意 图
1	0 0 1	2 0 0	0 2 0	$\sqrt{1}$	1.000	
2	0 1 1	$1\ 1\ \bar{1}$	$\bar{2}\ 1\ \bar{1} \times 2$ $4\ 2\ \bar{2}$	$2\sqrt{2}$	2.828	
3	1 1 1	$2\ \bar{2}\ 0$	$2\ 2\ \bar{4}$	$\sqrt{3}$	1.732	
5	0 1 2	2 0 0	$0\ 4\ \bar{2}$	$\sqrt{5}$	2.236	
6	1 1 2	$1\ 1\ \bar{1}$	$\bar{3}\ 3\ 0 \times \frac{2}{3}$ $\bar{2}\ 2\ 0$	$\frac{2}{3}\sqrt{6}$	1.633	

附表 1 续

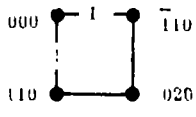
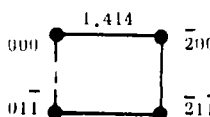
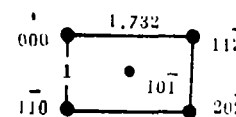
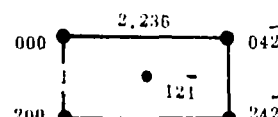
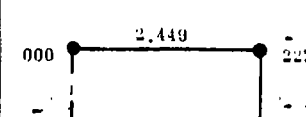
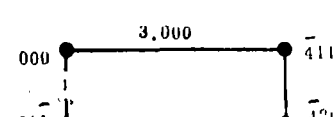
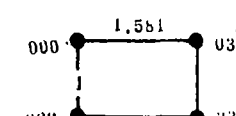
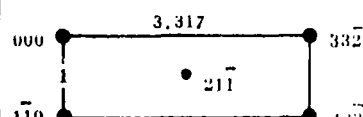
9	1 2 2	0 2 $\bar{2}$	8 $\bar{2}$ $\bar{2}$	$\sqrt{9}$	3.000	
10	0 1 3	2 0 0	0 6 $\bar{2}$	$\sqrt{10}$	3.162	
11	1 1 3	2 $\bar{2}$ 0	6 6 $\bar{4}$	$\sqrt{11}$	3.317	
13	0 2 3	2 0 0	0 6 $\bar{4}$	$\sqrt{13}$	3.606	
14	1 2 3	1 1 $\bar{1}$	$\bar{5}$ 4 $\bar{1} \times 2$ $\bar{10}$ 8 $\bar{2}$	$2\sqrt{14}$	7.483	
17	0 1 4	2 0 0	0 8 $\bar{2}$	$\sqrt{17}$	4.123	
17	2 2 3	2 $\bar{2}$ 0	6 6 $\bar{8}$	$\sqrt{17}$	4.123	
18	1 1 4	2 $\bar{2}$ 0	8 8 $\bar{4} \div 2$ 4 4 $\bar{2}$	$\frac{1}{2}\sqrt{18}$	2.121	
19	1 3 3	0 2 $\bar{2}$	$\bar{12}$ 2 2	$\sqrt{19}$	4.359	

附表 1 续

21	1 2 4	4 $\bar{2}$ 0	8 1 6 $\bar{10}$	$\sqrt{21}$	4.583	
22	2 3 3	0 2 $\bar{2}$	$\bar{12}$ 4 4	$\sqrt{22}$	4.690	
25	0 3 4	2 0 0	0 8 $\bar{6}$	$\sqrt{25}$	5.000	
26	0 1 5	2 0 0	0 10 $\bar{2}$	$\sqrt{26}$	5.099	
26	1 3 4	1 1 $\bar{1}$	$\bar{7}$ 5 $\bar{2} \times 2$ $\bar{14}$ 10 $\bar{4}$	$2\sqrt{26}$	10.198	
27	1 1 5	2 $\bar{2}$ 0	10 10 $\bar{4}$	$\sqrt{27}$	5.196	
29	0 2 5	2 0 0	0 10 $\bar{4}$	$\sqrt{29}$	5.385	
29	2 3 4	4 0 $\bar{2}$	$\bar{6}$ 20 $\bar{12}$	$\sqrt{29}$	5.385	

体心立方晶体单晶电子衍射谱的矩形参数及示意图

附表 2

N	$[uvw]$	$(h_1k_1l_1)$	$(h_2k_2l_2)$	r_2/r_1	r_2/r_1 之 近似值	矩 形 示 意 图
1	0 0 1	1 1 0	$\bar{1}$ 1 0	$\sqrt{1}$	1.000	
2	0 1 1	0 1 $\bar{1}$	$\bar{2}$ 0 0	$\sqrt{2}$	1.414	
3	1 1 1	1 $\bar{1}$ 0	1 1 $\bar{2}$	$\sqrt{3}$	1.732	
5	0 1 2	2 0 0	0 4 $\bar{2}$	$\sqrt{5}$	2.236	
6	1 1 2	1 $\bar{1}$ 0	$\bar{2}$ 2 $\bar{2}$	$\sqrt{6}$	2.449	
9	1 2 2	0 1 $\bar{1}$	$\bar{4}$ 1 1	$\sqrt{9}$	3.000	
10	0 1 3	2 0 0	$0\ 6\ \bar{2} \div 2$ $0\ 3\ \bar{1}$	$\frac{1}{2}\sqrt{10}$	1.581	
11	1 1 3	1 $\bar{1}$ 0	$\bar{3}\ 3\ \bar{2}$	$\sqrt{11}$	3.317	

附表 2 续

13	0 2 3	2 0 0	0 6 4	$\sqrt{13}$	3.606	
14	1 2 3	3 0 1	2 10 6	$\sqrt{14}$	3.742	
17	0 1 4	2 0 0	0 8 2	$\sqrt{17}$	4.123	
17	2 2 3	1 1 0	3 3 4	$\sqrt{17}$	4.123	
18	1 1 4	1 1 0	4 4 2	$\sqrt{18}$	4.243	
19	1 3 3	0 1 1	6 1 1	$\sqrt{19}$	4.359	
21	1 2 4	2 1 1	$\frac{6}{3} 9 \bar{3} \div 3$ $\bar{2} 3 \bar{1}$	$\frac{1}{3}\sqrt{21}$	1.528	
22	2 3 3	0 1 1	6 2 2	$\sqrt{22}$	4.690	
25	0 3 4	2 0 0	0 8 6	$\sqrt{25}$	5.000	

附表 2 续

26	0 1 5	2 0 0	$0 10 \bar{2} \div 2$ $0 5 \bar{1}$	$\frac{1}{2}\sqrt{26}$	2.550	
26	1 3 4	3 1 0	4 12 10	$\sqrt{26}$	5.099	
27	1 1 5	1 1 0	5 5 2	$\sqrt{27}$	5.196	
29	0 2 5	2 0 0	0 10 4	$\sqrt{29}$	5.385	
29	2 3 4	1 2 1	11 2 7	$\sqrt{29}$	5.385	

The Characteristics of the Single-Crystal Electron Diffraction Patterns in Cubic System—the Regularity of Rectangle and Regularity of the Proportion between Its Two Adjacent Sides

Zhang Jiachun

Abstract

This paper presents before the readers two important features of single-crystal electron diffraction patterns in the cubic system.

1. In cubic system, whatever crystal electron diffraction pattern it is, you can find the rectangular spotty arrangement with or without center.
2. There is a simple definite mathematical relationship between the adjacent sides of the rectangle.

Applying these two features to designate diffraction patterns will be much simpler than the conventional method.