

用矩形法快速绘制密排六方晶体 标准单晶电子衍射谱

张 家 春

提 要 本文介绍一种快速绘制密排六方晶体标准单晶电子衍射谱的新方法,称为矩形法。它不仅和传统的绘制衍射谱的方法不同,而且和绘制立方晶系标准衍射谱的矩形法也不同。这里采用了三个数学转换因子 a 、 b 、 c ,使绘制过程大大简化。几乎和立方晶系标准电子衍射谱的绘制过程一样简单。

一、前 言

金属的晶体结构类型有三种,它们是体心立方、面心立方和密排六方^[1]。对于体心立方和面心立方结构,由于其对称性较高,可以采用矩形法来绘制标准单晶电子衍射谱^[2],也可用矩形的边长比和矩形的不同点列特征(有心、无心、偏心、多心等)来标定衍射谱^{[3][4]}。这种标定方法比传统的平行四边形法要快且准。

对于密排六方结构的单晶,由于其对称性较差^[5],给绘制标准单晶电子衍射谱以及衍射谱的标定工作都带来了较大的麻烦。但能否使密排六方晶体的标准单晶电子衍射谱的绘制工作也得到简化呢?本文就是采用矩形法绘制密排六方晶体单晶电子衍射谱的初步探讨。笔者对具有密排六方电子衍射谱的九种文献^[5-13]近一百张图谱进行了校验,证明本文的方法简便、准确,并查出了上述图谱中的一些错误。

二、作图方法

密排六方晶体的标准单晶电子衍射谱的绘制,大体可分六步进行。即:确定 $[uvw]$ 、 $(h_1k_1l_1)$ 、 abc 、 $(h_2k_2l_2)$ 、 r_2/r_1 、作图。兹分述如下:

1. 确定 $[uvw]$

密排六方晶体,由于表面的六方对称性,往往用四轴系来表示其晶向和晶面。为使问题简化,须将用四轴系表示的晶带轴改用三轴系表示出来,即由 $[UVTW]$ 改成 $[uvw]$ 。其改法如下式:

本文1986年2月18日收到

$$\left. \begin{aligned} u &= 2U + V \\ v &= 2V + U \\ w &= W \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

2. 确定 $(h_1 k_1 l_1)$

根据晶带定律 $uh_1 + vk_1 + wl_1 = 0$ 找出一个在该晶带上的 $(h_1 k_1 l_1)$ 晶面。

3. 确定 abc

六方晶系两晶面的夹角如(2)式所示^[13]

$$\cos \phi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + \frac{h_1 k_2 + h_2 k_1}{2} + \frac{3}{4} \frac{a^2}{c^2} l_1 l_2}{\sqrt{\left(h_1^2 + k_1^2 + h_1 k_1 + \frac{3}{4} \frac{a^2}{c^2} l_1^2\right) \left(h_2^2 + k_2^2 + h_2 k_2 + \frac{3}{4} \frac{a^2}{c^2} l_2^2\right)}} \quad (2)$$

对密排六方晶体 a/c 的精确值为 $\sqrt{3}/\sqrt{8}$ ^[14]。将其代入(2)式得

$$\cos \phi = \frac{\left[(2h_1 + k_1)h_2 + (2k_1 + h_1)k_2 + \frac{9}{16} l_1 l_2 \right] \times \frac{1}{2}}{\sqrt{\left(h_1^2 + k_1^2 + h_1 k_1 + \frac{3}{4} \frac{a^2}{c^2} l_1^2\right) \left(h_2^2 + k_2^2 + h_2 k_2 + \frac{3}{4} \frac{a^2}{c^2} l_2^2\right)}} \quad (3)$$

若 $(h_1 k_1 l_1)$ 与 $(h_2 k_2 l_2)$ 垂直, 则有

$$(2h_1 + k_1)h_2 + (2k_1 + h_1)k_2 + \frac{9}{16} l_1 l_2 = 0 \quad (4)$$

令

$$\left. \begin{aligned} a &= 2h_1 + k_1 \\ b &= 2k_1 + h_1 \\ c &= \frac{9}{16} l_1 \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

$$\text{则有} \quad ah_2 + bk_2 + cl_2 = 0 \quad (6)$$

称 a 、 b 、 c 为三个数学转换因子。

4. 确定 $(h_2 k_2 l_2)$

因 $(h_2 k_2 l_2)$ 与 $(h_1 k_1 l_1)$ 垂直又在 $[uvw]$ 晶带上, 故必满足下列联立方程

$$\begin{cases} uh_2 + vk_2 + wl_2 = 0 \\ ah_2 + bk_2 + cl_2 = 0 \end{cases} \quad (7)$$

由此便可利用叉乘法求出 $(h_2 k_2 l_2)$:

$$\begin{array}{ccc|ccc} u & v & w & u & v & w \\ a & b & c & a & b & c \\ \hline & & & & & \\ & h_2 & k_2 & l_2 & & \end{array} \quad (8)$$

5. 确定 r_2/r_1

六方晶系晶面间距如(9)式所示^[15]

$$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \frac{l^2}{c^2} \quad (9)$$

密排六方的 $c = \sqrt{\frac{8}{3}}a$, 代入(9)式得:

$$\frac{1}{d} = \sqrt{\frac{32(h^2 + hk + k^2) + al^2}{24a^2}} \quad (10)$$

由此

$$\frac{r_2}{r_1} = \frac{\frac{1}{d_2}}{\frac{1}{d_1}} = \sqrt{\frac{32(h_2^2 + h_2k_2 + k_2^2) + 9l_2^2}{32(h_1^2 + h_1k_1 + k_1^2) + 9l_1^2}} \quad (11)$$

6. 画图

根据以上五步确定的 $(h_1k_1l_1)$ 、 $(h_2k_2l_2)$ 和 r_2/r_1 便可作出一个矩形图, (因 r 随相机常数的变化而变化, 故 r_1 可取任一个长度。设 $r_1=1$) 然后添上漏掉的斑点, 标记消光的斑点, 如图 1 所示

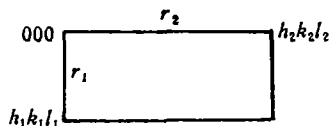


图 1

以上是作图的基本步骤, 下面举例说明之。

三、应用举例

为了说明此方法的简单性和应用的普遍性, 兹举四个例子: $[5\bar{1}40]$ 、 $[4\bar{2}21]$ 、 $[10\bar{1}2]$ 、 $[583]$, 现分述如下。

例 1 作出密排六方晶体 $[5\bar{1}40]$ 晶带的标准单晶电子衍射谱。

解 1. 确定 $[uvw]$

$$\left. \begin{aligned} u &= 2U + V = 10 + \bar{1} = 9 \\ v &= 2V + U = \bar{2} + 5 = 3 \\ w &= W = 0 \end{aligned} \right\} \xrightarrow{\text{化简}} \begin{matrix} 3 \\ 1 \\ 0 \end{matrix}$$

即 $[uvw] = [310]$

2. 确定 $(h_1k_1l_1)$

$$3 \times h_1 + 1 \times k_1 + 0 \times l_1 = 0$$

选定 $(h_1k_1l_1) = (001)$

3. 确定 abc

$$\left. \begin{aligned} a &= 2h_1 + k_1 = 0 \\ b &= 2k_1 + h_1 = 0 \\ c &= \frac{9}{16}l_1 = \frac{9}{16} \end{aligned} \right\} \xrightarrow{\text{化简}} \begin{matrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{matrix}$$

即 $abc = 001$

4. 确定 $(h_2 k_2 l_2)$

$$\begin{array}{rcl} uvw: & 3 & : 10 \quad 31 : 0 \\ & \vdots & \\ abc: & 0 & : 01 \quad 00 : 1 \\ & \cdots & \\ h_2 k_2 l_2: & & 1 \quad \bar{3} \quad 0 \end{array}$$

即 $(h_2 k_2 l_2) = (1\bar{3}0)$

5. 确定 r_2/r_1

$$\begin{aligned} \frac{r_2}{r_1} &= \sqrt{\frac{32(h_2^2 + k_2^2 + h_2 k_2) + 9l_2^2}{32(h_1^2 + k_1^2 + h_1 k_1) + 9l_1^2}} \\ &= \sqrt{\frac{32 \times (1 + \bar{3} + 9)}{9}} \\ &\approx 4.99 \end{aligned}$$

6. 作图 (先小矩形后平移并将消光点打 $\times$) 如图 2 所示。

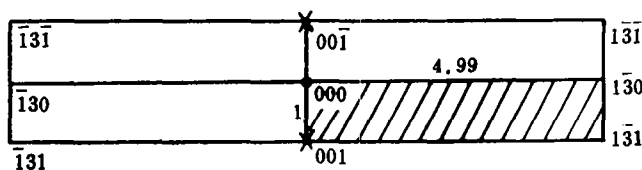


图 2 密排六方晶体 $[5140]$ 晶带标准衍射谱

例 2 作出密排六方晶体 $[4\bar{2}21]$ 晶带的标准单晶电子衍射谱。

解

1. $[uvw] = [2 \times 4 + \bar{2}, 2 \times \bar{2} + 4, 1] = [601]$

2. $(h_1 k_1 l_1) = (010)$

3. $abc = 2 \times 0 + 1, 2 \times 1 + 0, \frac{9}{16} \times 0 = 120$

4. $uvw: \quad 6 : 01 \quad 60 : 1$

$abc: \quad 1 : 20 \quad 12 : 0$

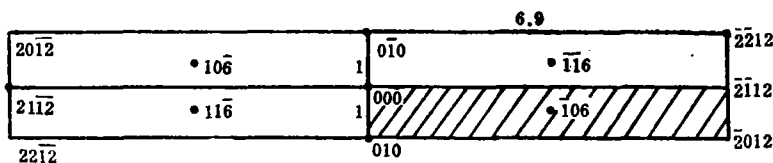
$h_2 k_2 l_2: \quad \bar{2} \quad \bar{1} \quad 12$

5. $\frac{r_2}{r_1} = \sqrt{\frac{32 \times (\bar{2}^2 + \bar{2} \times \bar{1} + \bar{1}^2) + 9 \times 12}{32 \times (0^2 + 0 \times 1 + 1^2) + 9 \times 0}}$

$$= \sqrt{\frac{32 \times 7 + 144 \times 9}{32}}$$

$$\approx 6.9$$

6. 作图, 如图 3 所示。

图 3 密排六方晶体 $[4221]$ 晶带标准衍射谱

例 3 作出密排六方晶体 $[10\bar{1}2]$ 晶带的标准单晶电子衍射谱。

解 $[uvw] = [2 \times 1 + 0, 2 \times 0 + 1, 2] = [212]$

$$(h_1 k_1 l_1) = (\bar{1}20)$$

$$abc = 010$$

$$uvw: 212 \quad 212$$

$$abc: 010 \quad 010$$

$$h_2 k_2 l_2 \quad \bar{2} \quad 0 \quad 2 \quad \text{简化得} (\bar{1}01)$$

$$\frac{r_2}{r_1} = \sqrt{\frac{32+9}{32 \times 3}} \approx 0.65$$

作图如图 4 所示。

以上三例是应用最广的常见晶带，本文引用文献中的一百多张图谱，均属此种情况。对于很少用到的高指数晶带，其 $(h_1 k_1 l_1)$ 晶面及 $(h_2 k_2 l_2)$ 晶面的晶面指数都会高一些，这时矩形内肯定会出现较多的斑点，但因矩形的三个衍射斑点的指数都已知，其他各点的位置也可准确定出。如例 4 所示。

例 4 作出密排六方 $[583]$ 晶带的标准单晶电子衍射谱。

解

1. 根据 $[583]$ 晶带作出矩形如图 5。（作法略）

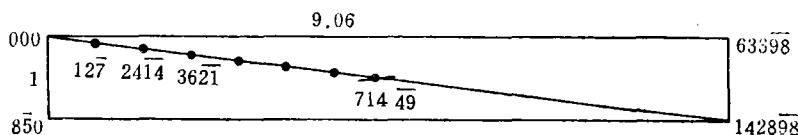
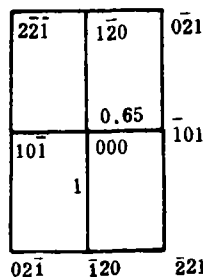


图 5

2. 根据晶带定律，找出最近斑点的指数 $(1\bar{1}1)$ 。

3. 在矩形内外或边线上找出 $h=1$ 的两个点， $\left(OD = \frac{1}{6}OB, OE = \frac{1}{8}OA\right)$ ，连成直线 ED 。

4. 同样找出 $h=-1$ 的两点 $\left(OF = \frac{1}{5}OA, AG = \frac{4}{28+5}AC\right)$ ，连成直线 FG 。二线的交点 H 就是 $(1\bar{1}1)$ 。如图 6 所示。

图 4 密排六方晶体 $[10\bar{1}2]$ 晶带标准衍射谱

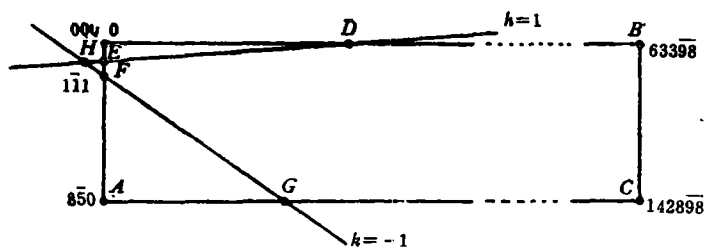


图 6

5. 以 $\overrightarrow{OH}$ 为基本矢量, 分别以 O 和 A 为原点, 向两个方向平移延伸, 便得到全部衍射谱, 再根据消光条件 ($h+2k=3n$, l 为奇数) 标上消光点如图 7 所示。

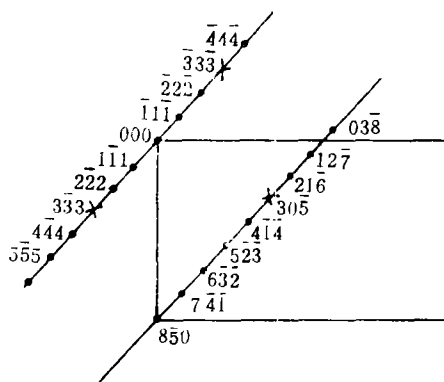


图 7 密排六方晶体[583]晶带标准衍射谱

四、讨 论

1. 本法是用三轴指数标定的, 若想换成四轴系也很容易, 按下式计算:

$$\begin{cases} U = 2u - v \\ V = 2v - u \\ T = -(U + V) \\ W = 3w \end{cases} \quad (12)$$

$$\begin{cases} H = h \\ K = k \\ I = -(h + k) \\ L = l \end{cases} \quad (13)$$

2. 整个衍射谱的绘制过程, 不需经过夹角计算。

3. $(h_1 k_1 l_1)$ 的取法: 若 $[uvw]$ 中的 $w \neq 0$, 则取 $l_1 = 0$, 因为这样可以保证 $c = \frac{9}{16} l_1 = 0$, 使问题简化; 若 $[uvw]$ 中的 $w = 0$, 则取 $(h_1 k_1 l_1) = (001)$, 尽管此时 (001) 点消光, 但 $abc = 001$, 便于计算。标定后再将消光点打上记号。

参 考 文 献

- [1] 广东工学院等, 金属学, 上海人民出版社, 1977年3月, 第1版, 127页。
- [2] 张家春, 速绘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。
- [3] 张家春, 立方晶系单晶电子衍射谱的特征, 矩形及边长比规律, 国防科技大学学报, 1985年, 第1期, 61~69页。
- [4] 张家春, 立方晶系单晶电子衍射谱的标定方法, 国防科技大学学报, 1986年, 第1期。
- [5] [英] P. 赫什等, 薄晶体电子显微学, 科学出版社, 1983年11月, 第1版, 582页。
- [6] K.W.Andrews, Interpretation of Electron Diffraction Patterns, p156, Second Edition, 1971.
- [7] Garth, Thomas, Michael.J.Goringe, Transmission Electron Microscopy of Materials, p361, 1979.
- [8] J.W.Edington, Practical Electron Microscopy in Materials Science, Part 2, p103, First Published, 1974.
- [9] 黄孝瑛, 电子衍射分析方法, 1976年4月, 第1版, 44~46页。
- [10] 陈梦谔, 金属物理研究方法, 第二分册, 1982年6月, 第1版, 252~254页。
- [11] 陈世朴, 王久瑞, 金属电子显微分析, 机械工业出版社, 1982年1月, 第1版, 246~247页。
- [12] 李树堂, 金属X射线与电子显微分析技术, 冶金工业出版社, 1980年11月, 第1版 263~266页。
- [13] [美] B.D. 柯列迪著, X射线金属学, 中国工业出版社, 1965年3月, 第1版, 317页。
- [14] 刘国勋, 金属学原理, 冶金工业出版社, 1980年7月, 第1版, 36页。
- [15] 朱宜、张存珪, 电子显微镜的原理和使用, 北京大学出版社, 1983年9月, 第1版, 219页。

Rapid Plot the Standard Electron Diffraction Patterns for Close-Packed Hexagonal Crystal Using the Rectangular Method

Zhang Jiachun

Abstract

In this paper, the readers can see a new method of plotting standard electron diffraction patterns for closepacked hexagonal crystals ($c/a=1.633$). This method is named "Rectangular Method" by the author. It is different from the conventional method and the rectangular method plotting cubic system electron diffraction patterns.

In this paper, we have used three mathematics transform factors " a, b, c ", greatly simplified the plotting processes.

This method is almost as simple as plotting cubic system standard electron diffraction patterns.