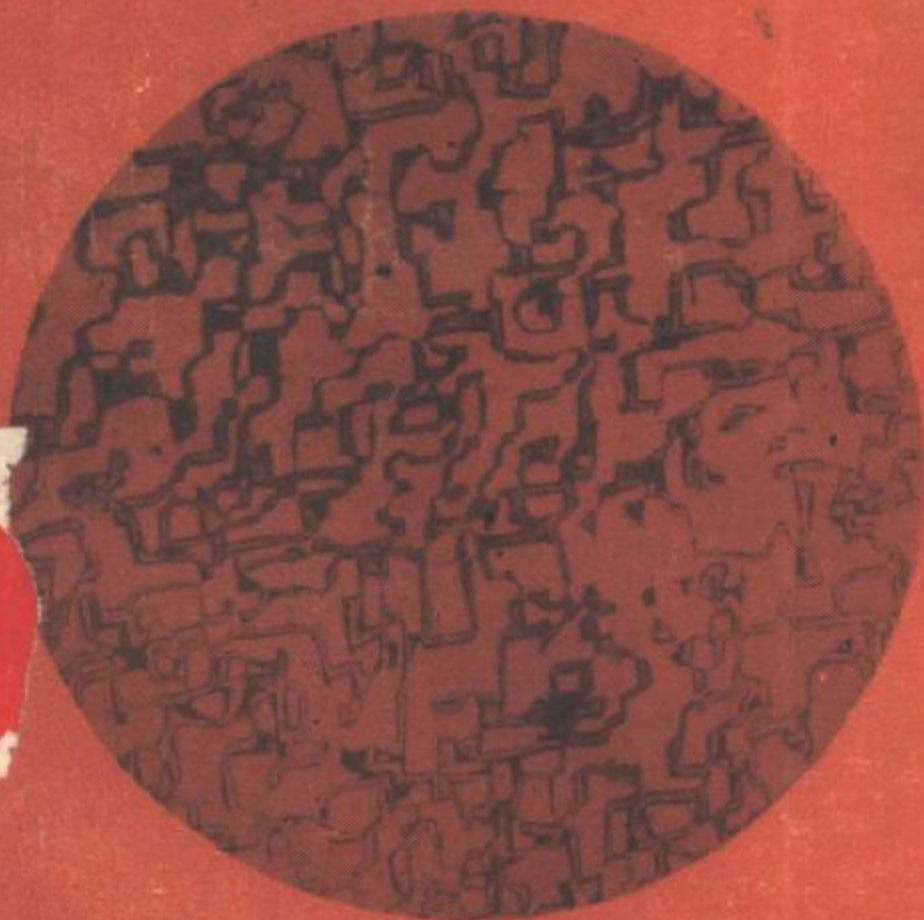


材料科学丛书

透射电子显微学

黄孝瑛 编著 上海科学技术出版社



材料科学丛书

透射电子显微学

黄孝瑛

上海科学技术出版社

材料科学丛书
透射电子显微学

黄辛瑛

上海科学技术出版社出版

(上海瑞金二路 450 号)

新华书店上海发行所发行 江苏扬中印刷厂印刷

开本 850×1156 1/32 印张 13 字数 499,000

1987 年 5 月第 1 版 1987 年 5 月第 1 次印刷

印数 1—14 000

统一书号: 15119·2443 定价: 4.85 元

内 容 提 要

本书对应用于材料科学的透射电子显微术作了比较全面的叙述。以主要篇幅讨论了电子衍射和衍射成象(图象解释)的分析原理和方法。叙述深入浅出,物理概念清楚;通过较多实例,介绍具体分析方法和步骤,有助于读者较快掌握这一近代实验分析技术。书末还附有多种作者收集、计算和绘制的数据、图表,对分析工作十分有用。本书适用于大专院校金属物理、金相和金属材料等专业师生及广大电镜工作者参阅阅读。

《材料科学丛书》序

无论在发展农业、工业、国防和科学技术方面,还是在人民生活方面,材料都是不可缺少的物质基础。材料的品种、数量和质量无疑是国家现代化程度的标志之一。随着材料的广泛生产和研究工作的不断深入,以及与材料有关的基础学科的日益发展,对材料的内在规律有了进一步了解,对各类材料的共性初步得到了科学的抽象,从而诞生了“材料科学”这个新的学科领域。

材料科学主要研究材料的组分、结构与性能之间的相互关系和变化规律,它是介于基础科学与应用科学之间的一门应用基础科学,与物理、化学、化工、电子、冶金、陶瓷等学科相互交叉、彼此渗透。热力学、动力学、固体物理、固体化学、化学物理等基础学科为材料科学提供理论基础,而材料科学又为应用科学提供发展新材料、新工艺和新技术的途径。

从当前来看,材料科学的发展大致有下列几方面的趋势:

(1) 高分子材料原料丰富、性能优良,在结构材料中所占的位置日益重要。塑料、合成橡胶和合成纤维比其他传统材料将有更大的发展。

(2) 功能材料显示广阔的发展前景。半导体的广泛应用,集成电路的发展,红外、激光和超导材料的发现和应用,使功能材料犹如异军突起,建立奇功。

(3) 在新能源材料方面,随着太阳能的利用,磁流体发电等的进展,出现了各种换能和储能材料,并已普遍受到重视。

(4) 对结构材料和耐磨、耐蚀等材料提出更高的要求,包括严酷的使用条件、更长的使用寿命等。

(5) 复合材料、定向结晶材料、初化陶瓷、定向石墨以及各种类型的表面处理与涂层的利用,使材料的效能进一步得到发挥。

(6) 探索材料在极端条件下的性能,例如玻璃态金属、超低温下的金属及金属氢都具有优越的性能。

(7) 改进制备工艺,提高质量,改进设计,更有效地使用材料。

(8) 对材料科学的基础研究趋向于更加深入和细致。尤其在表面,非晶态,原子象,固态中的杂质与缺陷,一维与二维结构,非平衡态,相变的微观机制,变形、断裂和磨损等的宏观规律和微观过程以及点阵结构的稳定性等领域,探索性研究正日益活跃。

人们期望,对材料基本规律的掌握将有助于按预定性能设计材料的原子或分子组成以及结构形态等。

我国在1978~1985年科学技术发展规划中把材料科学列为重点之一。我们必须十分重视和大力发展材料科学。

为了及时传播材料科学的基础理论,总结研究成果并扩大其工程应用,以有助于更快、更广泛地提高我国材料科学技术的水平,我们成立了《材料科学丛书》编辑委员会,由上海科学技术出版社出版这套丛书。

本丛书分为金属材料、无机非金属材料和高分子材料三个方面,选题包括材料科学的基础理论,研究方法和测试技术,研究成果,以及实际应用等方面。热忱地期望我国广大科学工作者,共同策进本丛书的编辑、出版工作,努力为我国早日实现四个现代化贡献力量。

《材料科学丛书》编辑委员会

一九七九年十二月

《材料科学丛书》编辑委员会

金属材料方面		无机非金属材料方面	高分子材料方面
主任委员 周志宏		主任委员 严东生	主任委员 钱宝钧
委员(以姓氏笔画为序)		委员(以姓氏笔画为序)	委员(以姓氏笔画为序)
马龙翔	王之玺	丁子上	于 翹
王启东	田庚锡	干福康	王孟钟
师昌绪	许顺生	江作昭	方柏容
孙珍宝	杜鹤桂	苏 耕	孙书棋
李恒德	吴自良	吴中伟	李世璠
汪 显	沈华生	袁润章	吴人洁
邹元炳	张文奇	黄蕴元	吴祥龙
张沛霖	陈新民	盛绪敏	张承琦
邵象华	林栋梁	程继健	范 棠
郝国城	周行健		姚锡福
周宗祥	周惠久		钱人元
柯 俊	胡为柏		徐 僖
钱临照	徐采栋		郭钟福
徐祖耀	顾翼东		
郭可信	黄培云		
葛庭燧	傅元庆		
童元照	谭庆麟		
魏寿昆			

序

电子显微镜的发明距今已整整五十年了。它的问世对科学技术的发展给以无可估量的巨大影响,随之产生一门新学科曰电子显微术或称电子显微学。近三十年来电子显微术有很大的发展,已成为探索微观世界的一门强有力的以实验为基础的科学。它在物理学、材料科学和生物学、医学中得到极为广泛的应用。它所获得的研究成果成功地验证并发展了关于晶体结构和晶体缺陷的许多理论推测,特别在近几年来对晶格象的深入研究,丰富了人们对物质微观结构的认识。

透射电子显微镜是电子显微镜中获得最早发展、用途最广的一种。本书系统地介绍了透射电子显微术的基本原理、实验方法和分析技术,着重于材料科学中的应用。内容包括两大部分:第一部分用了较多篇幅详细阐述电子衍射的基本原理。电子衍射原理是解释衍射象的基础,在这一部分中作者详尽地介绍了一般电子衍射谱和特殊电子衍射谱(如孪晶、高阶劳厄区、菊池线等)的诠释方法。第二部分共五章,介绍衍射成象和衍射衬度的分析方法,特别着重讨论晶体缺陷和合金中第二相的衬度效应及分析方法;对几种主要晶系中的层错、全位错、不全位错、位错环、共格沉淀、不共格沉淀及其界面衬度现象都作了讨论。

综观全书,对透射电子显微术的基本概念,给出了简明而清晰的物理图象,对数学推导可以简略的地方则从简,这对从事材料科学的工作者来说是有理由这样做的。阐述工作原理之后,往往配有典型示例,能加深读者的理解并便于应用。这是本书特点之一。

作者黄孝瑛同志在北京钢铁研究总院工作多年,在电镜工作上有极为丰富的经验、精湛的学术见解。本书不仅反映了这个领域当前国内外的先进水平,并在一定程度上,总结了作者多年来在

許曉山

前 言

电子显微镜是近代材料研究工作中的一个重要手段。以它为主要工具,对材料的宏观形貌和微观结构进行研究的科学,称为透射电子显微学。自从本世纪三十年代初第一台电子显微镜问世以来,在不到五十年时间里,它由最初只能起到高倍金相显微镜的作用,发展到目前已能深入揭示材料的内部组织结构,并把金属的表面形貌及其内部组织结构和性能有机地结合起来,形成一门具有强大生命力的、应用十分广泛的科学技术。

人类对于客观物质世界的认识,总是由表及里,从宏观到微观,逐步深入发展的。金属材料的物理力学性能,是其内部不同组织结构的反映。因此,把两者紧密结合起来,是近代材料研究工作的必然趋势和主要特点。近代电子显微镜在对材料表面形貌进行观察的同时,还可以对内部组织结构进行电子衍射分析,使它兼有显微观察和结构分析仪器的性能。它与扫描电子显微镜、离子显微镜、电子探针和俄歇谱仪等分析仪器一起,在材料研究工作中,正显示出日益重要的作用。

电子衍射分析方法是透射电子显微学的基础。近十余年来,作为电子衍射基本原理的衍射动力学理论,虽然没有取得引人注目的突破,但由于电子计算机的应用,在电子衍射具体分析方法上,却有不少可喜的进展。电子衍射分析技术是随着电子显微镜分辨本领和穿透能力的提高,开展了对金属薄膜的直接观察而发展起来的。它的基础仍然是电子衍射分析原理。十余年来,衍射分析技术所取得的进展,也是人所公认的。

透射电子显微学的主要内容,可以归纳为:透射电子象的成像原理,电子衍射原理和衍射原理及分析方法三大部分。本书在按上

这顺序进行介绍时,力图反映当前国内外的先进水平,为读者进一步探索这一领域,掌握该项先进技术提供基础。

本书在编写过程中,始终得到钱临照教授的热情鼓励和关怀,在此表示深深的感谢。此外,还得到刘曼朗、潘天喜、原林祥、崔玉梅、姚振梅等同志的帮助,谨致谢意。

作者学识有限,水平不高,错讹之处,在所难免,敬希读者批评指正。

编 者

目 录

序

前言

第一章 透射电子显微镜的原理和构造	1
§ 1-1 引言	1
§ 1-2 电子光学原理简述	2
§ 1-3 电子显微镜的构造	7
一、照明系统	8
二、成象系统	10
三、观察和记录系统	16
四、真空系统	17
§ 1-4 当前电子显微镜的发展动向	18
第二章 电子衍射基础	24
§ 2-1 引言	24
§ 2-2 电子的性质	24
§ 2-3 运动电子与物质交互作用产生的信息	26
§ 2-4 原子对电子的散射	28
一、描述运动电子的方程及其解	29
二、原子对电子的散射	32
§ 2-5 单胞对电子的散射	35
§ 2-6 晶体对电子的散射	44
第三章 电子衍射实验方法	49
§ 3-1 引言	49
§ 3-2 选区域电子衍射原理	49
§ 3-3 $L\lambda$ 值的意义及其测定方法和误差来源	57
一、 $L\lambda$ 值的意义	57
二、测定 $L\lambda$ 常数的方法	59

三、仪器常数 $L\lambda$ 的误差来源	59
§ 3-4 衍射谱相对于显微象偏转角的测定	61
§ 3-5 试样制备方法	63
第四章 倒易点阵	72
§ 4-1 引言	72
§ 4-2 正空间和倒空间、倒易点阵的引入	73
§ 4-3 倒易面(标准单晶衍射图谱)的绘制方法	78
§ 4-4 借助倒易点阵方法计算晶面间距、晶面夹角及晶向长度	81
一、求晶面间距与晶面指数的关系	81
二、求晶面夹角余弦的表达式	84
三、求晶向长度的表达式	93
§ 4-5 正点阵与倒易点阵的指数互换	93
一、正点阵与倒易点阵的互换公式和运算矩阵	93
二、六方晶系指数换算中的问题	98
§ 4-6 晶体几何形状对倒易点形状的影响	103
第五章 标定电子衍射谱的一般程序	107
§ 5-1 引言	107
§ 5-2 分析过程综述	107
§ 5-3 立方晶系衍射谱的标定	114
一、查 $\sqrt{N}$ 比值表法	114
二、特征平行四边形的标定方法	120
三、计算尺标定法	122
四、利用标准衍射图谱进行标定	123
五、指数标定注意事项	125
§ 5-4 六方晶系衍射谱的标定	131
一、一般讨论	131
二、六方晶系衍射谱的标定方法	131
§ 5-5 四方晶系电子衍射谱的标定	139
§ 5-6 正交晶系电子衍射谱的标定	142
§ 5-7 多晶电子衍射谱的标定	143
第六章 孪晶电子衍射谱的分析	146
§ 6-1 引言	146
§ 6-2 孪晶的晶体几何学	143

§ 6-3 立方晶系孪晶衍射谱的分析	151
一、基本公式	151
二、讨论	152
三、孪晶衍射谱的标定方法	158
§ 6-4 高次孪晶电子衍射谱的分析	163
§ 6-5 孪晶矩阵的一般表达式(任意晶系孪晶分析)	166
一、任意晶系孪晶晶面及晶面指数的转换矩阵	166
二、任意晶系孪晶转换矩阵应用于各晶系	169
§ 6-6 标定孪晶电子衍射谱的解析方法	173
第七章 高阶劳厄区电子衍射谱的分析	179
§ 7-1 引言	179
§ 7-2 形成高阶劳厄区衍射谱的几何学讨论	179
一、概述	179
二、不对称劳厄区	181
三、对称劳厄区	191
§ 7-3 高层倒易面 $(uvw)_h^*$ 上倒易点在零层倒易面 $(uvw)_0^*$ 上的投影位置	194
一、取原倒易点阵坐标为坐标系进行计算	194
二、取新坐标轴 I^* 、 G_1 和 G_2 进行计算	197
§ 7-4 高阶劳厄区衍射谱标定程序及举例	198
一、与标定有关的若干问题	198
二、计算举例	200
§ 7-5 标定高阶劳厄区衍射谱的直接方法	205
§ 7-6 高阶劳厄区衍射谱的应用	208
一、利用零阶劳厄区上高阶斑点位置鉴定物相	209
二、利用高阶劳厄区的曲率,测定倒易面间距,以鉴定物相	210
第八章 菊池衍射谱分析	212
§ 8-1 引言	212
§ 8-2 菊池衍射花样的几何学	213
§ 8-3 菊池线的指标化	222
一、零阶劳厄区菊池线指标化	222
二、高阶劳厄区菊池线指标化	224
三、菊池图	224

§ 8-4 菊池线的应用	232
一、晶体取向的精确测定	233
二、衍衬分析	238
三、校正电子显微镜试样倾动台的角度	238
四、偏离参量 σ 的测定	240
五、电子束波长(加速电压)的校正	241
六、临界电压测定	243
第九章 取向关系测定和迹线分析方法	245
§ 9-1 引言	245
§ 9-2 电子衍射测定取向关系的一般程序	246
§ 9-3 描述两相取向关系的矩阵方法	252
一、矩阵方法概述	253
二、矩阵方法应用于测定取向关系	256
§ 9-4 迹线分析方法	264
一、线状结构特征的取向分析	265
二、平面结构特征的取向分析	267
三、迹线分析的精确度	274
第十章 衍衬原理概述	277
§ 10-1 引言	277
§ 10-2 电子显微象的衬度类型	277
一、质量厚度衬度	277
二、衍射衬度	281
§ 10-3 衍衬成象的运动学理论	290
一、运动学理论的一般讨论	290
二、振幅-相图	298
§ 10-4 衍衬成象的动力学理论	300
第十一章 晶体缺陷的衍衬分析	308
§ 11-1 引言	308
§ 11-2 位错和层错的基本概念	308
一、刃型位错和螺型位错	308
二、汤普森标记法	310
三、全位错的分解及层错	313
四、固定位错(不动位错)	316

五、扩展位错节	318
六、体心立方金属中的位错	318
七、六角结构晶体中的位错	320
§ 11-3 位错和层错的衍衬分析	323
一、衍衬分析所需基本数据和实验条件	323
二、位错布氏矢量的测定	326
三、位错密度测量	345
四、位错和层错的衍衬分析	347
第十一章 第二相和界面的衍衬分析	387
§ 12-1 引言	387
§ 12-2 第二相的各种衬度	387
一、应变衬度	388
二、沉淀衬度	392
§ 12-3 第二相质点密度和尺寸分布的测量	402
一、测量质点的体积密度	403
二、用直线交截质点的方法测量质点的平均直径 R	403
三、利用 $N_A t$ 曲线求 N_V 和 R	403
四、不同直径范围内质点数的分布	404
§ 12-4 界面衍衬分析	405
一、 α 边界、 π 边界、 δ 边界	405
二、同相界面及异相界面	412
第十三章 弱束成像技术	427
§ 13-1 引言	427
§ 13-2 弱束成像原理简述	428
§ 13-3 弱束暗场象技术	430
一、 $g/3g$ 弱束暗场象的实验步骤	431
二、对称弱束暗场象的实验步骤	433
三、弱束暗场技术中的若干问题	434
§ 13-4 弱束技术的应用	438
一、关于位错的研究	439
二、关于位错环的研究	441
三、层错观察及层错能测定	441
四、其它方面的应用	445

参考文献	447
附录一 加速电压和电子波长	456
附录二 电子的原子散射因子 $f_{sc}(\mu)(\text{\AA})$	457
附录三 立方晶系常见孪晶和基体取向关系	462
附录四 立方晶系电子衍射花样特征平行四边形表	465
附录五 立方晶系晶面夹角表	480
附录六 高阶、零阶劳厄区斑点重迭图形	486
附录七 孪晶衍射位置表	507
附录八 若干金属材料的消光距离	575
附录九 合金中常见第二相的晶体学数据	582

第 一 章

透射电子显微镜的原理和构造

§ 1-1 引 言

眼睛是人类认识客观世界的第一架“光学仪器”。但它的能力却是有限的。在正常明视距离(约 25 cm)内,能够被察觉的物体,其尺寸不得小于 0.075 mm。如果两个细小物体之间的距离小于 0.1 mm 时,眼睛就无法把它们分开,因此通常把 0.1 mm 作为眼睛的最佳分辨本领。

随着人类对客观世界认识的深入,迫切需要找到一种新的手段,以弥补人眼视力的不足,进一步探测微观世界的奥秘。十七世纪初,光学显微镜的出现,使得可以把细小物体放大一千倍以上,分辨本领比人眼提高五百倍以上。过去许多没有被人们察觉的物质结构的细节,在光学显微镜的帮助下,清晰地展现在人们的眼前。在人类认识能力发展史上,这无疑是一次巨大的突破。但是,客观物质世界所包括的内容是如此丰富多采,而人类认识世界、改造世界的任务,又是无穷无尽的。这就促使人们进一步向认识的深度和广度进军。例如,揭示构成物质的单元——原子及其更深一层的结构,是人们多年来的宿愿。而要达到这一目的,就远非光学显微镜所能胜任。1932~1933 年间,在德国实验物理学家鲁什卡(E. Ruska)等人的努力下,终于制成了以电子射线为照明源的电子显微镜。在不到五十年时间里,电子显微镜的性能,已发展到今天这样的水平:放大率接近百万倍,分辨本领也接近理论值,达到了原子尺度水平。Yada 和 Hibi 1969 年获得了 Pd 的(001)晶格象,其面间距为 $0.97 \text{ \AA}$ 。今天,电子显微镜已成为研究物质微观结构的强有力手段之一。

§ 1-2 电子光学原理简述

从功能和工作原理上讲,电子显微镜与光学显微镜是相同的。

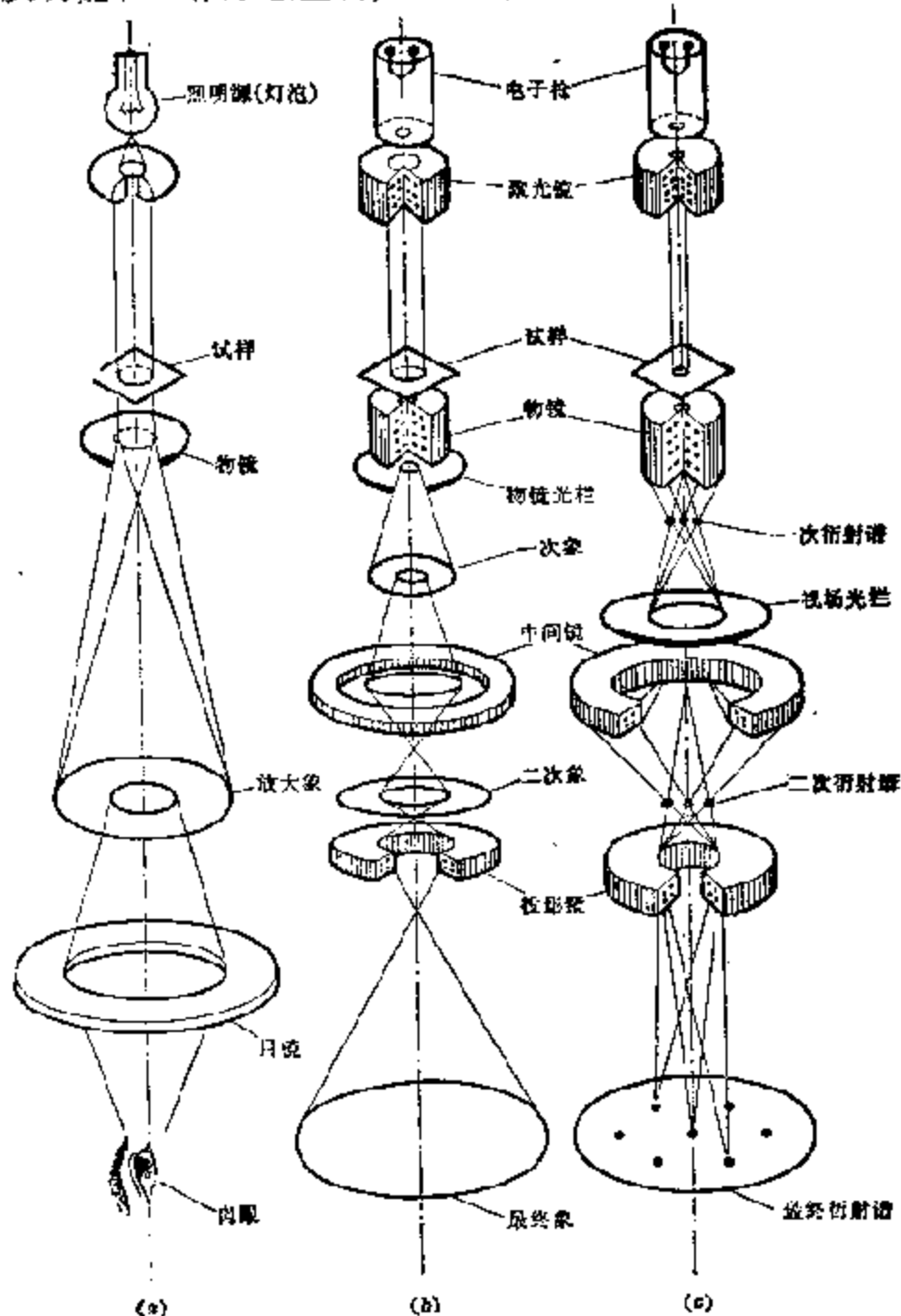


图 1-1 电子显微镜和光学显微镜的比较

(a) 光学显微镜; (b) 电子显微镜上成像; (c) 电子显微镜上进行电子衍射。

其功能都是将细小物体放大至肉眼可以分辨的程度；工作原理也都遵从射线的阿贝成象原理。下面先将电子显微镜和光学显微镜作一比较,然后简要介绍电子光学的主要原理。

图 1-1 是两种显微镜主要组成部分和光路示意图。表 1-1 扼要概括了它们的异同。从图 1-1 和表 1-1 可以看出,它们的主要不同点在于:光学显微镜采用普通可见光作光源,电子显微镜则用电子束作为射线源,从这点出发,构成了它不同于光学显微镜的一系列特点。由于电子波长很短,其分辨本领高得多。电子波通过物质,遵从布拉格定律,产生衍射现象,借此可以对晶体物质进行结构分析;光学显微镜却只能观察试样表面。为减少运动电子能量损失,电子显微镜整个系统必须处在真空下工作;光学显微镜则没有这个要求。此外,电子显微镜成象的衬度机理也不同于光学显微镜,电子射线与物质相互作用时提供的信息也要丰富得多,利用这些信息对物质进行研究,使电子显微镜已发展成为一种完整的分析系统。

为了了解电磁透镜的聚焦成象原理,有必要考察运动电子在磁场中的受力情况和运动轨迹。在一个任意磁场中,电子的运动轨迹是十分复杂的,但经特殊设计的电磁透镜中心被利用的狭小区域,可以视为均匀磁场的情况。电子通过均匀磁场时,一般有以

表 1-1 电子显微镜与光学显微镜比较

项目	电子显微镜	光学显微镜
射线源	电子束	可见光
波长	$0.0089\text{\AA}$ (20kV) $\sim$ $0.0251\text{\AA}$ (200kV)	$7500\text{\AA}$ (可见光) $\sim$ $2000\text{\AA}$ (紫外线)
介质	真空	大气
透镜	电磁透镜(或静电透镜)	玻璃透镜
孔径角	$\sim 25^\circ$	$\sim 70^\circ$
分辨本领(最佳)	点分辨本领 $3.5\text{\AA}$, 晶格分辨本领 $\sim 1\text{\AA}$	可见光 $2000\text{\AA}$, 紫外线 $1000\text{\AA}$
放大率	几百倍 $\sim$ 1000000 倍	10 倍 $\sim$ 2000 倍
聚焦方式	电磁控制, 电子计算机控制	机械操作
衬度	散射吸收, 衍射和相位衬度	吸收、反射衬度

下三种情况:

(1) 电子沿磁场方向入射, 沿这个方向作匀速直线运动。

(2) 电子沿垂直于磁场的方向入射, 则电子在一个平面内作圆周运动, 此平面[图 1-2(a) 中打阴影线的平面]垂直于包含入射方向和磁力线方向的平面。设电子运动速度为 v , 磁通密度为 B , 电子电荷为 e , 质量为 m , 则作用在电子上的力是 evB , 在数值上它正好等于使电子作半径为 r 的圆周运动的向心力 mv^2/r 。如果令电子的比电荷为 $\eta = e/m$, 那么轨迹圆的半径 r 可以表示为:

$$r = \frac{mv}{eB} = \frac{v}{\eta B} \quad (1-1)$$

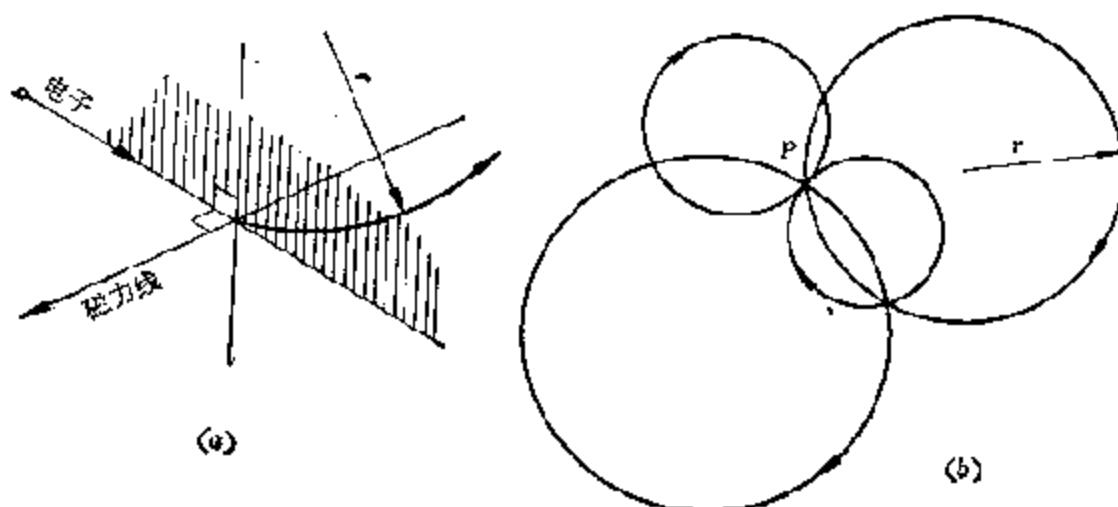


图 1-2 电子运动轨迹

由(1-1)式可知, 在恒磁场 B 下, r 正比于电子运动速度 v , 速度大的电子, 轨迹圆半径大, 速度小的电子半径也小, 如图 1-2(b)。如有若干电子以不同速度和方向(但都垂直于磁场方向)同时从同一点 P 入射, 则各电子运动一周所需的时间 τ 是:

$$\tau = \frac{2\pi r}{v} = \frac{2\pi}{\eta B} \quad (1-2)$$

可见恒磁场下 τ 是一个常数。这就是说速度不同的电子将同时回到出发点 P , 它们的角速度是一个常量。这对解释电磁透镜对运动电子具有聚焦作用, 是一个十分重要的结论。

(3) 电子相对于磁场方向成任意角度入射, 这时电子的运动

• 4 •

可以看成沿磁场方向的匀速直线运动和垂直于磁场方向的圆周运动的合成。最终轨迹是一螺旋线, 如图 1-3。电子以速度 v 和磁场 B 成 α 角入射, 则 v 可以分解为沿 B 方向的分量 v_x , 和垂直于 B 方向的分量 v_y 。电子一方面以 v_x 匀速直线前进, 另一方面以 v_y 作圆周运动, 这两种运动合成, 形成以 PP' 为轴的螺旋轨迹 (PP' 在同一磁力线上)。由(1-1)式可知, 圆形轨迹的半径 r 是:

$$r = \frac{v_y}{\eta B} = \frac{v \sin \alpha}{\eta B} \quad (1-3)$$

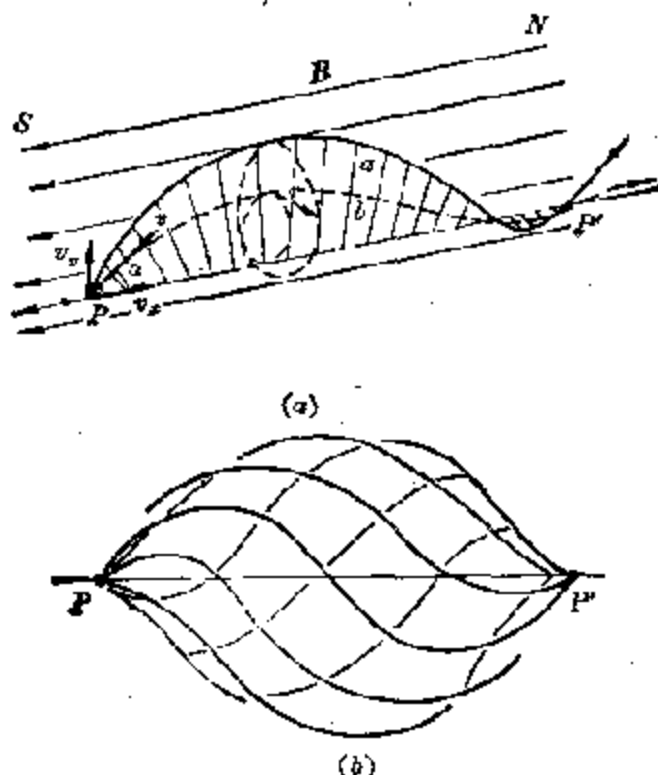


图 1-3 电子相对于磁场方向倾斜一个角度入射时的运动轨迹

在电镜中, 通常利用近轴电子束成像, 所以 α 很小, 故 $v_x = v \cos \alpha \approx v$ 。可见同时从 P 点出发但夹角 α 不同的两束电子 a 和 b [图 1-3(a)], 由于它们的 $v_x \approx v$, 近似相等, 因此 a 和 b 将同时到达 P' 点。这就是均匀磁场能使运动电子束聚焦成像的基础。不难看出, PP' 可以表示为:

$$PP' = v_x t = 2\pi v / (\eta B) = 2\pi r \quad (1-4)$$

将(1-4)式与(1-1)式进行比较, 可知 PP' 正好等于电子以速度 v 且垂直于磁力线方向入射时, 作圆周运动的圆周长。如果有许多

方向略异的电子束从 P 点出发, 则它们的轨迹可表示如图 1-3(b)。

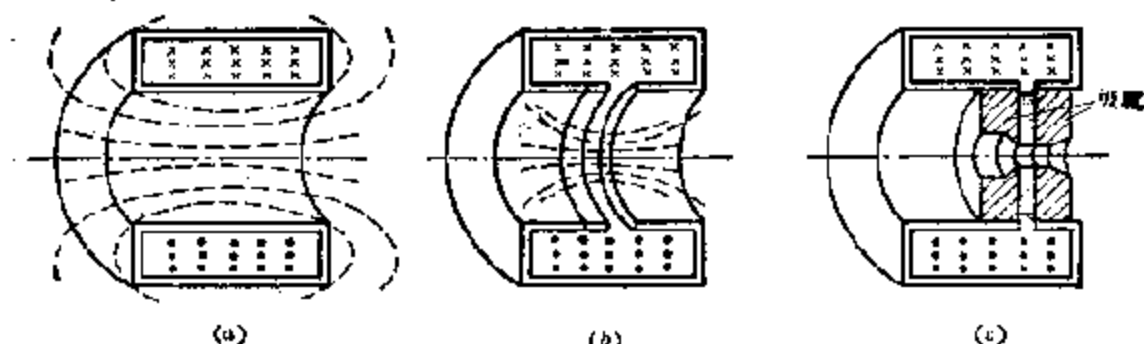


图 1-4 电磁透镜结构的发展过程

由以上讨论可知, 均匀磁场对运动电子的聚焦作用, 与玻璃透镜对可见光的聚焦作用相似。那么怎样设计具有这种性能的电磁透镜呢? 当前的电磁透镜是逐步发展完善起来的。最早的也是最简单的一种设计如图 1-4(a) 所示, 它实际上只是一个多层绕线空心线包, 显然无法获得均匀的磁场分布。图(b)则是对(a)的改进, 它将线包封闭在一个内侧开有空隙的软铁壳中, 以屏蔽磁力线, 减少漏磁, 而空隙的作用是使磁感尽可能集中。图(c)是近代电子显微镜普遍采用的比较理想的电磁透镜, 它除铁壳内侧同样开有空隙外, 还在空隙处加入一个由被磁化到接近饱和的高导磁材料制成的极靴, 上下极靴间留有更窄的空隙, 使磁力线进一步会聚, 获得近似均匀的磁场, 从而形成了近似理想的“薄透镜”。总之, 有了极靴以后, 极大地改善了磁透镜的聚焦性能,

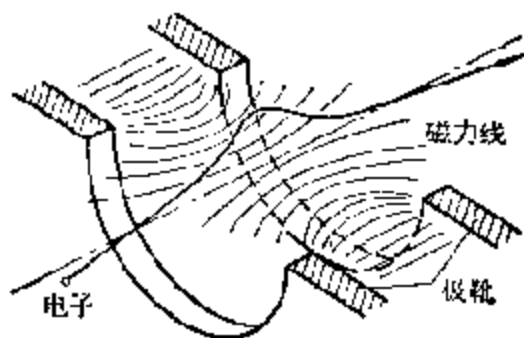


图 1-5 极靴间隙处的磁场分布和电子的运动轨迹

提高了电子显微镜的分辨本领。极靴材料的选择、设计合理与否及其加工精度, 都直接影响电子显微镜的性能, 因此, 人们常把极靴称作电子显微镜的心脏, 对它的设计给予高度的重视。极靴间隙处的磁场分布和电子通过时的运动情况, 示意于图 1-5。

以上对轴对称均匀磁场聚焦特性的电子光学原理, 作了简要

的叙述。也不难对这一过程, 进行较为严格的定量描述。设垂直于电镜轴 Z 的平面上, 电子的坐标为 $[r(z), \theta(z)]$, r 、 θ 均可表示为 z 的函数。考虑到电镜观察时, 利用近轴电子束, r 很小, 因此 r 和 dr/dz 的高次项均可忽略, 于是有:

$$\frac{d^2 r}{dz^2} = - \frac{e}{8mE_r} H_z^2 r \quad (1-5a)$$

$$\frac{d\theta}{dz} = (e/8mE_r)^{1/2} H_z \quad (1-5b)$$

式中: H_z 是磁场强度的轴向分量; m 是电子静止质量; E_r 是表征电子能量的电压, 它与加速电压 V 的关系是:

$$E_r \approx V(1 + 10^{-6}V) \quad (1-6)$$

(1-5b) 式表明, 在磁场作用下, 运动电子将绕 Z 轴发生旋转, 最终像矢相对于物矢旋转一个 θ 角。由于 θ 与 r 无关, 故从物面上各点出发的电子, 均绕轴作同一角度旋转。了解这一点是十分重要的, 后面将要介绍的衍衬工作中, 在对晶体试样作晶体学分析时, 必须对这种像的旋转进行校正。不难看出, 励磁越强, θ 越大; 电子加速电压越高, 电子运动速度越快, θ 也越大。

鉴于本书读者主要是使用电镜进行研究的工作者, 对透镜聚焦原理, 只作了以上定性讨论, 关于电子光学的严格数学处理, 可参见文献[2]。

§ 1-3 电子显微镜的构造

电子显微镜由如下几个部分组成:

照明系统: 包括电子枪和会聚透镜;

成象系统: 包括物镜、中间镜和投影镜;

记录系统: 包括常规照相、快速摄影和其它显示装置等;

真空系统: 保证镜体有足够的真空度;

电器系统: 包括高压电源、透镜电源、真空系统电源和其它电器部件。

一、照明系统

照明系统由发射并使电子加速的电子枪和会聚电子束的会聚透镜组成。

对电子枪的要求是：高亮度、小截面和高稳定性。它包括一个发卡形灯丝或点状灯丝和三个电极：阴极（即灯丝）、阳极和栅极，如图 1-6。灯丝一般由直径 0.1mm 左右的钨丝制成，这是由于钨的熔点高（>3400°C）、寿命长、逸出功低、发射效率高。要使金属中的自由电子脱离阳离子束缚离开表面，必须使金属丝升温，以便电子获得足够能量。物理学上把使电子完全逸出表面，克服束缚阻力所作的功，称为逸出功。不同金属材料，有其特定的逸出功值。金属表面单位面积发射的电子数 n 与逸出功 W 存在如下关系：

$$n = AT^2 e^{-W/kT} \quad (1-7)$$

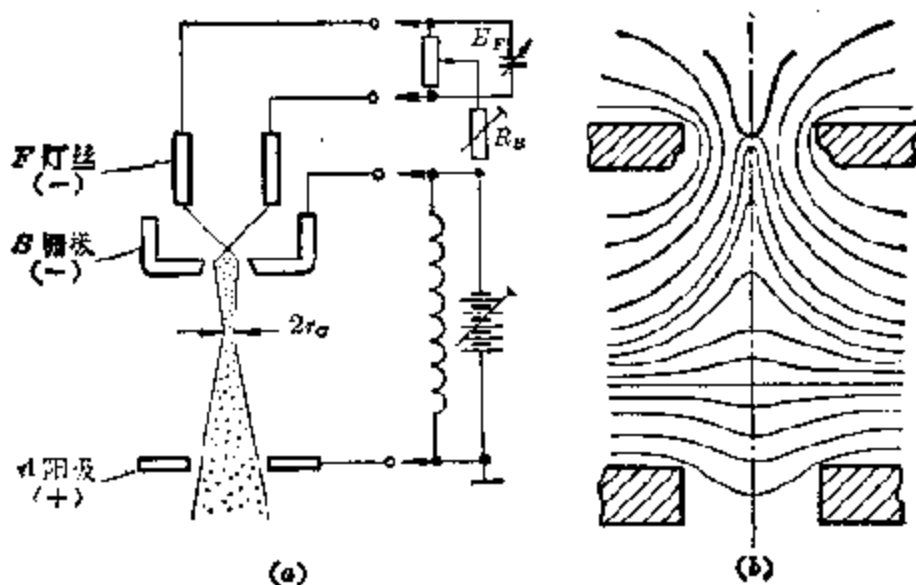


图 1-6 电子显微镜的电子枪

T 是绝对温度， A 和 k 都是常数。逸出功的单位是电子伏特。逸出功越低，在给定的灯丝温度下，发射电子数也越多。钨、氧化铯和氧化钡的混合物，都属于这一类。随着灯丝工作温度的波动，发射电子也不稳定。就钨丝而言，达到正常工作温度 2600K 以后，温度每增加 100K，电子数目就将增加一倍，这将导致照明亮度不稳

定。所以设计电子枪时, 保证稳定的阴极发射是十分重要的。近代高性能电镜, 多采用高稳定度直流电源, 供给灯丝加热, 有助于提高照明亮度的稳定性。在正常工作情况下, 灯丝平均寿命应不低于 200 小时, 不适当地加大灯丝电流, 不仅无助于提高灯丝的发射效率, 而且反会降低灯丝寿命。近年来, 日本等国的电镜制造工厂, 为了提高灯丝亮度, 在高性能电镜上, 有采用 LaB_6 灯丝的趋势。但它要求 10^{-6} 托以上的真空度, 故在常规电镜上普遍采用似乎尚有一定困难。此外, 利用单晶钨丝制造灯丝也尚在试验中。

图 1-6(a) 中, S 是栅极, 亦称韦氏 (Wehnelt) 圆筒; A 为阳极。栅极和阳极都做成中心开孔圆筒状。在阴极和阳极之间加高压, 栅极和阴极之间加一负偏压。阳极为零电位, 阴极为负高压, 栅极更负于阴极几千伏。栅极的作用类似电子管中栅极的作用。电子枪的特性决定于灯丝材料和形状设计, 以及三电极的相对位置和电位分配。从灯丝发出的电子, 经电压加速后, 经由偏压电阻 R_B 加给栅极一负偏压, 对电子轨道起着控制作用。调节栅偏压还可获得电子束的最小截面。这个最小截面, 称为交叉截面。电流密度、照明亮度因交叉截面缩小而提高。

在电子枪下面是一个或两个会聚透镜。会聚镜的作用: 一是提高电流密度, 缩小电子束截面, 减少样品照射面积; 二是尽可能减小电子束照射到样品上的入射孔径角, 获得近似平行的电子束。近代高性能电镜都采用双会聚镜系统, 如图 1-7(a) 所示。第一会聚镜 OL_1 是短焦距强励磁透镜, 作用是把直径为 $40\sim 50\mu\text{m}$ 的有效光源 (即交叉截面) 缩小到 $1\sim 2\mu\text{m}$, 这就是光源经 OL_1 后得到的象。第二会聚镜 OL_2 为长焦距弱透镜, 它将上述得到的 $1\sim 2\mu\text{m}$ 的光源象会聚到试样上, 这时聚焦光斑直径约为 $10\mu\text{m}$ 左右。如仅用一个会聚镜时, 则将使聚焦光斑直径达到 $50\mu\text{m}$ 甚至更大。由于 OL_2 减小了照明孔径角, 照明电子束的平行性得到了极大的改善。会聚镜电流与照明孔径角之间的关系, 如图 1-7(b) 所示。曲线平顶相当于稍过焦、正焦、稍欠焦之间的状态, 孔径角在正焦附近的很小范围内保持不变, 平顶两侧, 孔径角很快下降。透

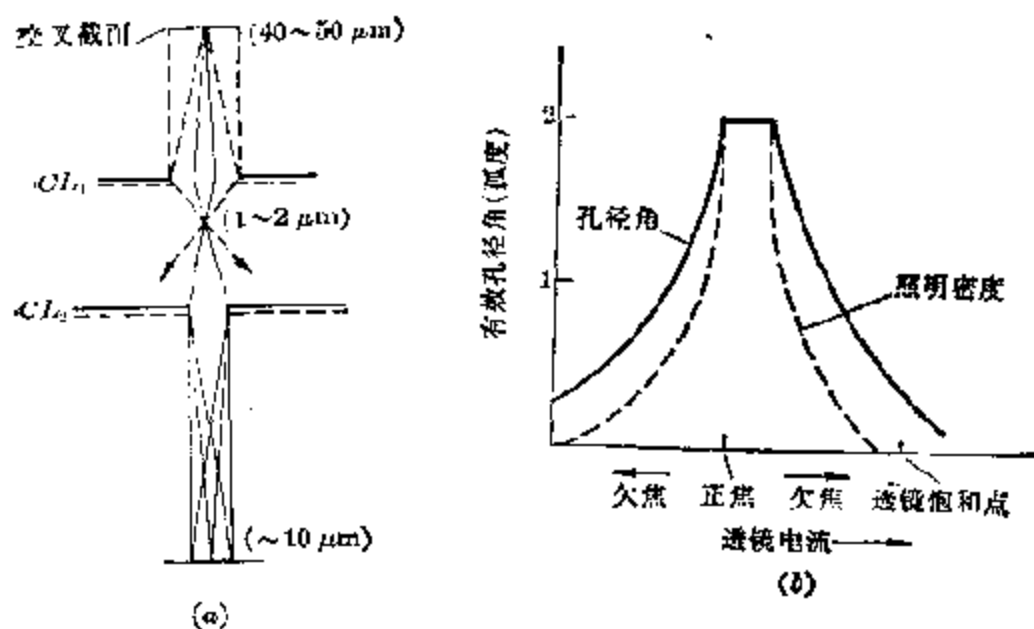


图1-7 双会聚镜照明系统

镜电流达到饱和点和关闭透镜时,孔径角最小。值得指出的是,采用双会聚镜,虽然能够得到较小的光斑,但光斑亮度和电流密度不会增强。这是因为在双会聚镜情况下,照明面积虽有了显著减小,但由电子枪发射的电子束中被 OL_2 会聚的部分也相应地减少了,如图1-7(a)中实线所示。

由以上讨论可知,双会聚镜的主要优点在于:

(1) 扩大了光斑尺寸的变化范围,由一、两个微米到几十微米。在不同放大率下,可以通过改变第一会聚镜的电流,选择所需要的光斑尺寸。

(2) 由于试样被照射面积减小,可以减少试样温升,防止试样被烧坏,这对观察金属薄膜更是十分重要。

(3) 观察时可以改变第二会聚镜电流,使光束聚焦在试样上,以得到最大照明孔径角和电流密度,这时图象亮而景深短,易于调焦。照相时,又可以使第二会聚镜散焦,减小照明孔径角,使其远小于与最高分辨率相应的最佳孔径角。这对拍摄高质量衍射照片尤为重要。

二、成象系统

电子显微镜的成象系统由物镜、中间镜(一个或两个)和投影

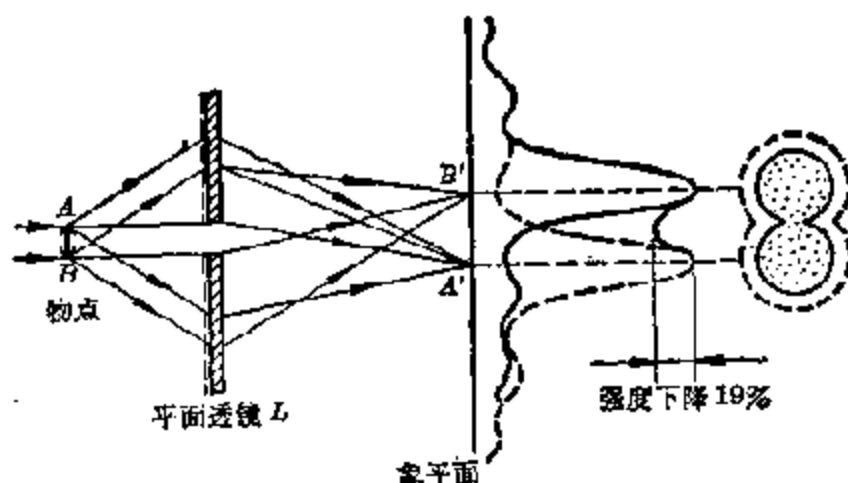


图 1-8 Lord Rayleigh 关于分辨本领的定义

镜(一个或两个)组成。

(一)基本性能指标

在具体讨论成像系统以前,先介绍描述电镜性能的两个基本指标。

1. 分辨本领

它表示电子显微镜能够分辨试样上两个极为靠近的细节的能力。关于分辨本领的较为严格的定义,虽能列举若干,但下面仅就 Lord Rayleigh 提出的建议进行介绍。参见图 1-8,设有两个极为靠近的物点 A 和 B ,由于衍射和象差的缘故,来自它们的射线,经过透镜的作用,在象平面上形成两个强度极大的亮斑 A' 和 B' ,对应地会看到两个模糊圆,它们中间有一个重叠部分。定义重叠部分的强度为 A' 或 B' 的 81% 时,认为 A 和 B 的象 A' 和 B' 是可分辨的。于是规定此时 A 和 B 间的距离为透镜 L 的分辨本领。通常我们说某电镜的分辨本领是 $1.4 \text{ \AA}$,即是说试样上相距仅为 $1.4 \text{ \AA}$ 的两点,电镜成像时仍能将它们分辨。显然,此值愈小,电镜性能愈高。

下面简要讨论影响电镜分辨本领的主要因素。电镜的分辨本领主要取决于物镜的性能;而物镜的理论分辨本领又受球差和衍射误差控制^[6]。球差与物镜孔径角 α_0 三次方成正比,衍射误差与 α_0 成反比。当孔径角 α_0 等于最佳值,即

$$\alpha_{\text{最佳}} = 0.87 (\lambda / c_s)^{1/4} \quad (1-8)$$

时,可分辨的最小间距为

$$\Delta r_{\text{min}} = 1.32 (c_s \lambda^3)^{1/4} \quad (1-9)$$

例如,加速电压 100 kV 下, $\lambda = 0.037 \text{ \AA}$, 如球差系数 $c_s = 1 \text{ mm}$, $\alpha_{\text{最佳}} = 6.8 \times 10^{-3}$ 弧度, 这时分辨极限可达 $6.3 \text{ \AA}$ 。由 (1-8) 式可知, 若物镜球差系数较小, 就允许有较大的孔径角。 $\alpha_{\text{最佳}}$ 一般在 $10^{-2} \sim 10^{-3}$ 弧度之间, 设计良好的物镜, $\alpha_{\text{最佳}}$ 可接近 10^{-2} 弧度, 较差的物镜接近 10^{-3} 弧度。

以上只是从理论上分析影响物镜分辨本领的因素, 而实际上影响分辨本领的因素尚有很多, 例如色差、象散、合轴调整、漂移、污染等都是。

消除轴上色差, 要求电源有较高的稳定性(达到 10^{-6} 量级水平), 目前的制造工艺水平已能做到这一点。至于轴外色差, 它与物点到轴的距离成正比, 因此应进行严格的合轴调整。但是, 由于杂散磁场存在, 不太可能使电压中心与电流中心完全相重合, 两者难免相差几个微米。为了减小轴外色差的影响, 可使物镜与投影镜线圈的极性相反, 以取得互相补偿的效果。

文献[3]指出, 如果要求总分辨本领达到 $4 \text{ \AA}$, 则前面提到的各因素单项引起的象点弥散不得超过 $2 \text{ \AA}$ 。而要求象散也达到这一点, 则因象散引起的失焦量不得大于 $0.018 \mu\text{m}$, 这在目前还是难于办到的。因为无论从极靴的加工精度及其所用的磁性材料均匀性来说, 都满足不了这个要求。解决这个问题的途径是采用消象散器(机械的或电磁的)进行矫正。

除色差、象散以外, 另一不可忽视的因素是象的漂移。其来源, 或者由于试样的热漂移, 或者由于试样台机械稳定性不好。采用双会聚镜照明系统, 使试样照射面积缩小, 电子束能量减弱, 有助于控制试样温度升高, 对防止热漂移是有好处的。此外在试样室安装冷却装置, 也有明显效果, 既可减弱热漂移, 也可防止污染。为了改善试样台机械不稳定性, 除设计合理、提高部件加工精度外, 近来一些电镜设计成拍照时能自动停止机械泵工作, 这对获得

高分辨率照片有显著作用。

2. 放大倍数

电子显微镜的任一透镜, 都满足下述关系:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{a} + \frac{1}{b} &= \frac{1}{f} \\ \frac{b}{a} &= M \\ f &= 48.4 (E_r / (NI)^2) \cdot d \cdot F^2(S, R_1, R_2) \end{aligned} \right\} \quad (1-10)$$

式中: a 为物距; b 为象距; f 为透镜焦距; M 为放大倍数; E_r 为决定速度的电位; NI 为透镜线圈的安匝数; d 为透镜线圈的平均直径; F 为与透镜结构尺寸有关的函数。(1-10)式中前两式是人们熟知的几何光学公式, 第三个式子是 Liebman 根据实验结果归纳出来的经验公式, 反映了透镜焦距与透镜参数(安匝数、极靴几何尺寸)及加速电压之间的关系。从这组公式不难看出: 当透镜设计好以后, 它的放大倍数, 相应于一定加速电压和透镜励磁电流, 就被确定了; 反过来, 根据一定放大倍数的要求, 也可以设计透镜的几何参数和电器参数。

任一电子显微镜的总的放大倍数是由各级透镜分别承担的, 即

$$M_{\Sigma} = M_{\text{物镜}} \times M_{\text{中间镜}} \times M_{\text{投影镜}} \quad (1-11)$$

总的放大倍数决定于对电镜的分辨本领设计要求。设要求电镜具有分辨本领为 D , 人眼的分辨本领为 E , 则电镜所应具有总放大倍数为:

$$M_{\Sigma} = E/D \quad (1-12)$$

例如, 设 D 为 $5 \text{ \AA}$, E 取 0.1 mm 即 $10^6 \text{ \AA}$, 则总放大倍数为 200000 倍; 若 D 取 0.25 mm , 则应不小于 500000 倍。

一般成象系统共包括物镜、中间镜、投影镜, 至于每级透镜的个数, 则决定于所要求的最大电子光学放大倍数和对电镜功能上(如考虑衍射功能的改进)的要求。近代高性能电镜如 EM-400、JEM-200CX, 都采用了物镜-双中间镜-双投影镜的成象系统, 较

之早期的三透镜成象系统,具有更优越的性能。

物镜和投影镜的放大倍数,通常为每级 100 倍左右;每级中间镜的放大倍数则在 0~20 倍之间,它由中间镜的励磁电流控制总放大倍数。当改变中间镜电流使其放大倍数改变时,为了使物镜的第一个实象准确落在中间镜物面上,需要改变物镜电流以调整焦距,称为“聚焦”。近年来,有些电镜如 II-800 已设计了先进的统调系统,利用电子计算机对加速电压、放大倍数(由中间镜控制)和物镜聚焦的协同配合,自动选择最佳参数,实现统调,大大提高了工作效率,也改善了成象质量。

(二) 成象系统设计

1. 物镜

在电镜成象系统中,物镜占有头等重要地位。由于物镜设计不周带来的任何缺陷,都将被随后多级中间镜和投影镜所放大。为了获得高分辨本领,物镜通常设计成短焦距磁透镜。物镜的关键部件是极靴,其重要性在§ 1-2 已有讨论。近代电镜由于往往还需要安装多种试验装置,如拉伸、加热、冷却、磁场屏蔽等,要求试样室有足够大的活动空间,这给设计上带来很大困难。一个能够在任意方向平移和倾斜的试样支架,是十分重要的。设计满足各种工作要求的高精度试样台,已成为电镜设计家们最感兴趣的课题之一。在物镜的后焦面上设有各种尺寸(如 $\phi 30\mu\text{m}$ 、 $50\mu\text{m}$ 、 $70\mu\text{m}$ 等)的物镜光栏,以挡住散射电子,提高象的衬度。为了提高分辨本领,有的电镜还安装有“冷指”,这是一种降温装置,作为防止污染的措施。

由于物镜在电镜中,承担着给出第一个放大象和衍射谱的任务,所以电镜的分辨本领,实际上主要取决于物镜的分辨本领。而物镜的分辨本领,又取决于极靴的设计和性能。

2. 中间镜

中间镜是长焦距弱磁透镜,其极靴内孔直径较物镜极靴内孔直径大得多。它的作用是将物镜给出的第一次放大象或衍射谱放大,并使之成象在投影镜的物面上。中间镜的放大作用是通过调

节中间镜电流的大小来实现的。有的电镜已将不同加速电压下的中间镜电流恒转换成放大倍数,显示在指定屏幕上,或绘制成电流-放大倍数对照表备查。

减弱中间镜电流,其会聚本领将减弱。如象距不变,物距就应加大,即中间镜物面将向物镜方向移动,放大倍数随之变小。这时应适当调整物镜电流,使其象平面与新的中间镜物平面重合。这就是说物镜的放大倍数也减小了,从而总的放大倍数变小,是为低倍放大。

进一步减弱中间镜电流,中间镜物面将与物镜后焦面相重,这时放大的是物镜后焦面上的第一次衍射谱,而该中间镜电流位置就是通常电镜上的衍射位置(常标有“Diffraction”字样)。从此位置适当加大电流,中间镜物面将落在与该后焦面衍射谱相对应的物镜象面上,放大的是对衍射谱有贡献的物象,是为衍射象位置。

由此不难得出进行选区域衍射的正确操作程序是:

(1) 在衍射象位置处聚焦物象,并用选区视场光栏将感兴趣的区域围住(在加视场光栏前,拍摄所需照片);

(2) 调节中间镜电流(电镜上设有特定旋钮),使视场光栏正碰聚焦(边缘明锐),中间镜物面与视场光栏平面相重合;

(3) 将中间镜电流旋钮倒向衍射位置,抽出物镜光栏,即可在荧光屏上得到放大的衍射谱,这就是与视场光栏所围区域相对应的物质结构信息。为使衍射谱花样(环或斑点)明锐,可适当微调中间镜电流(电镜上也有专门旋钮),使中间镜物面完全与物镜后焦面相重合。注意此过程中物镜电流不能变动,否则衍射花样反映的信息将不能与所选物象区域严格对应;

(4) 拍摄衍射谱以前,应减弱第二会聚镜电流,使入射束散焦,这样可进一步缩小光斑,有利于显示弱斑点。这样做对拍摄显微象也有好处,它有利于显示细节并提高象的衬度。

关于选区域电子衍射的对应性,以及如何提高精确度等问题,将在§3-2中再行讨论。

3. 投影镜

成象系统的最后一级是投影镜。投影镜也与物镜一样是个强励磁透镜。极靴因内部无需安置其它部件,内径可以做得很小,投影镜放大倍数比物镜略大。为减少象差,投影镜总是在固定励磁电流下工作(低倍放大时例外),所以它的放大倍数是固定的。由于加入成象的电子束,进入投影镜时孔径角很小,所以投影镜物空间的景深和象空间的焦深都很大,这就使得在改变中间镜电流以变更放大倍数时,无须改变投影镜电流,仍能保持图象清晰。投影镜在低倍时畸变很大,但可以利用可调的中间镜,产生负畸变,使投影镜产生的正畸变得得到相当程度的补偿。解决这个问题的另一途径是配置几个不同内径的极靴,实验时,根据不同工作放大倍数,分别予以选用。如在低倍率时,可选用内径为10~20毫米的极靴;高倍率时,可选用内径为1~2毫米的小孔径极靴。

三、观察和记录系统

前已提到投影镜的景深和焦深都很大,因此在荧光屏下面数厘米甚至更远处,成象都是清晰的。移动底片位置,仅改变象的大小,并不影响清晰度。荧光屏上涂有在电子轰击下发出荧光的物质。对荧光物质的要求是发光效率高,颗粒度小(100微米甚至更小),光色柔和(近年电镜荧光屏多发绿色)。一般照明底片的乳胶,颗粒更细,因此获得更高的分辨率。在观察窗外备有长工作距离的双筒显微镜,其放大率为5~10倍。为减少光的损失,双筒显微镜的物镜设计得比较大。拍摄图象采用玻璃底片或软片均可。

为了进行动态观察,记录实验中的变化过程(例如固体材料中位错及其它晶体缺陷的运动过程和交互作用),有些电镜还配有专门电影拍摄装置。近几年来,若干国家的电镜工作者,已成功地拍摄了位错运动、在热作用下单个原子振动并聚集成原子团的引人入胜的影片。它为晶体缺陷、原子热振动的理论推测,提供了直接证据。

为便于实验时容纳更多人进行现场观察,有的电镜附有电视观察设备。它由图象增强器、摄像和接收装置组成,将图象引至电视接收机中,可在附近房间内,让更多人同时进行观察。

四、真空系统

为了保证从电子枪发射的电子尽可能少地损失能量,使之获得足够的速度和穿透能力,整个镜筒必须保持一定的真空度。如果真空度不好,则还会由于高速电子和气体分子相撞,产生随机散射电子,引起炫光,降低象的衬度;或因气体分子放电而造成放电现象,使电子束不稳定,成象质量变坏。此外,灯丝也将因真空不好而被氧化,缩短使用寿命。

对电子显微镜真空度的要求是:在该真空度下,电子平均自由程不得小于电子在镜筒中的行程,即不得小于1米。根据气体定律计算,镜筒真空度至少不得小于 10^{-6} 托(毫米汞柱)。为了保证高压稳定性和防止试样污染,试样室真空度则还要更高一些,要求达到 10^{-5} 托或更高。近代高性能电子枪如LaB₆发射源,甚至需要达到 10^{-9} 托。JEM-2000X的试样室,真空度达到 10^{-7} 托,换用LaB₆电子枪,其附近的真空度要求不小于 $10^{-8} \sim 10^{-9}$ 托。

目前,电镜所需的真空度,一般采用两级串联系统完成。粗真空(约 10^{-2} 托)由旋转机械泵获得;高真空(优于 10^{-5} 托)由扩散泵获得。机械泵的安装位置距镜体太近时,将因泵的振动,而使拍摄高分辨照片发生困难,高倍拍照时尤其如此。这时,可在拍照曝光的瞬间,临时关闭机械泵。有的电镜将扩散泵的排气能力设计成大于机械泵10倍以上,并在二泵之间设计一个容量为10升左右的排气容器,当机械泵停止工作时,扩散泵仍可以向容器排气。这样,如镜筒没有泄漏,也不过度放气,则机械泵甚至可以关闭20分钟之久。这种低真空排气容器,称为贮气罐或“托持箱”。为了保证安全,它常配有控制贮气罐压力的装置(如自控真空规或报警器)。这样,一旦贮气罐真空度下降太大,有可能通过扩散泵将气体分子返回镜筒以前,即能自动启动机械泵。

近代先进电子显微镜,多已采用自动控制系统,控制真空系统的操作,实现了从低真空到高真空的自动转换、真空与高压启闭的连锁控制等。操作者只需按一下电钮,系统就能连续地自动完成规定的操作程序,如遇有反常泄漏,也能自动调整操作,使之恢复

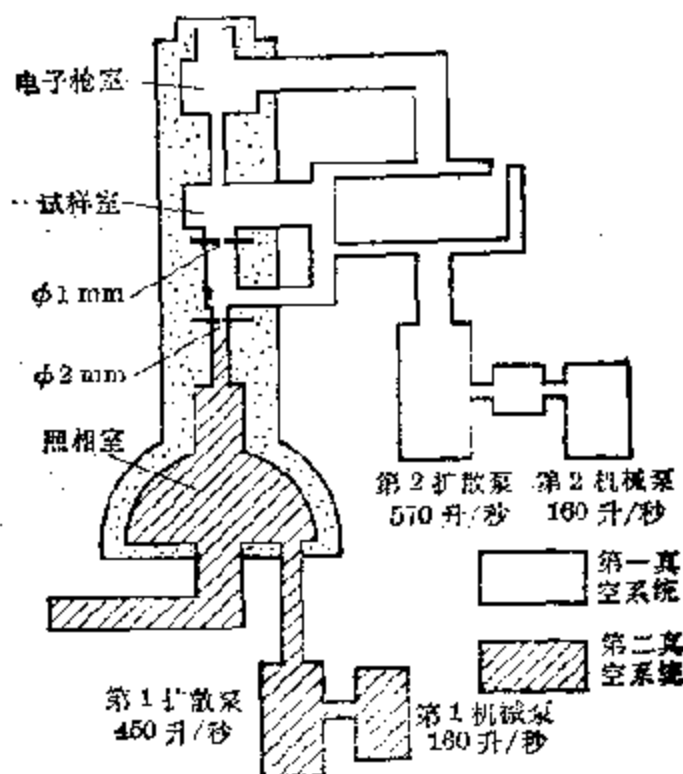


图 1-9 H-600 电镜真空系统示意图

正常。图 1-9 是 H-600 电镜真空系统示意图。

§ 1-4 当前电子显微镜的发展动向

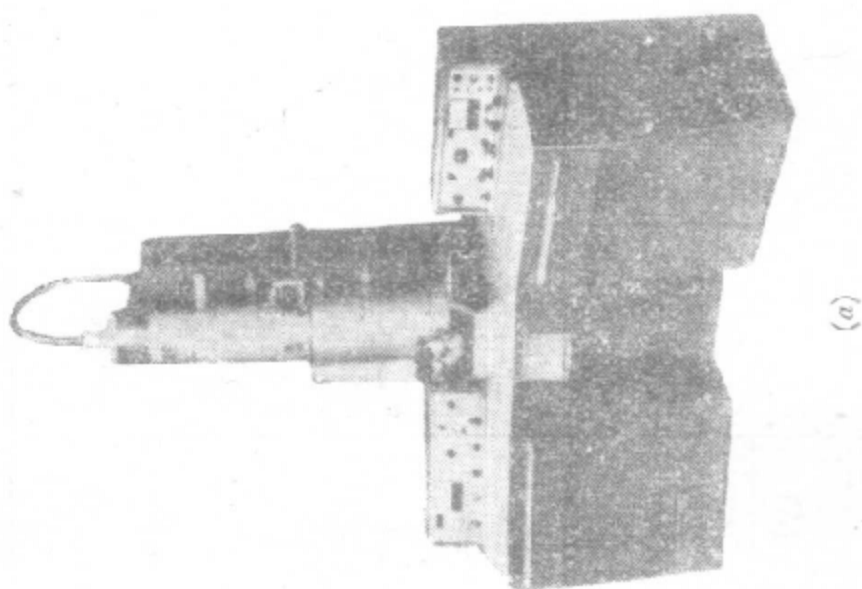
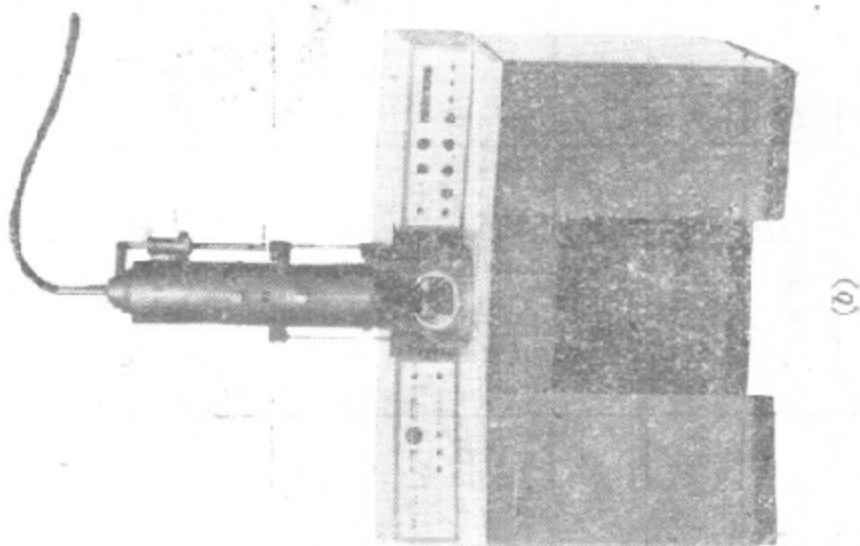
据不完全统计,自 1938 年第一台电镜问世以来,全世界大约生产了各种型号的电镜二万台,其中有近半数是日本生产的。目前全世界生产电镜的主要国家有日本、联邦德国、荷兰和英国。而以日本产量最大,新技术发展最快。日本自 1955 年生产商品电镜,到 1978 年,已生产 11620 台常规电镜,其中 6000 余台出口许多国家,留国内约 5000 台。到 1977 年底,全世界共生产 500 kV 以上超高压电镜 51 台,其中 31 台是日本生产的,留国内达 22 台。日本是全世界拥有电镜最多的国家。

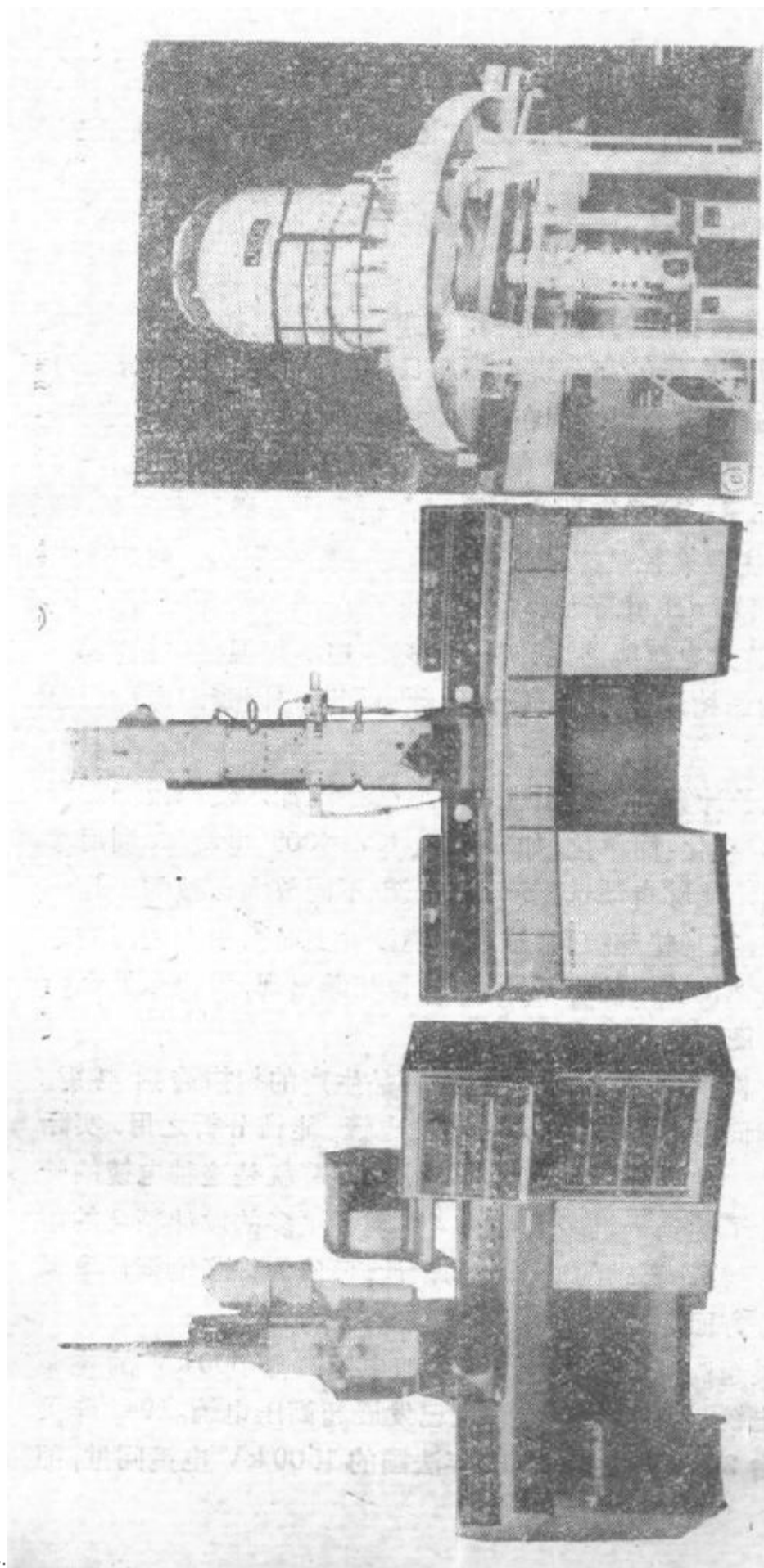
我国的电子显微镜工业,发展较晚,但在短短十多年里,已获得十分可喜的进展。目前,已有北京、上海、南京三地生产常规电镜,其中上海生产的 DXB₂-12 型 120 kV 电镜,已达到国际上同类

表 1-3 国内外几种电镜的性能

电镜型号 国别、厂家	DXP-12 中国·上海新跃	XDP-10 中国·南京	EM-100T 荷兰·菲利浦	JEM-200CX 日本·电子	E-800 日本·日立	H-600 日本·日立
分辨率 晶格/点(Å)	2.04/3.0	/10	1.4/4.0	1.4/3.5	2.04/4.5	1.4/3.0
加速电压(kV)	10, 20, 40, 80, 100, 120	40, 60, 80, 100	20, 40, 60, 80, 100, 120	80, 100, 120, 160, 200	75, 100, 150, 175, 200	25, 50, 75, 100
放大率(倍)	300~800000	1500~200000	46~480000	100~450000	100~300000	100~800000
衍射长度			0.15 m~6.5 m	0.13~2.3 m (SAD) 312 mm (HRE) 8~140 μ (HDD)	0.4~1.2 m (SAD) 328.5 mm (HRE) 10~160 m (HDD)	0.1~0.8 m (SAD) 3~6 mm (HRE) 20~200 m (HDD)
试样倾斜角	$\pm 60^\circ$, 360°旋转		$\pm 60^\circ$	$\pm 60^\circ$, $\pm 45^\circ$	$\pm 60^\circ$	$\pm 60^\circ$, $\pm 35^\circ$
透镜系统	会聚镜 2 物镜 1 中间镜 2 投影镜 1	会聚镜 2 物镜 1 中间镜 3 投影镜 1	会聚镜 2 物镜 1 衍射镜 1 中间镜 1 投影镜 2	会聚镜 2 物镜 1 中间镜 2 投影镜 2	会聚镜 2 物镜 1 中间镜 2 投影镜 2	会聚镜 3 物镜 1 中间镜 1 投影镜 2

注: SAD——选区电子衍射;
HRE——高分辨电子衍射;
HDD——高分散电子衍射。





(a)

(b)

(c)

图 1-10 几种有代表性的电镜

(a) DXB₁-12(中国,上海); (b) XDT-10(中国,南京); (c) EM-400T(荷兰,飞利浦);

(d) JEM-200CX(日本,电子); (e) JEM-1000(日本,电子)

电镜的水平。晶格分辨本领达到 $2.04 \text{ \AA}$, 其它综合性能也比较好。分辨本领为 $100 \text{ \AA}$ 的扫描电镜, 已由北京科学仪器厂制成并正式投产。

从几个主要国家的电镜技术发展动向来看, 有如下几个值得注意的趋势:

(1) 力图获得稳定的高分辨率, 生产出能够直接观察晶体原子结构, 包括单个原子的高分辨电镜。日本的日立和电子, 荷兰的非利浦, 英国的 AEI 公司, 都在这方面进行努力, 并已取得进展。日立生产的 H-800、电子生产的 JEM-200CX 和菲利浦生产的 EM-400T 等都属于这类高性能电镜。它们的性能详见表 1-2。提高分辨本领的主要途径是: ① 改进电子枪, 提高亮度。例如采用场发射电子枪和 LaB_6 电子枪; ② 大力提高高压电源和透镜电源的稳定度, 除改进电源线路设计外, 还采取电源恒温供电措施等; ③ 改进镜体的结构设计, 尽可能消除环境和其它因素对电镜引起的微小振动。

(2) 将电子计算机技术引进电子显微镜设计, 使电镜操作调整更自动化、合理化、简单化。如 H-800、EM-400T 电镜等, 利用小型电子计算机, 能够自动选择不同高压下不同放大倍数的工作状态的透镜参数, 实现快速统调, 这在透镜设计上是个引人注目的进展。专门配备电镜应用的电子计算机, 也相继出现, 为快速处理衍射数据和其它图象信息提供了方便。

(3) 向一机多用发展。例如已有商品生产的扫描透射电镜, 使一台设备能同时兼作扫描电镜、透射电镜、能谱分析之用, 实际上已发展成为一种全分析系统。JEM-200CX 就是这种电镜的一例。此外, 为了达到一机多用目的, 出现了更多的设计精巧的附件, 特别是满足特殊要求的试样台的设计, 已成为许多电镜厂家最为瞩目的一个方面。

(4) 发展超高压电镜。一般把加速电压高于 500 kV 的电镜称为超高压电镜。从五十年代起, 就已发展超高压电镜。1941 年美国制成第一台 300 kV 电镜, 1962 年法国的 1500 kV 电镜问世, 随

后 1969 和 1970 年法国和日本各制成一台 3000 kV 超高压电镜。现在接受超高压电镜订货的厂家有英国的 AEI 公司和日本的日立和电子公司 (JEO)。日本的超高压电镜多是一些大学或研究机构与电镜生产厂家联合研制的。

图 1-10 是几种有代表性的电镜外观。

第 二 章

电子衍射基础

§ 2-1 引 言

本章概述有关电子衍射的基本知识。包括：电子的波粒二象性；运动电子与物质交互作用及其产生的各种信息，这些信息几乎已全部被人们所利用，设计成各种分析仪器；讨论原子和物质的交互作用，引出原子对电子的散射因子，进而讨论单胞和晶体对电子的散射，并引出结构因子。在晶体对电子的散射中，将介绍布拉格 (Bragg) 定律及其几何表达——厄瓦尔德 (P. P. Ewald) 作图法，这对于以后章节将要介绍的电子衍射分析方法是十分重要的。

§ 2-2 电子的性质

电子与一切微观粒子一样，都具有波粒二象性。在一定条件下，它们显示波动性；而在另一定条件下，又显示粒子性。粒子的质量或能量愈大，波动性愈不显著，因此日常所见宏观物体，实际上往往被看作只具有粒子性。波粒二象性这种现象，是本世纪初，首先在光的某些现象中发现的。例如在光电效应中，光显示粒子性；而在干涉、衍射等现象中，则显示波动性。为了描述粒子性，引入了体积等概念；为了描述波动性，德布罗意 (de Broglie) 在 1924 年提出了“物质波”、“实物波”的概念，并且指出，一切微观粒子都具有波粒二象性。1927 年，戴维逊 (Davisson) 和革马 (Germer) 所完成的著名电子衍射实验，在电子中证实了德布罗意的假说。这一实验的重要结论是：电子入射到晶体表面后发生的行为，也遵从布拉格父子 (W. H. Bragg, W. L. Bragg) 于 1913

年总结的关系式。只有把运动的电子流看成是一种连续传播的波，才能合理地解释所观察到的衍射现象。

能量 E 和动量 p 是描述电子粒子性的参量，频率 ν 和波长 λ 是描述电子波动性的参量，可以用下面这组公式把它们联系起来，使波粒二象性得到统一的描述：

$$E = h\nu \quad (2-1)$$

$$p = h/\lambda \quad (2-2)$$

式中： h 为普朗克常数， $=6.6254 \times 10^{-27}$ 尔格·秒。

下面我们导出电子波长 λ 与加速电压 V 的关系，在加速电压 V 下，以速度 v 运动的电子，其动能 E ，动量 p 分别为：

$$E = eV = \frac{1}{2} m_0 v^2 \quad (2-3)$$

$$p = m_0 v \quad (2-4)$$

式中： e 是电子电荷， $=4.8029 \times 10^{-10}$ 静电单位； m_0 是电子的静止质量， $=9.1086 \times 10^{-28}$ 克。

将(2-3)和(2-4)式代入(2-2)式，可得：

$$\lambda = h/p = h/m_0 v = h/[m_0 (2eV/m_0)^{\frac{1}{2}}] = h/(2m_0 eV)^{\frac{1}{2}} \quad (2-5)$$

将常数 h 及 m_0 、 e 各值代入(2-5)式，可得：

$$\lambda = 12.26/(V^{\frac{1}{2}}) \quad (2-6)$$

对于高能快速电子衍射，还应进行相对论校正，这时电子的动能为：

$$E - eV = mc^2 - m_0 c^2 \quad (2-7a)$$

c 是光速，等于 2.9979×10^{10} 厘米·秒⁻¹， m 是相对论质量

$$m = m_0 / (1 - v^2/c^2)^{\frac{1}{2}} \quad (2-8a)$$

将(2-7a)式加以整理：

$$\begin{aligned} eV &= (m - m_0) c^2 \\ (m + m_0) eV &= (m^2 - m_0^2) c^2 \end{aligned} \quad (2-7b)$$

将(2-8a)式加以整理：

$$m^2 = m_0^2 / [(c^2 - v^2)/c^2]$$

$$\begin{aligned} (m^2c^2 - m^2v^2)/c^2 &= m_0^2 \\ \therefore m^2c^2 - m_0^2c^2 &= m^2v^2 \end{aligned} \quad (2-8b)$$

以(2-8b)代入(2-7b), 即得:

$$(m + m_0)eV = (mv)^2 = p^2 \quad (2-9)$$

以(2-9)式代入(2-2)式, 可得:

$$\begin{aligned} \lambda &= h / [(m + m_0)eV]^{\frac{1}{2}} \\ &= h / [2m_0eV (1 + eV/2m_0c^2)]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (2-10)$$

对(2-10)与(2-5)两式进行比较, 可以将 $(1 + eV/2m_0c^2)^{1/2}$ 称为波长的相对论校正因子。将常数代入(2-10)式中得:

$$\lambda = 12.26 / [V(1 + 10^{-6}V)]^{\frac{1}{2}} \quad (2-11)$$

上式中 V 的单位是伏(V), 根据(2-6)和(2-11)式计算某些加速电压下的电子波长($\text{\AA}$)列于表 2-1 中。

表 2-1 不同加速电压下的电子波长

加速电压 (V)	$\lambda = 12.26/V^{\frac{1}{2}} (\text{\AA})$	$\lambda_{校正} = \frac{12.26}{[V(1 + 10^{-6}V)]^{\frac{1}{2}}} (\text{\AA})$
1	12.26	12.26
10	3.878	3.878
100	1.226	1.226
1000	0.3878	0.3876
10000	0.1226	0.1220
50000	0.0548	0.0536
100000	0.03878	0.0370
150000	0.0317	0.0295
200000	0.0274	0.0251
1000000	0.0123	0.0087

§ 2-3 运动电子与物质交互作用产生的信息

在透射电子显微镜、扫描电子显微镜及其它以电子束为照明源的分析仪器中, 都是利用运动电子和物质的交互作用所产生的各种信息, 来探索物质的内部结构。十余年来它们发展很快, 性能

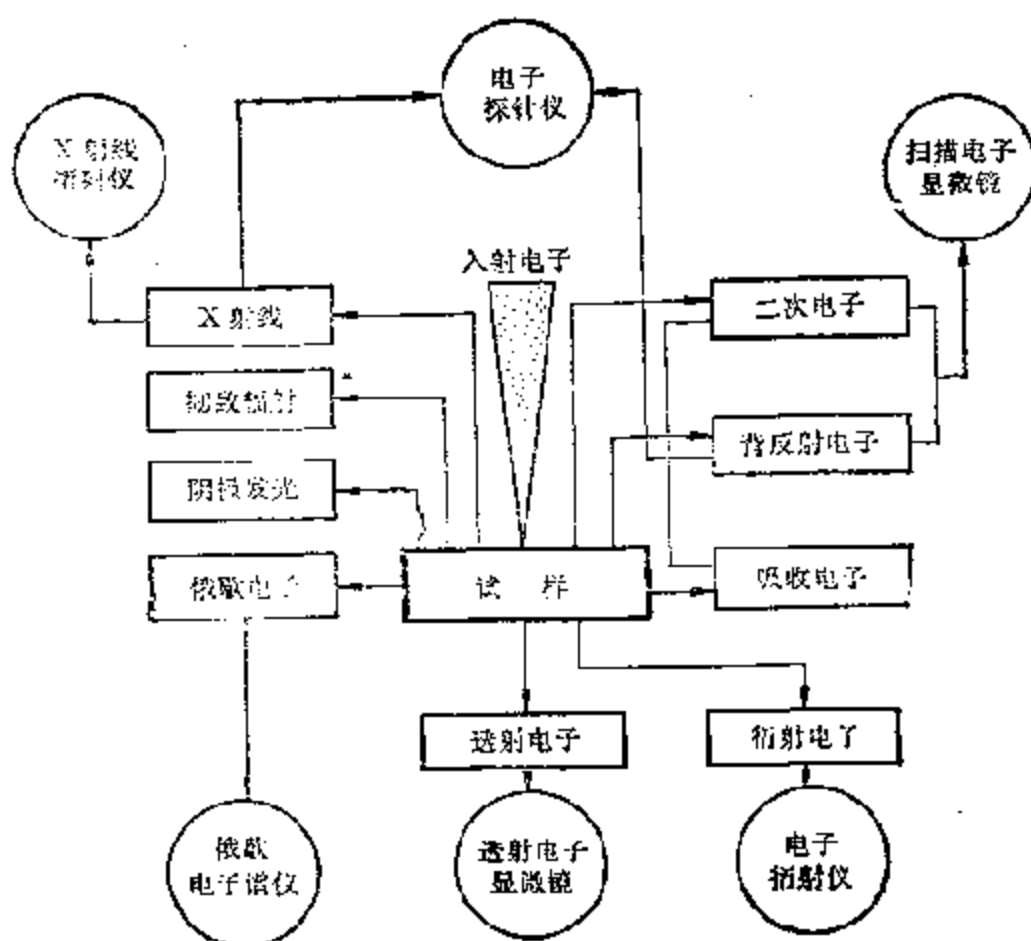


图2-1 电子和物质相互作用产生的信息(*连续X射线)

也大有提高,分析区域已缩小到微米以下;含量测量下限,甚至可达 10^{-20} 克的水平。由于电子计算机的应用,数据处理的速度和精确度,都已达到了令人满意的程度^[4]。有些仪器,甚至已经应用于现场工业生产过程的快速分析。这类仪器所以发展如此迅速,一方面固然由于生产和材料科学研究的需要,另一方面也正是由于人们对电子与物质的交互作用,有了越来越深入的了解。今天,甚至可以这样说:这种交互作用所产生的各种信息,几乎已经全部得到了应用,参见图2-1。

当被加速的电子以足够大的速度轰击物质表面时,表面原子的部分外层电子,将因获得动能而逸出,这些电子称为二次电子。二次电子的多少,决定于入射电子的速度、入射角以及试样物质的性质及表面状态。二次电子被激发是一个连续过程,开始被激发的二次电子,尚具有足够的能量,以致它们还可能激发新的二次电

子,如此继续下去,直到最后的二次电子能量甚低,激发过程才因而终止。一般来说,二次电子的能量较低(小于 $30\sim 50\text{eV}$),故只

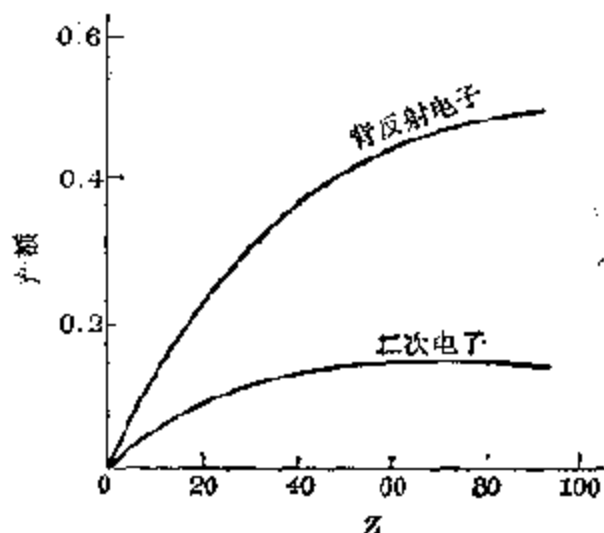


图 2-2 背反射电子和二次电子产额随原子序数的变化(加速电压 30kV)

在离试样表面 $50\sim 100\text{\AA}$ 深度范围内的二次电子才能逸出,这使得从它得到的信息,能较好地反映试样表面的形貌特征。仅当试样含有轻元素或超轻元素时,二次电子产额才与组成成分有关,参见图 2-2。此外,在如此薄的层内,入射电子没有经过多次散射,因此其照射范围,基本上与二次电子发射范围相

同,这一点使得利用二次电子成象能得到较高的空间分辨率。扫描电镜就是利用这一特点获得二次电子象。

在入射电子中有一部分电子和原子外层电子碰撞后,遭到散射,方向和能量均略有改变,且这种散射过程可以连续多次,甚至成百次进行,最终其总的散射角可以大于 90° ,以致重新从试样表面逸出,这部分电子称为背反射电子。背反射电子的数目随原子序数的增大而增大,它是一种和成分密切相关的信息(图 2-2)。我们可以利用背反射电子象的衬度,很方便地测出试样的成分分布概貌。因此,在两种元素原子序数相差较大的简单二元系中,甚至可以通过测定试样一定点的背反射电子产额,定量计算出相应处的成分。

二次电子和背反射电子都是扫描电镜利用的信息。

入射电子中另有一部分电子,进入试样后,能量损失殆尽,终至被试样吸收,称为吸收电子。试样中吸收电子的份额随质量厚度增大而增大。一般,随着组分元素原子序数的增大,背反射电子增多,吸收电子减少。除可利用吸收电子信号成象外,还可从它得出元素的定性分布概况。吸收电子是电子探针仪利用的主要信息

之一。吸收电子象和 X 射线波谱分析, 同是电子探针进行成分分析的依据。

透射电子显微镜利用的是入射电子中透过试样的那一部分电子——透射电子, 以及衍射电子。当试样厚度小于或等于该加速电压下所允许的穿透深度时, 一部分入射电子将透过试样, 称为透射电子, 电子显微镜用它成明场象。入射电子照射到晶体试样表面后, 当入射角 θ 和反射面间距 d 满足布拉格关系时, 在特定的方向, 产生的衍射波将得到加强, 沿这个方向的电子射线称为衍射电子束, 电子显微镜用它来成暗场象, 并进行结构分析。不言而喻, 透射电子和衍射电子也是电子衍射仪用来进行晶体结构分析的信息。

二次电子中有一部分电子的能量, 具有和特定元素相对应的特征值, 称为俄歇电子, 它是俄歇(Auger)在 1925 年发现的。这种电子能量很低, 约在 50~1500 eV 之间, 其平均自由程很短。能够测得的具有特征值的俄歇电子, 限于来自试样表面二、三层的原子, 因此俄歇电子谱, 对分析表面成分, 十分有用。60 年代发展起来的俄歇谱仪, 在金属材料科学中, 已被广泛应用于研究晶界偏析和其它微区域表面成分分析, 并且受到人们越来越多的重视。

电子轰击试样后, 在电子被减速的同时, 原子被激发, 发出电磁辐射, 称为 X 射线。当辐射的波长连续分布, 则称为连续 X 射线谱, 亦称韧致辐射, 它有一最短的波长, 称“短波限”, 它与加速电压 V 存在下述关系:

$$\lambda_0(\text{\AA}) = 12.4/V(\text{kV}) \quad (2-12)$$

当入射电子将原子的内层电子轰击出来以后, 原子处于受激状态, 这时整个原子能量是不稳定的, 外层电子将跃迁到被击出电子的壳层, 以降低系统的能量。跃迁的同时, 伴随着 X 射线的发出。这种 X 射线, 具有与一定元素相对应的特征能量(波长)值, 因此称为特征 X 射线。X 射线是电子探针分析、X 射线荧光分析以及材料物相组成和晶体结构分析的基础。今天, X 射线分析技术已发展成为一门内容十分丰富, 从基本理论到实验技术都比较成熟

的实验科学。

电子入射到晶体物质时,还会产生一种现象,就是试样表面将发射出可见光、紫外光或红外光,称为阴极发光。它常与存在于晶体中的少量杂质或晶体缺陷有关,因此,借助于阴极发光的波谱组成,可以研究试样的杂质成分和缺陷的分布情况。

从以上简单叙述可知,电子与物质交互作用产生的信息是极为丰富的。由于对产生这些信息的物理过程的了解已不断深入,因此它们相继得到利用。在人们认识微观物质世界的过程中,这类电子分析仪器所作出的贡献是永远值得人们称颂的。

§ 2-4 原子对电子的散射

一、描述运动电子的方程及其解

电子的运动可以用下述薛定谔方程来描述:

$$\nabla^2\psi + (8\pi^2m/h^2)(E-U)\psi = 0 \quad (2-13)$$

式中: ψ 是波函数, $\psi\psi^* = |\psi|^2$ 表示在给定点电子出现的几率, 或表示单位体积内的电子数; U 是电子在静电场中获得的位能, $U = e\varphi$ (φ ——散射物质的原子库仑静电场位势)。

运动电子可以视为由下式表示的平面单色波:

$$\psi_0 = A \exp(ik_0x) \quad (2-14a)$$

式中: $k_0/2\pi = \lambda^{-1}$, 称为波矢量。在电子被散射以前, ψ_0 就是(2-13)式在 $U=0$ 时的解, 即

$$\nabla^2\psi_0 + k_0^2\psi_0 = 0 \quad (2-15)$$

显然, $k_0 = 2\pi\lambda^{-1} = 2\pi(2mE/h^2)^{\frac{1}{2}}$ 。这时单位体积内的电子数为 $\psi\psi^* = |\psi_0|^2 = |A|^2$, 电子束中的电荷密度 $\rho = -e|A|^2$, 在实际问题中, 我们感兴趣的不是电荷密度的大小, 而是单位时间内, 通过单位面积的电子数 I (或 N), 或电流 Ie 的大小, 即

$$I = \frac{h}{4\pi im} (\psi^* \text{grad} \psi - \psi \text{grad} \psi^*) \quad (2-16)$$

对于平面波(2-14a), 则是:

$$I = -\frac{\hbar k_0}{2\pi m} |\mathbf{A}|^2 = v |\mathbf{A}|^2 = N \quad (2-17)$$

式中 v 是电子的速度。以 $(-e)$ 乘 I , 就可得到电子束流:

$$Ie = -ev |\mathbf{A}|^2 = \rho v = -Ne \quad (2-18)$$

下面讨论(2-18)式的解。

由 $U = e\varphi$ 和(2-15)式, 可以将(2-13)式改写成:

$$\nabla^2 \psi + k_0^2 \psi = \frac{8\pi^2 me}{\hbar^2} \varphi \psi \quad (2-19)$$

上式的解应包括两部分: 透射波, 即(2-14a)式的 ψ_0 , 和散射波 ψ' , 即

$$\psi = \psi_0 + \psi' \quad (2-20)$$

(2-20)式代入(2-19)式, 可得:

$$\nabla^2 \psi' + k_0^2 \psi' = \frac{8\pi^2 me}{\hbar^2} \varphi \psi_0 + \frac{8\pi^2 me}{\hbar^2} \varphi \psi' \quad (2-21)$$

上式右端第二项 $\frac{8\pi^2 me}{\hbar^2} \varphi \psi'$ 为二阶无穷小量, 予以略去, 便得:

$$\psi' = \frac{2\pi me}{\hbar^2} \int \varphi(\mathbf{r}) [\psi_0(\mathbf{r}) + \psi'(\mathbf{r})] \times \left[\frac{\exp(-ik_0 r')}{r'} \right] dv(\mathbf{r}) \quad (2-22)$$

式中: $dv(\mathbf{r})$ 是散射体中 $\mathbf{r}$ 处的一个体积元; 从观察点 P 到体积元的距离是 r' ; $\mathbf{r}$ 为以散射体中心为坐标原点的体积元位置矢量(参见图 2-3)。

整个散射体的散射波, 是从散射体各点发出的各散射波之和。

一般说来, $r \ll r'$, 又假设 $\psi' \ll \psi$ (电子衍射就是这种情况), 设入射波和散射波方向的单位矢量分别为 $\mathbf{s}_0$ 和 $\mathbf{s}$, r_0 为观察点到散射体中心 O 的距离, 则有:

$$\psi' = \frac{2\pi me}{\hbar^2} \int \varphi(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}) \frac{\exp[-ik_0(r_0 - \mathbf{r} \cdot \mathbf{s})]}{r_0} dv(\mathbf{r}) \quad (2-23)$$

又(2-14a)式可改写成:

$$\psi_0(\mathbf{r}) = A \exp[ik_0 x] = A \exp[ik_0(\mathbf{r} \cdot \mathbf{s}_0)] \quad (2-14b)$$

于是

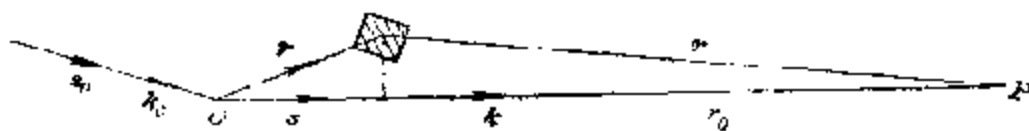


图 2 3 散射体对入射电子的散射

$$\psi' = \frac{2\pi me}{h^2} A \frac{\exp[-ik_0 r_0]}{r_0} \int \varphi(\mathbf{r}) \exp[ik_0(\mathbf{r} \cdot \mathbf{s} - \mathbf{s}_0)] dv(\mathbf{r}) \quad (2-24)$$

由(2-24)和(2-14b)式, 不难得出散射波的相对强度为:

$$|\psi'|^2/|\psi_0|^2 = \left[\frac{2\pi me}{h^2} \int \varphi(\mathbf{r}) \exp[i(\mathbf{r} \cdot \mathbf{s} - \mathbf{s}_0)] dv(\mathbf{r}) \right]^2 \quad (2-25)$$

二、原子对电子的散射

入射电子在原子库仑场作用下, 运动方向(或同时还有能量)发生改变, 这种现象称为散射。散射分为两种: 只改变方向, 能量基本上不变化的, 称为弹性散射; 方向和能量都有变化的, 则称为非弹性散射。电子能量的衰减, 转变为热、光、X射线或二次电子发射等。其中弹性散射部分是电子衍射的基础, 也是我们讨论的重点。

按照经典的卢瑟福处理方法, 原子核和核外电子对入射电子的散射能力, 可以用相应的散射截面的半径 R_c 和 R_e 来描述, 如下面一组式子所示:

$$\begin{cases} R_c = (Ze)/(V\theta) = (Ze^2)/(E\theta_c) \end{cases} \quad (2-26a)$$

$$\begin{cases} \theta_c = (Ze^2)/(R_c E) \end{cases} \quad (2-26b)$$

$$\begin{cases} R_e = e/(V\theta) = e^2/(E\theta_e) \end{cases} \quad (2-27a)$$

$$\begin{cases} \theta_e = e^2/(R_e E) \end{cases} \quad (2-27b)$$

式中: z ——原子序数;
 e ——电子电荷;
 V ——对电子的加速电压;
 θ ——散射角;
 E ——电子的能量(电子伏特)。

R_c 和 R_e 定性地反映出核和核外电子作用场的大小, 因此, 它们的数值可以近似作为散射能力大小的量度。不难看出, 加速电压愈低即能量愈小的电子, 在距核较近处入射, 将遭到较强的散射, 表现为 θ 角较大, 而且重原子的散射作用, 较轻原子为甚。从这组式子, 还可近似地认为: 原子核对入射电子的散射能力约为核外电子的 Z 倍。原子序数愈高的元素, 弹性散射的贡献较大; 而对轻元素, 则因非弹性散射占据主要部分, 故弹性散射的贡献十分微弱。

从原子对电子的散射, 还可以引出电子穿透能力的概念。

设入射电子数目为 N , 其中被散射的部分为 dN , 则 dN/N 表示被散射的份额, 或称散射几率, 它可以近似表示为:

$$\begin{aligned} dN/N &= (\rho N_A/A) (\alpha R_c^2 + Z\pi R_e^2) t \\ &= \pi (\rho N_A/A) (Z^2 e^2/V^2 \theta^2) (1+Z^{-1}) t \end{aligned} \quad (2-28)$$

式中: ρ ——物质密度;

A ——原子量;

N_A ——阿弗加德罗常数;

t ——试样厚度;

V ——加速电压;

R_c, R_e ——意义同前。

(2-28)式通常称为散射定律, 可以用来近似地估计散射角大于 θ 的入射电子的散射几率。 dN/N 值愈大, 被散射能量愈多, 电子的穿透能力愈差。同时(2-28)式还定性地描述了电子穿透能力与原子序数、加速电压和试样厚度之间的关系。

除了用散射截面的半径来描述原子对入射电子的作用场之外, 还可引入原子散射因子的概念来描述原子对电子的散射能力。在 X 射线衍射中, 曾引入散射因子 f_x , 表征原子对 X 射线的散射本领; 仿此, 在电子衍射中, 也可引入散射因子 f_e 来表征原子对电子的散射本领。 f_x 和 f_e 可分别表示为

$$f_e = \int \rho(\mathbf{r}) \exp[ik_0(\mathbf{r} \cdot \mathbf{s} - \mathbf{s}_0)] d\mathbf{r} \quad (2-29)$$

$$f_{el} = (2\pi me/h^2) \int \varphi(\mathbf{r}) \exp[ik_0(\mathbf{r} \cdot \mathbf{s} - \mathbf{s}_0)] d\mathbf{v}(\mathbf{r}) \quad (2-30)$$

原子对 X 射线的散射主要是核外壳层电子云的作用, (2-29) 式中的 $\rho(\mathbf{r})$ 是原子的电子密度分布函数, 对 X 射线衍射结果进行傅里叶分析, 反映出晶体电子密度的分布状况。物质原子的核及核外电子都与一定的库仑静电场相联系, (2-30) 式中的 $\varphi(\mathbf{r})$, 是库仑静电场的电位分布函数, 故对电子衍射结果进行傅里叶分析, 所反映的是晶体内部静电场的分布状况。 $\rho(\mathbf{r})$ 和 $\varphi(\mathbf{r})$ 之间存在着一定的关系, 即:

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) = -4\pi e [\rho_+(\mathbf{r}) + \rho_-(\mathbf{r})] \quad (2-31)$$

称为泊松关系。利用它, 可以把 f_{el} 表示为:

$$f_{el}(\theta) = (me^2/2h^2) [(Z - f_x)/(\sin \theta/\lambda)^2] \quad (2-32)$$

(2-32) 式的意义在于:

(1) 它把 f_{el} 与 f_x 联系了起来, 计算表明, 对于低指数反射, 原子对电子的散射强度要比对 X 射线大一万倍以上。这使得两者对试样的尺寸要求不同, X 射线样品的线性大小为 10^{-3} cm, 电子衍射样品只允许在 $10^{-6} \sim 10^{-5}$ cm 之间 (常规电镜)。在 100 kV 加速电压下, 样品厚度超过 1000 Å, 衍射线几乎全部被吸收; 200 kV 下, 对一般钢铁材料, 试样允许厚度约为 1500 Å。实验指出:

500 kV 下, 有色金属 (如 Al、Cu 合金) 的试样厚度可达到微米数量级。X 线和电子衍射照相曝光时间也大不相同, 前者以小时计, 后者以分秒计。

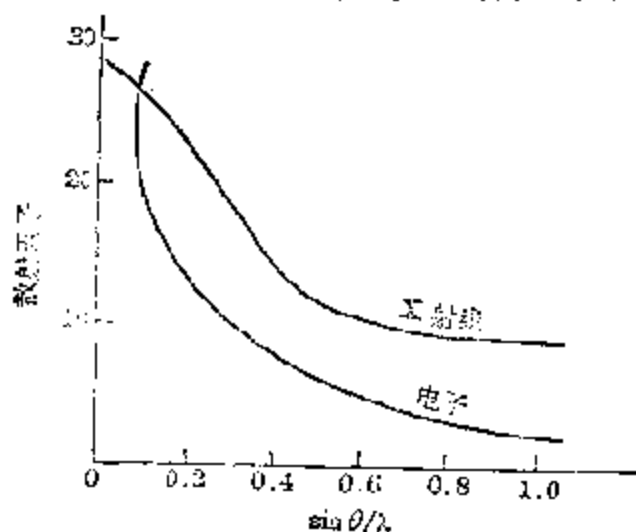


图 2-4 Cu 原子的 f_x 和 f_{el} 随散射角的变化

因子都随散射角增大而单调下降, 如图 2-4 所示, 但电子的变化趋

(2) 它反映了 f_{el} 与散射方向之间的关系, f_{el} 与 f_x 相似, 散射

势较 X 射线为快。

(3) 反映了 f_a 与原子序数的关系, f_x 和 f_a 都随原子序数的增大而增大, 但增强的趋势, f_x 不如 f_a 明显。原子对 X 射线的散射因子与原子序数的平方成正比, 而对电子的散射因子约与原子序数的 $4/3$ 方成正比。从图 2-5 可以看出 f_x 和 f_a 随原子序数变化的差异。正是由于这一特点, 使得电子衍射方法较之 X 射线衍射更适宜于鉴定试样中轻元素的存在。但是, 如果试样组分的原子序数十分接近, 则 X 射线和电子衍射方法都是无能为力的。这时只能采用中子衍射方法, 因为中子衍射的强度与原子序数没有明显的依赖关系。

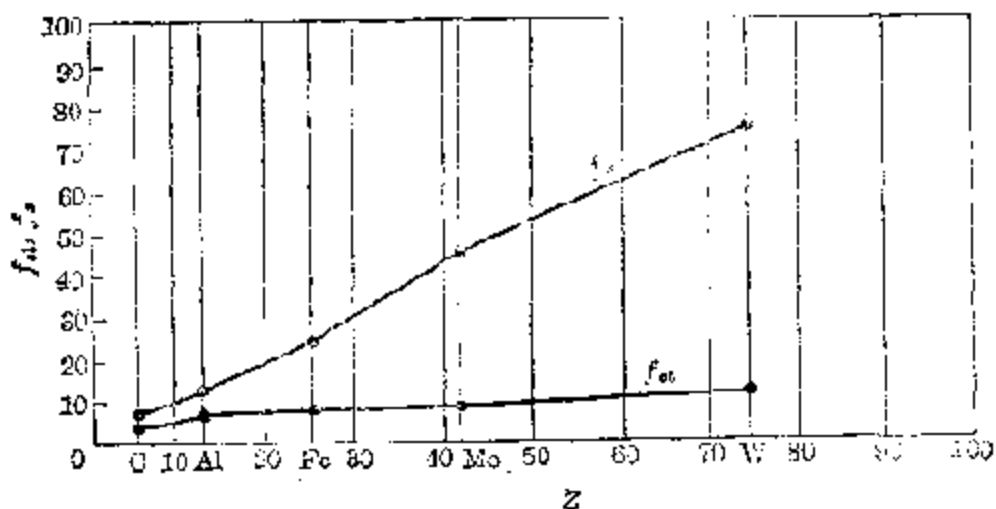


图 2-5 某些元素的 f_x 和 f_a 随原子序数的变化

(4) 原子库仑静电场对电子的散射作用, 可以分为两部分: 一是带正电的原子核电场的作用, 二是核外负电子电场的作用。但原子核电荷比较集中, 故原子对电子的散射主要取决于原子核, 而电子只起散射屏蔽作用。(2-32) 式右边含 Z 的一项与核电场相联系, 含 f_a 项则显然与核外电子的电场相联系。

§ 2-5 单胞对电子的散射

单胞是由原子组成的, 单胞对电子的散射, 是单胞内各原子对电子的合成贡献。上一节我们研究了单个原子对电子的散射, 并

引入了原子散射因子 f_a , 描述单个原子对散射的贡献, 这一节将讨论单胞对电子的散射, 同时引入结构因子 F 来描述一个单胞对电子散射的贡献。

下面先讨论入射电子束作为平面单色波, 遭到两个原子散射的情况, 如图 2-6 所示。然后推广到整个单胞中多个原子的情况。

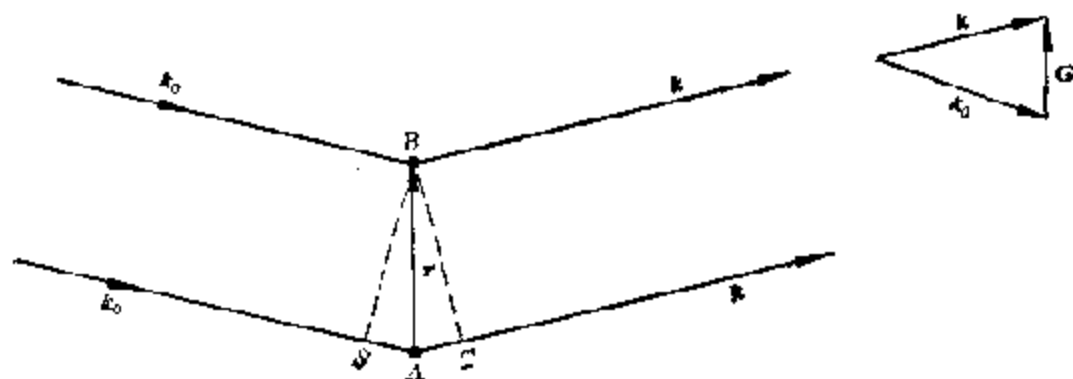


图 2-6 两个原子(A和B)对入射波 k_0 的散射

设入射波 k_0 经过散射体原子 A 和 B 散射后, 得到两支散射波, 它们的光程差是:

$$SAT = r \cdot k - r \cdot k_0 = r(k - k_0) \quad (2-33)$$

当光程差 SAT 是波长 λ 的整数倍, 或合成波周相差是零或 2π 的整数倍时, 两散射波相干得到加强; 而当光程差是半波长的奇数倍, 或合成波周相差是 $\pm\pi$ 时, 则两散射波将抵消。

周相差可表示为:

$$\begin{aligned} \phi &= 2\pi(SAT/\lambda) \\ &= 2\pi[r(k - k_0)/\lambda] \end{aligned} \quad (2-34)$$

如果取 $1/\lambda$ 作为 k_0 和 k 的单位, 则周相差可写成为如下形式:

$$\phi = 2\pi(k - k_0)r \quad (2-35a)$$

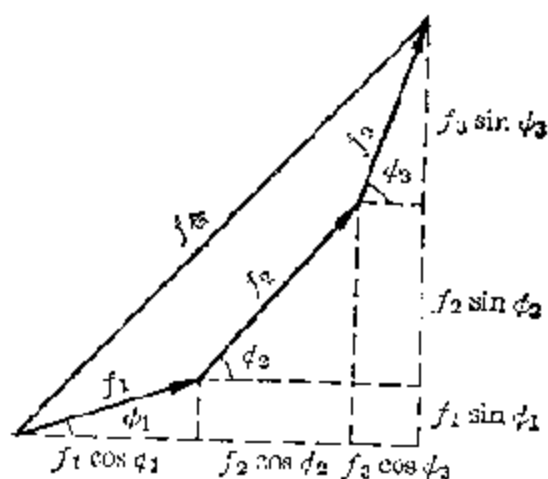


图 2-7 相干散射波的合成

如图 2-7, 散射波的合成, 可以在一个复平面上用相应的实部和虚部表示。

显然,

$$f_{\text{晶}} = f_1(\cos \phi_1 + i \sin \phi_1) + f_2(\cos \phi_2 + i \sin \phi_2) + \dots \quad (2-36)$$

利用尤拉公式: $\exp(i\phi) = \cos \phi + i \sin \phi$, 上式可改写成:

$$f_{\text{晶}} = \sum_j f_j \exp(i\phi_j) \quad (2-37)$$

如果取图 2-6 中原子 A 的位置为坐标原点, 则(2-35a) 式中的 $\mathbf{r}$ 表示单胞内某一原子相对于选定的坐标原点的位矢, 在下一章中我们将看到, 不妨把(2-35a)式的 $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$, 用一个矢量 $\mathbf{G}$ 来表示, 则(2-35a)式可以写成:

$$\phi = 2\pi(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (2-35b)$$

下面将两个原子散射的情况, 推广到单胞中含有多个原子的情况, 于是(2-37)式可以写作:

$$F = f_{\text{晶}} = \sum_{j=1}^n f_j \exp[2\pi i(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j)] \quad (2-38)$$

(2-38) 式表达了一个单胞中所有原子对电子散射的贡献, F 称为结构因子。其平方 F^2 具有强度的意义, F 值愈大, 衍射强度愈大; 若 $F=0$, 则表示该衍射将不出现。与 $\mathbf{G}$ 相应的某一反射的结构因子的数值, 决定于单胞内的原子分布。可以根据衍射强度来计算晶体的结构因子、确定晶体的点阵类型以及晶胞中原子的分布。

在应用(2-38)式计算结构因子以前, 必须对式中各参数有一个十分明确的了解。 f_j 是单胞中第 j 个原子的原子散射因子。在附录二中, 列出了不同元素原子对电子的散射因子, 它表示为不同 $\sin\theta/\lambda$ 值的函数。 $\mathbf{r}_j = x_j\mathbf{a} + y_j\mathbf{b} + z_j\mathbf{c}$ 是单胞中第 j 个原子在正空间的位置矢量。相应于以 $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{b}$ 、 $\mathbf{c}$ 为基矢的正空间, 可以建立一个以 $\mathbf{a}^*$ 、 $\mathbf{b}^*$ 、 $\mathbf{c}^*$ 为基矢的倒易空间。 $\mathbf{G} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$, 是倒易空间的一个矢量, 它表示产生衍射束 $\mathbf{k}$ 的一组晶面的法线方向, (hkl) 即这一组晶面的面指数。

下面分别计算不同类型晶体点阵的结构因子。

1. 面心立方点阵

单胞中有四个相同原子, 其坐标分别为: $000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$, 利用公式(2-38), 可得:

$$\begin{aligned} F_{hkl} &= f \exp[2\pi i(0)] + f \exp[2\pi i \cdot (h+k)/2] \\ &\quad + f \exp[2\pi i \cdot (h+l)/2] + f \exp[2\pi i \cdot (k+l)/2] \\ &= f[1 + \exp \pi i(h-k) + \exp \pi i(h+l) + \exp \pi i(k+l)] \end{aligned} \quad (2-39)$$

讨论:

(1) 当 h, k, l 为全奇数或全偶数时, $(h+k), (k+l), (h+l)$ 均为偶数, 因此

$$F_{hkl} = f[1+1+1+1] = 4f$$

说明一个单胞对电子散射的贡献, 相当于一个原子对电子散射贡献的四倍, 且其强度:

$$F_{hkl}^2 = 16f^2$$

(2) 当 h, k, l 中有两个奇数或两个偶数时, $(h+k), (k+l), (h+l)$ 中必有两项为奇数, 一项为偶数, 故:

$$F_{hkl} = f[1-1+1-1] = 0$$

$$F_{hkl}^2 = 0$$

由此可见, 只有当 h, k, l 为全奇或全偶时, 才能产生衍射, 除此以外的反射均消光。故面心立方晶体只有 $(111), (200), (224), (311), (222), (400), (331) \dots$ 等反射; 而没有 $(100), (110), (210), (211), (300) \dots$ 等反射。

2. 体心立方点阵

单胞中有两个相同原子, 其坐标分别为: $000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$, 利用公式(2-38), 可得:

$$\begin{aligned} F_{hkl} &= f \exp[2\pi i(0)] + f \exp[2\pi i(h+k+l)/2] \\ &= f[1 + \exp \pi i(h+k+l)] \end{aligned} \quad (2-40)$$

讨论:

(1) 当 $h+k+l$ 为偶数时:

$$F_{hkl} = f[1+1] = 2f$$

$$F_{hkl}^2 = 4f^2$$

(2) 当 $h+k+l = \text{奇数}$ 时:

$$F_{hkl} = f[1-1] = 0$$

$$F_{hkl}^2 = 0$$

由此可见, 只有当 $h+k+l = \text{偶数}$ 时, 才有衍射产生, 其它情况均消光。故体心立方只有(110)、(200)、(220)、(222)、(400)、(420)等反射; 而没有(100)、(210)、(300)等反射。

3. 六角密堆点阵

单胞中有两个相同原子, 其坐标为 $000, \frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{2}$, 得:

$$\begin{aligned} F_{hkl} &= f \exp[2\pi i(0)] + f \exp[2\pi i(h/3 + 2k/3 + l/2)] \\ &= f \left\{ 1 + \exp \left[2\pi i \left(\frac{h+2k}{3} + \frac{l}{2} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2-41a)$$

令 $(h+2k)/3 + l/2 = g$, 则

$$F_{hkl} = f[1 + \exp(2\pi i g)] \quad (2-41b)$$

$$\begin{aligned} F_{hkl}^2 &= F_{hkl} \cdot F_{hkl}^* \\ &= f[1 + \exp(2\pi i g)] \cdot f[1 + \exp\{2\pi i(-g)\}] \\ &= f^2[1 + e^{2\pi i g} + e^{-2\pi i g} + 1] \end{aligned}$$

因为 $e^{i\theta} + e^{-i\theta} = 2 \cos \theta$, 故有:

$$F_{hkl}^2 = f^2[2 + 2 \cos(2\pi g)] = 2f^2[1 + \cos(2\pi g)]$$

再利用 $\cos 2\theta = 2 \cos^2 \theta - 1$, 则上式可写作:

$$\begin{aligned} F_{hkl}^2 &= 2f^2[1 + 2 \cos^2(\pi g) - 1] \\ &= 4f^2 \cos^2(\pi g) \\ &= 4f^2 \cos^2 \left[\pi \left(\frac{h+2k}{3} + \frac{l}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (2-42)$$

讨论: 当 $h+2k=3n, l = \text{奇数} = 2n+1$ 时(n 为任意整数),

$$F_{hkl}^2 = 0$$

可见, 六角密堆点阵没有(001)、(003)、(121)、(123)、(303)、(031)和(215)等反射; 而其它情况, 结构因子不为零, 均产生衍射。

4. 金刚石型点阵

单胞中有八个原子, 其坐标为: $000, 1/4 \ 1/4 \ 1/4, 1/2 \ 1/2$

0, $\frac{1}{4}$, $\frac{3}{4}$, $\frac{3}{4}$, $\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{4}$, $\frac{1}{4}$, $\frac{3}{4}$, 0, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{4}$, $\frac{3}{4}$, $\frac{1}{4}$, 利用(2-38)式, 可得:

$$\begin{aligned} F_{hkl} = & f \exp[2\pi i(0)] + f \exp[\pi i(h+k)] \\ & + f \exp[\pi i(h+l)] + f \exp[\pi i(k+l)] \\ & + f \exp[\pi i/2(h+k+l)] + f \exp[\pi i/2(h+3k+3l)] \\ & + f \exp[\pi i/2(3h+k+3l)] + f \exp[\pi i/2(3h+3k+l)] \end{aligned}$$

上式右边前四项即面心点阵的结构因子, 可用 F_f 表示, 后四项提出公因子 $\exp[\pi i/2(h+k+l)]$, 于是:

$$\begin{aligned} F_{hkl} = & F_f + f \exp[\pi i/2(h+k+l)] \\ & \cdot [1 + \exp \pi i(h+k) + \exp \pi i(h+l) + \exp \pi i(k+l)] \\ = & F_f + \exp[\pi i/2(h+k+l)] \cdot F_f \\ = & F_f \{1 + \exp[\pi i/2(h+k+l)]\} \end{aligned} \quad (2-43)$$

讨论:

(1) 当 h, k, l 中有两个偶数或两个奇数时, 由于 $F_f = 0$, 因而

$$F_{hkl} = 0$$

$$F_{hkl}^2 = 0$$

说明此时 (hkl) 不产生衍射。

(2) 若 h, k, l 全是奇数, 则 $F_f = 4f$ 。此时 $h+k+l=2n+1$, 于是(2-43)式中的

$$\begin{aligned} 1 + \exp[\pi i/2(h+k+l)] &= 1 + \cos \pi/2(2n+1) \\ &\quad + i \sin \pi/2(2n+1) \\ &= 1 + i \sin \pi/2(2n+1) \\ &= 1 + (-1)^n \cdot i \end{aligned}$$

因此, $F_{hkl} = 4f(1 \pm i)$

$$F_{hkl}^2 = F_{hkl} \cdot F_{hkl}^*$$

$$= 4f(1 \pm i) \cdot 4f(1 \mp i) = 16f^2(1+1) = 32f^2$$

故反射 (hkl) , 产生衍射强度。

(3) 若 h, k, l 全是偶数, 且 $h+k+l=4n$ 时, (2-43)式可化作:

$$F_{hkl} = 4f\{1 + \exp[2\pi i n]\} = 4f \cdot 2 = 8f$$

$$F_{hkl}^2 = 64f^2$$

此时, (hkl) 产生衍射。

(4) 若 h, k, l 全为偶数, 但 $h+k+l \neq 4n$, 而有 $h+k+l=2(2n+1)$, 则

$$\begin{aligned} F_{hkl} &= 4f \{1 + \exp[\pi i(2n+1)]\} \\ &= 4f [1 - \exp(2\pi n i) \cdot \exp(\pi i)] \\ &= 4f [1 - 1] = 0 \\ F_{hkl}^0 &= 0 \end{aligned}$$

此时, (hkl) 不产生衍射。

最后以 AlN 为例, 说明实际衍射物质结构因子的计算过程^[5]。为了校验电子衍射分析结果的正确与否, 常常需要将实测的衍射强度和理论计算强度进行比较, 这就需要计算衍射物质各级反射的结构因子。

ASTM 卡片上的数据, 取自 X 射线粉末法德拜相结果, 卡片上的相对强度 I/I_0 , 只能作参考, 这是由于:

1) 单晶衍射的强度不包括重复因子, 而 X 射线多晶衍射的强度公式中包括重复因子。

2) 两者角因子不同。

3) X 射线衍射中, 可忽略散射波之间及散射波与入射波之间的相互作用, 可采用运动学理论计算强度。而电子衍射由于散射强度较 X 射线大得多, 动力学相干效应不能完全忽略。尽管如此, 但仍是 $|F|$ 愈大, 强度也愈大。所以计算出各反射的结构因子, 仍可作为强度校验的依据。

下面介绍计算 AlN 各级反射结构因子的步骤:

首先从有关资料中查出 AlN 的晶体结构数据。1960 年第二版《晶体结构》中, W. Ralph, G. Wyckoff 提供的 AlN 数据如下: hex 结构, 单胞中有两个 Al 原子, 两个 N 原子, 它们的坐标分别为:

$$\begin{aligned} \text{Al: } &00u, 1/3 \quad 2/3 \quad (u+1/2) \\ \text{N: } &000, 1/3 \quad 2/3 \quad 1/2 \end{aligned}$$

其中 $u=0.385$, 根据(2-38)式:

$$F'_{hkl} = \sum_{j=1}^n f_j \exp[2\pi i(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j)]$$

$$= \sum_{j=1}^n f_j \exp[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)]$$

将 Al 和 N 的原子坐标代入上式,

$$\begin{aligned} F_{hkl} &= f_{Al} \exp 2\pi i(ul) + f_{Al} \exp 2\pi i[(1/3)h + (2/3)k \\ &\quad + (l+1/2)] + f_N \exp[2\pi i(0)] + f_N \exp[2\pi i(h/3 \\ &\quad + 2k/3 + l/2)] \\ &= f_{Al} \exp 2\pi i(ul) + f_{Al} \exp[2\pi i(h/3 + 2k/3 + l/2)] \\ &\quad \cdot \exp 2\pi i(ul) + f_N + f_N \exp[2\pi i(h/3 + 2k/3 + l/2)] \\ &= f_{Al} \exp 2\pi i(ul) \{1 + \exp[2\pi i(h/3 + 2k/3 + l/2)]\} \\ &\quad + f_N \{1 + \exp[2\pi i(h/3 + 2k/3 + l/2)]\} \\ &= [f_N + f_{Al} \exp 2\pi i(ul)] [1 + \exp 2\pi i(h/3 + 2k/3 + l/2)] \end{aligned} \quad (2-44)$$

F_{hkl} 是否为零, 决定于上式右方第二方括号内的数据。显然, 当 $h-k=3n$, l = 奇数时, 则

$$\begin{aligned} 2\pi i(h/3 + 2k/3 + l/2) &= 2\pi i[(h-k+k+2k)/3 + l/2] \\ &= 2\pi i[(n+k) + l/2] \\ &= \pi i[2(n+k) + l] \end{aligned}$$

$\therefore 2(n+k) + l$ 恒为奇数, 故(2-44)式右端中括号内的因子:

$$\exp 2\pi i(h/3 + 2k/3 + l/2) = -1$$

这时 $F_{hkl} = [f_N + f_{Al} \exp 2\pi i(ul)] [1 - 1] = 0$

可见, 对于 AlN 来说, 消光条件为: $h-k=3n$, l = 奇数。例如, (001)、(111)、(221)、(301)、(113)、(115)等这些反射是不应该出现的。

下面导出计算 AlN 结构因子的可供适用的公式。令 $1 + \exp 2\pi i(h/3 + 2k/3 + l/2) = \xi_{hkl}$, 则

$$\begin{aligned} F_{hkl} &= \xi_{hkl} [f_N + f_{Al} \exp 2\pi i(ul)] \\ &= \xi_{hkl} [f_N + f_{Al} \exp i(2\pi ul)] \\ &= \xi_{hkl} [f_N + f_{Al} \cos(2\pi ul) + i f_{Al} \sin(2\pi ul)] \\ &= \xi_{hkl} \{ [f_N + f_{Al} \cos(2\pi ul)] + i f_{Al} \sin(2\pi ul) \} \end{aligned}$$

$$\therefore |F_{hkl}| = \xi_{hkl} \{ [f_N + f_{Al} \cos(2\pi ul)]^2 + [f_{Al} \sin(2\pi ul)]^2 \}^{1/2} \quad (2-45)$$

这就是计算 AlN 各级反射结构因子的公式。

求 f_{Al} 和 f_N 的步骤如下：先由有关资料找出该散射因子与 $\sin \theta/\lambda$ 的关系，并分别作出 f_N 、 f_{Al} 和 $\sin \theta/\lambda$ 的曲线，利用该曲线便可用内插法求出相应于不同反射 (hkl) 的 f_{Al} 和 f_N ，最后利用公式 (2-45) 即可计算结构因子。计算结果列于表 2-2。

表 2-2 AlN 各级反射的结构因子

hkl	$\sin \theta/\lambda$	f_A	f_N	$ F_{hkl} $	F/F_0	hkl	$\sin \theta/\lambda$	f_{Al}	f_N	$ F_{hkl} $	F/F_0
100	0.1711	1.20	0.60	1.80	f	232	0.6746	0.20	0.13	0.33	m
110	0.3220	0.55	0.40	1.60	f	302	0.5929	0.22	0.15	0.32	f
200	0.3719	0.45	0.30	0.75	f	312	0.6099	0.20	0.10	0.24	P
210	0.4920	0.30	0.22	0.52	m	322	0.5831	0.14	0.08	0.17	P
220	0.6412	0.22	0.12	0.68	m	003	0.3074	0.57	0.10	0	PP
300	0.5571	0.25	0.18	0.86	f	103	0.3537	0.50	0.33	1.23	f
310	0.7705	0.20	0.12	0.32	P	113	0.1468	0.35	0.25	0	PP
320	0.6166	0.16	0.09	0.24	P	203	0.4784	0.30	0.24	0.51	f
001	0.1003	2.00	0.66	0	PP	213	0.5767	0.23	0.16	0.63	m
101	0.2011	1.00	0.55	1.18	f	004	0.4102	0.36	0.29	0.28	P
111	0.3874	0.50	0.35	0	PP	104	0.4422	0.35	0.25	0.13	PP
201	0.3852	0.42	0.30	0.49	m	114	0.5145	0.30	0.22	0.22	P
211	0.5021	0.30	0.22	0.33	P	224	0.3147	0.26	0.20	0.36	PP
221	0.3519	0.22	0.13	0	PP	214	0.3048	0.23	0.13	0.13	PP
301	0.5649	0.23	0.17	0	PP	005	0.5017	0.30	0.21	0	PP
311	0.6779	0.20	0.12	0.24	P	105	0.5349	0.20	0.20	0.36	f
002	0.2006	1.00	0.55	2.42	ff	115	0.5830	0.25	0.25	0	PP
102	0.2735	0.67	0.45	0.86	f	205	0.4313	0.22	0.13	0.34	m
112	0.2795	0.43	0.30	1.12	f	006	0.6049	0.24	0.11	0.13	m
202	0.4226	0.37	0.26	0.43	m	106	0.6244	0.21	0.12	0.13	PP
212	0.5312	0.27	0.20	0.36	m	116	0.6825	0.20	0.10	0.54	m

根据结构因子确定常见晶体结构的衍射消光条件如表 3-3。

以上讨论的是正常点阵结构因子的计算，关于超结构结构因子的计算步骤原则同上，表 2-4 列出了常见超点阵的结构因子。

表 2-3 常见晶体结构的衍射消光条件

晶 体 结 构	下述情况下衍射不出现
简单立方	对指数没有限制, 都能产生衍射
fcc(面心立方)	h, k, l 奇偶混合
bcc(体心立方)	$h+k+l$ 奇数
hcp(密排六方)	$h+2k=3n$, 同时 l 奇数
复杂立方(如 ZnS)	h, k, l 奇偶混合
NaCl 型结构	h, k, l 奇偶混合
bct(体心四方)	$h+k+l$ 奇数
(如马氏体 α -Fe)	
金刚石型结构	h, k, l 全偶, 同时 $h+k+l$ 不能被 4 整除; 或 h, k, l 奇偶混合

表 2-4 含有 A 和 B 原子的简单有序晶体的结构因子^[12]

起点阵型	F (超点阵反射)	F (晶体反射)
P_1	$F=S(f_A - f_B)$, 即 $h+k+l$ 为奇	$F=(f_A+f_B)$, 即 $h+k+l$ 为偶
$LiAlO_2$ 和 D_{2h}	$F=4(f_B - f_A)$, hkl 全奇 $F=4(f_B + f_A - 2f_A)$, hkl 全偶 ($h+k+l$)/2 为奇	$F=4(f_B + f_A - 2f_A)$ $\begin{cases} hkl \text{ 全偶} \\ (h+k+l)/2 \text{ 为偶} \end{cases}$
LiF	$F=(f_A - f_B)$, hkl 混合	$F=(3f_A + f_B)$, hkl 不混合
$LiCl$	$F=2(f_A - f_B)$, hkl 混合	$F=2(f_A + f_B)$, hkl 不混合
D_{2h}	$\{20\bar{1}\} F=(3f_B - 6f_B f_A + 3f_A^2)^{1/2}$ $\{0\bar{1}0\} F=2(f_B - f_A)$	$\{20\bar{2}\} F=(f_B + 5f_B f_A + 7f_A^2)^{1/2}$ $\{0002\} F=(2f_B + 3f_A)$

注: 其中 S —Bragg-Williams 有序参数, $S=(p-\sigma)/(1-\sigma)$; 其中: p —A 原子的正位位置, 为 A 原子所占有的几率; σ —A 原子在合金中的百分比。

§ 2-6 晶体对电子的散射

上面几节我们讨论了物质与单个原子及单胞的交互作用, 以及由前者引出了原子散射因子的概念, 由后者引出了结构因子的概念。许多单胞的集合, 便是晶体。本节将讨论电子波和晶体的交互作用, 并导出作为 X 射线、电子衍射基础的布拉格定律。

历史上, 人类对于波的本质的认识, 是从可见光开始的, 从可

见光的反射和衍射现象,人们设想X射线是否也具有同样的性质?本世纪初,厄瓦尔德提出,如果找到一种合适的光栅(光栅常数和波长在数量级上近似),就能显示X射线的衍射特性。不久,这一大胆设想由劳厄(M. Von Laue)的著名实验证实了。后一年,布拉格父子,也完成了同样的实验。这些实验得出的重要结论是:X射线具有波动性,晶体内部结构具有周期性。

实验指出:X射线照射到晶体上时,也与可见光在镜面上的反射一样,都遵从反射定律。但是,两者又不尽相同,即X射线入射到晶体,只有当入射角取某些特定值时,才能在角度相同的反射线方向上获得集中的反射强度;而可见光被镜面反射是不受入射角限制的。

下面推导布拉格定律。

假定晶体中不存在任何缺陷或晶格扭曲,原子完全规则地排列在晶格结点上,也不考虑原子的热运动,或者认为原子虽有热运动,但其平衡位置仍处于晶格结点上。将每一个原子作为一个整体来考虑,并且都作为一个发生散射的次级波源,而不考虑原子内部的电子结构细节以及由此而产生的各电

子散射波的位相差;此外完全忽略了入射波和散射波的交互作用,也不考虑多重散射效应。

如图2-8所示,设平面单色波 σ_0 (X射线或电子束),以入射角 θ 入射到晶体的表面,两支波在波前 SS' 处位相相同。进入晶体后,被晶面I和II[它们的指数为 (hkl)]所反射,其反射角亦为

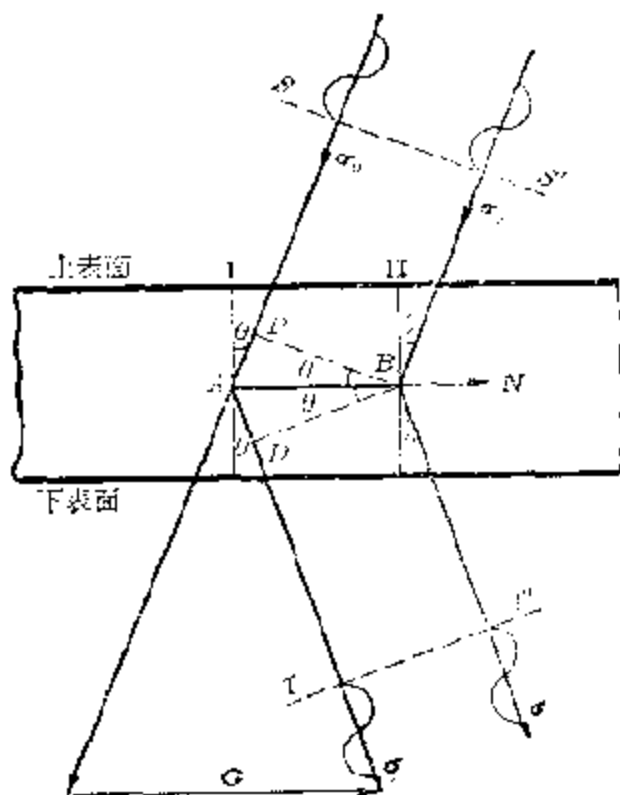


图2-8 入射波在晶体上的反射

θ , 这时将发生两种情况, 一是反射线到达波前 TT' 时, 两波同位相, 相干的结果得到加强, 在 σ 方向可得到明显的强度极大的衍射; 二是反射线到达波前 TT' 时, 两波位相不同, 相干的结果强度为0, 或得到弱的衍射。

我们更感兴趣的是前一种情况。

这时, 两波的程差应为波长的整数倍,

$$\therefore PA = AD = AB \sin \theta$$

而 $AB = d_{hkl}$, 即 (hkl) 面组的晶面间距, 故程差是

$$PAD = PA + AD = 2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$$

我们把

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda \quad (2-46a)$$

称为布拉格公式。它告诉我们: 入射到晶面 (hkl) 上的 X 射线 (或电子束), 只要晶面间距 d_{hkl} , 入射角 θ 和波长 λ 三者之间满足 $2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$ 关系, 就能在与晶面成 θ 角的反射方向上, 得到有强度极大的衍射束。

(2-46a) 式如果写成 $2(d_{hkl}/n) \sin \theta = \lambda$ 的形式, 则说明将晶面间距缩小了 n 倍。这时, 从晶体学可知, 面指数应加大 n 倍, 即 (nh, nk, nl) , 这正是 (hkl) 的 n 级反射。实际工作中, 常常无须考虑 (hkl) 的 n 级反射, 而只考虑它的一级衍射就可以了。因而通常把布拉格公式写成如下形式:

$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda \quad (2-46b)$$

为了把布拉格公式应用于电子衍射, 将 (2-46b) 式表示为图解的形式, 则更为直观且便于理解, 这就是下面所要介绍的厄瓦尔德作图法。

将 (2-46b) 式改写成:

$$1/d = 2 \sin \theta / \lambda \quad (2-46c)$$

由图 2-8, 也不难将上式写成如下的向量形式:

$$\mathbf{G} = (\sigma - \sigma_0) / \lambda \quad (2-47)$$

式中: $\mathbf{G}$ ——相应于产生衍射的晶面组 (hkl) 的倒易矢量;

σ_0 ——入射电子束的单位矢量;

σ ——衍射电子束的单位矢量;

λ ——电子波长。

由(2-46a)和(2-47)式,可得:

$$G = |(\sigma - \sigma_0)/\lambda| = 1/d$$

由(2-47)式和图 2-8, 可以作出表达衍射条件即布拉格公式的图解,如图 2-9。

在入射电子束方向上选择任一点 O , 作为倒易点阵的原点, 并沿这个方向作向量 $\sigma_0 \lambda$, 使其端点落在 O 上, 始点 O 作为球心, 此球的半径为 $|\sigma_0 \lambda| = \lambda$ 。显然, 以 O 为倒易原点的倒易点阵的那些阵点, 只要它们落在球面上, 那么这些阵点对应的晶面就是满足布拉格条件的。如果它们的结构因子不为零, 就会产生衍射, 并

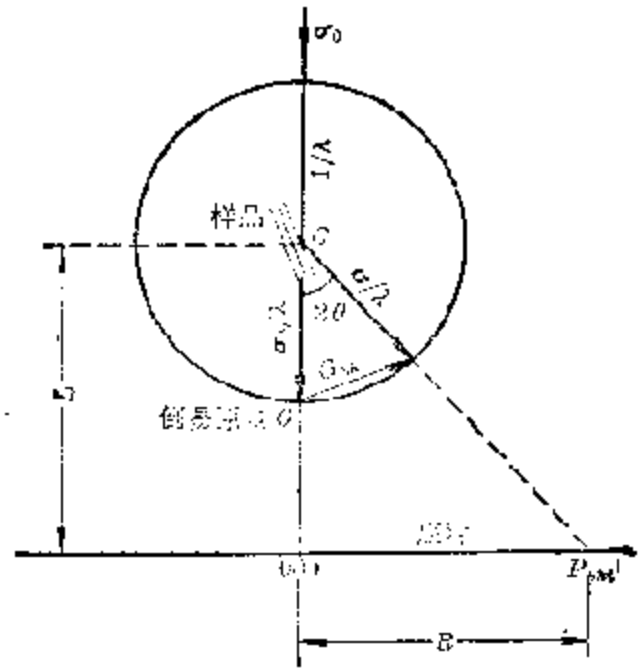


图 2-9 布拉格公式的几何图解
——厄瓦尔德图解

且在衍射花样上, 出现相应的衍射斑点。例如图 2-9 中, 在底片上出现和 G_{hkl} 相应的斑点 P_{hkl} 。由图可知, $R = L \tan 2\theta$, 即

$$R/L = \tan 2\theta$$

式中: R ——底片上中心斑点(000)到 (hkl) 衍射斑点的距离;

L ——厄瓦尔德球中心(即试样处)到底片中心的距离[注]。

由布拉格公式(2-46a), 有

$$\lambda/d = 2 \sin \theta \quad (2-46d)$$

由于在电子衍射下, 波长很短, 具备一定强度的衍射线所对应的 θ 都很小, 故近似有 $\tan 2\theta \approx 2 \sin \theta$, 因此

[注] 严格地说, L 不是一个通常意义的几何长度, 其真实含义是 $L = f(0) \cdot M_1 \cdot M_P$; 其中 $f(0)$ 为物镜焦距, M_1 、 M_P 分别为中间镜、投影镜的放大倍数。

$$R/I = \tan 2\theta \approx 2 \sin \theta \quad (2-48)$$

由(2-46d)和(2-48), 故

$$Rd = I\lambda \quad (2-49)$$

(2-49)式就是处理衍射照片的基本关系式。虽然还可以导出较为严格的关系式来代替,但在通常的电镜工作中,由于不可避免地存在杂散磁场所产生的畸变和透镜象差,建立这种严格表达式的意义不大,而应用(2-49)式已经足够。

第 三 章

电子衍射实验方法

§ 3-1 引 言

电子衍射包括低能电子衍射 (LEED) 和高能电子衍射 (HEED)。前者一般在专门的电子衍射仪上进行, 电子的加速电压通常为几百伏, 由于能量较低, 与试样物质发生作用的仅限于表层几十埃范围内, 因此适于研究表面物质结构。随着电子显微镜技术的改进, 从五十年代起, 发展了在电镜上进行电子衍射的技术, 加速电压一般为几十到几百千伏, 甚至更高, 称为高能或快速电子衍射。二十多年来, 高能电子衍射有了很大发展, 并取得可喜的成绩。配合金属薄膜的直接观察, 高能电子衍射已成为衍射技术的基础。在电镜上观察显微图象的同时, 对选定的微小区域进行电子衍射, 把形貌观察和结构分析有机地结合起来, 这种电子衍射称为选区域电子衍射 (SAED)。

本章介绍选区域电子衍射基本原理及与此有关的实验技术。

§ 3-2 选区域电子衍射原理

在电镜中电子束照射试样, 成象和产生衍射的过程, 仍然可以借助经典的阿贝 (Abbe) 衍射成象原理来解释。阿贝原理指出, 当平行光束照射到光栅上时, 除产生一束透射束 (即零级衍射束) 外, 还会产生各级衍射束 (图 3-1)。这些衍射束, 经过透镜 (在电镜中为物镜) 的聚焦, 在后焦面上产生各级衍射束的振幅极大值, 形成衍射谱。每个衍射极大值, 又可视为次级光源, 它们发出的波, 在象平面上相干成象。因此, 可以说, 电子束照射试样后, 在透镜作

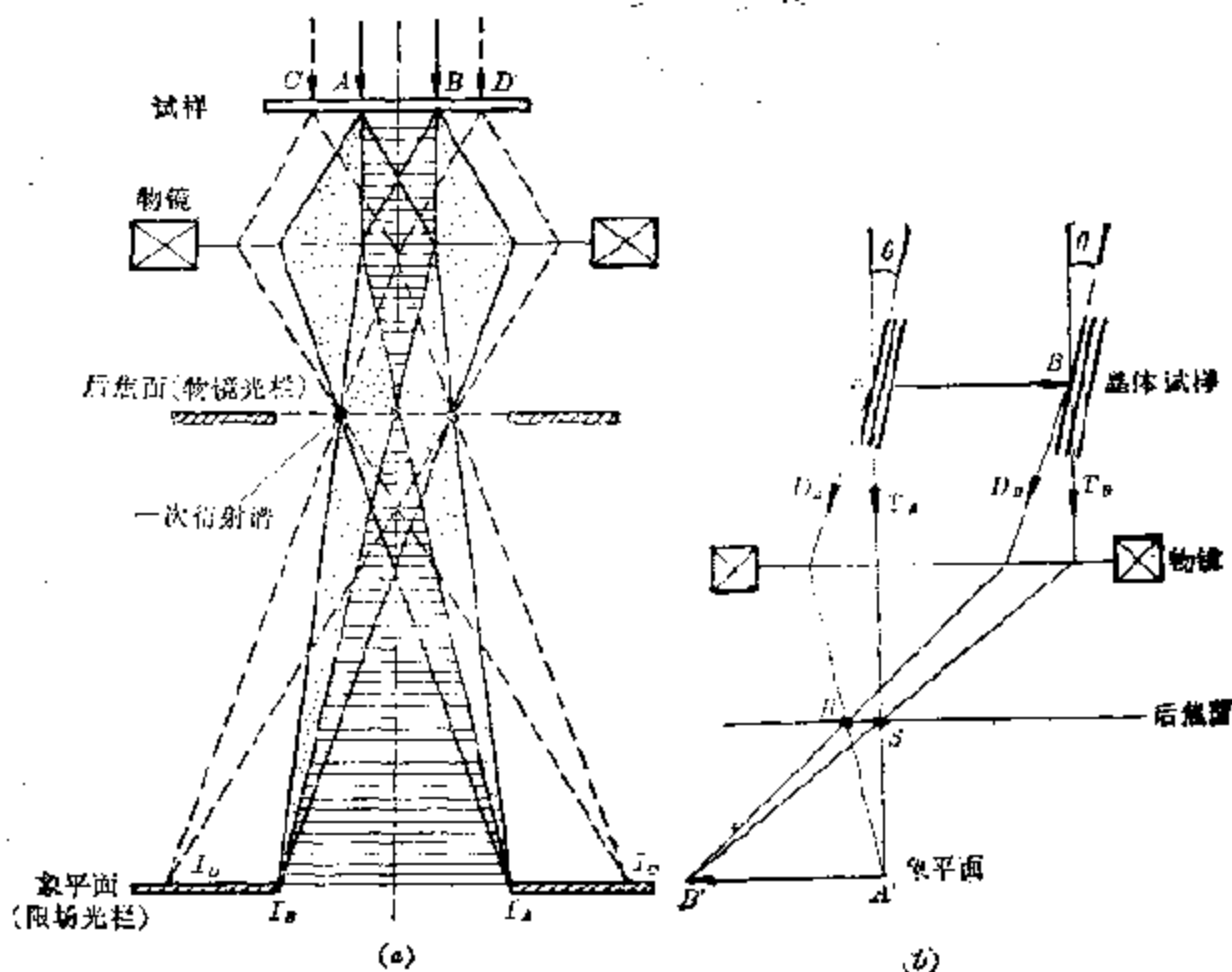


图 3-1 选区域电子衍射原理光路示意图

用下发生了两个过程：一是由物变换到衍射谱的过程；二是由衍射谱还原为物（象是放大了的物）的过程。其中后者是前者的逆变换。

实际工作中，在物镜象平面处设置限制视场的光栏（简称限场光栏），将对应于试样上 AB 范围的物象 $I_A I_B$ 围住。只有从 AB 范围内发出的成象电子束（实线）能通过限场光栏；而从 AB 范围以外发出的成象电子束（虚线），均被限场光栏挡住。因此，这时的一次衍射谱，是试样上 AB 范围内的物质贡献的。我们说物体 $A-B$ 、衍射谱、象 I_A-I_B 三者都是对应的 [图 3-1(a)]。

如何实现对试样上指定区域进行电子衍射结构分析，曾有人首先考虑在试样上设置一极小直径的光栏，将它围住指定区域，只

让电子束通过此光栏，得到的衍射信息当然是对应于该指定区域

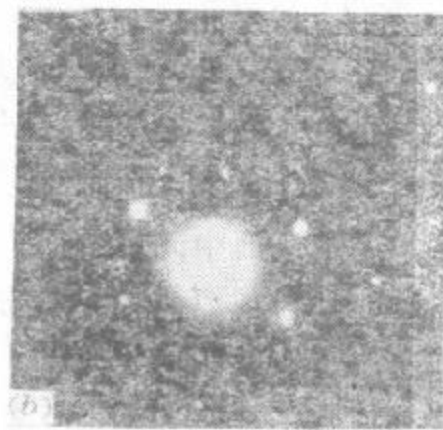
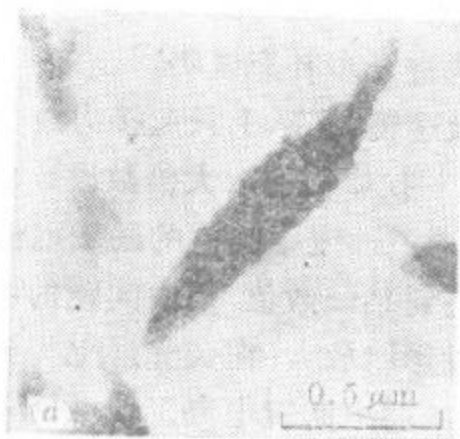
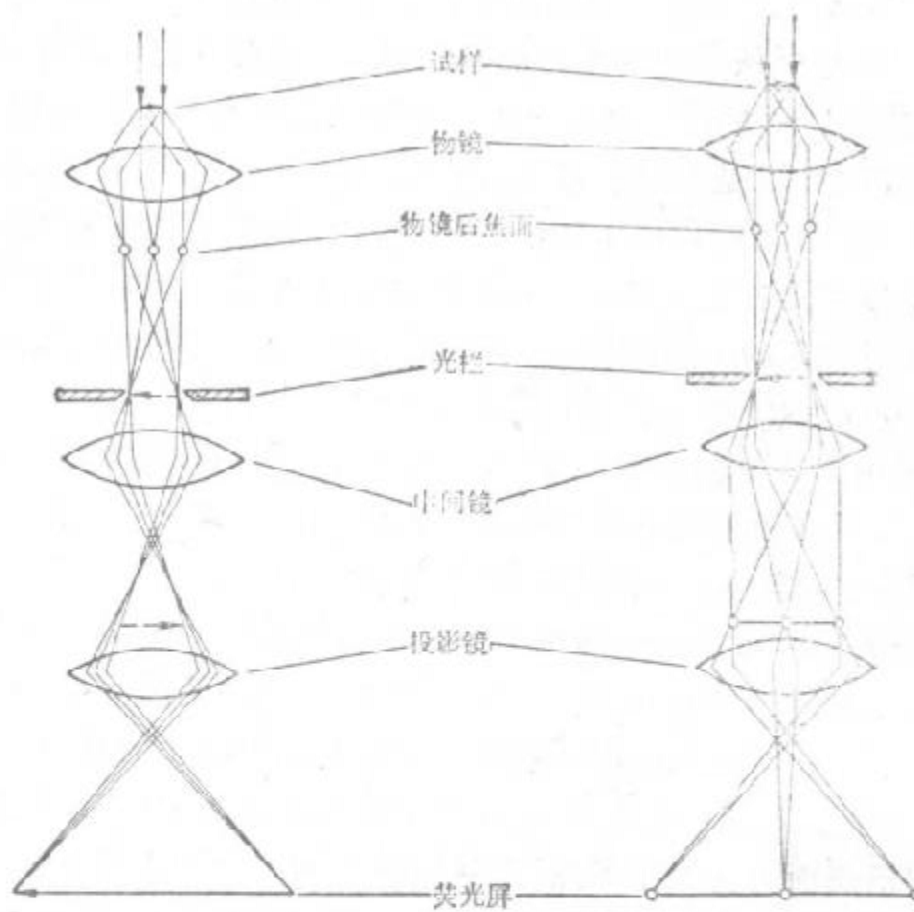


图 3-2 在电子显微镜上进行显微观察和选区域电子衍射
(a) 放大显微观察; (b) 图(a)指定区域的衍射

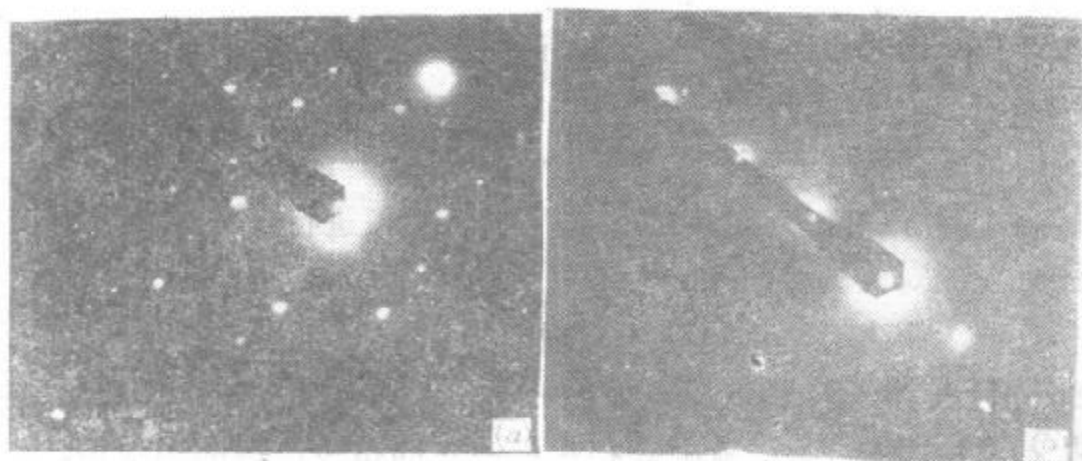
为 28000 倍时进行衍射。这在应用上当然也有某些不便,例如试样上的某些细节,在大于 28000 倍时才能察觉,这样,就无法在仪器的指定倍数下进行衍射分析。有鉴于此,近年来许多先进的电镜,都设计成在一定范围的放大倍数下均可进行电子衍射,并能保证必要的对应性。

在了解上述选区域电子衍射原理后,对本书 § 1-3 中所规定的衍射正确操作步骤,就不难进一步理解了。一般说来,只要严格执行这些操作步骤,就会获得相当满意的指定区域的衍射谱。但是,实际上还往往会出现一些意外情况。常见的现象主要有:

(1) 能看到显微图象,却不能获得衍射谱。其原因多半是衍射区域试样太厚,虽然能勉强看到显微象,但衍射束却被试样吸收,因此无法得到衍射谱。这时,可适当移动试样,或借助倾动台倾动试样,使电子束从试样边缘掠射,有可能得到衍射谱。

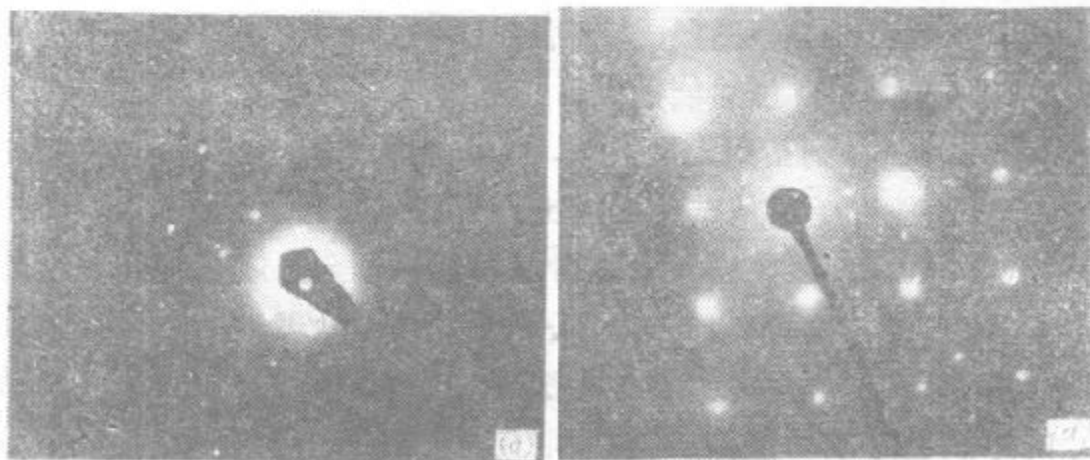
(2) 从所选区域得到的衍射谱,斑点不全,或只得到单列斑点。这是我们所不希望的,因为这将给数据处理带来困难。单列斑点不能构成一个重复单元,无法确定倒易面。遇到这种情况,最好的办法也是倾动试样,以改变取向,直至得到由两个方向斑点组成的衍射谱。斑点不全则又有两种情况,一是仅一侧有斑点,但周期性明显,这是由于衍射区域靠近膜的边沿,分析这种衍射谱没有困难,不足介意。另一种情况是斑点不全且周期性也不明显,这可能是由于特定的试样取向造成的。即在此取向下,该倒易面的某些倒易点,本来就比较弱,或结构因子接近于零。为使周期性有所改善,也可稍许倾动试样,有可能使斑点分布变得规则整齐。若试样已足够薄,透明度也相当好,而仍不能得到周期性满意的衍射谱,则多半由于试样相对于入射电子束的取向不合适,以致不能使更多反射面正好满足布拉格条件,因而不能得到周期分布的相干强度极大值。解决的办法,仍是倾动试样,以获得有利取向。图 3-3 是不同情况下所得到的几种电子衍射谱,其中 (a) 和 (b) 不适于分析; (c) 和 (d) 均可进行分析。

(3) 有时在衍射谱中出现限场光栏以外的物质的衍射信息,



(a) 取向不合适, 斑点不全, 且周期性差

(b) 取向不合适, 只出现单列斑点



(c) 选区靠近试样边沿, 斑点集中在一侧

(d) 试样厚度和取向均合适, 斑点分布完全, 周期性理想

图 3-3 不同情况下的几种电子衍射谱

这就是通常所说的选择区域和衍射谱不对应的问题。

设物镜的放大倍数为 100 倍, 如果所用限场光栏的直径为 $50\ \mu\text{m}$, 那么在试样上被选定的分析范围将是 $0.5\ \mu\text{m}$ 。实际工作中, 常常会出现这种情况, 即衍射谱并非完全是 $0.5\ \mu\text{m}$ 范围的贡献, 而包括了该范围以外物质的衍射谱。从电子光学角度考虑, 这主要是由于物镜球差造成的, 电子透镜总是存在一些球差, 这在目前还不能得到解决。由于球差的存在(参见图 3-4), 使得透射束 (000) 和衍射束 (hkl) 在象平面处形成的象的位置, 相对无球差时应有的位置偏移了一个距离 $M_o C_s \alpha^3$ 。此处 M_o 为物镜放大倍数, C_s 为物镜球差系数, α 是衍射锥顶角的一半, $\alpha = 2\theta$ 。这就是说,

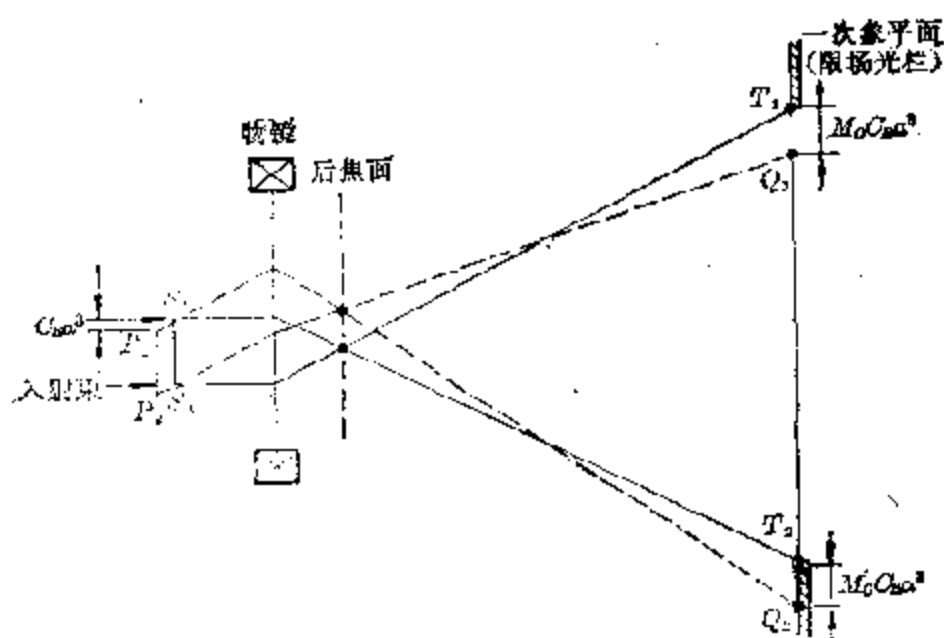


图 3-4 由球差而引起(360°)衍射斑点的象向下位移

透射束和衍射束在一次象平面处产生的象是不相重的。可以认为，透射束产生的象，处于理想位置，即落在限场光栏的准确范围内，而衍射束产生的象却向下错动了距离 $M_o C_s \alpha^3$ 。反过来说也是正确的：在后焦面上的衍射斑点，除了对应于象平面上 $T_1 T_2$ 范围在试样上由 $S_1 S_2$ 的贡献外，还包含了对应于象平面 $Q_1 Q_2$ 范围在试样上由 $P_1 P_2$ 的贡献，而在试样上就比选定的范围多 $C_s \alpha^3$ 。不难理解，随着衍射指数愈高，即 α 愈大，象位移量也愈大。若取通常物镜球差系数的典型值 $C_s = 0.33 \text{ cm}$ ，在加速电压为 100 和 1000 kV 下，Al 的各级 111 衍射产生的象位移还原为物面上的选区偏差如下表所列：

hkl		111	222	333	444	555	666
$C_s \alpha^3$	100 kV	130 Å	0.1 μm	0.35 μm	0.70 μm	1.63 μm	2.80 μm
	1000 kV	1.7 Å	0.0012 μm	0.0046 μm	0.0108 μm	0.0214 μm	0.0367 μm

这说明，{111} 的各级衍射斑点，除 111 和 222 基本与所选物区对应外，其余 333 以上各级衍射均与所选区域偏离很远。它还告诉我们：如果一张衍射底片，靠近(000)处的衍射斑点模糊不清，而用远离中心的衍射斑点进行计算，以鉴定物相，其误差可能很大。

由 $C_s \alpha^3 = C_s (2\theta)^3 \approx C_s (\lambda/d_{hkl})^3$ 可知, 加速电压愈高, 这种不对应情况将有所改善, 详见上表所列的计算结果。就 Al 而言, 在 1000 kV 下甚至 333 衍射的对应物区偏离量也不过 $46 \text{ \AA}$ 。可见, 超高压电镜, 除了穿透能力高, 可以观察较厚样品的优点外, 在进行选区域电子衍射方面, 也远较常规电镜优越。

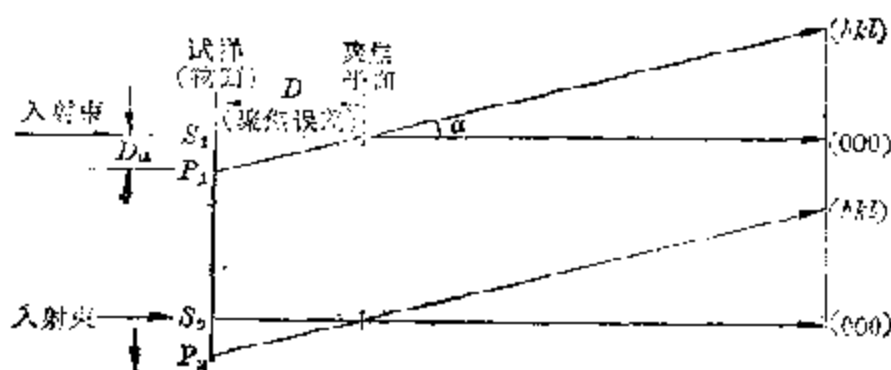


图 3-5 物镜过聚焦引起的物面选区偏离

值得指出的是, 除了由于物镜球差所引起的衍射与选区不对应外, 物镜聚焦不当, 也会增加不对应的程度。这一点却往往为实际衍射工作者所忽视。图 3-5 所示为过聚焦所引起的衍射与选区不对应的情况。由于过聚焦, 致使选区范围 S_1S_2 以外的 P_1P_2 物区的离束光线, 也可以通过光栏。这时 (000) 透射线仍可视作来自所选物区 S_1S_2 , 而衍射线则相当于来自 P_1P_2 , 即位移了 $D \tan \alpha \approx D\alpha$, D 是物面与聚焦平面之间的距离。将聚焦不当和物镜球差引起的偏离合并起来, 可记作 $\Delta S = C_s \alpha^3 \pm D\alpha$, 过聚焦取正号, 欠聚焦取负号。有人指出, 聚焦不当引起的不对应情况, 可以与球差的影响相当, 甚至更为严重。Riecke 1961 年曾在微小第二相作衍射分析时, 对上述两种因素可能导致的不对应情况进行研究。图 3-6 归纳了他们所获得的实验结果。

从以上讨论可知, 在作选区电子衍射时, 衍射信息与选区不对应的情况几乎是难以避免的。如果发现异常斑点, 除了确属所选区域微观结构(如孪晶、超结构、二次衍射、肉眼不可见的第二相等)的反应外, 多数情况可能就是上述选区不对应所造成的, 即选区外物质参加了贡献。实际的衍射工作者, 也往往遇到这样的情

况,即:在作暗场时,选择的斑点明显是由所选区域物质提供的,但暗场象却看到选区以外的物质,衬度也反过来了。由此可见,即使是用来成暗场象的低指数斑点,也有来自选区外物质的贡献。这就告诉我们,分析一张复杂衍射照片时,必须全面考虑各种因素的影响,加以恰当的处理,才能得出正确的结论。

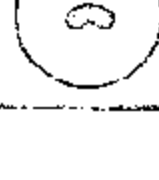
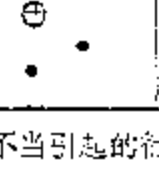
选区电子衍射	物像状态	衍射图	说 明
	欠聚焦		欠聚焦,使得选区以外的试样在(000)衍射产生低指数及高指数衍射
	正聚焦		由于球差,高指数斑点不可见,中指数斑点亦很弱,唯低指数斑点可见
	过聚焦		过聚焦,使得仅出现低指数衍射
	欠聚焦		球差加欠聚焦,使高指数及低指数衍射均消失

图 3-6 球差和聚焦不当引起的衍射与选区不对应情况

§ 3-3 $L\lambda$ 值的意义及其测定方法和误差来源

一、 $L\lambda$ 值的意义

在 § 2-6 中我们曾导出了处理电子衍射谱的基本关系式(2-49),即 $L\lambda = L\lambda_0$ 。

我们曾定义 L 为试样到荧光屏中心的距离,实际上这是不严格的。下面我们从电子光学的角度来建立这个关系式,这样将有助于看出 $L\lambda$ 值的物理意义。

参看图 3-7, 电子束通过试样, 在物镜后焦面上得到相应于反射面 (hkl) 的衍射振幅极大值 A' , 此时因 $\alpha=2\theta$, 从 A' 到透射中心 O' 的距离为:

$$r = O'A' = OO' \tan \alpha = f(0) \tan 2\theta \quad (3-1)$$

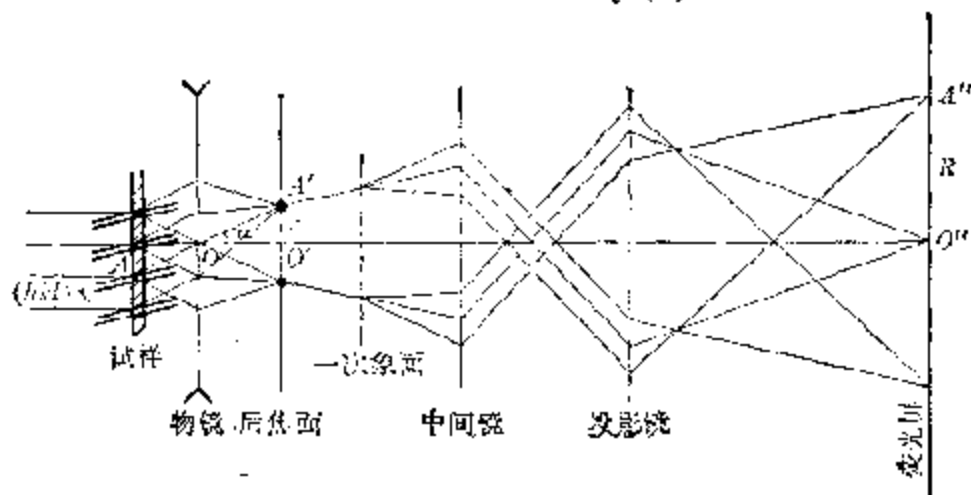


图 3-7 衍射谱的放大, $r \rightarrow R$

O' 是后焦面的中心位置, O 是物镜的中心。设在荧光屏上, r 被放大为 R , 显然应有:

$$R = r \cdot M_I \cdot M_P \quad (3-2)$$

式中: M_I 、 M_P ——分别为中间镜、投影镜的放大倍数。

由(3-1)和(3-2)有:

$$R = f(0) \cdot M_I \cdot M_P \tan 2\theta \quad (3-3)$$

在电子衍射中, 因 θ 很小, 并且利用(2-46b)式, 易知:

$$\tan 2\theta \approx 2\theta \approx 2 \sin \theta = \lambda/d$$

将上式代入(3-3), 得

$$R = f(0) \cdot M_I \cdot M_P \cdot \lambda/d \quad (3-4)$$

令 $L = f(0) \cdot M_I \cdot M_P$, 它是物镜参数(焦距 $f(0)$) 和工作条件(中间镜、投影镜的放大倍数)的函数, 于是上式可写作:

$$R = L \cdot \lambda/d$$

将上式与(2-49)式进行比较, 可见 $L\lambda$ 的含义是:

$$L\lambda = [f(0) \cdot M_I \cdot M_P] \lambda \quad (3-5)$$

对特定的物镜, 在一定的加速电压和所设定的放大倍数下, $L\lambda$ 是

一个常数,称为有效镜筒常数或仪器常数,亦称为衍射常数。只要知道 $L\lambda$ 值,再测量出衍射斑点到(000)的距离,就可利用(2-49)式计算出相应于衍射斑的反射面的面间距 d 。

二、测定 $L\lambda$ 常数的方法

(1) 利用标准物质测定:即在实验条件下,对一些晶体学参数为已知的物质进行衍射。由于已知这些物质的晶面间距,所以在量出各(hkl)的 R 值后,就可根据 $Rd = L\lambda$ 计算出 $L\lambda$ 值。一般只需计算三、四个(hkl)的 $L\lambda$,取其平均值即可。用来测定 $L\lambda$ 的标准物质有: Au, Ti, Cl, Al 等,以 Au 为例:在碳支持膜上喷金,得到多晶金膜,进行衍射时测得第一、二、三环的半径分别为 7.94, 9.20, 13.00 mm, 则

$$L\lambda_1 = 7.94 \times d_{111} = 7.94 \times 2.3555 = 18.70 \text{ mm}\text{\AA}$$

$$L\lambda_2 = 9.20 \times d_{200} = 9.20 \times 2.039 = 18.76 \text{ mm}\text{\AA}$$

$$L\lambda_3 = 13.00 \times d_{220} = 13.00 \times 1.442 = 18.75 \text{ mm}\text{\AA}$$

$$\therefore \overline{L\lambda} = \frac{18.70 + 18.76 + 18.75}{3} = 18.74 \text{ mm}\text{\AA}$$

除了单独喷制金膜外,也可在待分析的试样上喷金,这时,在衍射谱上将同时获得分析物质和金的衍射谱。先由金的衍射环求出 $L\lambda$ 值,再据此来标定分析物质的衍射谱。这种方法虽较简便,但其缺点是:金的衍射环有时会模糊待分析物质的衍射谱。

(2) 内标法:衍射工作中对金属薄膜直接观察时,由于此衍射谱中总还包含有基体金属的衍射谱,而其晶体学数据是已知的,因此也可利用它来求 $L\lambda$,再据此计算未知相的结构。例如,从 18-Ni 马氏体时效钢的金属薄膜获得成正四边形分布的衍射谱,不难看出这正是 $\alpha\text{-Fe}$ 的 $[001]$ 倒易面,互成直角的两倒易矢,相应于 $\alpha\text{-Fe}$ 的 (011) 和 $(0\bar{1}\bar{1})$, 已知 $d_{(110)} = 2.07 \text{ \AA}$, 所以:

$$L\lambda = Rd_{(110)} = 9.00 \times 2.07 = 18.63 \text{ mm}\text{\AA}$$

这种标定方法较之(1)法更为可靠,是衍射工作中经常采用的。

三、仪器常数 $L\lambda$ 的误差来源

由(3-5)式可知:

$$\frac{\Delta L\lambda}{L\lambda} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} + \frac{f'(0)}{f(0)} + \frac{\Delta M_I}{M_I} + \frac{\Delta M_P}{M_P} \quad (3-6)$$

可见, $L\lambda$ 的误差是波长 λ 、物镜焦距 $f(0)$ 、中间镜放大倍数 M_I 和投影镜放大倍数 M_P 各项误差的总和, 这四个因素的精度决定了 $L\lambda$ 的精度。为了提高 $L\lambda$ 的可靠性, 要求:

(1) 高压稳定, 使波长稳定。一般电镜高压稳定度为 10^{-5} /分数量级, 相对其它三项, 则 $\Delta\lambda/\lambda$ 的影响较小。

(2) 透镜电流稳定。这就要求严格执行 § 1-3 中所规定的操作步骤, 特别是正确调节中间镜电流。

(3) 正确聚焦。影响物镜焦距的因素很多: 首先是观察者判断不正确, 误认失焦为正焦; 其次是试样在试样架中的位置不当。经验指出, 在作金属薄膜的衍射观察时, 由于膜边沿、孔边沿翘起, 常使聚焦发生困难或判断错误, 因之引起的误差也是可观的。

最后, 试验还指出, 同一张底片, 在不同方位 φ 处(参见图 3-8a), $L\lambda$ 值也稍有不同, 这是由中间镜和投影镜(特别是中间镜)的象散所造成。象散会使衍射环变成椭圆。此外, 透镜的径向畸变, 使不同径向距离 R 处的放大率也不相同。这些都将使 $L\lambda$ 值发生误差。

为了消除不同方位 φ 处 $L\lambda$ 值的不同给分析计算带来的影响, 在计算未知物质的衍射谱时, 可以用同方位的 $L\lambda$ 值来计算同方位的斑点, 而不采用平均值 $\overline{L\lambda}$ 。而消除不同 R 处 $L\lambda$ 值的不同给衍射分析带来的影响, 则可以这样处理[参看图 3-8(b)]; 因 $L\lambda$ 与 R 一般呈线性关系, 因此, 可事先用已知物质绘制一条 $L\lambda-R$ 曲线, 在分析未知物质的衍射谱时, 从低指数到高指数依次选用不同径向距离 R 处的 $L\lambda$ 值来进行计算。

还值得指出的是, 通常用来计算衍射谱的(2-49)式, 利用了 $\tan 2\theta \approx 2 \sin \theta$ 这个近似关系, 而该式的精确表达式应为:

$$d = \frac{\lambda L}{R} \left(1 + \frac{3R^2}{8L} \right) \quad (3-7)$$

例如, 当 $2\theta = 3.6^\circ$ 时, 精确的 d 值就比根据(2-49)式的计算值大

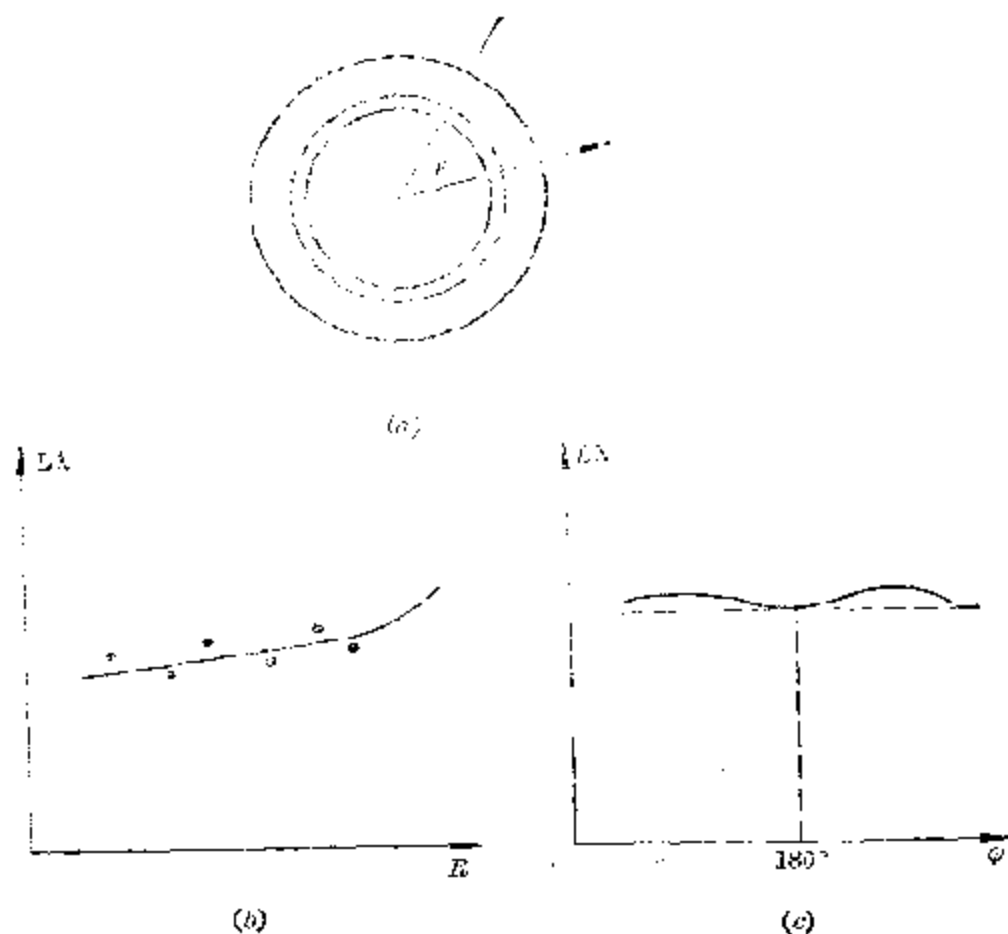


图 3-8 由透镜质量引起的 $L\lambda$ 值的误差

0.15%。尽管在测定相结构的电子衍射和取向分析中,应用(2-49)式,从精度来讲已经足够。但对要求精确的点阵常数,则仍以采用X射线衍射技术为宜。

§ 3-4 衍射谱相对于显微象偏转角的测定

在衍射工作中,常常需要在显微图象上标出它的真实取向。但是,正如§ 1-2中式(1-5b)所指出的,在磁场作用下,显微图象与物之间发生了相对旋转,而物镜后焦面上的衍射谱与物存在着对应的富氏变换关系,因此,也可以说显微图象相对于衍射谱发生了相对旋转。由(1-5b)式可知,旋转的角度 θ 是随着透镜的励磁强度(即透镜电流强度)的增大而增大。由于投影镜电流通常是固定的,因此总是以相应于不同中间镜电流(即不同的总放大倍数)测

定一系列转角值, 绘制成转角-中间镜电流曲线备用。

标定物质一般采用既有确定的几何外形, 且其特征边长的晶体学取向又为已知的物质。用得最多的是 $\alpha\text{-MoO}_3$ 晶体。它是伪正交晶系; 其点阵常数为: $a=3.966 \text{ \AA}$, $b=13.848 \text{ \AA}$, $c=3.696 \text{ \AA}$; 其单晶常为矩形, 长边平行于 $[001]$, 表面法线方向为 $[010]$ 。如果在同一张底片上同时拍下衍射谱和显微图象, 则很容易测出两者之间的相对旋转角 θ (图 3-9)。在此放大倍数下, 衍射谱应相对于显微象顺时针旋转 18 度。图 3-10 是 JSEM-200B 的转角校正曲线。严格地说, 以三级成像系统而言, 终象相对于物发生了 180° 反转, 而衍射谱则不存在这种与物的反转, 因此其总的校正应为 $180^\circ + \theta$ 。

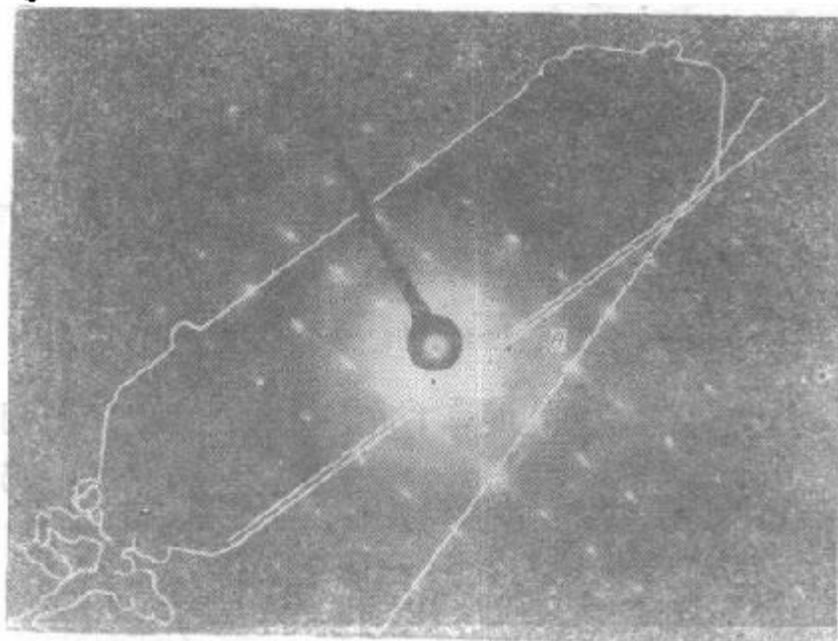


图 3-9 利用 $\alpha\text{-MoO}_3$ 单晶片测定磁偏转角

$\alpha\text{-MoO}_3$ 的制备方法: 将钼酸铵粉末燃烧, 直至蒸发出白色烟雾, 然后用钟罩覆盖, 燃烧产物即为 $\alpha\text{-MoO}_3$ 微晶片, 它在钟罩内沉积于事先制备的支持膜上, 再喷上一层碳膜加固后即可应用。

除上述方法外, 当衍射照片上出现某些有固定晶体学取向的特征时, 也可直接用来校正, 且这种方法往往更为可靠和直观。例如, 在 Ni 基高温合金中, 就可利用第二相 γ' 的零衬度效应来标定转角。由第二相衬度理论可知, 其零衬度方向总是垂直于操作反

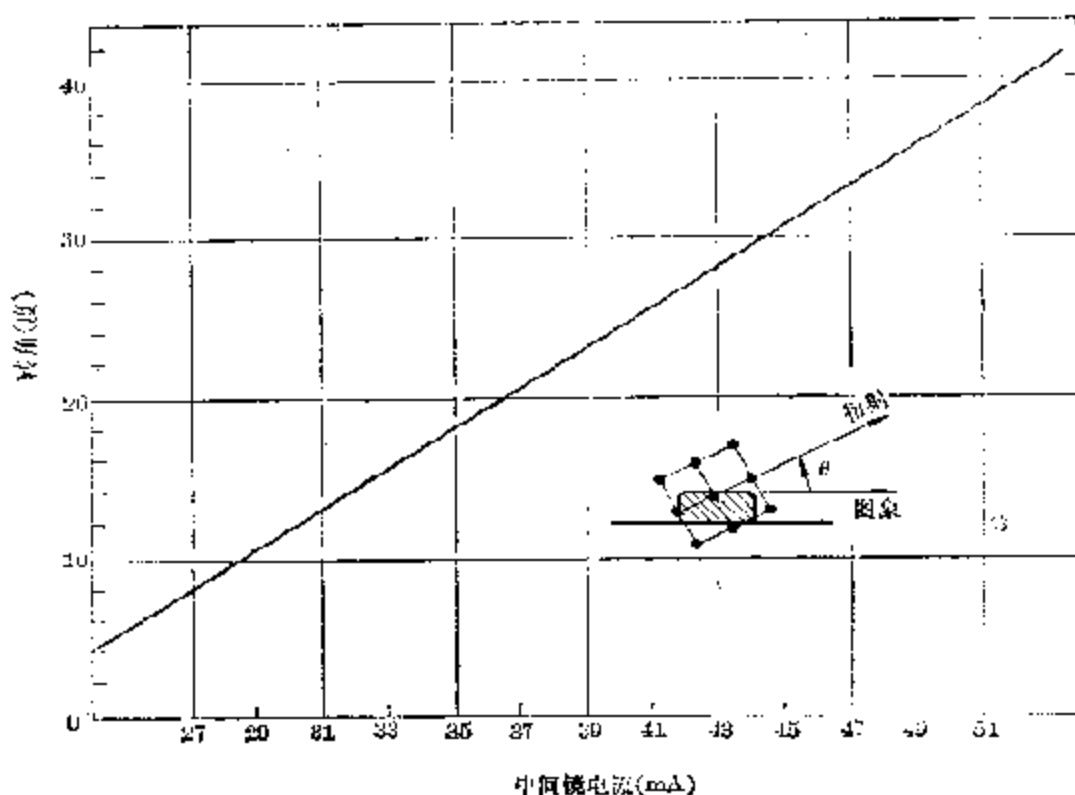


图 3-10 JSEM-200B 在不同放大倍数下的磁偏转角校正曲线

射 g 的，将衍射谱上的最强反射的倒易矢 $g_{\text{衍射}}$ 移至与零衬度线正交的 $g_{\text{真实}}$ 上，即可得出转角。如图 3-11 上的 $\theta = 12^\circ$ 。又如孪晶的外形也可用来直接校正转角，已知面心立方、体心立方的孪生面分别为 $\{111\}$ 和 $\{112\}$ ，在标定衍射谱后，由于显微图象上孪晶的长边必定是垂直于 $\langle 111 \rangle$ 或 $\langle 110 \rangle$ 方向的，因此也可用来校正转角。

§ 3-5 试样制备方法

自从电子显微镜问世以来，电镜工作者在探索电镜试样制备方法上付出了辛勤的劳动。可以毫不夸张地说，没有制样技术的进展，即使设计最佳、性能最好的电镜，也是不可能做出高水平工作的。许多衍衬工作者都知道，衍衬工作的第一关，就是制备一个合乎要求的薄膜试样。

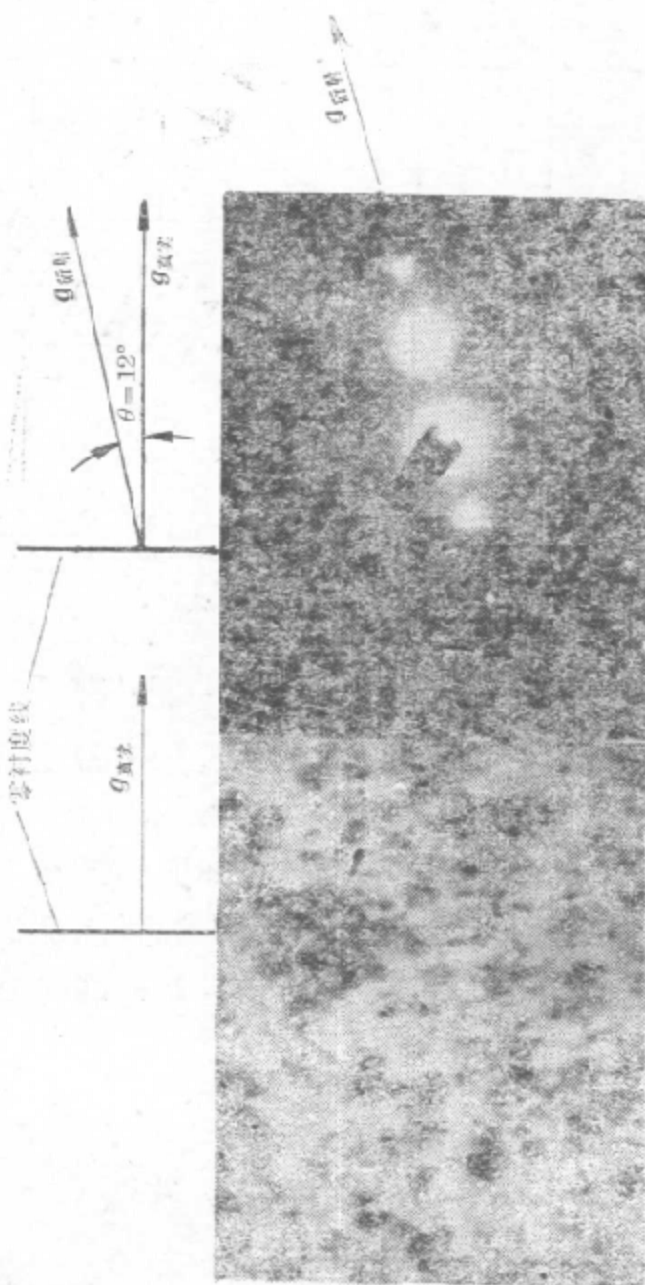


图 3-11 利用镍基合金中 γ' 相的零衬度线校正转角

电镜试样,可分为:间接试样、半直接试样和直接试样三种。它们各有所长,相互配合才能使分析更全面,并得到丰富的结果。现分述如下:

1. 间接试样

间接试样指复型试样,因为观察的是复制试样表面浮凸的材料,而不是试样材料的本身,故称间接试样。复型又分一次复型和二次复型:

(1) 一次复型制备方法:按一般金相方法制好试样(经过抛光和腐蚀),置于真空喷镀仪中,喷上无结构薄膜。目前最常用的是碳膜。碳膜即使在电子束轰击下也比较稳定,且不致球化或发生其他结构变化。如果喷镀工艺合适,碳颗粒细而致密,则可获得不小于 $50\text{\AA}$ 的分辨率。喷完碳膜后,再用小针在表面划上小方格,然后用电解法或化学法,将碳膜从试样上剥离下来,电解液和化学溶液的选择,须视试样材料而定。如果有意使第二相质点剥离下来并嵌镶在碳膜上,即制成一次萃取碳复型,那末电解液和化学溶液应选择只溶解基体而不溶解第二相的溶液。对一般碳钢或合金钢,可试用盐酸、硫酸、高氯酸等的酒精溶液,可参见文献[6]附录5所建议的规范。

(2) 二次复型制备方法:在制好的金相试样表面覆盖一层醋酸纤维丙酮溶液,或在一定温度下压制一层聚苯乙烯塑料。干燥后将它们剥离下来,然后仿照一次碳复型制备方法,在真空中喷上一层碳膜,再在丙酮中溶去醋酸纤维薄膜,或在三氯甲烷或其它溶液中溶去塑料,碳复型即在溶液中漂起,捞出干燥后即可应用。二次碳复型也可以这样制备:用AC纸(用醋酸纤维丙酮溶液展布在平底盘中凝固而成的薄纸)直接贴在试样表面,再用胶带揭下AC纸,反过来使AC纸朝上,在喷镀仪中真空喷碳,再在二甲苯中溶去胶带,在丙酮中溶去AC纸,最后即可得到碳膜。

由以上制备过程不难看出:一次复型为负复型,浮凸情况正好与原试样相反;而二次复型为正复型,浮凸情况完全和原试样对应。二次复型同样也可将第二相质点剥下,使之嵌镶在碳膜中,成

为二次萃取复型。

2. 半直接试样

半直接试样就是指一次和二次萃取复型, 因为复制材料碳膜虽不是原试样材料, 但被剥离的第二相质点却是真实的, 故称半直接试样。

为了使制得的复型(一次、二次均可)显示浮凸的衬度更好, 立体感增强, 可以以一定角度($15^{\circ} \sim 45^{\circ}$)向复型喷上一层散射能力大的重金属, 如铬(Cr)、钯(Pd)、金(Au)等, 这样在凸起部的背面投影元素较少, 因而在电子束照射下, 就会显示出与基体不同的衬度, 更有利于显示细节, 这种技术称为投影技术。

上述试样制备过程如图 3-12 所示。

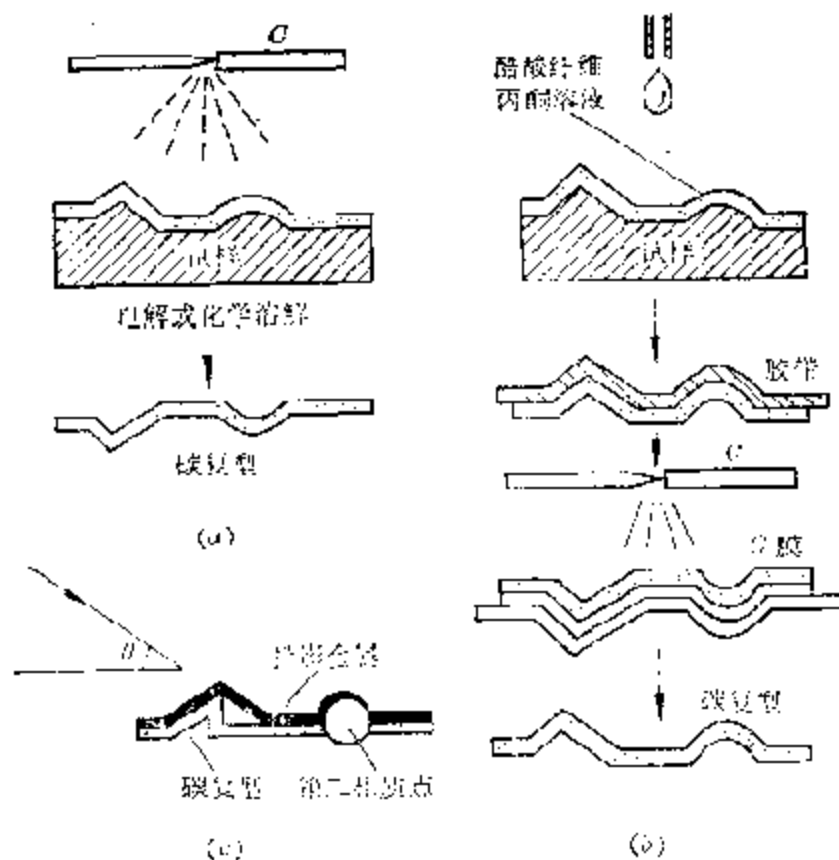


图 3-12 复型制备过程

(a) 一次复型; (b) 二次复型; (c) 投影

3. 直接试样

在电镜上对金属薄膜直接进行观察, 是电镜技术的一次大的

飞跃,从而使人们能够利用电镜研究金属的内部结构。1956年,波尔曼(W. Bollman)和赫尔许(P. B. Hirsch)第一次用金属薄膜,在电镜上看到了位错,证实了早在三十年代初即已提出的关于晶体中存在位错的理论推测。

金属薄膜的制备方法有:沉积法、形变法、化学腐蚀法、离子轰击法和电解减薄法等。

(1) 沉积法:又包括真空喷镀、电解沉积和从液态金属中结晶出金属薄膜。真空喷镀法就是在真空中加热金属,使之蒸发并沉积在支持膜或某种底晶(如新解理的氯化钠、云母片等)上,然后在溶剂中将支持膜或底晶溶解,也可用机械方法剥离。如果沉积是在高温下进行,而底晶又具有一定取向,则得到的金属薄膜也具有一定取向,称为配位生长或外延生长(Epitaxy)。这种薄膜对于某些机理性研究有重要意义。Takahashi及其合作者,曾用这种方法同时喷镀两种金属,得到过Al-Cu合金薄膜。中国科学院沈阳金属研究所的工作者早在1964年曾用这种方法喷制过有一定取向的Ni-Cr合金薄膜,并进行了电子衍射研究。电解沉积法是用碳膜或另一种金属作支持膜,通过电解方法,将待研究的金属沉积在支持膜上。从熔融的液态金属中获得金属薄膜的方法是Takahashi和Kazato发展的,他们将小圆形金属环浸入熔融金属液中,迅速从中提起,即可在环上得到薄膜。

(2) 形变法:就是用锻压、轧制或其它机械加工方法(包括用金刚砂轮切片),从大块金属上获得薄膜。此法适用于塑性较好的金属,如金、银、铂等。塑性好的金属甚至可以通过锻压制成厚度 $<100\text{ \AA}$ 的金属箔,也可用超薄切片机切割。但形变法得到的金属膜,组织受到严重歪曲,因而必须在真空下进行长时间退火进行恢复。

(3) 化学腐蚀法:指用化学减薄液对经过初步减薄的试样片再进行减薄。常用的化学减薄液:对于铁和合金钢,可以用30% HNO_3 , 15% HCl , 10% HF , 45% H_2O ;对于高温合金和马氏体时效钢可用5% HF , 85% H_2O_2 , 10% H_2O ;对于有色金属,可用

60% H_3PO_4 , 40% HF 或 80% HNO_3 , 20% H_2O 或 40% HNO_3 , 50% H_3PO_4 , 10% HCl ; 钛合金则可用 20% HF , 20% HNO_3 , 60% H_2O_2 。

(4) 离子轰击法: 适用于难熔金属和硬质合金的减薄。困难在于不易掌握轰击后期的离子流速度, 而且制膜时间很长, 有时甚至长达 20~30 小时。本书图 9-9 所用试样就是用离子轰击法获得的。

(5) 电解减薄法: 它是目前应用最广的方法。国内外电镜工作者, 多年来曾有不少探索, 名目众多, 如窗口法、“8”字穿孔法、点状电极法等等。在文献[6]中均曾有介绍。近年来, 根据我们的实践证明, 采用双阴极喷射法是颇为成功的。曾用来制备高温合金、合金钢、硅钢等大多数合金, 制备一个试样, 只需一、二分钟, 合格率可达 90% 以上。下面着重介绍这一方法, 其余则从略。

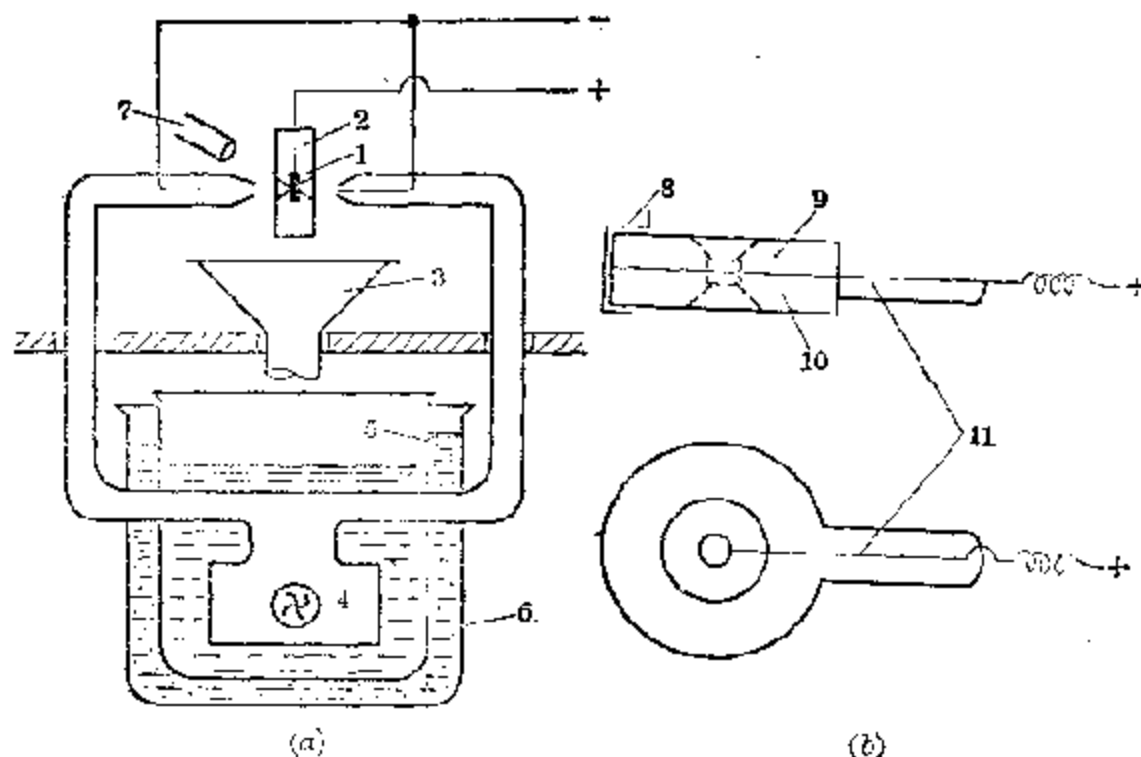


图 3-13 双阴极喷射电解减薄装置

(a) 装置示意图; (b) 试样支架

1—试样; 2—试样支架; 3—漏斗; 4—泵; 5—电解液杯; 6—冷却液杯; 7—照明指示灯; 8—紧固夹; 9—支架上盖; 10—支架下托; 11—阴极导线

此法采用一台小型泵提升电解液, 使之循环流过两个埋有阴

极的喷嘴, 电解液(阴极)不断喷射到作为阳极的试样上, 即可获得直径 $\phi=3\text{mm}$ 的中心穿孔试样。整个装置系统及试样支架如图 3-13。

应用时的注意事项:

1) 电解抛光减薄前, 必须将试样磨得非常薄。先将块状试样用线切割机切成 0.2mm 厚的薄片, 再用手工均匀研磨至 0.1mm 。但要注意不能出现穿孔, 否则电解时在孔边沿优先扩大, 最终将无法获得满意的穿孔部位和良好的楔形边沿。

2) 大多数情况下, 电解液均需进行冷却。冷却液可选用于冰加酒精, 冰块加水或液氮加酒精。对于一般碳钢和硅钢尤需注意冷却, 硅钢要求冷却至 -60°C 左右。

3) 选择合适的电解液。表 3-1 列出了我们实际工作中常用

表 3-1 常用电解减薄液

序号	电解液成分及配比	适用材料
1	乙醇 : 冰醋酸 : 高氯酸 : 甘油 80 : 80 : 15 : 10 (ml)	高温合金、耐热钢、铝及其合金
2	正磷酸 : 硫酸 : 钨酸 : 水 480 ml : 50 ml : 80 g : 60 ml	铝及铝合金
3	高氯酸 : 冰醋酸 30 : 70 (ml)	钢、硅钢
4	高氯酸 : 乙醇 10 : 90 (ml)	钎基合金、硅钢、马氏体时效钢

表 3-2 采用 10% 高氯酸乙醇溶液时的电压与电流

材 料	电压(V)	电流(mA/cm ²)
铝	40~50	30~40
钎基合金	40	30~40
不锈钢、高温合金	70	50~60
钛、铝	70	50
铁合金	80~100	80~100
马氏体时效钢	95	90
6% 钨钢	80~100	80~100

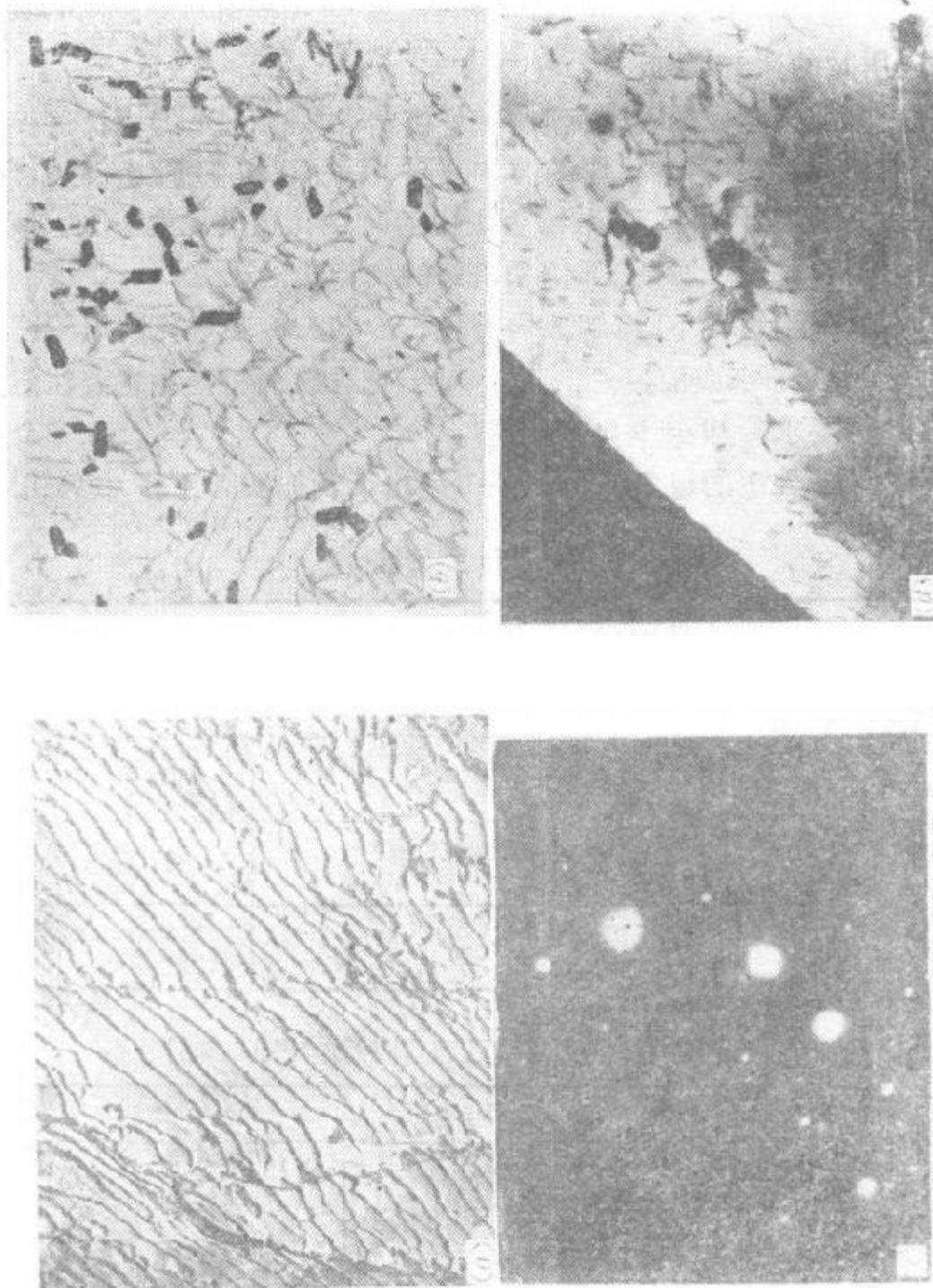


图 3-14 各种试样在电子显微镜上获得的显微照片
 (a) 低合金高强度钢基复型; (b) 马口铁萃取复型; (c) 合金钢中碳化物电子衍射; (d) 深基高温合金金属薄膜衍射象

的电解减薄液,供具体应用时参考。

表中第4项电解液适用性很广,几乎绝大多数材料均可用它来减薄。但在采用该电解液时,建议选用表3-2所示规范。

图3-14是电子显微镜上各种试样的电子金相照片,其中(d)就是采用上述电解减薄方法获得的金属薄膜衍射照片^[7]。

第四章

倒易点阵

§4-1 引言

倒易点阵是厄瓦尔德在 1912 年建立的一种晶体学表达方法。X 射线和电子衍射的研究对象是晶体，晶体是原子呈周期规则排列的物质。寻找一种能够在二维平面上同时描述晶体的许多晶面族，不仅空间关系明确，而且数学运算上也很方便的表达方法，这是晶体学工作者、物理工作者长期以来所致力的一项工作。历史上曾先后出现过球面投影、极射赤面投影、心射切面投影等方法。

§ 4-2 正空间和倒空间、倒易点阵的引入

通常把实际晶体点阵称作正点阵, 它所据有的空间称为正空间。正点阵的结点是原子, 而晶面是由原子周期排列所组成, 表示晶面有两个参量: 取向和晶面间距 d_{hkl} 。我们定义一个与上述正点阵相对应的倒易点阵, 它所占据的空间称为倒空间。

可以通过如下的数学表述把正空间与倒空间联系起来。

如图 4-1, 设 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 分别表示正空间单胞的三个初基矢量; 对应这个正空间, 定义一个倒空间, 它的三个初基矢量为 $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ 。这两组参数之间的关系如下: [注]

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_1 &= \mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_3^* \cdot \mathbf{a}_3 = 1 \\ \mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_2 &= \mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_3^* \cdot \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_3 = \mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_3^* \cdot \mathbf{a}_2 = 0 \end{aligned} \right\} \quad (4-1a)$$

或简记如下:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j^* &= 1 \quad (\text{当 } i=j) \\ \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j^* &= 0 \quad (\text{当 } i \neq j) \end{aligned} \right\} \quad (4-1b)$$

上式中 i, j 分别可等于 1, 2, 3。

(4-1a)式的前三个式子决定倒易矢量的长度, 后六个式子决定倒易基矢的方向。用 a_1, a_1^* 等表示矢量的长度, 于是有:

[注] 本书按照习惯, 以后都规定不带“*”号的向量, 表示正空间的向量, 而用带“*”号的向量表示倒空间的向量。

$$\left. \begin{aligned} a_1^* &= \frac{1}{a_1 \cos \widehat{a_1 a_1^*}} \\ a_2^* &= \frac{1}{a_2 \cos \widehat{a_2 a_2^*}} \\ a_3^* &= \frac{1}{a_3 \cos \widehat{a_3 a_3^*}} \end{aligned} \right\} \quad (4-2)$$

对于正交系统(例如正交、四方、立方点阵), 因 $a_1^* \parallel a_1$, $a_2^* \parallel a_2$, $a_3^* \parallel a_3$, 故上式变为:

$$\left. \begin{aligned} a_1^* &= 1/a_1 \\ a_2^* &= 1/a_2 \\ a_3^* &= 1/a_3 \end{aligned} \right\} \quad (4-3)$$

这就是说, 对于任意晶系来说, 其倒易单胞的基矢长度用(4-2)式决定; 正交晶系作为特例, 其基矢长度用(4-3)式决定。至于基矢的方向, 均由(4-1a)式后六个式子决定, 即不同下标的基矢互相垂直。亦即:

$$\left. \begin{aligned} a_1^* &= \alpha_1 [a_2 \times a_3] \\ a_2^* &= \alpha_2 [a_3 \times a_1] \\ a_3^* &= \alpha_3 [a_1 \times a_2] \end{aligned} \right\} \quad (4-4)$$

式中 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 为比例系数, 它们可以这样决定: 将(4-4)式的三个式子分别点乘 a_1, a_2, a_3 , 则有:

$$\left. \begin{aligned} (a_1^* \cdot a_1) &= 1 = \alpha_1 [a_1 \cdot (a_2 \times a_3)] \\ (a_2^* \cdot a_2) &= 1 = \alpha_2 [a_2 \cdot (a_3 \times a_1)] \\ (a_3^* \cdot a_3) &= 1 = \alpha_3 [a_3 \cdot (a_1 \times a_2)] \end{aligned} \right\} \quad (4-5)$$

注意各式右端无向量积正好等于正点阵单胞的体积 V , 于是可得:

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 1/V$$

这样(4-4)式可改写为:

$$\left. \begin{aligned} a_1^* &= \frac{[a_2 \times a_3]}{V} \\ a_2^* &= \frac{[a_3 \times a_1]}{V} \\ a_3^* &= \frac{[a_1 \times a_2]}{V} \end{aligned} \right\} \quad (4-6)$$

由于(4-1a)式对于基矢 $\mathbf{a}_i$ 与基矢 $\mathbf{a}_i^*$ 完全对称, 因此很容易证明下述关系成立:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \frac{[\mathbf{a}_2^* \times \mathbf{a}_3^*]}{V^*} \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{[\mathbf{a}_1^* \times \mathbf{a}_3^*]}{V^*} \\ \mathbf{a}_3 &= \frac{[\mathbf{a}_1^* \times \mathbf{a}_2^*]}{V^*} \end{aligned} \right\} \quad (4-7)$$

V^* 为倒易点阵单胞的体积。由此可见, 不仅基矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 与 $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ 互为倒易, 而且分别建立在它们基础上的晶格, 也都互为倒易。还可证明 V 与 V^* 也是互为倒易的。证明如下: 由(4-1a)式, 有:

$$\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_1 = 1$$

将(4-6)式中 $\mathbf{a}_1^*$ 和(4-7)式的 $\mathbf{a}_1$ 代入上式, 则

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_1 &= 1 - \frac{[\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{V} \cdot \frac{[\mathbf{a}_2^* \times \mathbf{a}_3^*]}{V^*} \\ &= \frac{1}{VV^*} [(\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_2^*)(\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_3^*) - (\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3^*)(\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_2^*)] \\ &= \frac{1}{VV^*} [1 - 0] \\ \therefore \frac{1}{VV^*} &= 1 \quad \text{即} \quad V = \frac{1}{V^*} \end{aligned} \quad (4-8)$$

以上我们一般地讨论了倒易空间的基本性质。在这个基础上, 下面再来证明关于倒易点阵的一条十分重要的定理。

定理: 倒易矢量 $\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^*$, 垂直于对应的正空间的 (hkl) 平面, 并且矢量的长度 G_{hkl} 等于 (hkl) 面间距 d_{hkl} 的倒数。

证明: 参见图 4-2, 平面 ABC 的指数是 (hkl) , 按照晶体学的定义, (hkl) 交三个轴的截距为 $\frac{a_1}{h}, \frac{a_2}{k}, \frac{a_3}{l}$, 显然, 矢量 $\overrightarrow{AB} = \frac{a_2}{k} - \frac{a_1}{h}$, 并且有:

$$\left(\frac{a_2}{k} - \frac{a_1}{h} \right) \cdot (\mathbf{G}_{hkl}) = 0$$

所以 $\overrightarrow{AB}$ 是垂直于 $\mathbf{G}_{hkl}$ 的。同理还可证明 $\overrightarrow{BC}$ 和 $\overrightarrow{CA}$ 也是垂直于

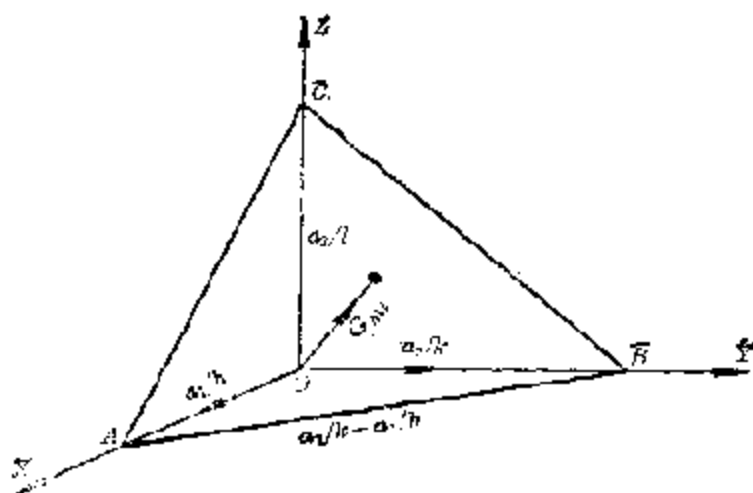


图 4-2 证明倒易矢量和正空间晶面的关系

G_{hkl} 的。故 G_{hkl} 是垂直于平面 ABC 的, 即 G_{hkl} 是平面 ABC 的法线。

下面再讨论 G_{hkl} 的长度:

设 n 为沿法线的单位矢量, 则

$$d_{hkl} = n \cdot \frac{\mathbf{a}_1}{h} = \frac{(h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^*) \cdot \mathbf{a}_1}{|\mathbf{G}_{hkl}| \cdot h} = \frac{1}{G_{hkl}}$$

即

$$G_{hkl} = \frac{1}{d_{hkl}} \quad (4-9)$$

定理得证。这说明在按照 (4-1a) 式定义的倒空间中的倒易点, 确实可以代表正空间中以该倒易矢为法线方向的一族晶面, 而倒易矢的长度等于晶面间距的倒数。

至此, 我们可以将正点阵与倒易点阵之间的关系归纳如下:

(1) 正点阵与倒易点阵互为倒易, 即正点阵的倒易是倒易点阵, 倒易点阵的倒易是正点阵, 这一点通过 (4-6)、(4-7) 和 (4-8) 式反映出来。

(2) 倒易点阵中的方向 $[hkl]^*$ 与正点阵中同指数面 (hkl) 正交, 倒易原点到倒易点的距离 $G_{hkl} = 1/d_{hkl}$ 。同样, 正点阵中的晶向 $[uvw]$ 与倒易点阵中同指数倒易平面 $(uvw)^*$ 正交, 正点阵原点到 uvw 阵点的距离 $r_{uvw} = 1/d_{(uvw)^*}$, $d_{(uvw)^*}$ 是倒易面 $(uvw)^*$ 的间距。

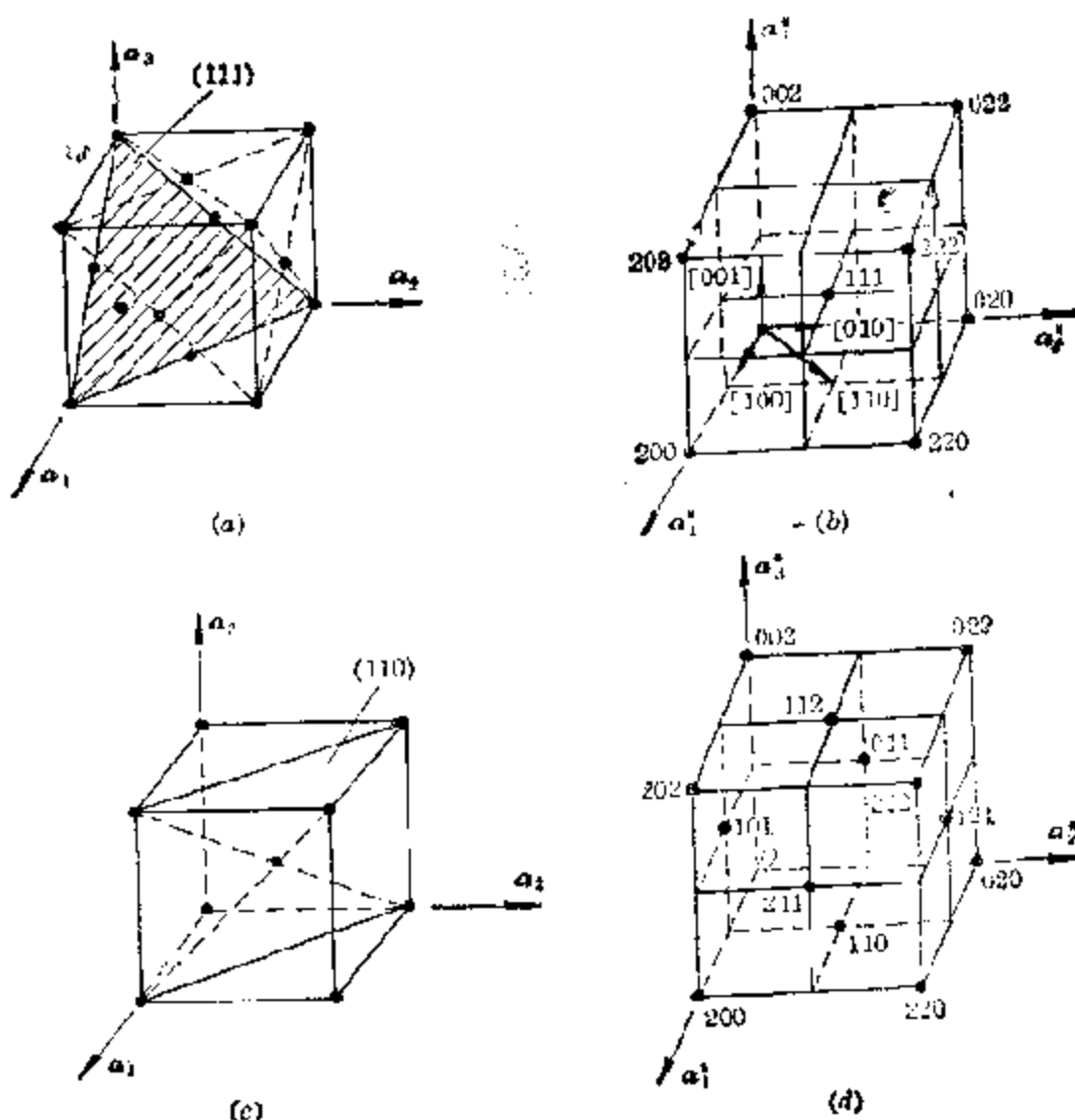


图 4-3 面心立方、体心立方正空间与倒空间的相互关系

但应注意,只有在立方晶系情况下,正点阵中的晶向 $[uvw]$ 才与正点阵中同指数晶面 (uvw) 正交,而其它晶系则不一定有这种正交关系。

(3) 常见晶系空间倒易关系(在扣除禁止衍射以后)如表 4-1。

在图 4-3 中以面心、体心立方为例,示意说明两者互为倒易的情况。

图中:(a)为正空间的面心立方,其相应的倒空间为体心立方(b);(c)为正空间的体心立方,其相应的倒空间为面心立方(d);

表 4-1 常见晶系空间倒易关系

正 空 间	倒 空 间
简单立方	简单立方
四方	四方
六方	六方
面心立方	体心立方
体心立方	面心立方

(a)、(c)上圆点代表原子；(b)、(d)上的圆点是倒空间的倒易点，从坐标原点到这些点的向量称为倒易矢量，它代表正空间一族晶面。

§ 4-3 倒易面(标准单晶衍射图谱)的绘制方法

前已指出，单晶电子衍射谱可以看作是厄瓦尔德球与倒易点阵相截得到的二维倒易截面在平面上的投影。因此，对设定的晶体取向，可以通过计算，绘制出它的单晶衍射谱，即二维倒易面。

〔例 1〕试绘制面心立方晶系的 $(421)^*$ 倒易面。

$(421)^*$ 在倒空间三轴上的截距是：

$$4 \times \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, 1 \right) = 1, 2, 4$$

得到如图 4-4(a) 的一个截面，三个顶点的坐标是：

$$100, 020, 004_c$$

使这个截面平移通过倒易原点，只需将三顶点坐标各加 $\bar{1}00$ 即可，于是它们变为 $000, \bar{1}20, \bar{1}04$ 。由于对面心立方，指数只能为全奇或全偶，将平移后三倒易点同乘以 2，得到 $000, \bar{2}40, \bar{2}08$ 。

下面再求出倒易矢 $[\bar{2}40]$ 和 $[\bar{2}08]$ 之间的夹角，以便在平面上确定它们的方位。根据立方晶系晶面夹角余弦公式：

$$\cos \varphi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \cdot \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

可求得： $\varphi = 88^\circ 49'$ 。至于倒易矢的长度，可以根据

$$r_1/r_2 = \sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} / \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}$$

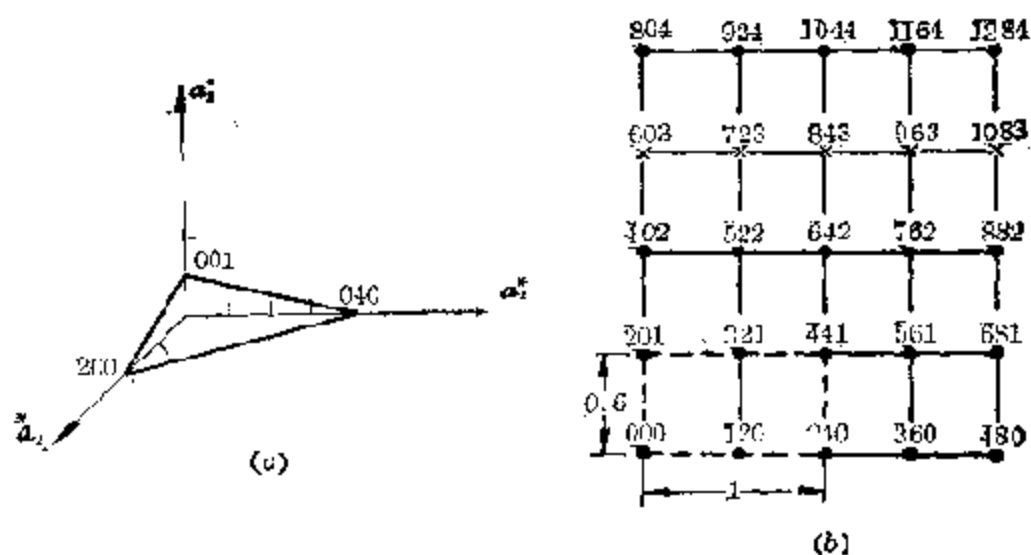


图 4-5 六角密排晶系, $c/a=1.633$, $(214)^*$ 倒易面的绘制

$$\cos \varphi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + 0.5(h_1 k_2 + h_2 k_1) + \frac{3a^2 l_1 l_2}{4c^2}}{\left[\left(h_1^2 + k_1^2 + h_1 k_1 + \frac{3a^2 l_1^2}{4c^2} \right) \left(h_2^2 + k_2^2 + h_2 k_2 + \frac{3a^2 l_2^2}{4c^2} \right) \right]^{1/2}}$$

求得 $(\bar{2}40)$ 和 $(\bar{2}01)$ 之间的夹角为 90° 。然后根据六角晶系倒易矢量长度比公式[11]

$$\frac{r_1}{r_2} = \left[\frac{4(c/a)^2(h_1^2 + h_1 k_1 + k_1^2) + 3l_1^2}{4(c/a)^2(h_2^2 + h_2 k_2 + k_2^2) + 3l_2^2} \right]^{1/2}$$

计算出: $r_{\bar{2}40}/r_{\bar{2}01}=1/0.6$ 。于是可画出如图 4-5(b) 以 000, $\bar{2}40$, $\bar{4}41$, $\bar{2}01$ 为顶点的单元。根据第二章表 2-3 所示的六方晶系消光条件考虑, 在 000 与 $\bar{2}40$ 之间, 还应该存在 $\bar{1}20$; 相应地在 $\bar{2}01$ 与 $\bar{4}41$ 之间, 也应有 $\bar{3}21$ 点, 可见此倒易面最基本单元应是 $(000) \rightarrow (\bar{1}20) \rightarrow (\bar{3}21) \rightarrow (\bar{2}01)$ 。最后经过外推即可作出 $(214)^*$ 倒易面, 如图 4-5(b) 所示。图中标“x”的反射, 是禁止反射, 衍射时不会出现。

熟练掌握绘制任意晶系任意取向的倒易面(即单晶衍射谱)的原理和方法, 对于分析和识别电子衍射谱是十分重要的; 有了这个基础, 对于分析较为复杂的孪晶衍射、高阶劳厄区衍射等也将是有

[注] 此公式见本书第五章 § 5-4。

§ 4-4 借助倒易点阵方法计算晶面间距、晶面夹角及晶向长度

在 § 4-2 中, (4-6)、(4-7) 式给出了正空间和倒空间初基矢量相互之间的关系; (4-8) 式给出了正空间、倒空间单胞体积相互之间的关系; (4-9) 式则给出了倒易矢量长度和相应的晶面间距之间的关系。实际工作中常常还需要知道晶面间距和晶向指数, 以及晶面夹角和晶面指数的关系。建立这两对关系, 可以有不同的途径, 下面我们借助倒易点阵这个工具来建立它们的关系。这样做, 一是为了进一步加深对倒易点阵这个颇为抽象的概念的理解; 二是作为运用倒易点阵处理问题的一种训练。

作为一种准备, 我们把运算中将要用到的几个矢量代数公式列举如下:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) &= \mathbf{b} \cdot (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \\ (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})^2 &= a^2 b^2 - [\mathbf{a} \times \mathbf{b}]^2 \\ [\mathbf{a} \times \mathbf{b}] \cdot [\mathbf{c} \times \mathbf{d}] &= (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) \cdot (\mathbf{b} \cdot \mathbf{d}) \\ &\quad - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{d}) \cdot (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) \\ V^2 &= (\mathbf{a} \cdot [\mathbf{b} \times \mathbf{c}])^2 = a^2 [\mathbf{b} \times \mathbf{c}]^2 = [\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c})]^2 \end{aligned} \right\} \quad (4-10)$$

一、求晶面间距与晶面指数的关系

由 (4-9) 式, 已知 $G_{hkl} = 1/d_{hkl}$, 故有

$$G_{hkl}^2 = 1/d_{hkl}^2 \quad (4-11)$$

要找出面间距 d_{hkl} 与晶面指数 h 、 k 、 l 的关系, 就是要找出 G_{hkl}^2 与 h 、 k 、 l 的关系。倒易矢量长度 G_{hkl} 可以由标量积求出:

$$\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{G}_{hkl} = G_{hkl} \cdot G_{hkl} \cdot \cos(\mathbf{G}_{hkl}, \mathbf{G}_{hkl}) = G_{hkl}^2 \quad (4-12)$$

由于 $\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^*$, 故有:

$$\begin{aligned} G_{hkl}^2 &= \mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{G}_{hkl} = 1/d_{hkl}^2 \\ &= (h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^*) \cdot (h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^*) \\ &= h^2 a_1^{*2} + k^2 a_2^{*2} + l^2 a_3^{*2} + 2hk(\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_2^*) \end{aligned}$$

$$+2hl(\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_3^*) + 2kl(\mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_3^*) \quad (4-13)$$

可见只要找出 a_1^{*2} , a_2^{*2} , a_3^{*2} ; $(\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_2^*)$, $(\mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_3^*)$, $(\mathbf{a}_3^* \cdot \mathbf{a}_1^*)$ 与正空间单胞基本参量 a_1 , a_2 , a_3 (或 a , b , c), α , β , γ 之间的函数关系, 并分别代入(4-13)式, 就可建立所要求的下述关系:

$$1/d_{hkl}^2 = f(h, k, l, \alpha, \beta, \gamma)$$

由标量积定义, 知

$$\left. \begin{aligned} (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2) &= a_1 a_2 \cos \gamma \\ (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_3) &= a_1 a_3 \cos \beta \\ (\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3) &= a_2 a_3 \cos \alpha \end{aligned} \right\} \quad (4-14)$$

由(4-6)式, 并注意矢量积定义, 可得:

$$\left. \begin{aligned} a_1^{*2} &= \frac{(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{V^2} = \frac{a_2^2 a_3^2 \sin^2 \alpha}{V^2} \\ a_2^{*2} &= \frac{(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1) \cdot (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}{V^2} = \frac{a_3^2 a_1^2 \sin^2 \beta}{V^2} \\ a_3^{*2} &= \frac{(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}{V^2} = \frac{a_1^2 a_2^2 \sin^2 \gamma}{V^2} \end{aligned} \right\} \quad (4-15)$$

$$\text{式中: } V^2 = (\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])^2 = (\mathbf{a}_2 \cdot [\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1])^2 \\ = (\mathbf{a}_3 \cdot [\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2])^2$$

利用(4-10)方程第一、二、四个公式, 可以计算 V^2 :

$$\begin{aligned} V^2 &= (\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3])^2 \\ V^2 &= a_1^2 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]^2 - [\mathbf{a}_1 \times (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)]^2 \\ &= a_1^2 \{ a_2^2 a_3^2 - (\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3)^2 \} - \{ \mathbf{a}_2 (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_3) - \mathbf{a}_3 (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2) \}^2 \\ &= a_1^2 a_2^2 a_3^2 - a_1^2 a_2^2 a_3^2 \cos^2 \alpha - a_2^2 a_1^2 a_3^2 \cos^2 \beta \\ &\quad - a_3^2 a_1^2 a_2^2 \cos^2 \gamma + 2(\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3)(\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_3)(\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2) \\ &= a_1^2 a_2^2 a_3^2 (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma) \end{aligned} \quad (4-16)$$

故正点阵单胞的体积为:

$$V = a_1 a_2 a_3 \cdot [1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma]^{1/2} \quad (4-17)$$

下面计算(4-13)式中的三个倒易基矢标量积: $(\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_2^*)$, $(\mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_3^*)$, $(\mathbf{a}_3^* \cdot \mathbf{a}_1^*)$ 。由(4-6)式并利用(4-10)式中第三式, 可

得

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_2^*) &= \frac{(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{V} \cdot \frac{(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}{V} \\ &= \frac{(\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_3)(\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_1) - a_3^2(\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_1)}{V^2} \\ &= \frac{a_3^2 a_1 a_2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)}{V^2} \end{aligned} \quad (4-18)$$

同理可得:

$$(\mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_3^*) = \frac{a_1^2 a_2 a_3 (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)}{V^2} \quad (4-19)$$

$$(\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_3^*) = \frac{a_2^2 a_1 a_3 (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta)}{V^2} \quad (4-20)$$

将(4-15)、(4-16)、(4-18)、(4-19)和(4-20)代入(4-13)式,便得到了适用于各个晶系的晶面间距与面指数(h, k, l)及正空间单胞参数($a_1, a_2, a_3, \alpha, \beta, \gamma$)之间的关系。

下面利用(4-18)式,求出最常见的六方晶系、立方晶系晶面间距表达式,其它晶系的表达式列于表4-2中。

(1) 六方晶系:

$$a_1 = a_2 = a, a_3 = c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

由(4-17)式 $V = a^2 c \sqrt{1 - \cos^2 120^\circ} = a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2}$

由(4-15)式

$$\left. \begin{aligned} a_1^{*2} &= \frac{a^2 c^2 \sin^2 90^\circ}{a^2 c^2 3/4} = \frac{4}{3} \cdot \frac{1}{a^2} \\ a_2^{*2} &= \frac{c^2 a^2 \sin^2 90^\circ}{a^2 c^2 3/4} = \frac{4}{3} \cdot \frac{1}{c^2} \\ a_3^{*2} &= \frac{a^2 a^2 \sin^2 120^\circ}{a^4 c^2 3/4} = \frac{1}{c^2} \end{aligned} \right\} \quad (4-21)$$

由(4-18)、(4-19)、(4-20)式

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_2^*) &= \frac{c^2 \cdot a \cdot a (\cos 90^\circ \cdot \cos 90^\circ - \cos 120^\circ)}{a^4 \cdot c^2 3/4} \\ &= \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{a^2} \\ (\mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_3^*) &= (\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_3^*) = 0 \end{aligned}$$

将(4-21)代入(4-13), 即得:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3} \cdot \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad (4-22)$$

(2) 立方晶系:

$$\begin{aligned} a_1 &= a_2 = a_3 = a \\ \alpha &= \beta = \gamma = 90^\circ \end{aligned}$$

由(4-17)式 $V = a^3$

由(4-15)式

$$\left. \begin{aligned} a_1^{*2} &= a_2^{*2} = a_3^{*2} = \frac{1}{a^2} \\ (a_1^* \cdot a_2^*) &= (a_2^* \cdot a_3^*) = (a_1^* \cdot a_3^*) = 0 \end{aligned} \right\} \quad (4-23)$$

将(4-23)代入(4-13)式, 即得:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} \quad (4-24)$$

二、求晶面夹角余弦的表达式

平面 $(h_1 k_1 l_1)$ 与 $(h_2 k_2 l_2)$ 之间的夹角, 用各自的法线之间的夹角表示, 即

$$\begin{aligned} G_{h_1 k_1 l_1} &= h_1 a_1^* + k_1 a_2^* + l_1 a_3^* \\ G_{h_2 k_2 l_2} &= h_2 a_1^* + k_2 a_2^* + l_2 a_3^* \end{aligned}$$

若它们之间的夹角为 φ , 则

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= \cos (G_{h_1 k_1 l_1}, G_{h_2 k_2 l_2}) \\ &= \frac{G_{h_1 k_1 l_1} \cdot G_{h_2 k_2 l_2}}{|G_{h_1 k_1 l_1}| \cdot |G_{h_2 k_2 l_2}|} \end{aligned} \quad (4-25)$$

式中:

$$\begin{aligned} G_{h_1 k_1 l_1} \cdot G_{h_2 k_2 l_2} &= (h_1 a_1^* + k_1 a_2^* + l_1 a_3^*) \cdot (h_2 a_1^* + k_2 a_2^* + l_2 a_3^*) \\ &= h_1 h_2 a_1^{*2} + k_1 k_2 a_2^{*2} + l_1 l_2 a_3^{*2} + (h_1 k_2 \\ &\quad + k_1 h_2) (a_1^* \cdot a_2^*) + (h_1 l_2 + l_1 h_2) (a_1^* \cdot a_3^*) \\ &\quad + (k_2 l_1 + l_2 k_1) (a_2^* \cdot a_3^*) \end{aligned} \quad (4-26)$$

至于分母 $G_{h_1 k_1 l_1}$ 和 $G_{h_2 k_2 l_2}$ 的绝对值 $|G_{h_1 k_1 l_1}|$, $|G_{h_2 k_2 l_2}|$ 可以从(4-13)式求出, 即

表 4-2 各晶系正点阵、倒易点阵单胞基本参数及常用晶体学公式

晶系	立	方	六	三方	四方(正方)	正交(斜方)
正点阵	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$ $V=\frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$ $V=\frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$ $V=\frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ $V=abc$	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ $V=abc$
单胞参数	a/a a/a a/a 90° 90° 90° $1/a^3$	$1/a$ $1/a$ $1/a$ 90° 90° 90° $1/a^3$	$2/(\sqrt{3} a)$ $2/(\sqrt{3} a)$ $1/c$ 90° 90° 60° $2/(\sqrt{3} a^2 c)$	$1/a$ $1/a$ $1/a$ 90° 90° 90° $1/a^3$	$1/a$ $1/a$ $1/a$ 90° 90° 90° $1/(abc)$	$1/a$ $1/b$ $1/c$ 90° 90° 90° $1/(abc)$
倒易点阵单胞参数	a_1^* a_2^* a_3^* α^* β^* γ^* $1/a^3$	$1/a$ $1/a$ $1/a$ 90° 90° 90° $1/a^3$	$2/(\sqrt{3} a)$ $2/(\sqrt{3} a)$ $1/c$ 90° 90° 60° $2/(\sqrt{3} a^2 c)$	$1/a$ $1/a$ $1/a$ 90° 90° 90° $1/a^3$	$1/a$ $1/a$ $1/a$ 90° 90° 90° $1/(abc)$	$1/a$ $1/b$ $1/c$ 90° 90° 90° $1/(abc)$
计算 $\frac{1}{a^2}$ 和 所有 参数	$a_1^* \cdot a_1^*$ $a_2^* \cdot a_2^*$ $a_3^* \cdot a_3^*$ $a_1^* \cdot a_2^*$ $a_1^* \cdot a_3^*$ $a_2^* \cdot a_3^*$	$1/a^2$ $1/a^2$ $1/a^2$ 0 0 0	$4/(3a^2)$ $4/(3a^2)$ $1/c^2$ $2/(3a^2)$ 0 0	$1/a^2$ $1/a^2$ $1/a^2$ 0 0 0	$1/a^2$ $1/b^2$ $1/c^2$ 0 0 0	$1/a^2$ $1/b^2$ $1/c^2$ 0 0 0
$\frac{1}{a^2}$ ($a=1$ 时相加)	$\frac{1}{a^2} (a^2 + b^2 + c^2)$	$\frac{4}{3a^2} (a^2 + b^2 + c^2) + \frac{c^2}{a^2}$	$\frac{4}{3a^2} (a^2 + b^2 + c^2) + \frac{c^2}{a^2}$	$\frac{1}{a^2} (a^2 + b^2 + c^2) + \frac{c^2}{a^2}$	$\frac{1}{a^2} (a^2 + b^2 + c^2) + \frac{c^2}{a^2}$	$\frac{1}{a^2} (a^2 + b^2 + c^2) + \frac{c^2}{a^2}$

(续表)

晶系	立方	六方	四方(正方)	正交(斜方)
$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} \rightarrow$	$\begin{bmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} a^2 & -\frac{a^2}{2} & 0 \\ -\frac{a^2}{2} & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & b^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{bmatrix}$
$\begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ c \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} \rightarrow$	$\begin{bmatrix} \frac{4}{3a^2} & \frac{2}{3a^2} & 0 \\ \frac{2}{3a^2} & \frac{4}{3a^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{4}{3a^2} & \frac{2}{3a^2} & 0 \\ \frac{2}{3a^2} & \frac{4}{3a^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{b^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{bmatrix}$

变换矩阵

晶系	菱形(三角)	单斜	斜方
正点阵	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=120^\circ$ $V=a^2(1+2\cos^2\alpha+2\cos^2\alpha)^{1/2}$	$a \neq b \neq c$ $\alpha=\gamma \neq 90^\circ \neq \beta$ $V=abc \sin \beta$	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ $V=abc[1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma]^{1/2}$
点阵参数			
a_1^*	$\frac{\sin \alpha}{a(1+2\cos^2\alpha+2\cos^2\alpha)^{1/2}}$	$1/(a \sin \beta)$	$(bc \sin \alpha)/V$
a_2^*		$1/b$	$(ac \sin \beta)/V$
a_3^*		$1/(c \sin \beta)$	$(ab \sin \gamma)/V$
a^*	$\cos^{-1}\left(1-\frac{\cos \alpha}{1+\cos \alpha}\right)$	90°	$\cos^{-1}[(\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)/(\sin \beta \sin \gamma)]$
b^*	$\cos^{-1}\left(1-\frac{\cos \alpha}{1+\cos \alpha}\right)$	$180^\circ - \beta$	$\cos^{-1}[(\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta)/(\sin \gamma \sin \alpha)]$
c^*	$\cos^{-1}\left(1-\frac{\cos \alpha}{1+\cos \alpha}\right)$	90°	$\cos^{-1}[(\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)/(\sin \alpha \sin \beta)]$
V^*	$\frac{1}{a^2(1+2\cos^2\alpha+2\cos^2\alpha)^{1/2}}$	$1/(abc \sin \beta)$	$\frac{1}{abc}(1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma)^{-1/2}$
计算			
a^2	$\frac{\sin^2 \alpha}{a^2(1+2\cos^2\alpha+2\cos^2\alpha)}$	$1/(a \sin \beta)^2$	$\left(\frac{bc \sin \alpha}{V}\right)^2$
a_1^2		$1/b^2$	$\left(\frac{ac \sin \beta}{V}\right)^2$
a_2^2		$1/(c \sin \beta)^2$	$\left(\frac{ab \sin \gamma}{V}\right)^2$
$a_1^* \cdot a_2^*$		0	$[c^2 ab (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)]/V^2$
$a_1^* \cdot a_3^*$		0	$[a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)]/V^2$
$a_2^* \cdot a_3^*$		$-\cos \beta/(ac \sin^2 \beta)$	$[b^2 ac (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta)]/V^2$

晶系	菱形(三角)	单斜	三斜
$\frac{1}{a^2 k^2}$ ($d = \frac{1}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$)	$\frac{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(h_1 l_1 + h_2 l_2 + h_3 l_3) \times (\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2 (1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)}$	$\frac{h^2}{a^2 \sin^2 \beta} + \frac{l^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2 \sin^2 \beta} - \frac{2hl \cos \beta}{ac \sin^2 \beta}$	$\frac{1}{V^2} (S_{11} h^2 + S_{22} l^2 + S_{33} l^2 + 2S_{12} h l + 2S_{13} h l + 2S_{23} l l)$ 式中: $S_{11} = (bc \sin \alpha)^2$ $S_{12} = abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)$ $S_{22} = (ac \sin \beta)^2$ $S_{23} = a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)$ $S_{33} = (ab \sin \gamma)^2$ $S_{13} = ab^2 c (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta)$
$\cos \varphi$ ($\varphi = \frac{1}{2} \angle(h_1 k_1 l_1, h_2 k_2 l_2)$)	$\frac{(h_1 k_1 + h_2 k_2 + l_1 l_2) \sin^2 \alpha + (h_1 l_1 + h_2 l_2 + h_3 l_3) \times (\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2 (1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)}$ $\frac{\{ [(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2) \sin^2 \alpha + 2(h_1 l_1 + h_2 l_2 + h_3 l_3) \times (\cos^2 \alpha - \cos \alpha)] \times [(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2) \times \sin^2 \alpha + 2(h_2 k_2 + h_3 l_3 + l_3 k_3) \times (\cos^2 \alpha - \cos \alpha)] \}^{1/2}}{a^2 \sin^2 \beta}$	$\frac{h_1 k_1}{a^2 \sin^2 \beta} + \frac{h_2 k_2}{b^2} + \frac{l_1 l_2}{c^2 \sin^2 \beta} + \frac{(h_1 l_1 + h_2 l_2) \cos \beta}{ac \sin^2 \beta} - \frac{l_1^2}{b^2} + \frac{l_2^2}{c^2 \sin^2 \beta} - \frac{2h_1 l_1 \cos \beta}{ac \sin^2 \beta} \times \left(\frac{h_2^2}{a^2 \sin^2 \beta} + \frac{l_2^2}{b^2} + \frac{l_1^2}{c^2 \sin^2 \beta} \right) + \frac{l_1^2}{b^2} + \frac{l_2^2}{c^2 \sin^2 \beta} - \frac{2h_2 l_2 \cos \beta}{ac \sin^2 \beta} \Big]^{1/2}$	$\frac{V}{\Delta h_{h_1 k_1} \times \Delta h_{h_2 k_2}}$ 注: $V = h_1 h_2 (bc)^2 \sin^2 \alpha$ $+ h_1 h_2 (ac)^2 \sin^2 \beta + h_1 h_2 (ab)^2 \sin^2 \gamma$ $+ ab c^3 (h_1 h_2 + h_1 h_3) (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)$ $+ a b^2 c (h_1 l_2 + h_2 l_3) (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta)$ $+ a^2 b c (h_2 l_3 + h_3 l_1) (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)$ $\Delta h_{h_1 k_1} = [h_1^2 c^2 \sin^2 \alpha + h_1^2 a^2 c^2 \sin^2 \beta + l_1^2 a^2 b^2 \sin^2 \gamma + 2h_1 a b c^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) + 2h_1 a b^2 c (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta) + 2h_1 a^2 b c (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)]^{1/2}$

(续表)

已知条件	观测形(三角形)	(1)	计算	求
$\sigma^2 = \frac{1}{d(u, v)^2}$ $(d = \text{距离 [长度]})$	$a^2[u^2 + v^2 + uv \cos \alpha]$ $+ uv + uv \cos \alpha$	$u^2 + v^2 + 2uv \cos \alpha + 2uv \cos \alpha$	$a^2 u^2 + v^2 v^2 + 2uv \cos \alpha$ $+ 2uv \cos \alpha \cos \beta + 2uv \cos \gamma$	
$\cos \psi$ $(\psi = \text{夹角})$	$\frac{u_1 v_1 + v_1 v_2 + u_1 u_2 + (u_1 v_2 + u_1 v_2 + u_1 v_2 + u_1 v_2) \cos \alpha}{\{ [u_1^2 + v_1^2 + 2(u_1 v_1 + u_1 v_2 + u_1 v_2) \cos \alpha] \times [u_2^2 + v_2^2 + 2(u_2 v_2 + u_2 v_2) \cos \alpha] \}^{1/2}}$	$\frac{a^2 u_1 v_2 + b^2 v_1 v_2 + c^2 u_1 v_2}{[(a^2 u_1^2 + b^2 v_1^2 + c^2 u_1^2) \times (a^2 v_2^2 + b^2 v_2^2 + c^2 u_2^2) \cos \beta]^{1/2}}$	$\frac{I_1}{I_2 u_1 v_1 \cdot I_3 u_2 v_2}$ 式中: $I_1 = a^2 u_1 v_2 + b^2 v_1 v_2 + c^2 u_1 v_2$ $+ 2c(u_1 v_2 + u_1 v_2) \cos \alpha$ $+ 2c(u_1 v_2 + u_1 v_2) \cos \beta$ $+ 2c(u_1 v_2 + u_1 v_2) \cos \gamma$ $I_2 = (a^2 u_1^2 + b^2 v_1^2 + c^2 u_1^2) \cos \alpha$ $+ 2buv \cos \alpha + 2cuv \cos \beta$ $+ 2abuv \cos \gamma$	

(续表)

矩阵	旋形(10)	单	斜
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{bmatrix} a^2 & a^2 \cos \alpha & a^2 \sin \alpha \\ a^2 \cos \alpha & a^2 & a^2 \sin \alpha \\ a^2 \sin \alpha & a^2 \cos \alpha & a^2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} a^2 & 0 & a^2 \cos \beta \\ 0 & b^2 & 0 \\ ac \cos \beta & 0 & c^2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ac \cos \beta \\ ab \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ac \cos \beta & bc \cos \alpha & c^2 \end{bmatrix}$
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{bmatrix} \sin^2 \alpha & \cos \alpha & \sin^2 \alpha \\ \cos \alpha - \cos^2 \alpha & \sin^2 \alpha & \\ \sin^2 \alpha & \cos \alpha & \cos \alpha - \cos^2 \alpha \end{bmatrix}$ $\begin{bmatrix} \cos^2 \alpha - \cos \alpha & \sin^2 \alpha \\ \cos \alpha - \cos^2 \alpha & \sin^2 \alpha \end{bmatrix}$ $S = \sin^2 \alpha + 2 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{\sin^2 \alpha}{a^2} \\ \frac{1}{b^2} \left[\frac{\cos \gamma - \cos \alpha \cos \beta}{ab} \right] \\ \frac{\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta}{ac} \end{bmatrix}$ $\begin{bmatrix} \frac{\cos \gamma - \cos \alpha \cos \beta}{ab} \\ \frac{\sin^2 \beta}{b^2} \\ \frac{\cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}{bc} \end{bmatrix}$ $T' = (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma) V^2$

$$G_{h_1k_1l_1} = 1/d_{h_1k_1l_1} \\ = [h_1^2 a_1^{*2} + k_1^2 a_2^{*2} + l_1^2 a_3^{*2} + 2h_1k_1(\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_2^*) + 2h_1l_1(\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_3^*) \\ + 2k_1l_1(\mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_3^*)]^{1/2} \quad (4-27)$$

$$G_{h_2k_2l_2} = 1/d_{h_2k_2l_2} \\ = [h_2^2 a_1^{*2} + k_2^2 a_2^{*2} + l_2^2 a_3^{*2} + 2h_2k_2(\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_2^*) + 2h_2l_2(\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_3^*) \\ + 2k_2l_2(\mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_3^*)]^{1/2} \quad (4-28)$$

也如(4-21)、(4-23)一样, 对应于不同晶系, 可先计算出相应的 a_1^{*2} , a_2^{*2} , a_3^{*2} 和 $(\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_2^*)$, $(\mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_3^*)$, $(\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_3^*)$, 再代入(4-25)~(4-28)各式, 便可计算出 $\cos \varphi$ 来。

下面仍以六方晶系、立方晶系为例, 求出任意二晶面 $(h_1k_1l_1)$ 、 $(h_2k_2l_2)$ 的夹角余弦表达式, 连同其它晶系的 $\cos \varphi$ 表达式, 列于表 4-2 中。

(1) 六方晶系:

将(4-21)式代入(4-26)式后所得结果, 连同

$$G_{h_1k_1l_1} = \frac{1}{d_{h_1k_1l_1}} = \left[\frac{4}{3} \cdot \frac{h_1^2 + k_1^2 + k_1^2}{a^2} + \frac{l_1^2}{c^2} \right]^{1/2} \\ G_{h_2k_2l_2} = \frac{1}{d_{h_2k_2l_2}} = \left[\frac{4}{3} \cdot \frac{h_2^2 + k_2^2 + k_2^2}{a^2} + \frac{l_2^2}{c^2} \right]^{1/2}$$

一并代入(4-25)式, 并加以整理, 即得人们熟习的六方晶系晶面夹角余弦表达式:

$$\cos \varphi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + (h_1k_2 + h_2k_1)/2 + 3a^2l_1l_2/4c^2}{[(h_1^2 + k_1^2 + k_1^2 + 3a^2l_1^2/4c^2)(h_2^2 + k_2^2 + k_2^2 + 3a^2l_2^2/4c^2)]^{1/2}} \quad (4-29)$$

(2) 立方晶系:

将(4-23)式代入(4-26)式所得到的结果, 连同

$$G_{h_1k_1l_1} = \frac{1}{d_{h_1k_1l_1}} = \frac{1}{a} (h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)^{1/2} \\ G_{h_2k_2l_2} = \frac{1}{d_{h_2k_2l_2}} = \frac{1}{a} (h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)^{1/2}$$

一并代入(4-25)式, 并加以整理, 便得到:

$$\cos \varphi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{[(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)]^{1/2}} \quad (4-30)$$

三、求晶向长度的表达式

与“倒易矢量长度是正点阵晶面间距的倒数”这个概念相对应，可以引入“正点阵中晶向长度 $r_{[uvw]}$ 等于倒易面间距 $d_{(uvw)^*}$ 的倒数”这样一个概念。在后面讨论高阶劳厄区的处理时，将用到晶向长度的概念。为以后的讨论作准备，下面就来计算晶向长度 $r_{[uvw]}$ ：

因为
$$r_{[uvw]} = \frac{1}{d_{(uvw)^*}}$$

由
$$\mathbf{r}_{[uvw]} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$$

故有

$$\begin{aligned} r_{[uvw]}^2 &= \frac{1}{d_{(uvw)^*}^2} = (u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}) \cdot (u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}) \\ &= uu\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} + uv\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + uw\mathbf{a} \cdot \mathbf{c} + vu\mathbf{b} \cdot \mathbf{a} + vv\mathbf{b} \cdot \mathbf{b} \\ &\quad + vw\mathbf{b} \cdot \mathbf{c} + wu\mathbf{c} \cdot \mathbf{a} + wc\mathbf{c} \cdot \mathbf{b} + ww\mathbf{c} \cdot \mathbf{c} \\ &= u^2a^2 + v^2b^2 + w^2c^2 + 2uvw\cos\alpha + 2uvac\cos\beta \\ &\quad + 2uvab\cos\gamma \end{aligned} \quad (4-31)$$

(4-31)式就是求各晶系晶向长度的普遍式，例如对于立方晶系，将 $a=b=c$ ， $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ 代入上式，可得：

$$r_{[uvw]}^2 = a^2(u^2 + v^2 + w^2)$$

仿此，可以求出各晶系的晶向长度，列于表 4-2 中。

§ 4-5 正点阵与倒易点阵的指数互换

初学者在进行电子衍射分析时，往往在指标互换时出现混乱和错误，六方晶系三指数与四指数互换时有时也发生错误，这些都与正点阵、倒易点阵的概念不清及对两种指数的互换规律不甚了解有关。本节将着重讨论两个问题：① 正点阵与倒易点阵的互换公式及运算矩阵；② 六方晶系的指数换算。

一、正点阵与倒易点阵的互换公式和运算矩阵

前已指出，正点阵的 (hkl) 晶面与倒易点阵的同指数倒易方向

(即倒易矢量的方向) $[hkl]^*$ 垂直; 正点阵的 $[uvw]$ 晶向与倒易点阵的同指数倒易面 $(uvw)^*$ 垂直。所以一般说来, 一张电子衍射谱是一个二维倒易截面 $(uvw)^*$, 如果写成 $[uvw]$, 则它代表各衍射斑点对应的晶面组成的正空间晶带的带轴方向。对非立方晶系, 不能认为电子束是垂直于正空间 (uvw) 面的。这时人们要问: 当从一张电子衍射谱计算出指数 $(uvw)^*$ 或 $[uvw]$ (注意: 在衍射照片下标记 (uvw) 是错误的!) 后, 那么试样膜面的正空间晶面指数是什么? 另一个问题是: 非立方晶系, 如果知道了某一晶面的指数为

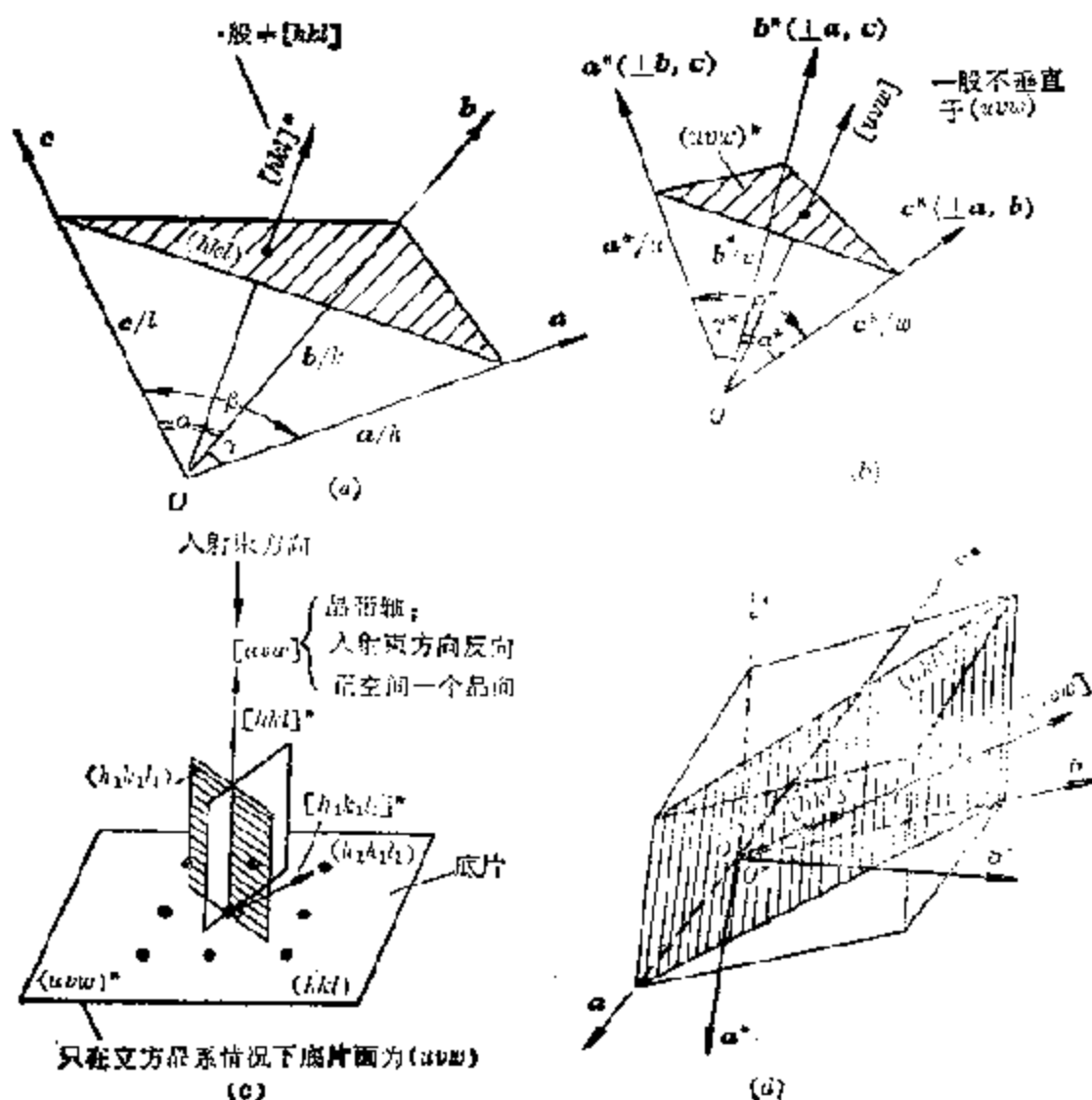


图 4-6 正空间、倒空间中晶面和晶向的相互倒易关系

(a) 正空间; (b) 倒空间; (c) 电子衍射谱; (d) 正空间 (hkl) 面法线 $[uvw]$ 与倒空间用来表示 (hkl) 的倒易矢量 $[hkl]^*$ 是同一向量

(hkl) , 那么 (hkl) 面的法线方向是什么? 因为只在立方晶系的情况下, (hkl) 面的法线方向就是 $[hkl]$!

在回答上面两个问题以前, 我们先用图 4-6 来说明这几个概念的差异。

设 $[uvw]$ 是 (hkl) 的法线, 则 $[uvw]$ 垂直于 (hkl) 。倒易坐标的原点与正点阵的坐标原点是相重的, 根据倒易点阵与正点阵的倒易关系, 在此倒易坐标中引出的代表 (hkl) 面倒易矢量 $[hkl]^*$ 也是垂直于 (hkl) 面的, 这就是说, $[uvw]$ 和 $[hkl]^*$ 是同一矢量在正、倒空间的不同表示方式, 如图 4-6(d) 所示, 可用数学式表达如下:

$$ua + vb + wc = he^* + kb^* + lc^* \quad (4-32)$$

现在我们来回答上面提出的第一个问题。

将(4-32)式分别乘以 a, b, c , 并利用(4-1a)式可得:

$$\left. \begin{aligned} h &= ua \cdot a + va \cdot b + wa \cdot c \\ k &= ub \cdot a + vb \cdot b + wb \cdot c \\ l &= uc \cdot a + vc \cdot b + wc \cdot c \end{aligned} \right\} \quad (4-33a)$$

可用矩阵形式表示如下:

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = [G] \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} \quad (4-33b)$$

式中

$$[G] = \begin{bmatrix} a \cdot a & a \cdot b & a \cdot c \\ b \cdot a & b \cdot b & b \cdot c \\ c \cdot a & c \cdot b & c \cdot c \end{bmatrix} \quad (4-34)$$

(4-33a)或(4-33b)式便是求与晶向 $[uvw]$ 垂直的 (hkl) 面面指数的公式。例如, 对于立方晶系

$$[G]_{\text{立方}} = \begin{bmatrix} a^2 & 0 & 0 \\ 0 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & a^2 \end{bmatrix}$$

代入(4-33b)式, 可得:

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ua^3 \\ va^3 \\ wa^3 \end{bmatrix}$$

约去公因子, $(hkl) = (uvw)$, 即与 $[uvw]$ 垂直的晶面可直接写成 (uvw) 。但是, 对于非立方晶系, 例如六方晶系

$$[G]_{\text{六方}} = \begin{bmatrix} a^2 & -\frac{a^2}{2} & 0 \\ -\frac{a^2}{2} & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{bmatrix}$$

代入(4-33b)可得:

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a^2u + \left(-\frac{a^2}{2}v\right) \\ \left(-\frac{a^2}{2}u\right) + a^2v \\ c^2w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a^2\left(u - \frac{v}{2}\right) \\ a^2\left(v - \frac{u}{2}\right) \\ c^2w \end{bmatrix}$$

例如六方晶系的 AlN, $c = 4.986 \text{ \AA}$, $a = 3.114 \text{ \AA}$, 若晶向 $[uvw] = [111]$, 代入上式,

$$(hkl) = (4.85, 4.85, 24.9) \approx (1, 1, 5.14)$$

即和 $[111]$ 晶向垂直的晶面不是 (111) 而是 $(1, 1, 5.14)$, 一般说来, 都不是整数。

下面讨论上面提出的第二个问题并导出换算公式。也就是要求出(4-33a)或(4-33b)式的逆变换。

将(4-32)式分别乘以 $\mathbf{a}^*$ 、 $\mathbf{b}^*$ 、 $\mathbf{c}^*$, 并利用(4-1)式, 即得:

$$\left. \begin{aligned} u &= h\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a}^* + k\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b}^* + l\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{c}^* \\ v &= h\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{b}^* + l\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c}^* \\ w &= h\mathbf{c}^* \cdot \mathbf{a}^* + k\mathbf{c}^* \cdot \mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* \cdot \mathbf{c}^* \end{aligned} \right\} \quad (4-35a)$$

也可表为矩阵形式:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = [G]^{-1} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} \quad (4-35b)$$

式中

$$[G]^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a}^* & \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b}^* & \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{c}^* \\ \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{a}^* & \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{b}^* & \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c}^* \\ \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{a}^* & \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{b}^* & \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{c}^* \end{bmatrix} \quad (4-36)$$

(4-35a)或(4-35b)式便是求已知晶面(hkl)的法线 $[uvw]$ 的公式。
例如,对立方晶系,

$$[G]_{\text{立方}}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{a^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{a^2} \end{bmatrix}$$

代入(4-35b)可得:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h \cdot \frac{1}{a^2} \\ k \cdot \frac{1}{a^2} \\ l \cdot \frac{1}{a^2} \end{bmatrix}$$

约去公因子,得 $[uvw] = [hkl]$

但对于非立方晶系,却并没有这样的简单关系,例如对六方晶系

$$[G]_{\text{六方}}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{4}{3a^2} & \frac{2}{3a^2} & 0 \\ \frac{2}{3a^2} & \frac{4}{3a^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c^2} \end{bmatrix}$$

代入(4-35b)式,得:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (4/3a^2)h + (2/3a^2)k \\ (2/3a^2)h + (4/3a^2)k \\ (1/c^2)l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (2/3a^2)(2h+k) \\ (2/3a^2)(h+2k) \\ l/c^2 \end{bmatrix}$$

一般说来,如(hkl)为整数,则它的法线指数 $[uvw]$ 不会是整数。

不同晶系的 $[G]$ 和 $[G]^{-1}$ 矩阵表达式已列于表4-2上,以便应用公式(4-33b)和(4-35b)作指数换算时备用。

二、六方晶系指数换算中的问题

六方晶系与其它晶系不同,有四指数和三指数两种标定方法。这两种指数换算中应注意什么问题?既然有四指数法,其倒易点阵又如何表示?甚至在公开发表的文献中,也出现过错误。因此,近年来,这个问题颇引起一些工作者的注意。下面就与此有关的几个方面作简单归纳。

1. 密勒指数和密勒-布喇菲指数

三指数法又称密勒 (Miller) 指数法。以 c 轴与晶体的六次旋转对称轴重合,另作长度相等的两轴 a_1 和 a_2 ,互成 120° ,且均与 c 轴垂直,如图 4-7。这种标法,六个柱面为 (100) 、 (010) 、 $(\bar{1}10)$ 、 $(1\bar{1}0)$ 、 $(0\bar{1}0)$ 和 $(1\bar{1}0)$,看不出六次对称关系。而采用四指数的密勒-布喇菲 (Miller Bravais) 指数法可以弥补这个缺点。在基面上引入三个互成 120° 的 a_1 、 a_2 和 a_3 轴,它们都垂直于与六次对称轴平行的 c 轴。这时六个柱面的指数为 $(10\bar{1}0)$ 、 $(01\bar{1}0)$ 、 $(\bar{1}100)$ 、 $(1\bar{1}010)$ 、 $(0\bar{1}10)$ 和 $(1\bar{1}00)$,它由 1、 $\bar{1}$ 、0、0 四个数字作不同排列组成,通常用一个 $\{1\bar{1}00\}$ 表示即可,反映了柱面的六次对称关系。泛指某一晶面时,用 $(hkl\bar{l})$ 表示。容易证明:四指数中前三个指数是不独立的,其关系是 $h+k+i=0$,即 $h+k=-i$ 。同一晶面,由三指数换成四指数时很简单,只需在第二指数后加上第三个指数 (i) 即可。例如:

$$(010) \longrightarrow (01\bar{1}0)$$

$$(210) \longrightarrow (21\bar{1}0)$$

至于晶向指数,三指数法用 $[uvw]$ 表示;四指数法用 $[UVTW]$ 表示,且 $T=-(U+V)$ 。但注意同一晶向的三指数与四指数不能直接互换。可以证明,它们的关系是:

$$u=2U+V, v=2V+U, w=W \quad (4-37)$$

或

$$\left. \begin{aligned} U &= (2u-v)/3, & V &= (2v-u)/3 \\ T &= -(u+v)/3, & W &= w \end{aligned} \right\} \quad (4-38)$$

与三指数晶面指数一样,三指数晶向指数也不能反映六次对

称性, 如垂直六个柱面的六个晶向指数是: $[2\bar{1}0]$ 、 $[\bar{1}10]$ 、 $[120]$ 、 $[210]$ 、 $[1\bar{1}0]$ 和 $[\bar{1}\bar{2}0]$, 用四指数表示, 则能看出这种对称性, 它们是: $[1010]$ 、 $[\bar{1}100]$ 、 $[01\bar{1}0]$ 、 $[10\bar{1}0]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}00]$ 和 $[0\bar{1}10]$, 这一组晶面用一个符号 $\langle\bar{1}010\rangle$ 或 $\langle\bar{1}0\cdot0\rangle$ 表示即可。

2. 正空间与倒空间的相互关系

参看图 4-7, 对应于正空间的三指数、四指数法, 倒空间也有三轴和四轴两种描述方法。

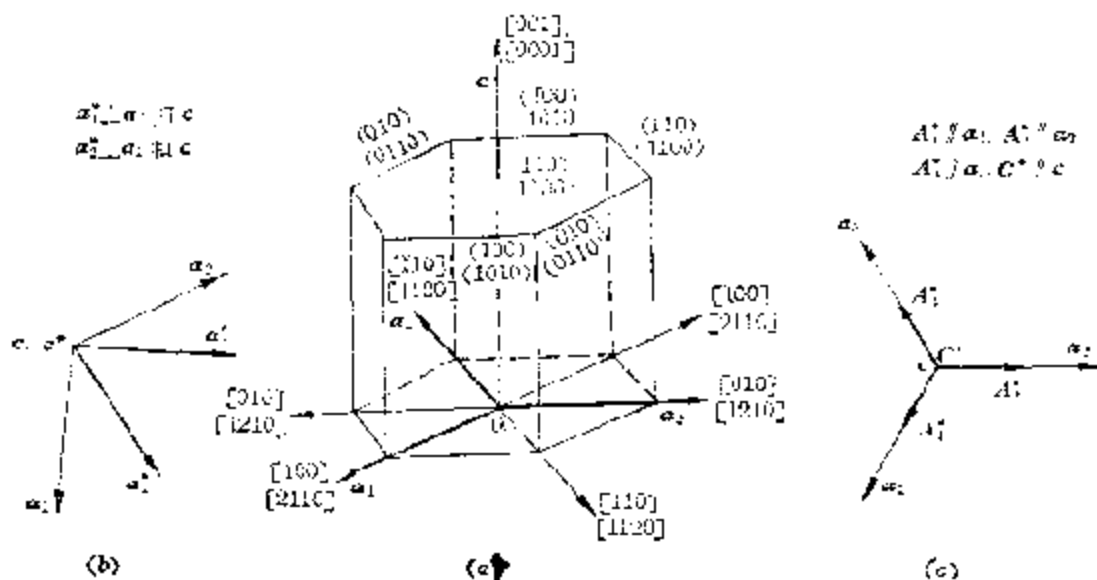


图 4-7 六方晶系晶面、晶向指数的标定

- (a) 正点阵的三轴坐标和四轴坐标; (b) 三指数的正点阵和倒易点阵三轴系统;
 (c) 四指数的正点阵和倒易点阵坐标系统

三轴情况下, 如图 4-7(b), a_1^* 垂直于 a_2 和 c , a_2^* 垂直于 a_1 和 c , 基矢仍满足(4-1)式关系。正空间的 $[uvw]$ 方向, 垂直于倒空间 $(uvw)^*$ 面; 倒空间的倒易矢量 $[hkl]^*$ 垂直于正空间的 (hkl) 面; 晶带定律仍取 $hu+kv+lw=0$ 的形式。

采用四轴表示时, $A_1^* \parallel a_1$, $A_2^* \parallel a_2$, $A_3^* \parallel a_3$, $C^* \parallel c$, 不是正交关系, 所以正空间的 $(hkil)$ 面, 虽然也与倒易点 $(hkil)$ (或倒易矢量 $[hkil]^*$) 相对应, 但它们之间的倒易关系是间接的, 不是由于两轴的正交性质所赋予的。

现将三轴、四轴正点阵、倒易基矢之间的关系归纳于表 4-3。

3. 用四指数标注六方晶系时的变换关系

表 4-3 六方晶系用三轴、四轴表示时, 正点阵、倒易点阵基矢之间的关系

参量及相互关系	三轴表示法	四轴表示法
轴的符号	正空间: $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{c}$ 倒空间: $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ (或 $\mathbf{c}^*$)	正空间: $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3, \mathbf{c}$ 倒空间: $\mathbf{A}_1^*, \mathbf{A}_2^*, \mathbf{A}_3^*, \mathbf{C}^*$
轴 长	$ \mathbf{a}_1^* = \mathbf{a}_2^* = (2/\sqrt{3}) \cdot 1/a$ $\mathbf{c}^* = \frac{1}{c}$	$ \mathbf{A}_1^* = \mathbf{A}_2^* = \mathbf{A}_3^* = (2/3) \cdot (1/a)$ $ \mathbf{C}^* = 1/c$
正空间倒空间坐标轴的相互关系	$\mathbf{a}_1^*$ 垂直于 $\mathbf{a}_2$ 和 $\mathbf{c}$ $\mathbf{a}_2^*$ 垂直于 $\mathbf{a}_1$ 和 $\mathbf{c}$ $\mathbf{c}^* \parallel \mathbf{c}$	$\left. \begin{array}{l} \mathbf{A}_1^* \perp \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{A}_2^* \perp \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{A}_3^* \perp \mathbf{a}_3 \end{array} \right\}$ 垂直于 $\mathbf{c}$ $\mathbf{C}^* \parallel \mathbf{c}$
	$\widehat{\mathbf{a}_1^* \mathbf{a}_1^*} = 60^\circ$ $\widehat{\mathbf{a}_1^* \mathbf{c}} = \widehat{\mathbf{a}_2^* \mathbf{c}} = 120^\circ$	$\widehat{\mathbf{A}_1^* \mathbf{A}_2^*} = \widehat{\mathbf{A}_2^* \mathbf{A}_3^*} = \widehat{\mathbf{A}_3^* \mathbf{A}_1^*} = 120^\circ$ $\widehat{\mathbf{A}_1^* \mathbf{c}} = \widehat{\mathbf{A}_2^* \mathbf{c}} = \widehat{\mathbf{A}_3^* \mathbf{c}} = 90^\circ$
	$\left. \begin{array}{l} \mathbf{a}_1^* = 2(2\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)/3a^2 \\ \mathbf{a}_2^* = 2(\mathbf{a}_2 + 2\mathbf{a}_1)/3a^2 \\ \mathbf{c}^* = \mathbf{c}/c^2 \end{array} \right\} A$	$\left. \begin{array}{l} \mathbf{A}_1^* = (2/3a^2)\mathbf{a}_1 \\ \mathbf{A}_2^* = (2/3a^2)\mathbf{a}_2 \\ \mathbf{A}_3^* = (2/3a^2)\mathbf{a}_3 \\ \mathbf{C}^* = \mathbf{c}/c^2 \end{array} \right\} B$
三轴、四轴倒易矢量相互关系	$\mathbf{A}_1^* = (2/3)\mathbf{a}_1^* - (1/3)\mathbf{a}_2^*$ $\mathbf{A}_2^* = (-1/3)\mathbf{a}_1^* + (2/3)\mathbf{a}_2^*$ $ \mathbf{A}_{1,2}^* = (1/\sqrt{3}) \mathbf{a}_1^* $	$\left. \begin{array}{l} \mathbf{A}_3^* = (-1/3)\mathbf{a}_1^* + (2/3)\mathbf{a}_2^* \\ \mathbf{C}^* = \mathbf{c}^* \end{array} \right\} C$

[注] 见(4-21)式。本表其它关系式的证明, 可参见文献[8]。

应注意以下几点:

(1) (hkl) 面的法线方向不是 $[hkl]$, 而是 $[h, k, i, \lambda^{-2}l]$ 。与正空间 $[uvw]$ 方向正交的晶面不是 (u, v, t, w) , 而是 $(u, v, t, \lambda^2 w)$ 。 $\lambda^2 = (2/3)(c/a)^2$, 这是由表 4-3 中第五栏标有“B”的一组式子决定的。这就是说, 同一矢量, 用四指数正空间坐标或倒空间坐标表示时, 前三个指数是相同的, 第四指数应分别乘上一个因子 λ^2 或 λ^{-2} , 简记为

$$\left. \begin{array}{l} [h, k, i, l]^* = [h, k, i, \lambda^{-2}l] \\ [h, k, i, l] = [h, k, i, \lambda^2 l]^* \end{array} \right\} \quad (4-39)$$

(2) 晶带定律

设晶轴为 $Z = u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 + t\mathbf{a}_3 + w\mathbf{c}$

任意倒易矢为 $G = h\mathbf{A}_1^* + k\mathbf{A}_2^* + i\mathbf{A}_3^* + l\mathbf{C}^*$

利用表 4-3 “B”组式子, 和 $u+v+t=0$, 以及

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{A}_i^* \cdot \mathbf{a}_i &= \begin{cases} 2/3 & (\text{当 } i=j) \\ -1/3 & (\text{当 } i \neq j) \end{cases} \\ \mathbf{C}^* \cdot \mathbf{c} &= (1/c^2) \mathbf{c} \cdot \mathbf{c} = 1 \end{aligned} \right\} \quad (4-40)$$

即得

$$G \cdot Z = hu + kv + it + lw = 0 \quad (4-41)$$

这就是说, 采用四指数表示时, 晶带定律仍取三指数表示时相同的形式。

(3) 两正点阵矢量之积

设二矢量分别为

$$\mathbf{Z}_1 = u_1\mathbf{a}_1 + v_1\mathbf{a}_2 + t_1\mathbf{a}_3 + w_1\mathbf{c}$$

$$\mathbf{Z}_2 = u_2\mathbf{a}_1 + v_2\mathbf{a}_2 + t_2\mathbf{a}_3 + w_2\mathbf{c}$$

则

$$\mathbf{Z}_1 \cdot \mathbf{Z}_2 = (3/2)a^2(u_1u_2 + v_1v_2 + t_1t_2 + \lambda^2w_1w_2) \quad (4-42)$$

(4) 两倒易矢量之积

设二倒易矢量分别为

$$\mathbf{G}_1 = h_1\mathbf{A}_1^* + k_1\mathbf{A}_2^* + i_1\mathbf{A}_3^* + l_1\mathbf{C}^*$$

$$\mathbf{G}_2 = h_2\mathbf{A}_1^* + k_2\mathbf{A}_2^* + i_2\mathbf{A}_3^* + l_2\mathbf{C}^*$$

则

$$\mathbf{G}_1 \cdot \mathbf{G}_2 = \frac{2}{3a^2} (h_1h_2 + k_1k_2 + i_1i_2 + \lambda^{-2}l_1l_2) \quad (4-43)$$

(5) 矢量长度

设矢量为 $\mathbf{Z} = u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 + t\mathbf{a}_3 + w\mathbf{c}$

则

$$|\mathbf{Z}|^2 = (3/2) \cdot a^2 (u^2 + v^2 + t^2 + \lambda^2 w^2) \quad (4-44)$$

同理, 对于

$$\mathbf{G} = h\mathbf{A}_1^* + k\mathbf{A}_2^* + i\mathbf{A}_3^* + l\mathbf{C}^*$$

有

$$|\mathbf{G}|^2 = \frac{2}{3a^2} (h^2 + k^2 + i^2 + \lambda^{-2}l^2) \quad (4-45)$$

(4-45)式就是用密勒-布喇菲指数标定时, 求面间距的公式。

(6) 两晶面 $(h_1k_1l_1)$, $(h_2k_2l_2)$ 间夹角的方向余弦

$$\begin{aligned}\cos(\hat{G}_1, \hat{G}_2) &= (G_1/|G_1|) \cdot (G_2/|G_2|) \\ &= \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2(\lambda^{-2})}{[h_1^2 + k_1^2 + l_1^2(\lambda^{-2})]^{1/2} \cdot [h_2^2 + k_2^2 + l_2^2(\lambda^{-2})]^{1/2}}\end{aligned}\quad (4-46)$$

这也是两个倒易矢量间的夹角的方向余弦。

(7) 两倒易面 $(u_1v_1w_1)^*$, $(u_2v_2w_2)^*$ 间夹角的方向余弦

$$\begin{aligned}\cos(\hat{Z}_1, \hat{Z}_2) &= (Z_1/|Z_1|) \cdot (Z_2/|Z_2|) \\ &= \frac{u_1u_2 + v_1v_2 + w_1w_2(\lambda^2)}{[u_1^2 + v_1^2 + w_1^2(\lambda^2)]^{1/2} \cdot [u_2^2 + v_2^2 + w_2^2(\lambda^2)]^{1/2}}\end{aligned}\quad (4-47)$$

显然, 这也是两个正点阵矢量之间夹角的方向余弦。

§ 4-6 晶体几何形状对倒易点形状的影响

电子衍射谱中的单晶斑点, 可以看作是厄瓦尔德球与倒易阵点相切时得到的切面在底片上的投影。而通常看到的单晶斑点的精细结构又是多种多样的, 它们反映衍射过程的什么物理本质呢? 弄清这个问题, 有助于我们从衍射谱中获得衍射物质内部结构的更多信息。

晶体的几何形状, 决定了它对电子衍射时按照布拉格定律 (§ 2-6) 在一定的方位获得的衍射强度的空间分布。前面建立的布拉格定律是假定衍射晶体具有无限大的尺寸, 而电子衍射时被电子束照射的晶体尺寸却是有限的。在垂直于电子束的方向为微米数量级, 而在平行于电子束方向试样厚度不过数百或一千埃 (100 kV 下); 这就是说被衍射区域是个薄片, 使得倒易点被拉长成垂直于试样的倒易杆 (rel.rod)。有时, 试样中存在薄片状的第二相, 而薄片的平面是平行于电子入射方向的, 那么倒易杆的长轴将和电子束方向垂直。因此, 同样都是倒易杆, 但与厄瓦尔德球相切时得到的切面却是不同的, 前者为圆点, 后者为条纹状。由于倒

易点扩展成倒易杆或其它形状,使得厄瓦尔德球与它们相切的条件放宽了,即不准确地满足布拉格条件,也可能相交,并且得到各种不同花样。

下面较为详细地讨论这个问题。

衍射过程中,衍射谱是物的富里叶变换,因此衍射束的强度决定于衍射晶体的形状和体积,在薄晶体和含有面缺陷(如层错等)或体缺陷(如小质点)的试样进行衍射时,应考虑两个因素:一是由于薄膜在电子束方向的厚度引起的形状因素;二是由于薄膜中缺陷所引起的形状因素。

任意一张电子衍射谱可以看成是第二相与基体衍射谱的迭加,而斑点附近的细节则与晶体的形状以及晶体中存在某些缺陷有关。

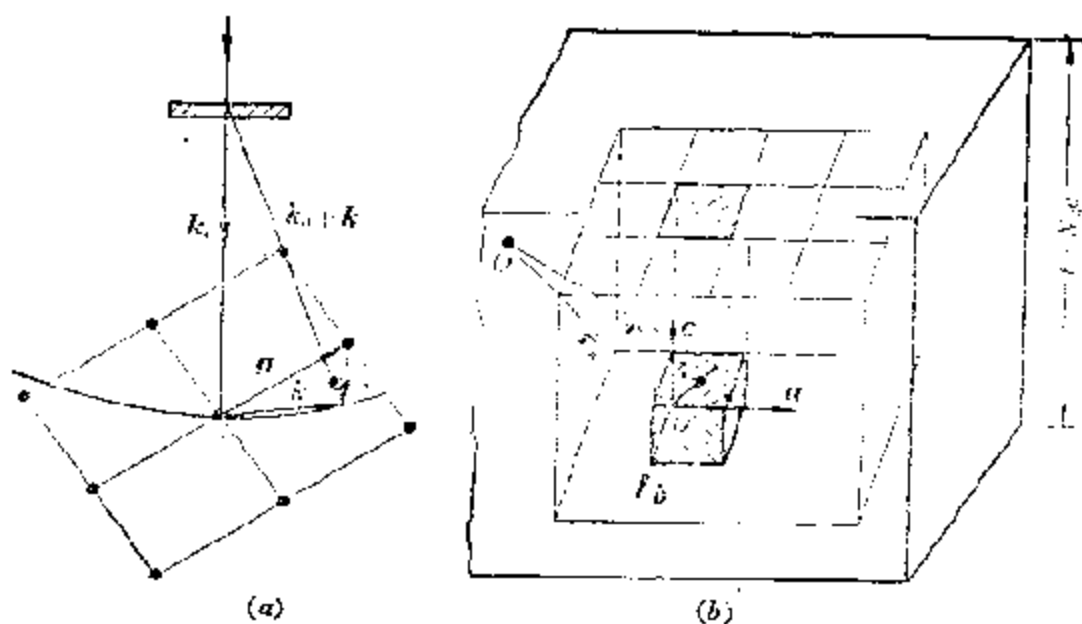


图 4-8 (a) 偏离布拉格条件时厄瓦尔德球与倒易点阵的关系;
(b) 计算相干函数的柱体模型

可以用运动学理论导出晶体形状和倒易点强度分布之间的关系。上面提到薄晶体电子衍射情况下,使得布拉格条件放宽了。如图 4-8(a) 所示,设某倒易点偏离厄瓦尔德球一个 s 矢量;入射波为 k_0 ;某反射准确倒易矢量为 g ; k 为厄瓦尔德球与拉长了的倒易

杆相切后,对应于切点处的倒易矢量, $\mathbf{k} = \mathbf{g} + \mathbf{s}$ 。在图 4-8(b) 中, O 为晶体中的坐标原点, O' 为单胞的坐标原点, $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ 为单胞的三个基矢, $\mathbf{r}_i$ 为原子相对于 O 的位置矢量, $\mathbf{r}_n$ 为单胞相对于 O 的位置矢量, $\mathbf{r}_i'$ 为原子相对于 O' 的位置矢量。

电子通过晶体后的散射振幅, 等于各个晶胞的散射振幅按位相差的迭加。

一个单胞的散射振幅, 根据 (2-38) 式, 用图 4-8(a) 中的 $\mathbf{k}$ 代替原来的 $\mathbf{G}$, 可表示为:

$$\psi_{\text{单胞}} \sim \sum_{\text{单胞中的原子}} f_i \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i) \quad (4-48)$$

整个晶体的散射振幅是:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{晶体}} &\sim \sum_{\text{晶体中的单胞}} \psi_{\text{单胞}} \{ \exp 2\pi i (\mathbf{g} + \mathbf{s}) \cdot \mathbf{r}_n \} \\ &= \sum_{\text{晶体中的所有单胞}} \{ \sum_{\text{每个单胞中的原子}} f_i \exp [2\pi i (\mathbf{g} + \mathbf{s}) \cdot \mathbf{r}_i] \} \\ &\quad \cdot \{ \exp 2\pi i (\mathbf{g} + \mathbf{s}) \cdot \mathbf{r}_n \} \end{aligned} \quad (4-49)$$

式中, $\sum_{\text{每个单胞中的原子}} f_i \exp [2\pi i (\mathbf{g} + \mathbf{s}) \cdot \mathbf{r}_i]$ 与晶体的形状无关, 且当 $\mathbf{s} = 0$ 时, 它就是结构因子 F_g 。由于 $|\mathbf{s}| \ll |\mathbf{g}|$, 所以 $\mathbf{s}$ 对于它的数值的影响是很小的。于是 (4-49) 式可以写成:

$$\psi_{\text{晶体}} \sim \sum_{\text{晶体中的所有单胞}} F_g \cdot \{ \exp (2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_n) \cdot \exp (2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_n) \} \quad (4-50)$$

因为 $\mathbf{g}$ 是倒易矢量, $\mathbf{r}_n$ 是正空间矢量, 故 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_n = \text{整数}$, $\exp 2\pi i (\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_n) = 1$, $(\mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_n)$ 在不同单胞之间无明显变化, 可用积分求和:

$$\psi_{\text{晶体}} = F_g \int_{\text{晶体}} \frac{1}{V_0} \exp (2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_n) dV \quad (4-51)$$

式中 V_0 为晶体的体积, 由 $\mathbf{r}_n = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c}$ 和 $\mathbf{s} = s_x\mathbf{a}^* + s_y\mathbf{b}^* + s_z\mathbf{c}^*$, 故有

$$\psi_{\text{晶体}} \approx \frac{F_g}{V_0} \int_0^{N_1a} \int_0^{N_2b} \int_0^{N_3c} \exp [2\pi i (s_x x + s_y y + s_z z)] dx dy dz \quad (4-52)$$

式中, N_1 , N_2 , N_3 分别为晶体中沿 $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ 轴方向含有的单胞数。(4-52) 式近似表示为:

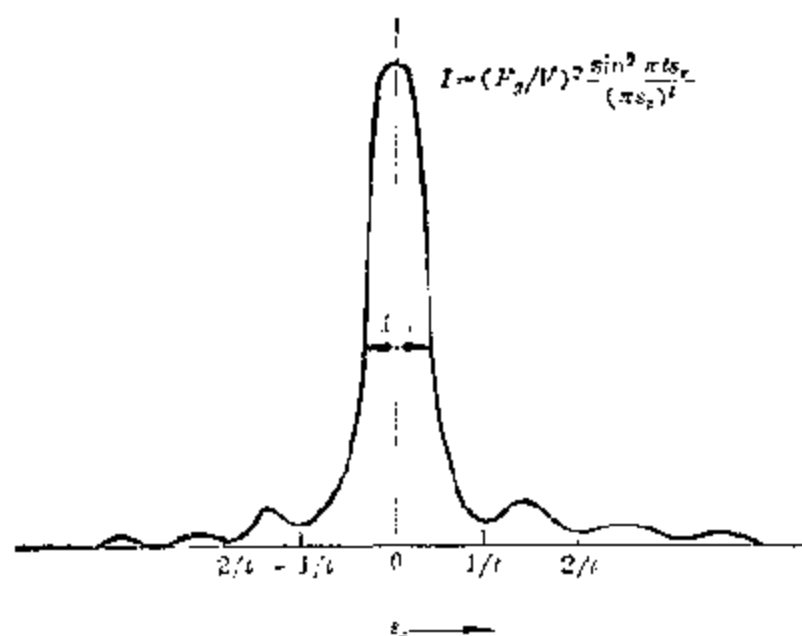


图 4-9 薄晶电子衍射时散射强度的运动学分布, 干涉函数沿 s_z 轴的分布

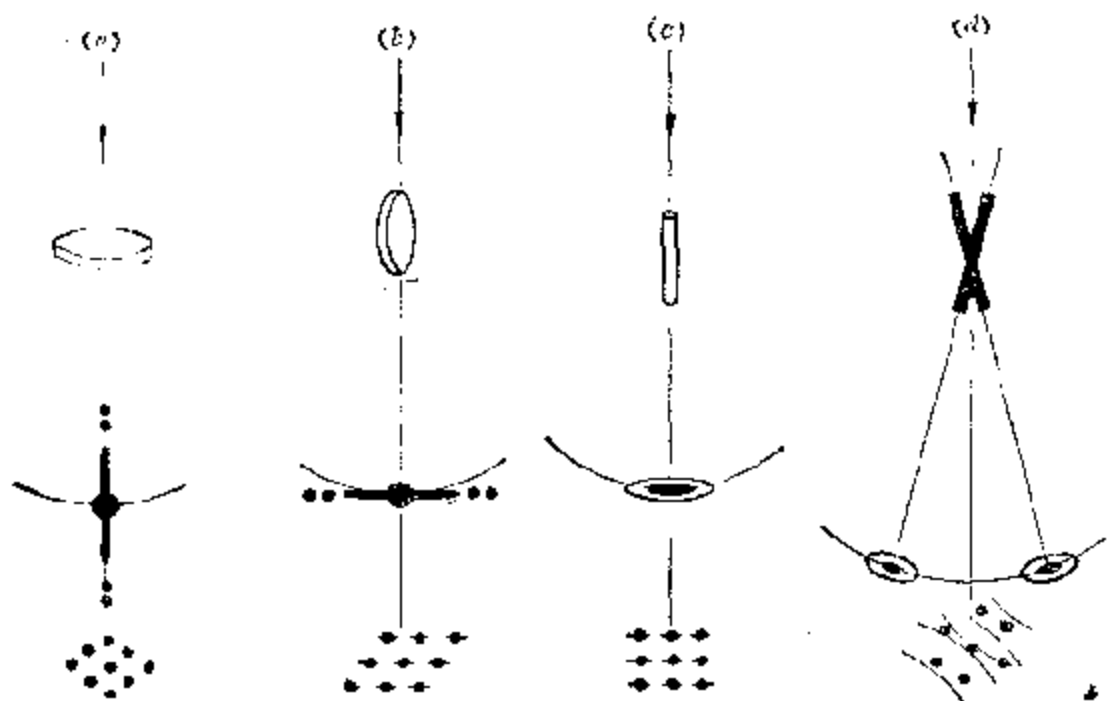


图 4-10 晶体形状对倒易点强度分布的影响

(a) 薄片平面垂直于入射束; (b) 薄片平面平行于入射束; (c) 针状晶体长轴平行入射束; (d) 针状晶体倾斜于入射束(注意弧状条纹)

$$\psi_{g,h} \approx \frac{F_g}{V_a} \frac{\sin(\pi s_x N_1 a)}{(\pi s_x)} \cdot \frac{\sin(\pi s_y N_2 b)}{(\pi s_y)} \cdot \frac{\sin(\pi s_z N_3 t)}{(\pi s_z)} \quad (4-53)$$

$$\text{令 } G(\mathbf{s}) = \frac{\sin(\pi s_x N_1 a)}{(\pi s_x)} \cdot \frac{\sin(\pi s_y N_2 b)}{(\pi s_y)} \cdot \frac{\sin(\pi s_z N_3 c)}{(\pi s_z)}$$

称为干涉函数。对于电子衍射的薄晶体试样, N_3 远比 N_1 和 N_2 为小, 同时 $s_x = s_y = 0$, 于是有

$$\psi_{\text{衍}} \approx \frac{F_g}{V_c} \cdot \frac{\sin(\pi s_z N_3 c)}{(\pi s_z)} \quad (4-54)$$

又因 $N_3 c = t$ 是晶体的厚度, 故强度为

$$I \approx \left(\frac{F_g}{V_c} \right)^2 \cdot \frac{\sin^2(\pi t s_z)}{(\pi s_z)^2} \quad (4-55)$$

(4-55)可表示如图 4-9。这就是说, 电镜下对薄膜进行衍射时, 在倒易点处, 可得到一个强度分布杆, 即倒易杆。同样推理, 可知当衍射物质为针状时, 转换为倒易强度空间分布时, 应是圆盘状。现将常见几种情况示意如图 4-10。

第 五 章

标定电子衍射谱的一般程序

§ 5-1 引 言

通常我们见到的电子衍射谱, 可以分为多晶衍射环和由斑点列组成的单晶衍射谱。前者的标定方法与X射线衍射德拜环的标定方法相同, 将在本章末举例介绍。本章及以后各章讨论的都限于单晶衍射谱的标定方法。制成一个好的样品是重要的第一步, 这是获得理想衍射谱的基础。而对衍射谱的分析, 往往是十分艰巨的, 联系内部微观组织结构, 进行衍衬分析, 尤其是这样。细致入微的分析, 可以使我们从有限的衍射和衍衬照片上得到关于内部组织结构的更多的资料。反之, 即使衍射谱上已经记录了许多有用信息, 也可能由于分析粗糙而被忽视, 甚至得出错误结论。出色的衍衬研究工作, 引用的照片并不多, 但由于试验设计巧妙, 和作者十分熟悉衍射和衍衬分析原理, 并且能综合利用关于合金的多方面知识, 由表及里, 层层深入, 终于获得丰富和有说服力的结果。只要理论概念清楚, 实践出真知, 分析多了, 形形色色的衍射花样见多了, 经验也就积累起来了。本书在介绍各种分析方法时, 将尽可能提供一些有启发性的实例, 以供参考。可以预期, 读者在获得必要的基本知识以后, 在工作中举一反三, 不断积累资料, 总结经验, 就可以较好地掌握这一分析技术。

§ 5-2 分析过程综述

在具体介绍分析方法以前, 将前面章节中已经引入的重要概念, 和尚未介绍的一条重要定律——晶带定律, 综述如下:

(1) 衍射谱是厄瓦尔德球与倒易点阵相截时得到的截面在底片上的投影, 是放大的倒易截面。倒易点与厄瓦尔德球相截, 表示相应的倒易矢量 $\boldsymbol{g}$ 满足布拉格条件, 倒易点落在厄瓦尔德球上, 且结构因子不为 0, 即:

$$\boldsymbol{g} - \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0 \quad (5-1)$$

$$F(\boldsymbol{g}) \neq 0 \quad (5-2)$$

(5-1)、(5-2) 式是斑点出现的必要条件。参看图 2-9, 在那里 $\boldsymbol{k}_0$ 记作 σ_0/λ , $\boldsymbol{k}$ 记作 σ/λ , $\boldsymbol{g}$ 记作 $\boldsymbol{G}_{hkl}$ 。

(2) 衍射斑点的精细结构是衍射晶体形状效应的反映。电子衍射时, 倒易点演变成倒易杆、倒易片或其他复杂形状, 已经不是一个几何意义的“点”。而电子射线的波长极短, 因而厄瓦尔德球半径很大。例如 100 kV 下, 半径为 $27 \text{ \AA}^{-1}$; 200 kV 下, 半径为 $39.84 \text{ \AA}^{-1}$, 马氏体 (M) (011) 面的面间距是 $2.027 \text{ \AA}$, 奥氏体 (A) (111) 面的面间距是 $2.070 \text{ \AA}$, 相应的倒易矢长度分别为 $0.49 \text{ \AA}^{-1}$ 和 $0.48 \text{ \AA}^{-1}$ 。这就是说, 200 kV 下的厄瓦尔德球半径是 $|\boldsymbol{g}_{011}|_M$ 的 81 倍, $|\boldsymbol{g}_{111}|_A$ 的 83 倍, 因此在倒易原点附近的厄瓦尔德面, 十分接近于一平面, 加上倒易点具有一定形状, 故电子衍射时, 经常能同时记录到相当多的衍射斑点。

(3) 底片上任意斑点到透射点的距离与相应晶面的面间距成反比。一般说来, 衍射物质的单胞常数越大, 斑点密而多; 反之, 单胞常数越小, 斑点疏而少。此外, 衍射面准确处于布拉格位置时, 斑点较强; 略偏离布拉格位置, 斑点较弱。

(4) 计算衍射谱的基本公式 $L\lambda = Rd$ 中, 仪器常数 $L\lambda$ 精确与否, 直接影响到分析结果的可靠性 (参看 § 3-3)。对萃取复型, 可在复型上喷金或 TiCl 作为内标, 由于它们的晶面间距 d 是已知的, 所以在测得 R 值后, 就可求出常数 $L\lambda$ 。注意, 切不可简单地用一定加速电压下的电子波长 λ , 乘以试样到底片的机械长度 L 去求 $L\lambda$, 这样做是错误的。

Au 和 TiCl 的低指数晶面间距如表 5-1。

金属薄膜试样, 由于基体点阵常数是已知的, 可用基体的衍射

表 5-1 Δu 和 $TiCl$ 的低指数晶面间距

Δu		$TiCl$	
hkl	$d(\text{\AA})$	hkl	$d(\text{\AA})$
111	2.3546	100	2.840
200	2.0393	110	2.716
220	1.4418	111	2.217
311	1.2295	200	1.920
		210	1.717

斑点直接求出 $L\lambda$ ，再用此 $L\lambda$ 值计算并标定第二相斑点，用这种内标法求 $L\lambda$ 值，往往更为可靠。

(5) 标定衍射谱不外两种情况：一是已知衍射物质及其晶体结构，例如所研究材料的基体（如马氏体、奥氏体等）是已知的；二是未知相的标定。对前一种情况，标定没有什么困难。对后一种情况，可以借助从 X 射线分析、化学分析或电子探针分析得来的数据，再根据试样热处理条件和析出规律，并结合析出相形态，加以判断，缩小怀疑范围。这就要求分析工作者，在所从事的研究领域里，不断充实自己，扩大知识面，并养成经常积累资料的习惯，这对于提高分析工作效率和质量是十分重要的。本书附录九中，提供了一些常见合金在不同状态下的析出相数据，可供参考。

(6) 电子衍射谱只是一个二维倒易截面，仅凭一张衍射照片确定未知物质的三维晶体结构，是不充分的。应利用试样倾动台，对同一试样倾动不同角度，并拍下相应的衍射谱，由此确定倒易单胞的基矢，并进而标定斑点指数。标定后各衍射谱的指数如果能够互洽，就说明这种标定是合理的。如果衍射谱上同时出现高阶劳厄区斑点，可简化分析过程。有时仅利用一张底片，借助高阶斑点的位置，并参照特定衍射斑点的强度差异，也可作出比较肯定的结论，详见第七章的讨论。

(7) 晶带定律是衍射分析中经常用到的一条定律。晶体中若干晶面族 $\{hkl\}$ 同时与一个晶向 $[uvw]$ 平行，即这些晶面族有一个共同晶向 $[uvw]$ [如图 5-1(a)]，这些晶面族同属一个晶带， $[uvw]$

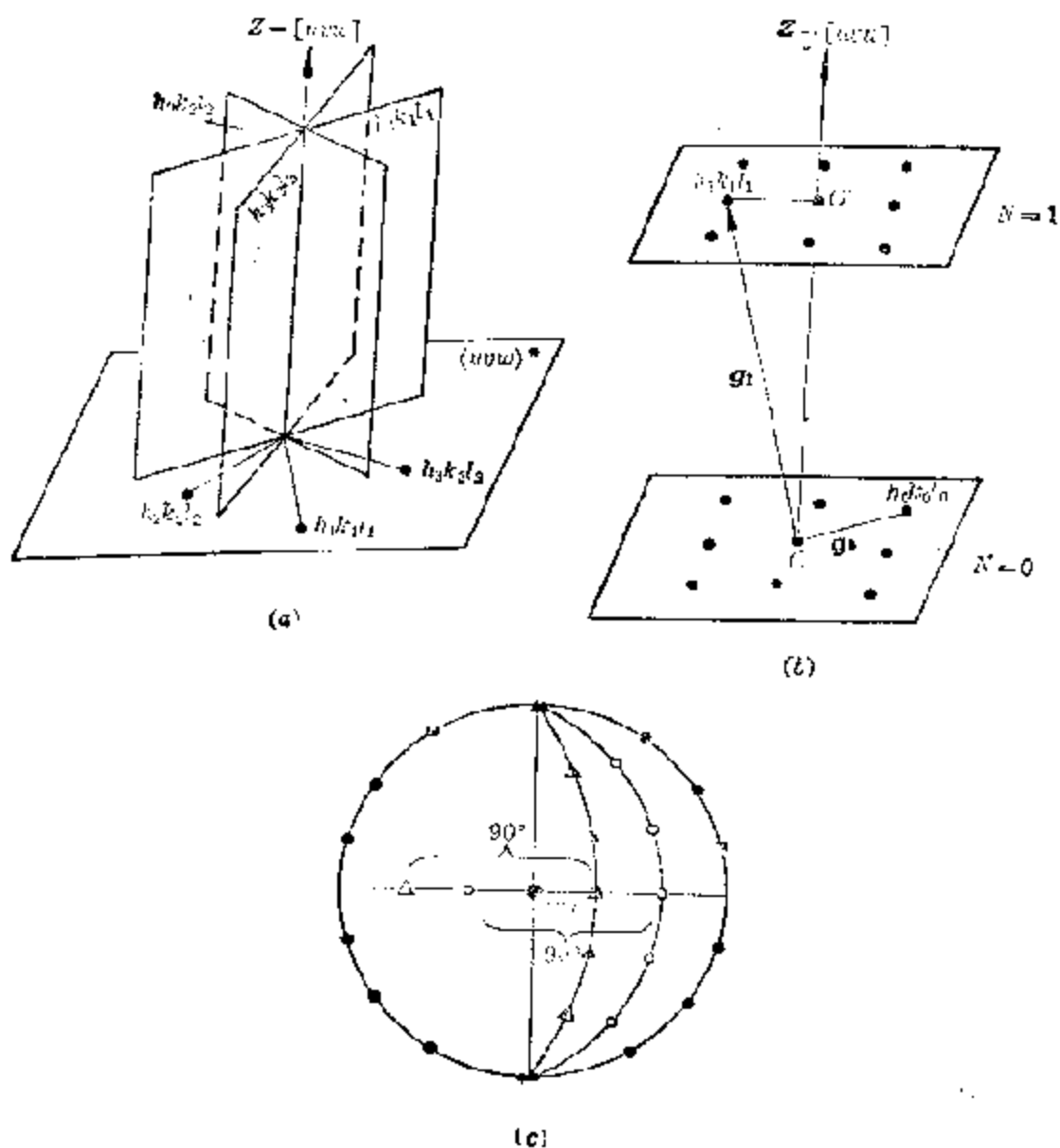


图 5-1 晶带及晶带定律

称为此晶带的晶带轴。

晶带的各晶面族用倒易矢量 $\mathbf{g}_i = h_i \mathbf{a}^* + k_i \mathbf{b}^* + l_i \mathbf{c}^*$ 表示，晶带轴方向是一个正空间矢量，记作 $\mathbf{Z} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$ ，显然 $\mathbf{g}_i$ 与 $\mathbf{Z}$ 有正交关系，即

$$\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{Z} = 0 \quad (5-3)$$

利用(4-1)式，可得出被称之为 Diophantine 方程的下述关系式：

$$h_i u + k_i v + l_i w = 0 \quad (5-4)$$

(5-3)和(5-4)式是晶带定律的数学表达式，它们反映的正空间与

倒空间的关系是:

1) $[uvw]$ 是正点阵矢量, $[h_1k_1l_1]^*$ 是倒易矢量, 二者正交。
 $(uvw)^*$ 是倒易平面, $(h_1k_1l_1)$ 是正空间平面, 二者正交。

2) $[uvw]$ 是正点阵矢量, $(h_1k_1l_1)$ 是正空间平面, 二者平行。
 $(uvw)^*$ 是倒易平面, $[h_1k_1l_1]^*$ 是倒易矢量, 二者平行。满足(5-3)或(5-4)关系的许多倒易矢的端点 $(h_1k_1l_1)$ 均落在 $(uvw)^*$ 倒易面上, 这就是我们所见到的单晶衍射谱。

3) 在极图上, 满足晶带定律的各 (hkl) 面的极点, 均落在距极点 $(uvw)90^\circ$ 的大圆上, 如果 $[uvw]$ 就是某极图的中心极点, 则各 (hkl) 极点均落在基圆圆周上[图 5-1(c)]。

4) (5-4)式中, 若 u, v, w 为常数, $h_1k_1l_1$ 可变, 则方程确定该晶带的所有平面, 也就是确定倒易面 $(uvw)^*$ 上所有倒易点的指数。若 h, k, l 为常数, u, v, w 可变, 则方程确定 (hkl) 可能同时落在哪些晶带上; 用倒空间的语言讲, 表示以倒易矢量 $[hkl]^*$ 为交线的所有可能倒易面。

晶带定律在电子衍射分析中的重要应用, 是在标定斑点指数后, 求晶带轴(或试样膜面法线)方向的指数。

例如, 已标定两个斑点的指数: $(h_1k_1l_1)$ 、 $(h_2k_2l_2)$, 则据(5-4)式, 应有

$$\begin{cases} h_1u + k_1v + l_1w = 0 \\ h_2u + k_2v + l_2w = 0 \end{cases}$$

其解是:

$$u:v:w = \begin{vmatrix} k_1l_1 \\ k_2l_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} l_1h_1 \\ l_2h_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} h_1k_1 \\ h_2k_2 \end{vmatrix} \quad (5-5)$$

习惯上写成如下便于运算的形式:

$$\begin{array}{ccccccc} h_1 & k_1 & l_1 & h_1 & k_1 & l_1 & \\ & \times & \times & \times & & & \\ h_2 & k_2 & l_2 & h_2 & k_2 & l_2 & \\ & \underbrace{}_u & \underbrace{}_v & \underbrace{}_w & & & \end{array}$$

向下箭头两指数相乘取正号, 向上箭头两指数相乘取负号, 然后两

者相加。约去公因子后,即为所求指数。 $[uvw]$ 也是 $(h_1k_1l_1)$ 与 $(h_2k_2l_2)$ 交线的指数。

晶带定律还有其它一些应用,举例如下:

例如,如果一个晶面同属于两个晶带,则当两晶带轴已知时,该晶面指数可求。设晶带轴指数为 $[u_1v_1w_1]$ 、 $[u_2v_2w_2]$,则晶面 (hkl) 满足:

$$\begin{cases} hu_1 + kv_1 + lw_1 = 0 \\ hu_2 + kv_2 + lw_2 = 0 \end{cases}$$

$$\therefore \begin{cases} h = v_1w_2 - v_2w_1 \\ k = w_1u_2 - w_2u_1 \\ l = u_1v_2 - u_2v_1 \end{cases}$$

通常也写成如下形式:

$$\begin{array}{c} u_1 \quad v_1 \quad w_1 \quad u_2 \quad v_2 \\ \left| \begin{array}{ccc} \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \end{array} \right| \\ u_2 \quad v_2 \quad w_2 \quad u_1 \quad v_1 \\ \hline \quad \quad \quad h \quad \quad k \quad \quad l \end{array}$$

为后面第七章讨论高阶劳厄区分析方法作准备,将上述晶带定律加以推广,成为广义晶带定律。(5-3)或(5-4)式是零层倒易面上倒易点与晶带轴的关系,电子衍射中由于许多原因,厄瓦尔德球与高层倒易点相截的截点,有时也可能投影到零层倒易面上,从而在衍射照片上出现所谓高阶劳厄区斑点,这时就必须应用广义晶带定律进行解释。

参见图5-1(b),零层倒易面通过倒易原点 O ,在它上面或下面与之平行的第 N 层倒易面 $(uvw)_N^*$ 不通过原点,这时,必须由下述公式来代替(5-3)和(5-4)式:

$$g \cdot Z = N \quad (5-6)$$

即

$$h_u + k_v + l_w = N \quad (5-7)$$

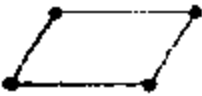
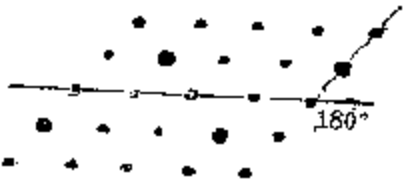
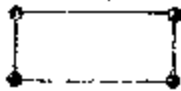
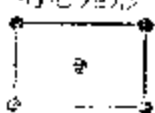
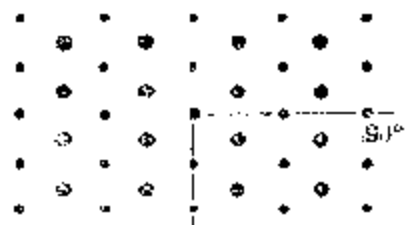
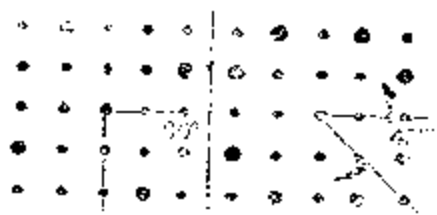
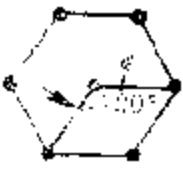
此即广义晶带定律。由于 h , k , l 和 u , v , w 均为整数, N 当然也是整数,它代表 $(uvw)_N^*$ 倒易面的层数。但是由于不同晶系具有

不同的消光条件, N 不一定取连续的整数。在介绍高阶劳厄区分析方法时, 将再详予讨论。

(5-6) 和 (5-7) 式的意义是: 满足此关系式的诸 $(h_k k_l k_m)$ 倒易点, 一定落在第 N 层 $(uvw)^*$ 倒易面上。

(8) 电子衍射谱的对称性

表 5-2 电子衍射谱的对称性

电子衍射谱斑点配置 (例另不画阵点配置)	电子衍射谱及其相应点群	可能归属的晶系
平行四边形 		单斜、单斜、正交、六角、六角、三角、立方
矩形 		单斜、正交、四角、六角、三角、立方
有心矩形 		单斜、正交、四角、六角、三角、立方
正方形(正方形) 		四角、立方
正三角形(正六角形) 		六角、三角、立方

了解二维倒易平面上阵点分布的对称性, 对于根据电子衍射谱的斑点分布, 迅速判断它可能属于什么晶系, 减少分析工作量大有好处。B. K. Vainshtein 对此作了很好的分析, 其主要结论如下:

正空间只有五种平面布喇菲点阵, 倒空间里相应地也只有五种平面点阵, 它们是: 矩形(或称长方形)、有心矩形、四方形、平行四边形和六角形。也就是说, 电子衍射谱的斑点配置, 也不外是这五种之一。从几何上考虑, 这五种平面点阵的每一个阵点都是等价的(不考虑 f 值随 $\sin \theta/\lambda$ 单调衰减)。文献[8]指出, 利用电子衍射谱中斑点强度分布的对称性, 对于确定它们所对应的晶体结构是有帮助的。因此, 还应考虑对衍射强度有重大影响的点群对称。在以透射点为中心的一定角度范围内, 强度分布不含任何对称操作, 分析斑点强度时, 只要分析这个角度范围内的斑点就可以了。

表 5-2 归纳了上述结果^[9]。由表中可见: 在电子衍射谱中出现最多的低对称性斑点配置是平行四边形, 其对应的晶系最不确定, 几乎七大晶系都可能出现这种排列。而对称性愈高的倒易阵点配置, 相应晶系的对称性也愈高。例如四方形点列只能属于四方和立方晶系; 正三角形或正六角形点列, 只能属于六角、三角或立方晶系。对称性较差的矩形和有心矩形的斑点排列, 也有多种可能的归属。

§ 5-3 立方晶系衍射谱的标定

本节介绍立方晶系衍射谱的标定程序, 其基本步骤也适用于其它晶系衍射谱的标定。

一、查 $\sqrt{N}$ 比值表法

立方晶系的晶体学特点是三轴基矢长度相等且正交, 只有一个单胞常数 a , 其晶面间距和晶面夹角的公式分别为:

$$1/d_{hkl}^2 = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} = N/a^2 \quad (5-8)$$

$$\cos \varphi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{[(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)]^{1/2}} \quad (5-9)$$

透射斑点 to 任意衍射斑点的矢量长度:

$$g_{hkl} = \sqrt{N} a^*$$

N 是三指数平方和。据 § 2-5 所述结构因子的考虑, 三种立方晶系点阵, N 可分别取下列数列:

简单立方: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 24, 25, 26, 27, ...;

体心立方: 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 22, 24, ...;

面心立方: 3, 4, 8, 11, 12, 16, 19, 20, 24, 27, ...;

金刚石立方: 3, 8, 11, 16, 19, 24, 27, ...。

上述数列可表示如图 5-2。

N	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27
简单立方																											
体心立方																											
面心立方																											
金刚石立方																											
$\sqrt{N}(\propto r)$	1	1.414	1.732	2.000	2.236	2.449	2.646	2.828	3.000	3.162	3.317	3.464	3.606	3.742	3.873	4.000	4.123	4.243	4.359	4.472	4.583	4.690	4.793	4.895	5.000	5.106	
N	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27

图 5-2 立方晶系的 N 值数列

如果是多晶试样的衍射环, 其谱线的排列, 也符合图 5-2 所示分布。

设透射点(000)到两个斑点 $(h_1 k_1 l_1)$ 和 $(h_2 k_2 l_2)$ 的距离分别为 r_1 和 r_2 , 则根据(2-49)式, 有 $r_1 d_1 = L\lambda$ 和 $r_2 d_2 = L\lambda$ 。代入(5-8)式, 取比值:

$$\frac{d_2^2}{d_1^2} = \frac{r_1^2}{r_2^2} = \frac{N_1}{N_2}$$

$$\therefore \frac{r_1}{r_2} = \frac{\sqrt{N_1}}{\sqrt{N_2}} \quad (5-10)$$

同样, $r_1 : r_2 : r_3 : \dots = \sqrt{N_1} : \sqrt{N_2} : \sqrt{N_3} : \dots$

表 5-5 立方晶系

N	$h_1k_1l_1$	$\sqrt{N_1}$	$h_2k_2l_2$							
			100	110	111	200	210	211	220	300
			$\sqrt{N_2}$							
1	100	1.0000	1	1.4142	1.7321	2.0000	2.2361	2.4495	2.8284	3.0000
2	110	1.4142	0.7071	1	1.2247	1.4142	1.5811	1.7321	2.0000	2.1313
3	111	1.7321	0.5773	0.8165	1	1.1547	1.3420	1.4142	1.6229	1.7321
4	200	2.0000	0.5000	0.7071	0.8661	1	1.1181	1.2248	1.4142	1.5000
5	210	2.2361	0.4472	0.6325	0.7746	0.8944	1	1.0954	1.2649	1.3416
6	211	2.4495	0.4082	0.5773	0.7071	0.8165	0.9129	1	1.1547	1.2247
8	220	2.8284	0.3535	0.5000	0.6123	0.7071	0.7906	0.8660	1	1.0000
9	300	3.0000	0.3333	0.4714	0.5773	0.6666	0.7453	0.8165	0.9428	1
10	310	3.1623	0.3162	0.4472	0.5477	0.6325	0.7071	0.7746	0.8944	0.9435
11	311	3.3166	0.3015	0.4264	0.5222	0.6030	0.6742	0.7385	0.8529	0.9045
12	221	3.4641	0.2880	0.4032	0.5005	0.5773	0.6455	0.7071	0.8165	0.8660
13	320	3.6056	0.2773	0.3922	0.4803	0.5546	0.6201	0.6793	0.7845	0.8320
14	321	3.7417	0.2672	0.3779	0.4629	0.5345	0.5976	0.6546	0.7559	0.8017
16	400	4.0000	0.2500	0.3535	0.4330	0.5000	0.5590	0.6123	0.7071	0.7500
17	410	4.1231	0.2425	0.3422	0.4200	0.4850	0.5423	0.5940	0.6855	0.7276
18	411	4.2426	0.2357	0.3333	0.4082	0.4714	0.5270	0.5773	0.6666	0.7071
19	331	4.3589	0.2294	0.3244	0.3973	0.4588	0.5129	0.5619	0.6485	0.6832
20	420	4.4721	0.2236	0.3162	0.3872	0.4472	0.5000	0.5477	0.6325	0.6708
21	421	4.5826	0.2180	0.3086	0.3779	0.4364	0.4879	0.5345	0.6123	0.6546
22	332	4.6904	0.2152	0.3015	0.3692	0.4274	0.4767	0.5222	0.5939	0.6336
23	422	4.7950	0.2041	0.2886	0.3535	0.4082	0.4564	0.5000	0.5773	0.6123
25	500	5.0000	0.2000	0.2828	0.3464	0.4000	0.4472	0.4899	0.5773	0.6000
26	510	5.1962	0.1961	0.2773	0.3396	0.3923	0.4385	0.4803	0.5546	0.5883
27	511	5.1962	0.1924	0.2723	0.3333	0.3848	0.4303	0.4714	0.5413	0.5773
29	520	5.3852	0.1856	0.2626	0.3216	0.3718	0.4152	0.4528	0.5270	0.5576

注: $\sqrt{N_1} = \sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}$; $\sqrt{N_2} = \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}$; $r_2:r_1 = \sqrt{N_2}:\sqrt{N_1}$ 。

$\sqrt{N_1} \sqrt{N_2}$

k_{12}										k_{12}	N
310	311	222	320	321	400	410 322	411 330	331	420		
$\sqrt{N_1}$										k_{12}	N
310	311	222	320	321	400	410 322	411 330	331	420		
3.1013	3.3106	3.4341	3.6056	3.7417	4.0000	4.1231	4.2426	4.3559	4.4721	100	1
2.9201	2.2452	2.4195	2.5495	2.6458	2.8281	2.9154	3.0000	2.0822	2.1622	110	2
1.8257	1.5147	2.0000	2.0816	2.1602	2.3093	2.3834	2.4498	2.5165	2.5818	111	3
1.5812	1.6583	1.7322	1.8028	1.8703	2.0000	2.0615	2.1213	2.1795	2.2361	200	4
1.3142	1.4833	1.5423	1.6124	1.6733	1.7888	1.8433	1.8973	1.9494	1.9999	210	5
1.2909	1.3504	1.4142	1.4719	1.5275	1.6329	1.6832	1.7320	1.7795	1.8257	211	6
1.1180	1.1726	1.2247	1.2747	1.3229	1.4142	1.4577	1.5000	1.5411	1.5811	220	8
1.0543	1.1055	1.1547	1.2018	1.2472	1.3333	1.3473	1.4142	1.4529	1.4907	300 221	9
1	1.0487	1.0954	1.1401	1.1832	1.2649	1.3038	1.3416	1.3782	1.4142	310	10
0.9554	1	1.0444	1.0871	1.1281	1.2060	1.2431	1.2792	1.3142	1.3487	311	11
0.9128	0.9574	1	1.0408	1.0801	1.1547	1.1902	1.2247	1.2583	1.2907	222	12
0.8770	0.9198	0.9607	1	1.0377	1.1094	1.1435	1.1766	1.2089	1.2406	330	13
0.8451	0.8865	0.9258	0.9636	1	1.0690	1.1019	1.1338	1.1649	1.1952	321	14
0.7966	0.8291	0.8560	0.9014	0.9353	1	1.0307	1.0606	1.0897	1.1180	400	16
0.7660	0.8041	0.8401	0.8747	0.9074	0.9701	1	1.0289	1.0571	1.0846	410 322	17
0.7452	0.7817	0.8165	0.8498	0.8819	0.9428	0.9718	1	1.0274	1.0540	411 330	18
0.7254	0.7608	0.7947	0.8271	0.8584	0.9176	0.9459	0.9723	1	1.0359	331	19
0.7071	0.7416	0.7740	0.8062	0.8366	0.8944	0.9219	0.9486	0.9746	1	420	20
0.6900	0.7232	0.7550	0.7868	0.8165	0.8728	0.8997	0.9258	0.9511	0.9757	421	21
0.6742	0.7071	0.7385	0.7687	0.7976	0.8528	0.8790	0.9045	0.9293	0.9534	332	22
0.6454	0.6769	0.7071	0.7358	0.7637	0.8104	0.8416	0.8660	0.8897	0.9128	422	24
0.6324	0.6623	0.6928	0.7210	0.7482	0.8000	0.8246	0.8485	0.8717	0.8944	500 430	25
0.6000	0.6301	0.6598	0.7071	0.7328	0.7844	0.8086	0.8320	0.8548	0.8770	510 431	26
0.6065	0.6382	0.6666	0.6938	0.7200	0.7697	0.7934	0.8164	0.8388	0.8605	511 333	27
0.5872	0.6178	0.6472	0.6748	0.7027	0.7427	0.7656	0.7878	0.8094	0.8304	520 432	29

(续表)

N	$k_1 k_2 k_3$	$\sqrt{N_1}$	$h_0 h_1^2 h_2$							$h_1^2 h_2^2$	N
			421	332	422	500 130	510 431	511 333	520 432		
			$\sqrt{N_2} / \sqrt{N_1}$								
1	100	1.0000	4.5826	4.6904	4.8990	5.0000	5.0990	5.1962	5.3852	100	1
2	110	1.4142	3.2406	3.3166	3.4641	3.5355	3.6055	3.6185	3.8077	110	2
3	111	1.7321	2.6456	2.7079	2.8283	2.8868	2.9438	2.9999	3.1090	111	3
4	200	2.0000	2.2913	2.3432	2.4495	2.5000	2.5495	2.5981	2.6825	200	4
5	210	2.2361	2.0493	2.0975	2.1908	2.2360	2.2803	2.3237	2.4083	210	5
6	211	2.4495	1.8709	1.9148	2.0000	2.0412	2.0816	2.1213	2.1984	211	6
8	220	2.8284	1.6202	1.6583	1.7320	1.7677	1.8027	1.8371	1.9039	220	8
9	300 221	3.0000	1.5275	1.5634	1.6330	1.6666	1.6996	1.7320	1.7850	300 221	9
10	310	3.1623	1.4491	1.4832	1.5491	1.5811	1.6121	1.6431	1.7029	310	10
11	311	3.3166	1.3817	1.4142	1.4771	1.5075	1.5374	1.5667	1.6237	311	11
12	222	3.4641	1.3228	1.3640	1.4142	1.4433	1.4714	1.5000	1.5545	222	12
13	320	3.6056	1.2709	1.3008	1.3587	1.3867	1.4142	1.4411	1.4933	320	13
14	321	3.7417	1.2247	1.2535	1.3032	1.3302	1.3571	1.3837	1.4392	321	14
16	400	4.0000	1.1456	1.1726	1.2217	1.2500	1.2747	1.2990	1.3433	400	16
17	410 322	4.1231	1.1114	1.1375	1.1881	1.2126	1.2366	1.2602	1.3001	410 322	17
18	411 330	4.2426	1.0801	1.1055	1.1547	1.1785	1.2018	1.2247	1.2693	411 330	18
19	331	4.3589	1.0515	1.0760	1.1238	1.1470	1.1697	1.1920	1.2357	331	19
20	420	4.4721	1.0247	1.0488	1.0954	1.1180	1.1401	1.1619	1.2041	420	20
21	421	4.5826	1	1.0235	1.0630	1.0910	1.1126	1.1338	1.1751	421	21
22	332	4.6904	0.9770	1	1.0444	1.0680	1.0871	1.1078	1.1481	332	22
24	422	4.8990	0.9354	0.9574	1	1.0206	1.0408	1.0606	1.0992	422	24
25	500 430	5.0000	0.9165	0.9380	0.9738	1	1.0198	1.0302	1.0770	500 430	25
26	510 431	5.0990	0.8987	0.9198	0.9607	0.9805	1	1.0190	1.0561	510 431	26
27	511 333	5.1962	0.8819	0.9026	0.9428	0.9622	0.9812	1	1.0338	511 333	27
29	520 432	5.3852	0.8509	0.8709	0.9097	0.9284	0.9468	0.9649	1	520 432	29

〔例1〕 图5-3(a)是从马氏体时效钢基体获得的电子衍射照片,试标定其指数。

• 119 •

用金膜测得的仪器常数 $L\lambda = 19.25 \text{ mm}\text{\AA}$, 计算对应于 Q、P 斑点的 d 值:

$$\frac{L\lambda}{r} = \frac{19.25}{9.5} = 2.027 \text{ \AA}$$

与马氏体 $\{110\}$ 的面间距符合良好。

最后, 利用 (5-5) 式, 求出晶带轴指数:

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & 1 & \bar{1} & 0 & 1 \\ & \times & \times & \times & \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ \hline & 2 & 0 & 0 & \end{array}$$

$[uvw] = [200] = [100]$, 这就是试样膜面的法线方向。

二、特征平行四边形的标定方法^[10]

单晶电子衍射谱, 可以视为由某一特征平行四边形(斑点占有平行四边形的四个顶点), 按一定周期扩展而成。如图 5-4, 可以

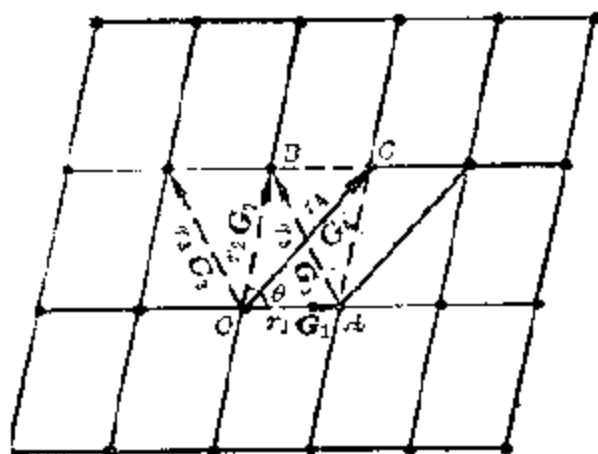


图 5-4 特征基本平行四边形的定义

$$r_1 \leq r_2 \leq r_3 \leq r_4; \quad 60^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$$

找出许多平行四边形, 作为这一个衍射谱的基本单元。但是我们定义具有如下性质的平行四边形为特征平行四边形: 这个平行四边形是由最短的两个邻边组成的, 若以 r_1 表示它的短邻边长度, r_2 表示它的长邻边长度, r_3 表示它的短对角线长度, r_4 表示它的长对角线长度, 且规定:

$$r_1 \leq r_2 \leq r_3 \leq r_4$$

在实际工作中, 可以简单地以 $r_2 \leq r_3$ 作为判据, 并且取 r_1 与 r_2 之间的夹角 θ 是锐角, 即 $60^\circ \leq \theta \leq 90^\circ$ 。

对于任何晶系, 都可以找出组成其衍射谱的特征基本平行四边形。由 (5-10) 式可知, 对于立方晶系, 透射斑点附近最邻近两倒易矢的长度之比 r_1/r_2 与点阵常数 a 无关, 而只与相应的指数有

表 5-4 面心立方特征基本平行四边形表

序号	r_2/r_1	r_3/r_1	$d_{h_1k_1l_1}$	uvw	$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$
1	1.000	1.000	$a/2.828$	[111]	202	022
2	1.000	1.026	$a/4.959$	[356]	133	531
3	1.000	1.038	$a/7.211$	[469]	640	054
4	1.000	1.054	$a/8.000$	[356]	442	244
5	1.000	1.095	$a/4.472$	[124]	042	420
6	1.000	1.135	$a/1.732$	[011]	111	111
7	1.000	1.183	$a/6.324$	[139]	630	082
8	1.000	1.291	$a/4.250$	[135]	422	242

关。因此可以计算适用于任意常数 a 的、由比值 r_2/r_1 、 r_3/r_1 求 $h_1k_1l_1$ 、 $h_2k_2l_2$ 和膜面法线指数 $[uvw]$ 的数表。其中面心立方的部分数表如表 5-4 所列；完整的数表则见附录四。

表中 $d_{h_1k_1l_1}$ 表示相应于 r_1 的 $(h_1k_1l_1)$ 的面间距，其它各栏的意义无须说明。

〔例 2〕 试标定如图 5-5(a) 所示的某高温合金奥氏体基体的电子衍射谱。

在图 5-5(a) 中选取 $OACB$ 特征基本平行四边形，测得 r_1 (OA) = 10.7 mm, r_2 (OB) = r_3 (AB) = 17.66 mm, 故得 $r_2/r_1 = 1.650$, $r_3/r_1 = 1.650$ 。查附录四中“面心立方特征平行四边形表”，

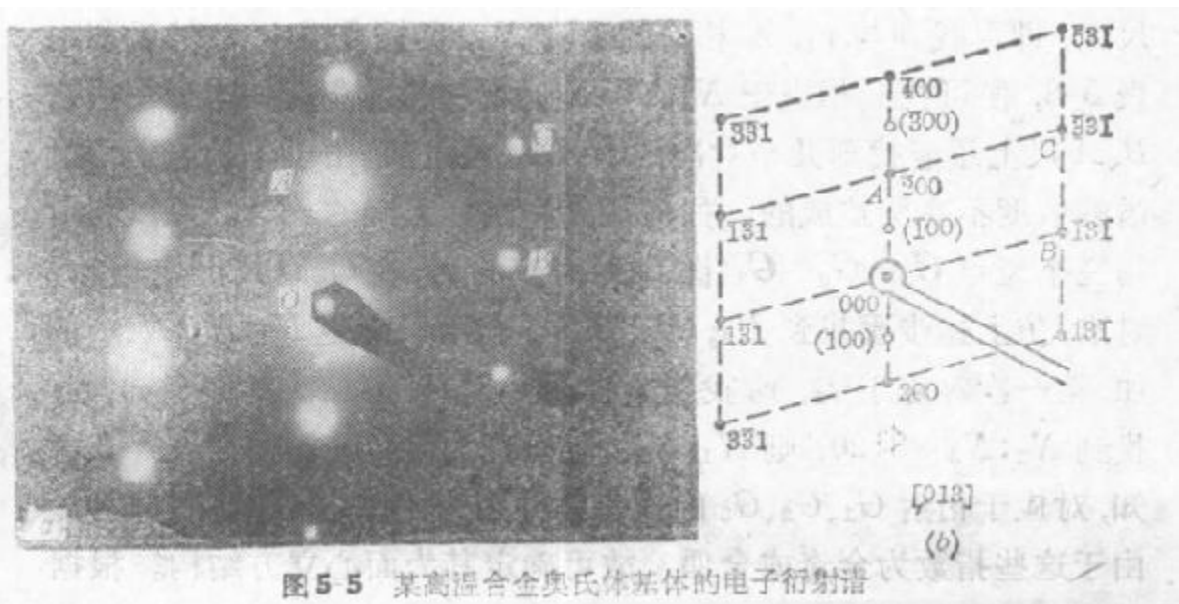


图 5-5 某高温合金奥氏体基体的电子衍射谱

上述比值,基本与序号 53 数据相符,可试标 A_1 ($\bar{2}00$), B_1 ($\bar{1}3\bar{1}$); $[uvw]$; $[01\bar{3}]$ 。利用操作条件下的仪器常数 $L\lambda = 19.10 \text{ mm } \text{\AA}$, 求出 d_A 即 $d_{r1} = 19.10/10.7 = 1.785 \text{ \AA}$, 与表中该栏内 $d_{r1} = a/2.000 = 3.570/2.000 = 1.780 \text{ \AA}$, 符合良好,可见上述指数标定是适宜的。全部标注如图 5-5(b)。

利用公式(5-9),计算 $\angle AOB = 72.45^\circ$, 与从图 5-5(a) 中得到的测量值也完全相符。图中强斑点之间的弱斑点, $100, \bar{1}00, 300, \dots$ 等为超结构斑点。

特征平行四边形分析法,对于其它晶系,原理上也是适用的。不过它们不象立方晶系那样存在如公式(5-10)那样的简单关系,制成的数表,都与特定的点阵常数有关,因此只能相应于一定的点阵常数,制出一套适用于特定物质的特征平行四边形数表,而无法制出通用的数表。

三、计算尺标定法^[8]

(5-10)式表明,立方晶系有这样的特点:不同衍射点到透射点的距离之比,等于相应衍射点指数平方和的平方根之比,且与点阵常数 a 无关。这正好可以利用计算尺的下述性质: A 、 B 尺的刻度,等于 C 、 D 尺刻度相应数值的平方。故可使从底片上测得的 r_1, r_2 数值分别落在 C 、 D 尺上,移动滑尺,使两者正好对准,这相当于在此两尺上的某处有 $\sqrt{N_1}$ 正好对准 $\sqrt{N_2}$, 而在它相对的 B 、 A 尺上,即可找到与 r_1, r_2 相应的 N_1, N_2 , 如图 5-6(a)。然后利用表 5-3, 便可找到相应于 N_1, N_2 的晶面指数。但是,这时往往在 B 、 A 尺上还能找到几个对准的 $N_1:N_2$ 对,这是由于单晶电子衍射谱的精度不高所造成的。如何从其中选择正确的一对,可以利用第三个斑点 $G_3 = G_2 - G_1$ (图 5-4) 对应的 r_3 , 在 C 、 D 尺上使 r_1, r_3 对准,仿上述步骤找到 N_1, N_3 , 这样,就可以确定 $N_1:N_2:N_3$ 。例如,第一次对应于 r_1, r_2 找到 $N_1:N_2 = 3:19$; 第二次对应于 r_1, r_3 , 找到 $N_1:N_3 = 3:20$, 则 N_1, N_2, N_3 分别为 3、19、20。从表 5-3 可知,对应于衍射 G_1, G_2, G_3 的面指数分别为 $\{111\}$ 、 $\{331\}$ 和 $\{420\}$ 。由于这些指数为全奇或全偶,故可确定其为面心立方结构。根据

G_1, G_2, G_3 之间的夹角, 不难决定指数的正负号。

采用上述方法标定电子衍射谱, 需进行多次运算, 颇不方便, 为此可将(5-8)式写成如下形式:

$$\frac{\frac{d_1}{1}}{\sqrt{N_1}} = \frac{\frac{d_2}{1}}{\sqrt{N_2}} = \frac{\frac{d_3}{1}}{\sqrt{N_3}} = \dots = a \quad (5-11)$$

这时, 先通过公式 $rd = L\lambda$, 求出一系列 d 值: $d_1, d_2, d_3, \dots$, 然后将 $B-C$ 尺倒置插入[如图 5-6(b)], 并在 D 尺上找到一系列 d 值 $d_1, d_2, d_3, \dots$, 移动已经倒置的 B 尺, 使 D 尺上的 $d_1, d_2, d_3, \dots$ 等对准 B 尺上的一系列整数值, 它们就是对应于 $d_1, d_2, d_3, \dots$ 等的 $N_1, N_2, N_3, \dots$ 。在 C 尺上的对应处就是 $\sqrt{N_1}, \sqrt{N_2}, \sqrt{N_3}, \dots$ 。并且在 B 尺端部对准的 D 尺处, 直接读出点阵常数 a 。有了这些 $N_1, N_2, N_3, \dots$ 数列, 同样可借助于表 5-3, 确定各斑点的指数。

但由于电子衍射底片斑点距离 r 的测量误差和计算尺刻度本身的误差, 使得运用此法获得的结果, 往往有较大的不确定性, 故实际工作中应用不多。

四、利用标准衍射图谱进行标定^[6]

我们用第四章 § 4-3 所述方法, 并利用第七章中所推导的高

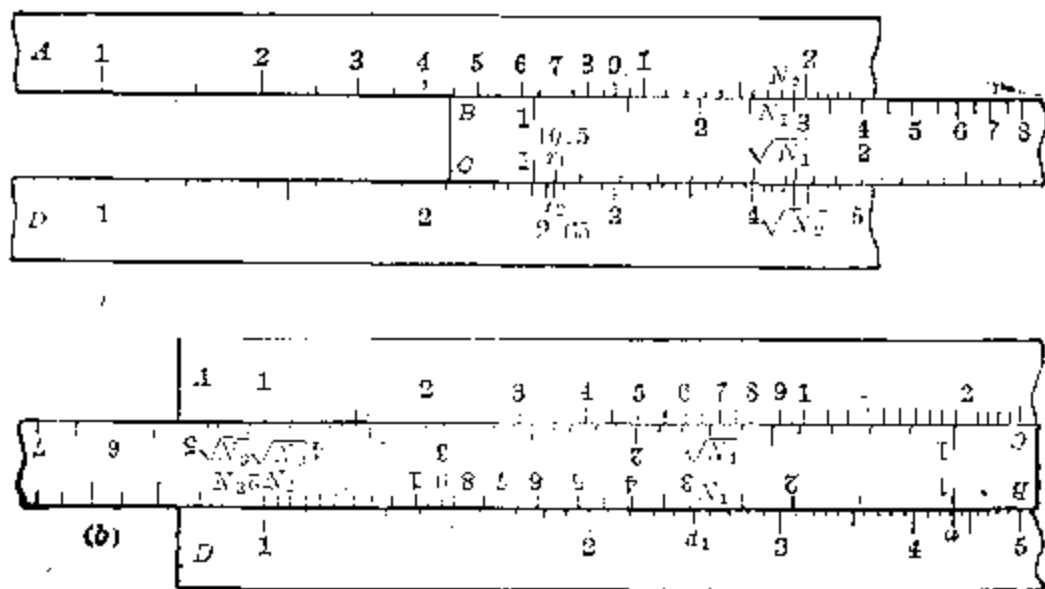


图 5-6 利用计算尺标定立方晶系的电子衍射谱

阶劳厄区斑点在零层倒易面上投影的公式，计算并绘制了一整套面心立方、体心立方和 $c/a=1.633$ 时的六方晶系的标准衍射图谱，它包括了常见的较低指数倒易面的标准图。除零阶劳厄斑点外，还画出了上一层倒易面上的倒易点在零层上的投影位置。

标定衍射谱时，只需测量两个低指数斑点^{*}到透射点的距离，并计算其比值，同时测量它们之间的夹角，然后在标准图谱中找出比值和夹角均相近者，试标指数。当然，仍须用已知仪器常数 $L\lambda$ ，计算若干低指数反射的面间距，再行校验其是否与设定物质的相应指数的面间距相符。

附录六收入了我们绘制计算的面心立方、体心立方和 $c/a=1.633$ 时六方晶系的常见倒易面零阶和高阶斑点重迭图形，可供标定时对照参考[注]。

〔例3〕图5-7(a)是从某合金钢奥氏体所获得的电子衍射谱，试标定其指数。

测量: OA

$$r_{OA}=17.23\text{mm}$$

OB

$$r_{OB}=14.69\text{mm}$$

$$r_{OA}/r_{OB}=1.172$$

$$\angle AOB=64.5^\circ$$

与附录六(一)各图对照，此衍射谱与(114)*标准图相近，且 r 比值和角度均符合良好。可将 A 点标 $\overline{3}11$ ， B 点标 $\overline{2}20$ ，晶带轴方向应是 $[114]$ ，衍射谱标注如图5-7(b)。用仪器常数 $18.63\text{mm}\hat{\text{A}}$ ，并根据 $rd=L\lambda$ 分别计算其 d 值：

$$d_{OA}=\frac{18.63}{17.23}=1.081\hat{\text{A}}=d_{\overline{3}11}$$

〔注〕*金属 X 射线衍射与电子显微分析技术》(1980,冶金工业出版社)，书中电镜部分，附录 13(c) 转抄了本书作者曾在文献[6]中发表的六方晶系($c/a=1.633$)高阶零阶劳厄区重迭图谱，该书转录时，没有说明是在 $c/a=1.633$ 条件下绘制的，请读者注意，此图谱不适用于一切六方晶系。

随 A, B 指数的不同搭配, O 点指数也应与它们互洽, 其结果是晶带轴指数也不是唯一的了(当然还是同一晶向族)。

对于物相鉴定, 上述各种标法都是可以的, 但进行衍射分析时, 如在同一视场获得两张衍射照片, 就应该考虑两个衍射谱的互洽, 这是不言而喻的。

当标定 $h_1k_1l_1$ 和 $h_2k_2l_2$ 后, 如何决定 $[uvw]$, 不同作者有不同的习惯, 但是同一作者前后各次所标定的衍射谱, 必须保持一致的标法, 以避免混乱。我们建议采取右手逆时针方向, 求 $G_1 \times G_2 = [uvw]$ (参看图 5-4) 为好, 这样晶带轴方向总是从图面向上。

2. 180° 不唯一性问题

参见图 5-8 所示的例子:

采用右手逆时针旋转法则, 如图(c)和(d), 有两种互相倒转 180° 的标定方式, 它们具有同一晶带轴指数 $[10\bar{1}]$, 而实际上(c)、(d)两种标法对应着实际晶体的两种不同取向(a)、(b)。

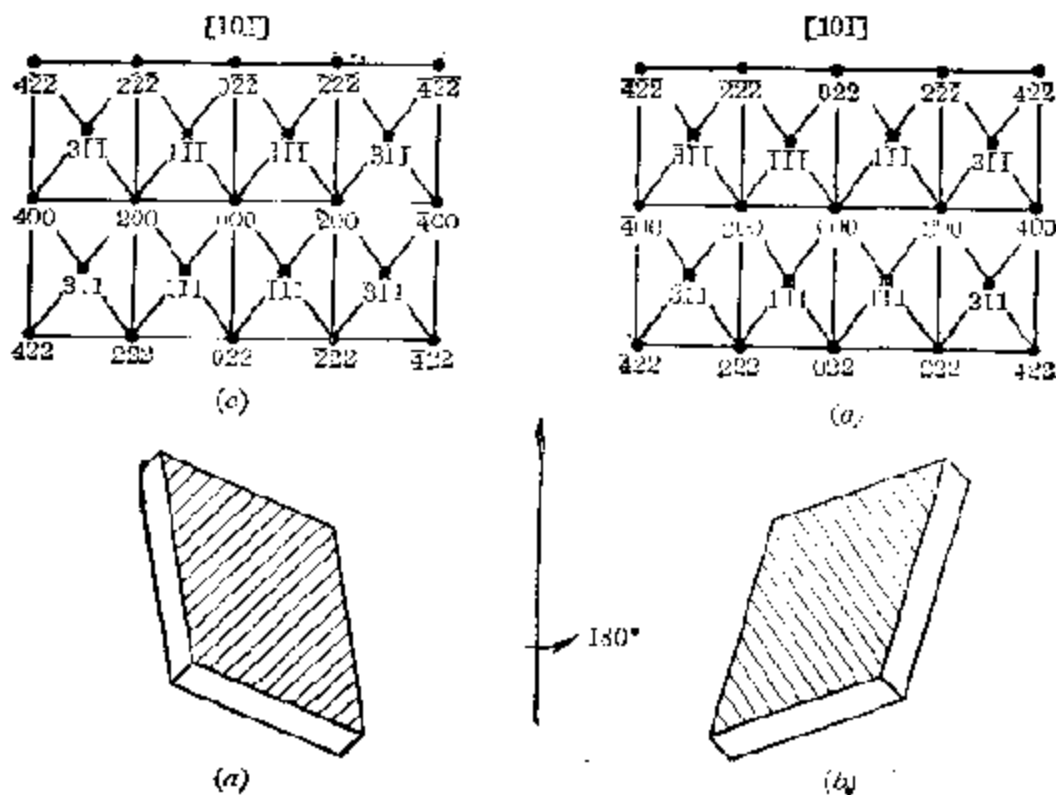


图 5-8 倒易点阵平面的二次旋转对称性, 180° 不唯一性

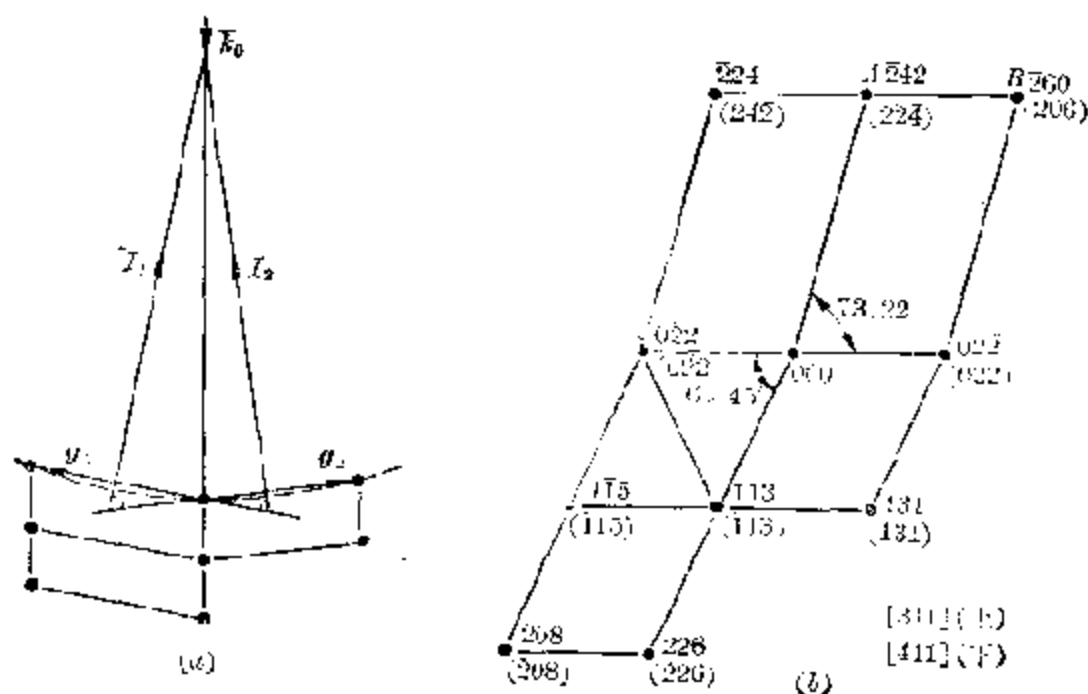
出现这种 180° 不唯一性,正如文献[8]指出的,是由于倒易点阵平面(即电子衍射谱)显示二次旋转对称性所引起的,因此无法区别 $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ 与 (hkl) 。如果 $[uvw]$ 本身就是二次旋转对称轴,则对 hkl 与 $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ 没有必要区别。一般情况下, hkl 和 $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ 两套指数所代表的是两种不同取向,在作衍射分析时必须加以区别。例如测定第二相与基体取向的关系,以及测定布氏矢量和位错环指向(sense)等,就不能不予以考虑。

如何解决 180° 不唯一性问题,唯一地标定一张衍射底片,可以借助双晶带电子衍射谱和倾斜技术。现分述如下:

(1) 利用双晶带电子衍射谱

由于反射球具有一定的曲率,电镜中的试样,在沿电子束方向很薄,倒易点变成倒易杆,以致有可能在一张衍射底片上同时出现相邻两个晶带的衍射谱,如图 5-9(a)。

由于 $[311]$ 和 $[411]$ 之间仅有 5.77° 夹角,加以倒易点拉长,使底片上同时获得这两个晶带的衍射谱如图 5-9(b)。令 g_1 , g_2 分别表示两个晶带 I_1 和 I_2 中满足布拉格条件的倒易矢量,则应有 $g_2 \cdot I_1 > 0$, $g_1 \cdot I_2 > 0$; 即 g_2 与 I_1 , g_1 与 I_2 的夹角均应小于 90° 。利



5 9 双晶带电子衍射谱的形成

用这个性质,可以唯一地标定这两个晶带的衍射谱。

这两个晶带的衍射谱可有两种标法,其指数分别用 hkl 和 (hkl) 表示。但后者满足 $g_2 \cdot I_1 > 0$ 和 $g_1 \cdot I_2 > 0$ 的条件,而且当 $[311]$ 的 A 点标为 $(2\bar{2}4)$ 时,在其反方向 180° 处有与 $(\bar{2}24)$ 接近的 C 点 $(\bar{2}26)$; 同样 $[311]$ 的 B 点 $(20\bar{6})$, 在其反方向 180° 的 $[411]$ 晶带,也有与 (206) 接近的 D 点 (208) 。由此可以肯定,图中加括号一套指数的标定是正确的,排除了 180° 不唯一性。

真正的试样膜面法线方向,既不是 $[311]$,也不是 $[411]$,而是在 $[311]$ 与 $[411]$ 之间。

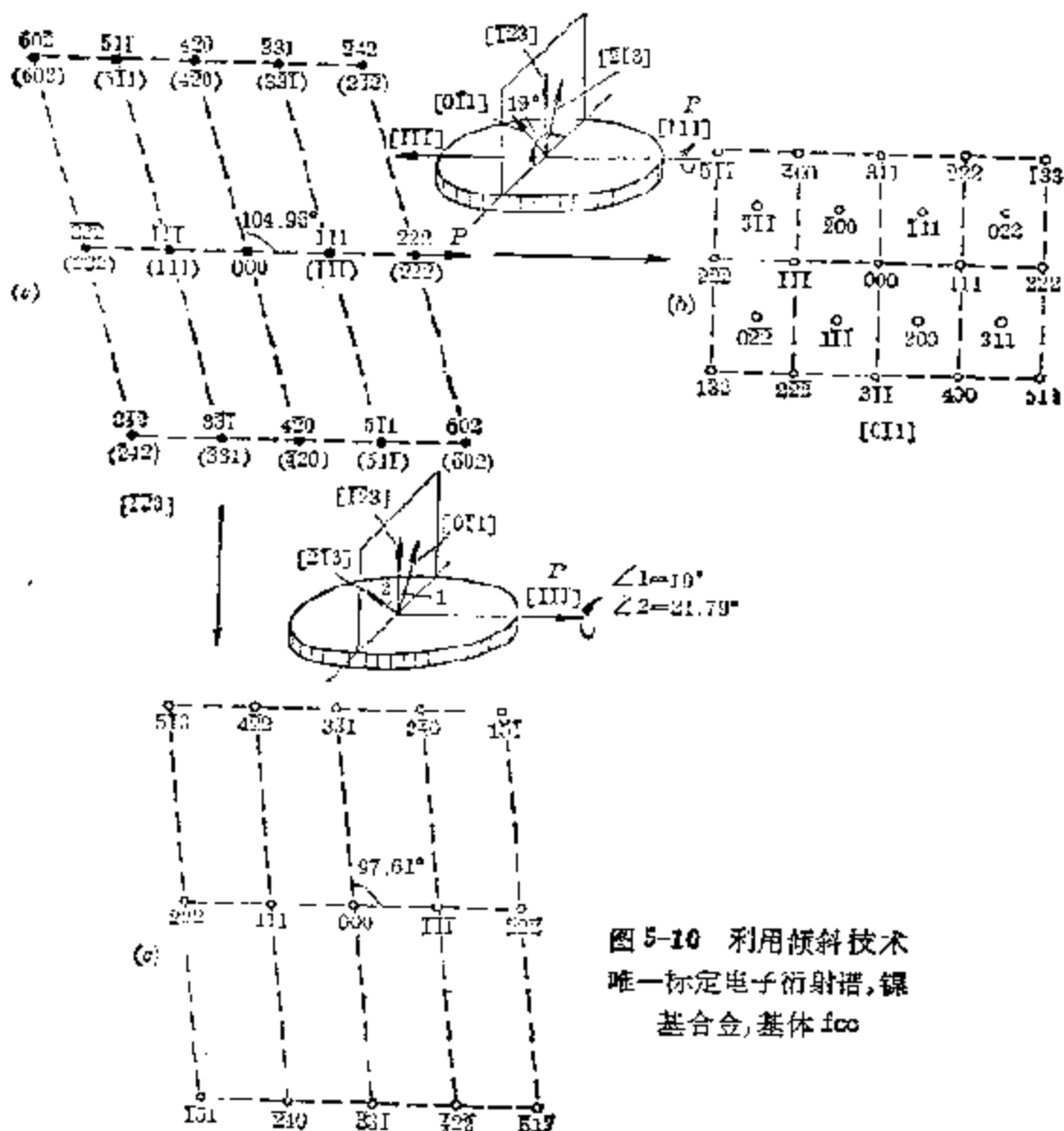


图 5-10 利用倾斜技术
唯一标定电子衍射谱,镍
基合金,基体 fcc

(2) 利用倾斜技术唯一标定衍射谱

设对某镍基合金奥氏体进行电子衍射, 得到如图 5-10(a) 所示的衍射谱, 对此, 可以有两种指标化方式, 分别记为 hkl 和 (hkl) 。这两种标法, 晶带轴均为 $[\bar{1}23]$, 那么哪一种标法是正确的呢?

以倒易矢 P 为轴倾斜 19° , 得到了新的 $[011]$ 衍射谱, 这是第一套 hkl 标法, 以 $[111]$ 为轴顺时针方向倾斜 19° 的必然结果。

如果是第二套 (hkl) 标法, 即令 P 轴为 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, 则根据计算, 以它为轴倾斜 19° , 应得到类似原衍射谱那样的斑点排列, 如图 (c), 晶带轴为 $[2\bar{1}3]$ 。但是实际上以 P 轴顺时针方向倾斜 19° 后, 得到的是图 (b) 而不是 (c), 可见第一套 hkl 标法是正确的, 排除了一种 (hkl) 标法的可能性。

此外, 利用菊池线, 也可以帮助排除 180° 任意性。

3. 等效指数不唯一性

高对称性的立方结构中, 其衍射花样可能在某些高指数取向出现下述情况: 一套斑点可以有两种完全不同的标定方式, 而它们的晶带轴指数, 并非属于同一晶向族。说明这两种标定方式只有一种是正确的, 要求我们加以鉴别。

如图 5-11, 这套斑点既可以标定为 $[\bar{1}28]$ 晶带, 也可以标为 $[247]$ 晶带。这主要由于有些高指数晶面, 两者指数完全不同, 并非同一面系, 却有相同的面间距。例如: $d_{355} = d_{173}$; $d_{352} = d_{611}$; $d_{506} = d_{420}$; $d_{510} = d_{421}$; $d_{511} = d_{323}$; $d_{520} = d_{422}$ 。两晶面的指数平方和都是相等的, 因此它们到中心斑点的距离也都相等^[11, 12]。

消除这种不唯一性的原理同上。即假定第一套是正确的, 并事先计算一下, 再沿某已知晶向倾斜一已知角, 如得到的倒易面与计算的倒易面相同, 则说明这一套标法是正确的, 反之是不正确的。

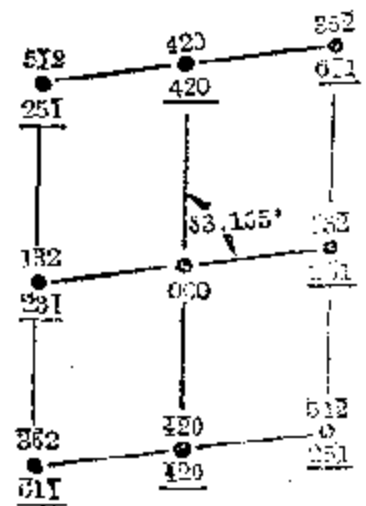


图 5-11 高指数晶带衍射谱

衍射谱标法者
 $[uvw]: [247]$;
 指数下有横线者
 $[uvw]: [\bar{1}28]$

还有一种鉴别方法, 就是利用高阶劳厄斑点的位置。因为不同指数的零层倒易面斑点可能完全相重, 而高阶劳厄斑点在零层上的投影位置, 一般是不同的, 详见第七章讨论。

同一花样具有不同晶带轴指数的衍射谱如下:

fcc: $[\bar{7}6\bar{5}]$ 与 $[25\bar{9}]$, $[2, \bar{1}, 13]$ 与 $[\bar{10}, 5, 7]$, $[\bar{2}59]$ 与 $[567]$;

bcc: $[\bar{1}28]$ 与 $[247]$, $[\bar{5}, 7, 11]$ 与 $[\bar{1}, 5, 13]$, $[7, 9, 13]$ 与 $[3, 11, 13]$ 。

类似这种不唯一性, 也可能出现在非立方晶系中。如正交晶系的渗碳体, 其单胞较大, 在某些高指数反射下, 面间距差别甚小, 标定有一定困难, 故一般应尽可能利用低指数反射进行标定。同时应尽可能提高 $L\lambda$ 数据的精确度。此外, 倾动试样, 获得同一区域另一取向的衍射谱, 也有助于确定前一个不能肯定的晶带轴指数。

4. 利用反射出现规律和对称性特征进行分析

相对来说, 立方晶系电子衍射谱的标定比较简单。尤其在用金属薄膜进行衍射工作时, 有些低指数倒易面是常见的, 如立方晶系中的 $\langle 100 \rangle^*$, $\langle 110 \rangle^*$, $\langle 111 \rangle^*$, $\langle 210 \rangle^*$, $\langle 211 \rangle^*$, $\langle 221 \rangle^*$, $\langle 311 \rangle^*$ 等。因此记住这些常见倒易面的斑点分布规律(例如基本重复单元的边长比和夹角), 有助于较快标定指数。在现场进行衍射观察时, 快速判断倒易面指数是十分重要的。此外, 标定时, 还应有意识地利用衍射谱的对称性进行分析。正如第四章 § 4-2 所指出的, 面心立方的倒易点阵是体心立方, 体心立方的倒易点阵是面心立方, 因此立方对称性在倒空间被保留下来, 且倒易单胞基矢与正晶格单胞基矢同向, 正交的晶面和晶向具有相同的指数。若衍射谱呈现四次对称性, 则电子束方向一定平行于晶体的 $\langle 001 \rangle$; 呈现三次对称性, 电子束方向一定平行于晶体的 $\langle 111 \rangle$ 。但是当衍射谱具有二次对称性时, 情况就不那么肯定。尽管如附录六(一)中的 $\langle 110 \rangle^*$, $\langle 210 \rangle^*$, $\langle 211 \rangle^*$ 等倒易面, 由于具有二次对称性, 衍射谱中包含着 $\langle 001 \rangle$ 、 $\langle 110 \rangle$ 方向(或仅含两者之一); 但也有如 $\langle 421 \rangle^*$ 那样的情况, 虽有二次对称性, 却不包含 $\langle 001 \rangle$ 或 $\langle 110 \rangle$ 。反之, 如衍射谱

不具备二次对称性,却可以肯定这个倒易截面中,既不含有 $\langle 001 \rangle$,也不含有 $\langle 110 \rangle$ 方向。从而可以判断晶面法线的指数应有 $u \neq v \neq w \neq 0$,若此不等式中有任一式不成立,就一定含有 $\langle 001 \rangle$ 或 $\langle 110 \rangle$ 方向。例如 $(228)^*$ 倒易面就是这样,因为 $u=v=2$,又不具有二次对称性,所以谱中包含了 $[1\bar{1}0]$ 方向。详见附录六中(一)。

§5-4 六方晶系衍射谱的标定

一、一般讨论

在物相分析中,遇见最多的除立方晶系外,就要算六方晶系了。本书§4-5已经指出,描述六方晶系有三指数(密勒)法和四指数(密勒-布喇菲)法。前者六次旋转对称轴(c 轴)垂直于另两个互成 120° 的 a_1 和 a_2 轴,后者 c 轴垂直于三个互成 120° 的 a_1 , a_2 和 a_3 轴。六方晶系有两个单胞参数 a 和 c (参见图4-7)。

晶面间距的公式是:

$$\begin{aligned}\frac{1}{d^2} &= \frac{4}{3} \cdot \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} = (h^2 + hk + k^2)a^{*2} + l^2c^{*2} \\ &= Ha^{*2} + l^2c^{*2}\end{aligned}\quad (5-12)$$

上式中 $H = h^2 + hk + k^2$ 。 H 可取1, 3, 4, 7, 9, 12, 13, 16, 19, 21, ... 等等。这个数列中任意一个数乘以3就得另一个数,如 $3 \times 3 = 9$; $7 \times 3 = 21$; ...。数列中出现3和7是六方晶系的低指数特征值。如 $H=3$,且已知晶体不属于立方晶系,则可按六方晶系试标。

由(5-12)式,知六方晶系倒易矢量长度是:

$$g_{hkl} = (Ha^{*2} + l^2c^{*2})^{1/2} \quad (5-13)$$

晶面法线(即倒易矢量)之间的夹角 φ 的余弦是:

$$\begin{aligned}\cos \varphi &= \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + 1/2(h_1k_2 + h_2k_1) + \frac{3a^2l_1l_2}{4c^2}}{\left[\left(h_1^2 + k_1^2 + k_1h_1 + \frac{3a^2l_1^2}{4c^2} \right) \left(h_2^2 + k_2^2 + h_2k_2 + \frac{3a^2l_2^2}{4c^2} \right) \right]^{1/2}} \\ &= \frac{[h_1h_2 + k_1k_2 + 1/2(h_1k_2 + h_2k_1)]a^{*2} + l_1l_2 \cdot c^{*2}}{g_1 \cdot g_2}\end{aligned}\quad (5-14)$$

上列各式, 均有 $a^* = 2/(a\sqrt{3})$, $c^* = 1/c$ (见表 4-2)。

由(5-12)式可知, 若 l 相同(正 l 或负 l 均可), h 与 k 两指数可以互换, 且互换后, d 值不变, 仍属于同一面族。例如 122 和 242 、 $\bar{2}42$ 属于同一面族。指标化时, 可以利用这个规律调整正负号, 使其符合二倒易矢间的夹角关系。

可以将 H 表示为:

$$\begin{aligned} H &= l^2 + hk + k^2 = h^2 - (\bar{h} + \bar{k})k \\ &= (\bar{h} + \bar{k})^2 - h\bar{k} - k^2 = (\bar{h} + \bar{k})h \end{aligned}$$

由此可见, 在 l 相同时, h 与 $(\bar{h} + \bar{k})$ 等价; h 相同时, k 与 $(\bar{h} + \bar{k})$ 等价。即 (hkl) 与 $(h, \bar{h} + \bar{k}, l)$, $(\bar{h} + \bar{k}, k, l)$ 属同一面族。亦即 $h, k, -(h+k)$ 三者可以互换。例如图 4-7 中六个柱面的指数: (010) , (100) , $(\bar{1}10)$, $(0\bar{1}0)$, $(1\bar{0}0)$, $(1\bar{1}0)$ 属于同一面族, 它们的前两个指数, 是由 0, 1, 1 三个指数两两互换而来。

晶向指数的互换关系, 也可作类似讨论。由表 4-2, 六方晶系的晶向长度是:

$$r^2 = a^2(u^2 - uv + v^2) + c^2w^2 = a^2 \cdot M + c^2 \cdot w^2 \quad (5-15)$$

如 w 的绝对值相同, 则 u 与 v 两指数互换后, 只要满足关系: $M = u^2 - uv + v^2$, 前后晶向指数仍属同一晶向族。

显然, M 可写成:

$$\begin{aligned} u^2 + v(v-u) &= (v-u)^2 + uv \\ v^2 + u(u-v) &= (u-v)^2 + uv \end{aligned}$$

可见, 前两个指数, $u, v; u, u-v; v-u, v$ 三者等价。即 $[u, v, w]$, $[u, u-v, w]$ 和 $[v-u, v, w]$ 属于同一晶向族。在图 4-7 中, $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[110]$ 、 $[100]$ 、 $[0\bar{1}0]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 属于同一晶向族。 $[210]$ 、 $[120]$ 、 $[\bar{1}10]$ 、 $[2\bar{1}0]$ 、 $[\bar{1}20]$ 、 $[1\bar{1}0]$, 属于同一晶向族。

考虑到 h, k 或 u, v 顺序可以互换, 符号也可同时反向, 而且 l 和 w 正负值等值, 可见 hkl , uvw 共有 24 种组合。即一般情况下, 一个六方晶系衍射谱有 24 种标法。

表 5-5⁽¹²⁾ 列出同一指数族的 h 与 k 和 u 与 v 互换关系, 可供标定六方晶系衍射谱时调整前两个指数(h 和 k , u 和 v)之用。

表 5-5 六方晶系同族晶面、晶向指数 h, k
和 u, v 指数互换表^[13]

$h^2 + hk + k^2$ ÷ 2 式	h, k 互 换 规 律						u, v 互换规律		
$u = \frac{2h}{h+k}, v = \frac{2k}{h+k}$	h, k	$h, \bar{k}$ $(\bar{k} + \bar{k})$	$(\bar{h} + \bar{k}), k$	$k, (\bar{h} + \bar{k})$	$(\bar{k} + \bar{k}), h$	k, h	u, v	$(v-u), v$	$u, (u-v)$
1	0, 1	0, $\bar{1}$	$\bar{1}, 1$	1, $\bar{1}$	$\bar{1}, 0$	1, 0	0, 1	1, 1	0, $\bar{1}$
1	1, 1	1, $\bar{1}$	0, 1	1, $\bar{2}$	2, 1	1, 1	1, 2	1, 2	1, $\bar{1}$
4	0, 2	0, $\bar{2}$	2, 2	2, $\bar{2}$	2, 0	2, 0	0, 2	2, 2	0, $\bar{2}$
7	1, 2	1, $\bar{2}$	2, 2	2, $\bar{3}$	3, 1	2, 1	1, 3	2, 3	1, $\bar{2}$
9	0, 3	0, $\bar{3}$	3, 3	3, $\bar{3}$	3, 0	3, 0	0, 3	3, 3	0, $\bar{3}$
12	2, 2	2, $\bar{4}$	4, 2	2, $\bar{4}$	4, 2	2, 2	2, 4	2, 4	2, $\bar{2}$
13	1, 3	1, $\bar{4}$	4, 3	3, $\bar{4}$	4, 1	3, 1	1, 4	3, 4	1, $\bar{3}$
16	0, 4	0, $\bar{4}$	4, 4	4, $\bar{4}$	4, 0	4, 0	0, 4	4, 4	0, $\bar{4}$
19	2, 3	2, $\bar{5}$	5, 3	3, $\bar{5}$	5, 2	3, 2	2, 5	3, 5	2, $\bar{3}$
21	1, 4	1, $\bar{5}$	5, 4	4, $\bar{5}$	5, 1	4, 1	1, 5	4, 5	1, $\bar{4}$
25	0, 5	0, $\bar{5}$	5, 5	5, $\bar{5}$	5, 0	5, 0	0, 5	5, 5	0, $\bar{5}$
27	3, 3	3, $\bar{6}$	6, 3	3, $\bar{6}$	6, 3	3, 3	3, 6	3, 6	3, $\bar{3}$
28	2, 4	2, $\bar{6}$	4, 4	4, $\bar{6}$	6, 2	4, 2	2, 6	4, 6	2, $\bar{4}$
31	1, 5	1, $\bar{6}$	6, 5	5, $\bar{6}$	6, 1	5, 1	1, 6	5, 6	1, $\bar{5}$
36	0, 6	0, $\bar{6}$	6, 6	6, $\bar{6}$	6, 0	6, 0	0, 6	6, 6	0, $\bar{6}$
37	3, 4	3, $\bar{7}$	7, 4	4, $\bar{7}$	7, 3	4, 3	3, 7	4, 7	3, $\bar{4}$
39	2, 5	2, $\bar{7}$	7, 5	5, $\bar{7}$	7, 2	5, 2	2, 7	5, 7	2, $\bar{5}$
43	1, 6	1, $\bar{7}$	7, 6	6, $\bar{7}$	7, 1	6, 1	1, 7	6, 7	1, $\bar{6}$
48	4, 4	4, $\bar{8}$	8, 4	4, $\bar{8}$	8, 4	4, 4	4, 8	4, 8	4, $\bar{4}$
49	0, 7	0, $\bar{7}$	7, 7	7, $\bar{7}$	7, 0	7, 0	0, 7	7, 7	0, $\bar{7}$
	3, 5	3, $\bar{8}$	8, 5	5, $\bar{8}$	8, 3	5, 3	3, 8	5, 8	3, $\bar{5}$

上面我们概述了六方晶系晶体对称性的一般特征和指数互换规律, 这些知识包括 § 4-5 中谈到的若干问题, 都是十分重要的。明确这些关系和概念, 对于避免在六方晶系分析中可能出现的混乱和错误是有益的。

二、六方晶系衍射谱的标定方法

1. 相应于不同轴比(c/a)的特定物质制定一个表格, 再查表标定。

例如表 5-6, 是 $\eta\text{-Ni}_3\text{Ti}$ ($c_0=8.306 \text{ \AA}$, $a_0=5.1055 \text{ \AA}$) 衍射谱标定数据表的一部分。

表 5-6 $\eta\text{-Ni}_3\text{Ti}$ ($c_0=8.306 \text{ \AA}$, $a_0=5.1055 \text{ \AA}$)
衍射谱标定数据表(部分)

序号	r_2/r_1	r_3/r_1	d_{hkl}	uvw	h_1^2/h_2^2	h_1^2/h_3^2
1	1.0000	1.0000	4.4174	101	100	010
2	1.0000	1.2891	3.9600	111	101	011
3	1.0000	1.2891	3.9600	121	101	111
4	1.0000	1.1862	2.0258	221	012	102
5	1.0000	1.1862	3.0258	201	112	102
6	1.0181	1.3276	2.1733	214	122	201
7	1.0181	1.3276	2.1733	204	122	201
8	1.0181	1.3276	2.1733	204	112	221
9	1.0593	1.2974	2.4381	211	111	013
10	1.0461	1.0461	2.5505	113	110	111
11	1.0461	1.0461	2.5505	123	110	111
12	1.0724	1.0990	2.3149	512	113	112
13	1.0724	1.2382	2.3459	531	013	112
14	1.0872	1.0872	2.5505	331	110	013
15	1.0872	1.2774	2.5505	332	110	113
16	1.1819	1.2609	2.4381	341	111	212

[注] 本表可用电子计算机计算, 见文献 [10]。

表中 r_1 , r_2 , r_3 , d_{hkl} 的意义和规定, 与 § 5-3 所述相同, 查表的标定方法也相同。

2. 借助于通用的《六方晶系电子衍射谱标定数据表》, 查表标定^[13,14]。

上述第一种方法的缺点是必须对应于特定物质, 先计算一套数表, 且它没有普适性。为此, 早在 1975 年, 我们曾用衍射谱基本重复单元的邻边边长比和相应倒易矢夹角为参数, 对不同轴比 (c/a) 的六方晶系编制过一套数表^[23] (《金属 X 射线衍射和电子显微分析技术》一书的电镜部分, 也曾经引用此表), 但此表仍存在一定缺点, 实际应用时还会遇到许多困难。因此我们在 1980 年又对数表的计算方法加以改进, 并用电子计算机计算了可供实用的、适用于各种轴比的《六方晶系电子衍射谱标定数据表》^[14]。它包括了常见的 200 个倒易面, 轴比从 0.5 到 3.0。利用它标定六方晶系衍射谱, 免去了烦琐的运算, 提高了效率。曾在一些单位试用, 效果显著。

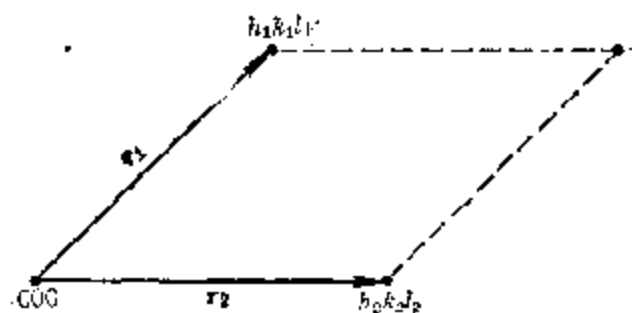


图 5-12 计算《六方晶系电子衍射谱标定数据表》的基本重复单元

如图 5-12, 设靠近透射斑点 (000) 附近有两个低指斑点 ($h_1k_1l_1$), ($h_2k_2l_2$), 规定以它们为邻边组成的平行四边形中, 不含有其它倒易点。并设它们到透射点的距离分别为 r_1, r_2 , 相应的晶面间距分别为 d_1, d_2 。由 $\frac{r}{L\lambda} = \frac{1}{d}$ 及 $\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3} \cdot \frac{(h^2 + hk + k^2)}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$, 有

$$\frac{r_1^2}{(L\lambda)^2} = \frac{1}{d_1^2} = \frac{4}{3} \cdot \frac{(h_1^2 + h_1k_1 + k_1^2)}{a^2} + \frac{l_1^2}{c^2}$$

$$\frac{r_2^2}{(L\lambda)^2} = \frac{1}{d_2^2} = \frac{4}{3} \cdot \frac{(h_2^2 + h_2k_2 + k_2^2)}{a^2} + \frac{l_2^2}{c^2}$$

$$\therefore \frac{r_1}{r_2} = \left[\frac{4(c/a)^2(h_1^2 + h_1k_1 + k_1^2) + 3l_1^2}{4(c/a)^2(h_2^2 + h_2k_2 + k_2^2) + 3l_2^2} \right]^{1/2} \quad (5-16)$$

又, 二倒易矢之间的夹角的余弦是:

$$\cos \varphi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + 0.5(h_1k_2 + k_1h_2) + 3/4(c/a)^{-2}l_1l_2}{\left\{ \left[h_1^2 + k_1^2 + h_1k_1 + 3/4(c/a)^{-2}l_1^2 \right] \cdot \left[h_2^2 + k_2^2 + h_2k_2 + 3/4(c/a)^{-2}l_2^2 \right] \right\}^{1/2}} \quad (5-17)$$

(5-16)和(5-17)式便是计算通用数表的基本公式, 此数表的形式示例于表 5-7。

使用表 5-7 的方法如下: 在电子衍射谱上选定(000)附近两个低指数斑点, 测量相应倒易矢长度 r_1 及 r_2 , 及夹角 φ , 计算 r_1/r_2 , 然后根据被衍射物质的轴比(c/a), 在表中选取 r_1/r_2 和夹角 φ 符合 $\varphi_1, \dots, \varphi_6$ 之一者, 标定相应的 $h_1k_1l_1$ 和 $h_2k_2l_2$ 。例如夹角符合 φ_1 , 则两斑点标定为 $h_1k_1l_1, h_2k_2l_2$ 。夹角符合 φ_2 , 则分别标定为 $h_1, (\bar{h}_1+k_1), l_1, h_2k_2l_2$, 余类推。

表 5-7 六方晶系电子衍射谱标定数据表 $c/a=1.63$ 部分)^[1]

r_1/r_2	φ_1	φ_2	φ_3	φ_4	φ_5	φ_6	$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$	$h_3k_3l_3$
:	:	:	:	:	:	:	:	:	:
1.000	60.0	120.0	0.0	180.0	60.0	120.0	010	110	001
1.018	32.0	125.4	82.3	62.8	125.4	32.0	021	112	012
1.018	32.0	125.4	32.0	125.4	82.3	82.3	021	122	212
1.018	54.6	148.0	97.7	97.7	148.0	54.6	021	112	012
1.018	97.7	54.3	97.7	54.6	148.0	148.0	201	122	254
:	:	:	:	:	:	:	:	:	:
1.080	33.4	87.1	63.7	87.1	63.7	33.4	112	013	131
:	:	:	:	:	:	:	:	:	:
1.132	63.8	28.9	116.2	63.8	136.5	116.2	101	110	111
1.142	28.9	136.5	85.7	85.7	136.5	28.9	021	111	112
:	:	:	:	:	:	:	:	:	:

[注] 表中 $\varphi_1, \dots, \varphi_6$ 表示 $h_2k_2l_2$ 固定, 但 $h_1k_1l_1$ 中前两个指数分别取 $h_1, k_1; h_1, (\bar{h}_1+k_1); (\bar{h}_1+k_1), k_1; k_1, (\bar{h}_1+k_1); (\bar{h}_1+k_1), h_1; h_1, k_1$ 时 r_1 与 r_2 的夹角。

最后再根据仪器常数, 用公式 $rd = L\lambda$, 计算相应反射之 d_1, d_2 , 与该物相已知面间距进行校验, 即可最后肯定。

[例 4] 图 5-18 是从六方晶系 AlN 获得的电子衍射谱 (200 kV 下), 试标定其指数, AlN 的 $c/a=1.63$ 。

测量透射点附近的两个低指数点 P 和 Q, 测得 $OP=1.25$ mm, $OQ=1.1$ mm, 故 $OP/OQ=1.136$, $\angle POQ=64^\circ$ 。经与表

5-7 核对, 可将 P 点标为 $10\bar{1}$, Q 点标为 $1\bar{1}0$, $[uvw] = \bar{1}\bar{1}\bar{1}$ 。用金膜标定仪器常数 $L\lambda$, 计算出相应于 P 、 Q 点的面间距分别为 $2.370 \text{ \AA}$ 、 $2.606 \text{ \AA}$, 与已知 ASTM 卡片 AlN 的数据符合良好, 全部衍射谱标注如图所示。

此衍射谱亦见附录六之(三)。

3. 与标准衍射图谱对比进行标定[附录六]。

我们采用 § 4-3 所述方法, 绘制了一套《六方晶系标准衍射图谱》, 它包括了轴比(c/a)等于 1.633 的六方晶系若干个常见倒易面。这当然只适用于此特定轴比的情况, 但是不论轴比如何, 还是有一些共同的规律, 认识这些规律, 对于指数标定是有益的。

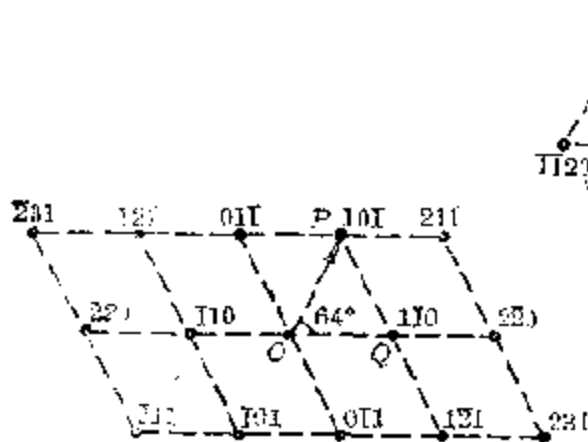


图 5-13 六方晶系 AlN 的电子衍射谱[111]

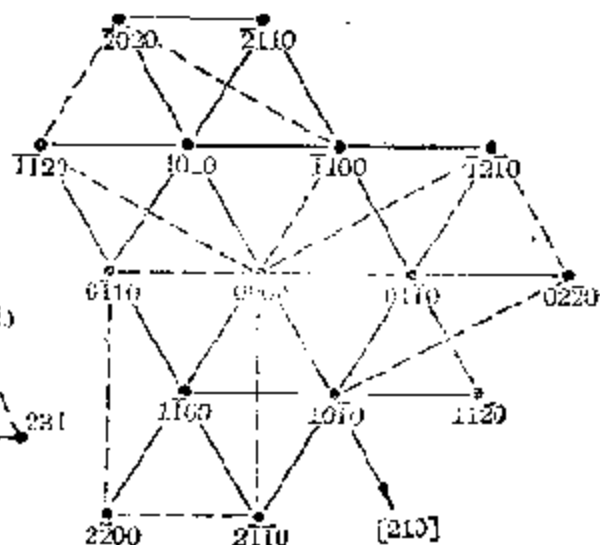


图 5-14 六方晶系 (0001)* 倒易面, 可取三种不同取向底心正交点阵

(1) 任何轴比下, $[0001]$ 晶带的点列均是六次对称排列。它与立方晶系 $[111]$ 晶带斑点排列完全相同, 若能通过其它途径否定该物相为立方晶系的可能性, 则可肯定该衍射谱必属六方晶系 $[0001]$ 晶带无疑。此倒易面各斑点指数, 各轴比下均相同。并可由最近的六个 $(hki0)$ 指数求出点阵常数 a 。

(2) 由于六方点阵又可视为底心正交点阵, 底的两正交边点阵常数分别为 $\sqrt{3}a$ 和 a ; 而底心正交点阵的倒易点阵仍是底心正交点阵。这就使在六方晶系衍射谱中, 矩形和有心矩形的斑点

排列屡见不鲜。如文献[8]所指出,在 $0 \leq u, v, w \leq 5$ 范围内的54个 $[u, v, w]$ 晶带衍射谱中,竟有34个 $[uv0]$ 、 $[0vw]$ 或 $[u\bar{u}w]$ 晶带衍射谱为矩形或有心矩形的阵点排列。如 $(001)^*$ 、 $(100)^*$ 、 $(201)^*$ 、 $(101)^*$ 、 $(102)^*$ 、 $(210)^*$ 、 $(211)^*$ 、 $(212)^*$ 、 $(214)^*$ 、 $(213)^*$ 、 $(301)^*$ 、 $(332)^*$ 、 $(423)^*$ 、 $(302)^*$ 、 $(810)^*$ 、 $(421)^*$ 、 $(601)^*$ 、 $(410)^*$ 、 $(223)^*$ 、 $(841)^*$ 、 $(843)^*$ 等即属于这一类型。

下面我们讨论这种矩形和有心矩形点列的构成情况。在图5-14的 $(0001)^*$ 倒易面中,可以看到底心点阵有三种不同取向的选择方式(如图中虚线所示)。最主要的点列是 0001 、 $10\bar{1}0$ 、 $11\bar{2}0$ 。其中 0002 点列(0001 点因 $F_{0001}=0$,消光)与 $(0001)^*$ 倒易面上的 $(h\bar{h}0)$ 阵点都构成矩形点列,如图5-15的 $(210)^*$,晶带轴指数总取 $[uv0]$ 形式。同样,根据晶带定律, $10\bar{1}0$ 点列与 $(h, 2\bar{h}, h, l)$ 点列正交,两者构成矩形或有心矩形,如图5-15中的 $(01\bar{2})^*$,晶带轴指数总取 $[0vw]$ 形式。也容易理解, $11\bar{2}0$ 总是与 $(h\bar{h}0l)$ 正交,两者构

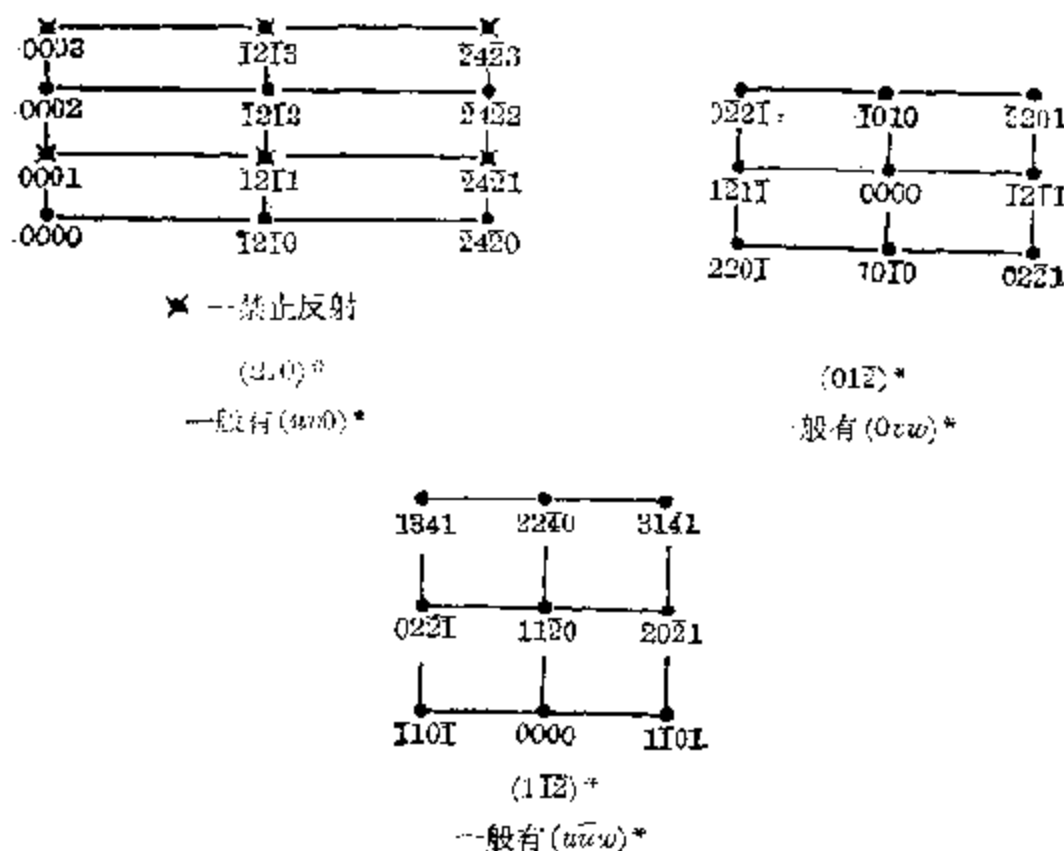


图5-15 六方密排点阵($c/a=1.633$),包括三个主要点列之一的矩形点列

成矩形或有心矩形,如图5-15中的 $(1\bar{1}2)^*$,晶带轴指数总取 $[uvw]$ 形式。

根据上述原则,读者可以自行作出许多这样的矩形或有心矩形点列的倒易面。

§ 5-5 四方晶系电子衍射谱的标定

四方晶系有两个点阵常数: a 和 c , 基面两个 a 轴互相垂直且长度相等, 它们又都与 c 轴正交。

四方晶系晶面间距公式是:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} = (h^2 + k^2)a^{*2} + l^2c^{*2} = Ma^{*2} + l^2c^{*2} \quad (5-18)$$

倒易矢量长度是:

$$g_{hkl} = (Ma^{*2} + l^2c^{*2})^{1/2} \quad (5-19)$$

晶面法线或倒易矢量间夹角的余弦是:

$$\cos \varphi = \frac{\frac{h_1h_2 + k_1k_2}{a^2} + \frac{l_1l_2}{c^2}}{\left[\left(\frac{h_1^2 + k_1^2}{a^2} + \frac{l_1^2}{c^2}\right)\left(\frac{h_2^2 + k_2^2}{a^2} + \frac{l_2^2}{c^2}\right)\right]^{1/2}} \quad (5-20)$$

(5-18), (5-19) 式中, 简单四方点阵, M 值可取: 1, 2, 4, 5, 8, 9, 10, 13, 16, 17, 18, 20, ... 等; 若为体心四方点阵, 上述数列中只取偶数, 而比值仍同上。注意此数列任意一值的两倍, 就得另一个 M 值, 例如 $2 \times 2 = 4$, $5 \times 2 = 10$, $13 \times 2 = 26$, ...。因此, 如果在测量值 $1/d^2$ 数列中, 明显看到 2 的因子, 则晶体可能具有四方对称性。

2, 5, 8 是四方晶系中 M 数列的低指数特征值。当倒易矢长度的平方 g_{hkl}^2 的比值出现 2、5、8, 且已肯定晶体不属于立方晶系, 则一定为四方晶系, 相应晶面指数应是 (hkl) 。

在指标化后, 可以利用 (5-18) 式取 $\{hk0\}$ 的各 $1/d^2$ 值求 a , 然后利用 $\{hkl\}$ 的各 $1/d^2$ 值求 c 。当不同的 $1/d^2$ 值, 但具有相同的

第三指数 l 时,有:

$$\frac{1}{d_1^2} - \frac{1}{d_2^2} = (M_1 - M_2)a^{*2}$$

故当 $M_1 - M_2 = 1$ 时, 可将一个 $1/d^2$ 值减去另一个 $1/d^2$ 值, 就得到 a^{*2} ; 或者, 当 $M_1 - M_2 =$ 某整数时, 就得到 a^{*2} 的整数倍。

又, 若不同的 $1/d^2$ 值具有相同的 M 值时, 则有:

$$\frac{1}{d_1^2} - \frac{1}{d_2^2} = (l_1^2 - l_2^2)c^{*2}$$

因此从一个 $1/d^2$ 值减去另一个 $1/d^2$ 值, 就可得到 c^{*2} 或它的整数倍。此处, $(l_1^2 - l_2^2)$ 值可取: 1、3、4、5、7、8、9、11、12、13、15、16、17、19、20、21、…等等。

一般情况下, 不同的 $1/d^2$ 值, 具有不同的 M 和 l , 那么有:

$$\frac{1}{d_1^2} - \frac{1}{d_2^2} = (M_1 - M_2)a^{*2} + (l_1^2 - l_2^2)c^{*2}$$

可见, 求出各衍射斑点的 $1/d^2$ 后, 如果能作出各对 $1/d^2$ 的差值表, 那么 a^* 和 c^* 一定可以区别开来, 并由此求出 a_0 和 c_0 。显然, $(M_1 - M_2)a^{*2}$ 因子要比 $(l_1^2 - l_2^2)c^{*2}$ 因子出现的机会为多。

从(5-18)式可知, 四方晶系的晶面指数, h 与 k 两指数可以互换, $\pm h$, $\pm k$, $\pm l$ 也等价, 变换后, 晶面间距不变, 仍属同一面族。例如 (211) , $(1\bar{2}1)$, $(\bar{2}11)$, $(1\bar{2}\bar{1})$ 、…等的 d 值都是相同的。

上面我们指出了晶面指数随 $1/d^2$ 差值变化的一些规律, 但是具体运用这些规律分析四方晶系衍射谱, 仍十分麻烦, 而且不易奏效。文献[8]列举分析四方晶系 σ 相的例子, 对我们处理四方晶系衍射谱很有启发。从中可以得到如下启示:

(1) 在高温合金及合金钢中经常出现的 σ 相, 薄片表面为 (001) 面, 因此电子衍射谱, 常得到 $[001]$ 晶带。但是仅凭此 $[001]$ 晶带衍射谱并不能求出点阵常数 a , 而且完全确定 a 也不可能。这时可以借助衍射斑点的强度进行鉴定, 如 $[001]$ 衍射谱比较完整, 可以看到几乎对称分布的十二个 $\{3\bar{3}0\}$ 和 $\{410\}$ 斑点, 其强度较其它斑点显著为高, 这正与 ASTM 卡片提供的衍射谱强度数据相吻合。虽然卡片数据得自粉末试样 X 射线德拜照相法, 它还包含多

重因子的影响,但作为单晶各衍射斑相对强度的比较,定性上仍是接近实际的。并且这也已为计算所得的相应反射的结构因子所证实。此外,ASTM 卡片上有些衍射如 100, 110, 200 等没有数据,^①这是因为 X 射线衍射谱上它们的强度为 0 或甚弱;而电子衍射单晶谱上,由于原子对电子的散射作用较强,以及多重衍射效应不可避免,因此这些斑点仍清晰可见(图 5-16)。

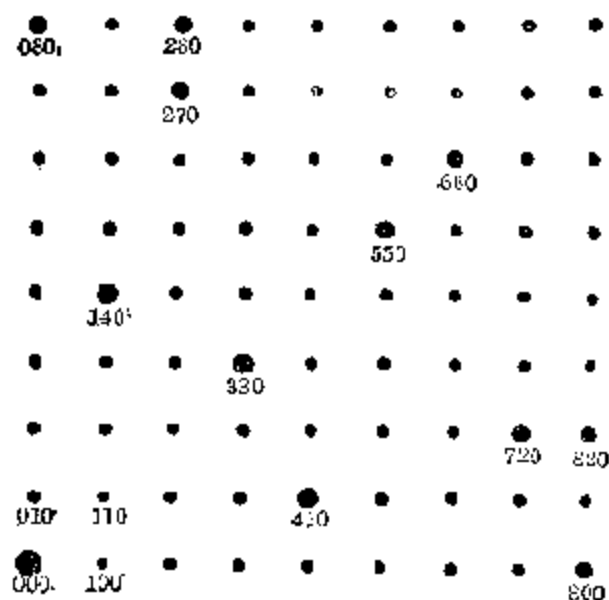


图 5-16 α 相 [001] 晶带的电子衍射谱

(2) 四方晶系单晶衍射谱,基本重复单元为矩形或有心矩形的也不少。在 $0 \leq u, v, w \leq 5$ 范围内的 98 个晶带内,有 53 个是这种类型。从(5-20)式看,当 l_1 和 l_2 两者之一为 h , 且有 $h_1h_2 + k_1k_2 = 0$ 时,就会出现矩形点列。例如 [120], (00 $\bar{1}$), (210); [125], (210), (121); [135], (310), (132); ... 等。矩形点列的两边总有一边不是 (001) 点列, 就是 ($hk0$) 点列, ($hk0$) 多为 (100) 和 (110)。注意 (100)、(110)、(210)、(310) 的边长比是 $1:\sqrt{2}:\sqrt{5}:\sqrt{10}$ 。可见如果我们从某物质的几个衍射谱中,发现有几个矩形点列的一个边长比满足 $\sqrt{2}$ 与 $\sqrt{5}$ 的关系,若又能肯定它不是立方晶系物质,则大体上可确定其为四方晶系。

(3) {001}、{100} 和 {110} 在四方晶系衍射谱中是三个有特征意义的反射,这些面都是镜面。在含有这些反射的晶带 [$ux0$]、[0 v w] 和 [uvw] 中,都显示 2mm 对称特征。[$uv0$] 晶带一定包含与点阵常数 c 有关的 (001) 斑点,如 [120], (00 $\bar{1}$), (210); [0 v w] 晶带一定包含与点阵常数 a 有关的 (100) 斑点,如 [001], (100), (0 $\bar{1}$ 0); 而 [uvw] 晶带则一定含有 (1 $\bar{1}$ 0) 斑点,如 [221], (110), (102)。

(4) 也可制定一个如表 5-6 那样的针对某具体四方晶系相的衍射谱标定数据表, 利用准确可靠的仪器常数 $L\lambda$, 计算出各斑点对应的 d 值, 并考虑上述规律, 将有助于较快的标定指数。

§ 5-6 正交晶系电子衍射谱的标定

正交晶系的特点是三轴正交, 但不等长, 有三个点阵常数 a 、 b 、 c 。

晶面间距关系的表达式是:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} \quad (5-21)$$

倒易矢量长度是:

$$g_{hkl} = (h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2})^{1/2} \quad (5-22)$$

倒易矢量(晶面法线)间夹角的余弦是:

$$\cos \varphi = \frac{\frac{h_1 h_2}{a^2} + \frac{k_1 k_2}{b^2} + \frac{l_1 l_2}{c^2}}{\left[\left(\frac{h_1^2}{a^2} + \frac{k_1^2}{b^2} + \frac{l_1^2}{c^2} \right) \left(\frac{h_2^2}{a^2} + \frac{k_2^2}{b^2} + \frac{l_2^2}{c^2} \right) \right]^{1/2}} \quad (5-23)$$

从(5-21)式, 可见 h 、 k 、 l 不可互换。

由于倒易基矢与正点阵基矢互相平行, 且有正交关系, 矩形点列出现也很频繁, 利用矩形点列邻边指数的某些规律性, 往往也有助于标定正交晶系的衍射谱。正交晶系矩形点列的一边常为 100, 010 或 001, 另一边则常是 $0kl$ 、 $h0l$ 或 $hk0$ 。利用倾动台多拍摄几个基本重复单元为矩形点列的衍射谱, 对于分析也是有用的。例如可利用出现次数较多的最短倒易矢(最大面间距), 先求出两个点阵常数, 再由矩形点列的另一边, 确定第三个点阵常数(参见文献[8])。

实践证明, 用电子计算机事先计算出特定正交晶系物质的衍射谱标定数据, 仍然是十分有效的。此外, 也有人相应于不同物质, 用电子计算机计算出三个表: 晶面间距表、晶面夹角表和晶带轴夹角表, 这对于标定对称性较差的非立方晶系物质, 如六角、正

交、三斜、单斜等，也不失为一种比较有效的方法。例如文献[15]附录表 11, 12, 13 所列正交晶系渗碳体的数据，对于钢铁材料电子衍射分析就非常有用。

关于正交晶系电子衍射谱的标定。也可参见文献[16]

§ 5-7 多晶电子衍射谱的标定

多晶电子衍射谱的标定程序与 X 射线衍射德拜相同，其程序如下：

(1) 由标准样品(如 Au, Al 等)计算出试验条件下的仪器常数 $L\lambda$ ，测量各衍射环的半径，利用公式(2-49)计算出对应的一系列 d 值。

(2) 查对 ASTM 卡片。ASTM 卡片上的数据虽得自 X 射线德拜相，但完全可以用来核对多晶电子衍射环的 d 值和相对强度。如果已知该合金中可能存在哪些相，查对工作将大为简化。前面 § 5-8 提到的谱线位置规律，可帮助缩小查对卡片的范围。值得指出两点：

1) 衍射花样可能是两种合金相的两套花样的迭加，这时，某些强线可能是分属于两套的两根谱线重合在一起。

2) 为使分析结果更加可靠，必须测量各谱线的相对强度，并找出强度最大的谱线的面间距 (d_1)，以及次强、再次强的面间距 (d_2, d_3)，再以 d_1 为 100，标定其余谱线的相对强度 I/I_0 。在许多情况下， d_{hk} 即低角度算起第一根线条的面间距是非常有用的。

一般先从卡片中检出与所测 d_1 值相近的一组卡片，再从中找出符合 d_2, d_3 的卡片，参照 d_{hk} 的数值，可以逐步肯定各相的晶体结构。如果怀疑是两种相的谱线叠加，则可利用几根强线用试探法分组查对卡片。

〔例 5〕 在 100 kV 下，对某多晶物质进行电子衍射，测得数据如表 5-8。

强度最大线是第一条线， $d_1 = 2.02 \text{ \AA}$ ，查出 $d_1 = 2.00 \sim 2.5 \text{ \AA}$

表 5-8 多晶样品电子衍射数据表 (Al 标定, $L\lambda = 17.00 \text{ mm}\text{\AA}$)

线号	$r(\text{mm})$	$d(\text{\AA})$	I/I_1	线号	$r(\text{mm})$	$d(\text{\AA})$	I/I_1
1	8.42	$(d_1) 2.02$	100	5	13.88	0.90	10
2	11.88	$(d_3) 1.42$	20	6	20.49	0.83	5
3	14.52	$(d_2) 1.18$	40	7	22.07	0.77	10
4	16.84	1.00	10	8	25.00	0.68	5

表 5-9 $\alpha\text{-Fe}$ 的数据表

线号	$(d_1) 1$	$(d_3) 2$	$(d_2) 3$	4	5	6	7	8
$d(\text{\AA})$	2.01	1.42	1.17	1.01	0.9	0.83	0.76	0.68
I/I_1	100	15	38	10	8	3	10	3

的一组卡片。在这组卡片中,核对 $d_2 = 1.18 \text{\AA}$, $d_3 = 1.42 \text{\AA}$ 左右的卡片,查出 bcc 结构 $\alpha\text{-Fe}$ 的数据(表 5-9)与此基本相符。由此可以确定该多晶物质为 $\alpha\text{-Fe}$ 。

〔例 6〕 在 80 kV 下,对某多晶样品进行电子衍射,测得的数据如表 5-10。

先令 5、2、3(或 15)三线依次为 d_1 、 d_2 、 d_3 ,查对卡片,无满意结果。这时可假定样品中有两种物质,并设第一种 $d_1 = 2.02 \text{\AA}$, $d_2 =$

表 5-10 某多晶样品电子衍射数据表 (Al 标定, $L\lambda = 19.23 \text{ mm}\text{\AA}$)

线号	$r(\text{mm})$	$d(\text{\AA})$	I/I_1	线号	$r(\text{mm})$	$d(\text{\AA})$	I/I_1	线号	$r(\text{mm})$	$d(\text{\AA})$	I/I_1
1	5.23	3.67	10 (20)	8	12.02	1.50	5 (10)	15	16.44	1.17	40
2	7.18	2.68	50 (100)	9	12.91	1.49	20 (40)	16	16.87	1.14	5 (10)
3	7.69	2.50	40 (80)	10	13.26	1.45	20 (40)	17	17.48	1.10	5 (10)
4	8.70	2.21	10 (20)	11	13.45	1.43	20 (40)	18	18.14	1.06	5 (10)
5	9.51	2.02	100	12	14.07	1.31	10 (20)	19	19.04	1.01	70
6	10.45	1.84	30 (60)	13	15.26	1.26	5 (10)	20	20.03	0.96	5 (10)
7	11.38	1.69	20 (60)	14	15.19	1.19	5 (10)	21	21.37	0.90	5

2.50 Å (或 1.17 Å), $d_0 = 1.17 \text{ Å}$ (或 2.50, 1.84, 1.69, 1.49, 1.45, ...), 在卡片中查找, 发现 $\alpha\text{-Fe}$ 的前 5 条线与上面的第 5、11、15、19、21 线相符; 下一步再查找第二种物质, 但在查找其余线时, 须将其余线的相对强度乘以 2, 使其中最强线的相对强度为 100, 如表 5-10 中带括号的所示。再按上法查找, 找出 Fe_2O_3 的卡片数据 (如表 5-11) 与所余线的数据相符。由此可以确定试样中含有 $\alpha\text{-Fe}$ 和 Fe_2O_3 。

表 5-11 Fe_2O_3 的数据表

$d(\text{Å})$	I/I_1	$d(\text{Å})$	I/I_1	$d(\text{Å})$	I/I_1
3.68	18	1.45	50	1.10	10
2.69	100	1.35	3	1.06	8
2.55	75	1.31	18	0.96	10
2.20	18	1.25	13	0.95	5
1.84	65	1.22	3	0.90	3
1.69	65	1.19	8	0.87	5
1.49	18	1.16	5	0.85	5
1.45	50	1.14	13		

近年以来, 电子计算机已广泛应用于电子衍射谱的标定, 使标定工作趋向于自动化。目前, 国内的许多电镜工作者, 均已先后编制了各有特色的计算机程序, 限于篇幅, 不及详为介绍。

第 六 章

孪晶电子衍射谱的分析

§ 6-1 引 言

孪生是金属范性形变的方式之一,研究孪晶的晶体学,是金属材料强度科学的重要方面。最早研究孪晶的手段是光学显微镜,当孪晶长大到 $0.01\sim 0.1\text{mm}$ 线尺寸时,就可以在光学显微镜下观察到。本世纪初开始用 X 射线衍射方法研究孪晶,但是只有当孪晶尺寸不小于 1mm 时,才能用这种方法进行研究。三十年代透射电镜出现以后,用复型技术在电镜上看到尺寸为微米数量级的细小孪晶,而且初步揭示了孪晶内部的精细结构。五十年代以后,用金属薄膜直接观察,发展了衍衬技术,对孪晶的晶体学和孪晶内部微观结构的研究,又较前跨进了一大步,并由此推动金属范性形变理论的深入发展。

图 6-1 是合金中的孪晶在光学显微镜和透射电镜下的形貌。

光学显微镜下,因孪晶两部分对光的反射能力不同而显示不同光泽。电镜下对金属薄膜直接观察,因孪晶两部分取向不同,满足布拉格条件的程度也不同,显示出不同的衍射衬度。

孪晶通常指按一定取向关系并非生长在一起的同一物质的两个晶粒,在晶粒的两侧还可以生长两次和多次孪晶。金属晶体由于对称性较高,孪晶取向关系比较简单。从晶体学讲,可以把孪晶晶体的一部分看成是另一部分以某低指数晶面为对称面的“反映”(镜象);也可以看成是以某低指数晶向为轴旋转一定角度而成。金属中的孪晶可以分生长孪晶和形变孪晶两大类。熔态金属中结晶过程生成的孪晶,气相凝固、电解沉积和固态相变,以及再结晶时形成的孪晶,属于生长孪晶。晶体在外力作用下发生形变,或相变

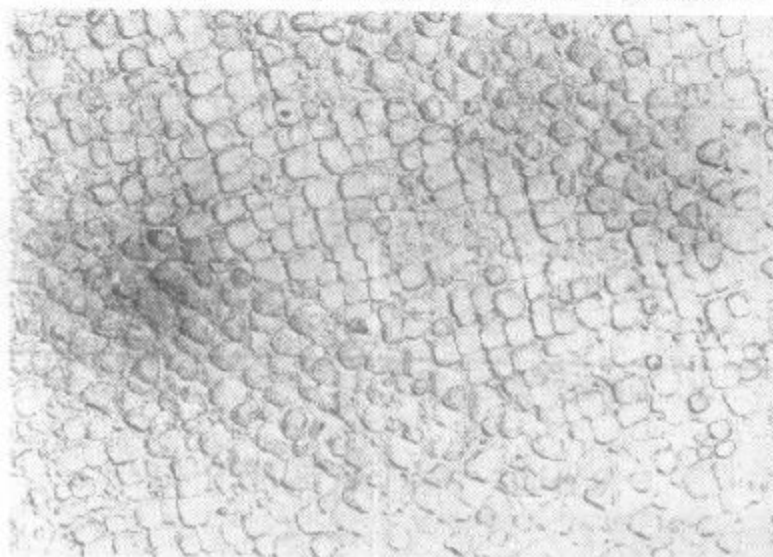
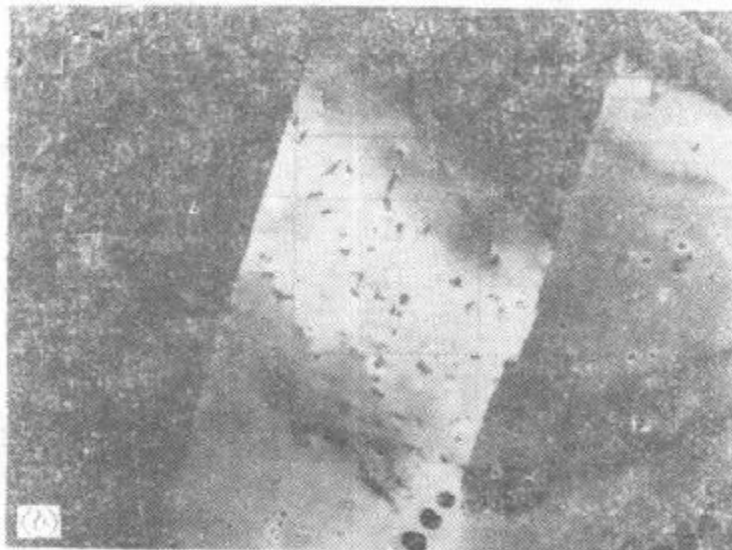
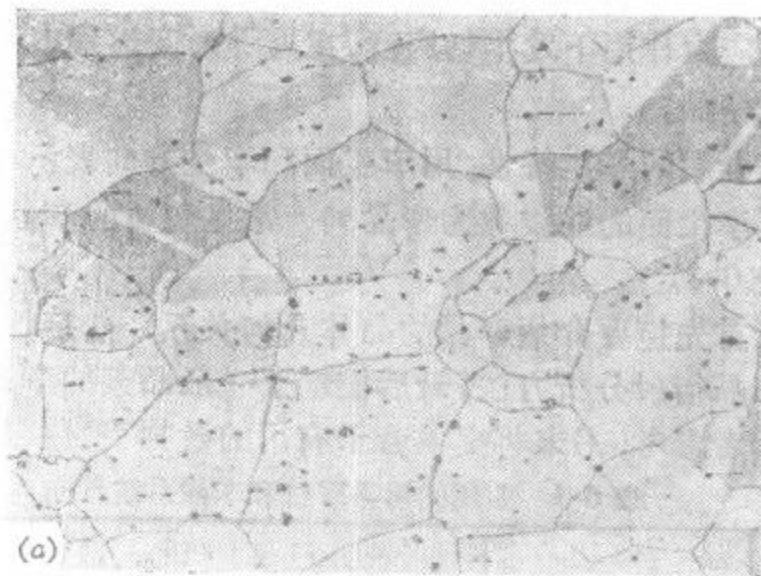


图 6-1 光学显微镜和电子显微镜下的孪晶形貌

(a) 光学显微镜下的孪晶, $\times 250$; (b) 电镜金属薄膜试样, $\times 28000$;
(c) 电镜复型试样, $\times 4500$

时在相变应力作用下发生切应变,在这种形变过程中形成的孪晶,称为形变孪晶。

描述金属的孪生特性,用孪生面和孪生方向表示,两者合称孪晶系统。孪生面的法线称为孪晶轴,常见金属的孪晶系统及滑移系统如表 6-1。

本章首先扼要介绍孪晶的晶体几何关系,然后着重讨论立方晶系的孪晶衍射分析方法,最后推广于一般晶系的孪晶衍射分析。为方便读者参考,书末将提供若干有用的数据表(附录七)。

表 6-1 金属的滑移系统和孪晶系统^[108]

晶 系	物 质	滑 移 系 统		孪 晶 系 统		
		面	方 向	面	方向	晶体轴
面心立方	金属及合金	(111)	[101]	(111)	[112]	(111)
金刚石立方	C, Si, Ge	(111)	[101]	(111)	[112]	(111)
体心立方	α -Fe, Cu-Zr, Mo	(110)	[111]	(112)	[111]	(112)
	α -Fe, Mo, W, Na	(112)	[111]			
	α -Fe, K	(123)	[111]			
六角密排	Be, Ti, Mg, Co	(0001)	[2110]	(1012)	[1011]	(1012)
	Zn, Cd	(0001)	[2110]	(1012)	[1011]	(1012)
正 交	α -U	(010)	[100]	(110)	[110]	(110)
				(112)	[112]	(112)
				(112)	[112]	(112)
				(112)	[112]	(112)
三 角	As, Sb, Bi	(111)	[100] 和 [101]	(110)	[001]	(001)
	Ilg	(100)	—	(110)	[001]	(001)
四 方	β -Sn, In	(110), (100)	[001]	(101)	[102]	(101)
		(010), (101) 和 (121)	[101]	(101)	[101]	(101)

[注] × 表示的指数是非结晶学的。

§ 6-2 孪晶的晶体几何学

以立方晶系为例,说明通过滑移切变产生孪晶的几何模型。图

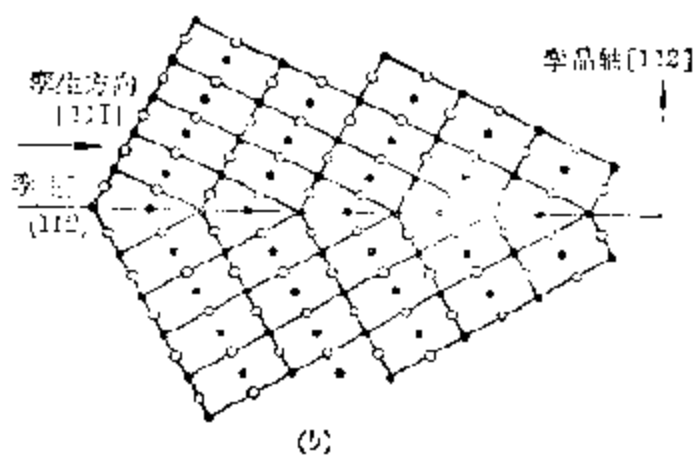
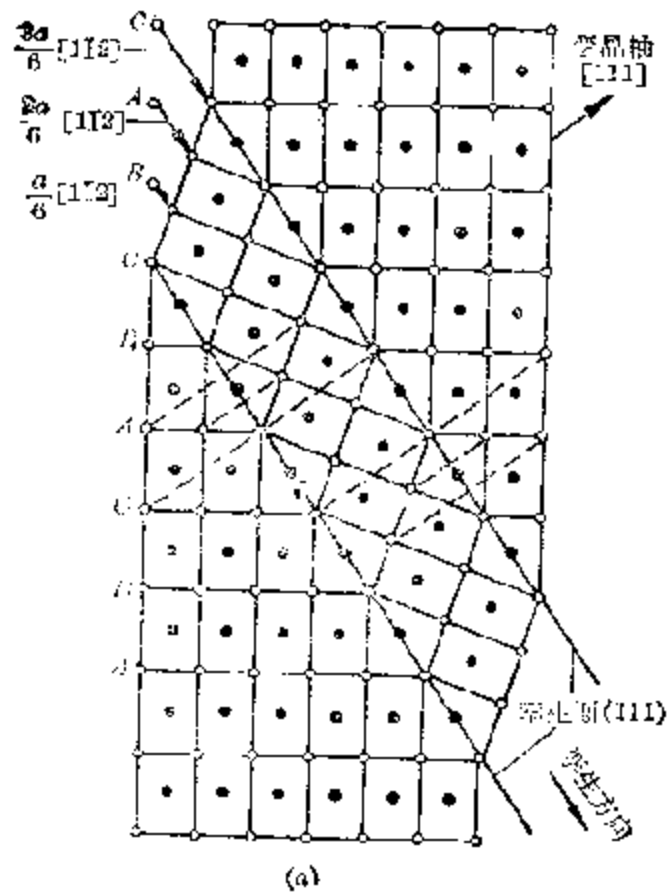


图 6-2 立方晶系晶体通过切变产生孪晶的几何模型
(a) 面心立方; (b) 体心立方

6-2 是立方晶体由切变产生孪晶的示意图。其中(a)是面心立方晶体孪晶和基体的原子排列。面心立方晶体的孪生面是 $\{111\}$ ，孪晶部分可以认为是基体部分以 (111) 为镜面的反映。切变时，阵点移动的距离分别为 $a/6[112]$ ， $2a/6[112]$ ， $3a/6[112]$ ， $\dots$ 等。图6-2(b)是体心立方晶体由切变产生孪晶的情况。孪生面为 $\{112\}$ ，孪生方向(阵点迁移方向)是 $\langle 111 \rangle$ ，阵点迁移的距离，随阵点所在原子层至孪生面的距离不同，由近及远分别取 $\langle 111 \rangle$ 方向点阵参数的分数值。孪生与滑移的主要不同点，就在于孪生切变时，相邻原子层原子移动的距离一般是这个方向重复周期长度的分数值；而滑移切变时，原子移动距离为此方向重复周期的整数倍。此外，孪生切变时，相邻原子层间的相对位移是相等的。归纳起来，孪晶

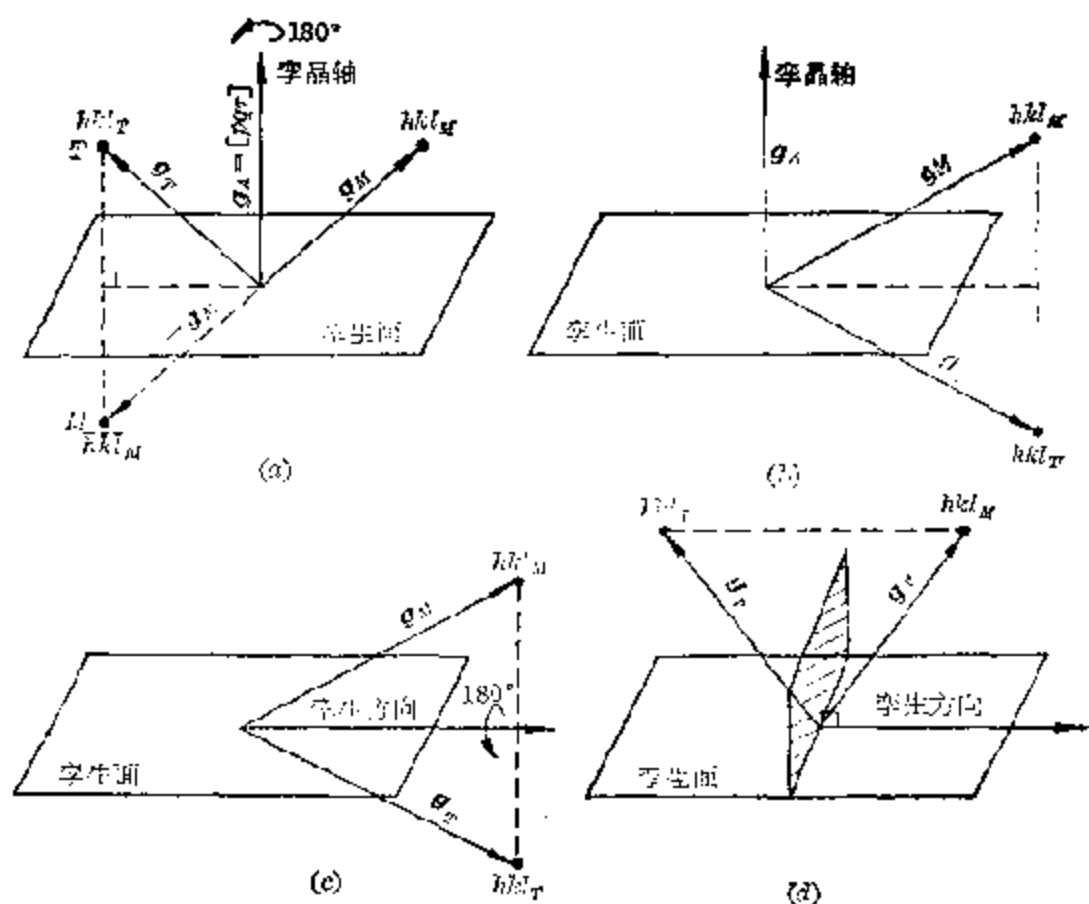


图 6-2 孪晶到基矢量的四种对称关系

(g_M —基体倒易矢, g_T —相应孪晶倒易矢)

- (a) 以孪晶轴为轴旋转 180° ; (b) 以孪晶面为镜面的反映;
(c) 以孪晶方向为轴旋转 180° ; (d) 以与孪生方向正交的平面为镜面的反映

存在着四种晶体学关系,这就是:

- (1) 基体阵点绕孪晶的法线旋转 180° ;
- (2) 基体阵点以孪晶面为镜面进行反映;
- (3) 基体阵点以孪生方向为轴旋转 180° ;
- (4) 基体阵点以与孪生方向正交的面为镜面进行反映。

与此相应,孪晶的倒易矢量也有四种对应的情况,如图 6-3 所示。

对孪晶电子衍射谱的分析,一般只是为了标定斑点指数,和从几何方面讨论取向关系,并不涉及与结构因子有关的强度分析,这样,上述四种孪晶关系,只需考虑其中(1)、(3)两种情况就可以了。因此,利用倒易点阵方法,从上述情况[即图 6-3 中(a), (c)两种倒易矢量的对称关系]出发,就可以对孪晶的电子衍射进行处理,这是孪晶电子衍射分析的基础。

§ 6-3 立方晶系孪晶衍射谱的分析

一、基本公式

定义下述符号,建立孪晶衍射指数的变换公式:

$g_M: (hkl)_M$ ——基体某衍射斑点指数;

$g_T: (hkl)_T$ ——与基体 (hkl) 斑点同名的孪晶衍射斑点指数;

$g_A: (pqr)$ ——孪晶面(在立方晶系中孪晶轴指数与此相同)的指数;

$h^*k^*l^*$ ——孪晶斑点 $(hkl)_T$ 在基体倒易点阵中的位置指数,即 $(hkl)_T$ 用基体倒易点阵坐标表示时之指数。

由图 6-3(a), 有:

$$(-g_M) \cdot (-g_A) = (g_T) \cdot (g_A) \quad (6-1)$$

于是有:

$$-(p\vec{h} + q\vec{k} + r\vec{l}) = p\vec{h}^* + q\vec{k}^* + r\vec{l}^* \quad (6-2)$$

注意对(6-1)式作代换时, g_T 不能用 $(hkl)_T$ 代入,而只能用 $(h^*k^*l^*)$

代入。又由于 $\overrightarrow{PM} \parallel [pqr]^*$, 可得:

$$\frac{h' - \bar{h}}{p} = \frac{k' - \bar{k}}{q} = \frac{l' - \bar{l}}{r} \quad (6-3)$$

联立(6-2)和(6-3)式, 并对 h' , k' , l' 求解, 即得:

$$\left. \begin{aligned} h' &= -\bar{h} + \frac{2p}{p^2 + q^2 + r^2} (ph + qk + rl) \\ k' &= -\bar{k} + \frac{2q}{p^2 + q^2 + r^2} (ph + qk + rl) \\ l' &= -\bar{l} + \frac{2r}{p^2 + q^2 + r^2} (ph + qk + rl) \end{aligned} \right\} \quad (6-4)$$

(6-4)式就是求孪晶斑点 $(hkl)_T$ 在基体倒易点阵中的位置坐标 $(h'k'l')$ 的公式。反过来, 如果已知孪晶面指数 (pqr) , 也可以根据孪晶斑点在基体中的位置 $(h'k'l')$, 求出此孪晶斑点的指数 $(hkl)_T$ 。

不难理解, 由于立方晶系晶面指数与其法线方向指数相同, 故(6-4)式也可用来转换基体与孪晶中的晶向指数。既然基体与孪晶成孪晶关系, 那就是二者是互为孪晶的, 所以对(6-4)式还可以进一步理解为: 已知基体斑点指数 (hkl) , 求它在孪晶倒易点阵中的位置 $(h'k'l')$; 或已知基体晶向的指数 $[uvw]$, 求它在孪晶正点阵中的位置 $[u'v'w']$ 。

面心立方, 孪晶面 $\{pqr\} = \{111\}$; 体心立方, 孪晶面 $\{pqr\} = \{112\}$ 。分别代入(6-4)式, 即得:

面心立方:

$$\left. \begin{aligned} h' &= -\bar{h} + (2/3)p(ph + qk + rl) \\ k' &= -\bar{k} + (2/3)q(ph + qk + rl) \\ l' &= -\bar{l} + (2/3)r(ph + qk + rl) \end{aligned} \right\} \quad (6-5)$$

体心立方:

$$\left. \begin{aligned} h' &= -\bar{h} + (1/3)p(ph + qk + rl) \\ k' &= -\bar{k} + (1/3)q(ph + qk + rl) \\ l' &= -\bar{l} + (1/3)r(ph + qk + rl) \end{aligned} \right\} \quad (6-6)$$

二、讨论

(1) 当 $ph + qk + rl = 3n$ ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$) 时, 则面心立方

的(6-5)式变为:

$$\left. \begin{aligned} h^t &= -h + 2np \\ k^t &= -k + 2nq \\ l^t &= -l + 2nr \end{aligned} \right\} \quad (6-7)$$

即:

$$\begin{bmatrix} h^t \\ k^t \\ l^t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{h} \\ \bar{k} \\ \bar{l} \end{bmatrix} + 2n \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} \quad (6-8)$$

可见, 当 $ph + qk + rl = 3n$ 时, 指数为 (hkl) 的孪晶斑点在基体倒易点阵中的位置是从基体斑点 $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$, 位移一个 $2n\langle 111 \rangle$ 距离, 以致与另一基体斑点相重。体心立方也有同样情况, 因为这时(6-6)式变为:

$$\left. \begin{aligned} h^t &= -h + np \\ k^t &= -k + nq \\ l^t &= -l + nr \end{aligned} \right\} \quad (6-9)$$

即:

$$\begin{bmatrix} h^t \\ k^t \\ l^t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{h} \\ \bar{k} \\ \bar{l} \end{bmatrix} + n \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} \quad (6-10)$$

这时孪晶斑点的位置相当于从基体的 $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ 位移一个 $n\langle 112 \rangle$ 距离, 终至与另一基体斑点相重。

〔例1〕求 fcc 中, 孪晶面为 (111) 时, 孪晶的 (244) 反射在基体点阵中的位置。

用 $(pqr) = (111)$, $(hkl) = (244)$ 代入(6-8)式, 得:

$$\begin{bmatrix} h^t \\ k^t \\ l^t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ 4 \end{bmatrix} + 4 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

即 $(244)_T$ 与 $(600)_M$ 相重。

〔例2〕求 bcc 中, 孪晶面为 (112) 时, 孪晶 $(2\bar{2}2)$ 反射在基体点阵中的位置。

用 $(pqr) = (\bar{1}12)$, $(hkl) = (2\bar{2}2)$ 代入 (6-10) 式, 得

$$\begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ \bar{2} \end{bmatrix} + 0 \begin{bmatrix} \bar{1} \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ \bar{2} \end{bmatrix}$$

即 $(2\bar{2}2)_T$ 与 $(2\bar{2}2)_B$ 相重。

关于孪晶斑点与基体斑点相重的规律, 文献 [17] 曾进行过十分细致的讨论。陈乾惕指出, 在相应于 $u, v, w \leq 3$ 的 13 个基体倒易面的 33 个体心和面心孪晶衍射谱中, 零层孪晶斑点和零层基体斑点全部相重的竟达 24 个。这时, 电子束入射方向平行孪晶轴方向, 即电子束垂直于孪晶面入射。这种情况下, 须借助高阶劳厄斑点在零阶劳厄区上的投影位置, 来发现孪晶的存在; 如果孪晶的高阶斑点也不存在, 就只好通过倾动试样以显露孪晶衍射。当然, 大多数情况下, 在一张衍射谱中, 只是一部分孪晶斑点与基体斑点重合, 而总有一部分斑点不重合。

(2) 当 $ph + qk + rl = 3n \pm 1$ ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$) 时, 面心立方的 (6-5) 式变为:

$$\begin{cases} h' = -h + 2np \pm 2p/3 \\ k' = -k + 2nq \pm 2q/3 \\ l' = -l + 2nr \pm 2r/3 \end{cases} \quad (6-11)$$

即

$$\begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{h} \\ \bar{k} \\ \bar{l} \end{bmatrix} + (2n \pm 1) \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} \mp \frac{1}{3} \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} \quad (6-12)$$

可见 $(hkl)_T$ 在基体倒易点阵中的位置是从基体某一倒易点再位移一个 $(1/3)\langle 111 \rangle$ 距离, 此位移总是沿孪晶面 $\{111\}$ 的法线方向。

〔例 3〕求 fcc 中, 孪晶面 $(pqr) = (111)$, 孪晶反射 $(11\bar{1})_T$ 在基体倒易点阵中的位置。

$\because ph + qk + rl = +1 = 3n \pm 1$, $n = 0$, 代入 (6-12) 式,

$$\begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{1} \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix} - \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\text{即} \quad [h'k'l'] = [002] - \frac{1}{3}[111]$$

同样, 当 $ph+qk+rl=3n\pm 1$ 时, 体心立方的(6-6)式变为:

$$\left. \begin{aligned} h' &= -h + np \pm \frac{1}{3}p = -h + \left(n \pm \frac{1}{3}\right)p \\ k' &= -k + nq \pm \frac{1}{3}q = -k + \left(n \pm \frac{1}{3}\right)q \\ l' &= -l + nr \pm \frac{1}{3}r = -l + \left(n \pm \frac{1}{3}\right)r \end{aligned} \right\} \quad (6-13)$$

即

$$\begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{h} \\ \bar{k} \\ \bar{l} \end{bmatrix} + n \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} \pm \frac{1}{3} \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{h} \\ \bar{k} \\ \bar{l} \end{bmatrix} + \left(n \pm \frac{1}{3}\right) \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} \quad (6-14)$$

可见这时孪晶斑点 $(hkl)_x$ 的位置也是从基体某一倒易点再位移一个 $(1/3)\langle 112 \rangle$ 位置。

[例 4] 求 bcc 中, 孪晶面 $(pqr) = (\bar{1}12)$, 孪晶反射 $(0\bar{1}1)_x$ 在基体倒易点阵中的位置。

$\because ph+qk+rl = +1, n=0$, 代入(6-14)式得:

$$\begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \bar{1} \end{bmatrix} + \frac{1}{3} \begin{bmatrix} \bar{1} \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} \bar{1} \\ 4 \\ \bar{1} \end{bmatrix}$$

$$\text{即} \quad [h'k'l'] = [01\bar{1}] + 1/3[\bar{1}12]$$

(3) 当电子束与孪晶轴正交, 即当孪晶面与电子束平行时, 则孪晶与基体有相同的 $\langle pqr \rangle$ 反射, 其它反射以 $[pqr]$ 为二次轴, 有对称关系。如图 6-4 所示, 体心立方, 基体晶带轴 $[110]$, 孪晶晶带轴 $[\bar{1}\bar{1}0]$, 孪晶面 $(1\bar{1}2)$, 电子束入射方向 $[110]$ 与孪晶轴 $[\bar{1}\bar{1}2]$ 正交, 孪晶与基体有相同的 $1\bar{1}2, 2\bar{2}4, \bar{1}1\bar{2}, \bar{2}2\bar{4}$ 等反射, 其它孪晶斑点, 可以看作是以 $[\bar{1}\bar{1}2]$ 为轴, 由相应基体斑点旋转 180° 而得。如图中虚线箭头所示。

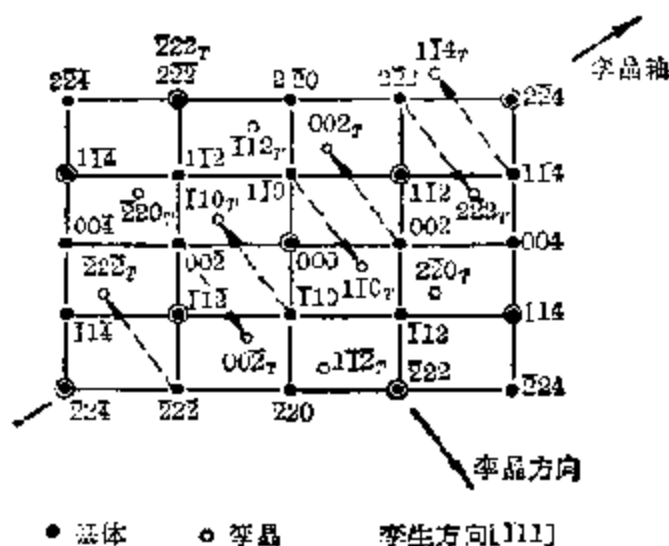


图 6-4 孪晶面平行于电子束时,体心立方孪晶区的电子衍射谱

(4) 体心立方 $\{112\}$ 孪晶与面心立方 $\{111\}$ 孪晶, 相互间有一个重要性质。参见图 6-5,

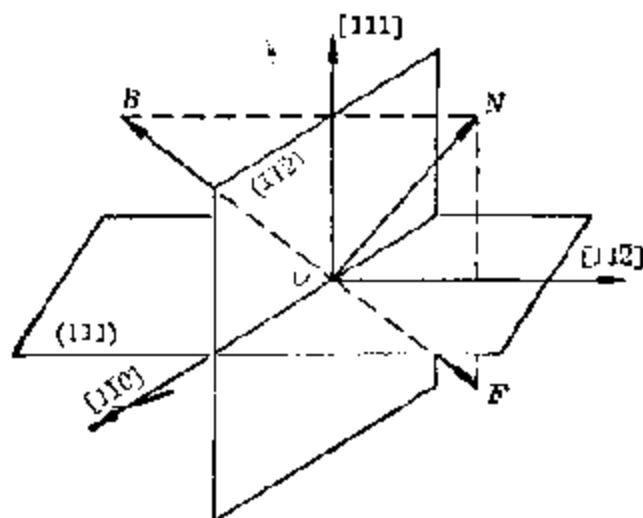


图 6-5 体心立方与面心立方孪晶的相互关系

在立方晶体中, 属于体心的 $\{112\}$ 孪晶平面, 总有一个属于面心的 $\{111\}$ 孪晶平面与它垂直, 例如图中 (111) 与 (112) 垂直, 两者交线为 $[1\bar{1}0]$ 。设某平面的法线即倒易矢为 ON , 如果形成体心立方的 (112) 孪晶, 则 ON 变成 OB ; 如果形成面心立方的 (111) 孪晶, 则 ON 变成 OF 。而 $[1\bar{1}0]$ 是二次对称轴, 以 OB 和 OF 为倒易矢的平面, 属于同一面族。据此不难求出立方晶系中同一晶面 (hkl) 分别形成 $\{112\}$ 和 $\{111\}$ 孪晶时, 两者斑点位置的相互关系。

例如, 基体中同一反射 (222) , 形成 (111) 孪晶时, $(h'k'l')_t = 2/3(1\bar{1}5)$; 形成 (112) 孪晶时, $(h'k'l')_t = 2/3(115)$, [由(6-5)、(6-6)式计算], 可见

$$h'_t = -k'_t, k'_t = -h'_t, l'_t = -l'_t$$

表 6-2 同一反射在面心立方和体心立方
单晶中位置的相互关系^[10]

求 (h_f, k_f, l_f) 之转换矩阵 (T_f)	$h_f k_f l_f \sim h_b k_b l_b$ 相互关系	求 (h_b, k_b, l_b) 之转换矩阵 (T_b)
$(111) \sim (1\bar{1}\bar{1})$ 垂直于 $(112) \sim (1\bar{1}2)$ $(1\bar{2}1) \sim (12\bar{1})$ $(21\bar{1}) \sim (2\bar{1}1)$ $\frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$	$h_f = -k_b$ $k_f = -h_b$ $l_f = -l_b$	$(1\bar{1}2) \sim (112)$ $\frac{1}{3} \begin{bmatrix} -2 & 1 & -2 \\ 1 & -2 & -2 \\ -2 & -2 & 1 \end{bmatrix}$
	$l_f = -l_b$ $h_f = -k_b$ $k_f = -h_b$	$(1\bar{2}1) \sim (12\bar{1})$ $\frac{1}{3} \begin{bmatrix} -2 & -2 & 1 \\ -2 & 1 & -2 \\ 1 & 2 & 2 \end{bmatrix}$
	$h_f = -k_b$ $k_f = -h_b$ $l_f = -l_b$	$(2\bar{1}1) \sim (21\bar{1})$ $\frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & -2 & -2 \\ 2 & 2 & 1 \\ -2 & 1 & -2 \end{bmatrix}$
$(111) \sim (11\bar{1})$ 垂直于 $(211) \sim (2\bar{1}1)$ $\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$	$h_f = -k_b$ $k_f = -h_b$ $l_f = -l_b$	$(211) \sim (2\bar{1}1)$ $\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & -2 & 1 \\ 2 & 1 & -2 \end{bmatrix}$
	$h_f = -k_b$ $k_f = -h_b$ $l_f = -l_b$	$(1\bar{1}2) \sim (112)$

(续表)

求 (h_f^i, k_f^i, l_f^i) 之转换矩阵 (T_f)	$h_f^i k_f^i l_f^i \sim h_b^i k_b^i l_b^i$ 相互关系	求 (h_b^i, k_b^i, l_b^i) 之转换矩阵 (T_b)
(111)、(111) 垂直于 (112)(112) (121)(121) (211)(211) $\frac{1}{3} \begin{bmatrix} -1 & 2 & -2 \\ 2 & -1 & -2 \\ -2 & -2 & -1 \end{bmatrix}$	$h_f^i = -h_b^i$ $k_f^i = -k_b^i$ $l_f^i = l_b^i$	(112)、(112): $\frac{1}{3} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 2 \\ 1 & -2 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{bmatrix}$
	$h_f^i = k_b^i$ $k_f^i = -h_b^i$ $l_f^i = k_b^i$	(121)、(121): $\frac{1}{3} \begin{bmatrix} -2 & -2 & -1 \\ -2 & 1 & 2 \\ -1 & 2 & -2 \end{bmatrix}$
	$h_f^i = -h_b^i$ $k_f^i = l_b^i$ $l_f^i = k_b^i$	(211)、(211): $\frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 \\ -2 & -2 & -1 \\ 2 & -1 & -2 \end{bmatrix}$

仿此不难求出同一反射在转化为面心立方和体心立方孪晶时, $h_f^i k_f^i l_f^i$ 与 $h_b^i k_b^i l_b^i$ 的相互关系, 综合如表 6-2。

三、孪晶衍射谱的标定方法

将(6-5)、(6-6)式稍加整理, 可得:

$$\begin{bmatrix} h_f^i \\ k_f^i \\ l_f^i \end{bmatrix} = T_f \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} \quad (6-15)$$

$$\begin{bmatrix} h_b^i \\ k_b^i \\ l_b^i \end{bmatrix} = T_b \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} \quad (6-16)$$

变换矩阵 T_f 和 T_b 也可见表 6-2。

(6-15)和(6-16)与(6-5)、(6-6)式是等价的。我们利用(6-15)和(6-16)式, 用电子计算机计算了立方晶系全部{111}和{112}孪晶的 $(h^i k^i l^i)$ 数据, 并按 h^i 数字由小到大排列成表^[6](见附录七)。在计算这些表时, 只从孪晶倒易点在基体倒易点阵的位置加以考虑, 与具体所在倒易面无关。利用此表进行标定的一般步骤是: 先通过某种途径确定出基体晶带的斑点列, 并用通常方法(第五章)予

以标定, 计算出晶带轴指数。然后选取靠近(000)的附加斑点, 测量其在基体倒易点阵中的坐标位置 $h'k'l'$, 据此即可查表直接确定 hkl 指数。

〔例 5〕 图 6-6 是从某体心立方金属孪晶区获得的选区域电子衍射谱, 经过转角校正后, 孪晶的迹线用箭头表示在衍射谱上, 试标定其指数。

从衍射谱斑点强度分析, 呈现出明显的规律性, 横向四排 A 、 B 、 C 、 D 为较强的斑点, 斜向三排 E 、 F 、 G 更强一些; 此外, 在上述强斑点之间, 有规律地分布着一些弱斑点。可以认为这些强斑点是基体斑点。标注为体心立方 $[120]$ 晶带, 孪晶迹线近似为 $[421]$ 方向。下一步是判断孪晶的可能孪晶面指数。基体晶带轴指数为 $[120]$, 则对 $\{112\}$ 孪晶的可能迹线方向如下: $([120] \times \langle 112 \rangle)$

孪 晶 面	$\bar{1}\bar{1}2$ $1\bar{1}2$ $11\bar{2}$ 121 $\bar{1}21$ $1\bar{2}1$ $12\bar{1}$ 211 $2\bar{1}1$ $21\bar{1}$ $2\bar{1}\bar{1}$ 112
迹 线	$42\bar{3}$ $\bar{4}23$ $4\bar{2}1$ 210 $2\bar{1}4$ 214 $2\bar{1}0$ 213 $2\bar{1}5$ 215 $2\bar{1}3$ 421

可见此孪晶的孪晶面是 (112) , 从附录七 (112) 孪晶表中查得:

$$A \text{ 点, } \therefore (h'k'l')_A = \frac{1}{3}[2\bar{1}7], \therefore \text{指数为}(121)$$

$$B \text{ 点, } \therefore (h'k'l')_B = \frac{1}{3}[424], \therefore \text{指数为}(200)$$

$$C \text{ 点, } \therefore (h'k'l')_C = [2\bar{1}1], \therefore \text{指数为}(\bar{1}21)$$

虚线网络的斑点为 (112) 孪晶斑点。 E 、 F 、 G 三列斑点为基体与孪晶相重的斑点。

由此可见, 对孪晶衍射进行分析时, 孪晶在显微图象上的迹线是十分有用的, 因为一套孪晶斑点, 常常可以有几套指标化方式, 而迹线可以帮助我们许多可能的解中, 找出一个确定的解。

对斑点指标化以后, 容易求出图 6-6 孪晶倒易面的指数为 $(0\bar{1}2)^*$ (孪晶晶带轴: $[0\bar{1}2]$)。立方晶系孪晶取向数据见附录三。

对孪晶衍射谱也可以按如下程序标定:

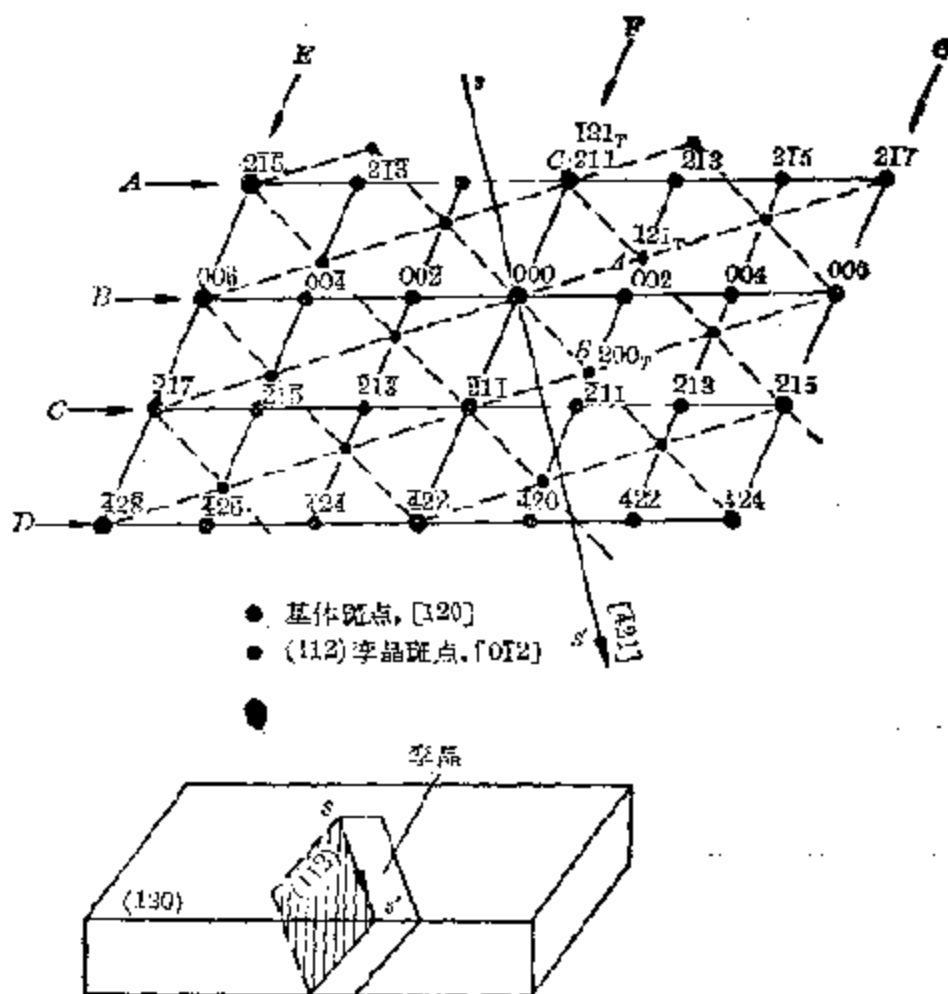


图 6-6 某体心立方金属孪晶区获得的电子衍射谱

- 1) 先标定基体衍射谱, 计算出晶带轴指数 $[uvw]_M$ 。
- 2) 按公式(6-4)或(6-15)、(6-16)计算出与 $[uvw]_M$ 平行的孪晶晶带轴的指数 $[u_t v_t w_t]$ 。
- 3) 分别按 § 4-3 的方法, 绘制基体 $[uvw]_M$ 晶带, 孪晶 $[u_t v_t w_t]$ 晶带的斑点分布图。
- 4) 将这种斑点图按一定取向重迭在衍射谱上, 使之与除基体外的其余斑点相吻合。

值得指出的是其中 2) 在计算 $[u_t v_t w_t]$ 时, 可能有许多解, 要从中找出一个确定的解, 需要一定的处理技巧。举例如下:

〔例 6〕文献[18](后又为文献[17]所引用)曾报导过一个很有启发的例子, 作者利用倾动台拍得碳化物的前后两张衍射谱, 如

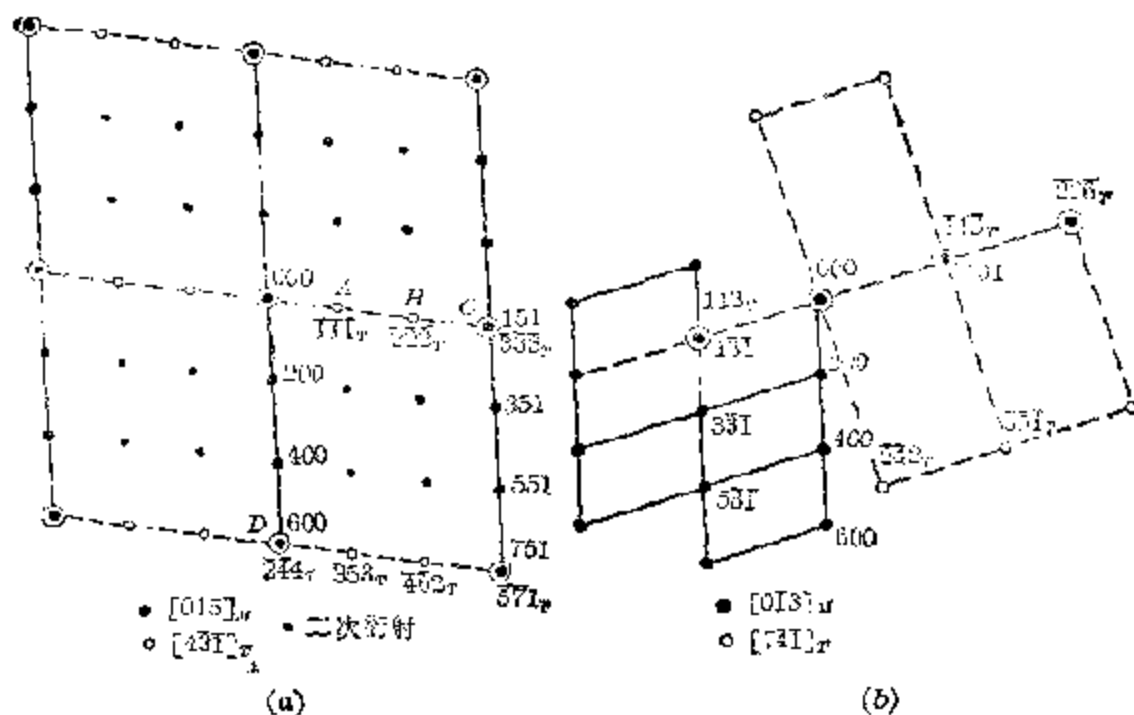


图 6-7 $M_{23}C_6$ 的电子衍射谱

图 6-7 所示, 其中(b)相对于(a)倾动 5° 。

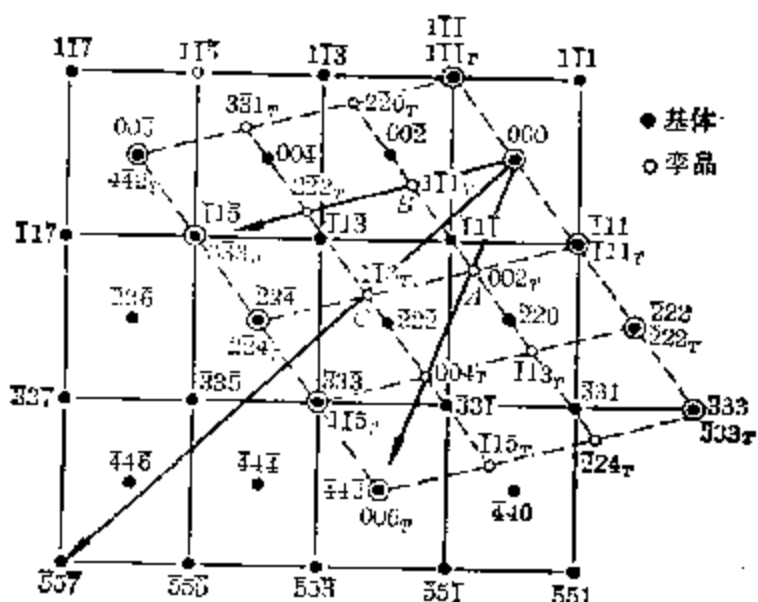
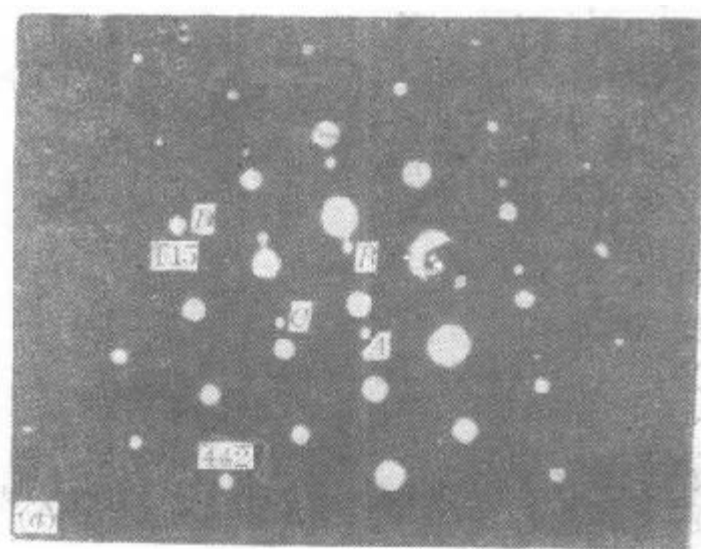
将强的一套斑点标为 $(0\bar{1}5)_M$, 如图(a)。利用公式(6-15)可计算平行于 $[u_0v_0]_M = [0\bar{1}5]_M$ 的孪晶带轴为:

$g_{h'k'l'}$	(111)	(111)	(111)	(111)
(u_0v_0)	$[8, 1, 7]$	$[8, 1, 7]$	$[43\bar{7}]$	$[35\bar{1}]$

考虑到 C 点标为基体的(151), D 点标为基体的(600), 根据 A、B、C、D 的坐标, 查表(见附录七), 获得如下数据:

斑点	(111)		(111)		(111)		(111)	
	$h'k'l'$	$(hkl)_g$	$h'k'l'$	$(hkl)_g$	$h'k'l'$	$(hkl)_g$	$h'k'l'$	$(hkl)_g$
A	$\frac{1}{3}[15\bar{1}]$	111	$\frac{1}{3}[15\bar{1}]$	111	$\frac{1}{3}[15\bar{1}]$	111	$\frac{1}{3}[15\bar{1}]$	111
B	$\frac{2}{3}[15\bar{1}]$	222	$\frac{2}{3}[15\bar{1}]$	222	$\frac{2}{3}[15\bar{1}]$	222	$\frac{2}{3}[15\bar{1}]$	222
C	$[15\bar{1}]$	333	$[15\bar{1}]$	333	$[15\bar{1}]$	333	$[15\bar{1}]$	333
D	$[600]$	244	$[600]$	244	$[600]$	244	$[600]$	244

A 、 B 、 C 、 D 分别标为 $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ 、 $\bar{2}\bar{2}\bar{2}$ 、 $\bar{3}\bar{3}\bar{3}$ 和 $\bar{2}\bar{4}\bar{4}$ 是合适的, 它们属于 $(1\bar{1}1)$ 孪晶的 $[4\bar{3}\bar{1}]$ 晶带。也可以分别作出 $[8, 11, \bar{7}]$, $[\bar{8}, 11, \bar{7}]$, $[\bar{1}\bar{3}\bar{1}]$ 和 $[4\bar{3}\bar{1}]$ 晶带的衍射谱, 按一定取向重迭在基体的 $[0\bar{1}\bar{5}]$ 晶带衍射谱上。结果发现 $[8, 11, \bar{7}]$ 和 $[\bar{8}, 11, \bar{7}]$ 的衍射谱与近似水平的三列衍射斑点分布无任何相似之处; $[\bar{1}\bar{3}\bar{1}]$ 晶带衍射谱也须反转 180° , 方可与近似水平点列重合; 只有 $[4\bar{3}\bar{1}]$ 晶带衍射谱可以很好重合。由此可以肯定标为 $(1\bar{1}1)$ 孪晶的 $[4\bar{3}\bar{1}]$ 晶带的合理性。



(b)

图 6-8 奥氏体合金中孪晶衍射谱的标定

至于图(b), 可以明显看出两套斑点, 按通常程序将左侧一套强斑点标为 $[01\bar{3}]_M$ 晶带, 利用(6-15)式, 取 $(pqr) = (1\bar{1}1)$, 计算得 $[uvcw] = [74\bar{1}]_T$, 并作出它的衍射谱, 很容易标定, 如图。鉴于 $[0\bar{1}3]_M$ 与 $[0\bar{1}5]_M$ 仅相差 $6^\circ 8'$, $[4\bar{3}1]_T$ 与 $[74\bar{1}]_T$ 夹角也只有 $8^\circ 20'$, 考虑到一般倾动台的精度, 倾动角 5° 与上述角度可以认为是近似符合的。

〔例7〕 图6-8(a)为形变奥氏体合金中含孪晶区域的衍射谱, 试用查表法(附录七)标定指数, 并确定孪晶面。

基体斑点谱, 具有边长比为1.414的有心矩形阵点排列, 容易标定为 $(110)^*$ 倒易面。在两基体反射点间三分之一处, 作规则分布的斑点为孪晶反射。在基体斑点标定后, 知A点位置为 $\frac{1}{3}[44\bar{2}]$, 在附录七 $\text{fcc}(\bar{1}11)$ 一表中, 找到此位置的孪晶反射指数为 $(002)_T$ 。B点位置为 $\frac{1}{3}[\bar{1}15]$, C点位置为 $\frac{1}{3}[\bar{5}5\bar{7}]$, 在同一表中, 指出它们分别对应于 $(1\bar{1}1)_T$ 和 $(1\bar{1}3)_T$ 。A、B、C三点和 (000) 组成一平行四边形, 且给出的三点指数完全互洽。而这些位置坐标, 在其它 fcc 孪晶衍射位置表中, 不能同时找到相互协调的孪晶反射指数,

中的坐标($h'k'l'$)的公式, 它也是孪晶晶面指数转换为基体晶面指数的变换公式。为了讨论应用方便, 可以将(6-4)式变换为矩阵形式。

很容易将(6-4)式写成下面的形式:

$$\begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} + \frac{2}{p^2+q^2+r^2} \begin{bmatrix} p^2 & pq & pr \\ qp & q^2 & qr \\ rp & rq & r^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} \quad (6-17)$$

故由(hkl)变换为($h'k'l'$)的变换矩阵是:

$$\begin{aligned} T &= - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{2}{p^2+q^2+r^2} \begin{bmatrix} p^2 & pq & pr \\ qp & q^2 & qr \\ rp & rq & r^2 \end{bmatrix} \\ &= - \frac{p^2+q^2+r^2}{p^2+q^2+r^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{2}{p^2+q^2+r^2} \begin{bmatrix} p^2 & pq & pr \\ qp & q^2 & qr \\ rp & rq & r^2 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{p^2+q^2+r^2} \left\{ (-p^2-q^2-r^2) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2p^2 & 2pq & 2pr \\ 2qp & 2q^2 & 2qr \\ 2rp & 2rq & 2r^2 \end{bmatrix} \right\} \\ &= \frac{1}{p^2+q^2+r^2} \begin{bmatrix} p^2-q^2-r^2 & 2pq & 2pr \\ 2qp & q^2-r^2-p^2 & 2qr \\ 2rp & 2rq & r^2-p^2-q^2 \end{bmatrix} \quad (6-18) \end{aligned}$$

对于面心立方, $\therefore \{pqr\} = \{111\}$, 由(6-18)式, 可得:

$$T_1 = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 2pq & 2pr \\ 2qp & 1 & 2qr \\ 2rp & 2rq & 1 \end{bmatrix} \quad (6-19)$$

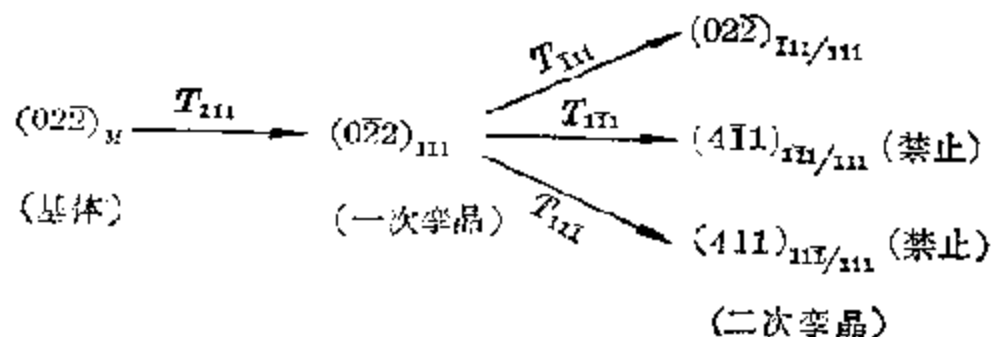
对于体心立方, $\therefore \{pqr\} = \{112\}$, 由(6-18)式, 可得:

$$T_2 = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} p^2-3 & pq & pr \\ qp & q^2-3 & qr \\ rp & rq & r^2-3 \end{bmatrix} \quad (6-20)$$

将不同孪晶面指数分别代入 (6-19) 和 (6-20), 即可得到表 6-2 中的各个 T_i 和 T_o 矩阵。

利用表 6-2 中的 T_i 和 T_o , 让其作用在新的孪晶指数上, 就可得到新的高次孪晶晶面指数。

例如, 面心立方基体的 (022) 反射经 T_{111} 的作用, 成为 (111) 孪晶的 (022) 反射, 再经过 T_{111} 的作用, 就成为 $\bar{1}11/111$ 二次孪晶的 (022) 反射, 若不经 T_{111} 而是分别经过 $T_{\bar{1}\bar{1}1}$ 、 $T_{1\bar{1}\bar{1}}$ 的作用, 则该反射将分别是二次孪晶 (111/111) 和 (111/111) 的 (411) 和 (411) 反射, 而它们是禁止的, 不会出现。



$$\begin{bmatrix} h^t \\ k^t \\ l^t \end{bmatrix} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} -1, & 2, & 2 \\ 2, & -1, & 2 \\ 2, & 2, & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}_{111}$$

$$\begin{bmatrix} h^t \\ k^t \\ l^t \end{bmatrix} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} -1, & -2, & -2 \\ -2, & -1, & 2 \\ -2, & 2, & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ -2 \end{bmatrix}_{\bar{1}11/111}$$

当然, 也可表为:

$$\begin{bmatrix} h^t \\ k^t \\ l^t \end{bmatrix}_{111/111} = T_{\bar{1}\bar{1}1} \cdot T_{111} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} -1, & -2, & -2 \\ -2, & -1, & 2 \\ -2, & 2, & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} \\ \times \frac{1}{3} \begin{bmatrix} -1, & 2, & 2 \\ 2, & -1, & 2 \\ 2, & 2, & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}_{111/111}$$

为方便处理高次孪晶衍射, 也可以将变换矩阵的连乘积变为一个

多次孪晶变换矩阵, 并且可以事先计算出来。如上述 $T_{111} \cdot T_{111}$ 可以写成:

$$T_{111} \cdot T_{111} = T_{111/111} = \frac{1}{8} \begin{bmatrix} 1, & -2, & -2 \\ -2, & -1, & 2 \\ -2, & 2, & -1 \end{bmatrix} \\ \times \frac{1}{3} \begin{bmatrix} -1, & 2, & 2 \\ 2, & -1, & 2 \\ 2, & 2, & -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{9} \begin{bmatrix} -7, & -4, & -4 \\ 4, & 1, & -8 \\ 4, & -8, & 1 \end{bmatrix}$$

同样可得:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{9} \begin{bmatrix} -7 & -4 & -4 \\ 4 & 1 & -8 \\ 4 & -8 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\left. \begin{aligned} u &= p\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a}^* + q\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b}^* + r\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{c}^* \\ v &= p\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{a}^* + q\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{b}^* + r\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c}^* \\ w &= p\mathbf{c}^* \cdot \mathbf{a}^* + q\mathbf{c}^* \cdot \mathbf{b}^* + r\mathbf{c}^* \cdot \mathbf{c}^* \end{aligned} \right\} \quad (6-21a)$$

或

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a}^* & \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b}^* & \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{c}^* \\ \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{a}^* & \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{b}^* & \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c}^* \\ \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{a}^* & \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{b}^* & \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{c}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} \quad (6-21b)$$

仍参见 § 6-3 中对图 6-3(a) 的讨论, 由 (6-1) 式:

$$(-\mathbf{g}_M) \cdot (-\mathbf{g}_A) = (\mathbf{g}_T) \cdot (\mathbf{g}_A)$$

式中: $\mathbf{g}_M = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$, 是基体 (hkl) 反射的倒易矢量;

$\mathbf{g}_A = u\mathbf{a}^* + v\mathbf{b}^* + w\mathbf{c}^*$, 是孪晶面 (pqr) 的法线方向矢量;

$\mathbf{g}_T = h^t\mathbf{a}^* + k^t\mathbf{b}^* + l^t\mathbf{c}^*$, 是孪晶 (hkl) 反射在基体倒易点阵坐标中的位置矢量。

可见有:

$$-(u\bar{h} + v\bar{k} + w\bar{l}) = uh^t + vk^t + wl^t \quad (6-22)$$

注意将 (6-22) 式与 (6-2) 式所表示立方晶系的情况相比较, 此处, 因对任意晶系来说, (p, q, r) 的法线方向已不再是 $[p, q, r]$, 故采用 u, v, w 替换了原来的 p, q, r 。

同样, 因为 $\overline{TM} \parallel [pqr]^*$ (注意是在倒易点阵中), 故前面的 (6-3) 式仍成立, 即:

$$\frac{h^t - \bar{h}}{p} = \frac{k^t - \bar{k}}{q} = \frac{l^t - \bar{l}}{r}$$

解 (6-22) 和 (6-3), 求 h^t, k^t, l^t 。令 (6-3) 式右边等于 C (常数), 代入 (6-22), 可解出

$$C = \frac{2(u\bar{h} + v\bar{k} + w\bar{l})}{pu + qv + rw}$$

于是可得:

$$\begin{bmatrix} h^t \\ k^t \\ l^t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{h} \\ \bar{k} \\ \bar{l} \end{bmatrix} + \frac{2}{pu + qv + rw} \begin{bmatrix} pu & pv & pw \\ qu & qv & qw \\ ru & rv & rw \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} \quad (6-23)$$

式中:

$$\begin{bmatrix} \bar{h} \\ \bar{k} \\ \bar{l} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}$$

$$pu + qv + rw = (uvw) \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} pu & pv & pw \\ qu & qv & qw \\ ru & rv & rw \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} (uvw)$$

用上述关系代换(6-23)式的相应量,则(6-23)式变成:

$$\begin{bmatrix} h^* \\ k^* \\ l^* \end{bmatrix} = \left\{ - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{\begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} (uvw)}{(uvw) \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix}} \right\} \cdot \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} \quad (6-24a)$$

或写作:

$$\begin{bmatrix} h^* \\ k^* \\ l^* \end{bmatrix} = T \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} \quad (6-24b)$$

式中:

$$[T] = -[I] + \frac{2[p][\tilde{u}]}{[u][p]} \quad (6-25a)$$

(6-25a)式是任意晶系的孪晶转换矩阵,下面改写(6-25a)式,使之成为便于运用的形式。

由(6-21b)式,有 $[u] = [G]^{-1}[p]$, $[G]^{-1}$ 可由表4-2查到;矩阵乘积的转置矩阵有下述关系: $([A][B])^T = [B]^T[A]^T$; 倒易矢量 $[hkl]^*$ 长度的平方: $\left(\frac{1}{d}\right)^2 = [\tilde{h}][G]^{-1}[h]$ [注], 因 $[G]^{-1}$ 是对称矩

$$\begin{aligned} \text{[注]} \quad |[hkl]^*|^2 &= [ha^* + kb^* + lc^*][ha^* + kb^* + lc^*] \\ &= h^2a^{*2} + k^2b^{*2} + l^2c^{*2} + 2hka^{*2}b^{*2} + 2hlc^{*2}a^{*2} + 2klb^{*2}c^{*2} \\ &\quad + 2hkb^{*2}c^{*2} + 2kla^{*2}c^{*2} + 2lhb^{*2}a^{*2} + 2lkc^{*2}b^{*2} \\ &= [hkl] \begin{bmatrix} a^{*2} & a^{*2}b^{*2} & a^{*2}c^{*2} \\ b^{*2} & b^{*2}b^{*2} & b^{*2}c^{*2} \\ c^{*2} & c^{*2}b^{*2} & c^{*2}c^{*2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = [\tilde{h}][G]^{-1}[h] \end{aligned}$$

阵, 则 $[G]^{-1} = [\tilde{G}]^{-1}$ 。将上述关系代入(6-25a)式, 可得:

$$\begin{aligned} [T] &= -[I] - \frac{2[p][\widetilde{[G]^{-1} \cdot [p]}]}{[\widetilde{[G]^{-1} \cdot [p]}] \cdot [p]} \\ &= -[I] - \frac{2[p][\tilde{p}][\tilde{G}]^{-1}}{[\tilde{p}][\tilde{G}]^{-1}[p]} \\ &= -[I] - \frac{2[p][\tilde{p}][G]^{-1}}{|p|^2} \end{aligned} \quad (6-25b)$$

式中 $|p|^2$ 即孪晶面法线倒易矢量的长度的平方。

(6-25b) 是利用(6-24b)式求任意晶系孪晶晶面指数的转换矩阵。

下面讨论求任意晶系孪晶晶向指数的转换矩阵:

设两个点阵基矢间变换矩阵为 $[M]$, $[A]$ 和 $[a]$ 是两个基矢的

列矩阵, 即 $\begin{bmatrix} A \\ B \\ C \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}$, 则有 $[A] = [M][a]$, 又设 $[H]$ 、 $[h]$ 分别为
矢量在 A, B, C 和 a, b, c 坐标系中的坐标列矩阵 $\begin{bmatrix} H \\ K \\ L \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}$, 则

有 $[H] = [M][h]$ 。这时可用 $[M]$ 的转置矩阵 $[\tilde{M}]$ 来实现方向指数的变换。即

$$[u] = [\tilde{M}][U] \quad (6-26)$$

由此可见, (6-25b) 式的转置矩阵, 就是任意晶系孪晶的晶向指数变换矩阵, 即:

$$[T]_{晶向} = [\tilde{T}]_{晶面} = -[I] + \frac{2[G]^{-1}[p][\tilde{p}]}{|p|^2} \quad (6-27)$$

如为反映孪晶, $[T]$ 、 $[\tilde{T}]$ 矩阵都取负号。

二、任意晶系孪晶转换矩阵应用于各晶系

1. 求立方晶系孪晶的晶面变换矩阵 T 和晶向变换矩阵

$\tilde{T}$

由(6-25b)式:

$$\begin{aligned}
[T] &= - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{2 \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} [pqr]}{(p^2 + q^2 + r^2)/a^2} \begin{bmatrix} 1/a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/a^2 \end{bmatrix} \\
&= - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{2 \begin{bmatrix} p^2 & pq & pr \\ pq & q^2 & qr \\ pr & qr & r^2 \end{bmatrix}}{(p^2 + q^2 + r^2)/a^2} \begin{bmatrix} 1/a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/a^2 \end{bmatrix} \\
&= - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{2}{p^2 + q^2 + r^2} \begin{bmatrix} p^2 & pq & pr \\ pq & q^2 & qr \\ pr & qr & r^2 \end{bmatrix} \quad (6-28)
\end{aligned}$$

这就是前面 § 6-4 中推导的 (6-18) 式。

由 (6-27) 式:

$$\begin{aligned}
[\tilde{T}] &= - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{2 \begin{bmatrix} 1/a^2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/a^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} [pqr]}{(p^2 + q^2 + r^2)/a^2} \\
&= - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{2 \begin{bmatrix} p & 1/a^2 \\ q & 1/a^2 \\ r & 1/a^2 \end{bmatrix} [pqr]}{(p^2 + q^2 + r^2)/a^2} \\
&= - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{2}{p^2 + q^2 + r^2} \begin{bmatrix} p^2 & pq & pr \\ pq & q^2 & qr \\ pr & qr & r^2 \end{bmatrix} \quad (6-29)
\end{aligned}$$

可见对立方晶系, $[T]$ 与 $[\tilde{T}]$ 是相同的, 因为对立方晶系, 晶面的法线方向指数与晶面指数完全相同。

2. 求六方晶系孪晶的晶面变换矩阵 T 和晶向变换矩阵 $\bar{T}$ 由(6-25b)式:

$$\begin{aligned}
 [T] &= - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{2}{|p|^2} \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} [pqr] \begin{bmatrix} 4/3a^2 & 2/3a^2 & 0 \\ 2/3a^2 & 4/3a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/c^2 \end{bmatrix} \\
 &= - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{2}{|p|^2} \begin{bmatrix} p^2 & pr & pr \\ pq & q^2 & qr \\ r^2 & rq & r^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4/3a^2 & 2/3a^2 & 0 \\ 2/3a^2 & 4/3a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/c^2 \end{bmatrix} \\
 &= - \frac{1}{|p|^2} \begin{bmatrix} |p|^2 & 0 & 0 \\ 0 & |p|^2 & 0 \\ 0 & 0 & |p|^2 \end{bmatrix} \\
 &\quad + \frac{2}{|p|^2} \begin{bmatrix} \frac{4}{3a^2} p^2 + \frac{2}{3a^2} pr, & \frac{2}{3a^2} p^2 + \frac{4}{3a^2} pq, & \frac{pr}{c^2} \\ \frac{4}{3a^2} pq + \frac{2}{3a^2} q^2, & \frac{2}{3a^2} pq + \frac{4}{3a^2} q^2, & \frac{qr}{c^2} \\ \frac{4}{3a^2} rp + \frac{2}{3a^2} rq, & \frac{2}{3a^2} rp + \frac{4}{3a^2} rq, & \frac{r^2}{c^2} \end{bmatrix} \\
 &= - \frac{1}{|p|^2} \begin{bmatrix} |p|^2 - \frac{8}{3a^2} p^2 - \frac{4}{3a^2} pr, & -\frac{4}{3a^2} p^2 - \frac{8}{3a^2} pq, & -\frac{3pr}{c^2} \\ -\frac{8}{3a^2} pq - \frac{4}{3a^2} q^2, & |p|^2 - \frac{4}{3a^2} pr - \frac{8}{3a^2} q^2, & -\frac{2qr}{c^2} \\ \frac{8}{3a^2} rp - \frac{4}{3a^2} rq, & -\frac{4}{3a^2} rp - \frac{8}{3a^2} rq, & |p|^2 - \frac{2r^2}{c^2} \end{bmatrix} \\
 &\quad - \frac{4}{3a^2 |p|^2} \begin{bmatrix} p^2 + pq + q^2 - 2p^2 - pq + \frac{3a^2}{4} \times \frac{r^2}{c^2}, & -p^2 - 2pq, & -\frac{3}{4} a^2 \cdot \frac{2pr}{c^2} \\ -2pq - q^2, & p^2 + pq + q^2 - pq - 2q^2 + \frac{3}{4} \left(\frac{a}{c}\right)^2 r^2, & -\frac{3}{4} a^2 \cdot \frac{2qr}{c^2} \\ -2rp - rq, & -rp - 2rq, & p^2 + pq + q^2 + \frac{3}{4} a^2 \cdot \frac{r^2}{c^2} - \frac{3}{4} a^2 \cdot \frac{2}{c^2} r^2 \end{bmatrix} \\
 &= - \frac{4}{3a^2 |p|^2} \begin{bmatrix} q^2 - p^2 + \frac{3}{4} \left(\frac{a}{c}\right)^2 r^2, & -p^2 - 2pq, & -\frac{3}{2} \left(\frac{a}{c}\right)^2 pr \\ -2pq - q^2, & p^2 - q^2 + \frac{3}{4} \left(\frac{a}{c}\right)^2 r^2, & -\frac{3}{2} \left(\frac{a}{c}\right)^2 qr \\ -2rp - rq, & -rp - 2rq, & p^2 + pq + q^2 - \frac{3}{4} \left(\frac{a}{c}\right)^2 r^2 \end{bmatrix} \\
 &= \frac{4}{3a^2 |p|^2} \begin{bmatrix} p^2 - q^2 - \frac{3}{4} \left(\frac{a}{c}\right)^2 r^2, & p(p+2q), & \frac{3}{2} \left(\frac{a}{c}\right)^2 pr \\ q(q+2p), & q^2 - p^2 - \frac{3}{4} \left(\frac{a}{c}\right)^2 r^2, & \frac{3}{2} \left(\frac{a}{c}\right)^2 qr \\ r(q+2p), & r(p+2q), & \frac{3}{4} \left(\frac{a}{c}\right)^2 r^2 - p^2 - pq - q^2 \end{bmatrix} \quad (6-30)
 \end{aligned}$$

由(6-27)式:

$$\begin{aligned}
 [\tilde{T}] &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{2}{|p|^2} \begin{bmatrix} 4/3a^2 & 2/3a^2 & 0 \\ 2/3a^2 & 4/3a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} [pqr] \\
 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{2}{|p|^2} \begin{bmatrix} 4/3a^2 & 2/3a^2 & 0 \\ 2/3a^2 & 4/3a^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/c^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p^2 & pq & pr \\ pq & q^2 & qr \\ rp & rq & r^2 \end{bmatrix} \\
 &= -\frac{1}{|p|^2} \begin{bmatrix} |p|^2 & 0 & 0 \\ 0 & |p|^2 & 0 \\ 0 & 0 & |p|^2 \end{bmatrix} \\
 &\quad + \frac{2}{|p|^2} \begin{bmatrix} \left(\frac{4}{3a^2}\right)p^2 + \left(\frac{2}{3a^2}\right)pq, \left(\frac{4}{3a^2}\right)pq + \left(\frac{2}{3a^2}\right>q^2, \left(\frac{4}{3a^2}\right>pr + \left(\frac{2}{3a^2}\right>qr \\ \left(\frac{2}{3a^2}\right>p^2 + \left(\frac{4}{3a^2}\right>pq, \left(\frac{2}{3a^2}\right>pq + \left(\frac{4}{3a^2}\right>q^2, \left(\frac{2}{3a^2}\right>pr + \left(\frac{4}{3a^2}\right>qr \\ \frac{rp}{c^2}, \frac{rq}{c^2}, \frac{r^2}{c^2} \end{bmatrix} \\
 &= -\frac{1}{|p|^2} \begin{bmatrix} |p|^2 & 0 & 0 \\ 0 & |p|^2 & 0 \\ 0 & 0 & |p|^2 \end{bmatrix} \\
 &\quad + \frac{1}{|p|^2} \begin{bmatrix} \left(\frac{8}{3a^2}\right>p^2 + \left(\frac{4}{3a^2}\right>pq, \left(\frac{8}{3a^2}\right>pq + \left(\frac{4}{3a^2}\right>q^2, \left(\frac{8}{3a^2}\right>pr + \left(\frac{4}{3a^2}\right>qr \\ \left(\frac{4}{3a^2}\right>p^2 + \left(\frac{8}{3a^2}\right>pq, \left(\frac{4}{3a^2}\right>pq + \left(\frac{8}{3a^2}\right>q^2, \left(\frac{4}{3a^2}\right>pr + \left(\frac{8}{3a^2}\right>qr \\ \frac{2rp}{c^2}, \frac{2rq}{c^2}, \frac{2r^2}{c^2} \end{bmatrix} \\
 &= \frac{4}{3a^2|p|^2} \begin{bmatrix} 2p^2 + pq - p^2 - pq - q^2 - \frac{3}{4}\left(\frac{a}{c}\right)^2 r^2, 2pq + q^2, 2pr + qr \\ p^2 + 2pq, pq + 2q^2 - p^2 - pq - q^2 - \frac{3}{4}\left(\frac{a}{c}\right)^2 r^2, pr + 2qr \\ \frac{3}{2}\left(\frac{a}{c}\right)^2 rp, \frac{3}{2}\left(\frac{a}{c}\right)^2 rq, \frac{3}{2}\left(\frac{a}{c}\right)^2 r^2 - p^2 - pq - q^2 - \frac{3}{4}\left(\frac{a}{c}\right)^2 r^2 \end{bmatrix} \\
 &= \frac{4}{3a^2|p|^2} \begin{bmatrix} p^2 - q^2 - \frac{3}{4}\left(\frac{a}{c}\right)^2 r^2, q(2p + q), r(2p + q) \\ p(p + 2q), q^2 - p^2 - \frac{3}{4}\left(\frac{a}{c}\right)^2 r^2, r(p + 2q) \\ \frac{3}{2}\left(\frac{a}{c}\right)^2 rp, \frac{3}{2}\left(\frac{a}{c}\right)^2 rq, \frac{3}{4}\left(\frac{a}{c}\right)^2 r^2 - p^2 - pq - q^2 \end{bmatrix} \quad (6-31)
 \end{aligned}$$

将(6-31)与(6-30)相比较,可见将(T)转置以后,就得到李晶的晶向指数变换矩阵 $[\tilde{T}]$ 。

以铯为例, $a=2.665 \text{ \AA}$, $c=4.947 \text{ \AA}$, $c/a=1.856$, 李晶面 $\{pqr\}$ 为 $\{102\}$, $\{111\}$, $\{112\}$, 代入(6-30)式,可得:

$$[T]_{102} = 0.536 \begin{bmatrix} 0.130 & 1 & 0.870 \\ 2 & -1.870 & 0 \\ 4 & 2 & -0.130 \end{bmatrix}$$

$$[T]_{111} = 0.310 \begin{bmatrix} -0.218 & 3 & 0.435 \\ 3 & -0.218 & 0.435 \\ 3 & 3 & -2.782 \end{bmatrix}$$

二、衍射

[221]方向。新老轴与[111]共平面,三组新老轴相对于[111]的夹角均为 54.734° ,图中只标出了 $[100]_M$ 和 $[100]_T$ 相对于[111]的夹角。基体和孪晶有共同的(111)、(222)、...斑点列。

基体和孪晶所有同名斑点都象图中用斜线标出的由(000)、 $(222)_{M,T}$ 、 $(220)_M$ 和 $(220)_T$ 组成的倒易面一样,具有上述共面等角的性质。

当电子束沿某一确定方向入射到试样上时,厄瓦尔德球面就沿垂直于电子束方向,通过倒易原点与基体、孪晶的重迭倒易点阵相切,得到同时含有基体、孪晶斑点的倒易截面,即复合衍射谱。

下面我们就来建立分析孪晶衍射的解析表达式。

参看图6-10,定义:

$p[pqr]^*$ 为孪晶轴矢量;

$h[hkl]^*$ 为与 $(hkl)_M$ 相应

的倒易矢量;

$H[HKL]^*$ 表示与 $(hkl)_M$

同名的孪晶反射 $(hkl)_T$ 在基体倒易点阵中位置的倒易矢量;

$S[STR]$ 为 h 和 p 所在晶带的带轴矢量。

显然,给定 $(hkl)_M$ 和 $[pqr]^*$ (对一定晶系, $[pqr]^*$ 为已知), S 可求:

$$S = p \wedge h \quad (6-32)$$

如前所述, h 、 p 、 H 共面,故有

$$H \cdot S = 0 \quad (6-33)$$

位于 H 处的 $(hkl)_T$ 和 $(hkl)_M$ 同指数,应有

$$|H| = |h| \quad (6-34)$$

注意到 h 和 H 与 p 共面且夹角相等,故有

$$H \cdot p = h \cdot p \quad (6-35)$$

在(6-32)~(6-35)这组式子中,(6-32)式为已知条件,其余三个式子中,只有 H 是未知的,故用于计算的基本关系式,可简单表

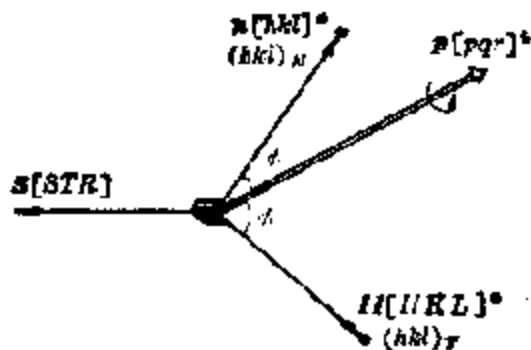


图6-10 孪晶轴、基体与孪晶同名倒易矢的位置关系

表 6.3 求不同晶系穿晶反射位置 H 的公式

晶系	$H \cdot S = 0$	$ H = h $	$H \cdot P = h \cdot p$
立方		$H^2 + K^2 + L^2 = h^2 + k^2 + l^2$	$(h-k)p + (K-k)q + (L-l)r = 0$
六方		$4\left(\frac{c}{a}\right)^2 (H^2 + HK + K^2 - h^2 - hk - k^2) + 3(L^2 - l^2) = 0$	$4\left(\frac{c}{a}\right)^2 \{ (H-h) + 0.5(E-k) \} p + [K-k + 0.5(H-k)] q + 3(L-l)r = 0$
四方		$(H^2 + K^2 - h^2 - k^2) + \left(\frac{c}{a}\right)^2 (L^2 - l^2) = 0$	$(L-l)p + (K-k)q + \left(\frac{c}{a}\right)^2 (L-l)r = 0$
正交		$\frac{1}{a^2} (H^2 - h^2) + \frac{1}{b^2} (K^2 - k^2) + \frac{1}{c^2} (L^2 - l^2) = 0$	$\frac{1}{a^2} (H-h)p + \frac{1}{b^2} (K-k)q + \frac{1}{c^2} (L-l)r = 0$
菱形	$LH + LK + LK = 0$	$H^2 + K^2 + L^2 - h^2 - k^2 - l^2 = \frac{2 \cos \alpha}{1 + \cos \alpha}$	$\frac{(H-h)p + (K-k)q + (L-l)r}{(K+L-h-k)p + (H+L-h-l)q + (H+K-k-l)r} = \frac{\cos \alpha}{1 + \cos \alpha}$
单斜		$H^2 - h^2 + \frac{\sin^2 \beta}{b^2} (K^2 - k^2) + \frac{l^2 - l'^2}{c^2} + \frac{2 \cos \beta}{a c} (hL - HL) = 0$	$\frac{H-h}{a^2} p + \frac{\sin^2 \beta}{b^2} (K-k)q + \frac{(L-l)}{c^2} r + \frac{\cos \beta}{c c} [(L-l)p + (h-H)r] = 0$
三斜		$S_{11}(L^2 - h^2) + S_{22}(K^2 - k^2) + S_{33}(L^2 - l^2) + 2S_{12}(HL - hk) + 2S_{23}(KL - kl) + 2S_{31}(HL - hl) = 0$	$S_{11}(H-h)p + S_{22}(K-k)q + S_{33}(L-l)r + S_{12}[(K-k)p + (H-h)q] + S_{23}[(L-l)q + (K-k)r] + S_{31}[(L-l)p + (H-h)r] = 0$
斜方	式(中)	$S_{11} = (bc \sin \alpha)^2$ $S_{22} = (ac \sin \beta)^2$ $S_{33} = (ab \sin \gamma)^2$	$S_{11} = bc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)$ $S_{22} = a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)$ $S_{33} = ab^2 c (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta)$

述为下面的联立方程组:

$$\left. \begin{aligned} H \cdot S &= 0 \\ |H| &= |h| \\ H \cdot p &= h \cdot p \end{aligned} \right\} \quad (6-36)$$

给定一个 $(hkl)_M$, 就可通过(6-36)式求得形成 (pqr) 孪晶时, $(hkl)_T$ 在基体倒易点阵中的位置 H 。

(6-36)式应用于各晶系的具体表达式见表 6-3。

讨论:

(1) 由于(6-36)式第二个方程为三元二次方程, 恒有一与 $(hkl)_M$ 同指数的增根, 应予舍弃。由于此增根恒与 $(hkl)_M$ 同指数, 可直接剔除, 不会造成分析中困难。

(2) 由表 6-3 可知, 各晶系的 $|H| = |h|$ 和 $H \cdot p = h \cdot p$ 方程的具体表达式, 有良好的对称性, 将物质已知点阵常数代入, 最终方程均十分简单。

(3) 四方和六方晶系的公式, 均与轴比 c/a 有关, 因此完全可以利用电子计算机, 作出一定轴比范围的孪晶衍射位置表, 如同我们已经编制的应用于立方晶系的这种数表(附录七)一样, 也可使四方和六方晶系孪晶的衍射标定工作大为简化。

(4) 由菱形、单斜、三斜的公式可以看出, 即使对于过去视为畏途的这三类低对称性晶体的孪晶谱标定, 采用此法也并不复杂, 因为将有关常数代入后, 所得到的联立方程仍然非常简单。

2. 应用举例

〔例 8〕求 fcc 晶体形成(111)孪晶时, 孪晶反射 $(3\bar{1}1)_T$ 在基体倒易点阵中的位置。

已知: $(pqr) = (111)$; $(hkl)_T = (3\bar{1}1)$ 。由(6-32)式, 知 $[STR] = [0\bar{2}2]$, 代入表 6-3 中立方晶系一栏的公式中, 得:

$$\begin{cases} L = K \\ H^2 + K^2 + L^2 = 11 \\ H + K + L = 5 \end{cases}$$

解此联立方程, 得:

$$H[HKL]^* = \frac{1}{3}[177]^*。$$

另解 $H[HKL]^* = [311]^*$ 为增根, 故予舍弃。

[例 9] 求 bcc 晶体形成 (112) 孪晶时, $(213)_T$ 反射在基体倒易点阵中的位置。

已知: $(pqr) = (112)$; $(hkl)_T = (213)$ 。由 (6-32) 式, 知 $[STR] = [111]$, 代入表 6-3 中立方晶系一栏的公式中, 得:

$$\begin{cases} -H - K + L = 0 \\ H^2 + K^2 + L^2 = 14 \\ H + K + L = 9 \end{cases}$$

上述联立方程的解是 $H[HKL]^* = [123]^*$ 。另解 $H[HKL] = [213]^*$ 为增根, 同样予以舍弃。

以上二例的解均可在我们计算编制的附录七的相应表中查到, 完全一致。

[例 10] 求 AlN (hcp 结构, $c/a = 1.633$, $a = 3.114 \text{ \AA}$, $c = 4.985 \text{ \AA}$) 形成 (112) 孪晶时, $(\bar{1}10)_T$ 反射在基体倒易点阵中的位置。

已知: $(pqr) = (112)$, $(hkl)_T = (\bar{1}10)$, 容易求得 $[STR] = [22\bar{2}]$ 。将上述数据连同点阵常数代入表 6-3 中六方晶系的一组公式中, 经整理即得:

$$\begin{cases} H + K - L = 0 \\ H^2 + HK + K^2 + 1.8L^2 = 1 \\ H + K + 0.375L = 0 \end{cases}$$

解此联立方程, 其解为 $H[HKL]^* = [1\bar{1}0]^*$ 。读者不仿用本章前面介绍的求孪晶转换矩阵的方法, 即应用 (6-24b) 和 (6-25b) 式进行计算, 也可得到同样结果, 但计算却要繁琐得多。

第七章

高阶劳厄区电子衍射谱的分析

§ 7.1 引言

简单的单晶电子衍射谱, 对应于厄瓦尔德球与零层倒易面相截时被截倒易点在底片上的投影。这些衍射斑点称为零阶劳厄区斑点。但是, 在许多情况下, 电子衍射谱上, 除零阶劳厄斑点外, 往往还出现厄瓦尔德球与高层倒易面相截获得的高阶劳厄斑点。它们或者与零阶劳厄区斑点相重, 或者与它们分开, 在其两侧成带状分布。这就是本章所讨论的高阶劳厄区衍射谱。在复杂电子衍射谱中, 高阶劳厄区衍射谱是最常见的一种; 此外, 还有二次衍射、孪晶衍射、织构衍射等。高阶劳厄斑点是一种十分有用的衍射信息, 不仅可以利用它来鉴定物相, 还可根据劳厄区分开和重迭的程度, 估计试样在电子束入射方向的厚度; 从劳厄区分布的不对称情况, 可以获得晶体取向的有用资料。因此, 了解高阶劳厄区的形成原理及其分析方法是十分重要的。下面首先从几何上予以描述, 然后介绍分析方法和应用。

§ 7-2 形成高阶劳厄区衍射谱的几何学讨论

一、概述

通常可以见到对称劳厄区 and 不对称劳厄区两种情况, 示意如图 7-1。当晶体晶带轴方向 $[uvw]$ 严格与入射电子束方向反向平行时, 若厄瓦尔德球面同时与零层 ($N=0$)、高层 ($N \neq 0$) 倒易面相截, 这时得到对称劳厄区衍射谱, 如图 7-1 (a)。零阶劳厄区直径和高阶劳厄区宽度取决于试样沿电子束方向的厚度 t , 一般 t 越小,

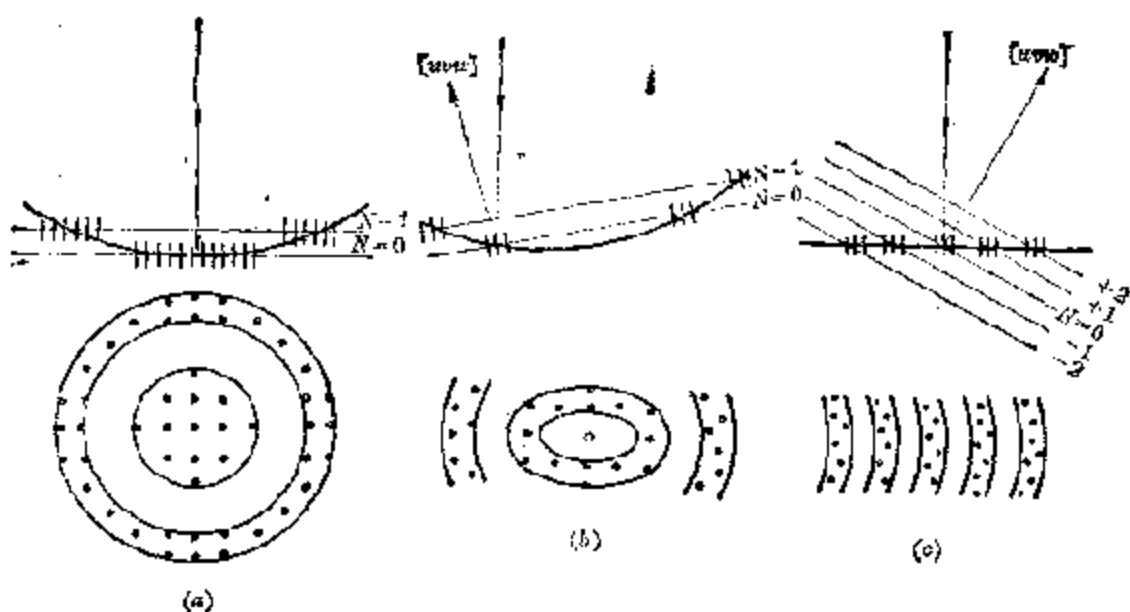


图 7-1 形成高阶劳厄区的几何示意图

(a) 对称情况; (b)、(c) 不对称情况

零阶劳厄区直径越大, 高阶劳厄区的斑点带也越宽。至于零阶与高阶劳厄区之间的空白区宽度, 则除试样厚度因素外, 还与衍射物质的晶格常数有关。一般 t 越小(倒易点沿电子束方向拉得越长), 晶格常数越大(倒易面间距越小), 空白区越窄; 极端情况下, 零阶与高阶劳厄区相连接甚至重迭, 空白区消失。对同一物质进行衍射, 有时观察到基本重复单元相同, 但互相错开的两套衍射斑点, 大多数情况下即属于这种对称情况。如果晶带轴方向不严格平行于电子束方向, 就会出现不对称劳厄区衍射谱, 如图 7-1(b) 和 (c)。由于上面讨论的原因, (b) 中零阶劳厄区可以不是偏心环, 而是实心偏心圆盘。高阶劳厄区与零阶劳厄区之间的空白区也可能变窄甚至消失。(c) 则更多出现在晶格常数较大的薄片状衍射物质中, 例如钢中的第二相, 如 Laves 相(六方, $a=4.75\sim 5.00\text{ \AA}$, $c=7.7\sim 8.15\text{ \AA}$)、 σ 相(四方, $a=8.8\sim 9.2\text{ \AA}$, $c=4.5\sim 4.8\text{ \AA}$)、 χ 相(bcc., $a=8.92\text{ \AA}$)、 $M_{23}C_6$ (fcc., $a=10.5\sim 10.7\text{ \AA}$) 等。(c) 中高阶劳厄区同时出现的个数, 取决于晶体取向和晶格常数。

正常情况下, 高阶与零阶劳厄区斑点的基本重复单元是相同的。自一般说来, 两者相对位置有一此规律。

可以将导致形成高阶劳厄区的主要因素归纳如下:

(1) 由于电子波长(λ)很短,所以厄瓦尔德球半径($1/\lambda$)很大,例如:

加速电压 (kV)	100	150	200	1000
厄瓦尔德球半径($\text{\AA}^{-1}$)	27.02	28.26	39.57	114.94

而通常的金属,如 $\alpha\text{-Fe}$, $d_{110} = 2.027\text{\AA}$, $|g_{110}| = \frac{1}{d_{110}} = 0.493\text{\AA}^{-1}$ 。

厄瓦尔德球半径,100 kV 下是它的 55 倍,200 kV 下是它的 80 倍。使球面的局部可近似视为平面,当其与倒易面相截时,可同时与该面上的许多倒易点相截,因此,投影到底片上,形成了由许多斑点规则排列组成的劳厄区。

(2) 试样分析区域越薄,倒易点沿电子束方向拉得越长,从而增加了它们与厄瓦尔德球相截的机会。此外,由于高压电源不可避免总有微小波动,因此波长不严格为定值,厄瓦尔德球面应视为有一定厚度的球壳,可以想象,这也有利于厄瓦尔德球与倒易杆相截。

(3) 试样取向对形成高阶劳厄区也有影响。可以从底片上高阶劳厄区分布的不对称情况,推知晶带轴方向 $[uvw]$ 偏离电子束入射方向的程度。换言之,也可以据此估计晶带轴方向 $[uvw]$ 偏离准确取向的程度。

(4) 除上述因素外,被分析物质晶格常数(正空间单胞尺寸)的大小,也对同一底片上所获得劳厄区的个数有直接影响。利用这一点,在进行相分析时,可以粗略估计衍射物质晶格常数的大致范围。

二、不对称劳厄区

1. 晶格常数和晶带轴指数对劳厄区分布的影响

参见图 7-2,规定图中各符号的意义如下:

B ——电子束入射方向; $I_{[uvw]} = ua + vb + wc$, 是倒易面法线方向的正空间矢量。取绝对值,称为“晶向长度”,见表 4-2; D ——

$$D_{[uvw]} = \frac{1}{a\sqrt{u^2+v^2+w^2}} \quad (7-2)$$

由(7-2)式可见, 衍射物质单胞愈小(即 a 愈小), 晶带轴指数 $[uvw]$ 愈低, 倒易面间距 $D_{[uvw]}$ 就愈大, 劳厄区将分得愈开, 同时获得多个劳厄区的可能性也愈小。反之, 当晶体单胞尺寸较大时, 就较易看到多个劳厄区。图 7-3 是钢中碳化物 $M_{23}C_6$ 的电子衍射谱。

表 7-1 列出了相同衍射条件下, 几种物质出现劳厄区的情况。

表 7-1 相同 LA 值下, 几种物质的衍射花样

衍射物质	点阵常数 (Å)	$[uvw]$	$I_{[uvw]}$ (Å)	$\frac{1}{ I_{[uvw]} }$ (Å ⁻¹)	出现劳厄 区个数
α -Fe (bcc)	$a=2.866$	$[100]$	2.866	0.349	1
AlN (hcp)	$a=3.114$ $c=4.975$	$[00\cdot1]$	4.975	0.201	1
$M_{23}C_6$ (fcc)	$a=10.637$	$[110]$	15.091	0.067	2
M_3C (正交)	$a=10.276$ $b=10.034$ $c=11.923$	$[2\cdot\bar{1}]$	52.903	0.019	3
M_6C (fcc)	$a=17.082$	$[138]$	95.321	0.010	4

2. 倒易杆长度和电子束偏离倒易面法线方向的角度 ρ 对劳厄区宽度的影响

由图 7-2 知, 劳厄区宽度直接决定于圆锥半顶角 α 。现在要求 α 与 ρ 及 S (根据运动学理论, $S=1/t$, t ——沿电子束方向晶体的厚度) 的关系。

第 N 层倒易面(注意不是投影到底片上的斑点图)的方程是:

$$z = \frac{N}{|I_{[uvw]}|} \quad (7-3)$$

为简单计, $|I_{[uvw]}|$ 以后记作 I 。若考虑到沿电子束入射方向的晶体尺寸很小, 倒易点拉长成杆, 则(7-3)式应改为:

$$z = \frac{N}{I} \pm S \quad (7-4)$$

厄瓦尔德球与倒易面相截,被截到的那些倒易点,一定落在半顶角为 α 的圆锥的底周上,且对应于不同层的锥有公共轴 OP ,这些同心锥延长交底片于一系列椭圆。如取图7-2的坐标系, Y 轴垂直于图面,则底片上的椭圆方程是:

$$\frac{(x-x_0)^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (7-5)$$

椭圆的中心坐标为 $(x_0, 0)$ 。利用解析几何, (7-5)式中的有关参数可表示为:

$$\left. \begin{aligned} \text{中心坐标 } x_0 &= \sin 2\rho / [\lambda (\cos 2\alpha + \cos 2\rho)] \\ \text{半长轴 } a &= \sin 2\alpha / [\lambda (\cos 2\alpha + \cos 2\rho)] \\ \text{半短轴 } b &= (\sqrt{2} \sin \alpha) / [\lambda \sqrt{\cos 2\alpha + \cos 2\rho}] \end{aligned} \right\} \quad (7-6)$$

上述各式中的圆锥半顶角 α ,由下式决定:

$$\cos \alpha = \cos \rho - \lambda [N/I \pm S] \quad (7-7)$$

(7-7)式由如下推导得出:

$$\begin{aligned} \cos \rho &= \overline{OP} / (1/\lambda) = \lambda \overline{OP} \\ \cos \alpha &= \overline{OP} / \left[\frac{1}{\lambda} + TQ \right] = \frac{\overline{OP}}{(1/\lambda) + (N/I \pm S) \sec \alpha} \\ &\quad \left[\text{注意: } TQ = TK \sec \alpha = \left(\frac{N}{I} \pm S \right) \sec \alpha \right] \\ &= \frac{\lambda \overline{OP}}{1 + \lambda (N/I \pm S) (1/\cos \alpha)} \\ &\quad \left[\text{注意: } \lambda \overline{OP} = \cos \rho \right] \\ &= \frac{\cos \rho}{1 + \lambda (N/I \pm S) (1/\cos \alpha)} \\ &= \cos \alpha \left[1 + \lambda (N/I \pm S) \frac{1}{\cos \alpha} \right] = \cos \rho \\ \therefore \cos \alpha &= \cos \rho - \lambda \left(\frac{N}{I} \pm S \right) \quad [\text{即(7-7)式}] \end{aligned}$$

讨论:

(1) $\rho=0$, 为对称劳厄区情况。

这时
$$\cos \alpha = 1 - \lambda \left(\frac{N}{I} \pm S \right)$$

1) $N=0$, 即零阶劳厄区, 于是上式变为:

$$\cos \alpha = 1 \mp S\lambda$$

显然, 如果只考虑 S 的绝对值, 只能有:

$$\cos \alpha = 1 - S\lambda$$

在一定加速电压(即波长 λ 一定)下, 试样愈薄, 则 S 愈大; 这时, α 愈大, 从而零阶劳厄区的半径也愈大, 通常所获得的电子衍射谱, 多属于这种情况。

2) $N \neq 0$, 即高阶劳厄区, 这时有:

$$\cos \alpha = 1 - \lambda(N/I \pm S)$$

要求 $\lambda(N/I \pm S)$ 恒大于零。注意 I 是晶体品格常数和晶带轴指数的函数, 且位于分母下。可见当单胞尺寸愈小, 晶带轴指数愈低, 试样愈薄时, 则 $\lambda(N/I \pm S)$ 值也愈大, 故 $\cos \alpha$ 愈小, α 愈大, 从而高阶劳厄区半径也愈大。

(2) $\rho \neq 0$, 为不对称劳厄区情况。

这时, 在(7-7)式中的 $\cos \rho$ 值应接近 1(因偏离角一般不大)。

1) $N=0$, 即零阶劳厄区情况, $\alpha=\rho$ 。理论上, ρ 愈大, 零阶劳厄区半径也愈大。但是, 由于倒易杆尺寸有一定限度, 而 ρ 又较大, 这时零阶劳厄区将是一个偏心的空心圆环。极端情况下, 圆环一侧将超出底片范围, 故只能记录到通过(000)的弧带, 如图 7-3。

2) $N \neq 0$, 即高阶劳厄区。由(7-7)式可知, $\cos \alpha$ 受晶体品格常数、晶带轴指数、加速电压和试样厚度的综合影响。可以指出如下几点: ρ 愈大, 不对称情况愈严重; 单胞尺寸愈小, 各劳厄区半径相应缩小, 有可能在一张底片上同时记录到多个劳厄区; 试样愈薄, 往往使劳厄区间的空白区缩小、消失, 甚至相邻劳厄区发生重叠。

3. 晶带轴偏离电子束方向的角度 ρ 的计算

如前所述, 晶带轴相对于入射电子束方向偏离一微小角度 ρ , 是导致出现高阶劳厄区的重要因素。尤为重要的是, 由于 ρ 的存

的。因而标定所获得的晶带轴指数与膜面法线方向，往往有一微小的角度差，这就是 ρ 。在衍衬工作中进行迹线分析时，需要知道准确的膜面法线方向指数，因而利用高阶劳厄区的不对称分布，计算出 ρ 角，是十分重要的。

下面介绍两种测定 ρ 角的方法。

(1) 利用正、负一阶劳厄区的位置求 $\rho^{[201]}$ 。

参见图 7-4，设晶带轴方向 $I_{[uvw]}$ 偏离电子束方向 B 一个微小角度 ρ ，类似图 7-3 那样，在底片上出现四个劳厄区： 0 阶、 $+1$ 阶、 -1 阶、 $+2$ 阶。它们的中心斑点分别为 L_0 、 L_1 、 L_{-1} 、 L_2 ，并定义：

$$\alpha_{-1} = \angle L_0 O L_{-1}$$

$$\alpha_1 = \angle L_1 O L_0$$

$$\alpha_2 = \angle L_2 O L_0$$

由图可知，

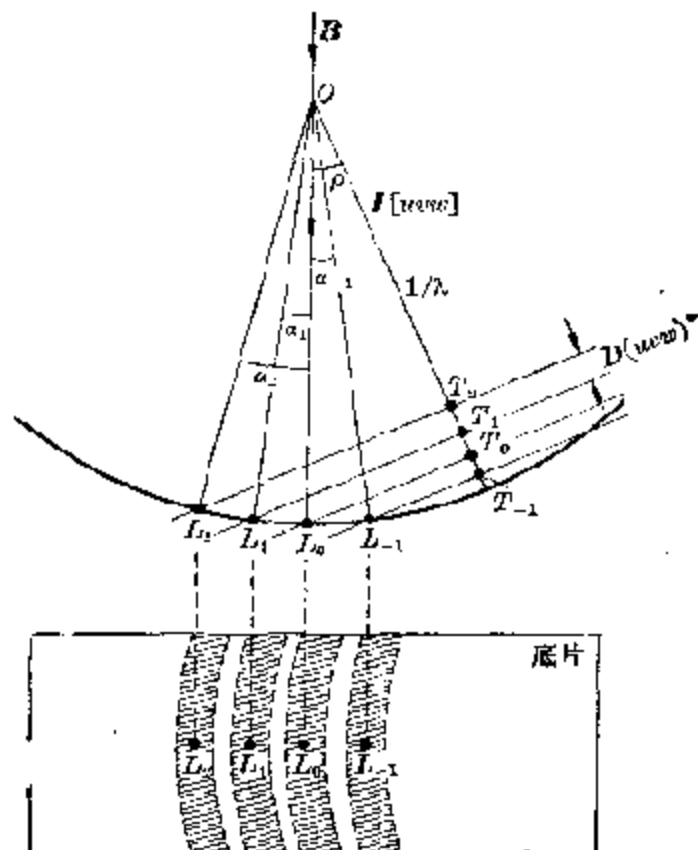


图 7-4 利用正、负一阶劳厄区位置测定 ρ

$$\left. \begin{aligned} OT_{-1} &= \frac{1}{\lambda} \cos(\rho - \alpha_{-1}) \\ OT_0 &= \frac{1}{\lambda} \cos \rho \\ OT_1 &= \frac{1}{\lambda} \cos(\rho + \alpha_1) \\ OT_2 &= \frac{1}{\lambda} \cos(\rho + \alpha_2) \end{aligned} \right\} \quad (7-8)$$

$D_{(uvw)}$ (简记作 D) 为 $(uvw)^*$ 倒易面间距, 显然:

$$D = OT_{-1} - OT_0 = OT_0 - OT_1$$

利用(7-8)式, 可得:

$$\lambda D = \cos(\rho - \alpha_{-1}) - \cos \rho = \cos \rho - \cos(\rho + \alpha_1)$$

即

$$\cos(\rho - \alpha_{-1}) - \cos \rho = \cos \rho - \cos(\rho + \alpha_1) \quad (7-9)$$

注意 α_{-1} , α_1 , α_2 都是很小的角, 并利用 $\cos(A \pm B) = \cos A \cos B \mp \sin A \sin B$, 分别简化(7-9)式的左端和右端。

左端:

$$\begin{aligned} \cos(\rho - \alpha_{-1}) - \cos \rho &= \cos \rho \cos \alpha_{-1} + \sin \rho \sin \alpha_{-1} - \cos \rho \\ &= \cos \rho \left[\cos \left(\frac{\alpha_{-1}}{2} + \frac{\alpha_{-1}}{2} \right) \right] + \sin \rho \sin \alpha_{-1} - \cos \rho \\ &= \cos \rho \left[\cos^2 \left(\frac{\alpha_{-1}}{2} \right) - \sin^2 \left(\frac{\alpha_{-1}}{2} \right) \right] + \sin \rho \sin \alpha_{-1} - \cos \rho \\ &= \cos \rho \left[\cos^2 \left(\frac{\alpha_{-1}}{2} \right) - \sin^2 \left(\frac{\alpha_{-1}}{2} \right) - 1 \right] + \sin \rho \sin \alpha_{-1} \end{aligned}$$

因 α_{-1} 很小, 故 $\sin \alpha_{-1} \approx \alpha_{-1}$, $\cos \alpha_{-1} \approx 1$, 上式可写作:

$$\begin{aligned} &\cos \rho \left[-2 \sin^2 \left(\frac{\alpha_{-1}}{2} \right) \right] + \sin \rho \sin \alpha_{-1} \\ &= -\cos \rho \cdot 2 \left(\frac{\alpha_{-1}}{2} \right)^2 + \sin \rho \sin \alpha_{-1} \\ &= -\cos \rho \cdot \frac{\alpha_{-1}^2}{2} + \alpha_{-1} \sin \rho \end{aligned}$$

同样, 右端可写作:

$$\cos \rho - \cos(\rho + \alpha_1) = \cos \rho \left(\frac{\alpha_1^2}{2} \right) + \alpha_1 \sin \rho$$

这样, (7-9) 式演化成:

$$-\cos \rho \left(\frac{\alpha_{-1}^2}{2} \right) + \alpha_{-1} \sin \rho = \cos \rho \left(\frac{\alpha_1^2}{2} \right) + \alpha_1 \sin \rho$$

即

$$\tan \rho = \frac{\alpha_{-1}^2 + \alpha_1^2}{2(\alpha_{-1} - \alpha_1)} \quad (7-10)$$

(7-10) 式就是利用非零阶劳厄区在底片上的位置求偏离角 ρ 的公式。

具体运算步骤如下:

从仪器常数求出镜筒有效长度 L ; 再在底片上量出从 (000) 到正、负一阶劳厄区中心斑点的距离: $\overline{L_0 L_1}$, $\overline{L_0 L_{-1}}$ 。就可得出:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 &= \overline{L_0 L_1} / L \\ \alpha_{-1} &= \overline{L_0 L_{-1}} / L \end{aligned} \right\} \quad (7-11)$$

将 (7-11) 式代入 (7-10) 式, 即可求出 ρ 值。

(2) 利用零阶劳厄区的半径求 ρ 。

当高阶劳厄区不明显, 而零阶劳厄区周界比较明显时, 可以应用此法。这是一个近似方法, 虽然这时零阶劳厄区偏于 (000) 一侧, 在底片上斑点分布呈椭圆形, 但仍近似视作椭圆, 如图 7-5, 有:

$$\tan \rho = r_0 / L \quad (7-12)$$

式中: r_0 ——在底片上测得的零阶劳厄区半径;

L ——从 $L\lambda$ 求得的镜筒有效长度。

由 (7-12) 式可得:

$$\lambda L \tan \rho = \lambda r_0 \quad (7-13)$$

根据 (7-13) 式, 可以作出如图 7-6 的算图 (诺模图), 借此可以方便地查出在一定 $L\lambda$ 下, 不同零阶劳厄区半径所对应的 ρ 值。

4. 高阶劳厄区的曲率

如图 7-7 所示不对称劳厄区情况。设电子束方向 B 与倒易面 $(uvw)^*$ 的法线方向 $[uvw]$ 成 ρ 角, 易知 ρ 亦为零阶劳厄区的衍射圆锥半顶角。除 $(uvw)_0^*$ 与厄瓦尔德球相截外, 还有 $(uvw)^*$ 的高层

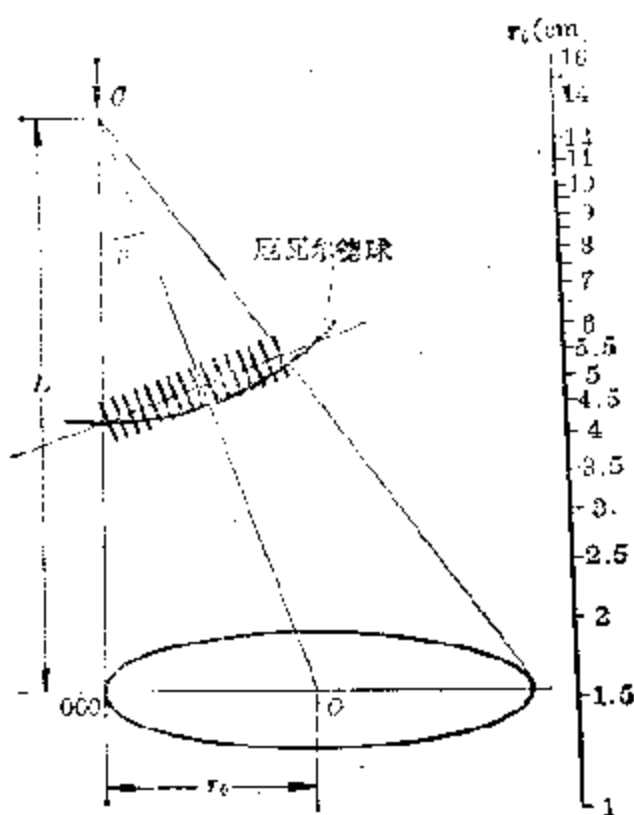


图 7-5 利用零阶劳厄区半径求 ρ

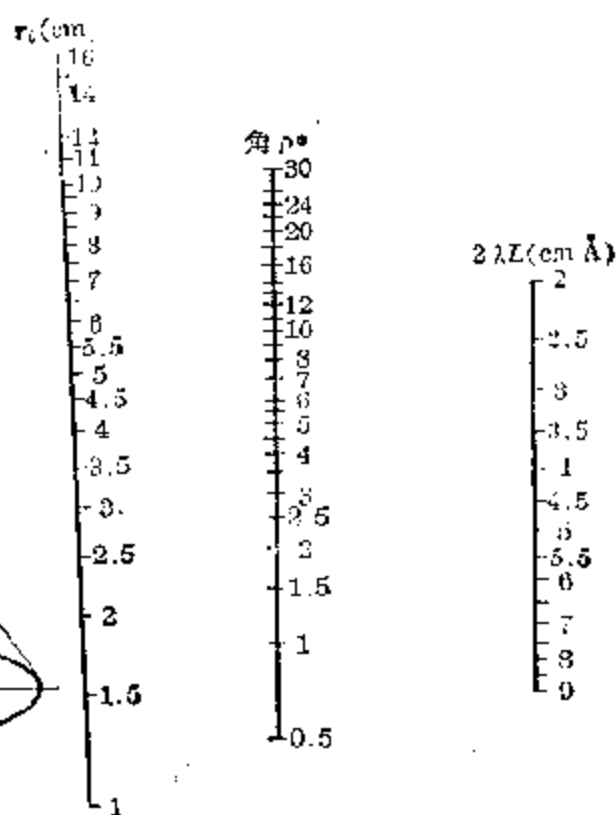


图 7-6 根据零阶劳厄区半径 r_0 直接求偏离角 ρ 值的算图

倒易面与厄瓦尔德球相截。从而获得如图所示的多个劳厄区不对称分布。

设 r_0 为零阶劳厄区半径; r_N ($N=1, 2, 3, \dots$) 为 N 阶劳厄区半径; ψ_N 是 N 阶劳厄区中心斑点对应衍射圆锥的半顶角(锥的中心轴均为 $O'C$)。又设 G^* 是 $(uvw)_1^*$ 上一倒易点对应的倒易矢, 它在 $I_{(uvw)}$ 上的分量为 G_v 。则由图(图中 $N=2$)可知:

$$N \cdot G_v = O'M_0 - O'M_N = OO' \cos \rho - O'O_N \cos \psi_N$$

考虑到 $O'O = O'O_N = \frac{1}{\lambda}$, 故有:

$$G_v = (\cos \rho - \cos \psi_N) / N\lambda \quad (7-14)$$

G_v 就是 $(uvw)^*$ 倒易面面间距, 是一个重要的晶体学参数。(7-14)式在实际应用时, 需将公式中有关参数换算成能从底片上测量的参数, 例如 r_0 , r_N 以及镜筒有效长度 L 等。

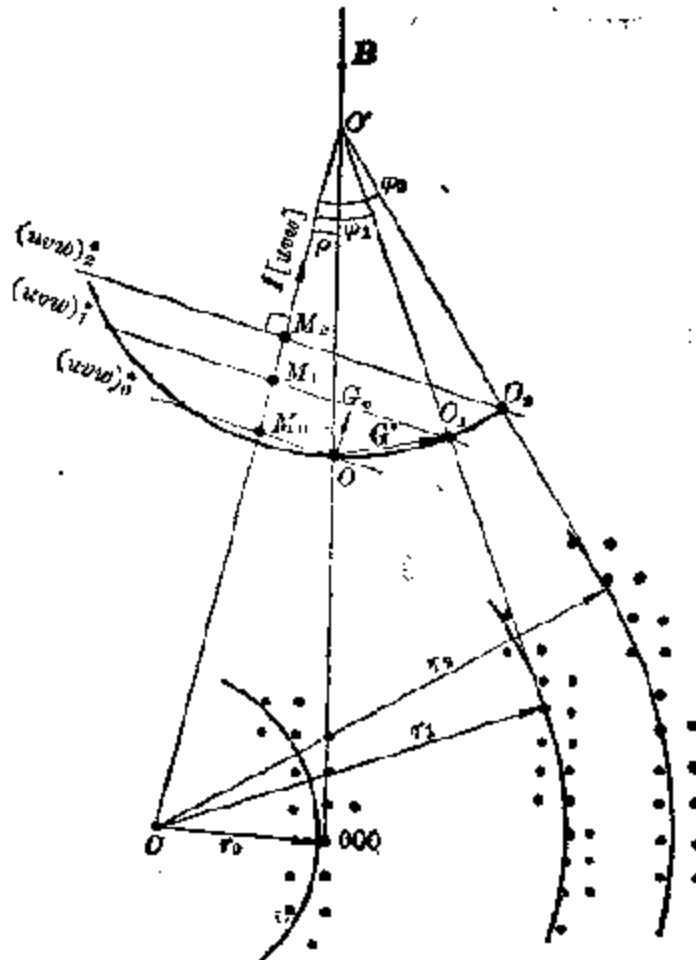


图 7-7 不对称情况下高阶劳厄区的曲率

考虑到电子衍射中, ρ 和 ψ 均很小, 利用公式 $\cos 2A = 1 - 2 \sin^2 A$, 则:

$$\cos \rho = \cos 2\left(\frac{\rho}{2}\right) = 1 - 2 \sin^2 \frac{\rho}{2} = 1 - 2\left(\frac{\rho}{2}\right)^2 \approx 1 - \frac{\rho^2}{2}$$

作同样处理, 则有:

$$\cos \psi_N \approx 1 - \frac{\psi_N^2}{2}$$

将上述 $\cos \rho$ 、 $\cos \psi$ 的近似值代入 (7-14) 式, 可得:

$$\begin{aligned} \Theta_e &= \left[\left(1 - \frac{\rho^2}{2}\right) - \left(1 - \frac{\psi_N^2}{2}\right) \right] / N\lambda = |\rho^2 - \psi_N^2| / 2N\lambda \\ &= [(\tau_0/L)^2 - (\tau_N/L)^2] / 2N\lambda, \\ &\quad [\text{考虑 } \rho \approx \tau_0/L, \psi_N \approx \tau_N/L] \\ &= (\tau_0^2 - \tau_N^2) / 2N\lambda L^2 = (\tau_0 + \tau_N) |\tau_0 - \tau_N| / 2N\lambda L^2 \end{aligned}$$

(7-15)

可以利用(7-15)式,通过测量零阶和高阶劳厄区半径 r_0, r_N , 代入公式, 近似计算倒易面间距 G_0 。在衍射实际中, 如果高阶劳厄区的 (hkl) 反射的 $G_H = 0$, 即高阶与零阶斑点相重, 则 $1/G_0$ 应是正空间单胞常数 a, b 或 c 中的一个。于是有:

$$a, b \text{ 或 } c = \frac{2NL^2\lambda}{(r_0 + r_N)(r_0 - r_N)} \quad (7-16)$$

实用上通常取 $N=1$, 这时单胞的两个基矢落在 $(uvw)^*$ 上。

三、对称劳厄区^[21]

上面在讨论不对称劳厄区时, 曾简略地讨论过 $\rho=0$ 的情况, 这就是对称劳厄区, 下面将对这种情况作较为深入的进一步讨论。

当电子束入射方向严格地与倒易面法线方向平行时, 零阶和高阶劳厄区呈对称分布。在实际工作中, 常常发现衍射底片上的斑点分布有各种不同情况: 有时密集于底片中央一个小范围; 有时布满整个底片; 有时除零阶外, 还有一个或多个高阶劳厄区, 有时劳厄区间的空白区宽, 有时又较窄。这些都与什么因素有关, 我们能从中获得哪些有用的晶体学信息?

参见图 7-8, 设 G_N^* (G_{hkl}^*) 为与 N 阶劳厄区中心斑点 (hkl) 相对应的倒易矢量, 则在底片上 N 阶劳厄区半径 r_N 由下式决定:

$$r_N d_{hkl} = L\lambda \quad (7-17)$$

因为 $\triangle OGC \sim \triangle OPG$, 故

$$\frac{|G_{hkl}^*|}{2/\lambda} = \frac{N\left(\frac{1}{|I|}\right)}{|G_{hkl}^*|}$$

式中 $1/|I| = D_{(uvw)^*}$, 是倒易面间距。将此式整理, 即得:

$$|G_{hkl}^*| = \left[2N\left(\frac{1}{|I|}\right) / \lambda \right]^{1/2}$$

因 $|G_{hkl}^*| = \frac{1}{d_{hkl}}$, 故有:

$$d_{hkl} = \left[\frac{\lambda}{2N\left(\frac{1}{|I|}\right)} \right]^{1/2} \quad (7-18)$$

将(7-18)式代入(7-17)式, 得:

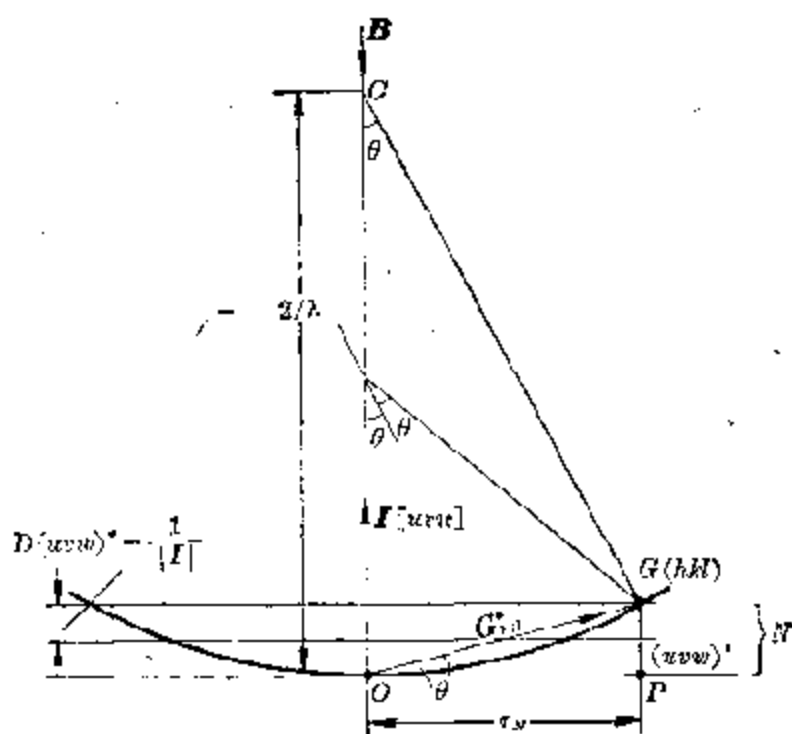


图 7-8 对称劳厄区的衍射几何

$$r_N = L\lambda \left[\frac{2N \left(\frac{1}{\lambda |I|} \right)}{\lambda} \right]^{1/2} \quad (7-19)$$

(7-19)式就是对称劳厄区情况下,求任意高阶劳厄区半径的公式。 N 是阶数, $|I|$ 是倒易面法线晶向长度,可从表 4-2 查到。例如对立方晶系, $|I| = a\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$,代入(7-19)式,得:

$$r_N = L\lambda \left[\left(\frac{2N}{\lambda a} \right) (u^2 + v^2 + w^2)^{-1/2} \right]^{1/2} \quad (7-20)$$

(7-20)式表达了电子束严格平行于晶带轴时,劳厄区半径 r_N 与仪器常数 $L\lambda$ 、晶格常数 a 和晶带轴指数 $[uvw]$ 之间的关系。由此可知,加速电压愈高,晶格常数愈大,晶带轴指数愈高,则劳厄区半径将愈小,在底片上有可能同时出现多个劳厄区。这个公式较之前面介绍的用衍射锥半顶角 α 来描述劳厄区大小的公式

$$\cos \alpha = 1 - \lambda \left(\frac{N}{I} \pm S \right)$$

有更为直观的优点。不足之处是(7-20)式没有考虑试样厚度的影响。下面我们把厚度因素考虑进去加以讨论。

如图 7-9, 设 (hkl) 是零层倒易面与厄瓦尔德球相截的最外边的一个倒易点。由于晶体极薄, 而使倒易点拉长成杆, 根据运动学理论, 晶体厚度 t 与 S 有如下关系, 即 $S=1/t$ 。设 M 为倒易矢 $\overline{OB}$ 的中点, 则由于 $\triangle OOM \sim \triangle OAB$, 应有 $\frac{1}{t} : \frac{1}{d} = \frac{1}{2d} : \frac{1}{\lambda}$; 再由 $r_0 d = L\lambda$, 故零阶劳厄区半径 r_0 为:

$$r_0 = L \sqrt{\frac{2\lambda}{t}} \quad (7-21)$$

这个式子定性地反映了晶体厚度 (t) 对劳厄区半径的影响。可由此式借助劳厄区半径大小, 粗略地估计出晶体沿电子束方向的线尺寸。

上面我们在讨论不对称情况下高阶劳厄区的曲率时, 得到 (7-14) 式; 在对称情况下, $\rho=0$, 因而图 7-7 应换成图 7-8, 这时 (7-14) 式变成:

$$G_v = (\cos \rho - \cos \psi_N) / N\lambda = (1 - \cos \psi_N) / N\lambda.$$

$$= \left[1 - \left(1 - \frac{\psi_N^2}{2} \right) \right] / N\lambda,$$

$$[\text{因 } \cos \psi_N \approx 1 - \psi_N^2/2, \text{ 见上节}]$$

$$= \psi_N^2 / 2N\lambda = (r_N^2 / L^2) / 2N\lambda,$$

$$[\text{因 } \psi_N \approx r_N / L, \text{ 见上节}]$$

$$= r_N^2 / (2N\lambda L^2)$$

故

$$c = \frac{1}{G_v} = 2N\lambda L^2 / r_N^2 \quad (7-22)$$

从底片上测量 N 阶劳厄区半径后, 由 (7-22) 式可求得晶体单胞晶格常数之一。

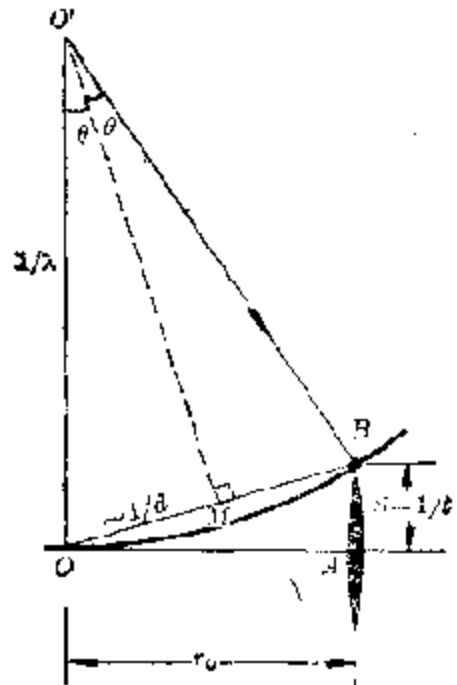


图 7-9 晶体厚度对劳厄区半径的影响

§ 7-3 高层倒易面 $(uvw)_N^*$ 上倒易点在零层倒易面 $(uvw)_0^*$ 上的投影位置

有多种方法计算高层倒易面上的倒易点在零层倒易面上的投影位置, 下面介绍两种处理方法。

一、取原倒易点阵坐标为坐标系进行计算

如图 7-10, 实心圆点组成的平面, 为零层倒易面 $(uvw)_0^*$, 在底片上就是零阶劳厄区斑点。空心圆点表示高层倒易面上的倒易点。设在高层倒易面上有一倒易点 $G(hkl)$, 相应倒易矢为 G_{hkl} , 并表示为:

$$G_{hkl} = h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^* \quad (7-23)$$

$G(hkl)$ 投影到 $(uvw)_0^*$ 上为 $P(h_H k_H l_H)$ 。在高阶与零阶不相重情况下, h_H, k_H, l_H 一般不是整数。 $(uvw)^*$ 的法线方向是:

$$I[uvw] = u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 + w\mathbf{a}_3 \quad (7-24)$$

此为用正空间坐标表示; 同一法线方向, 若用倒空间坐标表示, 则为:

$$I^*[u^*v^*w^*] = u^*\mathbf{a}_1^* + v^*\mathbf{a}_2^* + w^*\mathbf{a}_3^* \quad (7-25)$$

上述矢量以后简记为 I 或 I^* 。

G_{hkl} 可以分解为 G_V 和 G_H , 前者沿 I 或 I^* ; 后者落在 $(uvw)_0^*$ 上。 G_H 的端点 P 即 $G(hkl)$ 在零阶劳厄区上的投影点。既然 $G_V \parallel I^*$, 可令:

$$G_V = \alpha I^* \quad (7-26)$$

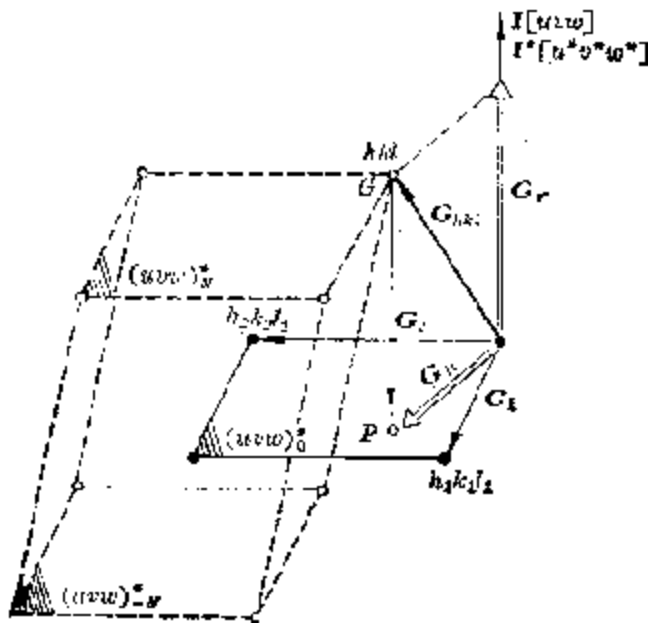


图 7-10 高层倒易面上一倒易点 $G(hkl)$, 在零层倒易面上的投影 P

- 零层倒易面上的斑点;
- 高层倒易面上的斑点

显然, 应有:

$$\mathbf{G}_V \cdot \mathbf{I} = \mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{I} = N \quad (7-27)$$

由(7-23)、(7-24)和(7-26), 得:

$$\begin{aligned} \mathbf{G} \mathbf{I}^* \cdot \mathbf{I} = \mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{I} &= (h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^*) \cdot (u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 + w\mathbf{a}_3) \\ &= hu + kv + lw = N \end{aligned} \quad (7-28)$$

令(7-27)式右端等于 N , 是由于我们假定 $G(hkl)$ 所在的倒易面为第 N 层。(7-28)式即广义晶带定律。由此得出:

$$G = N / (\mathbf{I}^* \cdot \mathbf{I}) \quad (7-29)$$

(7-29)代入(7-26), 得:

$$\mathbf{G}_V = [N / \mathbf{I}^* \cdot \mathbf{I}] \cdot \mathbf{I}^*$$

因为 $\mathbf{G}_{hkl} = \mathbf{G}_V + \mathbf{G}_H$, 故立即可得:

$$\mathbf{G}_H = \mathbf{G}_{hkl} - \frac{N}{\mathbf{I}^* \cdot \mathbf{I}} \cdot \mathbf{I}^* \quad (7-30)$$

(7-30)式是适用于任意晶系, 求高阶倒易点在零层倒易面上投影位置的普遍公式。将它写成分解形式, 则为

$$\left. \begin{aligned} h_H &= h - \frac{N}{\mathbf{I}^* \cdot \mathbf{I}} \cdot u^* \\ k_H &= k - \frac{N}{\mathbf{I}^* \cdot \mathbf{I}} \cdot v^* \\ l_H &= l - \frac{N}{\mathbf{I}^* \cdot \mathbf{I}} \cdot w^* \end{aligned} \right\} \quad (7-31)$$

只要找到对应于各晶系的 u^* 、 v^* 、 w^* 和 $\mathbf{I}^* \cdot \mathbf{I}$ 表达式, 并确定最邻近的高阶劳厄区的阶数 N , 就可以求出 $\mathbf{G}(hkl)$ 在 $(uvw)_0^*$ 上的投影位置 $(h_H k_H l_H)$ 。注意应用此公式时, 需将所有倒空间的量, 换算成正空间的量, 例如晶格常数等。这就需要借助第四章所述坐标变换公式(4-33b), 并只要将该公式中的 h 、 k 、 l 换成 u^* 、 v^* 、 w^* 就可以了。即:

$$\begin{bmatrix} u^* \\ v^* \\ w^* \end{bmatrix} = [G] \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

变换矩阵 $[G]$, 也已经根据(4-34)式, 对各晶系进行了计算, 并列

表 7-2 不同晶系 u^*, v^*, w^* 表达式

晶系	晶胞特征	u^*	v^*	w^*
正交	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	ua^2	vb^2	wc^2
立方	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	ua^2	va^2	wa^2
四方	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	ua^2	va^2	wc^2
六方	三轴制 $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	$\left(u - \frac{v}{2}\right)a^2$	$\left(v - \frac{u}{2}\right)a^2$	wc^2
	四轴制 $a_1 = a_2 = a_3 = a \neq c$ $\alpha_1\alpha_2 = \alpha_2\alpha_3 = \alpha_3\alpha_1 = 120^\circ$	u	v	$\frac{2}{3} \frac{c}{a} w, (v' = t)$
三斜	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$ua^2 + vab \cos \gamma + wac \cos \beta$	$uab \cos \gamma + vb^2 + vbc \cos \alpha$	$uac \cos \beta + vbc \cos \alpha + wc^2$
单斜	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	$ua^2 + wac \cos \beta$	vb^2	$uaw \cos \beta + wc^2$

于表 4-2 中。为方便查找, 现将 u^*, v^*, w^* 换算成正空间量的结果列如表 7-2。

前已假定, I^* 和 I 是倒易面法线方向, 是同一晶向在倒空间和正空间的两种表示, 应有 $I^* \cdot I = I \cdot I = |I|^2$, 因此 (7-31) 式中的 $I^* \cdot I$, 就是晶向长度的平方, 可以从表 4-2 查得。在表 4-2 中, 采用符号 r 表示 $|I|$, r^2 表示 $|I|^2$ 。 N 如何选定, 将在下一节中讨论。

为便于计算机上运算, (7-31) 式也可改写成如下矩阵形式:

$$\begin{bmatrix} h_H \\ k_H \\ l_H \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} - \left\{ \frac{N}{|I|^2} \right\} \cdot [G] \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} \quad (7-32)$$

二、取新坐标轴 I^* 、 G_1 和 G_2 进行计算

选取零层倒易面上构成基本重复单元的两个倒易矢 $G_1(h_1k_1l_1)$ 和 $G_2(h_2k_2l_2)$ 以及倒易面的法线方向矢量 $I^*[u^*v^*w^*]$, 构成一个新的坐标系。让高层倒易面的倒易点 $G(hkl)$ 投影到由 G_1 、 G_2 组成的 $(uvw)^*$ 上(见图 7-10)。

设倒易面间距为 $D_{(uvw)^*}$, 则 N 阶倒易面可用下述向量方程表示:

$$G_{hkl} \cdot n_0 = N D_{(uvw)^*} \quad (7-33)$$

n_0 是倒易面法线方向单位矢量。用 $|I| = 1/D_{(uvw)^*}$ 代入 (7-33) 式, 可得:

$$G_{hkl} \cdot n_0 = N \cdot \frac{1}{|I|}$$

即

$$G_{hkl} \cdot I = N$$

这就是前面的(7-27)式, 亦即广义晶带定律。为确定 $G(hkl)$, 此式仍以写成 $hu + kv + lw = N$ 形式为宜。

上面选定的新坐标系: G_1 、 G_2 、 I^* 与原倒易坐标系之间, 可以简洁地用矩阵形式表达:

$$\begin{bmatrix} G_1 \\ G_2 \\ I^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ u^* & v^* & w^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1^* \\ a_2^* \\ a_3^* \end{bmatrix} \quad (7-34)$$

将 G_{hkl} 表示为新坐标系上的三个分量:

$$\begin{aligned} G_{hkl} &= ha_1^* + ka_2^* + la_3^* \quad (\text{旧倒易坐标系}) \\ &= \mathcal{H}G_1 + \mathcal{K}G_2 + \mathcal{L}I^* \quad (\text{新坐标系}) \\ &= \mathcal{H}(h_1a_1^* + k_1a_2^* + l_1a_3^*) + \mathcal{K}(h_2a_1^* + k_2a_2^* + l_2a_3^*) \\ &\quad + \mathcal{L}(u^*a_1^* + v^*a_2^* + w^*a_3^*) \end{aligned}$$

由此立即可得:

$$\begin{cases} h_1\mathcal{H} + h_2\mathcal{K} + u^*\mathcal{L} = h \\ k_1\mathcal{H} + k_2\mathcal{K} + v^*\mathcal{L} = k \\ l_1\mathcal{H} + l_2\mathcal{K} + w^*\mathcal{L} = l \end{cases}$$

即

$$\begin{bmatrix} h_1 & h_2 & u^* \\ k_1 & k_2 & v^* \\ l_1 & l_2 & w^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{H} \\ \mathcal{K} \\ \mathcal{L} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}$$

由此得 G_{hkl} 在新坐标系三轴上的投影分量为:

$$\begin{bmatrix} \mathcal{H} \\ \mathcal{K} \\ \mathcal{L} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_1 & h_2 & u^* \\ k_1 & k_2 & v^* \\ l_1 & l_2 & w^* \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} \quad (7-35)$$

式中, $h_1k_1l_1$, $h_2k_2l_2$ 在标定零阶劳厄区后即为已知; u^* 、 v^* 、 w^* 是不同晶系晶格常数与晶带轴指数 $[uvw]$ 的函数, 已计算出如表 7-2 所示。根据消光条件确定 N 值以后, 利用广义晶带定律可以确定 (hkl) 。因此 (7-35) 式右端各值均为已知, 不难计算出高阶 (hkl) 点在 $(uvw)^*$ 上的投影位置 $\mathcal{H}$ 、 $\mathcal{K}$ 、 $\mathcal{L}$ 。实际上, $\mathcal{L}$ 可以不必求出。

应用此式解题时, 求右端逆矩阵比较麻烦, 但对电子计算机来说, 并没有什么困难。我们在作上述处理时, 对新坐标系第三轴 $I^*[u^*v^*w^*]$, 没有如文献 [22] 那样规定 $I^*[u^*v^*w^*] = \frac{1}{a^2} I[uvw]$ 。但这样做, 在后来用矩阵方法求 u^* 、 v^* 、 w^* 时, 并没有什么不便。此外, 所选 $G(hkl)$ 点的投影, 有可能不落在由 G_1 、 G_2 为邻边组成的平行四边形内。不过, 即使这样, 在作图时却不会有什么困难。计算值 $\mathcal{H}$ 、 $\mathcal{K}$ 前面的正负号, 将帮助我们找到投影点 P 的正确位置。

§ 7-4 高阶劳厄区衍射谱标定程序及举例

一、与标定有关的若干问题

(1) N 值如何取?

当衍射谱出现高阶劳厄区斑点时, 应采用广义晶带定律: $hu + kv + lw = N$ 决定高阶劳厄区的阶次。但有时紧靠零层的上一层倒易面上所有反射, 结构因子均为零; 这时, 只有更上一层才开始产生衍射斑点, 即第一个高阶劳厄区的阶次不是 $N=1$, 而是 $N=2$ 。

不同晶系,在特定晶带轴 $[uvw]$ 下, N 取值各不相同。

以面心立方为例:

1) 当 u, v, w 三指数为一偶两奇时,例如 $[uvw] = [211]$,则不论 h, k, l 为全奇或全偶, N 必为偶,故 N 只能取 $0, \pm 2, \pm 4, \pm 6, \dots$ 。

2) 当 u, v, w 三指数为两偶一奇时,例如 $[uvw] = [221]$,则如果 h, k, l 为全偶, N 仍为偶,故取 $0, \pm 2, \pm 4, \pm 6, \dots$;而如如果 h, k, l 为全奇, N 取 $0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4, \dots$ 。

3) 当 u, v, w 三指数全为奇时,情况与上述2)相同。当 u, v, w 三指数全为偶时, N 恒取偶值,即 $N = 0, \pm 2, \pm 4, \pm 6, \dots$ 。

由此可以归纳面心立方 N 取值的规律是: $u+v+w = \text{奇数}$ 时, $N = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4, \dots$,阶次连续; $u+v+w = \text{偶数}$ 时, $N = 0, \pm 2, \pm 4, \pm 6, \dots$,阶次不连续,恒取偶数。

仿此,可得体心立方的 N 取值规律是: u, v, w 为全奇或全偶时, $N = 0, \pm 2, \pm 4, \pm 6, \dots$,阶次不连续,恒取偶数; u, v, w 为奇偶混合时, $N = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$,阶次连续。

对其它晶系,可作相似分析。六方、三斜、单斜等低对称性晶系,恒有连续 N 值,即 $N = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ 。

(2) 零阶与各高阶劳厄区的斑点配置相同,即基本重复单元几何形状相同。只当禁止反射反常出现时,才会使零阶与高阶点列配置发生差异。零阶与高阶劳厄区两套点列,少数情况下可能相重,多数情况下则位移一段距离。

(3) 由于厄瓦尔德球有一定曲率,而计算高阶劳厄斑点在零阶衍射谱的位置时,是按垂直投影建立公式的,因此,计算结果往往与实际位置略有出入。但实际上,除靠近底片边沿的高阶斑点外,靠近中心区域的高阶斑点的投影位置,仍与计算值相差无几。

(4) 在处理同时存在多个劳厄区的衍射谱时,首先要将零阶劳厄区斑点找出。有些斑点的分布看起来像两个劳厄区,但实际为两个晶带,应详予鉴别。这可以从两个方面加以考虑:① 高阶劳厄区斑点配置与零阶相同,而两个晶带的斑点配置一般是不同

的,并有一列共轭斑点;高阶劳厄区与零阶劳厄区则没有这种共轭性。②如果是高阶劳厄区,各斑点强度与零阶相应位置斑点的强度有相同的相对强度,而两个晶带则没有这个规律性。找出零阶劳厄区斑点后,先标定它们,求出 $[uvw]$ 。再根据消光规律确定 N 。然后按 $hu+kv+lw=N$,选定一个高阶斑点 $G(hkl)$ 。于是可以利用(7-31)式或(7-32)式、(7-35)式,进行计算,求出 $h_H k_H l_H$ 或 $\mathcal{H}$, $\mathcal{K}$, $\mathcal{L}$ 。最后一步是作图,以检验计算位置是否与实标位置相符。

(5) 如果用第一种方法求出 $h_H k_H l_H$,作图法是一种很有用的方法,将在下面例题中介绍。

二、计算举例

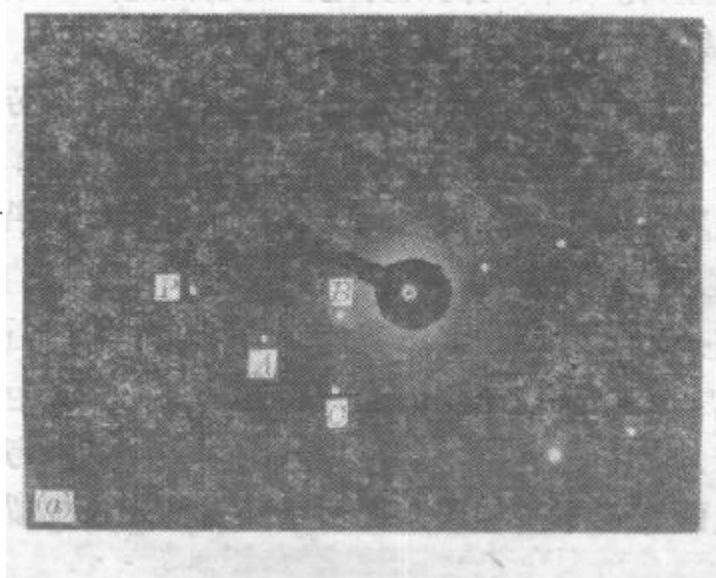
〔例1〕 图7-11(a)是作者从30CrMnSiA钢的断口萃取相获得的电子衍射谱^[117],加速电压100kV,用Au标定, $L\lambda=17.852\text{ mm}\cdot\text{\AA}$,试标定电子衍射谱,并估计电子束方向偏离晶带轴方向的程度。

1. 衍射谱标定

从衍射谱分析,可知由三个劳厄区组成,其衍射几何如图7-1(c),包含零阶和正、负一阶劳厄区,为不对称情况。

(1) 零阶劳厄区

由于零阶劳厄区中心附近斑点不全,取其左方三角形 ABO 试标,然后向右平移至中心。从萃取相外貌估计,考虑到合金成分



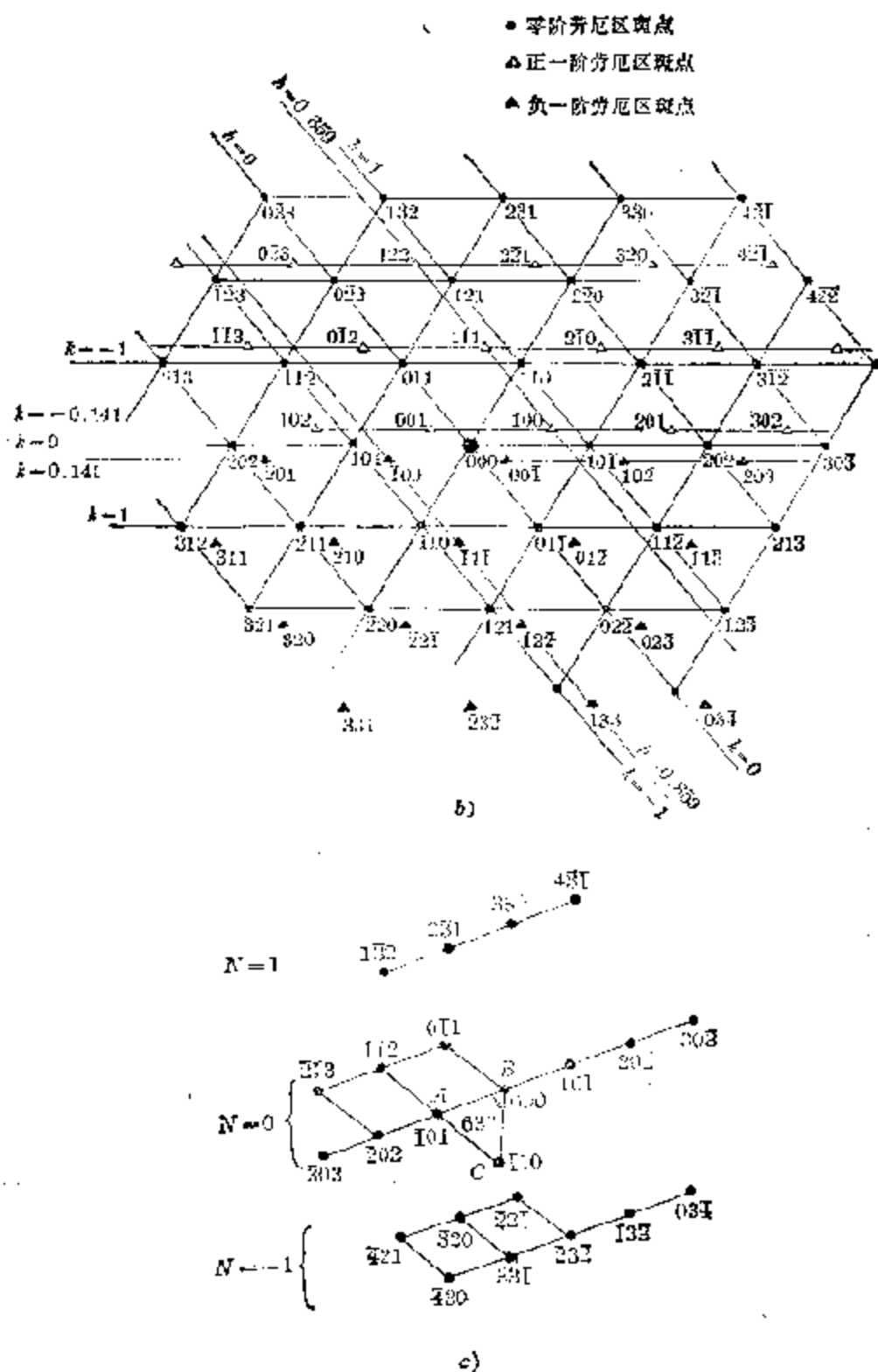


图 7-11 结构键中 AlN 的电子衍射分析 [117]

(a) 电子衍射谱; (b) 计算的 0, ±1 阶衍射谱; (c) 电子衍射谱的标定

和热处理条件,它可能是六方晶系的 AlN。根据 ASTM 卡片数据,AlN 的晶格常数是: $a=3.114 \text{ \AA}$, $c=4.985 \text{ \AA}$, $c/a=1.633$ 。利用第五章 § 5-4 介绍的《六方晶系电子衍射谱标定数据表》,进行标定。测量 $BO=6.443 \text{ mm}$, $BA=7.315 \text{ mm}$, $BO/BA=0.883$, $\angle OBA=63^\circ$, 在 $c/a=1.633$ 的一组表格中查对,知此倒易面指数为 $(111)^*$ 。 BO 可标为 $(\bar{1}10)$, BA 可标为 $(\bar{1}01)$, 右移通过原点,于是可标定如图 7-11(c),用实圆点表示。

利用仪器常数 $L\lambda=17.352 \text{ mm\AA}$ 验算各点对应的面间距数据,与 ASTM 卡片数据符合良好。如:

$$\bar{1}01 \text{ 点} \quad d=17.352/7.315=2.371 \text{ \AA}$$

$$\text{卡片} \quad d_{\bar{1}01}=2.372 \text{ \AA}$$

$$01\bar{1} \text{ 点} \quad d=17.352/7.321=2.370 \text{ \AA}$$

$$\text{卡片} \quad d_{01\bar{1}}=2.372 \text{ \AA}$$

利用 $d_{hkl}=\left[\frac{4}{9}\times\frac{h^2+\frac{hk+l}{a^2}+\frac{l^2}{c^2}}{a^2}\right]^{-1/2}$ 由 $(hkl)=(1\bar{1}0)$, 求得 $a=3.114 \text{ \AA}$; 由 $(hkl)=(10\bar{1})$, 求得 $c=4.985 \text{ \AA}$ 。这些数据都与 ASTM 卡片的 AlN 数据十分接近,因此,可以认为将衍射谱标定为 AlN 的 $(111)^*$ [即 $(11\bar{2}3)^*$] 倒易面是完全合适的。

同一试样略作倾斜,获得含有高阶劳厄区且基本重复单元为正三角形的六方晶系 $(001)^*$ 倒易面,高阶网格平移至零阶劳厄区后,所有斑点完全相重,这也正是标定为 AlN 所预期的,进一步证实了标定的可靠性。

(2) 正、负一阶劳厄区

对六方晶系, $N=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, 采用三指数系统标定,利用公式(7-31)进行计算。

正一阶:

$$\text{查表 7-2} \quad u^*=\left(u-\frac{v}{2}\right)a^2, v^*=\left(v-\frac{u}{2}\right)a^2, w^*=wc^2。$$

$$\text{查表 4-2} \quad \mathbf{I}^* \cdot \mathbf{I} = r^2 = a^2(u^2 - uv + v^2) + c^2w^2$$

已确定 $N=\pm 1$, 先取 $N=1$ 。

由 $hu + kv + lw = 1$, 已知 $[uvw] = [111]$, 故 (100) 是 $(111)_1^*$ 上一倒易点, 即公式中 $(hkl) = (100)$ 。将上列各值以及 $a = 3.114 \text{ \AA}$, $c = 4.935 \text{ \AA}$ 代入 (7-31) 式, 即得:

$$\begin{cases} h_H = 0.859 \\ k_H = -0.141 \\ l_H = -0.719 \end{cases}$$

即 $(hkl) = (100)$ 在零阶劳厄区上的位置是:

$$[h_H k_H l_H] = [0.859, -0.141, -0.719]$$

将上述计算结果标注在图 7-11(b) 中, 用记号 $\triangle$ 表示(只标了上半部)。这与把照片上半部劳厄斑点网格平移至零阶劳厄区后, 其位置基本相符。上述位置也可分解为:

$$\begin{aligned} [h_H k_H l_H] &= [0.859, -0.141, -0.719] \\ &= 0.719[10\bar{1}] + 0.141[1\bar{1}0] \end{aligned}$$

这样表示, 标注更方便。

负一阶:

计算步骤同上, 取 $N = -1$, 代入 $hu + kv + lw = -1$, 因 $[uvw] = [111]$, 故 (hkl) 可取 $(\bar{1}00)$ 。将有关值代入公式 (7-31), 可得 $(\bar{1}00)$ 在 $(111)_1^*$ 上的投影位置为:

$$\begin{aligned} [h_H k_H l_H] &= [-0.859, 0.141, 0.719] \\ &= 0.719[\bar{1}01] + 0.141[\bar{1}\bar{1}0] \end{aligned}$$

标注于图 7-11(b), 用记号 $\blacktriangle$ 表示(只标了下半部)。同样将照片下半部劳厄斑点网格平移至零阶劳厄区上, 其位置与图(b)计算的位置也基本相符。

有了图(b)这个总图, 很容易找出底片上出现的三个劳厄区全部斑点的指数, 如图(c)所示。

2. 估计电子束方向偏离 $[111]$ 轴的角度

应用公式 (7-10), 此处: $\overline{L_0 L_1} = 22.5 \text{ mm}$, $\overline{L_0 L_2} = 17.5 \text{ mm}$, $L = 17.352/0.037 = 469 \text{ mm}$, 故:

$$\tan \rho = \left[\left(\frac{22.5}{469} \right)^2 + \left(\frac{17.5}{469} \right)^2 \right] / 2 \left(\frac{17.5}{469} - \frac{22.5}{469} \right) = -0.1666$$

$$\therefore \rho \approx 9.45^\circ$$

即电子束入射方向(或试样膜面法线方向)偏离 $[111]$ 方向约 9.45° 。这样大的偏离角,对于计算衍射工作的许多参量,是不可忽视的。

〔例 2〕 某面心立方结构萃取相的电子衍射谱如图 7-12(a),试标定其指数。

衍射谱由两个劳厄区组成,是一种不对称劳厄区分布,由于电子束不严格平行于晶带轴方向,厄瓦尔德球交截了零层和上一层倒易面。

先考虑通过透射斑的零阶劳厄区斑点分布,整个衍射谱由边

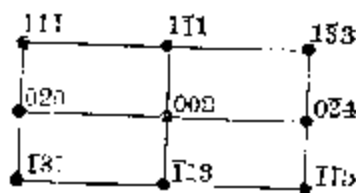
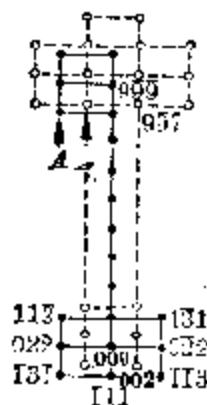


图 7-12 某面心立方萃取相的电子衍射分析

长比为 1.63:1 的矩形网格组成, 是典型的 $(211)^*$ 倒易面斑点分布。长边对应于 $(0\bar{2}2)$, 短边对应于 $(1\bar{1}1)$ 。查阅附录六(1) $(211)^*$, 可以将全部斑点标定于图(a)下半部。

考察高阶劳厄区, 也是由与零阶大致相同的边长比矩形组成。将它扩展至零阶劳厄区, 发现二者错动了一个距离(如图 b 所示)。

因 $[uvw] = [211]$, 指数和为偶数, 故取 $N=2$, 由 $hu + kv + lw = 2$, 取 2 阶劳厄区一点 $(hkl) = (002)$, 由此可画出 ± 2 阶劳厄区基本网格如图(c)。下面再求 (002) 在零阶劳厄区上的位置坐标。由表 7-2, $u^* = ua^2, v^* = va^2, w^* = wa^2$; 由表 4-2, $I^* \cdot I = r^2 = a^2(u^2 + v^2 + w^2)$; 连同 $[uvw] = [211]$, $(hkl) = (002)$ 以及 a 值一并代入(7-31)式, 可得:

$$\begin{cases} h_H = -2/3 \\ k_H = -1/3 \\ l_H = 5/3 \end{cases}$$

$$\therefore [h_H k_H l_H] = \frac{1}{3} [2\bar{1}5] = \frac{1}{2} [0\bar{2}2] + \frac{2}{3} [\bar{1}11]$$

这便是正二阶劳厄区上 (002) 反射在零阶上的位置。可以立即将 $(1\bar{1}1)$ 、 $(1\bar{1}1)$ 、 (020) 和 (002) 四点标注在零阶劳厄区上。正好与底片上部斑点网格延伸到零阶劳厄区时的斑点位置相重。

为了标注底片上部全部高阶斑点, 最好将零阶劳厄区两列斑点(如 A), 扩展到高阶劳厄区范围(参见图 b)中。这些斑点指数加 (002) , 就是该点右下方的高阶斑点指数, 如 $999 + 002 = 997, \dots$ 。附录六 零阶、高阶劳厄区斑点重迭图形就是这样计算绘制出来的(后由电子计算机作了校验)。

§ 7-5 标定高阶劳厄区衍射谱的直接方法^[178]

1981 年刘文西曾提出一种矢量分析方法^[179], 借此可以直接标定高阶劳厄斑点的指数。这里我们提出另一种可以根据高阶劳厄斑点在零阶衍射谱上的位置, 直接标定高阶斑点指数的方法。参

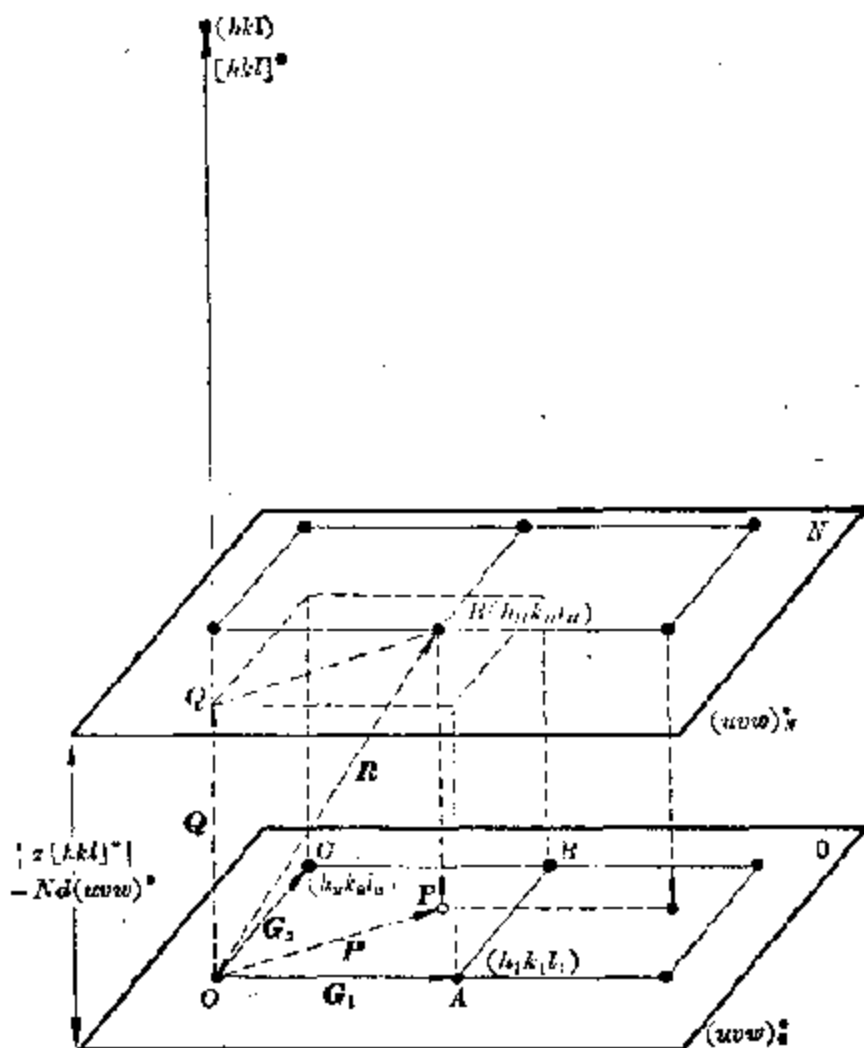


图 7-13 直接标定高阶劳厄斑点的指数之几何关系

见图 7-13, 设 N 阶倒易面上一反射 R , 其指数为 $(h_1 k_1 l_1)$, 投影到零阶上为 P 点。均以倒易矢表示之。 P 落在零阶上以 $G_1(h_1 k_1 l_1)$ 和 $G_2(h_2 k_2 l_2)$ 为邻边的 $OABO$ 平行四边形中。 R 在零层倒易面上的投影矢量为 P , R 在零层与 N 层之间的垂直分量为 Q , 即

$$R = Q + P \quad (7-36)$$

显然, P 的坐标由下式决定:

$$\begin{aligned} P &= xG_1 + yG_2 = x[h_1 k_1 l_1]^* + y[h_2 k_2 l_2]^* \\ &= [xh_1 + yh_2, xk_1 + yk_2, xl_1 + yl_2]^* \end{aligned} \quad (7-37)$$

x 、 y 一般为小于 1 的分数。 Q 的坐标可通过下述程序决定: 由 $(h_1 k_1 l_1)$ 和 $(h_2 k_2 l_2)$ 求得晶带轴指数 $[uvw]$, 再由 (4-33b) 式 (亦见表

4-2) 求出与 $[uvw]$ 对应的倒易矢, 即

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = G \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

于是 $\mathbf{Q}$ 必为 $[hkl]^*$ 的一部分, 即

$$\mathbf{Q} = z[hkl]^* = [zh, zk, zl]^* \quad (7-38)$$

故在求解(7-36)式时, 由于(7-37)式中的 x, y 可从底片上测得, 因此只要决定了(7-38)式的 z , 即可求得 $\mathbf{R}_c$.

易知 $|[hkl]^*| = \frac{1}{d_{(hkl)}}$, 而 $|\mathbf{Q}| = Nd_{(uvw)^*}$, 故有:

$$z = \frac{|\mathbf{Q}|}{|[hkl]^*|} = \frac{Nd_{(uvw)^*}}{\frac{1}{d_{(hkl)}}} = Nd_{(uvw)^*}d_{(hkl)} \quad (7-39)$$

式中 $d_{(uvw)^*}$ 可由(4-31)式求得(亦见表4-2), N 决定于消光条件, $d_{(hkl)}$ 亦为可求, 于是 z 值可得。

至此, (7-36)式可以写作:

$$\left. \begin{aligned} h_H &= zh + xh_1 + yh_2 \\ k_H &= zk + xk_1 + yk_2 \\ l_H &= zl + xl_1 + yl_2 \end{aligned} \right\} \quad (7-40)$$

写成矩阵形式, 即:

$$\begin{bmatrix} h_H \\ k_H \\ l_H \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h & h_1 & h_2 \\ k & k_1 & k_2 \\ l & l_1 & l_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z \\ x \\ y \end{bmatrix} \quad (7-41)$$

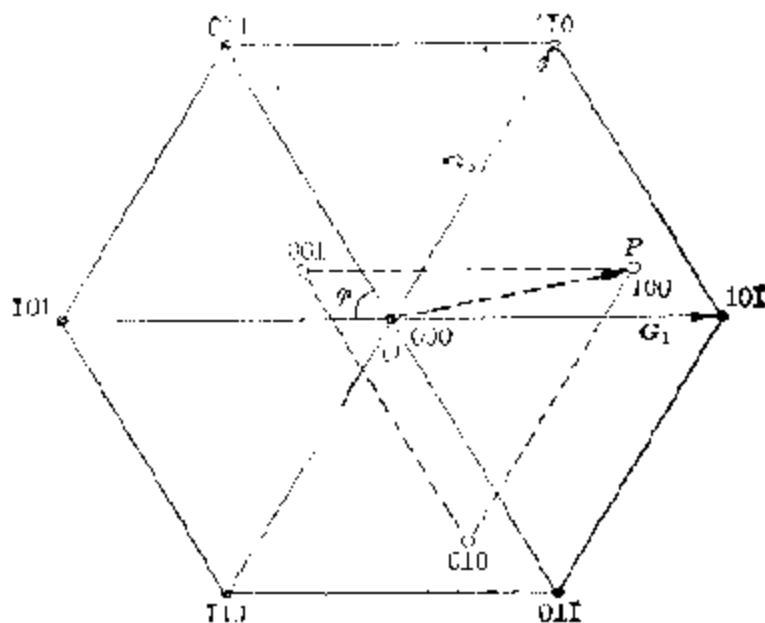
例如, 从 AlN(hcp结构, $c/a=1.633$, $a=3.114\text{\AA}$, $c=4.985\text{\AA}$) 获得的零阶、高阶重迭衍射谱, 如图7-4。零阶斑点已按常规方法标定如图上所示, P 点为高阶点的投影, 经测量:

$$\overrightarrow{OP} \approx 0.72[10\bar{1}] + 0.14[1\bar{1}0]$$

即 $\mathbf{G}_1(h_1k_1l_1) = (10\bar{1})$; $\mathbf{G}_2(h_2k_2l_2) = (1\bar{1}0)$; $x=0.72$; $y=0.14$ 。

由 $[uvw] = [\bar{1}11]$, 可通过(4-33b)式求得:

$$(hkl) = (4.85, 4.85, 24.85) \approx (115)$$



• 零阶 ○ 高阶 $N=1$

图 7-14 AlN 的(111)*衍射谱, (001)为禁止反射($\varphi=63^{\circ}20'$)

再由表 4-2 提供的公式, 求得:

$$d_{(115)} = 0.840 \text{ \AA}$$

$$d_{(111)} = 0.170 \text{ \AA}^{-1}$$

对 hep, $N=1$, 于是由(7-39)式, 求得 $z=0.143$ 。

将有关各值代入(7-41)式, 即得:

$$\begin{bmatrix} h_H \\ k_H \\ l_H \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 5 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.143 \\ 0.72 \\ 0.14 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.0027 \\ 0.0017 \\ -0.0055 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

即 P 点是 $N=1$ 层倒易面上(100)倒易点的投影, 无需尝试, 直接计算出了高阶倒易点的指数。

§ 7-6 高阶劳厄区衍射谱的应用

高阶劳厄区衍射谱用于精确测定晶体取向, 例如测定试样膜面法线偏离衍射谱所表示的晶带轴方向的微小角度, 前面已经讨论, 并在例 1 中计算了这种偏离角。衍射分析中, 如要求计算位错

密度,在计算膜厚时,就不能简单地把晶带轴方向当作膜面法线方向,而必须校正上述偏差。决定晶体缺陷取向或进行迹线分析时,上述校正也同样是必不可少的。下面介绍其它一些应用。

一、利用零阶劳厄区上高阶斑点位置鉴定物相

不同晶体结构的物相,在各白的某种取向下,它们的零阶劳厄区衍射谱可能相同。因此,仅凭一张代表二维倒易截面的零阶劳厄区衍射谱,是不能唯一地确定物相的。解决这个问题的途径之一,是利用晶体结构的下述特性:即只要晶体结构不同,零阶劳厄区斑点分布尽管可能相同,但其高阶斑点在零阶上的投影位置一般不会相同。所以如果在一张衍射底片上能同时获得高阶和零阶斑点,就可以借助高阶斑点在投影位置上的差异,唯一地鉴定物相。

例如,图 7-15 所示矩形点列,长边与短边的长度比约为 1.633,它既可以标为面心立方的 TiO ,这时晶带轴为 $[11\bar{2}]$,如图 (a), A 点标为 $(11\bar{1})$, B 点标为 (220) ,与 TiO 的 $d_{111}=2.49 \text{ \AA}$, $d_{220}=1.53 \text{ \AA}$ 相吻合;但也可以标为 $c/a=1.633$ 的六角密排相 Mo_2O ,这时,晶带轴为 $[1\bar{1}0]$,如图 (b), A 点标为 (002) , B 点标为 (110) ,正与 Mo_2O 的 $d_{002}=2.49 \text{ \AA}$, $d_{110}=1.53 \text{ \AA}$ 相吻合。究竟哪一种标法正确,如果没有高阶劳厄区斑点就比较难于确定,而必须借助于倾动试样后获得的另一衍射谱。但如果底片上同时出现高阶斑点,那就好办多了。因为如果是面心立方的 TiO ,而晶带轴又

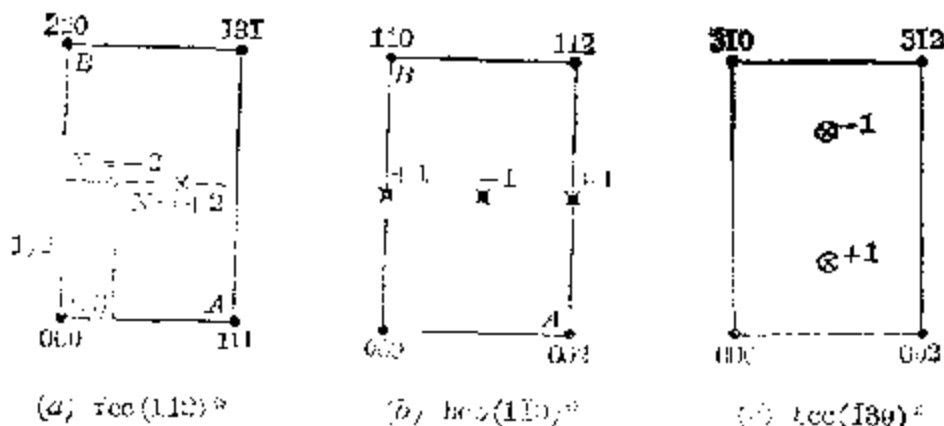


图 7-15 边长比为 1.633 的矩形点列的三种标法

是 $[211]$, 则高阶斑点投影位置应在图(a)的 $\times$ 处; 反之若为六方晶系的 Mo_2O 的 $(1\bar{1}0)^*$, 则高阶斑点投影位置应在图(b)的 $\times$ 处, 即两者重迭图谱迥然不同。作为练习, 读者可以自行计算并绘制 Mo_2O 的高阶重迭图谱。

若合金中同时存在fcc的Laves相, bcc的 γ 相和hcp的Laves相, 在没有高阶斑点时, 而只根据边长比点列将可以同时标为这三种物相。例如可分别标为fcc的 $(112)^*$ 、hcp的 $(1\bar{1}0)^*$ 和bcc的 $(\bar{1}30)^*$, 依次如图7-15(a)、(b)、(c)。但由于它们的高阶斑点投影位置完全不同, 则可以据此比较方便地确定物相, 并参考其它数据选择一种合理的标定。

再如, 立方晶系(fcc或bcc)的 $(111)^*$ 和六方晶系的 $(001)^*$, 其零阶劳厄区斑点分布均为正三角形。但如果注意到立方晶系在 $[111]$ 取向下, 其高阶斑点与零阶不相重, 落在三角形中心偏下方; 而六方晶系的 $(001)^*$, 高阶与零阶斑点却完全相重, 了解这一特点就不难正确选择了。

二、利用高阶劳厄区的曲率, 测定倒易面间距, 以鉴定物相

某些晶系, 如四方晶系、六方晶系的基面 $(001)^*$ 或正交晶系的正交面 $(100)^*$ 、 $(010)^*$ 、 $(001)^*$, 由于高阶斑点与零阶斑点完全相重, 即 $G_H=0$ (图7-10), 那末就只能依靠 G_V 的大小来鉴定物相。因为根据(7-16)式:

$$\frac{1}{G_V} = c = \frac{2N L^2 \lambda}{(r_0 + r_N)(r_0 - r_N)}$$

只要从衍射谱上测出零阶和高阶劳厄区的曲率半径 r_0 和 r_N , 就可以用上式求出一个常数 a 、 b 或 c , 而不同物质这个点阵常数是不同的。

例如, 面心立方 M_{23}C_6 的 $[001]$ 晶带和四方晶系 M_3B_2 的 $[001]$ 晶带, 零阶劳厄区斑点配置均为正方形; 且两者的 $(001)^*$ 上四方形网格格点相邻两倒易点对应的 d 值(面间距)也都近似相同, 前者 $d_{200}=5.25\sim 5.5\text{ \AA}$, 后者 $d_{100}=5.6\sim 5.8\text{ \AA}$ 。当高阶与零阶斑点完全相重时, 由于 $G_H=0$, 就无法区别它们。这时可利用(7-16)式,

求出 $1/G_r$ 。因为 $M_{23}C_6$ 的 $a=10.50\sim 10.85\text{ \AA}$ ，而 M_2B_2 的 $c=5.6\sim 5.8\text{ \AA}$ ，利用这个点阵常数的差别，就可以把它们区别开来。

又例如，当劳厄区为对称型时，高阶劳厄区曲率半径 r_N 满足 7-22) 式：

$$c = \frac{2N\lambda L^2}{r_N^2}$$

也可以利用这个公式，在特定取向，通过测量 r_N ，直接求出一个点阵常数。如分析石墨时，若获得相应于基面的正六角形点列，且同时有对称的高阶劳厄区斑点带，那么，只要 r_N 测量比较准确，也就可以求得点阵常数 c 的较可靠数据。

第 八 章

菊池衍射谱分析

§ 8-1 引 言

在金属薄膜的电子衍射和析出相的电子衍射分析工作中, 当试样晶体比较完整, 沿电子束入射方向的厚度又比较合适时, 在衍射谱上经常出现一些线状花样。它们有时与单晶斑点同时出现, 有时单独出现。1928年菊池(S. Kikuchi)^[23]首先对这种线状花样, 从衍射几何上作了解释, 所以被命名为菊池线。菊池线是晶体结构的一种重要衍射信息, 在结构分析特别是衍射工作中, 有着广泛的应用。单晶斑点的位置对试样在小范围内(例如几度)倾动并不敏感, 以致在倾动前后往往看不出明显的变化, 而菊池线却常常产生可观的位移。例如, 在 $\lambda = 20 \text{ mm} \text{Å}$ 下, 试样倾动 1° , 低指数斑点位置基本不动, 而相应菊池线却移动约 1 cm 。由于这一特点, 菊池线往往被用来精确测定晶体取向; 校正电子显微镜试样倾动台的倾动角度; 测定偏离矢量 s 等。

自1928年菊池第一次对这一衍射现象进行解释后, 1935年劳厄和1944年 Artmann 将电子衍射动力学理论推广到非弹性散射过程, 又进一步讨论了这个问题。1955年 Y. Kainuma 讨论了菊池线的强度^[24]。1968年和1971年 G. Thomas, W. L. Bell 等^[25, 26]先后讨论了菊池衍射的动力学过程。此后, 随着人们对菊池衍射本质的认识逐渐深入, 在结构分析的许多方面, 都成功地得到应用, 相继发表了不少有关这方面的文章。

本章主要从衍射几何角度, 讨论菊池花样的形成过程, 和分析标定中的一些问题, 并扼要介绍它在近代材料研究工作中的应用。

§ 8-2 菊池衍射花样的几何学

在通常的电镜工作电压下(例如 100 kV), 当试样厚度达到 10^{-7}cm (即 1000 Å), 且晶体比较完整时, 衍射谱上就出现菊池线。也有作者认为, 当试样厚度近似为最大可穿透深度的二分之一时, 即可获得菊池花样。简单地说, 其形成过程是: 电子束入射到试样中之后, 与物质原子相互作用, 发生非弹性不相干散射, 这些被散射的电子, 随后入射到一定晶面时, 当满足布拉格定律时, 便产生布拉格衍射。所谓菊池线就是衍射圆锥与厄瓦尔德球相截, 其交线经放大后在底片上的投影。

图 8-1(a)表示电子进入晶体后, 即使入射束对某晶面(hkl)不满足布拉格定律, 但可以在 P 点产生能量损失极小、方向略有改变的非弹性散射。此 P 点即成为球面子波的波源, 并且在从 P 点无定向地向四周发射的电子中, 总有一些射线束在入射到某晶面[例如(hkl)]时, 满足布拉格条件 $2d \sin \theta = n\lambda'$, 于是当入射角为 θ 时, 反射角也为 θ , 得到相应的衍射束。可以认为: 在(hkl)面, 入射点为 Q ; 在($\bar{h}k\bar{l}$)面, 入射点为 R , 相应的衍射线分别为 QQ' 和 RR' 。考虑到试样中各处的物质均可能成为球面子波的波源, 那么以 Q 、 R 为顶点, 向右、向左各应有一半顶角为 $(90^\circ - \theta)$ 的衍射圆锥。将(hkl)与($\bar{h}k\bar{l}$)重迭在一起后, Q 、 R 两顶点即合为一点, 如图(c)所示。

电子经非弹性散射后, 能量损失的典型值约为几十电子伏, 与通常的电镜工作电压(10 万伏以至更大)相比是一个极小的量, 因此 $\lambda' \approx \lambda$, λ 为电子进入试样以前的电子波长。可见仍可用讨论单晶斑点衍射时所采用的反射球结构, 讨论菊池线的形成几何。

两个衍射圆锥延伸后与反射球相交, 交线为双曲线, 由于电子衍射下, θ 角很小, 反射球半径很大, 交截处球面近似为一平面, 故此双曲线实际上很接近于一对平行直线, 如图 8-1(c)。一根对应于(hkl); 另一根对应于($\bar{h}k\bar{l}$)。为什么菊池线总是成黑白线对出

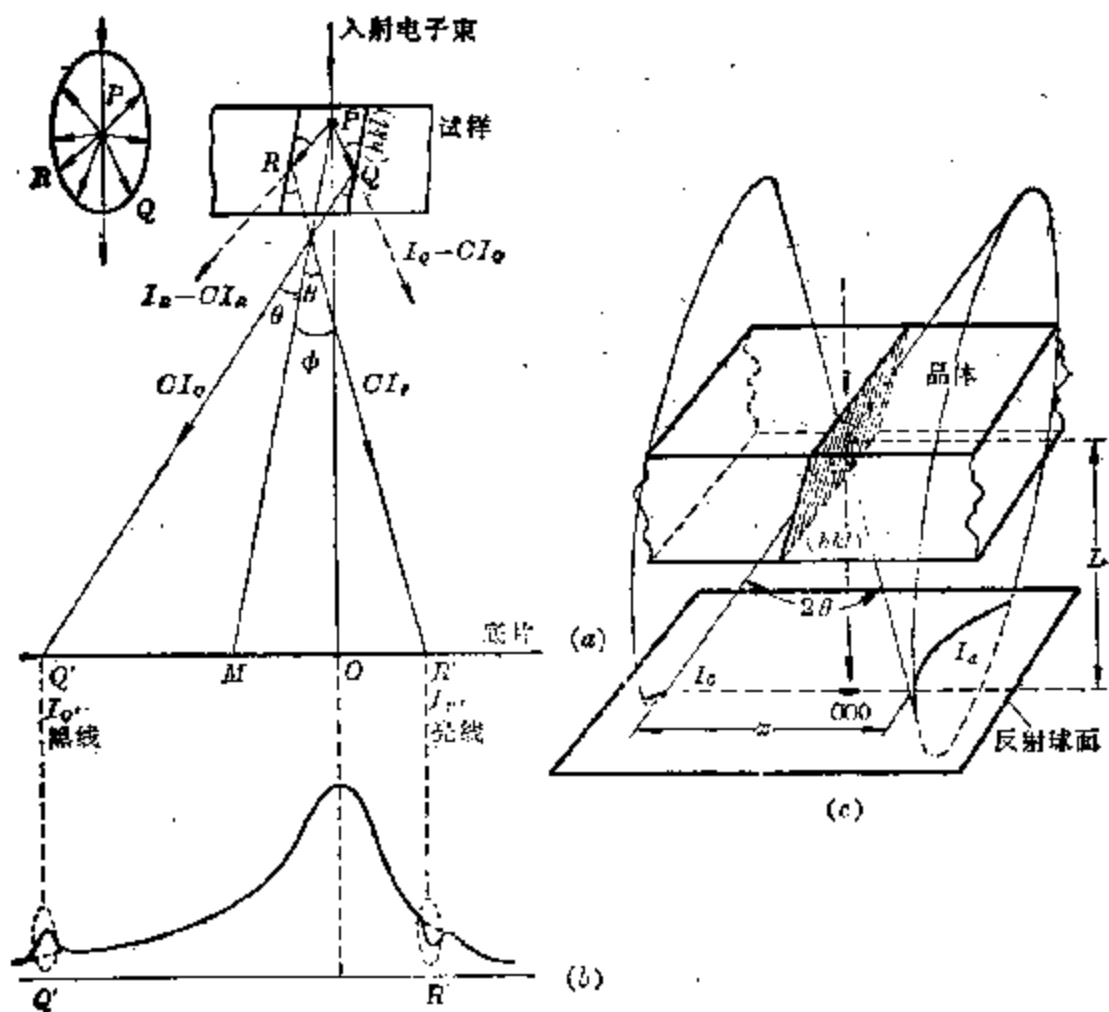


图 8-1 菊池线的衍射几何

现?解释如下:

在对称情况下,即反射平面平行于电子束方向时,两个衍射锥是等强的,所以菊池线对也是等强的。下面讨论非对称入射情况。

在 P 点[图 8-1(a)中]向各方向散射的电子强度,随偏离初始入射方向的角度增大而单调地减弱。因为 $\angle OPR > \angle OPQ$, 所以

所以 $1/d = (R_K \cos^2 \phi) / L\lambda$

□

$$R_K = L\lambda \sec^2 \phi (1/d) \quad (8-1a)$$

由于 $OM = L \tan \phi$, (8-1a)式可改写成:

$$R_K = L\lambda \sec^2 [\tan^{-1} OM/L] (1/d) \quad (8-2)$$

(8-2)式中 R_K 和 OM 均可从底片上直接测量, $L\lambda$ 为仪器常数, 故测得一个 R_K , 就可求出一个相应的 d_{hkl} 。(8-2)式是处理任意晶系菊池线的基本公式。

从(8-1a)式, 不难看出衍射面与膜面法线的夹角 ϕ , 决定着菊池线的分布。下面讨论 ϕ 为不同值时的各种情况。

(1) 当 $\phi = 0$ 时, (8-1a)式变成:

$$R_K d = L \cdot \lambda \quad (8-1b)$$

这个式子与单晶斑点指标化的关系式完全相同, 可见线对间距 R_K 与透射点到 (hkl) 斑点的距离相等。这时, 各菊池线对所对应的晶面同属于以膜面法线为轴的晶带。菊池线对称地分布在(000)的四周, 线对正好落在中心透射斑点(000)的两侧, 分别在(000)到 (hkl) 和 $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ 斑点的距离的 1/2 位置处。来自 (hkl) 和 $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ 的衍射对底片背景的贡献相同, 即这两条线衬度相同。由于线对间的背景强度较线对外为强, 可以看到一个黑带, 称为“过剩菊池带”(Excess Kikuchi Band), 或称“加强菊池带”。图 8-3(c) 为电子束沿面心立方晶体[001]方向入射时的菊池线分布; (a) 和 (b) 为衍射几何示意图。

(2) 当 $\phi = \theta_B$ (布拉格角) 时, (8-1a)式变成:

$$R_K = L\lambda \sec^2 \theta (1/d) \quad (8-3)$$

这相当于衍射面 (hkl) 处于准确布拉格位置的情况。正片上亮线通过 (hkl) 衍射斑点; 黑线通过(000)。与 (hkl) 相对的 $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ 点一般不出现或甚弱, 参见图 8-4。这是在衍射分析中希望获得的双束衍射条件。

(3) 当 $\phi \neq 0$, 也不等于布拉格角而为任意值时, 由图 8-2 和 (8-1a)式可知, 菊池线对在底片上成任意分布。正片上亮线不通过

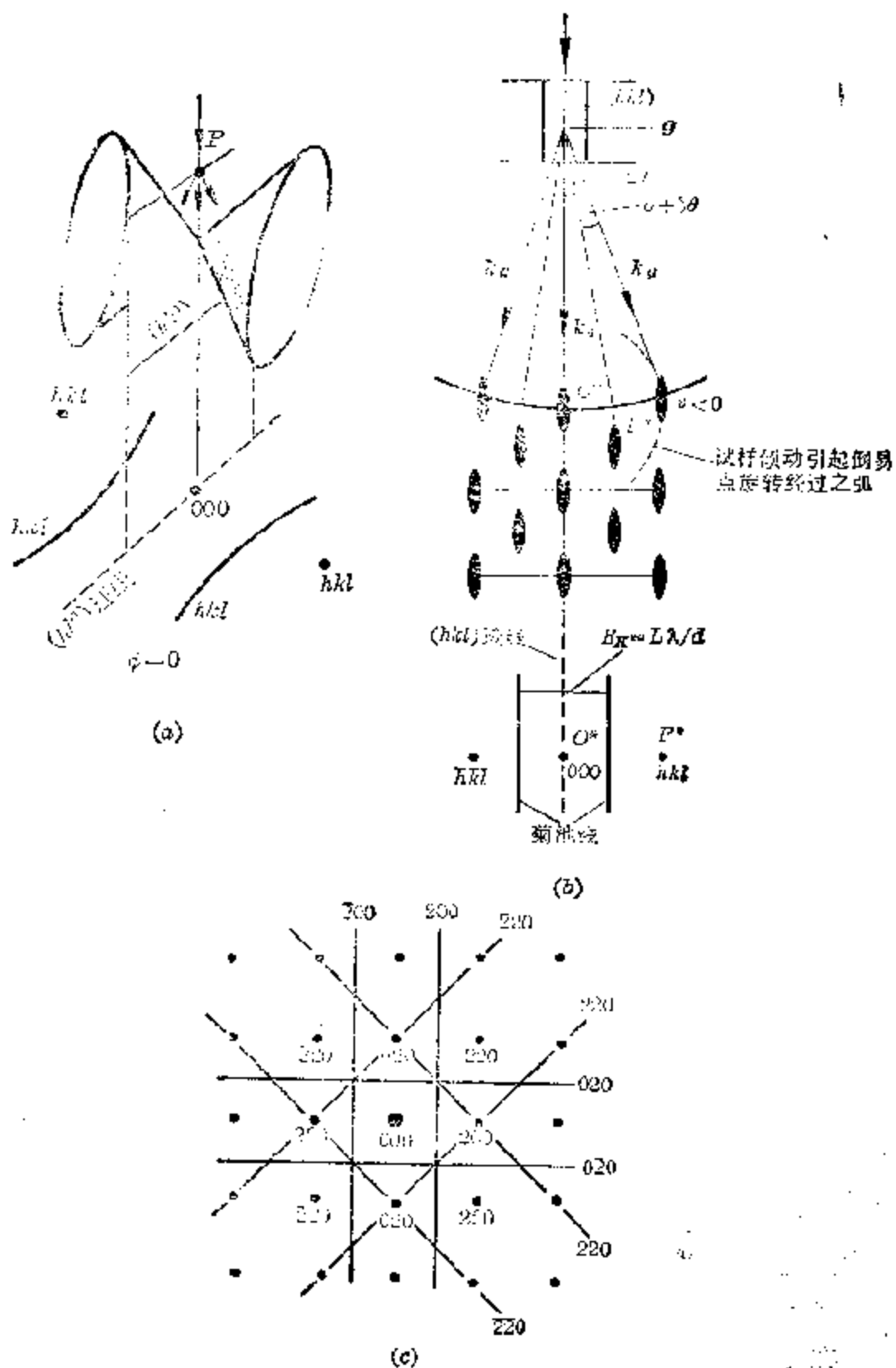


图 8-3 电子束沿 fcc 晶体 [001] 方向入射时，
单晶斑点和某泡线同时存在

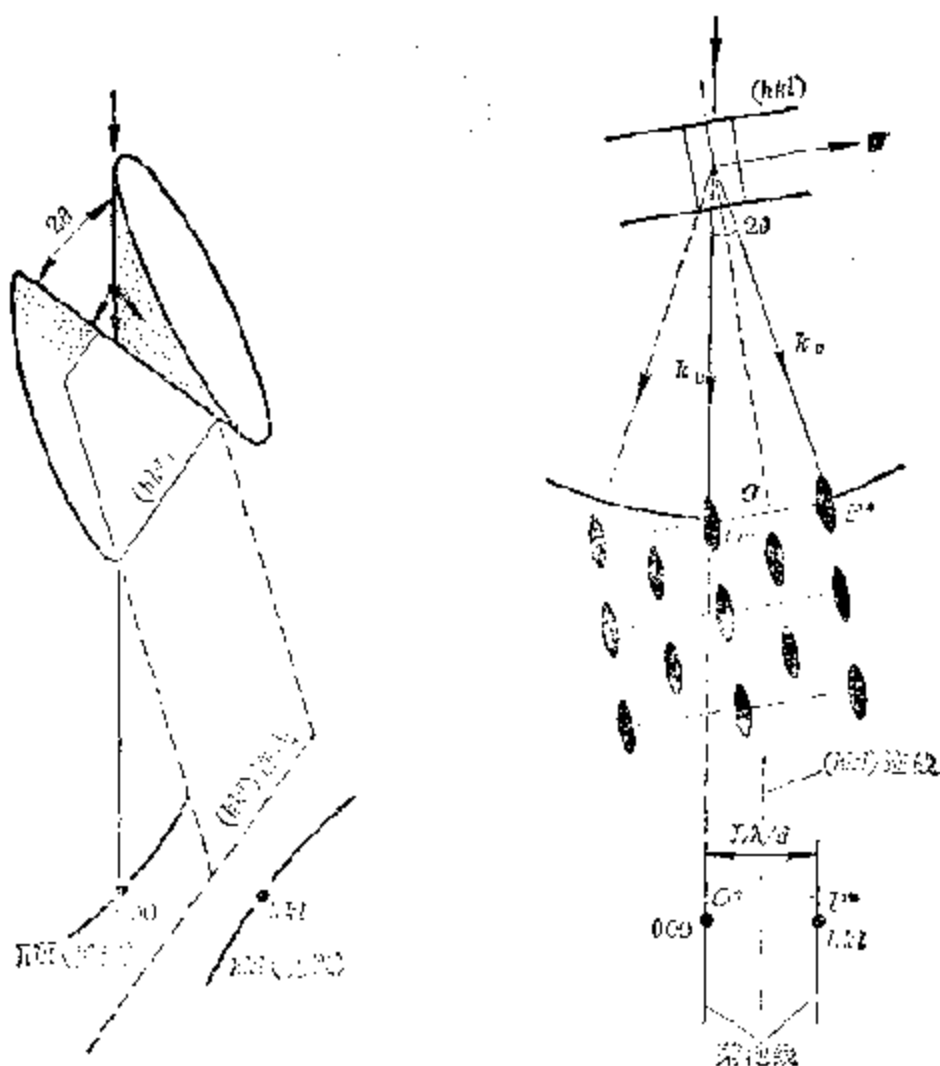


图 8-4 $\phi = \theta_B$ (布拉格角) 时, 菊池线与衍射斑点的相对位置

相应衍射斑点, 黑白线对或同时在透射斑一侧, 或分别两侧, 且一般是不对称的。在底片边沿处的高指数菊池线或非零阶菊池线, 有时仍可看到双曲线的趋势。

通常在衍射照片上看到的菊池线分布, 往往比较复杂。一般只在低指数反射, 菊池线与相应反射斑点的对应关系才比较明显; 高指数反射, 则往往很难找到确切的对应关系。有时还能看到与高阶劳厄斑点对应的菊池线, 不过一般只当电子束沿高指数晶带轴方向入射时, 它们才会出现。

在考虑菊池线与单晶斑点的对应关系时, 明确下述基本概念是十分必要的。即: 虽然菊池线和斑点均由布拉格衍射产生, 但前

者的入射束是原始入射电子经物质原子非弹性散射后的电子中,对 (hkl) 来说,入射方向满足布拉格条件的部分;而后的入射束就是原始入射束。因此,同一晶面可以不产生单晶斑点,但可能产生菊池线。对高指数反射尤其如此。

在底片上看到的不同反射的菊池线对,其强度是不同的,这取决于晶体取向、厚度和晶体的完整性。从原则上讲,只要晶体被衍射区域的厚度与该加速电压下允许穿透的深度一半相当时,任何取向向下都有可能得到菊池

花样。但是实践指出,即使试样很薄也能看到,不过其强度较弱,有时仅在冲出底片后才察觉出。另一方面,试样中的应变状态也是一个重要因素,例如弹性畸变严重,位错密度过高,将使菊池锥面有一定厚度,因而菊池线不

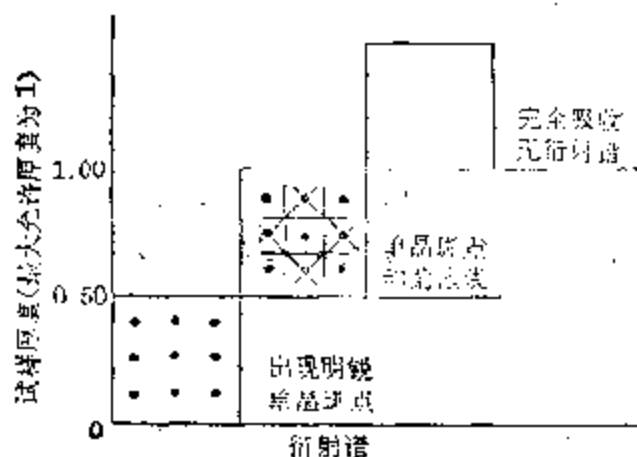


图 8-5 单晶衍射区厚度对衍射谱的影响

明锐,甚至弥散得难以辨认。衍射谱随试样厚度增加的变化规律如图 8-5 (超过最大允许厚度时,有时尚可看到弱的透射斑)。

最后,菊池衍射谱较之单晶斑点信息在作取向分析时,具有更大优越性,这是由于下述几何性质决定的。菊池谱的原点,象是固定在试样上一样,当倾动试样时,菊池谱将以相同方向和幅度发生倾动,可以明显地观察到菊池花样扫过单晶斑点谱;而单晶衍射斑点在试样倾动角度不太大(例如不大于 10°)时,几乎不能察觉出斑点位置有明显变化。此外,不论取向如何,线对所张的角度,总是 $2\theta_{hkl}$ 线对的平分线,正是衍射面在底片上的迹线:菊池线本身总是平行于相应指数的消光轮廓,垂直于透射原点到同指数斑点的连线。这些几何性质,对于衍射分析都是十分重要的,使我们可以直接借助极图,进行迹线分析和取向分析。这一点在下面介绍菊池线应用时,还要详加讨论。

还有一个概念在分析中经常要用到, 这就是菊池花样的对称中心, 即同属于一个晶带各菊池线对中线(即衍射面迹线)的交点。图 8-3(a), 由于电子束严格沿[001]方向入射, 菊池花样的对称中心与单晶斑点的透射中心(000)重合。若电子束不严格沿[001]入射, 或试样膜面法线略偏离[001]方向, 单晶斑点仍呈正四边形分布, 而菊池对称中心不再与(000)重合, 将偏离一个距离。

设试样倾斜一个小角度 ρ , 对称中心自(000)位移一微小距离 a , 则有:

$$a/L = \tan \rho \quad (8-4)$$

式中 L 为试样到底片的有效长度。正如第七章曾论述, 理论上, 当晶带轴偏离 ρ 角时, 将形成偏于一侧的半径为 r_0 的零阶劳厄区, 这时也存在类似关系, 即(7-12)式:

$$r_0/L = \tan \rho$$

与(8-4)式比较, 应有 $a = r_0$, 即菊池花样对称中心的位移量应等于因倾斜形成偏于一侧的零阶劳厄区的半径。然而, 事实上如前面已经提到的, 也如在图 8-3(b)中所看到的, 试样倾斜一个小角度, 倒易点只沿一个小圆弧(虚线所示)运动一小距离, 厄瓦尔德球截零层倒易面所得的斑点谱, 几乎与倾斜前无异; 而菊池对称中心偏离(000)的位移 a , 则是可以测量的。这也是精确测量晶体取向微小改变的一个方法。

为了有助于识别高阶劳厄区的菊池线, 有必要讨论一下它与相应高阶劳厄斑点位置的几何关系。参见图 8-6, 图中:

$[u_B v_B w_B]$ ——膜面法线取向, 即电子束入射方向;

$[uvw]$ ——晶带轴指数, 由于它相对于 $[u_B v_B w_B]$ 倾斜了 ρ 角, 形成了半径为 $r_0 = L \tan \rho$ 的零阶劳厄区(图中用实点表示零阶劳厄区斑点, 空心圆圈表示高阶劳厄区斑点);

(hkl) ——正一阶劳厄区上某衍射斑点;

K_1, K_2 ——对应于 (hkl) 的菊池线对;

M ——菊池线对的中线位置;

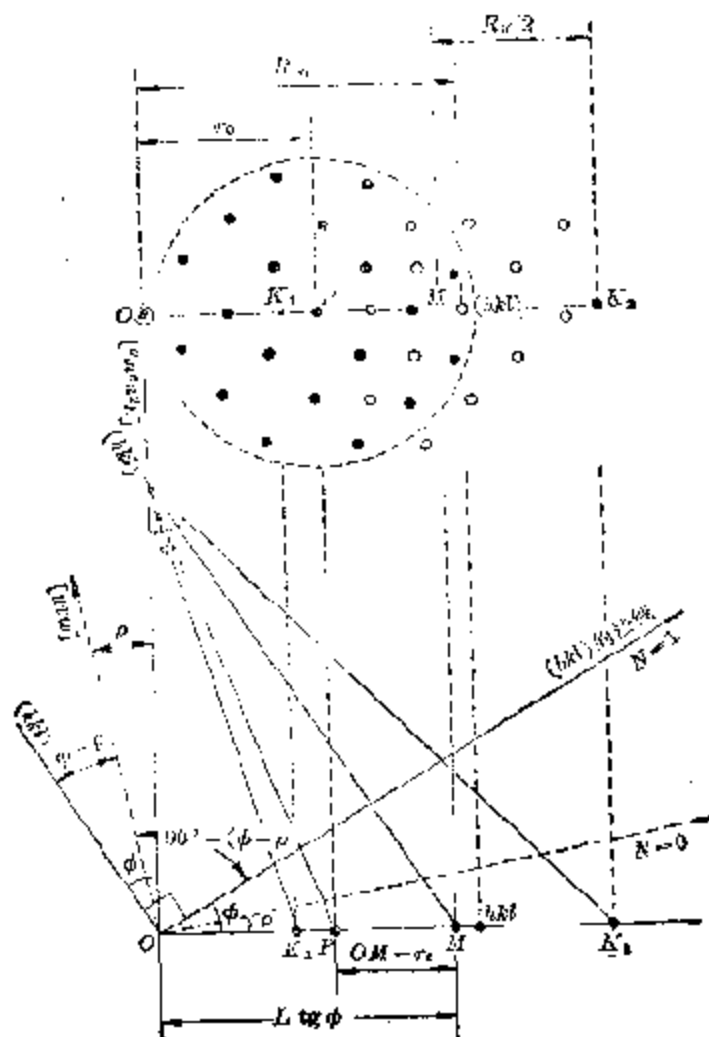


图 8-6 高阶劳厄区的菊池线

ϕ —— (hkl) 与 $(u_B v_B w_B)$ 的夹角。

图 8-6 的下半部分是垂直于衍射谱上 OM 的截面。对斑点 (hkl) , 因为在高阶上, 可近似取:

$$R_{hkl} \approx L\lambda(1/d_{hkl})$$

对菊池线 K_1, K_2 , 由 (8-1a) 式可取:

$$R_K = (L\lambda) \sec^2 \phi (1/d_{hkl})$$

两式进行比较, 由于 $\phi \neq 0$, 且 $\sec \phi$ 恒大于 1, 所以一般总是 $R_K > R_{hkl}$ 。也就是说, 高阶菊池线间距总是大于透射原点到该高阶斑点的投影距离, 这对于判别高阶菊池线有一定帮助。而且 (hkl) 指数越高, 菊池线位置将向底片中心移动。以立方晶系为例, 衍射面 (hkl) 与晶带轴 $[uvw]$ 的夹角 $(\phi - \rho)$, 决定于:

$$\begin{aligned}
 \cos[90^\circ - (\phi - \rho)] &= \sin(\phi - \rho) \\
 &= (hu + kv + lw) / [(h^2 + k^2 + l^2)^{\frac{1}{2}} (u^2 + v^2 + w^2)^{\frac{1}{2}}] \\
 &= 1 / [(h^2 + k^2 + l^2)^{\frac{1}{2}} (u^2 + v^2 + w^2)^{\frac{1}{2}}] \approx (\phi - \rho) \\
 &= (OM - r_0) / L \quad (\text{注意 } PM = OM - r_0)
 \end{aligned}$$

$$\text{即 } (OM - r_0) / L = 1 / [(h^2 + k^2 + l^2)^{\frac{1}{2}} (u^2 + v^2 + w^2)^{\frac{1}{2}}]$$

由此式可见, 当 (hkl) 指数愈高时, 式子右边的值也愈小, 而在一定倾角 ρ 下, r_0 一定, 故只能 OM 变小。即 (hkl) 指数愈高, 菊池线将向透射中心移动, 实际上也常常观察到高指数菊池线在靠近底片的中央部分。

§ 8-3 菊池线的指标化

一、零阶劳厄区菊池线指标化

先标定单晶斑点的指数, 然后根据菊池线与它们的相对位置, 确定菊池线指数。

(8-2)式是指标化的基本计算公式, 由该式可导出:

$$d = (L\lambda / R_k) \cdot \sec^2[\text{tg}^{-1} OM / L] \quad (8-5)$$

利用(8-5)式, 量出一系列 R_k 和 OM (从透射点到菊池线对中线的垂直距离), 就可求得一系列 d 值。将它们与已知物质的 ASTM 卡片核对, 即可大体确定各线对的指数。但必须注意如下几点:

(1) 由于与 (hkl) 面对应的倒易矢量 G_{hkl} 与菊池线对垂直, 因此, 从原点作菊池线对的垂直线与一些单晶斑点相交, 菊池线的指数必是这些斑点的指数之一。

(2) 先找出 $\phi = 0$ 和 $\phi = \theta_x$ (布拉格角) 这两种特殊情况的线对。前者是主晶轴平行于入射电子束方向的情况; 后者是衍射面处于准确布拉格位置的情况。前者两条线(或菊池带)对称分布于原点两侧, 其指数即从原点到菊池线垂直距离二倍处单晶斑点的指数, 参见图 8-3(o); 后者在正片上黑线通过原点, 亮线通过相应的单晶斑点, 参见图 8-4, 此单晶斑点的指数即该菊池线的指数。

(3) ϕ 为任意值时, 菊池线的分布是任意的, 它与相应斑点的相对位置, 取决于该反射偏离布拉格位置的程度, 见图 8-1(d)。可利用 (8-5) 式求得的 d 值以及线对所张的角度 (2θ) 进行校验, 以确定其指数。

(4) 最后根据菊池线对称中心偏离透射中心的距离 a , 求出膜面法线的准确指数 $[u_B v_B w_B]$ 。

(5) 测量 R_K 时, 黑白线对的正确匹配是十分重要的。还应该正确画好线对的公垂线, 尽可能减少 R_K 测量误差。如何确定菊池线的真实位置, Wilman 指出, 应取强度与本底一致处 (R_K), 而不应取亮线与黑线的中心处, 如图 8-7 中的 R_K 。

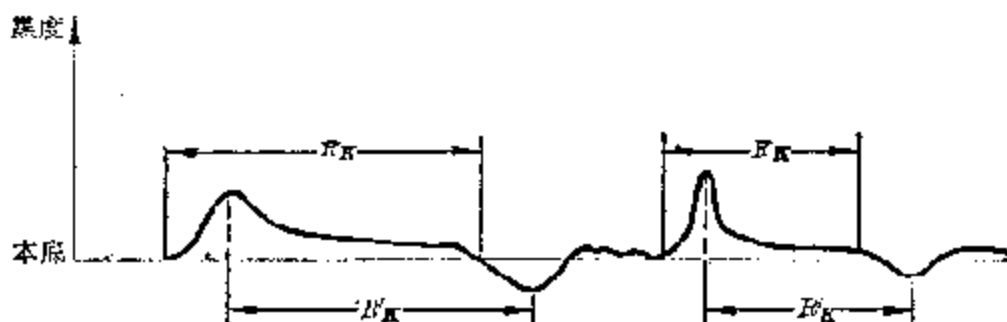


图 8-7 正确测量菊池线线对间距 (应取 R_K 而不取 R'_K)

以上介绍的是标定菊池谱的一般程序和注意事项, 实际上, 一个有经验的电子衍射工作者, 完全可以灵活运用第五章中所述标定单晶衍射谱的方法来标定菊池线。例如在电子衍射下, (8-1a) 式中的 ϕ 可以认为很小, 因此可以近似写为:

$$R_K = L\lambda(1/d)$$

即线对间距 R_K 与倒易矢长度成正比: $R_1 d_1 = R_2 d_2 = R_3 d_3 = \dots = R_n d_n = L\lambda$ (常数)。对于立方晶系, 显然有:

$$R_1/R_2 = (h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)^{1/2} / (h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)^{1/2} = N_1^{1/2} / N_2^{1/2}$$

一般表达式是:

$$R_1 : R_2 : R_3 : \dots = N_1^{1/2} : N_2^{1/2} : N_3^{1/2} : \dots$$

与第五章 (5-10) 式比较, 可见标定菊池线, 也可应用表 5-3 确定指数。当然, 仍需用夹角公式进行校验。

二、高阶劳厄区菊池线指标化

高阶劳厄区菊池线指标化程序是:

- (1) 标定零阶劳厄斑点及零阶菊池线的指数。
- (2) 按第七章所述步骤, 标定高阶劳厄斑点的指数。找准一

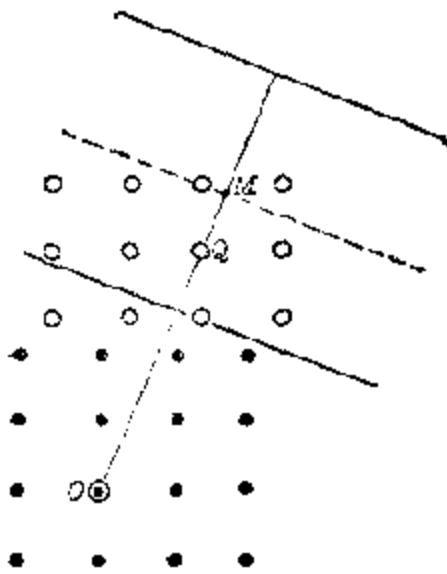


图 8-8 高阶劳厄区菊池线的指标化

对菊池线, 从原点作它们的公垂线, 交菊池线对的平分线于 M , 与这菊池线对应的 (hkl) 反射, 一定落在 OM 或其延长线上。如图 8-8 中的菊池线的指数, 即高阶劳厄斑点 Q 的指数。

三、菊池图 (Kikuchi Maps)

标定菊池衍射谱, 也可以借助于事先拍摄制出的标准菊池图, 将待定菊池谱与标准菊池图作比较, 可以较快的标定菊池线指数。此外, 利用已知菊池图, 有助于在电镜上现场进行观察时, 按预定要求, 决定试样的

倾动方向和角度, 以获得所需取向。

标准菊池图的摄制方法详见 G. Thomas 等人的文献报导^[27, 28], 一般是按单位极图三角形的范围单个摄制的。摄制时需准备一系列试样, 或是单晶的, 或是包含许多取向的大晶粒多晶试样。先从低指数对称取向位置, 进行衍射, 对应每一取向拍下一张菊池谱照片; 循序向另一邻近取向倾斜, 并作新位置菊池衍射, 记录下来。最后将这一系列菊池花样小心匹配起来, 选印在一个标准三角形内, 即成。只要衍射时透镜参数和曝光条件前后一致, 最终获得的标准菊池图是令人满意的。一张理想的菊池图, 应该包括三角形内的所有主要取向。摄制拼接时, 有时会发现某些取向附近菊池线相邻部位不能很好衔接, 而出现微小畸变。但实践指出, 在通常标准三角形的倾动角度范围内, 这种畸变还不会达到使菊池图不能应用的程度。

由于菊池线对的中线, 正是反射面在底片上的迹线, 故这种菊

池图，完全可以从理论上计算出来，也可以利用极图直接绘制出来。近年来就有不少作者采用这两种方法，绘制了一些标准图。它较之以逐个取向用试验法摄制的方法，要简便得多，应用效果亦颇令人满意。

图 8-9、8-10 和 8-11 分别为面心、体心立方和密排六方晶体

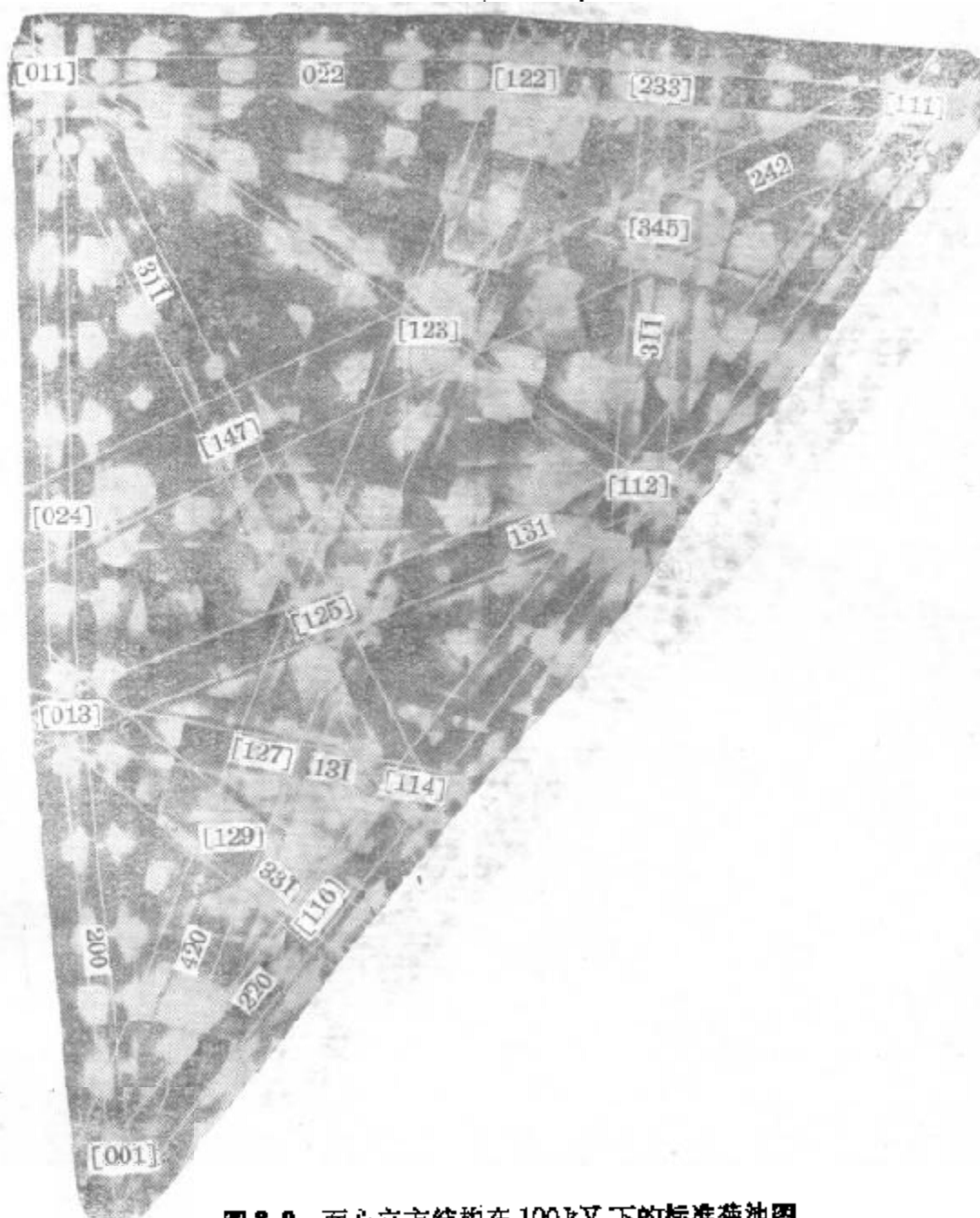


图 8-9 面心立方结构在 100 kV 下的标准菊池图
(加方括号指数为特定菊池线花样的电子束方向)

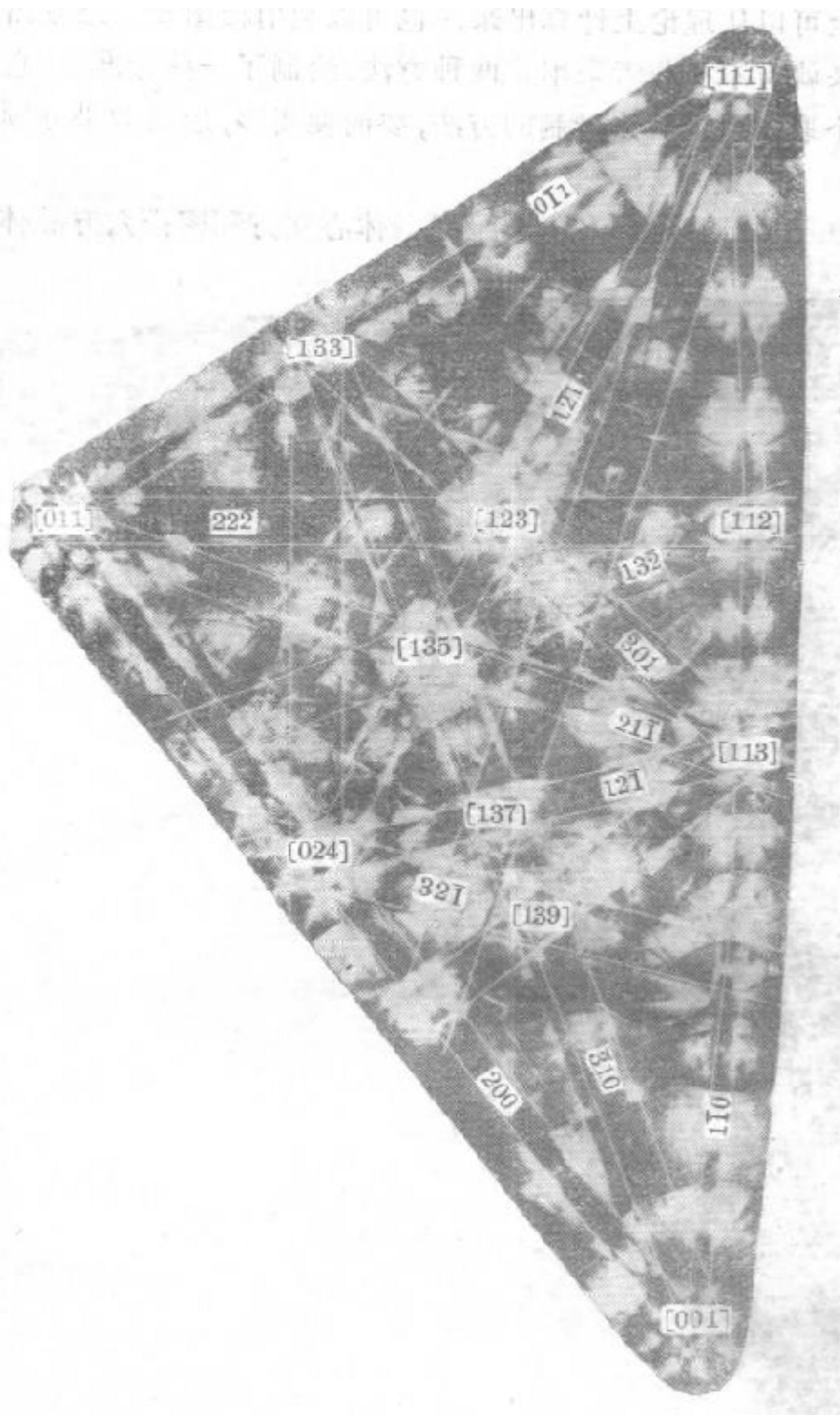


图 8-10 体心立方结构在 100 kV 下的标准菊池图
(指数符号说明同图 8-9)

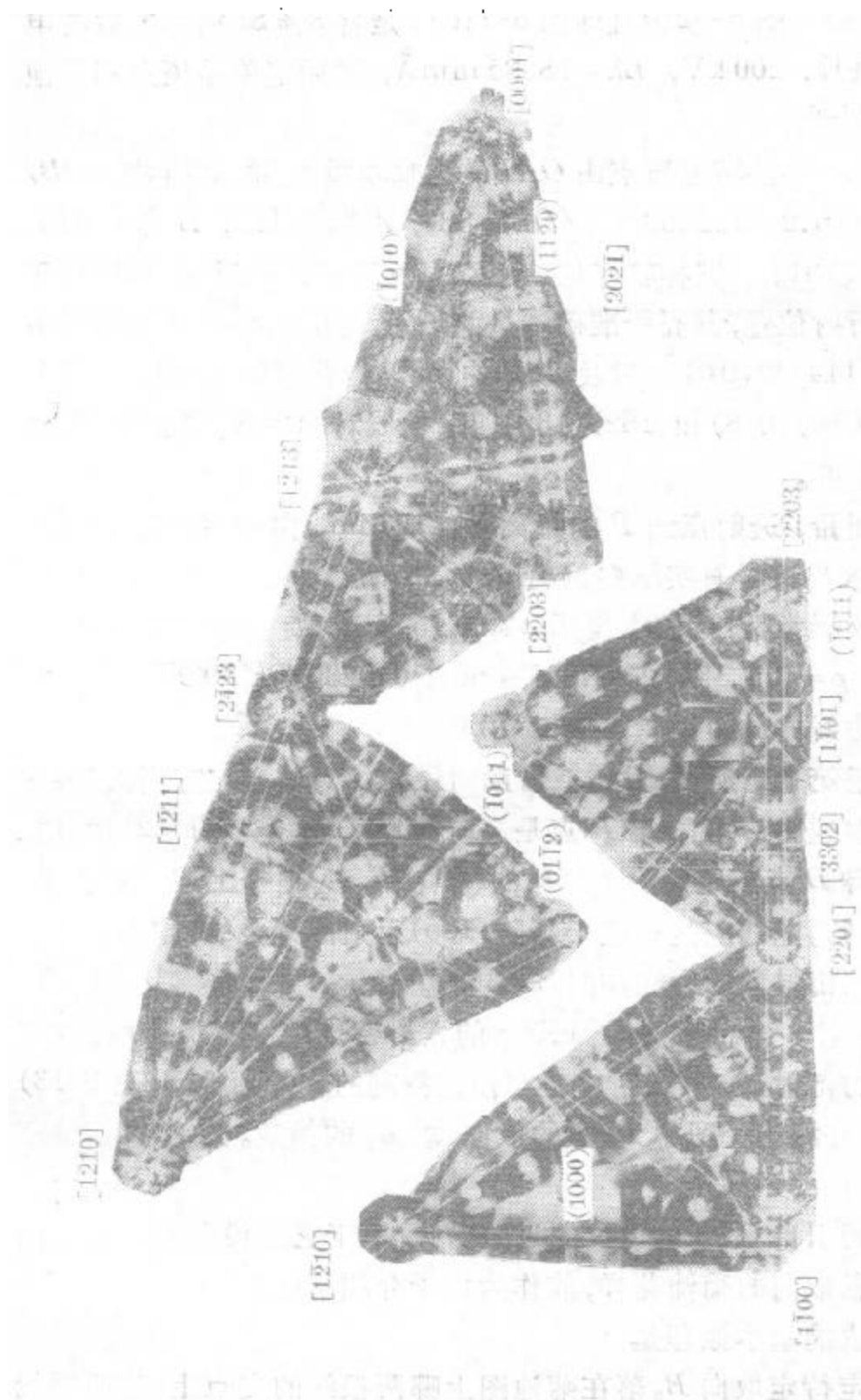


图 8-11 密排六方结构在 100 kV 下的标准菊池图
(指数符号说明同图 8-9)

结构在 100 kV 下摄制的标准菊池图^[30]。

〔例 1〕 图 8-12(a) [即图 8-1(d)] 是含 3% Si 钢热轧后的电子衍射照片, 200 kV, $L\lambda = 18.35 \text{ mm}\text{\AA}$, 试标定单晶斑点和菊池线的指数^[30]。

分析: 零阶劳厄斑点由 $OABC$ 为基本重复单元组成, $OB/OA = 21/16.2 = 1.2963$, $\angle AOB \approx 83^\circ$, A 标为 $\bar{1}21$, B 标为 $0\bar{1}3$, $[uvw] = [731]$ 。试样较好地处于双束反射条件, 反射 $(\bar{1}21)$ 处于布拉格衍射位置, 其亮线准确通过此斑点。此外, 零阶菊池线还有 $s > 0$ 的 $(\bar{1}14)$ 和 $(0\bar{1}3)$, 以及 $s < 0$ 的 $(1\bar{3}2)$ 。作 $(\bar{1}21)(1\bar{2}\bar{1})$ 、 $(\bar{1}14)(1\bar{1}\bar{4})$ 、 $(0\bar{1}3)(01\bar{3})$ 和 $(1\bar{3}2)(\bar{1}3\bar{2})$ 四菊池线对的中线, 相交于 P , 此即对称中心。

经测量, 透射点到 P 的距离, $a \approx 17 \text{ mm}$, 由 (8-4) 式, 若求出 L , 就可求出试样真实取向偏离 $[731]$ 的角度。

据仪器常数, 近似求得 $L \approx 738.25 \text{ mm}$, 故:

$$\rho = \tan^{-1}[17/738.25] = \tan^{-1}0.0230 = 1^\circ 19' 9''$$

即膜面法线方向约偏离 $[731]1^\circ 19' 9''$ 。

利用第七章所述方法, 或借助附录六(二)体心立方高阶、零阶劳厄区重迭图谱, 可求出 B 点是高阶劳厄区 $(N-2)$ 的 (121) 反射, 从而可得 D 点应是高阶劳厄区的 $(10\bar{5})$ 反射。根据上述标定方法, 知其外侧菊池线应是相应于高阶 $(10\bar{5})$ 反射的菊池线, $s > 0$ 。

全部衍射谱的标注如图 8-12(b)。

〔例 2〕 设有某 $c/a = 1.588$ 的六方密排结构物质, 获得含有菊池线的衍射谱, 其衍射中心与预先摄制的标准菊池图(图 8-13)比较, 正好相当于图中 B_s 点的取向, 求 B_s 的指数。

分析:

此例引自 G. Thomas 的近著^[30]。鉴于它能说明应用菊池图标定任意取向的菊池花样, 故作为例子介绍于此。

此法的基本原理是:

确定待定取向 B_s 落在菊池图上哪两根线的交点上, 这两根线一定与两个菊池线对平行; 也就是说, 这两根线一定与两个面指数

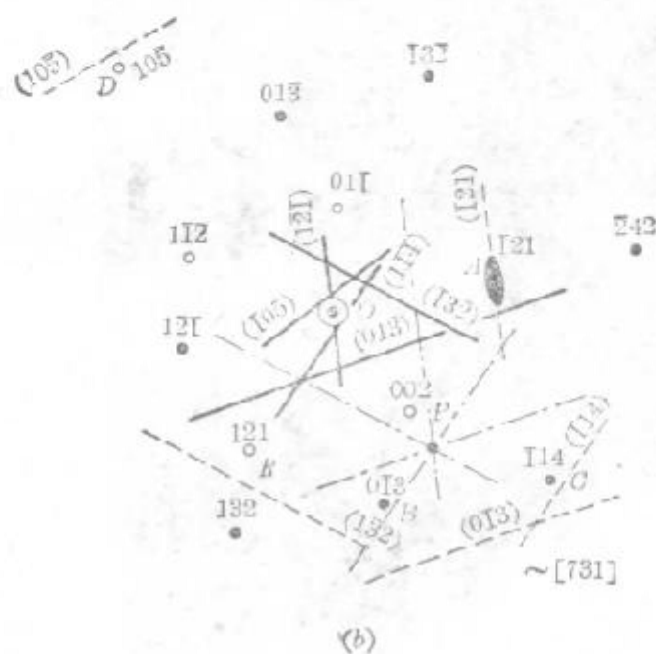
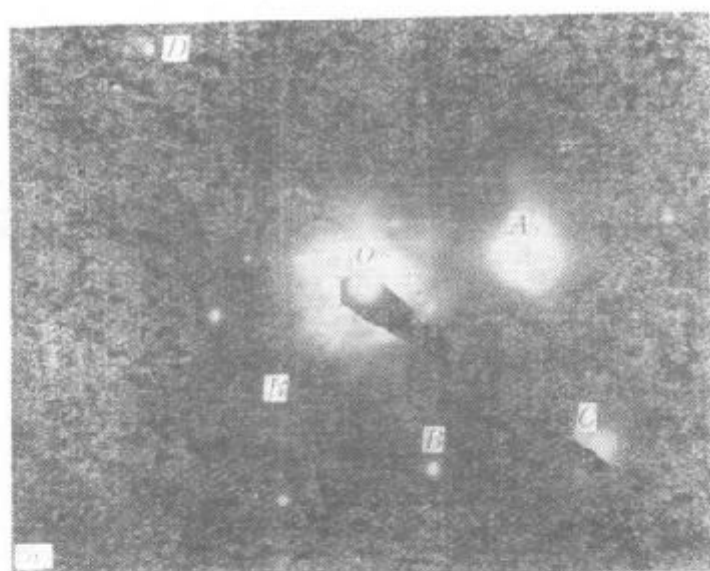


图 8-12 含 3%Si 钢热轧试样的电子衍射分析

(200 kV; $L\lambda = 18.35 \text{ mm}\text{\AA}$)

● 零阶劳厄区斑点; ○ 高阶($N=2$)劳厄区斑点;
——菊池线亮线; ——菊池线黑线

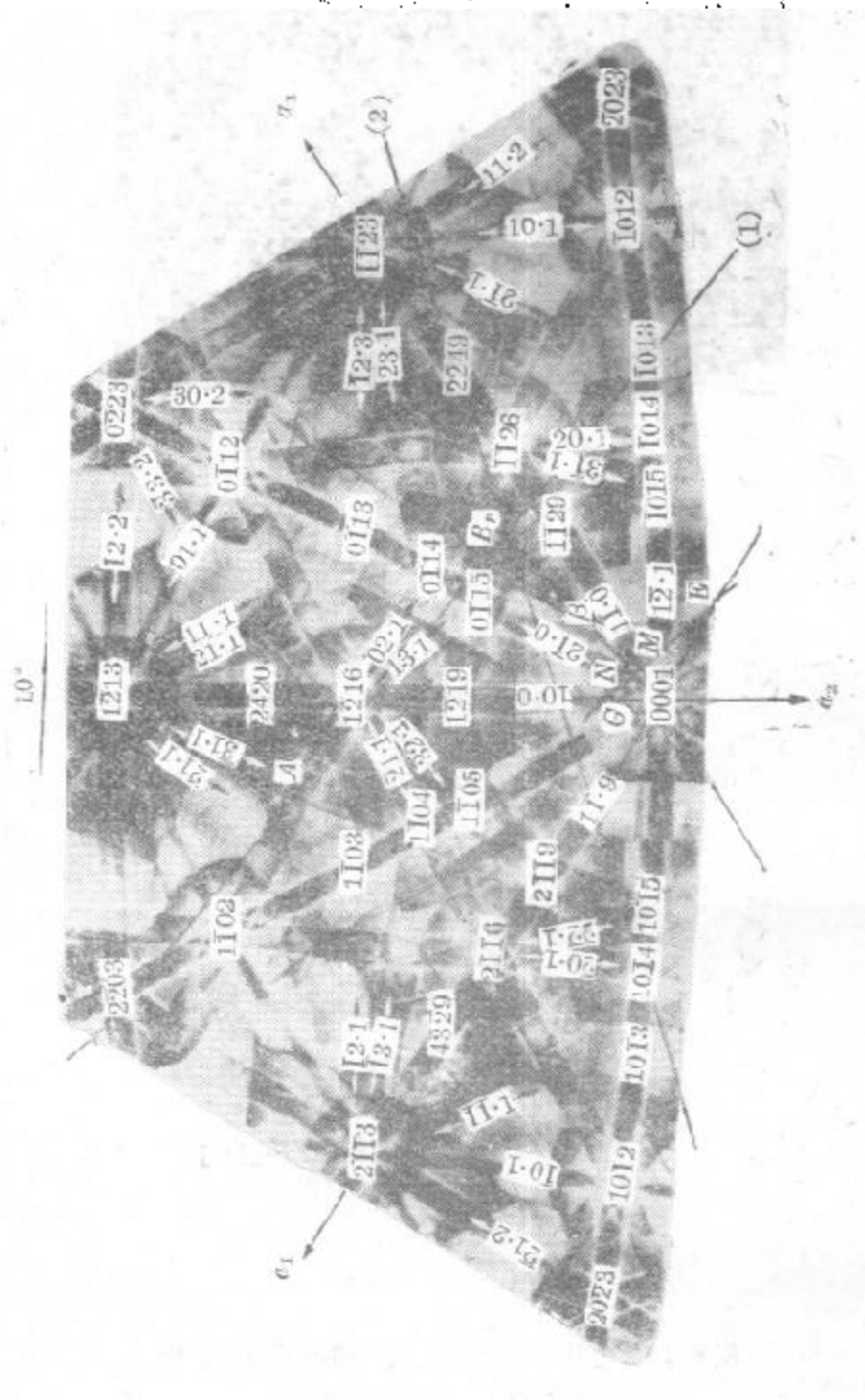


图 8-18 中心位于 $[0001]$ 的 hep 晶系菊池图
(所有极点均用方向指数表示, 所示标尺相当于 $c/a=1.588$)

$G_1(h_1k_1i_1l_1)$ 、 $G_2(h_2k_2i_2l_2)$ 对应。只要求出二面指数,那么就可利用(8-6)式求出 B_p 的指数 $[uvw]$:

$$[uvw] = \left[\begin{vmatrix} l_1 & k_1 & i_1 \\ l_2 & k_2 & i_2 \\ 0 & 1 & 1 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} h_1 & l_1 & i_1 \\ h_2 & l_2 & i_2 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} k_1 & l_1 & i_1 \\ k_2 & l_2 & i_2 \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix} \right] \quad (8-6)$$

求 $(h_1k_1i_1l_1)$ 、 $(h_2k_2i_2l_2)$ 的方法是:

分别找到 $(h_1k_1i_1l_1)$ 和 $(h_2k_2i_2l_2)$ 线各自通过的两个极点。例如线 1 [与 $(h_1k_1i_1l_1)$ 对应] 通过 $r_1: [u_1v_1t_1w_1]$ 、 $r_2: [u_2v_2t_2w_2]$ 极点; 线 2 [与 $(h_2k_2i_2l_2)$ 对应] 通过 $r_3: [u_3v_3t_3w_3]$ 、 $r_4: [u_4v_4t_4w_4]$ 极点。

因 $G_1(h_1k_1i_1l_1)$ 既通过 r_1 带轴, 也通过 r_2 带轴, 则有

$$\left. \begin{aligned} G_1 \cdot r_1 &= h_1u_1 + k_1v_1 + i_1t_1 + l_1w_1 = 0 \\ G_1 \cdot r_2 &= h_1u_2 + k_1v_2 + i_1t_2 + l_1w_2 = 0 \\ h_1 + k_1 + i_1 &= 0 \end{aligned} \right\}$$

由此可求得 G_1 的指数:

$$(h_1k_1i_1l_1) = \left[\begin{vmatrix} \bar{w}_1 & v_1 & t_1 \\ \bar{w}_2 & v_2 & t_2 \\ 0 & 1 & 1 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} u_1 & \bar{w}_1 & t_1 \\ u_2 & \bar{w}_2 & t_2 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} u_1 & v_1 & \bar{w}_1 \\ u_2 & v_2 & \bar{w}_2 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} u_1 & v_1 & t_1 \\ u_2 & v_2 & t_2 \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix} \right] \quad (8-7)$$

$$\left. \begin{aligned} G_2 \cdot r_3 &= h_2u_3 + k_2v_3 + i_2t_3 + l_2w_3 = 0 \\ G_2 \cdot r_4 &= h_2u_4 + k_2v_4 + i_2t_4 + l_2w_4 = 0 \\ h_2 + k_2 + i_2 &= 0 \end{aligned} \right\}$$

同理, 有

可求得 G_2 的指数:

$$(h_2k_2i_2l_2) = \left[\begin{vmatrix} u_3 & v_3 & t_3 \\ \bar{w}_4 & v_4 & t_4 \\ 0 & 1 & 1 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} u_3 & \bar{w}_3 & t_3 \\ u_4 & \bar{w}_4 & t_4 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} u_3 & v_3 & \bar{w}_3 \\ u_4 & v_4 & \bar{w}_4 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} u_3 & v_3 & t_3 \\ u_4 & v_4 & t_4 \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix} \right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc|ccc} u_3 & v_3 & w_3 & u_3 & v_3 & t_3 \\ u_4 & v_4 & w_4 & u_4 & v_4 & t_4 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{array} \right] \quad (8-8)$$

将 $(h_1 k_1 i_1 l_1)$ 和 $(h_2 k_2 i_2 l_2)$ 代入(8-6)式, 即得待定衍射谱的取向。

从图 8-13, 知本例题衍射谱衍射中心 B_p 位于 (1) 与 (2) 线之交点。而 (1) 线通过极点 A 和 $[10\bar{1}3]$; (2) 线通过 $[10\bar{1}4]$ 和 $[2\bar{2}49]$ 。

为求 A (即 $r: [u_1 v_1 t_1 w_1]$), 可利用(8-6)式, 因 A 又是 $(02\bar{2}1)$ 和 $(\bar{3}121)$ 的交点, 所以(8-6)式中 $(h_1 k_1 i_1 l_1) = (02\bar{2}1)$, $(h_2 k_2 i_2 l_2) = (\bar{3}121)$, 于是可得:

$$[u_1 v_1 t_1 w_1] = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 2 & \bar{2} & 0 & 1 & \bar{2} \\ 1 & 1 & 2 & \bar{3} & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & \bar{1} & 0 & 2 & \bar{2} \\ 2 & \bar{1} & 1 & \bar{3} & 1 & 2 \\ 1 & \bar{1} & 0 & 1 & 1 & 1 \end{array} \right] = [5, 7, 2, 18]$$

这样

$$\begin{aligned} [u_1 v_1 t_1 w_1] &= [5, 7, 2, 18] \\ [u_2 v_2 t_2 w_2] &= [\bar{1}, 0, 1, 3] \\ [u_3 v_3 t_3 w_3] &= [1, 0, \bar{1}, 4] \\ [u_4 v_4 t_4 w_4] &= [\bar{2}, 2, 4, 9] \end{aligned}$$

将它们分别代入(8-7)和(8-8)式, 立即可得:

$$\begin{cases} (h_1 k_1 i_1 l_1) = (3, \bar{15}, 18, 7) \\ (h_2 k_2 i_2 l_2) = (11, \bar{14}, 3, 2) \end{cases}$$

以这一组值代入(8-6)式, 最后求得 B_p 的取向是:

$$[B_p] = [u_0 v_0 w_0] = [1, 1.85, 2.85, 11.7]$$

§ 8-4 菊池线的应用

前面各节讨论指出, 菊池线由于本身特点, 使它在精确测量取向方面, 具有独特的优点。如果菊池线敏锐, 取向测量可精确到 0.01° , 而且没有单晶斑点那样的 180° 任意性。近些年来, 它的应

用正日益广泛,概括起来,主要应用于:测量晶体取向;测定母相与第二相的取向关系;衍射工作中的迹线分析和惯态面的测定;校正衍射谱相对于显微像的转角;倾动台角度的校正;波长和加速电压的校正;晶面间距的测定;帮助选择适当的衍射条件;测量晶体中内应变和有序固溶体中的局部有序等等。

下面仅就几个主要方面加以介绍。

一、晶体取向的精确测定

晶体的对称性与菊池花样的对称性,两者有严格的对应关系。因此菊池线在晶体结构研究中,有单晶斑点谱所无法代替的优越性,在取向测定方面尤其如此^[81]。精确测定取向是材料研究工作(如相变、晶界结构等)中必不可少的。

当电子束不严格沿某一低指数晶轴入射时,只凭单晶斑点衍射谱确定晶体取向是不够精确的。这是由于薄膜情况下,倒易点沿电子束入射方向被拉长了,这等于说劳厄条件放宽了,以致试样倾动一个不太大的角度时,厄瓦尔德球仍能与倒易杆相交,故倾动前后的斑点分布无变化。但正如前面所指出的,菊池线的位置对试样取向的微小改变,却是敏感的。

(一)利用菊池线精确测定取向的方法

在衍射谱上找三对两两相交的菊池线,如图 8-14(a)所示。先按 § 8-3 所述方法标定这三对菊池线的指数为 $(h_1k_1l_1)$ 、 $(h_2k_2l_2)$ 和 $(h_3k_3l_3)$ 。然后,将它们两两求矢量积,可得带轴 $A'A$ 、 $B'B$ 、 $C'C$,即 (a) 图上的 A 、 B 、 C 极点的指数。令 A : $[u_1v_1w_1]$ 、 B : $[u_2v_2w_2]$ 、 C : $[u_3v_3w_3]$,于是电子束的方向 $O'O$ [在 (a) 图上为透射点 O],可由解析算法或极图方法求得。

1. 解析计算方法:

(1) 测量衍射照片的长度 OA 、 OB 、 OC , 利用近似关系,求 OA 、 OB 、 OC 的对应的角度:

$$\left. \begin{aligned} \theta_1 &= OA/L \\ \theta_2 &= OB/L \\ \theta_3 &= OC/L \end{aligned} \right\} \quad (8-9)$$

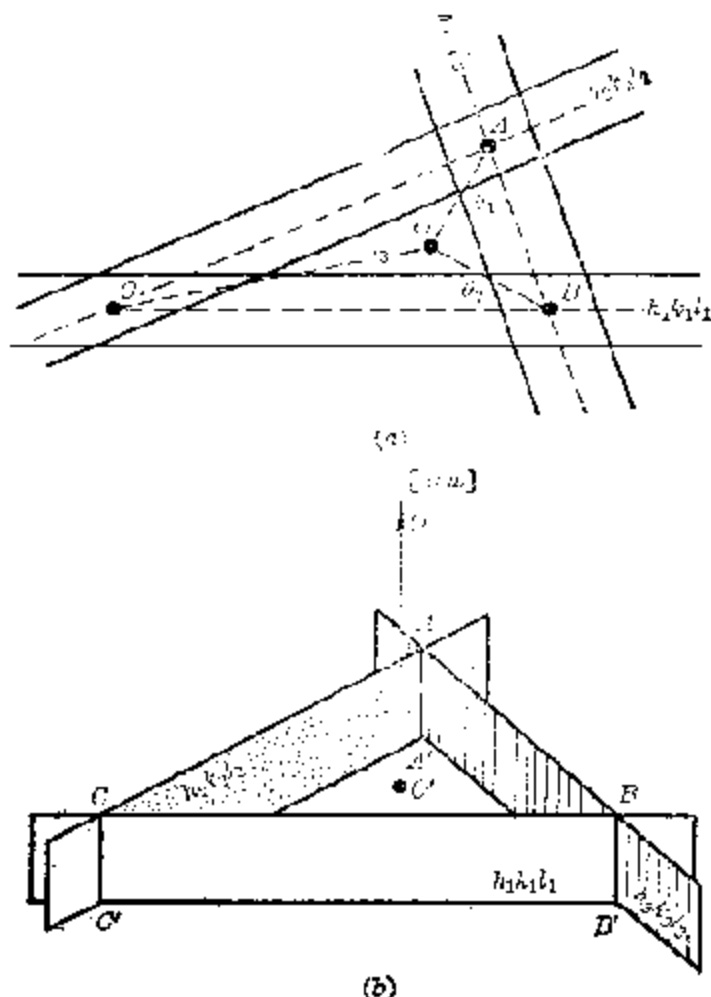


图 8-14 利用三对菊池线精确测定晶体取向

(如有的晶面迹线交点不在图中, 可以延长使之相交)

- (a) 衍射谱上的菊池线, O 为衍射中心(000), A, B, C 分别为迹线两两相交的交点;
- (b) 三晶面立体示意图。由于倾动试样, 使不同时垂直于底片的 $(h_1k_1l_1)$ 、 $(h_2k_2l_2)$ 和 $(h_3k_3l_3)$ 也都在底片上形成菊池线。显然三根带轴 $A'A, B'B, C'C$ 在很远处和试样膜面法线相交

式中 L 为仪器的有效长度。

(2) 设电子束方向指数为 $O: [uvw]$, 则对立方晶系, 下述关系成立(非立方晶系, 另有相应的晶向夹角公式):

$$\left. \begin{aligned} \cos \theta_1 &= (uu_1 + vv_1 + ww_1) / [(u^2 + v^2 + w^2)^{\frac{1}{2}} \cdot (u_1^2 + v_1^2 + w_1^2)^{\frac{1}{2}}] \\ \cos \theta_2 &= (uu_2 + vv_2 + ww_2) / [(u^2 + v^2 + w^2)^{\frac{1}{2}} \cdot (u_2^2 + v_2^2 + w_2^2)^{\frac{1}{2}}] \\ \cos \theta_3 &= (uu_3 + vv_3 + ww_3) / [(u^2 + v^2 + w^2)^{\frac{1}{2}} \cdot (u_3^2 + v_3^2 + w_3^2)^{\frac{1}{2}}] \end{aligned} \right\} \quad (8-10)$$

将(8-9)式求得的角度值利 A 、 B 、 C 带轴的指数代入(8-10)式, 即得 $[uvw]$ 。

2. 极图法:

取一适当标准极图(只要上面有三晶轴指数的极点即可), 将透明纸覆盖其上, 描下三晶轴极点 $[u_1v_1w_1]$ 、 $[u_2v_2w_2]$ 、 $[u_3v_3w_3]$ 。移去极图, 下面换上乌氏网, 先使 $[u_1v_1w_1]$ 落在某一大圆上, 在大圆上取 θ_1 角, 作一纬线圆; 旋转透明纸, 使 $[u_2v_2w_2]$ 也落在该大圆上, 取 θ_2 角, 作第二个纬线圆; 仿此, 取 θ_3 角, 得第三个纬线圆。三纬线圆交于一点, 然后将透明纸覆在所选极图上, 交点处的指数, 就是 $[uvw]$ 。如果它不正好是极图上标注的某极点的指数, 则用乌氏网量出它偏离某邻近极点多少度即可。

(二) 利用双晶带衍射谱精确测定取向的方法

当底片上不出现菊池线时, 则还可以利用双晶带衍射谱来进行测定。它是另一个精确测定试样取向的重要方法, 对分析工作者很有实用价值, 故附带在此作一简要介绍。

设倒易矢 g_1 、 g_2 、 g_3 分别属于两个晶带, g_1 与 g_2 组成第一晶带, 可标定其晶带轴指数 $n_1 = [u_1v_1w_1]$, g_1 与 g_3 组成第二晶带, 晶带轴指数为 $n_2 = [u_2v_2w_2]$ 。 g_3 为两晶带所共有, 相应斑点称为共轭点。显然, 一张衍射谱上同时出现两个晶带的条件是:

$$\begin{cases} g_1 \cdot n_1 = g_1 \cdot (g_2 \wedge g_3) > 0 \\ n_1 \approx n_2 \end{cases}$$

可以证明, 这时试样中平行于电子束方向的精确晶向是:

$$B = \frac{1}{d_{h_1k_1l_1}^2} (g_2 \wedge g_3) + \frac{1}{d_{h_2k_2l_2}^2} (g_3 \wedge g_1) + \frac{1}{d_{h_3k_3l_3}^2} (g_1 \wedge g_2)$$

式中: $d_{h_1k_1l_1}$ 、 $d_{h_2k_2l_2}$ 、 $d_{h_3k_3l_3}$ 分别为 g_1 、 g_2 和 g_3 的晶面间距。

[例 3] 图 8-15 是从 Cu 晶体上拍得的一组菊池衍射照片, 同时存在单晶斑点。Cu 的品格常数为 $a = 3.61 \text{ \AA}$, 工作电压为 100 kV , $\lambda = 0.037 \text{ \AA}$, 试标定衍射谱, 并测定试样精确取向。

分析:

从图 8-15(a) 和 (c) 可看出斑点分布具有六次对称性, 由

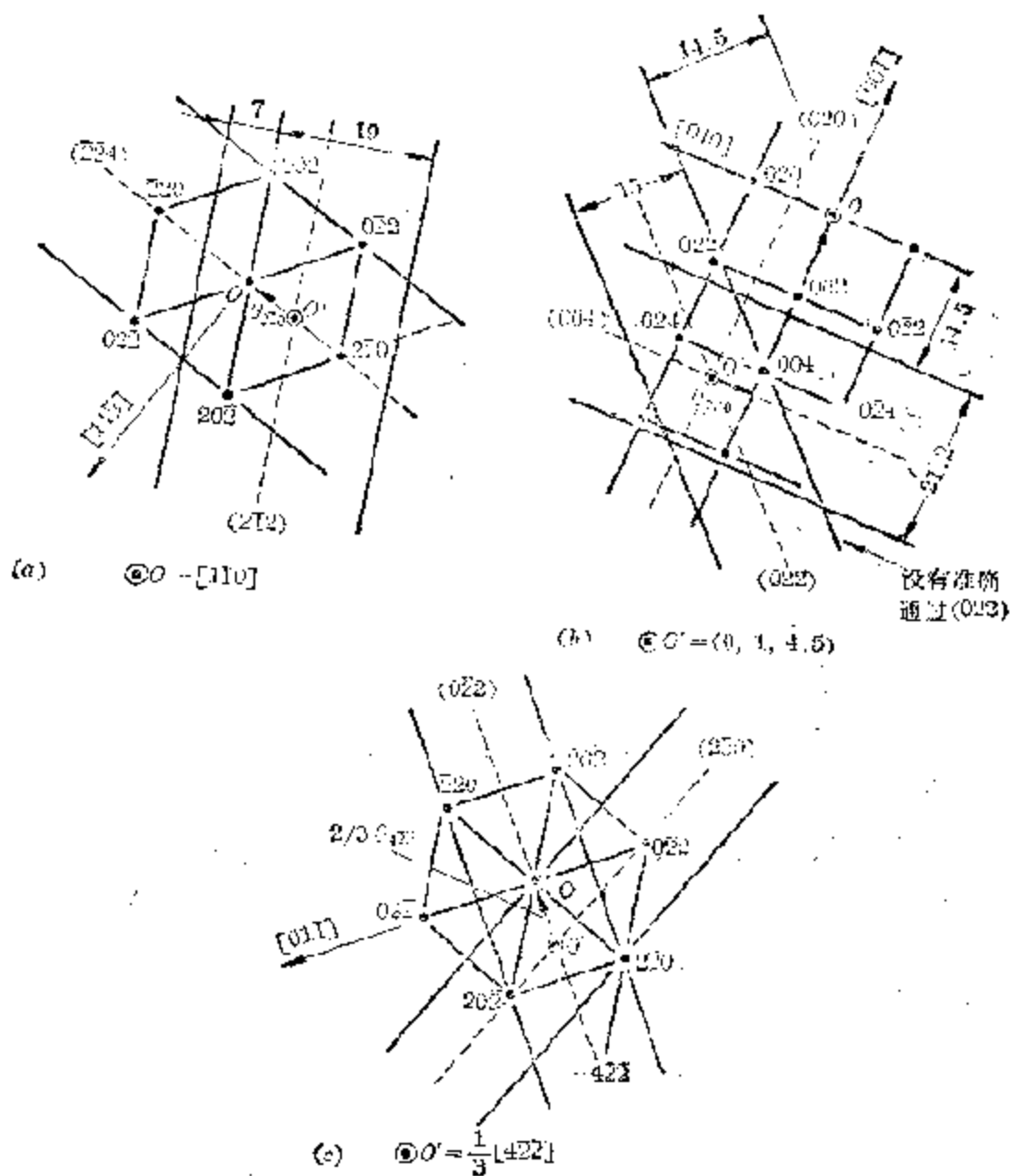


图 8-15 为单晶的电子衍射谱及其标定

{220}、{422} 型斑点组成，带轴方向为 [111]；(b) 为正四边形分布，取向为 [100]。但上述判断只是初步的，因为菊池花样的对称中心，并不与 (000) 重合。如图 (a)，菊池花样对称中心位于 (000) 到 (220) 距离的中点，由此可知准确取向并非 [111]，而是绕 [112] 有一个 θ_{220} 的旋转。

由

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

近似有

$$2d\theta = \lambda$$

即 $\theta = \lambda / 2d$

对立方晶系, $hkl = 2\bar{2}0$, 则:

$$d = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{\frac{1}{2}} = a / \sqrt{8}$$

故 $\theta = (\lambda / 2a) \cdot \sqrt{8}$

以 $\lambda = 0.087 \text{ \AA}$, $a = 3.61 \text{ \AA}$ 代入, 得

$$\theta = 0.0145 \text{ 弧度} = 0.0145 / 0.01745 = 0.83^\circ = 49'48''$$

即真实取向偏离 $[111] 49'48''$ 。沿与 $[111]$ 垂直的 $[11\bar{2}]$ 轴顺时针方向旋转 $49'48''$, 才是试样的准确取向。

从图(b)的斑点分布, 可初步标为 $[100]$ 。从斑点强度, 知操作反射为 (020) 和 $(0\bar{2}2)$ 。菊池花样的对称中心坐标近似为 $(0, 1, 4.5)$, 如⊙所示。要使⊙与透射点 O 重合, 需作如下操作:

第一步: 绕 $[00\bar{1}]$ 轴右旋 θ_{200}

第二步: 绕 $[010]$ 轴右旋 $4.5 \theta_{200}$ 。

上述两步, 相当于下述矢量合成:

$$\begin{aligned} ([00\bar{1}] + 4.5[010])\theta_{200} &= \{\theta_{200}/2\}[09\bar{2}] \\ &= \{(9^2 + 2^2)^{\frac{1}{2}}/2\} \cdot \theta_{200} = 4.6\theta_{200} = 4.6 \times (\lambda/2a) \times \sqrt{4} \\ &= 0.0473 \text{ 弧度} = 2^\circ 42'36'' \end{aligned}$$

即绕 $[09\bar{2}]$ 方向旋转 $2^\circ 42'36''$, 菊池对称中心即可与 (000) 重合。其真实方向为 $[100]$ 绕 $[09\bar{2}]$ 旋转 $2^\circ 42'36''$ 。

在图(c)上, $(20\bar{2})$ 和 (220) 同处于反射位置, 菊池对称中心位于 (000) 到 $(4\bar{2}2)$ 的 $1/3$ 处, 如⊙所示。可见绕 $[02\bar{2}]$ 轴旋转 $(2/3)\theta_{4\bar{2}2}$ 度, 两者可以重合, 即:

$$\begin{aligned} (2/3)\theta_{4\bar{2}2} &= 2/3 \cdot (\lambda/2a) \cdot (4^2 + 2^2 + 2^2)^{\frac{1}{2}} \\ &= 0.0168 \text{ 弧度} = 57'50.5'' \end{aligned}$$

上例告诉我们, 分析衍射照片, 精确测定取向时, 不能拘泥于固定的程序, 应灵活运用所掌握的知识, 进行分析, 这样往往能收到事半功倍的效果。而繁琐地按固定程序进行运算, 不一定能取得满意的结果。

二、衍衬分析

衍衬工作中,为了最佳地显示所研究晶体结构的衬度,就需选择理想的衍射成像条件,而这种选择,要求在观察现场立即完成。例如当时的衍射谱告诉我们试样正处于什么位向;为了显示某种精细结构,应从此位向向什么方向倾动多少角度,以获得所需成像条件;为证实观察者对某一细节性质的判断是否正确,应创造何种衍射条件,等等。这些都要求在短时间内对着荧光屏观察立即完成。菊池衍射谱在帮助观察者实现上述要求时,极为有用。这方面的应用例可参见文献[27]、[28]和[32]等。

例如,利用菊池图研究晶体缺陷。衍衬理论告诉我们,在双束条件下,且当 $S \approx 0$,位移矢量 $\mathbf{R}$ 满足 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R} = 0$ 时,缺陷衬度消失或很弱。 $\mathbf{g}$ 为处于准确布拉格位置的操作反射。因此,试验时可以事先准备一张包括主要取向的该晶系的菊池图,估计好布氏矢量的可能值,例如对面心立方,全位错的布氏矢量为 $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ 型,体心立方为 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 型,立即可以从菊池图上找到通过 $\langle 110 \rangle$ 、 $\langle 111 \rangle$ 极图的那些菊池带反射,可使位错消失。这样,便找到了所需要的 $\mathbf{g}$ 。如果当时的衍射谱上有菊池带,同样可以利用准备好的菊池图,找出位错。

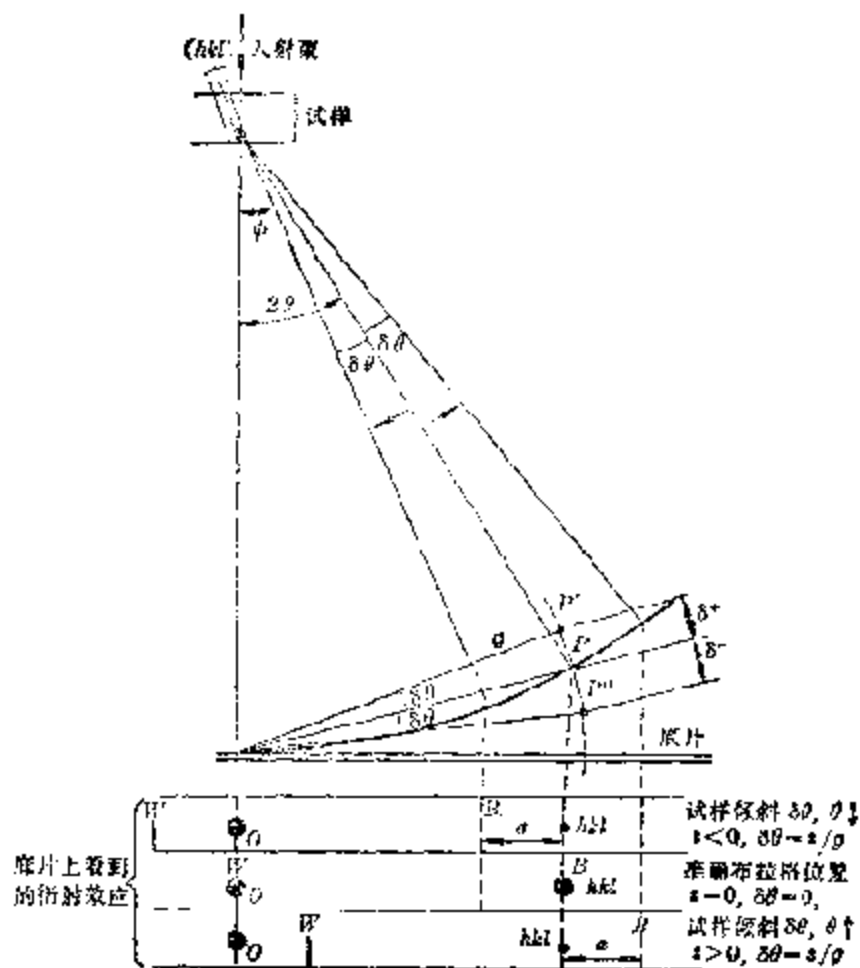


图 8-16 倾动试样对菊池线和斑点位置的影响
W—“不足”菊池线，白线；B—“过剩”菊池线，黑线
(斑点大小正比于斑点强度)

度足够，则此指示度数应与甲、乙两取向的角度差理论计算值相同；然而，事实上往往是不相等的。当然，也可用这个差值来近似评价此倾动台的刻度误差；但这也是不精确的，因它不能确切反映真实误差。这时，可利用菊池线在倾动时从准确布拉格位置发生的位移来计算绝对误差。

其方法是：选取适当试样，在低指数取向，倾动试样，得到较理想的双束条件，记下此时角度 θ_0 。这时菊池线应准确通过 (hkl) 斑点，如图 8-16 下面中间一行的条件，即 (hkl) 斑点最强时。然后略微倾动试样，并注意菊池线从 (hkl) 斑点移开，当移开的距离 a 可测时，停止倾动。这时斑点花样基本不动，记下刻度盘上的度数

θ_1 , $\theta_1 - \theta_0$ 就是此倾动台所指示的上述倾动过程的倾动度数。而从菊池线位移量 a 计算的倾动角度为 ρ , 并应有(8-4)式:

$$\operatorname{tg} \rho = a/L$$

近似为:

$$\rho \approx a/L$$

化成度数是

$$\rho = a/(0.01745 L)$$

可见倾动台的绝对误差是:

$$\Delta\theta = |(\theta_1 - \theta_0) - a/(0.01745 L)| \quad (8-11)$$

其相对误差应是:

$$\begin{aligned} \Delta\theta &= [(\theta_1 - \theta_0) - a/(0.01745 L)] / (\theta_1 - \theta_0) \\ &= 1 - a/[0.01745 L(\theta_1 - \theta_0)] \end{aligned} \quad (8-12)$$

式中: L ——电镜镜筒有效长度(mm);

a ——倾动后菊池线偏离(hkl)斑点的距离(mm);

θ_0 ——起始位置[准确布拉格位置, 菊池线通过(hkl)]时的刻度值(度);

θ_1 ——相应于 a 位移量时的刻度值(度)。

四、偏离参量 s 的测定

偏离参量的定义, 见图 8-17。它描述反射(hkl)偏离布拉格准确位置的程度。当厄瓦尔德球在倒易杆的强度极大处(即中心处)相截时, $s=0$, 是为准确布拉格位置。若厄瓦尔德球截于倒易杆的下端, 即强度极大处在厄瓦尔德球内侧, 则称偏离参量为正值, 这时相应的菊池线在斑点外侧。反之若厄瓦尔德球截于倒易杆的上端, 强度极大处于厄瓦尔德球外侧, 称这时的偏离参量为负值, 菊

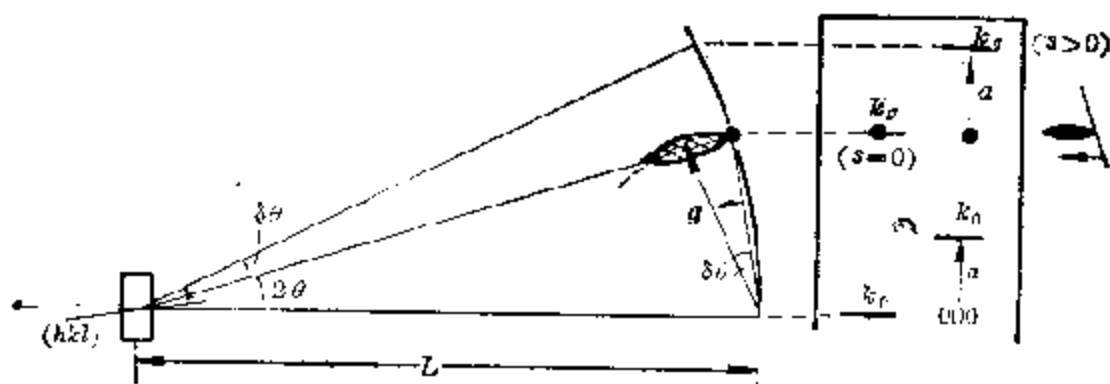


图 8-17 偏离参量 s 的定义

池线在相应斑点内侧, 即靠近(000)一侧。如图 8-3(b)就是 $s < 0$ 的情况。

偏离参量 s 的定义: 准确布拉格情况下, 一根菊池线 k_0 通过(000)斑点, 另一根 k_g 准确通过(hkl)斑点, 这时 $s=0$ 。当反射面略偏离布拉格位置, 相当于(hkl)向外倾斜一个 $\delta\theta$ 角, 这时(hkl)斑点仍基本上在原处, 而菊池线 k_0 和 k_g 向外离开(hkl)斑点一个距离 a , 定义这时 $s > 0$ 。反之, 当菊池线 k_0 和 k_g 在(hkl)斑点内侧时, 定义 $s < 0$ 。

由图易知:

$$\delta\theta = s/|g| = a/L \quad (8-13)$$

故

$$s = a|g|/L \quad (8-14)$$

可见只要菊池线已经标定, (hkl)已知, 则 $|g| = 1/d_{hkl}$ 已知, 从底片测量 a 值, 即可求得 s 值。

在本章[例 1]中, 反射(1 $\bar{3}$ 2)偏离布拉格位置, 其偏离量可计算如下:

$$\begin{aligned} a &= 5 \text{ mm}, \quad L = 738.25 \text{ mm} \\ |g_{1\bar{3}2}| &= 1/L_{1\bar{3}2} = 1/0.766 = 1.3055 \text{ \AA}^{-1} \end{aligned}$$

代入(8-14)式, 可得(s 取负值):

$$s_{1\bar{3}2} = -(5/738.25) \times 1.3055 = -8.842 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$$

五、电子束波长(加速电压)的校正

衍射和衍射分析工作中, 常常需要知道仪器有效镜筒长度 L 和工作条件下的实际加速电压或电子束的波长 λ 。R. Uyeda 和 M. Monoyama 等在1965年提出了利用菊池线精确测量波长 λ 的方法^[33]。这个方法的原理可简述如下:

电子波长在对称入射情况下, 与 L 及 d_{hkl} 、菊池线线对间距 R_K 存在下述关系(8-1b)式:

$$R_K d_{hkl} = L\lambda$$

求 λ 必须知道 L , 而 L 可以按如下方法求得。用已知物质单

晶或大晶粒试样, 拍下菊池衍射谱如图 8-18。对某一菊池线对指

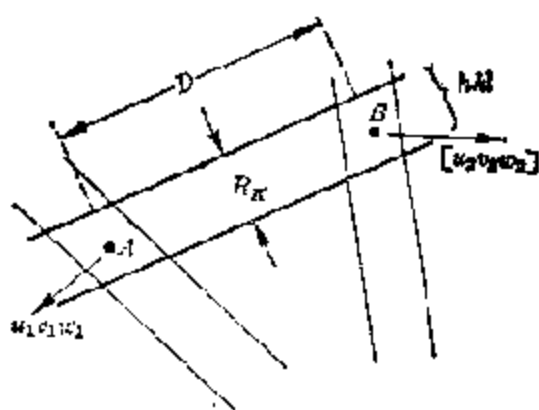


图 8-16 利用菊池线求 λ

标化(与已知菊池图比较), 确定其指数为 (hkl) , 又确定它与另两菊池线对相交得出的极点及其指数 $A: [u_1 v_1 w_1]$ 、 $B: [u_2 v_2 w_2]$ 。用查表或计算方法求 A 、 B 之间的角度 ϕ , 量出 A 、 B 间的距离 D , 那么菊池谱上一单位长度相当于 ϕ/D 度。

可见, 2θ 相当于 $(\phi/D) R_K$ 度, 于是有:

$$2\theta = (\phi/D) R_K = \lambda / d_{hkl}$$

与(8-1b)式比较, 显然, $L = D/\phi$, 这是不难理解的。上式亦可写作:

$$\lambda = (\phi/D) \cdot R_K d_{hkl} \quad (8-15)$$

式中 d_{hkl} 对已标定的 (hkl) 为已知, D 、 R_K 可从底片上量得, ϕ 可根据 A 、 B 指数求得(查表或计算), 故波长 λ 可求。

对于立方晶系物质, (8-15)式变成:

$$\lambda = a\phi R_K / [D(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}] \quad (8-16)$$

或

$$\lambda = \frac{a R_K}{D} \cdot \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2}{(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2} (u_1^2 + v_1^2 + w_1^2)^{1/2} (u_2^2 + v_2^2 + w_2^2)^{1/2}} \quad (8-17)$$

其它晶系, (8-16)式中的 ϕ , 可以利用晶向夹角公式求出。如果有标准菊池图, 还可利用图上的长度与角度换算尺直接求得(图8-13的上部即有这种标尺)。

值得指出的是, 如果已经有某晶系的标准菊池图, 借助于它, 标定了另一实际菊池衍射谱, 而且计算了精确的波长 λ_1 。那么, 当还要测量另一电镜某种工作状态的电子波长(设为 λ_2)时, 则无须重复上述繁琐的操作, 只要用同一试样, 在相同取向拍一张菊池

谱,然后与测 λ_1 时所得菊池谱进行比较,就可求得 λ_2 ,十分简便。

因为根据(8-15)式,第一次测量有:

$$\lambda_1 = (\phi_{AB}/D_1) \cdot R_{k1} \cdot d_{hk1}$$

对第二次测量,有:

$$\lambda_2 = (\phi_{AB}/D_2) \cdot R_{k2} \cdot d_{hk1}$$

于是

$$\lambda_2/\lambda_1 = (R_{k2}/R_{k1}) \cdot D_1/D_2$$

所以

$$\lambda_2 = \lambda_1 \cdot (R_{k2}/R_{k1}) \cdot (D_1/D_2) \quad (8-18)$$

式中的 λ_1 已求得, R_{k2} 、 R_{k1} 、 D_2 、 D_1 可从两次测量的底片上量得。此式适用于任何晶系,只要求试样相同,试样取向也相同。且可用第一台电镜求得的 λ_1 ,去校正另一台电镜的 λ_2 ,可见(8-18)式是十分有用的。

六、临界电压测定

随着高压电镜的出现,菊池线也被用来测量金属元素的临界电压。临界电压是多束动力学交互作用的结果^[34,35]。临界电压值对反射平面间距、德拜温度、有序度和结构因子等都非常敏感,通过它可以提供化学成分、德拜温度和结构因子等数据。而材料工作者很自然地把它与某种相变过程联系起来。据此,也可在衍射研究中,提供选择衍射条件改进缺陷成象衬度的启示。因此,近些年来,它不仅受到固体物理工作者,也受到电子衍射工作者的重视,并已报导了不少这方面的研究成果^[36~41]。当加速电压达到临界电压时,衍射谱上某反射的高级菊池线或斑点将消失,相应的在图象上,高级反射消光轮廓也随之消失。

目前测量临界电压有两个主要方法,一是会聚束方法;另一是利用菊池线。在高压电镜下,逐级升高电压,观察随着电压的升高,某一反射的较高级反射菊池线何时开始消失,此时的电压,即为临界电压;起始试验电压,可以根据计算估计,也可以查阅已有资料,确定大致范围。试验时采用小的限场光栏(直径20~50微米),正聚焦第二会聚镜,然后使衍射透镜微过焦,这时有可能得到会聚束衍射圆盘。然后仔细倾动试样,注意获得在 $\geq 2g$ 处,且 $s > 0$ 的条件(即菊池线在该斑点外侧)。在此条件下逐渐增加电压,并密

切监视该菊池线。达到临界电压以前, 此菊池线在底片上是亮的衬度; 超过此电压, 即转变为暗的衬度。电压按每 5 kV 分档逐级增加, 并且在试验之前应按前面所述, 对工作电压进行严格校正, 以便最后能对所测临界电压的精确度作出恰当估计。只要按照上述步骤进行, 测量精确度可达到或优于 1%。

表 8-1 列出部分材料的临界电压值^[30], 可供参考。

表 8-1 某些元素的临界电压值(V_c , kV) [注]

晶体结构	元 素	R	反 射	计算下临界电压计算值		试 验 值
				TFD 模型	自洽场模型	
fcc	Al	0.85	222 400 440	— — —	405 1010 3700	425, 430 — —
	Cu	0.54	222 400 440	130 380 1530	405 840 1900	310, 325 600 —
	Ni	0.40	222 400 440	145 410 1680	380 670 1870	295 610 —
	Au	0.62	222 400 440 622	110 35 630 1100	— — — —	— — 715 —
	Ag	0.58	222 400 440 622	25 215 1075 1770	75 230 910 1500	— 225 — —
bcc	Fe	0.36	220 400	240 1240	390 1350	305 —
	W	0.20	220 400 422	80 520 1175	40 590 1280	550 —
dc	Si	0.24	440	1440		1400
	Ge	0.87	440	680	960	—

[注] 电子散射数据取自国际晶体学表(Iber 和 Vainshtein);

TFD—Thomas-Fermi-Dirac。

第九章

取向关系测定和迹线分析方法

§9-1 引言

在固体物理和材料科学研究中,测定晶体取向关系有重要的理论意义和实际意义。实际材料中,大多数情况下,母相与第二相,遵从能量最低原理考虑,总是沿着彼此的一定晶体学平面及一定的晶体学方向生长起来的。在钢的相变过程中,第二相从基体中析出,也就是最常见的例子。如低碳钢中人们熟知的库-萨(Kurdjumov-Sachs)关系:

$$(111)_\gamma // (110)_\alpha$$

$$[\bar{1}\bar{1}0]_\gamma // [1\bar{1}1]_\alpha$$

和西山(Nishiyama)关系:

$$(1\bar{1}\bar{1})_\gamma // (1\bar{1}0)_\alpha$$

$$[0\bar{1}1]_\gamma // [001]_\alpha$$

又如晶体外延生长,外延层也总是沿衬底晶体的一定晶体学面和方向生长的。材料表面氧化时氧化膜的形成,电镀过程中镀层的生成等,也同样如此,往往都有确定的晶体学关系。因此,测定取向关系,对于了解合金相变、外延生长、氧化和镀层等过程的本质,及其对材料力学性能、耐氧化、耐腐蚀、耐磨等性能,有着重要意义。多年以来,寻求精确测定取向关系的新方法、新途径,已成为晶体学工作者和材料工作者十分关注的问题。

测定晶体取向关系,常用方法有X射线衍射和电子衍射方法。前者有较高的精确度,至今仍被公认的许多两相取向关系就是用这种方法测得的。它的缺点是需要有足够尺寸的单晶体样品(不小于0.1mm),难于对实际合金中的两相进行测定,应用上有一

定局限性。而电子衍射方法,由于能对金属薄膜(可以取自实际材料,不需专门生长单晶)进行选区域电子衍射,且测量结果能直接反映实际材料的两相取向关系,因此得到广泛应用。这个方法的优点,还在于当电镜有高温台时,还可对取向关系进行动态测量^[41]。新近发展起来的微微区域电子衍射($\mu\mu$ 衍射)甚至可以使所选衍射区域的范围,由通常的1微米左右,进一步缩小至几百埃,使测量结果可以准确反映人们感兴趣区域的两相取向关系。这一技术还被用来研究晶界的取向和微观结构,更显示了这个方法的极大优越性。

电子衍射测量取向关系,利用单晶电子衍射谱和菊池衍射谱。由于前面(第八章)讨论过的原因,单晶斑点测定取向,精确度不高,可能有 $\pm 15^\circ$ 的误差。如果衍射谱中同时存在菊池线,则可以利用它作进一步校正。但因菊池线产生于发散点源非弹性散射的布拉格衍射,常同时出现几个晶带,因此单独用它测定取向关系却是不合适的。极图和矩阵方法,在测定取向关系时则是重要的方法,本章中将着重予以介绍。

迹线分析,是电子衍射技术中的一个重要分析方法。它借助于电子衍射,从分析结构特征(如位错、层错、沉淀相)在试样上下表面留下的迹线入手,找出它们的空间几何关系,在电子衍射金相学中用处很大,本章也以一定篇幅进行讨论。

§ 9-2 电子衍射测定取向关系的一般程序

通常会遇到如下几种情况:

一是衍射区域除基体外,只有单个大质点;二是除基体外,第二相质点呈细小弥散分布,因此可能同时有多个第二相质点进入限场光栏。后一种情况下,这些第二相与基体可能只有一种取向关系,也可能有几种取向关系,或虽属一种取向关系,但包含几个变态。例如马氏体相变中,奥氏体有四个 $\{111\}_\gamma$ 面,每个 $\{111\}_\gamma$ 面上又有三个 $\langle 110 \rangle_\gamma$ 方向,所以无论是西山关系,还是库-萨

(K-S)关系,都存在12种取向变态。这些情况,在分析时都应予以注意。不难理解,只凭一张或极少数几张衍射照片去决定一种未知相与基体的取向关系是不严格的,有时甚至会得出错误的结果。对于一种未知相的取向测定,有人认为需分析30~800个质点,并应利用极图描点方法,进行统计分析,方可得到理想的结果^[42]。

为了使电子束方向更接近于衍射花样所表示的晶带轴方向,应使基体斑点尽可能以(000)为对称中心呈等强分布,即倒易面尽可能垂直于电子束方向,这时测定的晶体学取向与计算结果相差不会超过 $\pm 2^\circ$,否则其误差可以高达 $\pm 15^\circ$ ^[43]。

实验以前,应精确调整、校正试样倾动台,切实估计它可能带来的测量误差。同一试样取得多个倒易面的衍射谱,是通过倾动试样获得的,故倾动台的正常工作状态至关重要。

至于 180° 任意性问题,最好能在衍射试验时,利用倾动台,借助晶面、晶向间角度关系,予以排除。如有困难,则应在统计分析时,予以考虑。

大多数情况下,是对已知相测定取向关系;对未知相,一般最好先从合金中萃取出第二相,再用X射线方法测定成分,确定属于何种物质以后,再测定它与母相的取向关系。

下面通过实例,来说明测定分析过程。

〔例1〕在含Nb 1.9%的钢中,时效过程析出hcp结构的Laves相 Fe_2Nb ,前后拍得 Fe_2Nb 在 $\alpha\text{-Fe}$ 基体上的两张各含有两套斑点的衍射照片,如图9-1(a)、(b),试求 Fe_2Nb 与 $\alpha\text{-Fe}$ 的取向关系^[43]。

分析:

先对图9-1(a)进行分析。强斑点是边长比为1.414的无心矩形,可以标为 $\alpha\text{-Fe}$ 的 $[011]_\alpha$ 晶带;另一套可以标为 Fe_2Nb 的 $[1102]_{\text{Fe}_2\text{Nb}}$ 晶带,标注如图9-1(c)。从(c)很容易求出取向关系是:

$$(\bar{1}101)_{\text{Fe}_2\text{Nb}} // (21\bar{1})_\alpha$$

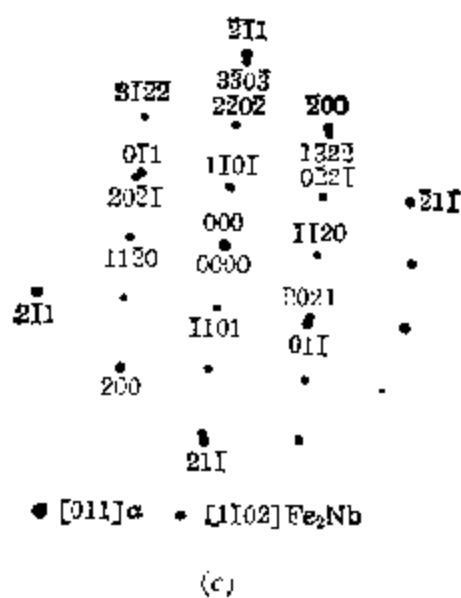
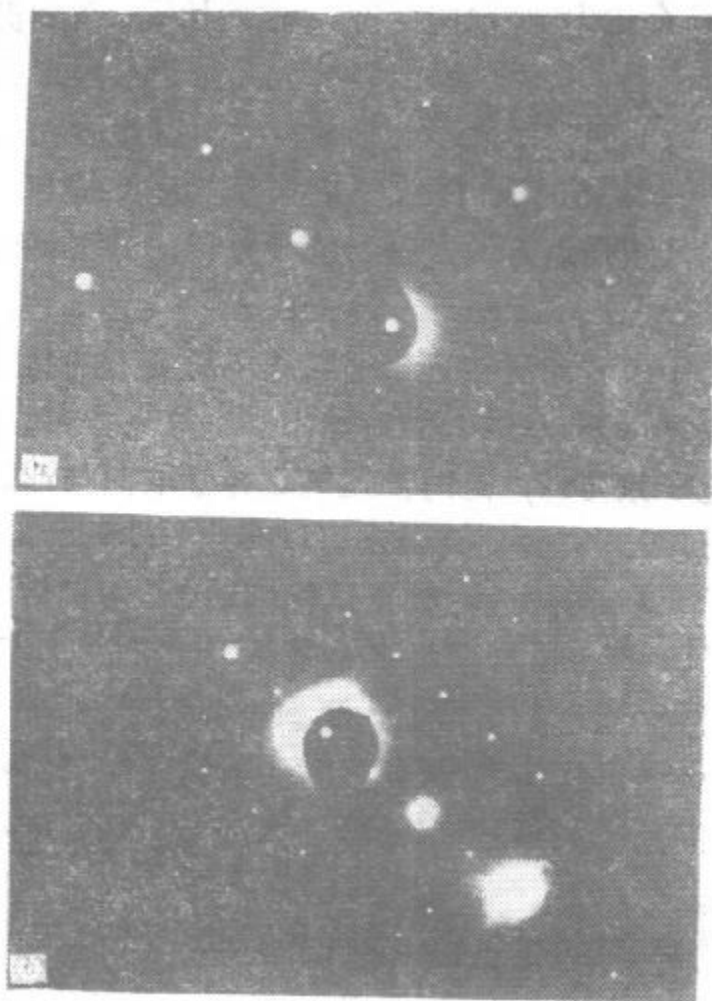


图 9-1 含 Nb 钢中 Fe_2Nb 与 (a)、(b) 前后两次拍得的衍射照片; (c) 为对 (a) 的

$$[\bar{1}\bar{1}02]_{\text{Fe}_2\text{Nb}} // [011]_{\alpha}$$

习惯上采用低指数晶面及晶向表示。最好能找到一个 $\alpha\text{-Fe}$ 的低指数面。为此,需先将 (c) 在相应的 $[011]_{\alpha}$ 和 $[\bar{1}\bar{1}02]_{\text{Fe}_2\text{Nb}}$ 极图上表示出来,并将两者重迭在一起,然后将 $\alpha\text{-Fe}$ 的 $[\bar{1}\bar{1}1]_{\alpha}$ 旋至中心;与此同步, Fe_2Nb 的 $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}0]_{\text{Fe}_2\text{Nb}}$ 也转到了中心,得到以晶面法线极点表示的重迭极图(d)。这样,上述取向关系可改写为:

$$\left. \begin{aligned} (0001)_{\text{Fe}_2\text{Nb}} // (121)_{\alpha} \\ [\bar{1}\bar{1}\bar{2}0]_{\text{Fe}_2\text{Nb}} // [\bar{1}\bar{1}1]_{\alpha} \end{aligned} \right\} \quad (9-1)$$

作者还对许多 Fe_2Nb 质点作了衍射,采用与上述相同的步骤作了分析,发现在 $\pm 5^\circ$ 范围内均符合上述取向关系。

另一衍射照片如图 (b), 标注如 (e)。它们似乎是另一种取向关系,但如果从 $\alpha\text{-Fe}$ 的 $[111]$ 倾斜 35.27° , 那么正好得到 $\alpha\text{-Fe}$ 的 $[011]$ 晶带与 Fe_2Nb 的 $[\bar{1}\bar{1}02]$ 晶带相重。由此可见, (b) 并非新的取向关系,而实质上与 (a) 相同。

结论是: 此含 Nb 钢中 Fe_2Nb 与 $\alpha\text{-Fe}$ 的取向关系, 应如 (9-1) 式所示。

关于 180° 任意性问题, 在每次拍衍射照片时, 都要求在现场观察时立即予以排除是很麻烦的, 实际上也很难办到。通常在每获得一张衍射照片时, 描在极图上, 固定基体极点不动, 让第二相所有极点绕中心旋转 180° , 另作一极图, 这样等于每拍一次衍射照片, 获得互成 180° 的两种取向关系。然后再把这几十个极图逐一将低指数极点移至中心, 其它极点作同步移动, 把这许多极图重迭起来, 选取分布集中的极点定为取向关系。可参见文献 [44] 第七章所举的例子。

上述极图法分析取向关系的步骤归纳如下:

(1) 对同时含有第二相和基体的试样, 作选区电子衍射, 拍三十张或更多的衍射照片, 并逐一指标化, 求出晶带指数。选择衍射谱上同一方向但分别属于两相的反射面指数, 作为平行晶面指数: $(h'k'l')_{\text{第二相}} // (hkl)_{\text{基体}}$; 以两者的晶带轴方向, 作为平行方向: $[u'v'w']_{\text{第二相}} // [uvw]_{\text{基体}}$ 。指标化时, 应注意将二次衍射区别开来。

试验中可利用中心暗场象技术 (ODF), 鉴定可能存在的取向类型和同一取向的不同变态。

(2) 将这些衍射照片描成以相应晶带轴为中心极点为重迭极图, 在此极图上分别找出基体和第二相的三基矢极点 (001, 010, 100)。

(3) 第(2)步所获得的极图, 一相不动, 另一相所有极点, 均绕中心旋转 180° , 得到另一套重迭极图。

(4) 将(2)和(3)所得的全部极图, 使一相的 [001] (或 [010]、[100]) 旋转至中心, 另一相的 001、010、100 三极点同步旋至应有位置。由于它们都描在同一张透明纸上, 所以得到了一张在一相 [001] (或 [010]、[100]) 标准极图上的另一相 001、010、100 三极点的分布图。如图 9-2, 设标准极图上 P 、 Q 、 R 三点的指数为 $[h_1 k_1 l_1]_M$ 、 $[h_2 k_2 l_2]_M$ 和 $[h_3 k_3 l_3]_M$, 则所求取向关系是;

$$(001)_S // (h_1 k_1 l_1)_M$$

$$[100]_S // [h_2 k_2 l_2]_M$$

$$[010]_S // [h_3 k_3 l_3]_M$$

其它分散分布在 P 、 Q 、 R 附近小范围 (例如 $\pm 5^\circ$) 以外的极点舍弃之。

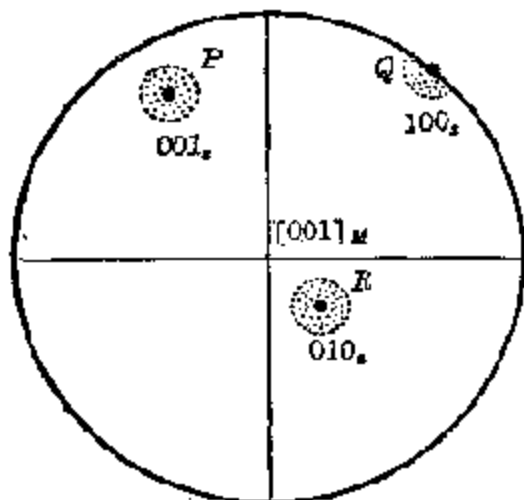


图 9-2 第二相 (S) 的 001、010、100 极点在基体 (M) [001]_M 标准极图上的分布

以上我们介绍了利用极图分析单晶斑点衍射谱求两相取向关系的方法, 且已初步指出此法的精确度不够理想, 下面就这个问题作进一步讨论。这里介绍 C. Laird 和 E. Eichen 曾经对此所作的分析^[45]。他们用高纯 Al 单晶进行电子衍射, 初始取向为 [001], 从此出发, 连续改变取向, 观察随试样倾动而发生的斑点强度和衍射谱的改变, 结果发现:

1) 试样倾动一个相当角度 ($\sim 20^\circ$), 原来的 [001] 衍射谱仍然存在, 同时还出现了 [015] 晶带衍射谱。以后继续倾动, [001] 晶带才开始消失, 但 [013] 和 [015] 晶带又同时存在, 这就是说, 由于倒

易点的拉长,厄瓦尔德球与倒易面相截的条件“放宽了”。

2) 在原有斑点消失和新斑点出现以前,一般先经过原有斑点强度发生改变的阶段。即存在着一个强度发生改变,而位置无显著变化的倾动角度范围,这个角度有时可以大至 $\sim 10^\circ$ 。

3) 倾动过程中,可能出现仅有一列与转动轴平行的斑点列,且它们在整个倾动过程中位置和强度均不变。这可能是由于此时晶带轴指数增高,其外侧高指数反射未能进入投影镜极靴,从而达不到荧光屏的缘故。

上述实验结果对我们进行取向分析是有启发的:即不要把极图分析中,新相与母相两个分离不远(例如 $< 10^\circ$) 的极点轻易确定为新的取向关系。在误差范围内,它们很可能仍然是已知取向关系的一种变态。例如图 9-3 中,虚线方框内的取向,可能仍然是已知的西山关系的十二种变态中的四种,因为它们与理想取向关系相比,最大仅相差 $9^\circ 44'$ 。

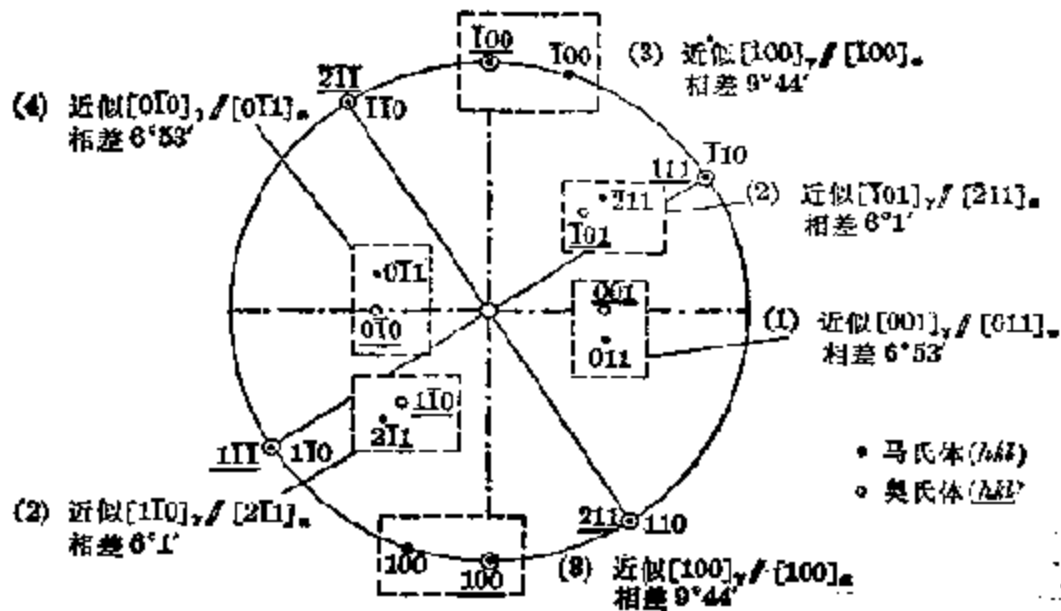


图 9-3 西山关系极射赤面投影图

§ 9-3 描述两相取向关系的矩阵方法

上一节介绍了利用极图分析两相重迭电子衍射谱,确定取向

关系的方法。目前此法仍应用较多,但由于要求拍摄很多衍射照片,逐一分析,工作量很大。如果结合采用下面介绍的矩阵方法,可以从不太多的衍射照片上,获得比较满意的分析结果。目前在取向关系测定工作中,大多数作者均倾向把极图法与矩阵方法结合起来应用。

什么是矩阵方法?简要地说,就是从数学上找出新相(第二相)与母相(基体)间晶面指数和晶向指数的变换关系。这种变换关系是通过“变换矩阵”来联系的。借助变换矩阵,可以在母相的坐标系中描述新相的晶面或晶向,反之也可,可见矩阵方法的核心,就是求各种转换中的变换矩阵。

这种通过变换矩阵反映两相取向关系的方法,十分简捷。尤其适用于验证实验结果是否符合已知取向关系数据,或预测当母相倒易面发生变化时,新相的倒易面将如何变化。另一优点是便于利用电子计算机进行计算。近年来,它受到广泛重视,其应用已扩展到晶体学理论的许多定量研究中。在相变研究中(例如马氏体相变),矩阵方法已成为相交过程、相变产物晶体学分析的重要手段,并已取得许多有意义的结果,自从Jawson和Wheeler^[46] 1948年首先应用矩阵方法研究马氏体相变两相取向关系以来,三十年来,马氏体相变晶体学的研究已越来越深入。这方面综述性总结见文献[47]。

下面简要介绍矩阵方法及其在两相取向关系测定方面的应用^[48]。

一、矩阵方法概述

(1) 晶面 (hkl) , 可以用倒易空间的一个倒易矢 $G_{hkl}^* = h\alpha_1^* + k\alpha_2^* + l\alpha_3^*$ 来表示, 它的法线是正空间的矢量:

$$I_{uvw} = u\alpha_1 + v\alpha_2 + w\alpha_3$$

G_{hkl}^* 和 I_{uvw} 的关系是:

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = G \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} \quad (9-2)$$

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = G^{-1} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} \quad (9-3)$$

式中, 对任意晶系, 均有:

$$G = \begin{bmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ac \cos \beta \\ ab \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ac \cos \beta & bc \cos \alpha & c^2 \end{bmatrix} \quad (9-4)$$

它的逆矩阵:

$$G^{-1} = \frac{1}{\Delta} \begin{bmatrix} b^2 c^2 \sin^2 \alpha & abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) & a^2 c^2 \sin^2 \beta \\ abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) & a^2 c^2 \sin^2 \beta & a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) \\ ab^2 c (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta) & a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) & a^2 b^2 \sin^2 \gamma \end{bmatrix} \quad (9-5)$$

式中

$$\Delta = (abc)^2 (1 + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma) \quad (9-6)$$

G 是晶体基矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 用倒易基矢 $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ 表述时的变换矩阵, G^{-1} 则是倒易基矢 $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ 用晶体基矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 表述时的变换矩阵。将不同晶系具体物质的晶格常数代入 (9-4)、(9-5) 式, 即可求得该物质的 G 和 G^{-1} 。它们实际上就是第四章分别用 G 和 G^{-1} 表示的变换矩阵 (参见表 4-2)。

已知晶面法线方向指数求该晶面指数, 用 (9-2) 式; 已知晶面指数, 求其法线晶向指数, 用 (9-3) 式。

(2) 设 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 和 $\mathbf{a}_1', \mathbf{a}_2', \mathbf{a}_3'$ 分别为母相及第二相在正空间的坐标基矢; $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ 和 $\mathbf{a}_1'^*, \mathbf{a}_2'^*, \mathbf{a}_3'^*$ 分别为母相及第二相在倒空间的坐标基矢。则两相间正空间基矢, 可以用变换矩阵 A 联系起来,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_1' \\ \mathbf{a}_2' \\ \mathbf{a}_3' \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{a}_3 \end{bmatrix} \quad (9-7)$$

其逆变换为:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{a}_3 \end{bmatrix} = A^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{a}'_2 \\ \mathbf{a}'_3 \end{bmatrix} \quad (9-8)$$

两相倒空间基矢, 可以用变换矩阵 B 联系起来:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^* \\ \mathbf{a}_2^* \\ \mathbf{a}_3^* \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^* \\ \mathbf{a}_2^* \\ \mathbf{a}_3^* \end{bmatrix} \quad (9-9)$$

其逆变换为:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^* \\ \mathbf{a}_2^* \\ \mathbf{a}_3^* \end{bmatrix} = B^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^* \\ \mathbf{a}_2^* \\ \mathbf{a}_3^* \end{bmatrix} \quad (9-10)$$

(9-9)式转置:

$$[\mathbf{a}_1^* \mathbf{a}_2^* \mathbf{a}_3^*] = [\mathbf{a}_1^* \mathbf{a}_2^* \mathbf{a}_3^*] B^T \quad (9-11)$$

以(9-11)式两端对应右乘(9-7)式:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}'_1 \\ \mathbf{a}'_2 \\ \mathbf{a}'_3 \end{bmatrix} [\mathbf{a}_1^* \mathbf{a}_2^* \mathbf{a}_3^*] = A \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{a}_3 \end{bmatrix} [\mathbf{a}_1^* \mathbf{a}_2^* \mathbf{a}_3^*] B^T$$

$$E = AB^T \quad (9-12)$$

式中 E 是单位矩阵, 可见 A 与 B 互为转置逆矩阵, 即:

$$\left. \begin{aligned} A^{-1} &= B^T \\ \text{又因 } [B^T]^{-1} &= A, \quad \therefore B^{-1} = A^T \end{aligned} \right\} \quad (9-13)$$

就是说, A 求逆等于 B 转置, 或 B 求逆等于 A 转置。

利用(9-13)这个重要性质, 经过简单处理, 可以得出如下两组变换关系:

$$\begin{bmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = B^{-1} \begin{bmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{bmatrix} = A^T \begin{bmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{bmatrix} \quad (9-14)$$

$[uvw]$ 、 $[u'v'w']$ 分别为同一正空间矢量在母相及第二相正空间坐标系中的坐标。(9-14)式与(9-9)、(9-10)式比较,可知正空间矢量与倒空间基矢变换具有相同变换矩阵 B 。

$$\left. \begin{aligned} \begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix} &= A \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} &= A^{-1} \begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix} = B^T \begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix} \end{aligned} \right\} \quad (9-15)$$

式中 $[hkl]$ 、 $[h'k'l']$ 分别为同一倒易矢量在母相及第二相倒易坐标系中的坐标,也可理解为在母相中的 (hkl) 面与第二相中的 $(h'k'l')$ 面平行。将(9-15)式与(9-7)、(9-8)式比较,可知两相间晶面指数的变换矩阵与两相间正空间坐标基矢的变换矩阵相同。

有必要强调指出,在上面讨论的多个变换关系式中,由于对一定晶系一定物质来说,变换矩阵值是固定值,所以这些关系左右两端的量,从取向关系来说,都可以理解为在母相与第二相中的一对平行的量,例如平行的晶面、倒易面或晶向。

从(9-14)式,只要求得变换矩阵 B ,就可确定与母相 $(uvw)^*$ 倒易面平行的第二相的倒易面 $(u'v'w')^*$,反之亦可。从(9-15)式,只要知道变换矩阵 B^T ,就可确定与母相 (hkl) 面平行的第二相中那个晶面的指数 $(h'k'l')$,反之亦可。

二、矩阵方法应用于测定取向关系

设第二相与母相之间有三对晶面成平行关系,即

$$\left. \begin{aligned} (h_1'k_1'l_1') &\parallel (h_1k_1l_1) \\ (h_2'k_2'l_2') &\parallel (h_2k_2l_2) \\ (h_3'k_3'l_3') &\parallel (h_3k_3l_3) \end{aligned} \right\} \quad (9-16)$$

求它们之间的变换矩阵。

(9-16)式也可写作:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{|g'_1|} [h'_1 a_1^{*'} + k'_1 a_2^{*'} + l'_1 a_3^{*'}] &= \frac{1}{|g_1|} [h_1 a_1^* + k_1 a_2^* + l_1 a_3^*] \\ \frac{1}{|g'_2|} [h'_2 a_1^{*'} + k'_2 a_2^{*'} + l'_2 a_3^{*'}] &= \frac{1}{|g_2|} [h_2 a_1^* + k_2 a_2^* + l_2 a_3^*] \\ \frac{1}{|g'_3|} [h'_3 a_1^{*'} + k'_3 a_2^{*'} + l'_3 a_3^{*'}] &= \frac{1}{|g_3|} [h_3 a_1^* + k_3 a_2^* + l_3 a_3^*] \end{aligned} \right\} \quad (9-17)$$

表成矩阵形式为:

$$\begin{bmatrix} h'_1 & k'_1 & l'_1 \\ h'_2 & k'_2 & l'_2 \\ h'_3 & k'_3 & l'_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1^{*'} \\ a_2^{*'} \\ a_3^{*'} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{|g'_1|}{|g_1|} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{|g'_2|}{|g_2|} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{|g'_3|}{|g_3|} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1^* \\ a_2^* \\ a_3^* \end{bmatrix} \\ = \begin{bmatrix} \frac{d_1}{d'_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{d_2}{d'_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{d_3}{d'_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1^* \\ a_2^* \\ a_3^* \end{bmatrix} \quad (9-18)$$

简单记作:

$$[H'] [A^{*'}] = [J] [H] [A^*] \quad (9-18a)$$

由此可得:

$$[A^{*'}] = [H']^{-1} [J] [H] [A^*] \quad (9-19)$$

令 $B = [H']^{-1} [J] [H]$, 那末第二相与母相倒易坐标基矢, 通过下式, 由变换矩阵 B 联系起来:

$$[A^{*'}] = B [A^*] \quad (9-19a)$$

此即(9-9)式, 式中:

$$B = \begin{bmatrix} h'_1 & k'_1 & l'_1 \\ h'_2 & k'_2 & l'_2 \\ h'_3 & k'_3 & l'_3 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{d_1}{d'_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{d_2}{d'_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{d_3}{d'_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{bmatrix} \quad (9-20)$$

如果已知取向关系如(9-16)式, 则(9-20)式右端都是已知的, 于是

可求出变换矩阵 B 。反之,借助此 B 矩阵,可以预测与母相一套平面 $(h_1k_1l_1)$ 、 $(h_2k_2l_2)$ 、 $(h_3k_3l_3)$ 平行的第二相的三个面。

但是,在通常的文献报导中,总是给出如 $(h'_1k'_1l'_1) // (h_1k_1l_1)$, $[u'_2v'_2w'_2] // [u_2v_2w_2]$ 形式的取向关系。这时,怎样利用 (9-20) 式求 B 呢?

首先利用 (9-2) 式,将 $[u'_2v'_2w'_2]$ 变换成对应的晶面 $(h'_2k'_2l'_2)$, 将 $[u_2v_2w_2]$ 变换成对应的晶面 $(h_2k_2l_2)$; 再利用 (9-3) 式,将 $(h'_1k'_1l'_1)$ 和 $(h_1k_1l_1)$ 分别转换成 $[u'_1v'_1w'_1]$ 、 $[u_1v_1w_1]$; 于是由 $[u'_1v'_1w'_1] \times [u'_2v'_2w'_2]$ 可求得 $(h'_3k'_3l'_3)$, 由 $[u_1v_1w_1] \times [u_2v_2w_2]$ 可求得 $(h_3k_3l_3)$ 。这样,就可将晶面、晶向平行取向关系,转换成如 (9-16) 式的三对晶面平行取向关系,再利用 (9-20) 式求 B 。

实际进行取向关系测定时,是将得到的三十张衍射照片,按 § 9-2 所述步骤逐个进行分析,得到 $30 \times 2 = 60$ 个取向关系,分别对它们求 B , 然后选定出现几率最多的变换矩阵所对应的取向关系,作为所分析合金母相与第二相的取向关系。不难设想,这个计算工作量是很大的,必须用电子计算机进行。

文献 [48] 用电子计算机按 (9-20) 式计算了钢中马氏体与奥氏体的库-萨取向关系的十二个变换矩阵,考察这些矩阵的元素组成和分布,可以认为它们等效于:

$$\{111\}_\gamma // \{011\}_\alpha$$

$$\langle 10\bar{1} \rangle_\gamma // \langle 11\bar{1} \rangle_\alpha$$

【例 2】碳钢中铁素体与回火马氏体中渗碳体之间的取向关系,经测定^[40], 渗碳体 (O) 晶格基矢与铁素体基矢之间,符合下述关系:

$$\left. \begin{aligned} [100]_\sigma // \langle 110 \rangle_\alpha \\ [010]_\sigma // \langle 1\bar{1}1 \rangle_\alpha \\ [001]_\sigma // \langle 112 \rangle_\alpha \end{aligned} \right\} \quad (9-21)$$

具体又可表示为 12 种取向关系,试求反映下述具体取向的变换矩阵。

$$\left. \begin{aligned} [112]_c // [1\bar{1}0]_a \\ [010]_c // [111]_a \\ [001]_c // [112]_a \end{aligned} \right\} \quad (9-22)$$

首先利用晶轴两两交叉相乘, 求矢量积的方法, 变 (9-22) 式

$$\left. \begin{aligned} (001)_c // (1\bar{1}0)_a \\ (100)_c // (2\bar{2}\bar{2})_a \\ (010)_c // (112)_a \end{aligned} \right\} \quad (9-23)$$

已知 Fe_3C 为正交晶系:

$$a_0 = 4.5241 \text{ \AA}, \quad b_0 = 5.0883 \text{ \AA}$$

$$c_0 = 6.7416 \text{ \AA}$$

$$\begin{cases} d_{001} = 6.742 \text{ \AA} \\ d_{100} = 4.524 \text{ \AA} \\ d_{010} = 5.088 \text{ \AA} \end{cases}$$

$\alpha\text{-Fe}$ 为体心立方: $a_0 = 2.8661 \text{ \AA}$

$$\begin{cases} d_{112} = 1.170 \text{ \AA} \\ d_{1\bar{1}0} = 2.027 \text{ \AA} \\ d_{2\bar{2}\bar{2}} = 0.828 \text{ \AA} \end{cases}$$

将有关值代入 (9-20) 式, 得:

$$\begin{aligned} B &= \begin{bmatrix} 001 \\ 100 \\ 010 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{1.170}{6.742} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2.027}{4.524} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{0.828}{5.088} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 112 \\ 1\bar{1}0 \\ 2\bar{2}\bar{2} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 001 \\ 100 \\ 010 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0.174 & 0 & 0 \\ 0 & 0.448 & 0 \\ 0 & 0 & 0.163 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 112 \\ 1\bar{1}0 \\ 2\bar{2}\bar{2} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0.326 & 0.326 & -0.326 \\ 0.174 & 0.174 & 0.343 \\ 0.448 & -0.448 & 0 \end{bmatrix} \quad (9-24) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B^{-1} &= \begin{bmatrix} 0.326 & 0.326 & -0.326 \\ 0.174 & 0.174 & 0.348 \\ 0.448 & -0.448 & 0 \end{bmatrix}^{-1} \\
 &= \frac{1}{0.1524} \begin{bmatrix} 0.1559 & 0.1559 & -0.1559 \\ 0.146 & 0.146 & -0.292 \\ 0.170 & -0.170 & 0 \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} 1.022 & 1.022 & -1.022 \\ 0.958 & 0.958 & 1.916 \\ 1.1155 & -1.1155 & 0 \end{bmatrix} \quad (9-25)
 \end{aligned}$$

于是据(9-14)式,可以得到变换关系:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_O = \begin{bmatrix} 0.326 & 0.326 & -0.326 \\ 0.174 & 0.174 & 0.348 \\ 0.448 & -0.448 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_\alpha \quad (9-26)$$

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_\alpha = \begin{bmatrix} 1.022 & 1.022 & -1.022 \\ 0.958 & 0.958 & 1.916 \\ 1.1155 & -1.1155 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_O \quad (9-27)$$

根据(9-26)、(9-27)式,可以预测 α -Fe与 Fe_3O_4 衍射谱相重时的晶带轴指数。其它十一种取向的 B 和 B^{-1} ,其矩阵元素组成是相同的,唯分布略有差异,这说明这十二种取向是同一类型取向。

下面计算母相 α -Fe与第二相 Fe_3O_4 的晶面指数的变换矩阵,这要通过(9-15)式,因此,首先要求出 A 和 B^T 。

由(9-13)式,知 $A=[B^{-1}]^T$,故由(9-25)式,得:

$$A = \begin{bmatrix} 1.022 & 0.958 & 1.1155 \\ 1.022 & 0.958 & -1.1155 \\ -1.022 & 1.916 & 0 \end{bmatrix}$$

故有

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_O = \begin{bmatrix} 1.022 & 0.958 & 1.1155 \\ 1.022 & 0.958 & -1.1155 \\ -1.022 & 1.916 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_\alpha \quad (9-28)$$

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_a = \begin{bmatrix} 0.326 & 0.174 & 0.448 \\ 0.326 & 0.174 & -0.448 \\ -0.326 & 0.348 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_c \quad (9-29)$$

(9-28)和(9-29)式可以帮助我们找到两相相重衍射谱上彼此斑点的相对位置关系。例如在(9-28)式所示的衍射谱上, α -Fe 的 $(1\bar{1}0)_a$ 斑点相当于渗碳体的 $(0.064, 0.064, -2.938)$ 衍射, 即:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_c &= \begin{bmatrix} 1.022 & 0.958 & 1.1155 \\ 1.022 & 0.958 & -1.1155 \\ -1.022 & 1.916 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \bar{1} \\ 0 \end{bmatrix}_a \\ &= \begin{bmatrix} 0.064 \\ 0.064 \\ -2.938 \end{bmatrix} \approx (001) \end{aligned}$$

而渗碳体的 $(100)_c$ 斑点相当于 α -Fe 的 $(111)_a$ 衍射, 即:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_a &= \begin{bmatrix} 0.326 & 0.174 & 0.448 \\ 0.326 & 0.174 & -0.448 \\ -0.326 & 0.348 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}_c \\ &= \begin{bmatrix} 0.326 \\ 0.326 \\ -0.326 \end{bmatrix} = (11\bar{1})_a \end{aligned}$$

上述结果与(9-23)的平行关系是一致的。

最后,着重指出,由(9-20)式可知变换矩阵 B 反映了两相取向关系的实质,它与两者平行晶面的指数及它们的面间距有关。可见在测定中,每一张衍射照片,求得一种取向关系及其对应的 B 后,如果有相当多个 B 矩阵,其九个元素绝对值相同,只不过正负号和排列位置不同,那么就可断定这两相的取向关系是属于这个类型的;而出现机率较少的 B 所对应的取向关系,则很可能是一种偶然现象,不足以定为一种确定的取向关系。

此外,注意到 B 矩阵中各元素的数值一般都不是整数,这是不足为奇的,其来源是(9-20)式中的 $[J]$ 矩阵对角线元素两相面间距比值 d/d' 一般都不是整数。考虑到电子衍射时试样前后两

一个位向在相差 5° 以内时, 衍射谱在大多数情况下, 不会发生明显改变。因此有时又常将这些 B 矩阵各元素加以约简, 这对求平行晶带轴指数和晶面指数无重大影响。例如 (9-25) 式, 可简化为:

$$B^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \bar{1} \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & \bar{1} & 0 \end{bmatrix} \quad (9-25a)$$

(9-27)、(9-28) 可分别简化为:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_a = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \bar{1} \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & \bar{1} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_c \quad (9-27a)$$

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_c = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \bar{1} \\ \bar{1} & 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_a \quad (9-28a)$$

(9-21) 式表示的取向关系, 通常称为 Багаряцкий 关系。我们在上面一系列计算中得到的结果: (9-26)、(9-27)、(9-28)、(9-29) 各式与 А. М. Утевский^[49] 的结果基本一致。许多工作表明, Багаряцкий 关系用来说明下贝氏体中的 α -Fe 与 Fe_3O 取向关系是合适的。在上贝氏体中, 则除一部分符合上述关系外, 另一部分符合 Pitsch 取向关系, 即:

$$\left. \begin{array}{l} [100]_c // [\bar{3}\bar{1}1]_a \\ [010]_c // [1\bar{3}1]_a \\ [001]_c // [2\bar{1}5]_a \end{array} \right\} \quad (9-30)$$

它们与 (9-26)、(9-27)、(9-28)、(9-29) 式对应关系式是:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_c = \begin{bmatrix} 0.57 & -0.22 & 0.18 \\ 0.14 & 0.52 & 0.16 \\ -0.16 & -0.08 & 0.39 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_a \quad (9-31)$$

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_a = \begin{bmatrix} 1.42 & 0.45 & -0.85 \\ -0.54 & 1.63 & -0.43 \\ 0.45 & 0.52 & 2.15 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_c \quad (9-32)$$

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_c = \begin{bmatrix} 1.42 & -0.54 & 0.45 \\ 0.45 & 1.63 & 0.52 \\ -0.85 & -0.43 & 2.15 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_a \quad (9-33)$$

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_a = \begin{bmatrix} 0.57 & 0.14 & -0.16 \\ -0.22 & 0.52 & -0.08 \\ 0.18 & 0.16 & 0.39 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_c \quad (9-34)$$

上贝氏体还存在一种取向关系, 即

$$\left. \begin{aligned} [100]_c // [9, \bar{4}, 4]_a \\ [010]_c // [\bar{5}, 16, 5]_a \\ [001]_c // [5, 2, 10]_a \end{aligned} \right\} \quad (9-35)$$

它们与上述各相应关系式分别为:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_c = \begin{bmatrix} 0.54 & -0.23 & 0.24 \\ 0.15 & 0.52 & 0.15 \\ -0.19 & -0.05 & 0.28 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_a \quad (9-36)$$

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_a = \begin{bmatrix} 1.85 & 0.46 & -1.04 \\ -0.58 & 1.64 & -0.29 \\ 0.59 & 0.46 & 2.10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_c \quad (9-37)$$

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_c = \begin{bmatrix} 1.85 & -0.58 & 0.59 \\ 0.46 & 1.64 & 0.46 \\ -1.04 & 0.29 & 2.10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_a \quad (9-38)$$

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_a = \begin{bmatrix} 0.54 & 0.15 & -0.19 \\ -0.23 & 0.52 & -0.05 \\ 0.24 & 0.15 & 0.38 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_c \quad (9-39)$$

将(9-36)~(9-39)式与(9-31)~(9-34)式进行比较, 也许可以认为(9-30)与(9-35)式, 在误差范围内, 同属于 Pitsch 关系。作为练习, 读者试利用本节所述的计算原理, 验算 Pitsch 关系[(9-30)式]这些变换公式的正确性。

表 9-1 列出了合金中常见的两相取向关系, 供参考。

表 9-1 合金中常见的两相取向关系

取向关系类型	互有一定关系的两相	取向关系
Курдюмов-Sachs (1930) (库-萨关系)	bcc/fcc 材料	$(011)_{\text{bcc}} // (111)_{\text{fcc}}$ $[11\bar{1}]_{\text{bcc}} // [101]_{\text{fcc}}$ $[\bar{2}11]_{\text{bcc}} // [\bar{1}2\bar{1}]_{\text{fcc}}$
西山 (1934) Wasserman (1938)	bcc/fcc 材料	$(110)_{\text{bcc}} // (111)_{\text{fcc}}$ $[001]_{\text{bcc}} // [0\bar{1}1]_{\text{fcc}}$ $[\bar{1}10]_{\text{bcc}} // [211]_{\text{fcc}}$
Pitsch (1962)	Fe_3C /铁素体	$[100]_{\text{Fe}_3\text{C}} // [3\bar{1}1]_{\alpha}$ $[010]_{\text{Fe}_3\text{C}} // [1\bar{3}1]_{\alpha}$ $[001]_{\text{Fe}_3\text{C}} // [2\bar{1}5]_{\alpha}$
Евлягуцкий (1950)	Fe_3C /铁素体	$[100]_{\text{Fe}_3\text{C}} // \langle 110 \rangle_{\alpha}$ $[010]_{\text{Fe}_3\text{C}} // \langle 111 \rangle_{\alpha}$ $[001]_{\text{Fe}_3\text{C}} // \langle 112 \rangle_{\alpha}$
Bain (1924)	bcc/fcc 材料	$(100)_{\text{bcc}} // (100)_{\text{fcc}}$ $(011)_{\text{bcc}} // (010)_{\text{fcc}}$ $(011)_{\text{bcc}} // (001)_{\text{fcc}}$

§ 9-4 迹线分析方法

在金属薄膜的电子衍射显微照片上,常常可以观察到多种结构特征,如位错、位错环、孪晶、沉淀相、晶界等在试样上下表面的交线;或者这些特征虽然位于试样中间,它们与上下表面并无实际交线,但将其沿所在平面延伸以后,还是会与上下表面有交线。我们把这种在衍射象中看到的交线,称为这些特征在试样上下表面的“迹线”,“迹”是痕迹的意思。迹线分析就是利用电子衍射谱,分析迹线的取向。进而确定有关特征的空间几何关系。

衍射工作中广泛用到这种分析方法,它对于测定位错布氏矢量、位错反应、位错密度,以及研究第二相的形态和析出行为、确定惯习面等,都是必不可少的。没有这些特征空间几何关系的正确数据,则上述测量分析就不能认为是可靠的。

由于迹线分析要把电子衍射谱与衍衬显微图象联系起来,而这两者之间又存在旋转效应 (§ 3-4),所以迹线分析的第一步,便是对显微图象作转角校正。即利用事先测定好的不同中间镜电流下的转角曲线,标出显微图象的正确取向。

迹线分析又离不开计算晶面、晶向之间的角度,除了必要的晶体学计算外,利用极图进行分析,往往更为简捷方便。因此读者必须具备基本的极图操作知识,熟悉极图的应用原理,并且最好备有一套直径为 10cm 或 12.8cm 的标准常用极图。极图原理和应用,可参阅 G. Thomas 的专著^[59]。

一、线状结构特征的取向分析

线状特征是指直的位错线、针状沉淀相、滑移线、滑移带等。它们沿任意方向通过试样,在显微图象上形成有一定衬度的线,即迹线,这是线状特征在二维平面上的投影像。要求利用它找出实物的空间晶体学取向。

1. 单根位错线

图 9-4(a),试样中有位错线 PP' ,在显微象上看到的是 MP' ;显然, MP' 与 PP' 共平面 (hkl) ,且 $(hkl) \parallel B$ (电子束方向)。 MP' 的长度可从底片上测量。求 MP' 的晶体学方向。

经过转角校正后, MP' 的方向 $[PQR]$ 可求(图 b)。

通过位错线附近的等厚条纹可求出试样厚度 $t (=MP)$, 即:

$$t = n\xi_g \quad (9-40)$$

$$\xi_g = \frac{\sigma \cdot V_g \cos \theta}{\lambda |F_g|} \quad (9-41)$$

式中: ξ_g ——相应操作反射 g 的消光距离;

V_g ——单胞体积;

F_g ——相应于操作反射 g 的结构因子;

θ —— g 的 Bragg 角;

n ——等厚条纹数。

因此 φ 角可求:

$$\varphi = \tan^{-1} \left(\frac{MP'}{t} \right) \quad (9-42)$$

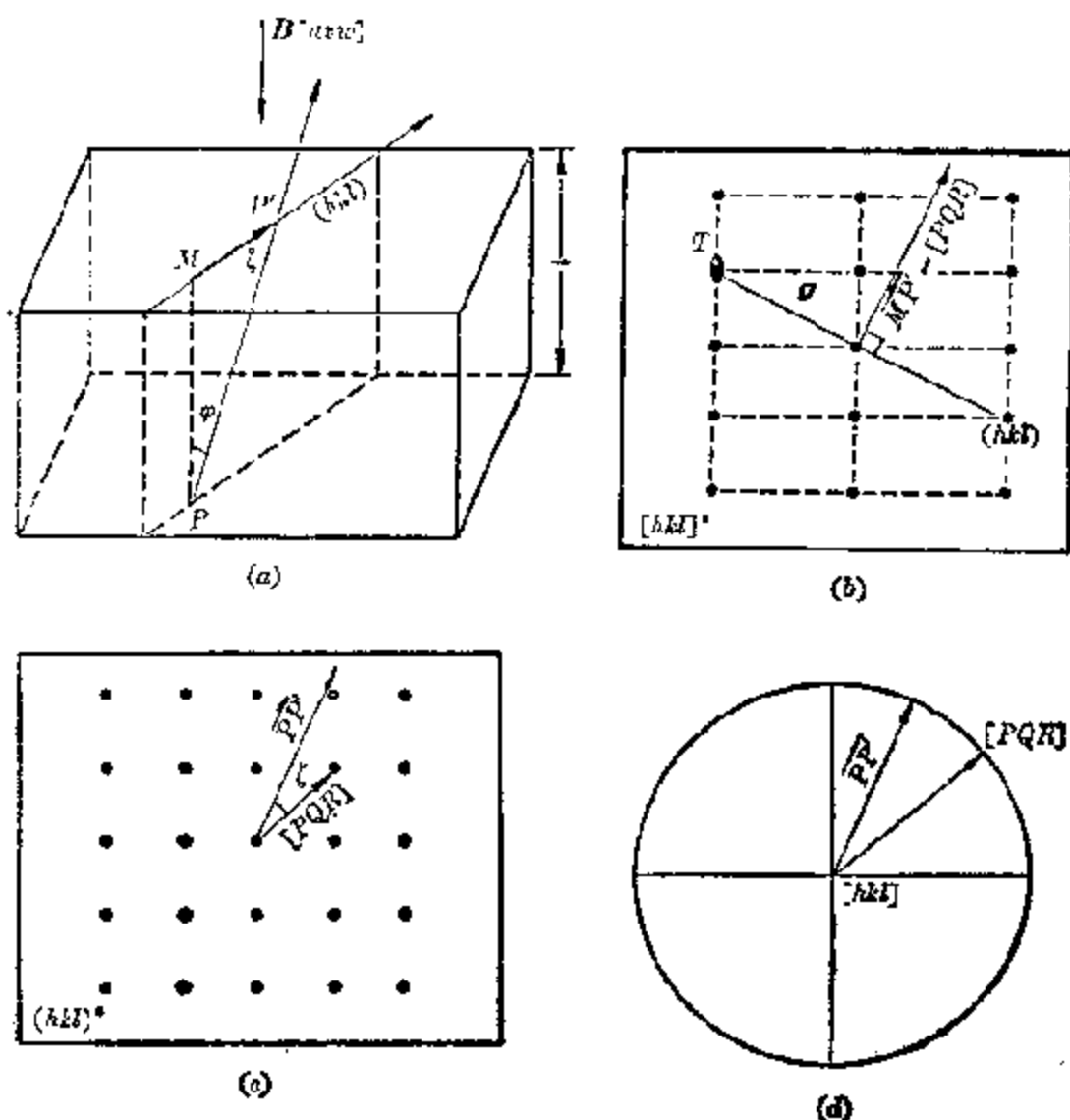


图 9-4 求试样中位错线 TF' 的晶体学方向

- (a) 位错线 PP' 在试样中成任意取向;
- (b) 位错线所征处的电子衍射谱, 经转角校正后, 确定了位错象方向 $[PQR]$;
- (c) 在(b)中确定位错所在平面 (hkl) 后, 另作 $(hkl)^*$ 倒易面;
- (d) $[hkl]$ 极图

$$\zeta = 90^\circ - \varphi \quad (9-48)$$

位错所在平面的指数 (hkl) , 应是经转角校正, 确定了方向 $[PQR]$ 后, 垂直于 $[PQR]$ 的倒易矢量的指数, 如图(b)。

位错在试样中的实际方向 $\overline{PP'}$ 可以这样决定: 作 $(hkl)^*$ 倒易面, 在其上必存在 $[PQR]$ 方向; 从 $[PQR]$ 左旋 ζ° , 即可求得 PP' 的实际方向, 如图(c)。

也可利用极图求 PP' ：作 $(hkl)^*$ 极图，如前面各步骤无误，则极点 $(PQ\mathcal{E})$ 一定在圆周上；以此为起点，左旋 ζ° ，即得 PP' 的方向指数，如图 (d)。

2. 位错列

如果分析的是某滑移面上的一组平行位错列，如图 9-5。 PP' 、 SS' 、 TT' 、... 等是位错列，可利用对已知材料滑移系统的知识帮助分析（如面心立方材料，滑移系统为 $\{111\} \langle 110 \rangle$ ，则可肯定 $ABCD$ 面的指数必定是 $\{111\}$ 之一。这时，求 $\overrightarrow{PP'}$ 方向，可简化成求 (hkl) 与 $\{111\}$ 的交线问题。因 (hkl) 与 $\{111\}$ 之一共晶带，晶带轴即 $\overrightarrow{PP'}$ 。因而，共有四组可能解，即：

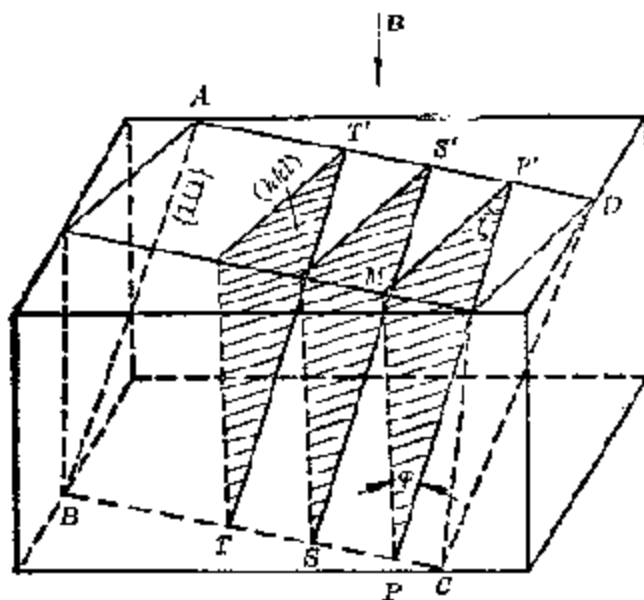


图 9-5 $\{111\}$ 面上位错列在试样上表面的迹线

- (hkl) 、 $(\bar{1}\bar{1}1)$
- (hkl) 、 $(1\bar{1}\bar{1})$
- (hkl) 、 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$
- (hkl) 、 $(11\bar{1})$

显然，其中只有所求 $\overrightarrow{PP'}$ 与 $\overrightarrow{MP'}$ 成 ζ° 的一个解，是位错线的正确方向。 ζ 角的求法参见上面 1. 所述。

二、平面结构特征的取向分析

平面特征是指位错环、滑移面、晶界面、层错面、孪晶界面、片状第二相、惯习面等。它包括两种情况：一是平面特征在试样内与膜表面无实际交线，如图 9-6(a) 中的位错环，位错环所在平面相对于电子束有一倾斜，位错环的像是椭圆；二是平面特征与试样表面有实际交线，如图 9-7(a) 中的滑移面，它在试样上、下表面留下

两条平行迹线。

1. 平面特征与试样上下表面无实际交线的情况

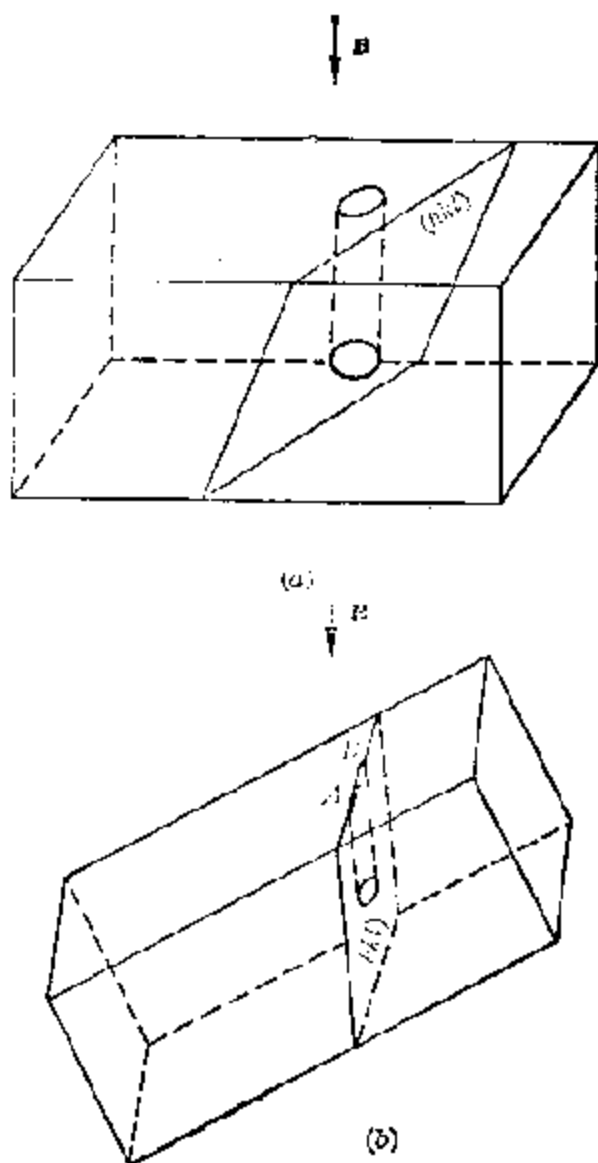


图 9-6 平面特征(位错环)的迹线
(a) 位错环所在平面相对于 B 成倾斜;
(b) 位错环所在平面平行于 B

图 9-6(a) 为试样原始位置, 位错环所在平面 (hkl) 相对于电子束方向倾斜一个角度, 位错环投影到试样表面为一椭圆。这时 (hkl) 斑点不在衍射谱中出现。倾斜试样, 直到显微像上的椭圆变成一直线 AB , 如图(b)。这时 (hkl) 面与电子束方向平行, (hkl) 斑点将出现在衍射谱上。

在校正转角后, 将显微图像重迭在衍射谱上, 很容易在垂直于 AB 的方向上找到 (hkl) 指数, 但应注意此时从衍射谱计算得到的晶带轴方向并非真实的试样膜面法向指数。

测得 (hkl) 面指数后, 就可以进一步分析位错环的性质及其它有关问题。

上述方法亦可用于分析片状沉淀相的惯习面。

2. 平面特征在试样表面有迹线的情况

如图 9-7(a), 试样中有平面特征(例如滑移面) $ABFE$, 其显微图像如图(b), AB 、 OD 是滑移面在试样上、下表面的迹线。 Q 是图象上看到的某一特征线状标记, 经衍射分析和转角校正后, 知

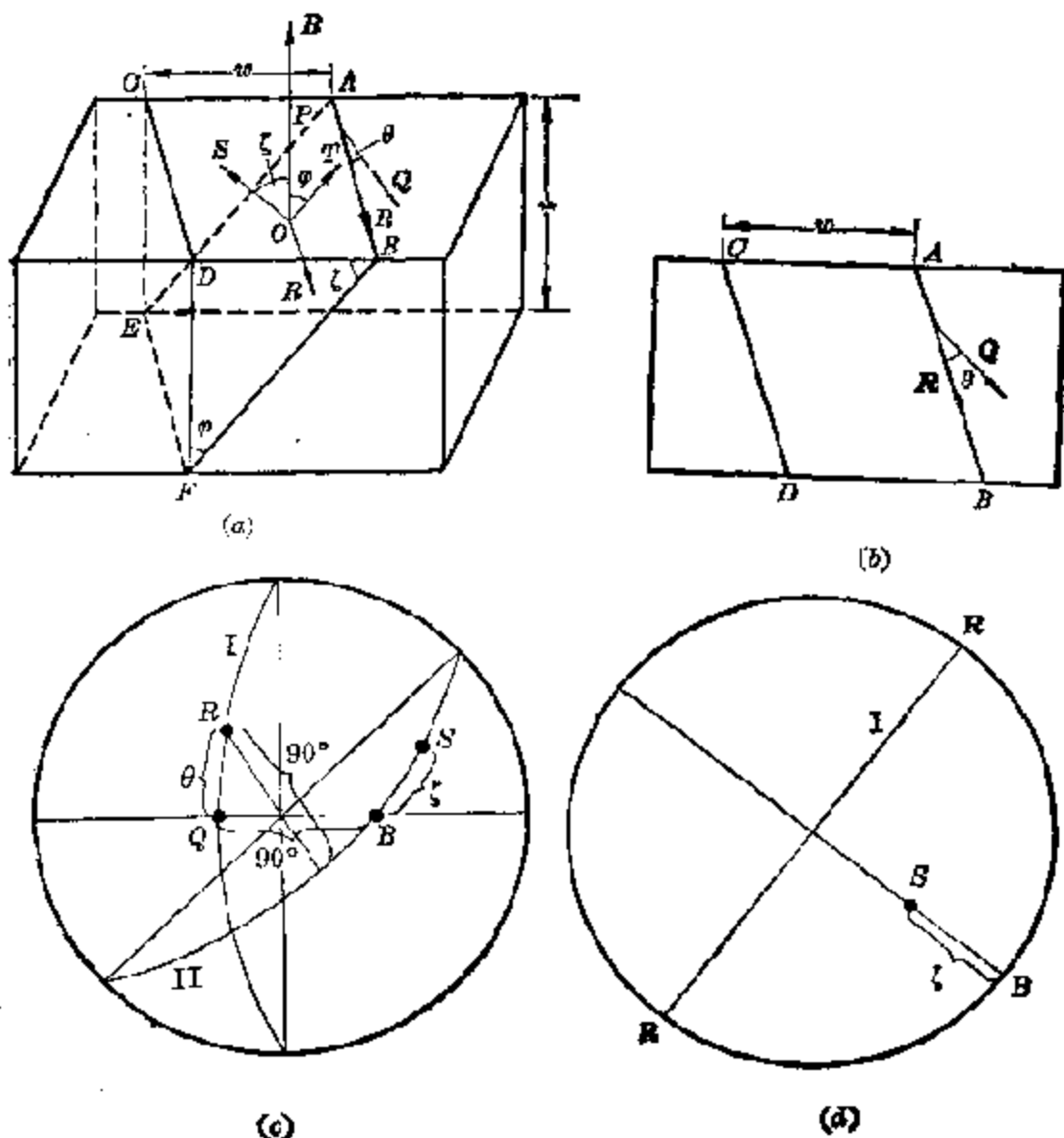


图9-7 平面特征的迹线分析

- (a) 滑移面 $ABFE$ 与电子束倾斜一个角度;
- (b) 衍衬显微图像, 除滑移面迹线 AB 、 CD 外, 另有与 AB 成 θ 角的线状特征 Q ;
- (c) 利用包含 B 、 Q 两极点 ($B \perp Q$) 的极图, 求 $ABFE$ 的指数;
- (d) 利用 B 、 R 和 ζ 三参数由极图求 $ABFE$ 平面指数

Q : $[RST]$ 与滑移面迹线 AB 成 θ 角。 AB 的方向指数 R 同样可以求得。

在滑移面上一点 O , 如图(a), 引平行于电子束方向的向量 OP , 垂直于滑移面的向量 OS , 以及垂直于 AB 的向量 OT 。令 $\angle POS = \zeta$, $\angle POT = \varphi$ 。显然 $\angle DBF = \zeta$, $\angle DFB = \varphi$ 。 φ , ζ 值

可按前述方法求出。

选取一包含 $B[uvw]$ (由衍射谱求得) 和 $Q[RST]$ 的适当极图。因为 Q 、 R (迹线 AB 的方向) 均与 B 成 90° , 所以 Q 、 R 均应位于与 B 成 90° 的大圆上。在距 B 90° 处作大圆 I, 先确定 Q 点 (从衍射谱上找到其指数为 $[RST]$), 以 B 为中心、沿大圆顺时针旋转 θ° , 即为 R 点。以 R 为中心, 再作与它相应的大圆 II。因 OP 、 OS 均与 R 成 90° , 故与滑移面相应的极点和 B 均在此大圆上。以 B 为中心, 从 B 出发, 逆时针旋转 ζ 角, 即得 S 极点, 如图 (c) 所示。其指数即滑移面 $ABFE$ 的指数。

上述极图操作, 也可按如下步骤进行:

(1) 计算倾斜台处于零倾斜 (0°) 时获得的衍射谱, 求 $B[uvw]$ 。校正转角后, 从衍射谱上求出平面特征与膜面的交线方向 R , 按前述方法求出 φ 和 ζ 。 ζ 即平面法线与 B 之夹角。

(2) 由图 9-7(a) 可知: 平面特征 $ABFE$ 的法线 S 与 R 成 90° , 与 B 成 ζ 角。可见找一适当极图如图 9-7(d), 使 B 落在圆周上, R 一定落在与 B 成 90° 的大圆 I 上, 鉴于 S 与 B 成 ζ 角, 与 R 成 90° , 故很容易如图求得 $ABFE$ 的指数 S 。这个方法, 无须在显微象上另找一直线特征 Q , 更比上法简捷。

〔例 3〕图 9-8(a) 是镍基高温合金经疲劳试验后, 在断口附近的形变结构。其左侧可以看到明显的交叉滑移带, 裂纹表现出明显的晶体学方向特征, 可以看出它是沿交叉的平面滑移形成和扩展的。用迹线分析方法, 讨论裂纹形成和扩展的晶体学特征^[51]。

衍射分析: 合金基体为面心立方的奥氏体组织, 经简单计算, 与附录六(1)中有关标准图谱比较, 知晶带轴指数为 $[1\bar{3}0]$, (001) 型超结构斑点, 是合金中弥散第二相 γ' 的贡献。

作 $[1\bar{3}0]$ 极图, 如图 (b) 所示。转角校正后, 将衍射谱重迭于显微图像上, 如图 (a); 其上之交叉滑移带方向, 在极图上相当于 AB 和 CD , 它们分别相应于 $\text{II}\bar{1}$ 、 $11\bar{1}$ 极点大圆在基圆上的交线, 可见交叉滑移线是滑移面 $(\text{II}\bar{1})$ 、 $(11\bar{1})$ 在试样表面的交线。

裂纹严格沿 AB 、 CD 方向扩展, 可以认为疲劳裂纹表面是

{111}型晶面。该工作中,看到断口上的疲劳条纹或裂纹前沿的方向,也总是 $\langle 110 \rangle$ 型方向,这与上述推论是一致的,参见图(c)的示意图。

〔例4〕 WC-12% Co 硬质合金粘结相(富钴的固溶体)中滑移系统的迹线分析^[52]。

图9-9(a)~(c)是一组从 WC-12Co 硬质合金粘结相 β -Co 中拍得的衍衬照片; (d) 是与 Co 相同区域的衍射谱; (e) 是对图(d)的标定。从图(a)可以看出, Co 晶粒受到形变后, 面心立方的四个滑移系统均被开动。经衍射分析, 在转角校正以后, (a) 图中的滑移迹线方向, 正好对应于四个 {111} 面与膜面 (011) 的交线, 即 $[01\bar{1}]$ 、 $[\bar{2}1\bar{1}]$ 、 $[\bar{2}\bar{1}1]$ 和 $[0\bar{1}1]$ 。迹线间夹角与理论值符合良好。更为有趣的是从图(d), 看到沿 $\langle 111 \rangle$ 在膜面上的投影方向, 出现了明锐的衍射条纹, 它们与滑移迹线方向严格垂直。垂直于 $[\bar{2}\bar{1}1]$ 和 $[\bar{2}1\bar{1}]$ 方向的条纹, 几乎贯穿所有斑点, 而垂直于 $[01\bar{1}]$ 方向的条纹却较短。这是不难理解的, 因为前者对应的 $(1\bar{1}1)$ 和 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面, 正好平行于电子束方向 $[011]$, 而后者对应的 $(\bar{1}11)$ 和 (111) 面与 (011) 分别有 35.26° 和 48.18° 的夹角。由于面心立方晶体中的层错面也是 {111}, 因此推测倒易点的拉长, 应是这些层错小片的反映。实际上, 将试样从图9-9(a) 位置倾斜一个小角度, 立即看到了层错的条纹衬度, 如图(b)和(c)。以上是迹线分析应用于晶体形变过程研究的一个较为成功的例子。

在平面结构特征中, 还经常遇到晶界真实取向和晶界夹角的测量问题。如图9-10, 若观察到三叉晶界 AO、BO 和 CO, 衍衬照片上观察到它们的投影宽度分别为 w_A 、 w_B 和 w_C , 这些界面均由厚度条纹组成, 它们与膜面的夹角分别为:

$$\left. \begin{aligned} \theta_A &= \tan^{-1} \frac{t}{w_A} \\ \theta_B &= \tan^{-1} \frac{t}{w_B} \\ \theta_C &= \tan^{-1} \frac{t}{w_C} \end{aligned} \right\} \quad (9-44)$$

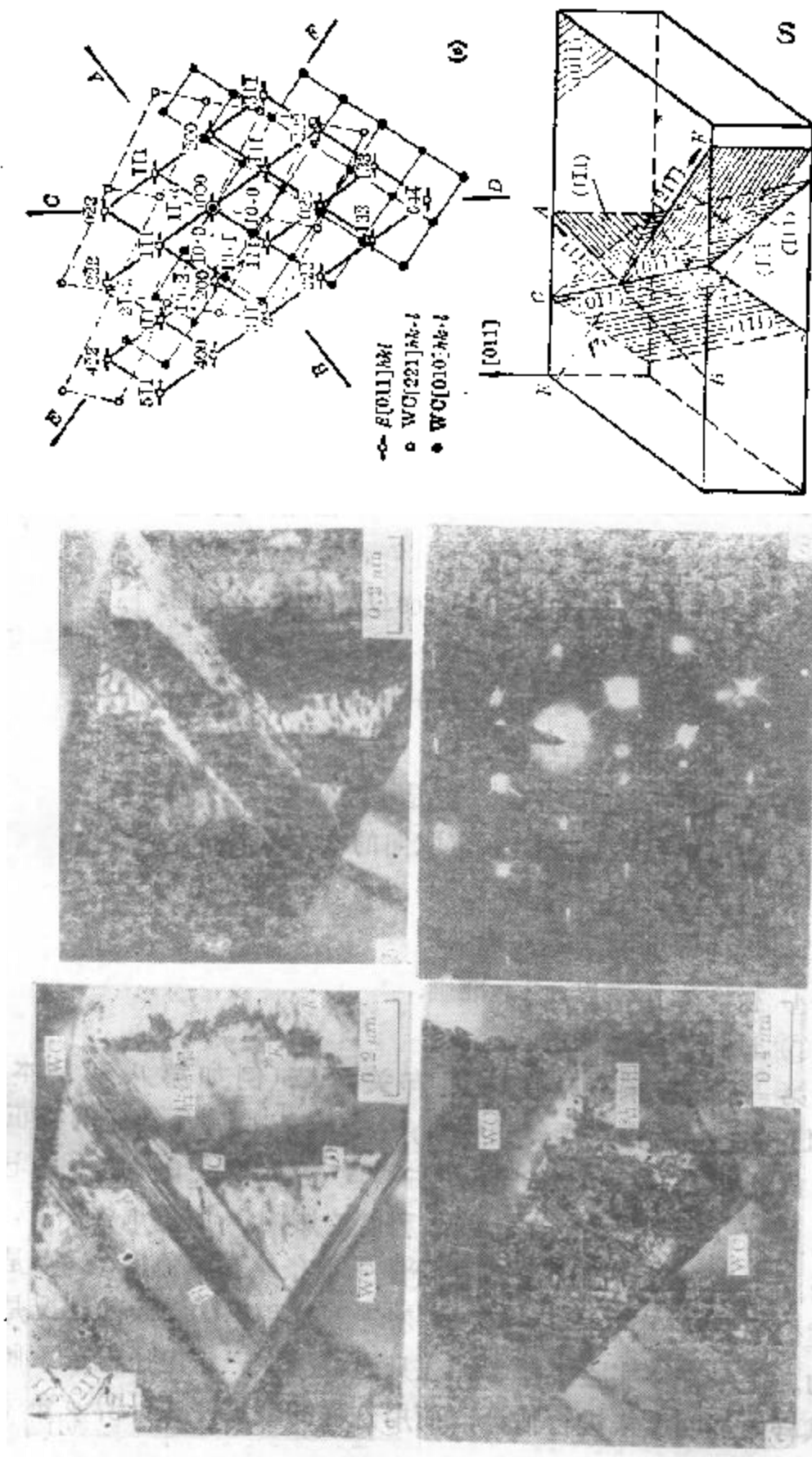


图 9-9 WC-Co 合金中粘滞相 Co 中滑移结构的迹线分析

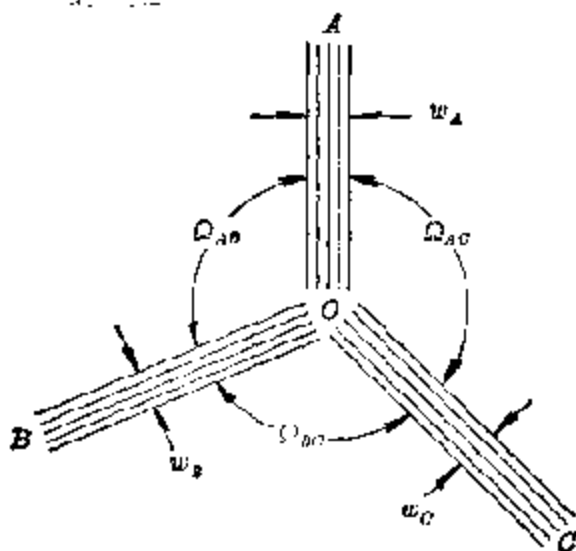


图 9-10 三叉晶界在衍射照片上的投影

t 为试样厚度, $t = n\xi_g$, n 为条纹数。

设三条晶界每两条的夹角分别为 Ω_{AB} 、 Ω_{BC} 和 Ω_{AC} , 这是在照片上测得的。现在要求它们在空间的真实二面角。利用前面所述迹线方法确定各界面指数后, 当然也可根据晶面夹角公式计算出真实二面角, 但也可用下述公

式, 直接进行计算, 求得真实二面角 w_{AB} 、 w_{BC} 、 w_{AC} ^[58]:

$$\left. \begin{aligned} \cos w_{AB} &= \cos \theta_C \cos \theta_B + \cos \Omega_{AB} \sin \theta_C \sin \theta_B \\ \cos w_{BC} &= -\cos \theta_A \cos \theta_C + \cos \Omega_{BC} \sin \theta_A \sin \theta_C \\ \cos w_{AC} &= -\cos \theta_B \cos \theta_A + \cos \Omega_{AC} \sin \theta_B \sin \theta_A \end{aligned} \right\} \quad (9-45)$$

三、迹线分析的精确度

迹线分析中产生误差的来源是多方面的, 主要有:

- ① 利用单晶斑点花样测定取向的不准确性;
- ② 转角校正不准确;
- ③ 试样厚度测量不准确;
- ④ 极图操作错误, 或不准确;
- ⑤ 试样倾斜带来的误差。

第一个误差来源已在前面有关章节(例如第八章及本章 §9.1)讨论过。第二项转角校正, 决定于实验室所测定的校正曲线的可靠性, 一般要求每半年左右测量一次, 它受电源条件, 电镜透镜参数以及测量者的工作细致程度的影响。测量试样厚度, 至今仍无十分可靠的办法。利用等厚干涉条纹测量厚度, 远不是一个理想的方法; 因为在分析区域, 看不到这种干涉条纹的情况是常有的。至今许多实验工作者往往只能根据在一定电压电子束照射下试样的透明度来进行估计, 而用这样的数据, 去计算 φ 角和 ζ

角,其误差是很可观的。看来应摸索一个途径,不利用厚度进行迹线分析,也许是有益的。第四项极图操作,只要分析工作者熟悉原理,精心操作,这种误差是可以减少,甚至避免的。

下面着重讨论在试样倾斜过程中带来的误差。

迹线分析中最严重的误差来源,是利用倾斜台倾斜试样时,倾角测量不准,进而影响到所有分析计算过程。故作迹线分析时,事先应对倾斜台认真校正,事后也应对误差作出恰当估计和修正。

倾斜对线状特征影响不大,只影响投影长度;而对平面特征影响极大,不可忽视,下面就此进行讨论。

参见图 9-11, $HIKJ$ 为试样上表面,设试验开始时,电子束垂直于 $HIKJ$, 图中:

PQ ——未倾斜前的平面特征在试样表面留下的迹线;

ϕ ——倾斜旋转角;

β ——倾斜轴 AB 与平面特征迹线 PQ 之夹角;

θ ——平面特征与试样下表面之夹角。

以 AB 为轴逆时针方向旋转 ϕ 角 (H 向下, K 向上),使试样中的 ABC 面垂直于电子束。根据 Pashly 和 Presland 未发表工作(转引自文献 [21], p315),由于倾斜旋转 ϕ 角引起的平面特征 ($PQST$) 的象的旋转角 ε , 可表达为下式:

$$\varepsilon = \cot \beta + \tan \theta \csc \beta \cot \phi \quad (9-46)$$

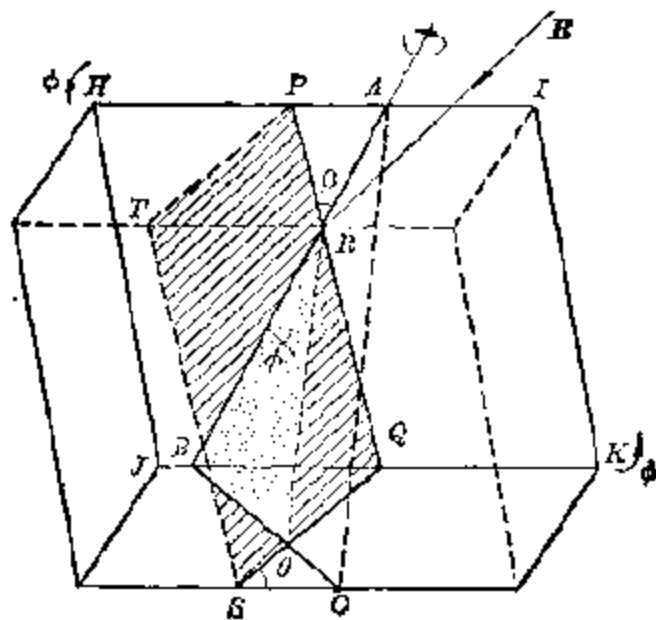


图 9-11 试样倾斜旋转时,对平面特征的影响

他们据此计算了 $\beta = 90^\circ$ 和 45° 时的 ε 值随倾斜旋转角 ϕ 变化的曲线,如图 9-12 所示。

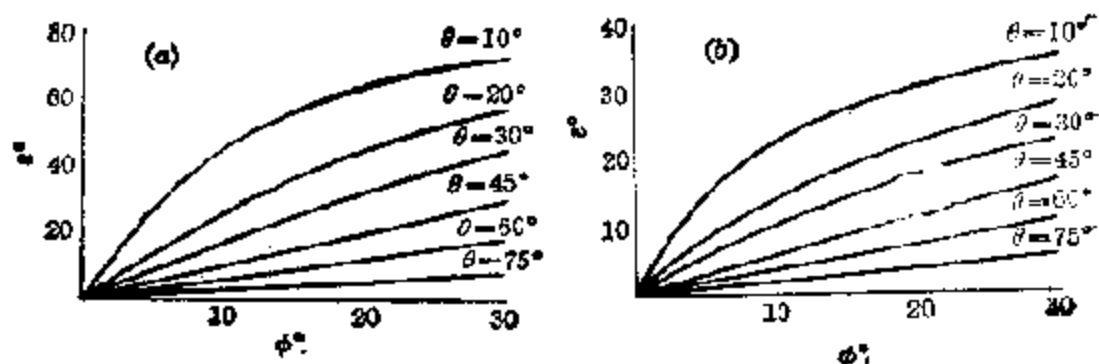


图 9-12 试样倾斜旋转引起象的旋转角 s (用度表示) 的变化曲线
(a) $\beta=90^\circ$; (b) $\beta=45^\circ$

可以得出如下几点:

(1) 试样倾斜时, 衍射花样的带轴方向, 不再是试样表面法线方向; 相应地, 试样中平面特征 (如图 9-11 中的 $PQST$ 平面) 的像, 也不再是在试样表面上的投影像, 而相对于未倾斜时计算出来的迹线方向旋转了 s° 。

(2) 最大的旋转角 s 产生于 $\beta=90^\circ$ 和 θ 较小时, 即倾斜轴与迹线正交, 以及平面特征在试样中比较平躺时。可见还必须注意选择倾斜轴方向, 不能任意选择, 而以选择与迹线方向较接近的方向作倾斜轴为宜。

(3) 在一定 β 下, 象旋转角 s 随 θ 的减小和 ϕ 的增大而增加。但只要能获得必需的取向资料, 倾斜旋转角 ϕ 应越小越好。

第 十 章

衍衬原理概述

§ 10-1 引 言

从本章起,将讨论衍衬分析中的若干问题,即在电镜下观察金属薄膜时获得的电子金相照片的分析问题。这种照片上的衬度,是由于试样不同部位对电子束的衍射作用不同而形成的,故通称为衍衬。本章主要介绍衍衬成象的一般原理及其基本概念,亦可称之为衍射衬度原理。内容包括:电子显微镜下的衬度类型;衍射衬度原理。

从理论系统讲,本章的叙述远不是详尽和严格的,读者如希望获得更深入的了解,则除前面介绍的文献[21]外,还可参阅赵伯麟的近著^[54]以及作者即将出版的另一新著^[18-1]。

§ 10-2 电子显微象的衬度类型

一般认为,根据电子与试样物质相互作用的机理,可以把电子显微象的衬度分为三类:复型样品的质量厚度衬度、金属薄膜样品的衍射衬度(简称衍衬)和相位衬度(如晶格象,原子象)。在揭示 $\geq 15 \text{ \AA}$ 的结构细节时,衍射衬度机制起主要作用;揭示 $< 10 \text{ \AA}$ 的结构细节时,相位衬度机制起主要作用^[42]。

一、质量厚度衬度

当电子束通过由无定形非晶物质组成的复型样品时,将发生两个主要过程,即散射和吸收。由于试样很薄,吸收作用可忽略不计。可以认为,复型衬度是由试样不同部位因物质种类或厚度不同从而散射作用也不同所造成的。有时亦称这种衬度为质量-密度

衬度。参见图 10-1, (a) 是复型衬度形成的示意图; (b) 是某合金钢断口二级碳萃取复型电子显微照片。试样某些部位愈厚, 或存在大原子序数物质(此处密度也比较高), 电子束与之相互作用后, 被散射掉的能量愈多, 散射角也愈大, 能够通过光栏参加成像的电子能量愈少, 故在显微象上亮度愈低。在图(a)上, 试样在 AB 处

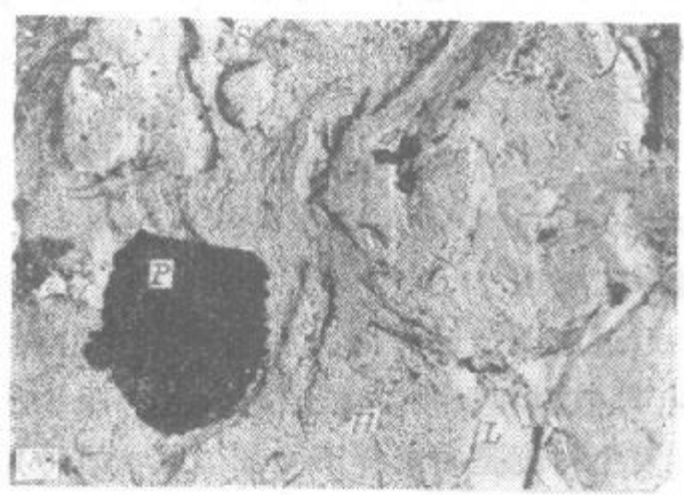
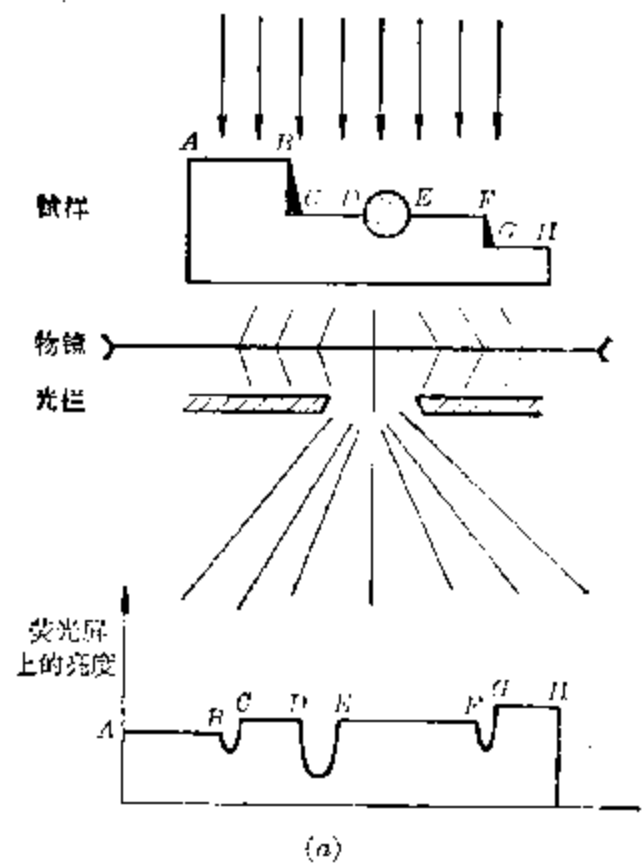


图 10-1 复型衬度原理

较厚, DE 处为萃取第二相粒子, BO 和 PG 是投影喷射的重金属物质(例如铬), 相应地, 在(a)下图中, 这些部位的亮度低, 表现为较深的衬度。在图(b)中, P 为萃取相, S 为投影物质, 均呈暗衬度。在图(a)中, GH 、 OF 、 AB 处的厚度依次递增,^⑤ 在亮度分布图上, 亮度则依次变暗。在图(b)中, 因试样的 L 处较 H 处薄, 故前者较后者为亮。粗略地说: 加速电压愈高, 试样愈薄, 组成试样的物质原子序数愈低, 透过的电子就愈多, 则象衬也愈亮。

下面讨论由理想完全无序原子组成的试样明场像强度, 以期对非晶试样的衬度, 有一个较为定量的理解^[55]。

设入射电子束被试样中 z 处某一点的物质所散射(图 10-2), 散射立体角为 Ω , 随着散射角的增大, 散射强度变弱, 立体角与散射角 θ_s 之间有如下关系:

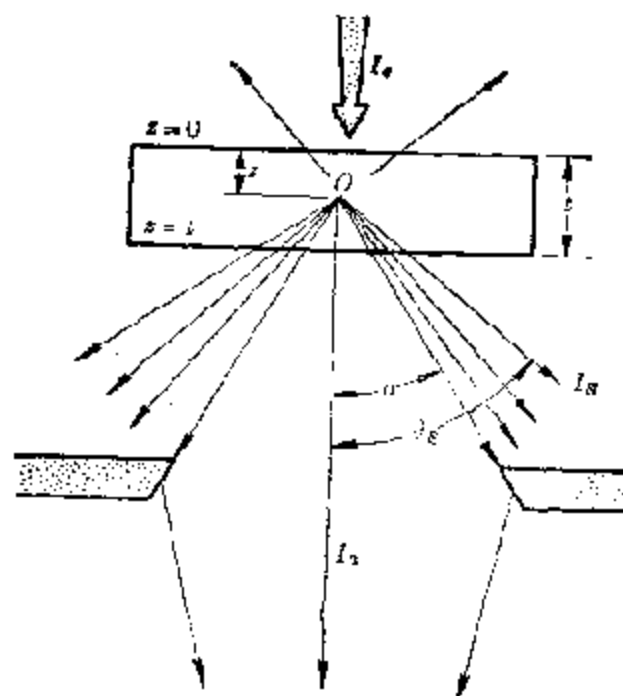


图 10-2 电子在原子无序试样中的散射

$$\Omega = 2\pi(1 - \cos \theta_s) \quad (10-1)$$

第二章 § 2-4 中, 曾引入散射截面半径描述物质原子散射电子能力的大小。此处我们引入原子的弹性散射截面 σ_a , 并定义为:

$$\sigma_a = \int D(S) d\Omega \quad (10-2)$$

$D(S)$ 称为微分截面。在物镜光栏外的散射截面则是:

$$\sigma_a = 2\pi \int_{\alpha}^{\infty} |f_{el}|^2 \sin \theta_s d\theta_s \quad (10-3)$$

式中 f_{el} 是原子对电子的散射振幅; 积分下限为物镜光栏孔径角。

显然,当 $\theta_s > \alpha$ 时,这些散射都对衬度有影响。若试样是由几种原子组成的固体,各组分的浓度百分比为 C_i , 则总散射截面为:

$$Q = N_A \sum_i \frac{\rho_i C_i \sigma_i}{A_i} \quad (10-4)$$

式中 A_i 、 ρ_i 为各组分的原子量(或分子量)和密度, N_A 为阿弗加德罗常数,于是可将所讨论的 O 点附近提供的强度份额表示为:

$$dI/I = -Q dz \quad (10-5)$$

当 $z=0$ 时,即入射上表面处, $I=I_0$; 试样下表面,即 $z=t$ 处,有 $I=I$ 。积分上式,可得电子束经试样作用后,离开下表面时所能获得的总强度:

$$I = I_0 e^{-Qt} \quad (10-6)$$

设透射强度为 I_T , 散射强度为 I_S , 则有

$$I = I_T + I_S \quad (10-7)$$

$$I_S = I - I_T = I_0 (e^{-Qt} - e^{-Q't}) \quad (10-8)$$

(10-8)式表示暗场象的强度。由(10-6)和(10-8)式可知,在非衍射成象情况下,明、暗场象衬度是定性互补的。在极端情况下,试样为零厚度,例如孔洞处,其明场象强度为 $I=I_0$, 而相应的暗场象强度为 $I=0$ 。

注意总散射截面 Q 有长度倒数的量纲,故可定义散射平均自由程:

$$\Lambda = 1/Q \quad (10-9)$$

由(10-6)式,可见当试样厚度 $t = \Lambda$ 时,则离开下表面的总强度正好是原始入射强度的 $1/e$ 倍,即:

$$I = (1/e) I_0 \quad (10-10)$$

也就是说,试样厚度 $t = \Lambda$ 时,入射电子强度将衰减到只有原来的 $1/e$, 即 $0.37 I_0$ 。

B. von Borries^[56] 定义了一个临界质量-厚度(Critical mass-thickness), 规定为(10-6)式中 $Qt=1$ 时的厚度 Λ 乘以密度 ρ 。这就不仅考虑了试样的几何厚度,而且考虑了试样的质量,综合考虑了试样的实际散射能力。由

$$t_c = \frac{1}{Q} = A = \frac{A_i}{N_A \sigma_i S_i \sigma_i} \quad (10-11)$$

得到临界质量 厚度的定义式:

$$(\rho t)_c = \rho_i A = \frac{A_i}{N_A \sigma_i \sigma_i} \quad (10-12)$$

表 10-1 列出了一些材料在 65 kV 加速电压下的临界质量 厚度^[57]。

表 10-1 若干材料在 65 kV 下的临界质量·厚度

材 料	原子序数	密度 ρ (g/cm ³)	$\lambda = t_c$ (Å)	$(\rho t)_c$ (g/cm ²)
Be	4	1.78	1900	3.3×10^{-3}
C	6	2.00	1390	2.8×10^{-3}
Al ₂ O ₃	—	3.70	1000	2.2×10^{-3}
Si	14	2.33	1250	2.7×10^{-3}
Cr	24	7.10	165	1.1×10^{-3}
Ge	32	5.36	270	1.4×10^{-3}
Pd	46	12.00	185	2.2×10^{-3}
Pt	78	21.45	155	3.3×10^{-3}
U	92	18.50	164	3.0×10^{-3}

二、衍射衬度

复型电子显微象反映的是试样的表面形貌。萃取复型除反映表面形貌外,还包含了剥离下来的第二相粒子,因而可以利用电子衍射研究第二相的晶体结构。而金属薄膜的电子衍衬象,既能反映试样内部的组织结构,同时也反映表面形貌;通过电子衍射就可以把表面形貌与结构的研究结合起来。

电子衍衬象的衬度是由试样各处满足布拉格条件程度的差异造成的。在其成象过程中,起决定作用的是晶体对电子的衍射,故称衍衬。影响衍射强度的主要因素是晶体取向和结构振幅。如衍衬象中两个晶粒一明一暗,说明前者不处于布拉格位置,而后者处于布拉格位置。晶体中的位错或其它缺陷所以能显示衬度,就是

由于缺陷存在,致使局部晶格发生畸变,改变了这些部位的衍射条件(例如,由原来不满足布拉格条件变为满足布拉格条件,或者相反)。即正常的周期性遭到了破坏,导致局部衍射条件改变,使其与周围有不同的成像电子强度,而被显示出来。又如基体中微区域元素富集,使正常晶面间距发生变化,也会改变局部区域的衍射条件,提供衬度。两种不同物质,组成不同,对电子散射本领不同,结构振幅不同,同样会引起衬度差异,例如合金中的沉淀相与基体显示不同衬度,就属于这种情况。在电子衍射中,由于波长短,衍射角很小(一般约 10^{-4} 弧度),即使像位错、层错、空位这样细小的缺陷,虽然衍射面相对于入射电子束方向只有微小改变,但所引起衍射条件的改变却是可观的。也就是说,电子衍射对晶体不完整性是十分敏感的。所有这些,使透射电子显微术成为研究晶体缺陷的一种非常有力的方法。

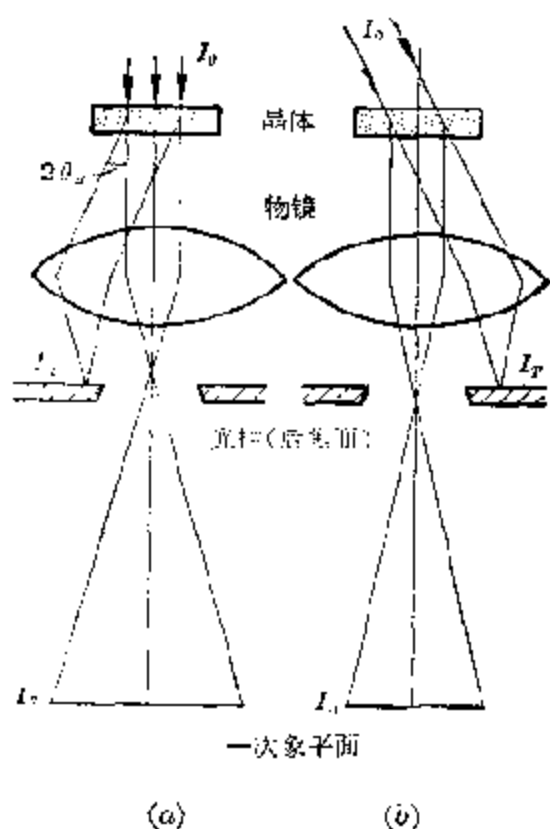


图 10-3 衍射成像光路示意图

(a) 明场象; (b) 暗场象

衍射, 衍射线与透射线夹角为 $2\theta_D$ 。透射线和衍射线经物镜的作

一种非常有力的方法。

由于衍射与衍射条件即晶体取向有关, 因此衍射象所显示的结构细节也是对取向敏感的。在某一取向没有观察到的细节, 在另一取向, 有可能被观察到。可见, 进行衍射研究, 要求电镜备有性能良好的试样倾动台, 同时也要求电镜工作者有娴熟的晶体学知识。

衍射成像的光路示意图如图 10-3。当电子束入射到晶体试样上时, 若某一晶面 (hkl) 的取向满足布拉格条件 [(2-47) 式或 (5-1)、(5-2) 式], 就会产生 (hkl)

用, 在后焦面聚焦, 形成衍射花样。利用在焦平面处放置的物镜光栏(其直径为 $20 \sim 40 \mu$ 不等) 挡住所有衍射线, 仅让透射线通过光栏在象平面上成象, 即为明场象, 如图 10-3(a); 若用束偏转装置使透射线偏至光栏孔以外, 而使某衍射束通过光栏在象平面成象, 则为暗场象, 如图 10-3(b)。这些象再经过中间镜和投影镜放大, 投射到荧光屏上, 得到最终象。

设入射电子束能量为 I_0 , 如果是接近理想双束条件, 除透射束外, 只有一束强衍射束, 又设此衍射束强度为 I_d , 透射束强度为 I_T , 则近似有:

$$I_d + I_T = I_0$$

由此可见, 明、暗场象强度近似互补, 明场下为亮的衬度, 暗场象衬度则是暗的。

上述暗场象, 称为“中心暗场象”(CDFI)。由于使衍射束沿透镜光轴近轴成象, 因之它与早期的移动光栏围住衍射束成暗场象的方法相比, 象的质量要高得多。

还应强调指出, 双束条件成中心暗场象时, 应将 $-g$ 移至中心, 而不是将强衍射斑点移至中心, 否则, 就成为弱束暗场象(详见第十三章)。

正确理解明、暗场象的衬度是十分重要的。近几年来, 在某些作者报导的工作中, 有些解释显然是错误的。他们简单地理解为明场象上一切部位的衬度, 在暗场象上都应该反转过来。这样理解, 在作相鉴定时, 难免会得出错误的结论。一般说: 明场下, 满足布拉格条件的区域呈暗象; 偏离布拉格条件的区域呈亮象。暗场下, 如果用 $-g$ 成暗场象, 原则上讲, 原来明场象上的衬度将一一反转过来; 但如采用任意弱的反射(指移至中心后, 偏离布拉格位置甚远)成暗场象, 则一切部位的衬度就不一定都反过来。例如图 10-4, 为锂铁氧体的电子衍射照片^[58]。在图(a)左上角为同区域衍射谱。衍射谱包含了图中第二相质点 A 和 B, 可见衍射斑点有基体的, 也有第二相的。但何者属基体, 何者属第二相, 必须用暗场象鉴定。先用斑点 1 作暗场象如图(b), 看到第二相 A、B 变暗,

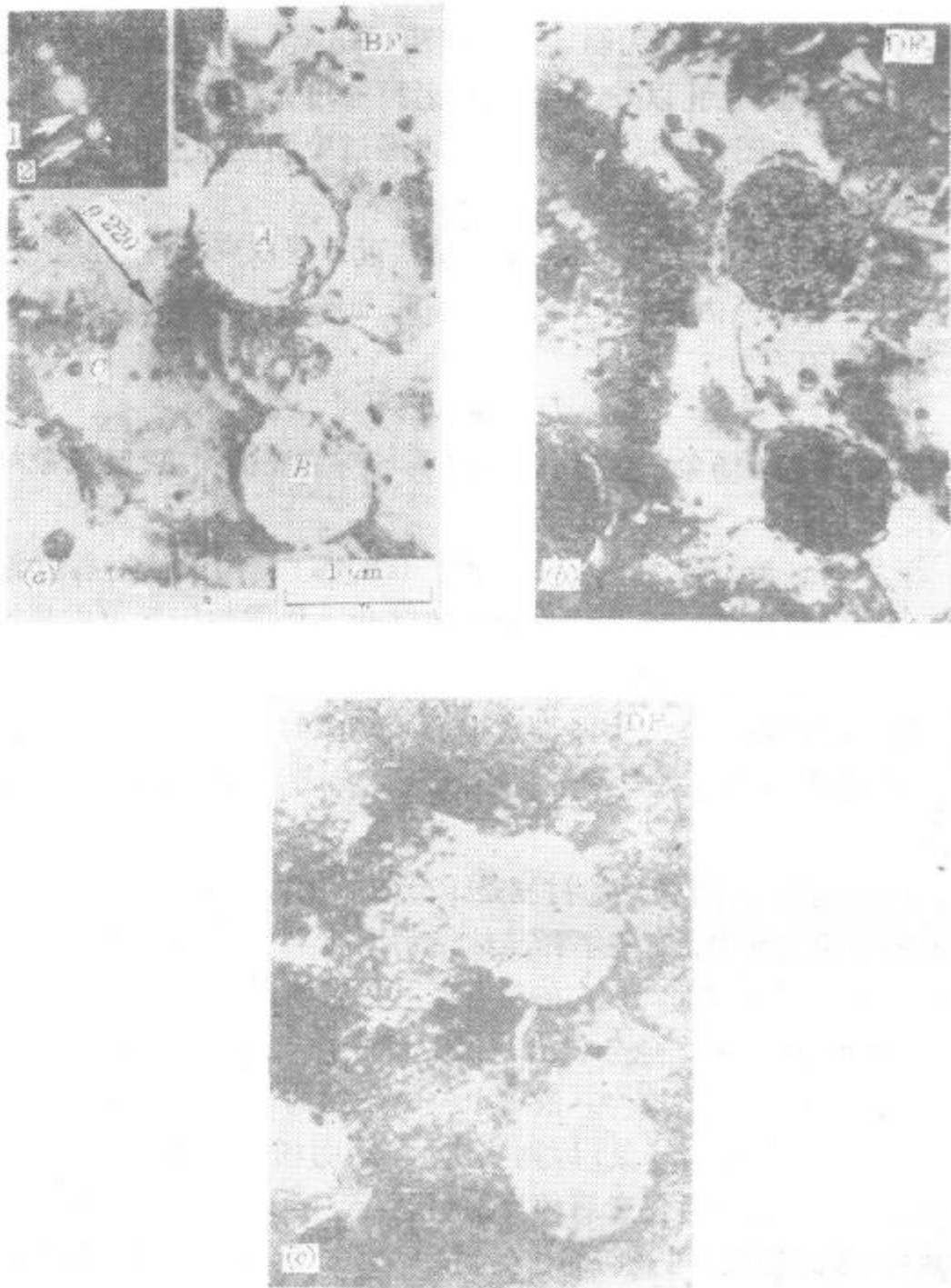


图 10-4 磁铁矿的电子衍射图象

(a) 明场象；(b) 衍射斑点 1 的暗场象；(c) 斑点 2 的暗场象

基体 O 处则出现黑色消光带, 这表明点 1 对 A 、 B 无贡献, 仅属于基体, 是基体斑点。用斑点 2 成暗场象如图 (c), 图中 A 、 B 与图 (a) 相同, 仍为亮的衬度, O 处衬度消失, 基体各处出现许多白点, 可以推断斑点 2 包含了 A 、 B 与基体的衍射贡献, 此斑点为基体与第二相的重迭衍射。如果看到图 (c) 基体变暗, 而 A 、 B 与图 (a) 衬度相同, 就确定斑点 2 为基体斑点, 则是错误的。读者不妨设想, 如果斑点 1 是第二相 A 、 B 的, 这时照片 (b) 上的衬度将如何? 分析时, 尤应注意暗场象的衬度变化和原始明场象的衬度。假如明场象 (a) 中的 A 、 B 是暗的衬度, 则用斑点 1 和 2 分别成暗场象时, 在相应的暗场照片上, 将又是另一种表现。

试再举一例, 图 10-5 为某双相不锈钢的衍衬照片^[59]。图 (b) 为明场象, 基体上有近似方形的片状第二相析出物 P 和弯曲消光轮廓 T 。电解减薄过程中, 析出物由内向外呈楔形减薄 (即中间薄, 四周厚), 出现等厚干涉条纹。在图 (b) 左上角为视场光栏围在 P 处所获得的电子衍射谱, 由两套斑点组成, 一套较强, 一套较弱。用强斑点 1 成暗场象如 (a), 注意 (a) 上除片状析出物 P 衬度明显反转外, 基体衬度则都变黑, T 处的消光轮廓也不见了, 可见斑点 1 只是析出物的贡献, 而并非与基体所共有。衍射谱标定结果示于图 (a) 右下角, 强的一套属于 NbC 的 $[011]$ 晶带, 弱的一套属于奥氏体的 $[011]$ 晶带。点阵常数, 晶面间距数据均符合良好。

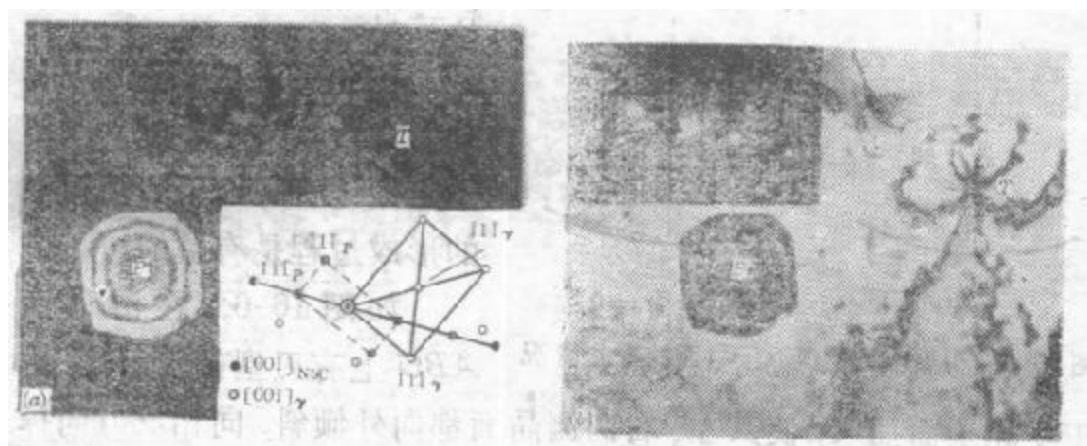


图 10-5 双相不锈钢的衍衬象

(a) 暗场; (b) 明场

作选区域衍射时,往往难于获得接近理想的双束条件,以及多相同时存在,带来衍射花样复杂化,使衬度分析有一定困难。但是,如果能了解衍射衬度的基本原理,则分析时还是不难得出正确结论的。

由上述两个例子,不难理解衍衬象的一个重要特点,即照片上的一些现象如位错线、与基体共格的第二相质点的外貌(存在“零衬度线”)、厚度均匀变化处的等厚干涉条纹等,它们虽然确实反映了晶体内部的结构特征,但又不完全是这些结构特征的真实“映象”。正如在下面将要讨论的:我们观察到的位错线的象,实际偏离其真实位置一侧。又如:共格第二相质点的真实形态也并没有一道与“零衬度线”相对应的“裂缝”;在等厚干涉条纹处的试样中,

不存在一道道平行条纹。所有这些,都不过是反映结构特征的衍射效应。此外,在照片上看到的各种现象,都是试样中三维分布的结构特征在二维平面上的投影,因此,重迭现象更是不可避免的。在作衍衬定量分析(如测位错密度)时,都必须注意这一点。

在介绍衍衬成象原理和分析方法以前,通过一些例子定性地直观地了解衍衬象的形成过程是有益的。

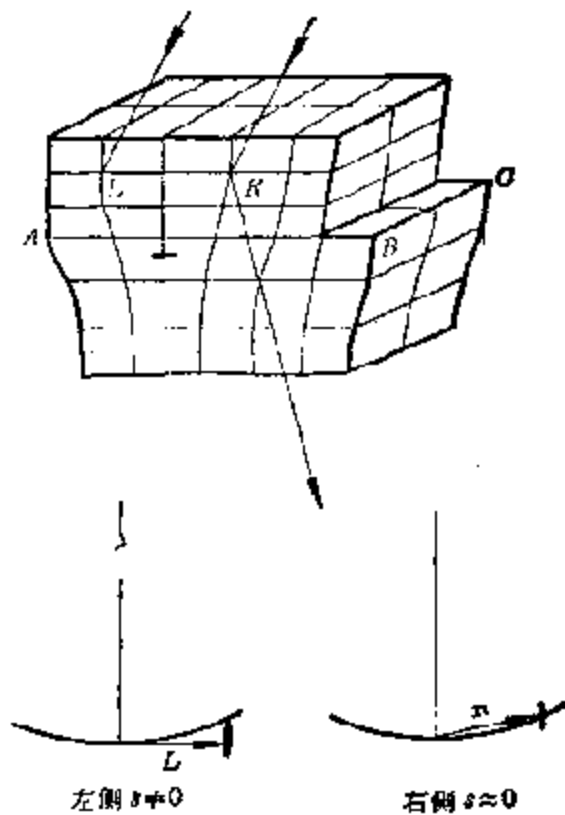


图 10-6 刃型位错两侧原子平面的弯曲情况

如图 10-6,在滑移面 ABC 上有刃型位错 $\perp$ 。由于半原子面插入,使其左、右两侧晶面都向外倾斜,向相反方向撑开。如果入射电子束对右侧晶面 R 满足布拉格条件,因而相应倒易点落在厄瓦尔德球上,产生强的布拉格反射;那么其左侧晶面 L

必定偏离布拉格条件,相应倒易点不落在厄瓦尔德球上,不产生衍射,或衍射强度甚弱。这样,在位错两侧的衬度将表现出明显的差异。按图上所假设的情况,衍衬象上的位错象位于真实位错位置的右侧,其左侧较亮。一般说,位错象所在处,并不与位错真实位置(最大晶格畸变中心)相对应。

下面分析弯曲薄膜的衍衬象。如图 10-7,上部为一弯曲薄膜试样,两侧均匀向下弯曲,下部为明、暗场衍射强度分布。右边极大值与 $+g$ 布拉格衍射对应,左边极大值与 $-g$ 布拉格衍射对应。图 10-8 是从 $[111]$ 方向入射弯曲薄膜的衍衬象实例^[59]。从左、右两侧获得的电子衍射谱,可知右侧 (220) 满足布拉格条件,左侧适相反, $(2\bar{2}0)$ 满足布拉格条件。衍衬象上除等倾条纹外,还有等厚条纹。照片中看到两个消光带重叠在一起。这是由于晶面弯曲,使两个带靠近,且 (202) 为强反射,带很宽,致使两者重叠。实际观察到的消光条纹往往比较紊乱,这说明试样在制备、剪切或电子束加热下发生变形,而这种应力应变状态又是比较复杂的。观察时即使没有移动试样,有时也会看到消光轮廓在运动,这是由于电子束的加热,使试样发生局部热变形,晶面不断转动,导致 s 值连续、缓慢地改变,亦即局部衍射条件在作动态改变。这一点正可用以鉴别消光轮廓与正常的缺陷衬度。

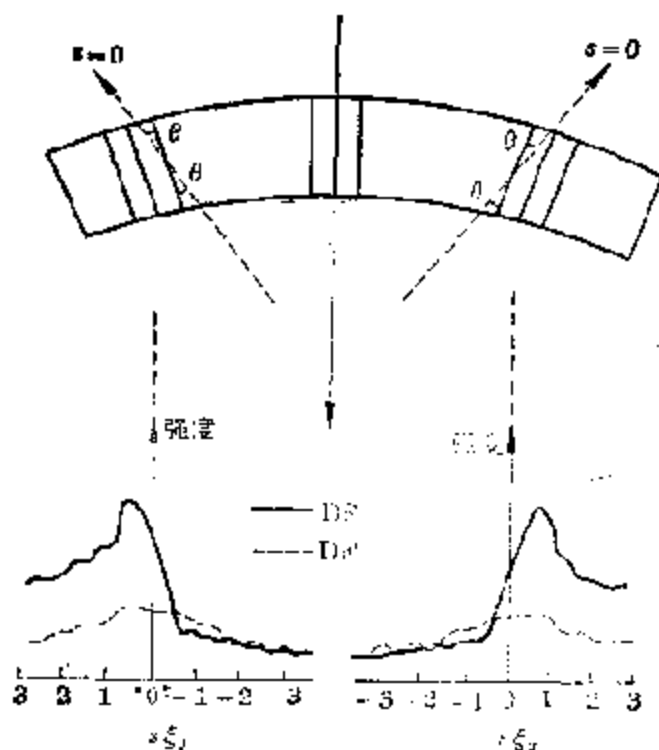


图 10-7 弯曲试样的衍射强度分布曲线

从图 10-7 弯曲晶体明、暗场象强度曲线的变化规律可以看出^[42],

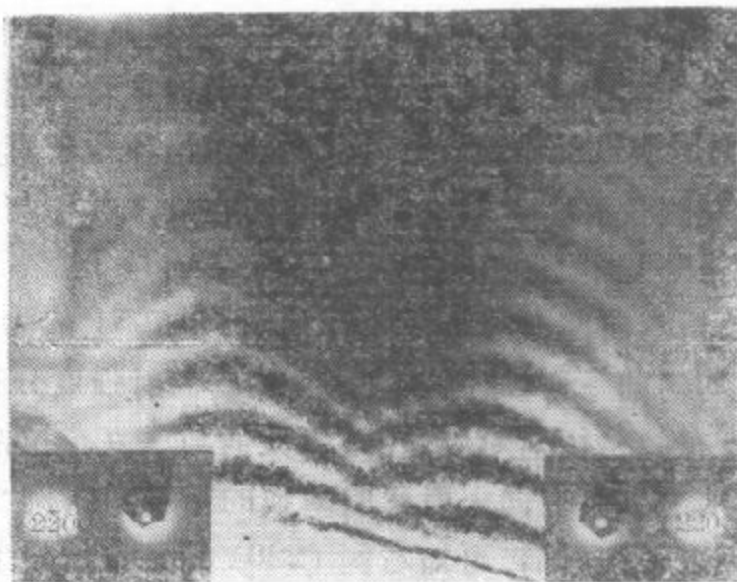


图 10-8 弯曲薄膜的衍衬象实例

(1) 明场象强度由 s 符号决定, 摆动曲线相对于 $s_{\theta_0} = 0$ 不对称; 暗场象强度与 s 符号无关, 摆动曲线对称。

(2) 当 s 甚小且 >0 时, 明场象有一高透射强度区, 相应于图 10-8 左右外侧亮区, 称为异常透射区。

(3) 当 $s < 0$ 时, 明场象强度普遍很低 (图 10-7 下部的中间位置), 相当于图 10-8 上的中部区域。

(4) $s \approx 0$ 处, 试样有最佳穿透性。

此外, 在晶体极薄区域, 吸收作用可以忽略, 接近运动学条件; 即使产生弯曲, 弯曲区域也很窄, 通常只有几百埃范围。这时常在衍衬象中观察到比较明锐的弯曲条纹, 称为弯曲轮廓 (bend contours)。只要倾动一个很小的角度, 它们便会在视场中很快扫动, 轮廓走向从 s 一侧倒向另一侧。此外, 还存在一类由弯曲轮廓交叉组成的条纹花样, 它有一个对应于严格取向的中心, 称为弯曲中心, 其四周的条纹与发生了弯曲的一定晶面对应。

金属薄膜的电子显微象中还常见一种衍衬现象, 即等厚干涉条纹。如图 10-9, 薄膜试样中有一孔洞, 孔洞边沿试样厚度呈楔形变化。在衍衬象 (下图) 上, 透射束强度以消光距离 ξ_g 为周期, 发生周期性变化。对应样品厚度为 $(n + \frac{1}{2})\xi_g$ 处 (n 为零或整数),

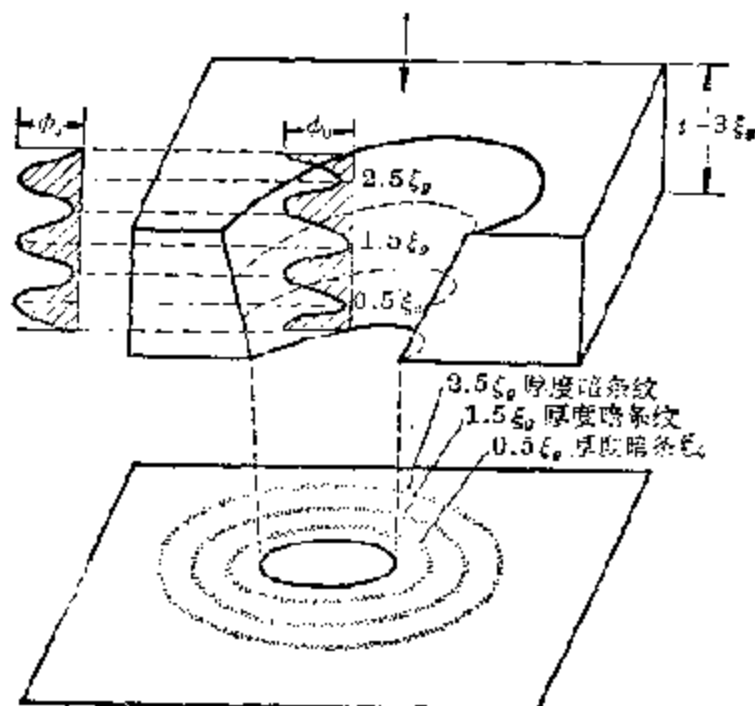


图 10-9 孔洞内周处随厚度变化的等厚条纹(图 10-5 的解释)

透射强度为零。可见,沿孔洞内周,在厚度为 $0.5\xi_g$ 、 $1.5\xi_g$ 、 $2.5\xi_g$ 、 $3.5\xi_g$ 处,底片上均呈现暗条纹(因这些处 $\phi_0=0$),形成了如图 10-5 那样的平行于内周的等厚条纹衬度。但是,由于吸收,往往在透射束达到零以前,这些条纹就随厚度增加而变弱以至消失。因而,许多试样往往在第五根条纹处,开始出现这种提前减弱和消失现象。值得注意的是,位错等晶体缺陷,总是在条纹将要减弱和消失的区域,表现出最佳衍射衬度,此时暗场与明场的条纹衬度正好相反。从照片上测得条纹数 n ,再从衍射照片上找到最强斑点,即操作反射的指数 g ,并求得相应于 g 的 ξ_g ,就可计算该处试样的厚度 $t=n\xi_g$ 。

$s=0$ 时, ξ_g 可以根据(9-41)式计算,也可从附录[八]中查得。若 $s \neq 0$, 则 $\xi_{g\text{eff}}$ 可根据下式计算:

$$\xi_{g\text{eff}} = \frac{\xi_g}{(1 + s^2 \xi_g^2)^{1/2}} \quad (10-13)$$

可见同一操作反射,如果由于某种原因(例如试样弯曲),使某一部

位取向偏离布拉格位置,从而使 s 发生变化,都会使有效消光距离 ξ_{eff} 发生改变。

§ 10-3 衍衬成象的运动学理论

一、运动学理论的一般讨论

运动学理论是一种简化理论,它虽不及动力学理论严格,但仍然可以用来定性解释衍衬工作中遇到的许多问题。只要试样取向不处于准确布拉格反射位置,且试样不太厚,则用它来解释衍衬中某些问题,还是满意的。此外,运动学理论也是学习掌握动力学理论的基础。

1. 运动学理论的基本假定

(1) 不考虑衍射束与透射束之间的交互作用。运动学理论认为对衬度有贡献的衍射束,其强度相对于入射束来说,是非常小的。这个假定的实际意义是,试样取向接近但不准确处于布拉格反射位置,即取衍射条件 $s \neq 0$ 。

(2) 理论处理时,把试样设想为由截面积略大于一个单胞尺寸的柱体所组成,这些柱体都贯穿试样上下表面。每个柱体只产生一支衍射束,相邻柱体中的衍射束彼此不相干扰,而总的衍射束就是各柱体中衍射束相加,并认为柱体内只有纵向畸变。

(3) 认为试样非常薄,吸收和多重散射都可以忽略不计。

为满足上述基本假设,实验上应注意两点:① 试样取向应使操作反射远离准确布拉格位置;② 尽可能选择试样比较薄的区域。这两点,实践上都有困难。特别是第①点,几乎无法做到,这是因为在电子衍射情况下,原子对电子的散射振幅较大,因此散射强度不会很弱;再者,薄晶体下又容易获得完全的布拉格反射。运用运动学理论解释衍衬在大多数情况下都是近似的。试样越薄,其结果越难完全代表大块材料的性质。例如位错密度,薄膜试样中的数值,由于上下表面应力松弛,在制样过程就消失了相当一部分(有工作指出,只剩下不到 30%^[60]),因此,利用薄膜试验结果解释

大块材料的性质时,应该特别注意。尽管这样,薄膜衍射研究,对理论探讨和分析实际材料中的问题,仍有着重要意义。下一节将要介绍的动力学理论,对衬度形成机制,可以提供更为精确的处理和完美的解释。

2. 完整晶体

考虑如图 10-10(a) 所示的完整晶体,具有单位振幅的电子波垂直入射于试样表面,首先要计算出下表面处的衍射振幅 ϕ_g , 由此即可求得衍射强度。与任何衍射问题的处理一样,考虑电子波经过试样时发生的位相变化,可以得到 ϕ_g 的表达式:

$$\phi_g \propto \sum_j \exp[-2\pi i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_j] \quad (10-14)$$

式中, $\mathbf{k}'$ 和 $\mathbf{k}$ 分别为衍射波、入射波的波矢量, $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = \lambda^{-1}$ 。

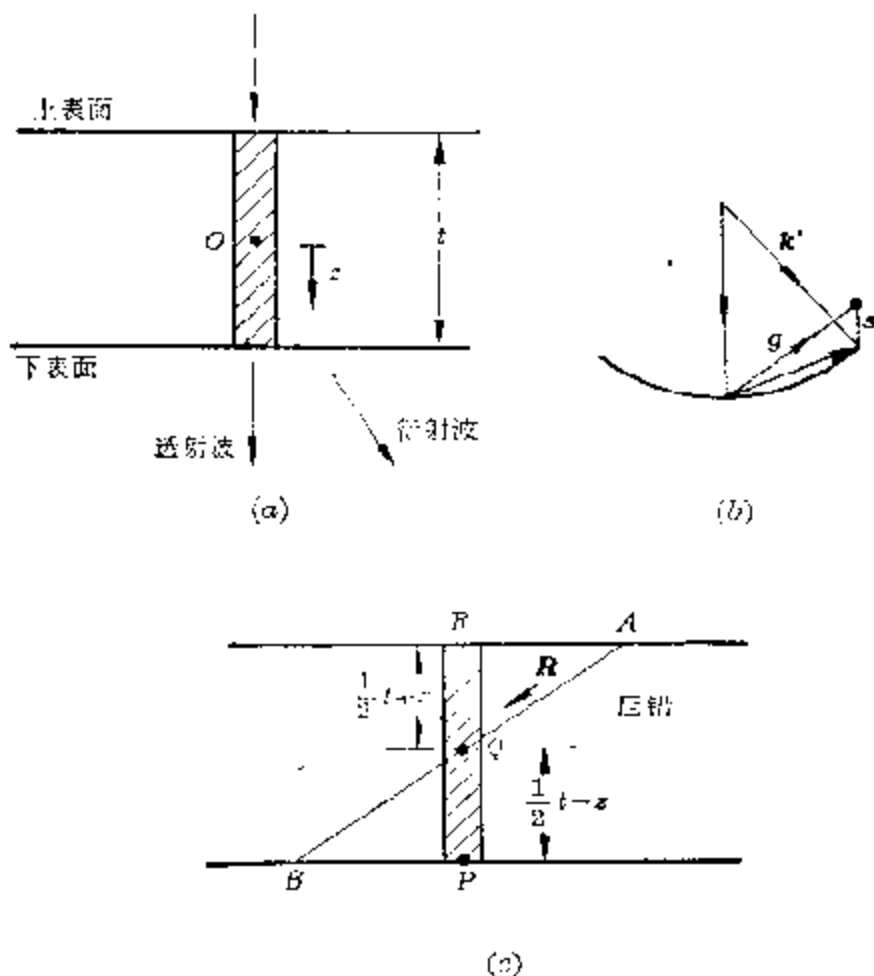


图 10-10 计算衍射振幅的柱体近似模型

(a) 完整晶体; (b) 波矢与倒易矢的关系; (c) 晶体含有层错 AB 时

对位于阵点 $\mathbf{r}_j$ 处的晶体所有单胞求和。为简单起见, 假定每一个初基单胞中只有一个原子, 显然, $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{g} + \mathbf{s}$, $\mathbf{s}$ 是倒易点偏离厄瓦尔德球的矢量, 定义如图(b)。于是得到:

$$\phi_g \propto \sum_j \exp[-2\pi i(\mathbf{g} + \mathbf{s}) \cdot \mathbf{r}_j] = \sum_j \exp(-2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_j) \quad (10-15)$$

这是因为 $\mathbf{g}$ 是倒易点阵矢量, $\mathbf{r}_j$ 是正空间矢量, 故 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_j = \text{整数}$ 。(10-15)式也可表达成积分式, 对整个晶体积分:

$$\phi_g = \frac{i\pi}{\xi_g} \int_{-t/2}^{+t/2} \exp(-2\pi i s z) dz = \frac{i\pi}{\xi_g} \frac{\sin \pi t s}{\pi s} \cdot \exp(-\pi i s t) \quad (10-16)$$

式中, t 为晶体厚度; 较之(10-14)和(10-15)式, 在此式中引入 ξ_g , 可表示为:

$$\xi_g = -\frac{q k V_0 \cos \theta}{E_g} \quad (10-17)$$

称为消光距离, 亦即前面的(9-41)式。详细推导可参见文献[21]。式中, V_0 为单胞体积; E_g 是单胞中原子的电子散射振幅, 可由Born近似方法求得(见Mott和Massey, 1965)。消光距离具有长度的量纲, 它是相应于一定的布拉格反射的。大多数金属的低指数反射的消光距离典型值约为 $200 \sim 500 \text{ \AA}$ 。(10-15)式中的 i , 表示有 $\pi/2$ 的相位改变。

衍射波强度和透射波强度分别为:

$$I_S = |\phi_g|^2 = \left(\frac{\pi}{\xi_g}\right)^2 \cdot \frac{\sin^2(\pi t s)}{(\pi s)^2} \quad (10-18)$$

$$I_T = |\phi_T|^2 = 1 - \left(\frac{\pi}{\xi_g}\right)^2 \frac{\sin^2(\pi t s)}{(\pi s)^2} \quad (10-19)$$

由于运动学理论认为明、暗场象的衬度是互补的, 因此令 $I_S + I_T = 1$ 。但实际上由于不能完全忽略吸收的作用, 互补性遭到破坏, 解释它们就有赖于动力学理论。

(10-18)式表示围绕布拉格反射的倒易点的强度分布是正比于 $\frac{\sin^2(\pi t s)}{(\xi_g s)^2}$ 的。可以描绘成一个垂直于晶体表面的强度峰, 如图10-11(a)。它有一个宽为 $2/t$ 的中心极大和旁边一系列次极

大。许多衬度效应都要借助于上面提出的概念加以解释。例如厚度条纹, 当其取向固定, 即(10-18)式中的 $\sin^2(\pi ts)/(\xi_g s)^2$ 一项里 s 是一常数, 而 t 是变化的, 这样, 强度随厚度 t 作周期变化, 图 10-5 中的第二相 NbO 的条纹衍衬象就是这种例子。将(10-18)式表示的强度随 s 的变化画成曲线, 则如图 10-11(a)所示。当厚度变化, 图中相干函数 $[\sin^2(\pi ts)/(\xi_g s)^2]$ 的宽度也发生改变, 次极大也可能被厄瓦尔德球截过。图 10-5 NbO 周围看到的同心等厚消光轮廓的深度周期可由下式给出:

$$\Delta t = s^{-1} \quad (10-20)$$

可见在某指定区域, 当其取向相对于布拉格反射条件的偏离程度恒定 ($s = \text{常数}$) 时, 深度周期 Δt 取某定值。所以当试样不同部位出现等厚条纹衬度时, 其深度周期是随各处取向的偏离参数 s 而变的, 应对不同区域进行电子衍射, 求出相应的 s 值, 再据以计算试样厚度。在后面第十三章将看到, 采用弱束成像技术, 对根据 s 值计算厚度有极大优越性。弯曲试样消光轮廓的衬度可以这样理解: 试样厚度不变, 但由于弯曲, s 在一个范围内发生变化, 这时衍衬照片上的黑带相当于某一恒定 s 值下的强度极大或次极大与厄瓦尔德球相截的结果。

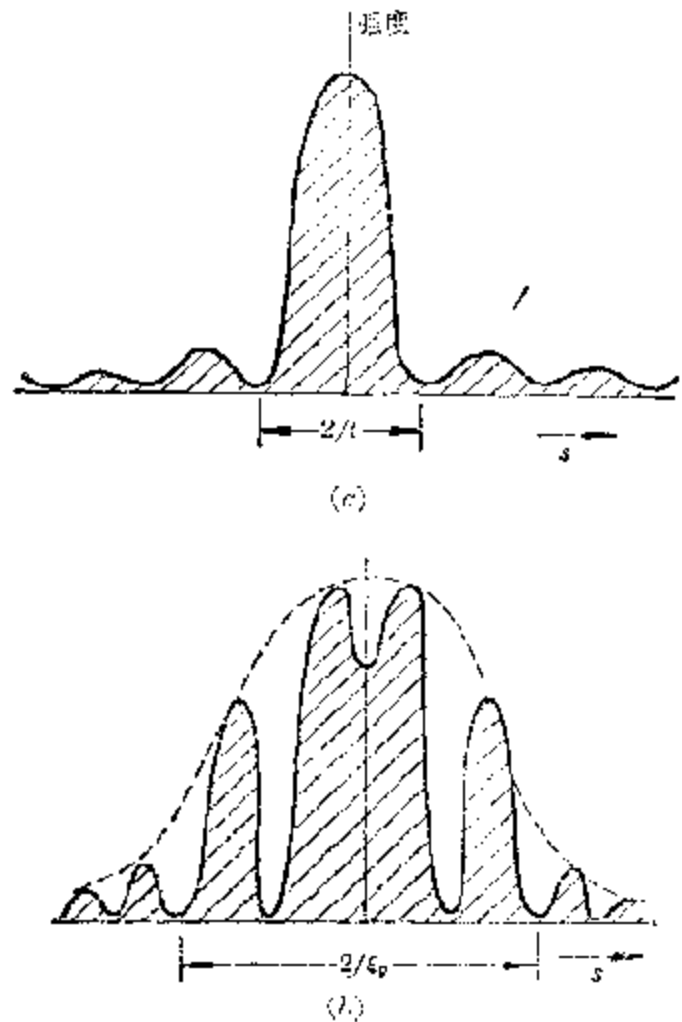


图 10-11 围绕倒易点的强度分布
(a) 据动力学理论; (b) 据动力学理论

运动学理论虽能对完整晶体的厚度条纹数给出定性估计（即一定厚度粗略地约相应于有多少根厚度条纹），但却不能据此进行定量的衍衬分析。显而易见，当 $s \rightarrow 0$ ，即接近准确布拉格反射位置时（这时衍射照片上操作反射的菊池线十分接近该反射斑点），由(10-20)式，条纹间距将为无限大，这与实验事实不符。实验指出， $s \rightarrow 0$ 时，仍可看到一个条纹间距的上限值。

3. 不完整晶体

下面讨论晶体中存在缺陷的情况。缺陷使布拉格反射平面发生弯曲或出现不连续性，从而局部衍射条件也发生变化，在显微象

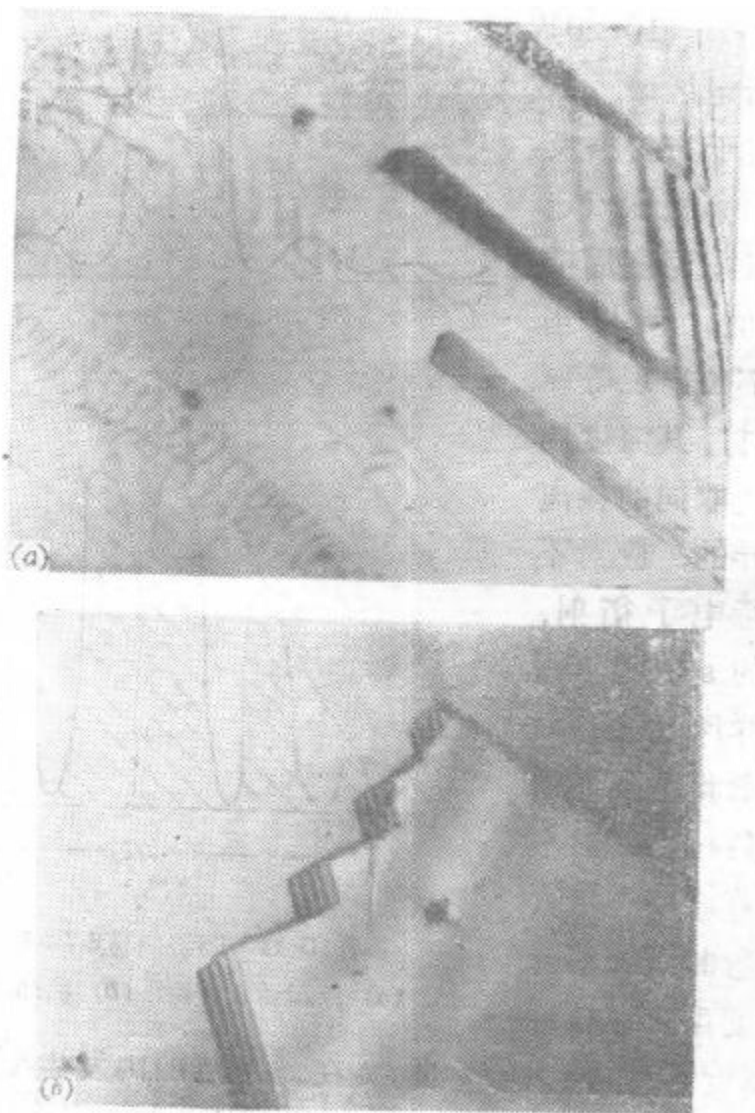


图 10-12 Ni-6.5% Al 镍基合金的衍衬象
(a) 合金中的层错群；(b) 合金中的晶界厚度条纹

上出现衬度。例如图 10-10(c), 晶体中存在层错 AB , 上半个楔形晶体相对于下半个楔形晶体位移了 R 矢量。由于 R 不是一个点阵矢量, 当电子束通过层错面时, 就会有一个位相差 $2\pi g \cdot R$, 成象时将出现等厚条纹那样的条纹衬度。图 10-12(a) 是镍基合金中的层错衍衬象^[7], 层错面为 $\{111\}$ 。值得注意的是, 不要把层错条纹与共格孪晶界或其它晶界的等厚条纹混淆起来。层错两侧的取向相同, 有相同电子衍射花样; 而孪晶界面两侧晶体互成孪生取向, 有各自的衍射花样。一般晶界处由于厚度变化形成的厚度条纹, 其衬度变化的细节与层错条纹不同, 且其两侧衍射花样也不相同。如图 10-12(b), 是与 (a) 图同一合金中看到的由于晶界厚度发生变化产生的条纹衬度^[7]。

考虑图 10-10(c) 中打斜线的柱体, 计算晶体下表面处的衍射振幅 ϕ_g 。坐标原点取在柱体中心, Q 处点阵位移为 R , 则 (10-15) 式应改写为:

$$\begin{aligned}\phi_g &\propto \sum_i \exp[-2\pi i(g+s) \cdot (r_i + R)] \\ &= \sum_i \exp[-2\pi i g \cdot R - 2\pi i s \cdot r_i]\end{aligned}\quad (10-21)$$

此处已略去小量 $s \cdot R$ 项。积分 (10-21) 式, 成为:

$$\phi_g = \frac{\partial \pi}{\xi_z} \int_{-\xi_z/2}^{\xi_z/2} \exp(-2\pi i g \cdot R) \exp(-2\pi i s z) dz \quad (10-22)$$

可以看到, ϕ_g 实质上是相位因子 $\exp(-2\pi i g \cdot R)$ 的傅里叶变换, 而相位因子是柱中位置的函数。(10-22) 式可以用来计算层错的衬度。注意在层错面以上, $R=0$; 而在层错面以下, $R=\text{常数}$ 。积分 (10-22) 式, 取平方, 得:

$$\begin{aligned}|\phi_g|^2 &= (\xi_z s)^{-2} \left[\sin^2 \left(\pi t s + \frac{1}{2} \alpha \right) + \sin^2 \frac{1}{2} \alpha - 2 \sin \frac{1}{2} \alpha \right. \\ &\quad \left. \cdot \sin \left(\pi t s + \frac{1}{2} \alpha \right) \cdot \cos 2\pi z s \right]\end{aligned}\quad (10-23)$$

式中 $\alpha = 2\pi g \cdot R$, z 是柱体与斜面相截处至柱体中心的距离。如果 α 不等于零或 2π 的整数倍时, 由方程 (10-23) 可以看出, 条纹衬度将随柱体所在位置, 即随 z 而作周期变化。变化的深度周期由

(10-20)式给出。当 $\alpha=0$ 或 2π 的整数倍时, (10-23) 式即演化为 (10-18)式, 即:

$$|\phi_g|^2 = \sin^2(\pi t s) / (\xi_g s)^2$$

这时, 层错引起的位移, 不会使衍射强度产生任何附加效应, 以致层错不可见。这是测定层错位移矢量 R 的一个很好的判据。测量时, 可利用测角台倾动试样, 在几个布拉格反射下使层错成象, 测得使层错条纹衬度消失的几个布拉格反射指数, 就可以唯一

地确定位移矢量 R 。

(10-22) 式同样可以用来计算含有位错的晶体下表面处的象衬。图 10-6 示意描绘出晶体中刃位错附近原子平面的弯曲情况, 图 10-13 表示膜中有一根螺位错 AB 平行于膜面, 位错引起的畸变, 使晶体中一个柱体 CD 被形变成 $E'F'$ 形式。

螺位错附近的位移可表示为:

$$R = \frac{b}{2\pi} \phi = \frac{b}{2\pi} \tan^{-1}\left(\frac{z}{x}\right) \quad (10-24)$$

故(10-21)式中的

$$2\pi g \cdot R = g \cdot b \tan^{-1}\left(\frac{z}{x}\right) = n \tan^{-1}\left(\frac{z}{x}\right) \quad (10-25)$$

由于 g 是倒易矢量, b 是点阵矢量, 故 $g \cdot b = n$ 。 n 是整数, 可取 0, $\pm 1, \pm 2, \dots$ 等。(10-22)式的积分值可以很方便地用计算机求得。计算(10-22)式, 可以得到图10-13中位错 AB 的象轮廓, 它是强度 $|\phi_g|^2$ 随图中位置 x 而变化的分布。现将若干计算结果归纳于下:

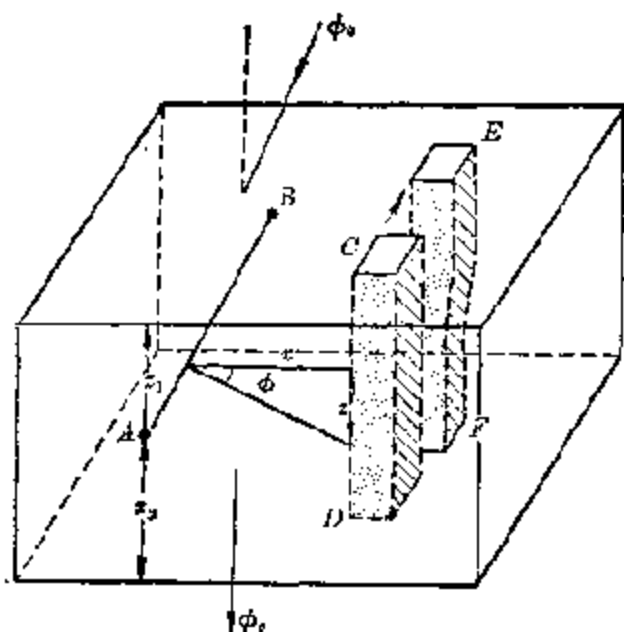


图 10-13 螺位错引起的畸变

(1) 螺位错的象, 位于实际位错核心的一侧。其偏离程度随偏离参数 s 的大小而异。这是由于 (10-22) 式中的两个相位因子同号时, 积分值围绕一个小的平均值快速摆动; 而当它们符号相反时, 积分将取一个大的平均值。由于 R 在螺位错两侧改变符号, 以致位错衬度相对于位错核心是不对称的。图 10-14 是铝中位错通过消光轮廓时衬度反相的情况^[91], 消光轮廓两侧 s 反号。至于刃位错象强度峰偏于一侧的原因, 还可参见图 10-6, 由于位错两侧, 点阵平面是朝着相反的方向偏转的。位错一侧点阵平面倾向反射位置, 衬度增加; 另一侧点阵平面远离反射位置, 衬度降低。

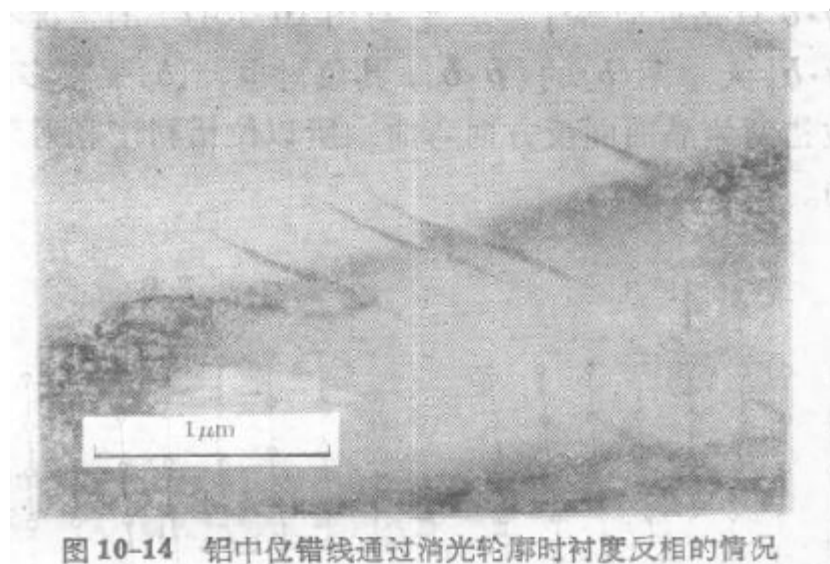


图 10-14 铝中位错线通过消光轮廓时衬度反相的情况

(2) 在所计算的柱体内, (10-22) 式中被积函数的相位因子可以视为不变; 而只需考虑含 s 的相位变化一项。在大 s 值下, 衍射强度峰出现在接近位错核心处, 而此处 R 的变化梯度最大。对螺位错而言, 当 $g \cdot b = 2$ 时, 此峰出现在距核心 $x = (\pi s)^{-1}$ 处; 象的半宽度为 $\Delta x = (\pi s)^{-1}$ 。这些结果指出, 采用大的 s 值成象, 可以使位错象变窄并接近于核心。由于衍射束的强度随 s^{-2} 而变化 [见 (10-23) 式], 所以在大的 s 下, 明场象衬度是弱的。但是暗场象尽管也很弱, 只要曝光足够, 衬度还是好的。这就是弱束成象技术的基础 (详见第十三章)。

(3) 刃位错与螺位错的象相似, 在同样衍射条件下, 其象较螺位错象为宽。

(4) 某些反射下, $g \cdot b = 0$, 这时位错不会产生衬度, 位错虽存在而不可见。常把 $g \cdot b = 0$ 称为“不可见准则”。由于 g 垂直于反射平面, 故不可见准则意味着位错的布氏矢量在反射平面内, 即位移平行于反射平面, 不会产生衬度 (因与 g 对应的晶面间距没有改变)。这个结论对螺位错是完全正确的, 而对刃位错, 在许多情况下, 只是近似成立。存在刃位错时, 如果滑移面平行于入射电子束, 即使 $g \cdot b = 0$, 由于在垂直于滑移面方向仍有一些位移, 因此会产生一些微弱衬度, 如图 10-15(b)。这时由于位错两侧点阵平面弯曲方向相同, 因此位错衬度相对于位错中心是对称的。严格讲, 这时的 $g \cdot b$ 只是近似等于零。它与图 10-15(a) 的情况不同, 图 (a) 的 $|g \cdot b|$ 大于图 (b) 的 $|g \cdot b|$, 其象衬也较 (b) 强得多。图 (a) 还由于位错两侧晶面向反方向弯曲, 所以位错衬度相对于中心是不对称的。

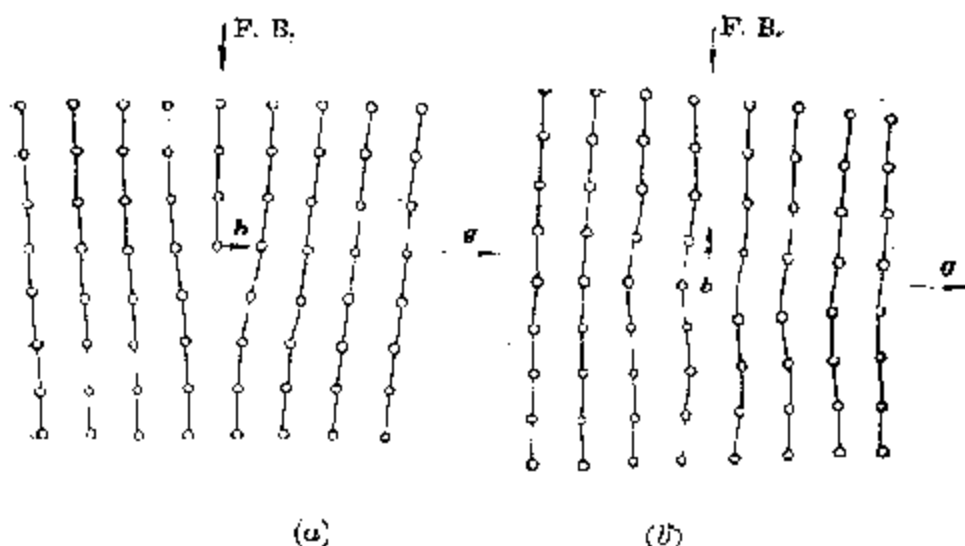


图 10 15 刃位错在两种特殊取向都产生衬度

- (a) 滑移面垂直于入射电子束, 位错有较强衬度;
(b) 滑移面平行于入射电子束, 位错仍有微弱衬度

二、振幅-相图

借助振幅-相图, 可以用图解方法表示 (10-14) 式反映的振幅矢量按位相迭加的情况。这个方法在 X 射线衍射中也被采用。

令从柱体中每一单胞产生的散射振幅等于 1, 相邻单胞产生

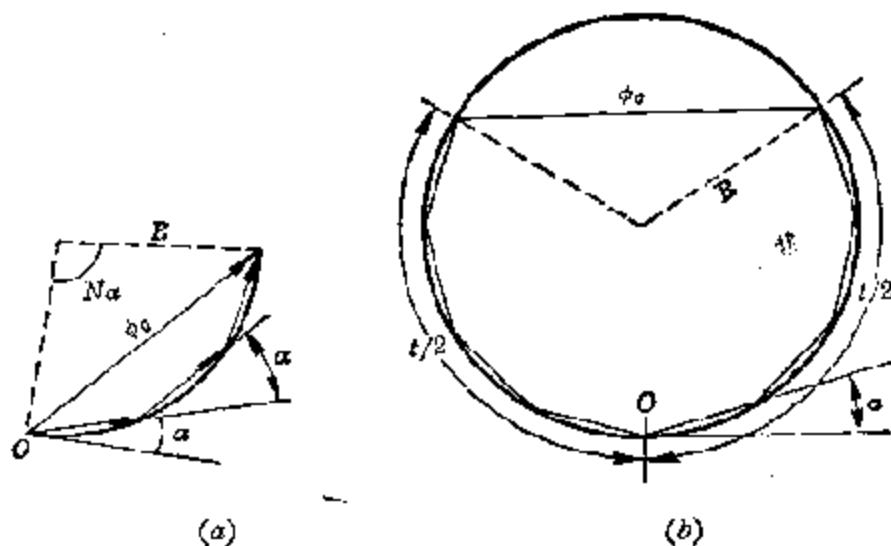


图 10-18 振幅-相图

(a) 原点取在柱体端部; (b) 原点取在柱体中心

的衍射束之间的位相差 $\alpha = 2\pi s a$, s 为倒易点偏离反射球的偏离矢量的大小。因此, 被柱体散射的波的相加, 可用代表相邻单胞散射振幅的 N 个等长矢量的相加表示。在振幅-相图上这些等长矢量是圆上的一段弦长, 它们相互差一个位相角 α , 如图 10-16 所示。 N 是图 10-10(c) 中柱体所包含的单胞数(即参与散射的单胞数), 它等于 t/a , t 为柱体高度即膜厚, a 为单胞边长。一般 N 是一个很大的数, 可见弧的总长近似等于 $N a$ 。由于这些振幅矢量所对的张角等于 $N \alpha$, 因此圆半径 $R = N a / N \alpha = \frac{1}{2\pi s}$, 而合成振幅 ϕ_s 可由下式导出: $\phi_s / 2 = |R| \sin(N \alpha / 2)$ 。由 (10-16) 式, 随着电子束深入试样, 衍射束相应增强, 至某一时刻, 衍射振幅达到最大值, 即当图 10-16 合成振幅矢量 ϕ_s 的长度正好等于圆的直径时, 衍射振幅最大, 强度也最大。达到最大值后, 电子束继续深入试样, ϕ_s 又逐渐减小, 直至等于零。这时振幅矢量正好绕圆一周, 也就是相当于 (10-20) 式的深度周期 $4t$ 。正是这样, 按照 (10-16) 式作正弦周期变化。图 10-16(b) 所示例子, 取试样厚度的中点于圆周的最下端 (0)。

对于不完整晶体, 衍射波的相角不再是 (10-15) 式中的 $(\mathbf{g} + \mathbf{s}) \cdot \mathbf{r}_j$, 而是 $\alpha_j = (\mathbf{g} + \mathbf{s}) \cdot (\mathbf{r}_j + \mathbf{R}_j)$, $\mathbf{R}_j$ 表示第 j 个单胞离开正常

位置的位移矢量。由于 $\mathbf{s} \cdot \mathbf{R}_j$ 和 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_j$ 均接近于零, 故合成振幅不再是(10-15)式所表示的, 而应为:

$$\phi_g \propto \sum_j \exp(2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}_j) \exp(2\pi i \mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_j) \quad (10-26)$$

下面举例说明振幅-相图在分析含有层错晶体衍射振幅的应用。图 10-17(b) 左侧半径为 $(2\pi s_1)^{-1}$ 的圆, 代表图(a)中左侧完整晶体 I。电子束在柱体内经过路程 $t_1 + t_2$ 达到 Q 点, 通过层错 AB 时产生相位移 α 。这时引入一个相应于图(a)中右侧完整晶体 II 的参考圆, 其半径为 $(2\pi s_2)^{-1}$ 。在 II 晶体中运行路程为 t_3 , t_3 是沿着新参考圆进行的。如果没有层错面 AB, 那么达到晶体底部时, 合成振幅为 $\overrightarrow{PP'}$; 但由于有了层错引起的相位移, 最终合成振幅就成为 $\overrightarrow{PP''}$ 。不难理解, 图(a)中垂直于图面, 同一深度 $t_1 + t_2$ 处, 获得同一个振幅 $\overrightarrow{PP''}$ 。结合(10-16)式和图 10-10(o), 容易想像, 晶体由于存在倾斜于膜面的层错, 在衍衬象上表现为明暗相间的条纹衬度。关于这一点, 还将在第十一章进一步讨论。

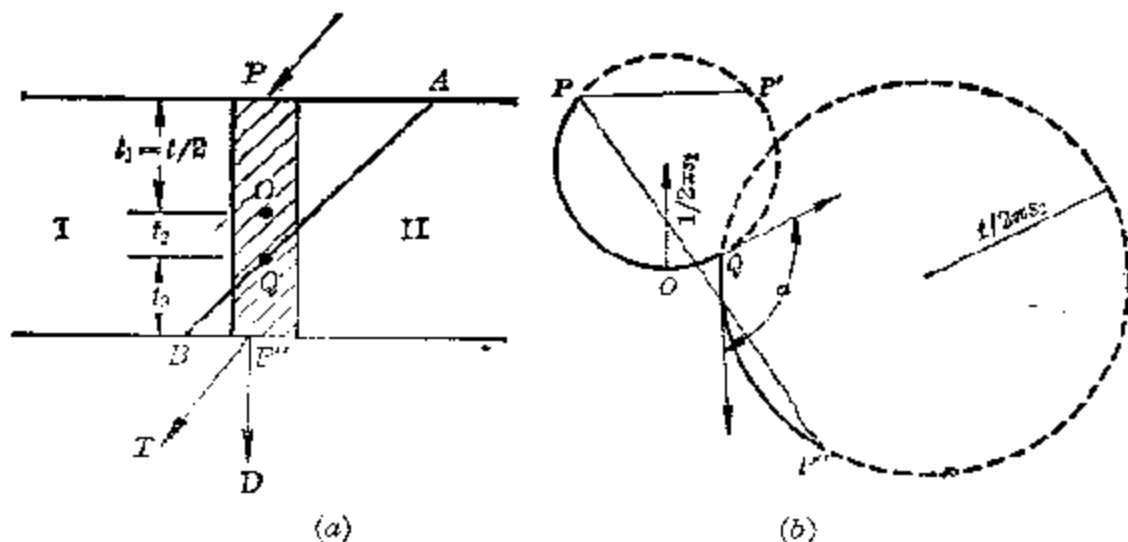


图 10-17 利用振幅-相图分析含有层错晶体的衍射强度

$$\widehat{OP} = t_1; \widehat{OQ} = t_2; \widehat{QP} = t_3$$

§ 10-4 衍衬成象的动力学理论

运动学理论虽然可以定性地解释薄晶体的一些衍衬效应, 但由于忽略了衍射束与透射束的交互作用, 因此它无法解释由动力

学相干引起的衬度反常现象。而这种动力学相干作用在电子衍射中则是不可避免的。这是由于原子对电子的散射作用比对 X 射线要大一万倍以上, 因此散射波的振幅有时甚至可以被当作一支新的入射波, 而在晶体中引起再散射, 以致使电子波在晶体中的传播过程复杂化。

下面我们再看看运动学理论的局限性。

对完整晶体设入射波振幅 $\phi_0=1$, 得到公式(10-18):

$$|\phi_g|^2 = \sin^2(\pi t s) / (\xi_g s)^2$$

若衍射条件转向动力学情况, 即当 $s \rightarrow 0$, 那么上式将变成:

$$|\phi_g|^2 = (\pi t / \xi_g)^2 \quad (10-27)$$

若晶体足够厚(例如当加速电压 $>200\text{ kV}$ 甚至更高时所允许的厚度), 以致 $t > \xi_g / \pi$ 时, 将导致 $\phi_g > 1$, 超过了入射波振幅; 又由(10-20)式, 这时的等厚条纹间距将趋于无限大, 这些显然都是不合理的。以不锈钢为例, 在 200 kV 下, $\xi_{220}=564\text{ \AA}$, 则按照(10-27)式, 就要求晶体厚度小于 $180\text{ \AA}$ 。但实际上电镜中观察的试样一般不小于 $1000\text{ \AA}$, 而当厚度变化时, 却仍可以看到一个有限的条纹间距。此外, 实际衍射工作中, 还存在着许多物理吸收效应, 它们有很大的实际意义, 而这些吸收效应, 在运动学处理中一般都不予考虑^[54]。超高压电子显微术的发展, 发现了许多新的衬度现象, 它们与高压下电子动力学相干作用有着直接关系。所有这些, 都要求我们发展更加完善的动力学理论, 使问题得到较为满意的解决。

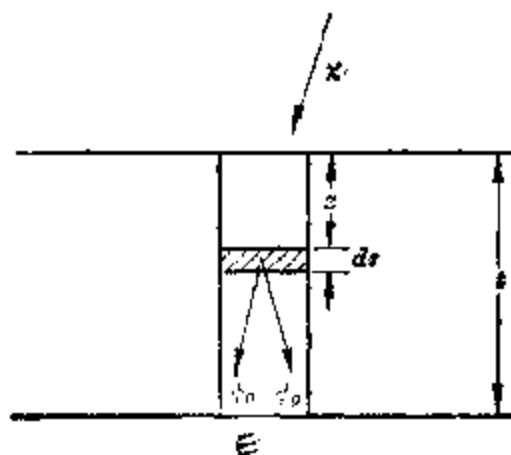


图 10-18 动力学处理的晶体模型
 ϕ_0 —透射束振幅; ϕ_g —衍射束振幅;
 k —入射电子束波矢

如图 10-18, 设透射束振幅为 ϕ_0 , 衍射束振幅为 ϕ_g , 则 ϕ_0 、 ϕ_g 随深度的变化可表示为:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\phi_0}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} \phi_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} \phi_g \exp[2\pi i s z] \\ \frac{d\phi_g}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} \phi_g + \frac{\pi i}{\xi_g} \phi_0 \exp[-2\pi i s z] \end{aligned} \right\} \quad (10-28)$$

第一个方程描述透射波振幅在小柱体单元 dz 中的变化, 这种变化, 部分由于透射波的向前散射, 部分由于衍射波的布拉格散射。第二个方程也可以作类似的解释。公式表达本身就反映了两种波的交互作用。 ξ_0 可以通过一个位相转变予以替换, 令:

$$\left. \begin{aligned} \phi'_0 &= \phi_0 \exp(-i\pi z/\xi_0) \\ \phi'_g &= \phi_g \exp(-i\pi z/\xi_0) \end{aligned} \right\} \quad (10-29)$$

替换后, 可得:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\phi'_0}{dz} &= \frac{i\pi}{\xi_g} \phi'_g \\ \frac{d\phi'_g}{dz} &= \frac{i\pi}{\xi_g} \phi'_0 + 2\pi i s \phi'_g \end{aligned} \right\} \quad (10-30)$$

利用边界条件, 解此方程。在上表面, $\phi'_0(0) = 1$, $\phi'_g(0) = 0$, 于是得到(以下略去“'”),

$$\left. \begin{aligned} \phi_0(t) &= \cos\left(\frac{\pi t}{\xi_g} \sqrt{1+\omega^2}\right) - \frac{i\omega}{\sqrt{1+\omega^2}} \sin\left(\frac{\pi t}{\xi_g} \sqrt{1+\omega^2}\right) \\ \phi_g(t) &= \frac{i \sin\left(\frac{\pi t}{\xi_g} \sqrt{1+\omega^2}\right)}{\sqrt{1+\omega^2}} \end{aligned} \right\} \quad (10-31)$$

式中 $\omega = \xi_0 s$, 为一无量纲参数, 是动力学条件下表示偏离反射条件的偏离参数。由(10-31)式, 可以知道 $|\phi_0|^2 + |\phi_g|^2 = 1$, 即明暗场象的强度是互补的。如果用下式表示的 s_{eff} (有效偏离参数) 代替 s , 则(10-31)式的第二个式子与(10-16)式是相同的。

$$s_{\text{eff}} = (s^2 + \xi_g^{-2})^{1/2} \quad (10-32)$$

可见根据动力学理论, s_{eff} 不可能为零, 即使当 s 很小或 $s=0$ 时, 仍存在一个极小值 ξ_g^{-1} 。同样, 由于(10-31)式的第二个式子, 当 $s \rightarrow 0$, 且在 $t > \xi_g/\pi$ 的情况下, 也不会导致 $|\phi_g|^2 > 1$ 。按照动力学理论, 倒易点附近的强度分布是:

$$|\phi_g|^2 = \frac{\sin^2(\pi l s_{\text{eff}})}{(\xi_g s_{\text{eff}})^2} \quad (10-33)$$

相应的图解已表示如图 10-11(b)。(10-33)式是与根据运动学理论的(10-18)式相对应的。从图 10-11(b)可知,当 $s \rightarrow 0$ 时,它不一定有极大值,其强度分布曲线的细节也不同于图 10-11(a)所示的根据运动学理论的情况。运动学理论关于厚度和弯曲条纹轮廓的定性结论在动力学情况下仍然有效。(10-31)式同样预言透射束和衍射束的强度随深度 z 而作周期变化。在布拉格反射位置,振动的变化如图 10-19(b)。透射束和衍射束强度在 0 和 1 之间变化,相互反相;深度变化周期为 ξ_g 。离开布拉格位置,其振动情况如图 10-19(a),深度变化周期为 s_{eff}^{-1} 。在大的 s 下, $s_{\text{eff}}^{-1} \rightarrow s^{-1}$,与运动学理论一致。由此很容易理解消光距离 ξ_g 的意义。

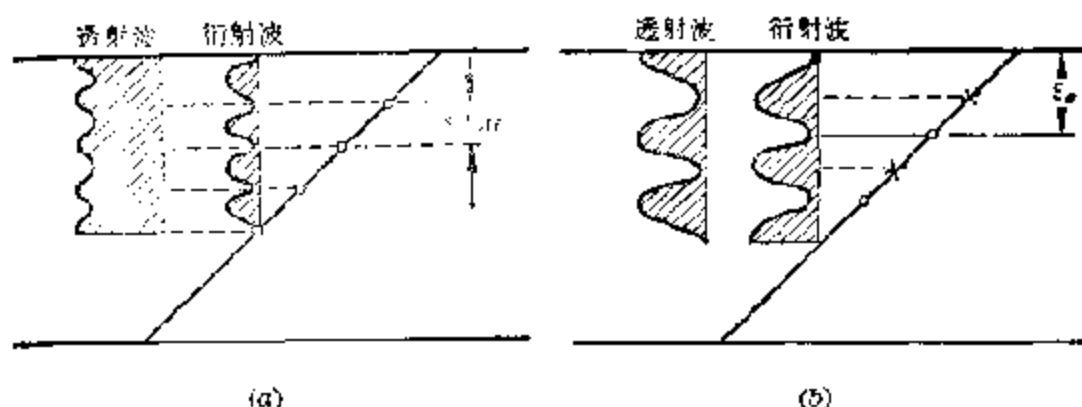


图 10-19 透射束、衍射束强度随深度变化作周期振动
(a) 运动学理论; (b) 动力学理论

我们在上面所述动力学理论,基本上是按照 X 射线中达尔文处理方法进行处理的。另一个方法是解周期势场中快速电子的薛定谔方程,这时引入布洛赫波的概念,得到解。由于布洛赫波的对称性,产生了某些重要的效应。电子进入到晶体,产生两支布洛赫波,它们在晶体中传播的情况如图 10-20^[21]。其中一支位于原子的反射平面上,而另一支则在两反射平面之间传播。在原子处可能通过带间电子激发或声子散射的机制,发生非弹性散射。这种类型的散射可以通过散射过程将电子全部散射到电镜的物镜光栏

以外，它们也可以被试样所吸收。显然，若非弹性散射局限于图 10-20 中打阴影的区域，那么第二型波将比第一型波吸收得多。因此就有可能使第一支布洛赫波从“通道”中透过并且容易穿透。这种现象称为异常吸收，这与 X 射线衍射中的 Borrmann 效应极为相似。这种效应使电子显微术可以在晶体材料的较厚区域进行。对第一支布洛赫波的优先吸收作用，导致晶体厚区域等厚条纹的可见度降低。Hashimoto 等 1982

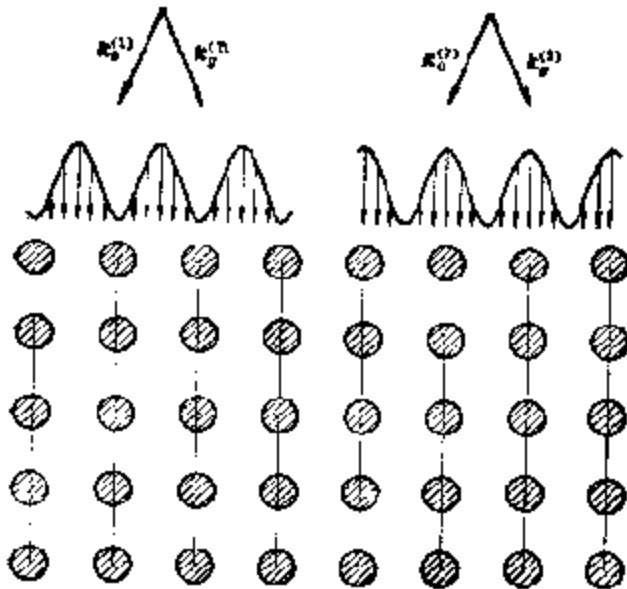


图 10-20 两种布洛赫波在晶体中传播
(在准确布拉格位置)

年曾讨论过异常吸收问题，随后 Yoshioka (1957), Hall 和 Hirsch (1965) 以及 Whelan (1965) 也研究了这个问题，并用它解释了衍射工作中遇到的一系列异常衬度现象。

象衬的动力学理论，也可以推广应用到晶体缺陷研究中。与运动学一样，在柱体中引入位移矢量 $\mathbf{R}$ 。这时，只要在 (10-30) 式中作下述代换即可，

$$\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s} + \frac{d}{dz} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}) \quad (10-34)$$

于是完整晶体的 (10-28) 式，变成：

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\phi_0}{dz} &= \frac{i\pi}{\xi_0} \phi_0 + \frac{i\pi}{\xi_g} \phi_g \exp(2\pi i s z + 2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}) \\ \frac{d\phi_g}{dz} &= \frac{i\pi}{\xi_g} \phi_0 \exp(-2\pi i s z - 2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}) + \frac{i\pi}{\xi_0} \phi_g \end{aligned} \right\} \quad (10-35)$$

吸收有两种类型：一是均匀吸收，随深度增加，引起强度普遍降低；另一是反常吸收，包括在晶体中某些电子的选择性吸收，它是晶体缺陷衍射象深度不对称性的重要原因。考虑上述两种吸

收,只需在上式中的 $1/\xi_0$ 和 $1/\xi_g$ 中分别引进一个虚数项即可,即作替换: $1/\xi_0 \rightarrow 1/\xi_0 + i/\xi'_0$, $1/\xi_g \rightarrow 1/\xi_g + i/\xi'_g$ 。 ξ_0/ξ'_0 称为均匀吸收参数,它反映吸收对衍衬象背景强度的影响; ξ_g/ξ'_g 称为反常吸收参数(ANO),它是形成衍衬象许多精细结构的重要来源。ANO的数值通常取为0.1,但Humphreys和Hirsch 1968年指出,它是原子量和操作反射的函数。在精确计算象衬时,必须考虑ANO。

对(10-35)式可以这样理解:由于缺陷在晶体中引起畸变,对振幅引进了一个相位因子 $\exp(-i\alpha)$, $\alpha = 2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}$,此相位因子附加在完整晶体情况下的振幅上,亦即位移使散射波相位改变 $\exp(-2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{R})$ 。在(10-35)式的第一个式子中, $\exp(+2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R})$ 表示衍射波对透射波的散射;第二个式子中,相位因子 $\exp(-2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R})$ 表示透射波对衍射波的散射引起的相位变化。因此,当用物镜光栏挡去衍射电子成明场象时,可以得到含有某些暗的区域的衍衬象,这些暗区域反映了相位因子对 ϕ_0 和 ϕ_g 的影响。

通过下述代换,以消去(10-35)式中的 ξ_0 ,则这组式子的物理意义更为明显。令

$$\begin{aligned}\phi'_0 &= \phi_0(z) \exp(-\pi i z / \xi_0) \\ \phi'_g &= \phi_g(z) \exp(2\pi i s z - \pi i z / \xi_g)\end{aligned}$$

(10-35)式变成:

$$\left. \begin{aligned}\frac{d\phi'_0}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_g} \phi'_g \\ \frac{d\phi'_g}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_g} \phi'_g + 2\pi i \left(s + \mathbf{g} \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dz} \right) \phi'_g\end{aligned} \right\} \quad (10-36)$$

由(10-36)式的第二个式子可以看出,位错应变场以 $\mathbf{g} \cdot (d\mathbf{R}/dz)$ 形式对衍射振幅变化($d\phi'_g/dz$)施加影响。也就是说,由于位错的存在,使反射平面局部发生旋转,从而使偏离矢量由 s 变成了 $\left(s + \mathbf{g} \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dz} \right)$,即(10-34)式。而(10-36)式则相当于(10-30)式,不过(10-30)式中的 s 也变为 $\left(s + \mathbf{g} \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dz} \right)$ 罢了。因此,可以认为位错处局部衍射强度的增加,是由于反射平面局部旋转,以致厄瓦尔

德球较其它处更接近 $s=0$ 的条件, 从而局部增加了布拉格衍射强度。

上面引入 R 进行讨论的方式, 不仅适用于晶体中含有缺陷的情况, 只要晶体一部分相对另一部分有一个位移 R 就可以用 (10-35) 式来描述和计算它的象衬, 这是动力学用来计算象衬的基本关系式。应该指出, 动力学处理这个问题, 从发展过程看, 有过多种途径。(10-28) 和 (10-35) 式是把散射波描述成平面波进行讨论的 (Howie 和 Whelan, 1961; Takagi, 1962; Taupin, 1964); 也可以把散射过程处理成布洛赫波的形式 (Howie, 1963; Wilkens 1964), 前面已经简单提到; Wilkens 在 1966 年还对他从前的布洛赫波处理方式, 作了改进。处理方式虽有不同, 但结论是一致的。

关于象衬计算, Edington 曾作过一个简要的述评^[42], 他指出可以把晶体缺陷分成四大类: ① 局部区域存在应变场 (如由位错、错配沉淀等产生); ② 平面缺陷 (两个无畸变区的交界, 例如层错等); ③ 膜中的空位和气泡 (比较宏观的缺陷); ④ 消光距离也局部改变 (如共格沉淀)。对第 ① 种类型缺陷可以对 Darwin-Howie-Whelan 方程进行数值积分求解, 这时采用布洛赫波概念, 可以节省计算时间, 而采用经过改进的布洛赫波概念的微分方程, 对计算慢变化应变场的衬度比较合适 (Wilken 等 1967; Ohik 等 1967)。第 ② 和第 ④ 种类型缺陷, 一般伴有点阵应变, 在理想条件下, 最好是对缺陷-基体界面处的某一适当边界条件求解 Howie-Whelan 方程, 这时用散射矩阵方法计算, 比较方便 (Howie 和 Whelan, 1961; Amelinckx, 1970)。

采用 (10-28) 和 (10-35) 式计算象衬时, 涉及到下列基本参数: (1) 操作反射 g ; (2) 偏离参数 s , 它和 g 一样, 通过倾斜试样控制; (3) 消光距离 ξ_g , 它随 g 的增大而增大, 随 s 的增大而减小, 有时采用 $\omega = \xi_g s$ 代替 s ; (4) 反常吸收系数, $ANO = \xi_g / \xi'_g$, 它和操作反射、原子序数及材料的结构有关。Humphreys 和 Hirsch 1968 年曾计算过立方结构材料的 ANO 值。前已指出, ANO 对具有条纹衬度特点的衍衬象是很敏感的, 例如对层错衬度的影响, 但

对非条纹衬度特点的缺陷象衬，却不那么敏感。例如位错衍衬象上就不容易看出 ΔNO 的影响，可以近似地取 $\Delta NO=0.1$ 来计算。

借助于 g 和 s ，并且如果有充分可靠的 ξ_g 和 ΔNO 数据，就可以对晶体缺陷的象衬进行定量分析。

图 10-21 是双相不锈钢中层错的衍衬象^[59]。(a) 为明场象；(b) 是强 $\bar{2}20$ 反射暗场象。注意 A、C 相应部位，可以看到明场下外侧条纹衬度对称，暗场则由于吸收效应，外侧条纹衬度不对称。利用这种现象可以决定膜的上下表面，确定层错的性质。有关这一问题详见下一章讨论。

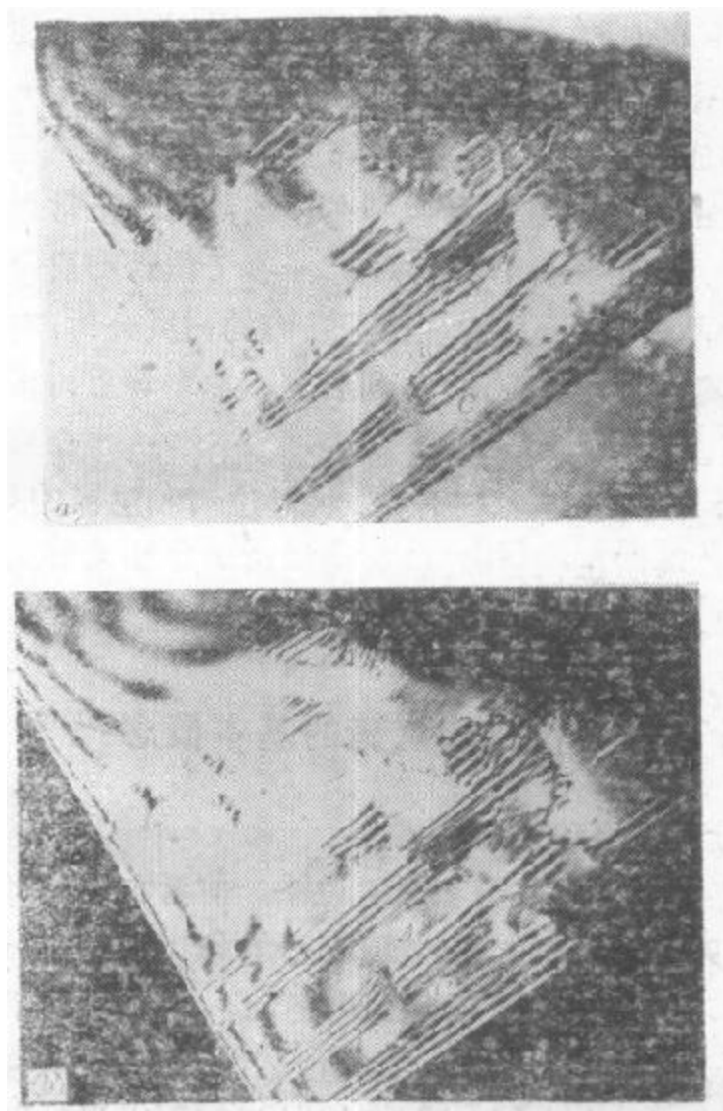


图 10-21 双相不锈钢中的层错
(a) 明场象；(b) ($\bar{2}20$)暗场象

第十一章

晶体缺陷的衍衬分析

§ 11-1 引言

广义地说,晶体缺陷包括位错、层错、晶界、孪晶界、第二相析出物、成分不均匀性、空位、亚微观孔洞等。总之,一切破坏正常点阵周期性的微观或亚微观结构,均可称为晶体缺陷。上一章已经指出,衍衬成象,实质上是选择布拉格衍射成象。可见一切破坏点阵周期性的结构,都将导致所在区域与周围正常区域在衍射条件上的差异,从而显示出不同衬度。鉴于位错和层错是最具有代表性的两种晶体缺陷,只要掌握了它们的衬度分析,对分析其它晶体缺陷时,就可以触类旁通,得到启发。本章着重讨论位错和层错的衍衬分析。

作为预备知识,本章一开始,将对位错和层错的基本概念,进行扼要介绍,以期在较短时间内,帮助读者尽快掌握衍衬分析时所必需的知识。

§ 11-2 位错和层错的基本概念^[61, 62, 63]

一、刃型位错和螺型位错

位错可分为刃型位错和螺型位错。前者布氏矢量($\vec{b}$)垂直于位错线,它只能在所在的滑移面内运动;螺型位错布氏矢量平行于位错线,它不一定在一个滑移面内运动。当位错运动到晶体表面时,就形成宏观的滑移台阶,或称滑移线,而许多滑移线则组成滑移带。刃位错可以在由 $\vec{b}$ 与位错组成的滑移面内滑动[图11-1(a)];也可以通过空位或原子扩散,在垂直于滑移面的方向上进行攀移

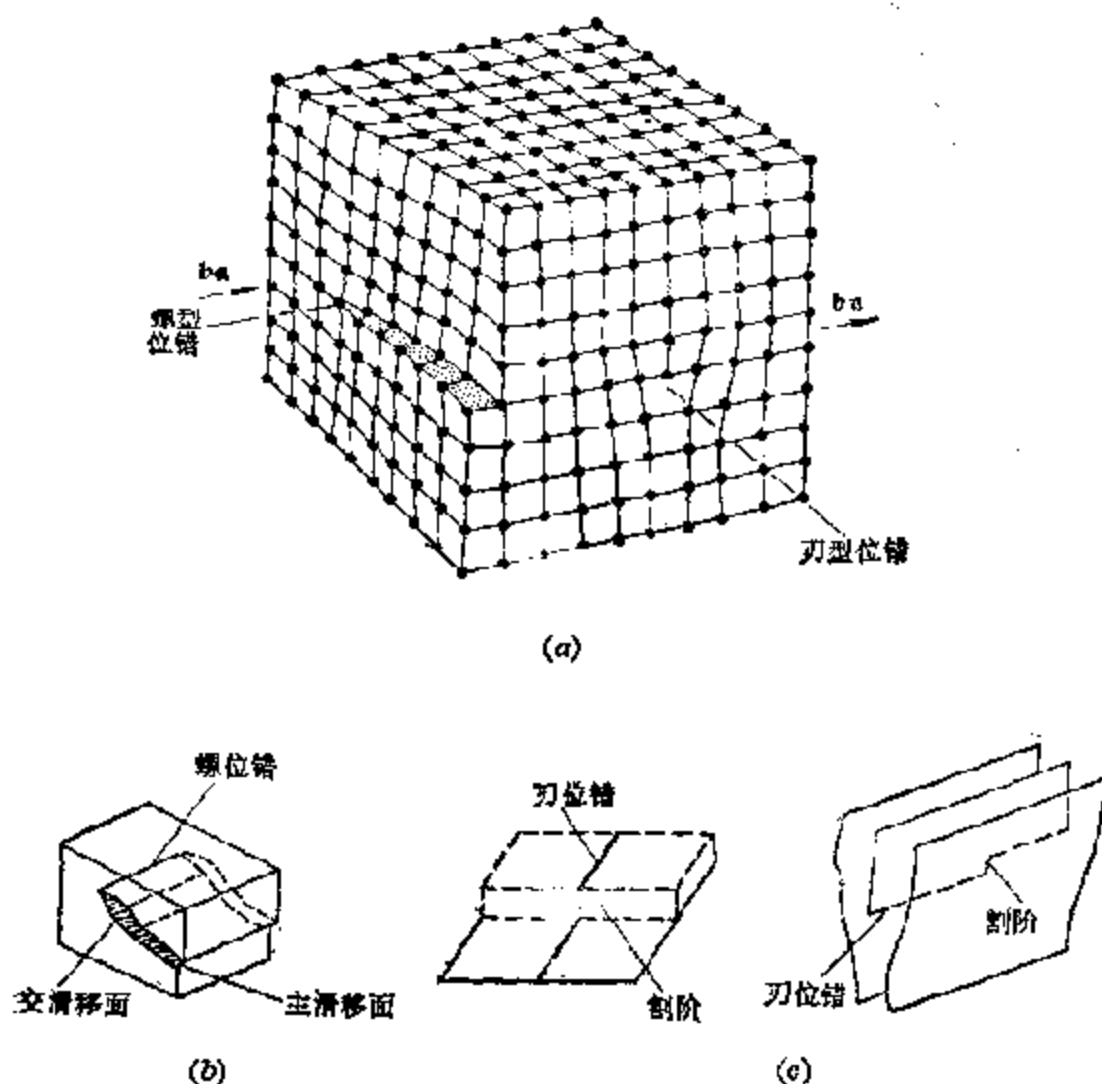


图 11-1 位错

(a) 刃型位错和螺型位错; (b) 螺型位错的交滑移过程;
(c) 刃型位错在垂直于滑移面方向上攀移

[图11-1(c)]。攀移过程中形成割阶,可以将割阶视为与主位错不在同一滑移面内但具有相同布氏矢量的一段短位错。螺位错则可以向另一滑移面上运动,但在前、后两个滑移面上的滑移方向相同[图 11-1(b)],这个过程称为交滑移过程。

通常所见到的位错,很少是纯刃型或纯螺型的,称为混合型位错,其布氏矢量与位错线成一角度,可以分解成刃型分量和螺型分量。例如位错圈,有的部分是刃型的,有的部分是螺型的,还有些部分是混合型的。当位错环只能在以布氏矢量为轴的棱柱面上

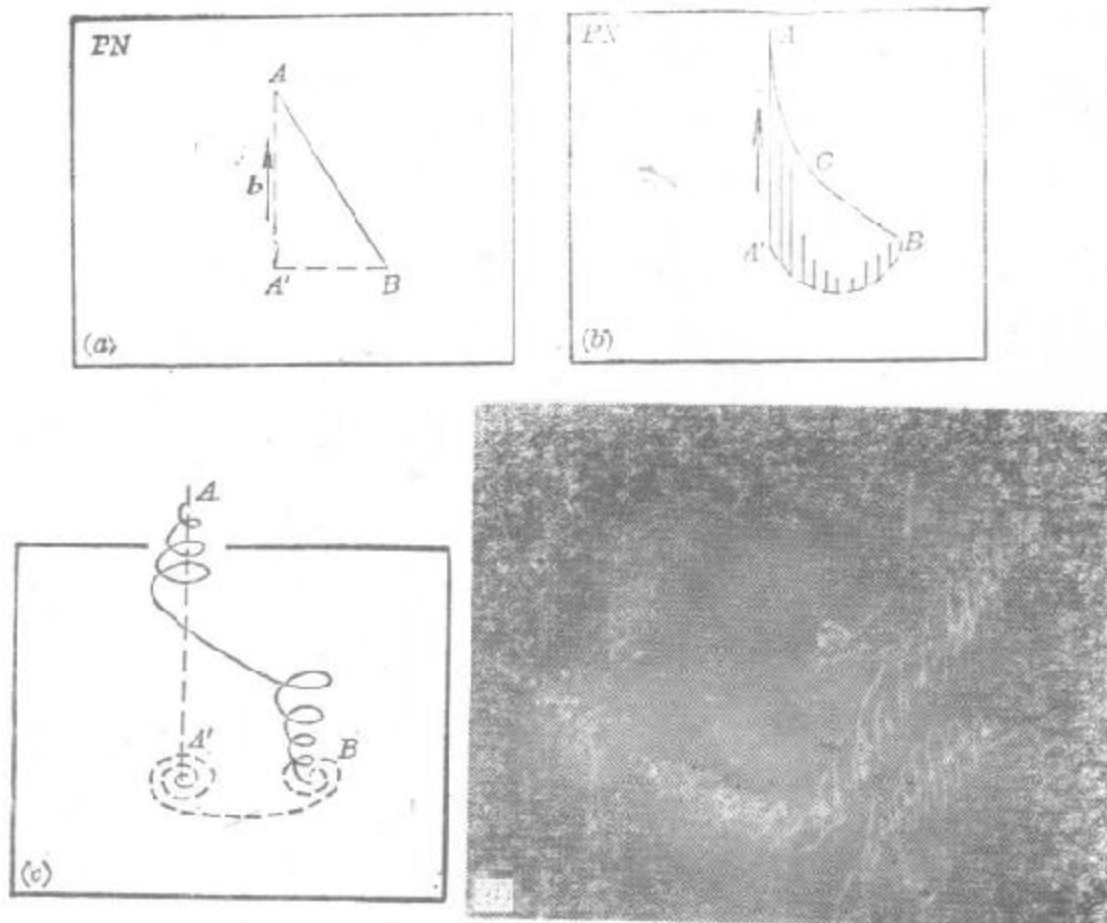


图 11-2 晶体中的螺线位错

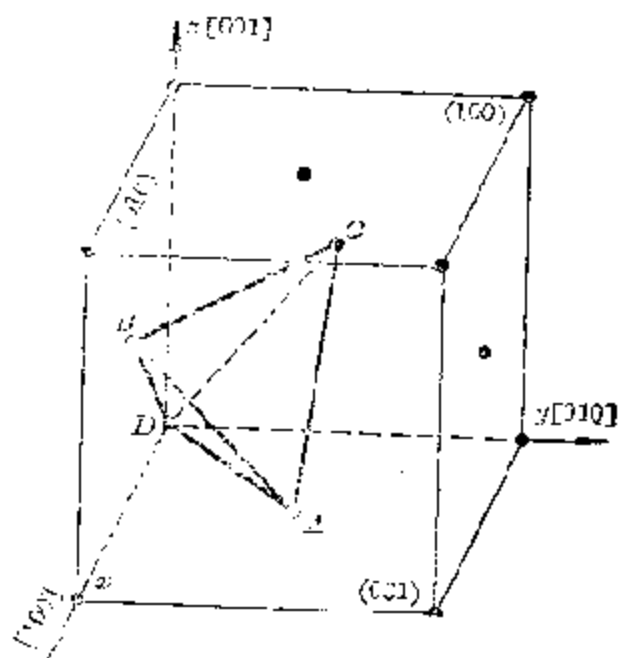
(a)、(b)、(c) 螺线位错形成示意；(d) Al-Mg-Cu 合金中的螺线位错(暗场)

的滑移面上滑移时, 这种位错称为棱柱位错。

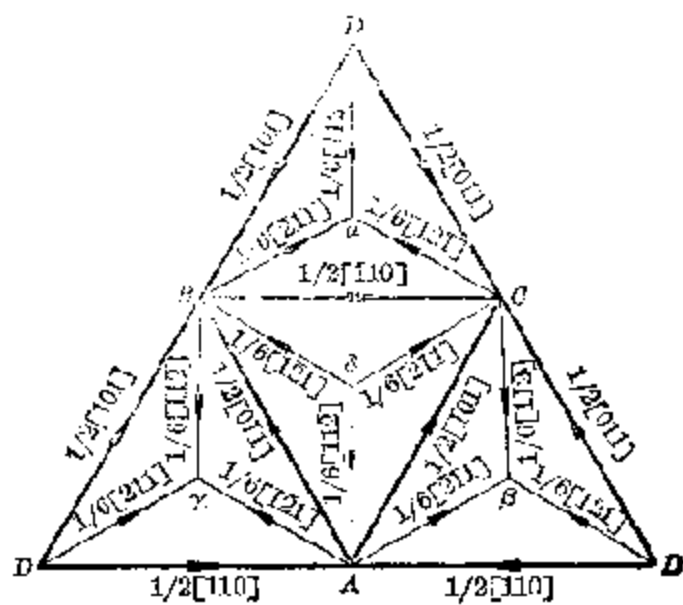
在衍衬工作中, 还常见到一种成螺旋状的螺线位错, 它可以理解为混合位错通过攀移形成的。如图 11-2 所示, 设有位错 AB , 它在 PN 面上的投影为 $A'B$, 其布氏矢量 $\mathbf{b}$ 垂直于 PN 面, 见图 (a); 由于攀移, AB 变成弧线 ACB , 它在以 $\mathbf{b}$ 为轴的一个柱面上, 并且能在此柱面上滑移, 见图 (b); 攀移过程继续进行, 使原来的 AB 位错, 变成了螺线状位错, 见图 (c)^[65]。G. Thomas、J. Nutting^[66] 及 R. B. Nicholson^[67] 曾分别在 Al-4% Cu 合金中观察到这种位错。

二、汤普森标记法

这是一种表示面心立方金属中全位错和不全位错(也称孪位



(a)



(b)

图 11-3 汤普森标记法

(a) 面心立方晶体中滑移系统所在四面体; (b) 四面体的展开

错)布氏矢量晶体学关系的标记方法。借助它,可使我们在分析面心立方晶体中的位错反应时,有一个较为清晰的概念。它是汤普森(Thompson)在1953年提出的^[68],其表示方法如图11-3所示。

图11-3(a)为面心立方晶体单胞,以A、B、C、D分别标记(001)、(010)、(100)三个面的面心及原点,它们的坐标分别为 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 及(000)。以ABCD为顶点连成一个四面体,各顶点相对的面分别标为(a)、(b)、(c)和(d)。即四个滑移面为:(a)=(11 $\bar{1}$), (b)=(1 $\bar{1}$ 1), (c)=($\bar{1}$ 11), (d)=(111)。显然,此四面体的六个棱就是滑移方向,即:

$$AB = \frac{1}{2} [0\bar{1}1], DC = \frac{1}{2} [01\bar{1}], AC = \frac{1}{2} [\bar{1}01]$$

$$DB = \frac{1}{2} [10\bar{1}], BC = \frac{1}{2} [1\bar{1}0], DA = \frac{1}{2} [\bar{1}10]$$

注意此 $\frac{1}{2}$ 表示括号内方向长度的二分之一,例如,AB也可理解为此矢量在三轴上的投影,即 $[0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}] = \frac{1}{2} [0\bar{1}1]$;它并非立方体单胞边长的二分之一。上述六矢量及对应的反号矢量,就是面心立方晶体十二个全位错的布氏矢量。

如图11-3(b),将(a)、(b)、(c)、(d)四个面的中心依次表示为 α 、 β 、 γ 、 δ ,那么四个n矢量(垂直于{111}面的矢量,习惯上称为n矢量)为:

$$A\alpha = \frac{1}{3} [\bar{1}\bar{1}1], B\beta = \frac{1}{3} [\bar{1}1\bar{1}]$$

$$C\gamma = \frac{1}{3} [1\bar{1}\bar{1}], D\delta = \frac{1}{3} [111]$$

在<112>方向的滑移矢量,即不全位错布氏矢量为:

$$\delta A = \frac{1}{6} [11\bar{2}], \delta B = \frac{1}{6} [1\bar{2}1], \delta C = \frac{1}{6} [\bar{2}11]$$

$$C\beta = \frac{1}{6} [1\bar{1}\bar{2}], D\beta = \frac{1}{6} [121], A\beta = \frac{1}{6} [\bar{2}\bar{1}1]$$

$$D\gamma = \frac{1}{6}[211], \quad A\gamma = \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{2}1], \quad B\gamma = \frac{1}{6}[\bar{1}1\bar{2}]$$

$$Ba = \frac{1}{6}[\bar{2}1\bar{1}], \quad Ca = \frac{1}{6}[1\bar{2}\bar{1}], \quad Da = \frac{1}{6}[112]$$

三、全位错的分解及层错

图 11-4 所示是面心立方晶体中的滑移过程和全位错通过分解形成层错, 以及层错衍衬象的几何解释。所谓全位错, 就是布氏矢量等于点阵平移矢量的位错。

由图 11-3(a) 可知, 面心立方晶体最短的点阵矢量是连接立方体单胞角顶到面心处原子的矢量, 即 $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ 型矢量。这就是宏观看到的滑移方向。图 11-4(a) 是从垂直 $\{111\}$ 方向看 $\{111\}$ 面上的原子分布, 圆圈代表中层原子, 称为 A 位置; ∇ 表示 A 层上面一层的原子, 称为 B 位置; $\triangle$ 表示 A 层下面一层的原子, 称为 C 位置。宏观看到的是由左 B 到右 B 的方向, 但从能量上看, 比较容易实现的, 是从左 B 先到上面的 C , 再从 C 到右 B 。从左 B 到上面 C 的滑移第一阶段, 产生了 $\{111\}$ 面上的堆垛层错, 堆垛顺序由 $ABOABO\cdots$ 变成 $ABOACABC\cdots$, 但经过滑移第二阶段, 即从上面 C 到右 B , 晶体又恢复到正常的堆垛顺序 $ABOABO\cdots$ 。

对于 (111) 面内的滑移运动, Heidenreich 和 Shockley 提出用下述全位错的分解来表述:

$$\frac{1}{2}a[10\bar{1}] \rightarrow \frac{1}{6}a[2\bar{1}\bar{1}] + \frac{1}{6}a[11\bar{2}] \quad (11-1)$$

位错作上述分解, 在能量上是有利的。位错的能量正比于布氏矢量的平方。(11-1)式左侧全位错的应变能正比于

$$b^2 = \left[\frac{1}{2}a[10\bar{1}] \right]^2 = \frac{a^2}{2}$$

右侧二不全位错应变能正比于

$$b_1^2 + b_2^2 = \left[\frac{1}{6}a[11\bar{2}] \right]^2 + \left[\frac{1}{6}a[2\bar{1}\bar{1}] \right]^2 = \frac{a^2}{3}$$

因此, 反应由左向右进行, 能量降低。右方不全位错称为肖克

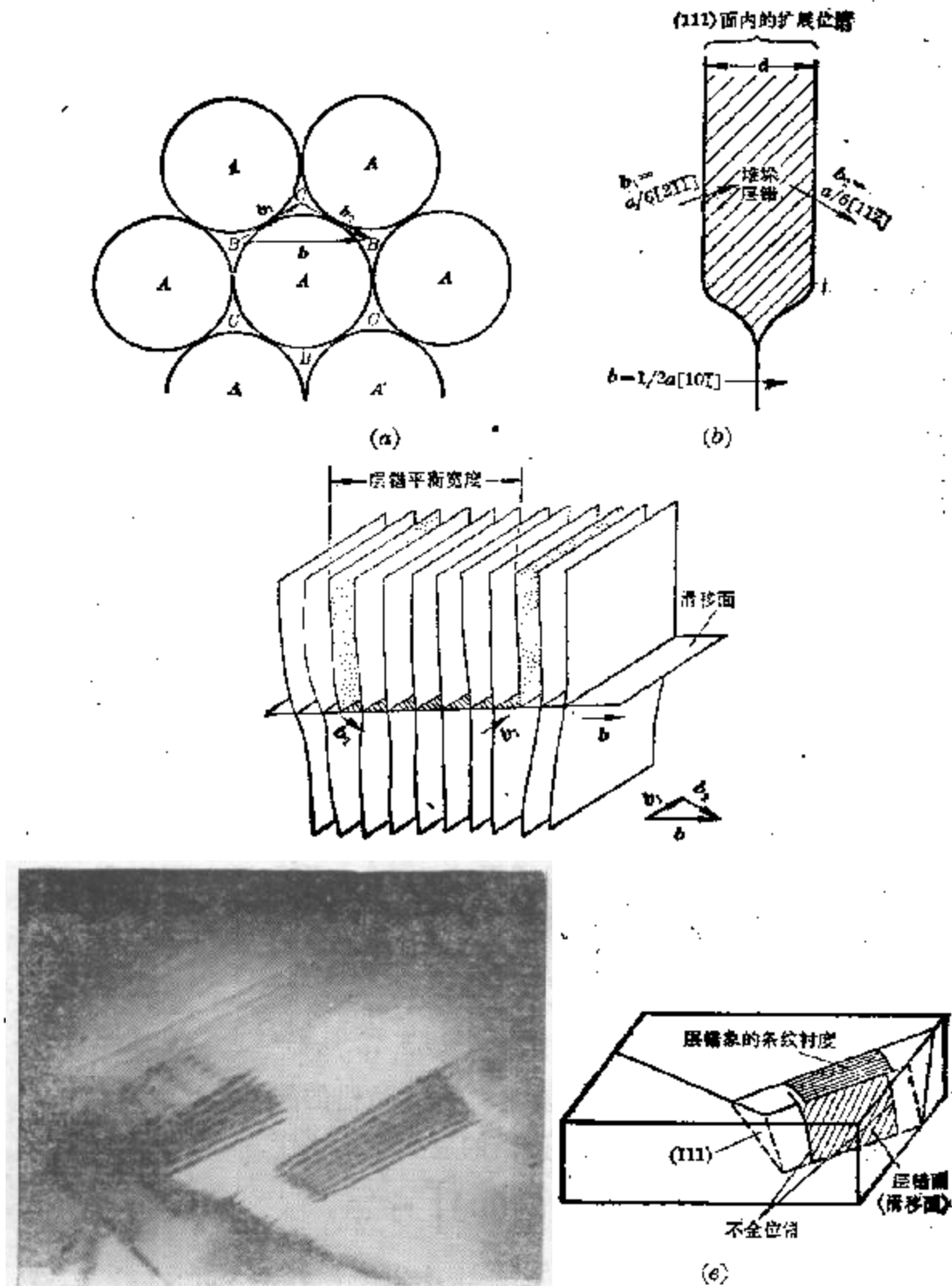


图 11-4 全位错的分解及层错的形成

(a) 滑移过程的分解： $b \rightarrow b_1 + b_2$ ；(b) 与(a)相对应的全位错分解；(c) 形成层错的原子面排列示意图；(d) 层错的电子衍射衬象^[7]；(e) 衍射衬象的几何解释

莱(Shockley)不全位错,它们互相排斥,斥力近似为:

$$F = \frac{\mu b_1 \cdot b_2 \cos 60^\circ}{2\pi d} \quad (11-2)$$

这就使在两不全位错之间的滑移面内形成一片堆垛层错。通常把两个不全位错连同夹在它们中间的层错,称为扩展位错。(11-2)式中, μ 为切变模量, d 是不全位错间的平衡间距(参见图 11-4b)。令 γ 为层错能(是单位面积上的能量,单位: 尔格/厘米²), 则 d 与 γ 之间近似有以下关系:

$$d = (\mu a^2) / (24\pi\gamma) \quad (11-3)$$

因此,层错能愈高, d 愈小,扩展位错中两不全位错愈不易扩展。在衍衬象中层错带宽度是材料层错能大小的一种量度。现将部分纯金属及合金的层错能数值列于表 11-1。纯金属可以通过合金化使层错能降低。

表 11-1 部分金属及合金的层错能(单位: erg/cm²)

金 属	层 错 能	金 属	层 错 能
银 (Ag)	20; 16.3±1.7 ^[66]	镍-17% 铝	90
金 (Au)	45; 32±5 ^[70]	锗 (Ge)	60±8 ^[71]
铜 (Cu)	75; 41±9 ^[69]	硅 (Si)	5±5 ^[72]
铜-10% 镍	35	α Co	25
铝 (Al)	135	Zn, Zr, Mg, Ti, Pb	250~300
镍 (Ni)	240		

层错能的大小是决定材料力学性能的一个十分重要的参数,其数值大小,决定着层错的宽度,而这种宽度又是决定材料在形变过程中,位错发生交截难易程度的因素。位错交截困难导致材料加工硬化。为了减少扩展位错对于位错交截造成的困难,不全位错应在割阶处先行收缩,然后发生反应。层错能大小也是交滑移难易的一种重要量度。交滑移过程要求位错处于螺型位错取向。若为扩展位错,则在交滑移之前,不全位错应有一部分先行收缩,这样才有可能交滑移到另一滑移面上去。许多实验指出,上述不全

位错收缩的过程是一个热激活过程。由此也不难理解,层错能愈高的金属,如铝的位错扩展就比较困难,交滑移比较频繁。当然,除热激活因素外,扩展位错处的应力集中,也有利于促使交滑移进行。例如位错塞积(pile-up)处端部,常使扩展位错宽度小于其平衡间距 d ,是有利于交滑移的。

四、固定位错(不动位错)

肖克莱不全位错的特点,是其布氏矢量位于层错面内,故这些不全位错可以在滑移面(如面心立方中的 $\{111\}$)上滑动。还有一类不可滑移的不全位错,例如空位聚集成空位片,其上下晶面崩塌而成的位错环[如图 11-5(a)]。这种位错环实际上是由布氏矢量为 $\frac{a}{8}[111]$ 的刃位错组成的。不难理解,由于环中少了一层原子,环中包围着一片层错,它们不能随位错而运动,所以亦称固定位错环。此外,若环不是由于空位聚集后,上下晶面崩塌而形成,而是由于间隙原子聚集,使局部区域新添了一个原子层,这时其周界仍是一个刃型位错环,中间也夹着一片层错,这种位错环也是不动位错。中间缺少一个原子层的位错环中的层错,称为内禀型或抽出型(intrinsic)层错;中间插进一个原子层形成的位错环中的层错,称为外禀型或插入型(extrinsic)层错(图 11-5)。上述两种位错环称为弗兰克(Frank)位错环。

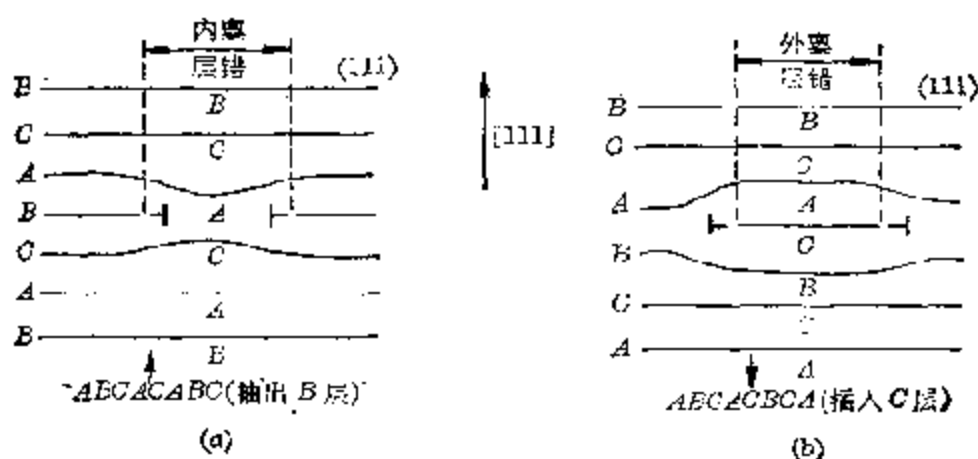


图 11-5 位错环

(a) 环中为内禀层错; (b) 环中为外禀层错

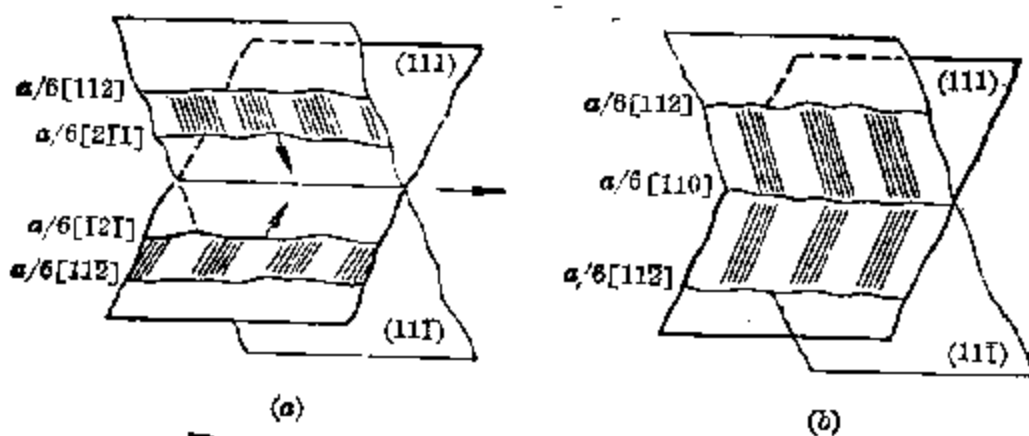


图 11-6 压杆位错(面角位错, Lomer-Cottrell 锁)的形成

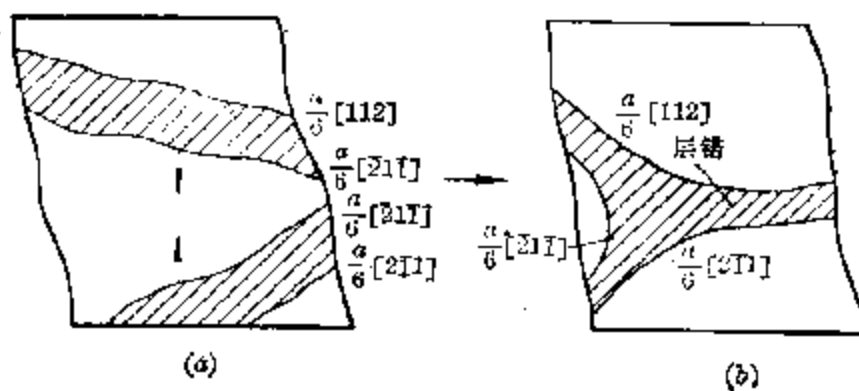


图 11-7 扩展位错节的形成

(a) 同一滑移面上的两个扩展位错; (b) 扩展位错相互接近形成一个扩展位错节; (c) 不锈钢中的扩展位错节

还有一种也被称之为固定位错的位错结构,叫做洛莫-柯垂耳锁(Lomer-Cottrell lock),这也是一种阻碍位错运动的障碍。它是在位错相交的两个 $\{111\}$ 面的两个扩展位错之间形成的。 $\{111\}$ 面内的领先不全位错与位于 $(1\bar{1}\bar{1})$ 面内的不全位错相互结合,形成一种被称为“压杆位错”(类似固定楼梯地毯的压杆)或“面角位错”,如图 11-6。其位错反应是:

$$\frac{a}{6}[2\bar{1}1] + \frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}] \rightarrow \frac{a}{6}[110] \quad (11-4)$$

五、扩展位错节

测量层错能的重要方法之一是利用扩展位错节。扩展位错节是这样形成的:在同一 $\{111\}$ 滑移面上,有两个扩展位错,如图 11-7(a),它们的一对不全位错都各自夹角一片层错,且其彼此靠近的一个不全位错的布氏矢量是相同的。当它们运动接近时,这对相同的不全位错便会合并在一起,最终形成扩展位错节,如图 11-7(b)。组成节的不全位错有一定的曲率半径,它是测量层错能的重要参数。图 11-7(c)为不锈钢中扩展位错节的衍衬象。

六、体心立方金属中的位错

在体心立方单胞中,最短的点阵矢量是连接立方体单胞角顶

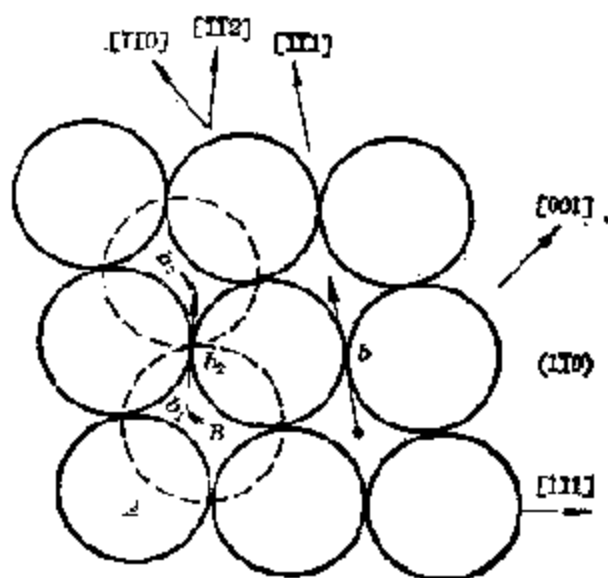


图 11-8 体心立方 (110) 面的原子排列

点到体心处原子的矢量,即 $a/2\langle 111 \rangle$,这就是宏观观察到的滑移方向。体心立方晶体的滑移面为 $\{110\}$ 、 $\{112\}$ 和 $\{123\}$ 。 $\{110\}$ 面是一个略有畸变的密排面,如图 11-8 所示。它的堆垛顺序是 $ABAB\cdots$, A 位置如实线圆, B 位置如虚线圆。沿每一个 $\langle 111 \rangle$ 方向,有三个 $\{110\}$ 面相交,以致

螺位错可以在这三个 $\{110\}$ 面中任意一个上滑动。这正是为什么在体心立方晶体中观察到的滑移线总是呈波浪形的原因；同时其滑移线的方向也因此难以确定。

从能量上考虑，体心立方的滑移过程，通过下述反应较易实现：

$$b \rightarrow b_1 + b_2 + b_3$$

或

$$\frac{a}{2}[\bar{1}\bar{1}1] \rightarrow \frac{a}{8}[\bar{1}\bar{1}0] + \frac{a}{4}[\bar{1}\bar{1}2] + \frac{a}{8}[\bar{1}\bar{1}0] \quad (11-5)$$

与面心立方情况相似，它也可以通过空位或间隙原子聚集而使两个 A 层或两个 B 层相遇，形成弗兰克不全位错。但由于纯体心立方金属层错能较高，至今还很少在这种金属中观察到层错。关于体心立方结构中的层错，表 11-2 的数据可供参考。关于 $\{112\}$ 层错的处理见文献 [74]。

表 11-2 bcc 结构中的层错^[73]

层 错 面	层 错 矢 量	层错能 (erg/cm ²)
$\{211\}$	$\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}1]$	180
$\{2\bar{1}\bar{1}\}$	$\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	180
$\{112\}$	$\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}0]$	1450
$\{100\}$	$\frac{1}{2}[\bar{1}00]$	200
$\{\bar{1}00\}$	$\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}0]$	600
$\{110\}$	$\frac{1}{2}[\bar{1}00]$	140
$\{\bar{1}\bar{1}0\}$	$\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}0]$	750

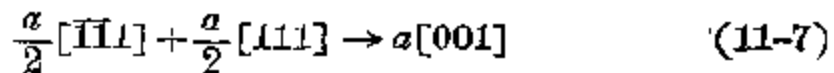
在 $\{112\}$ 滑移面内的全位错分解反应为：

$$\frac{a}{2}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}] \rightarrow \frac{a}{8}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}] + \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}] \quad (11-6)$$

我们已经知道(亦见第六章)，体心立方金属的孪晶面为 $\{112\}$ ，其孪生方向为 $\langle 111 \rangle$ 。即在体心立方晶体中产生孪晶，要求在 $\{112\}$

面内沿着 $\langle 111 \rangle$ 方向产生一个 $1/\sqrt{2}$ 均匀切变, 而这个切变过程是通过每一个相继的 $\{112\}$ 面的原子都位移 $\frac{a}{6}[11\bar{1}]$ 来实现的。可见, 孪生过程可以理解为由 (11-6) 式所表示的不全位错的运动所产生的。

体心立方晶体滑移带相交处, 还发现过 $a[001]$ 型位错, 它是下述反应的结果:



这个反应使能量由左侧的 $\frac{3}{2}a^2$ 降至右侧的 a^2 。 $a[001]$ 位错在 (001) 面内。

近年以来, 关于体心立方晶体中位错反应、位错结构的研究, 多数与该晶体中的孪生机制联系起来, 这对于研究体心立方金属和合金的形变过程是很有意义的。关于体心立方金属中通过位错反应产生层错的报导, 还可参考文献[75]。

七、六角结构晶体中的位错^[68]

六角结构晶体, 原子最密排面是基面 (0001) , 最密排方向是 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$; 最小点阵矢量是 a 。为了描述这种晶体的位错滑移矢量(布氏矢量)和面心立方的汤普森标记法, 选取四面体并命名各矢量相似, 在这里选取一个以 ABC 为底面的对称六面锥体 $TABCS$ (图 11-9a)。将三角形 ABC 的中点记为 σ , 于是得到许多矢量: AB 、 BC 、 CA 、 $A\sigma$ 、 $B\sigma$ 、 $C\sigma$ 、 AT 、 BT 、 CT 、 AS 、 BS 、 CS 以及 ST 等。这种晶系的滑移面有四: (0001) 、 $(10\bar{1}1)$ 、 $(11\bar{2}2)$ 和 $(10\bar{1}0)$, 它们分别标在图 11-9, 并用粗线表示。在小于或等于理想 c/a 值 (1.633) 金属中, 其公共滑移面是基面 (0001) , 滑移方向是 AB 型的, 例如 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 。但有时不是基面的 AB 方向, 而是其它滑移面, 例如 $(10\bar{1}1)$ 、 $(10\bar{1}0)$ 上的这个方向。还有一个滑移系统, 就是图 11-9(b) 所示的 $(11\bar{2}2)[AB+ST]$ 。一般说来, 当 c/a 值略小于 1.633 时, 滑移取 $(1\bar{1}00)AB$, 或 $(0001)AB$; 较小的 c/a 值, 则多取 $(10\bar{1}0)ST$ 系统, 参见表 11-3。

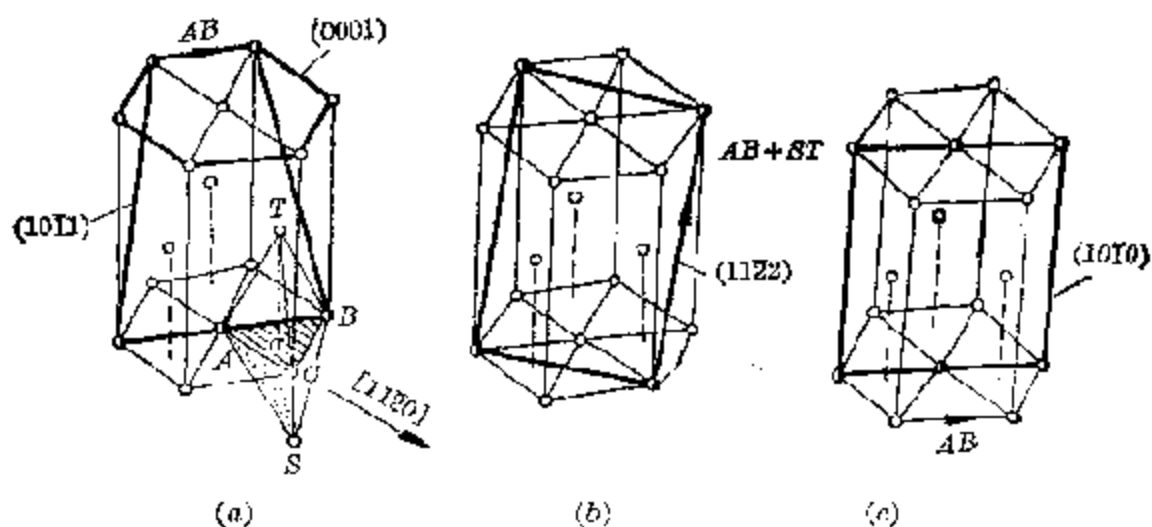


图 11-9 六角密排结构中的滑移面
(a) (0001)、(1011); (b) (1122); (c) (1010)

表 11-3 六角结构金属的滑移系统^[6]

金 属	c/a 值	滑移方向	滑移平面(可能性依次递减)
Zn, Cd	小于理想的 c/a	$\angle B$ $\angle B+ST$	$[11\bar{2}0]$ (0001) $(1\bar{1}01)$ $(1\bar{1}00)$ $[11\bar{2}3]$ $[11\bar{2}2]$
Ti	略小于理想的 c/a	$\angle B$	$[11\bar{2}0]$ $(1\bar{1}00)$ (0001)
Li	远小于理想的 c/a	$\angle B$ ST	$[11\bar{2}0]$ (0001) $(1\bar{1}01)$ $(1\bar{1}04)$ $[0001]$ $(10\bar{1}0)$

关于六角结构晶体中的位错类型可简要归纳如下:

1. 全位错

$\angle B$ 型六条: AB 、 BO 、 CA 、 BA 、 OB 、 AO , 布氏矢量 $\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 。

ST 型两条: ST 、 TS , 布氏矢量 $\langle 0001 \rangle$ 。

SA/TB 型十二条: 布氏矢量 $\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 。

2. 不全位错

(1) 布氏矢量均在基面上的 $A\sigma$ 、 $B\sigma$ 、 $C\sigma$ 及其负矢量共六条; 它们可以通过 $AB \rightarrow A\sigma + \sigma B$ 反应产生。

(2) 垂直于基面的四条, 即 σS 、 σT 、 $S\sigma$ 、 $T\sigma$, 大小为 $c/2$ 或 $\frac{1}{2}\langle 0001 \rangle$ 。

(3) 基面不全位错和非基面不全位错结合而成的十二条, 即 AS 、 BS 、 CS 、 AT 、 BT 、 CT 及其负矢量, 大小为 $\frac{1}{6}\langle 20\bar{2}3 \rangle$ 。

上述位错的相对能量列如表 11-4。

表 11-4 密排六方晶体位错的布氏矢量及其能量

布氏矢量	Miller-Bravais 标 记 法	相 对 能 量	位 错 类 型
AB	$\frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}0]$	a^2	全位错
ST	$[0001]$	$c^2 = \left(\frac{8}{3}\right)a^2$	全位错
$AB-ST$	$\frac{1}{3}[\bar{1}1\bar{2}3]$	$a^2 + c^2 = \left(\frac{11}{3}\right)a^2$	全位错
$A\sigma$	$\frac{1}{3}[\bar{1}100]$	$\frac{1}{3}a^2$	Shockley 不全位错
σB	$\frac{1}{2}[0001]$	$\frac{1}{4}c^2 = \left(\frac{2}{3}\right)a^2$	Frank 不全位错
AS	$\frac{1}{6}[\bar{2}0\bar{2}3]$	a^2	Frank 不全位错

六角结构中的全位错也会发生分解, 常见的是基面内 AB 型位错分解为肖克莱不全位错:

$$AB \rightarrow A\sigma + \sigma B$$

即

$$\frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}0] \rightarrow \frac{1}{3}[\bar{0}1\bar{1}0] + \frac{1}{3}[\bar{1}100] \quad (11-8)$$

与面心立方结构中全位错的分解相似, 在右侧两个不全位错间夹角一片层错。在六角的结构中已经观察到这种基面内全位错的分解, 这时钴经历了由 β -Co 到 α -Co 的相变, α -Co[注]的 $c/a=1.632$, 接近于标准值, 层错能甚低 ($\gamma=25$ 尔格/厘米²)。至于其它高层错金属如六角 Zn、Cd、Mg、Ti、Be 等, 由于 γ 很高 (250~300 erg/

[注] 有些文献将六角结构的 Co 称为 ϵ -Co。

cm^2), 尚未观察到象 $\alpha\text{-Co}$ 那样的内禀层错。可以推断, 这些金属即使有层错, 也不会扩展得太宽, 实验指出, $a/a < 1.633$ 时, 有利于基面位错的分解。

与面心立方结构中情况相似, 也可能通过空位或原子聚集, 在空位片或原子片周围形成弗兰克位错环, 但形成这样一种弗兰克位错环在能量上是不利的。如果能够形成位错环, 其布氏矢量是 $4S$ 型即 $\frac{1}{6}[20\bar{2}8]$ 型的(内禀型), 或 $S\sigma$ 型即 $\frac{1}{2}[000\bar{1}]$ 型的(外禀型)。借助于空位或间隙原子扩散, 可以使位错环的位错发生攀移, 从而使环的直径扩大或缩小, 这种现象已在 Zn 、 Mg 、 Cd 中观察到。

上面我们介绍了三种主要晶体结构中的位错、层错结构及反应, 这种叙述, 当然远不是全面细致的, 只是为了在下面介绍位错和层错的衍衬分析时, 作必要的准备。更深入的了解, 读者可参考推荐的专著^[63]。

§ 11-3 位错和层错的衍衬分析

一、衍衬分析所需基本数据和实验条件

1. 衍衬分析基本数据的获得

在进行衍衬分析以前, 应获得如下数据:

- ① 试样的正确取向, 包括区别上、下表面;
- ② 确定操作反射矢量 σ ;
- ③ 确定偏离矢量 $\mathbf{s}$ 的大小和正负;

④ 计算相应于 σ 的消光距离 ξ_g (或查表, 例如附录八), 并计算膜厚。

上述数据的测定方法, 在前面有关章节均已详细讨论, 但为便于叙述, 再略予综合介绍:

(1) 精确测定试样取向

它包括三个问题: ① 当试样并不倾斜, 表面垂直于电子束方

向时,则精确测定试样膜面法线的取向 FN , 仅依靠单晶斑点衍射谱是不够的, 而必须借助菊池线和高阶劳厄区衍射谱; ② 排除 180° 任意性, 其方法详见 § 5-3; ③ 决定膜的上、下表面, 可利用 s 不准确等于零时, 暗场象上由于异常吸收效应引起的层错条纹衬度的不对称性。Bell 和 Thomas 1965 年指出^[77], 当 $s > 0$ 时, 膜的下表面较上表面有较强的衬度; 而当 $s < 0$ 时, 上表面较下表面有较强的衬度。此外, 利用倾斜台倾斜试样, 观察某些结构特征投影宽度的变化, 也有助于鉴别上、下表面。

只有当试样取向精确测定以后, 结构特征(如位错、层错平面等)在膜中的倾斜方向也就确定了。这对于衍衬分析, 例如测定应变场方向、位错在膜中的方向, 都是十分必要的。多种衍衬分析, 均应尽可能使视场选在厚度为 $5 \sim 8\mu$ 的均匀区域, 并避开弯曲消光轮廓。

如有条件, 还可利用立体显微术, 以获得缺陷在试样中的深度分布。在获得立体对时, 由于一般只沿菊池带倾动 $8 \sim 10^\circ$, 故对衍射条件不会有明显改变。

作衍衬分析时, 总是将显微象与衍射谱联系起来讨论, 因此必须依据衍射谱对显微象作转角校正(详见 § 3-4)。校正时须将二者底片的乳胶向上, 使衍射谱相对于显微象旋转 180° 加上旋转角, 而不能只旋转用氧化钼测得的转角。不同型号电镜, 旋转方向不同, 如: 西门子公司电镜为顺时针方向, JEM7 则为逆时针方向, JSEM200B 为顺时针方向。由于转角未校正或校正不正确, 致使取向分析发生错误的情况也不是个别的。因此只有对转角经

是决定 s 符号的一种简便办法。通常规定, $s > 0$ 时, 菊池线在相应衍射斑点的外侧; $s < 0$ 时, 菊池线在相应斑点内侧。前者, 倒易点在反射球内, 后者, 倒易点在反射球外 (参见 § 8-4)。至于 s 值的测定, 则将在第十三章中介绍。

(3) 膜厚测定

测量点缺陷或位错密度时, 必须利用膜厚数据。其测量方法有:

1) 利用贯穿上、下膜表面的结构特征 (如滑移面、层错面、沉淀物等), 用迹线方法测量膜厚 (§ 9-4)。

2) 用会聚束方法或布拉格轮廓条纹, 根据次极大条纹间距测量膜厚^[78]。

3) 采用 M. von Heimendahl 1973 年提出的方法^[79], 设法将一或两个已知直径的 latex 球置于观测区的上、下表面, 拍照后进行计算, 求出膜厚。后一次拍照须使试样作已知角度的倾斜, 根据球的投影尺寸, 可间接计算膜厚。此法的测量精确度可近似达到 4%。

4) 根据等厚消光条纹数进行计算 (§ 9-4)。

2. 衍衬实验条件的确定

(1) 为了便于应用双束动力学理论对衍衬像进行解释, 应借助倾动台倾动试样, 获得双束衍射条件, 而且最好形成系列反射条件。但这是有困难的。因为能否作到这一点, 不但与倾动台的性能有关, 还与加速电压及试样本身条件有关。检查办法是观察电子衍射花样, 尽可能做到除透射斑点外, 只有一个较强衍射斑点。

(2) 明场象取 s 略正向偏离布拉格位置, 即亮菊池线稍位于相应斑点外侧, 而不要取 $s = 0$ 或 $s < 0$ 。这样可获得较好的衬度, 缺陷成象也较明锐清晰。而 $s < 0$, 虽然整个象的背景强度较低, 但对比度 (衬度) 却差了。根据作者的经验, 明场象取 $\omega - \xi, s \approx 0.2 \sim 1.0$, 可得到较好结果; 暗场象, 取 $\omega \approx \pm 1$ 即可。如有意要与明场像进行比较, 则 ω 的取值可与明场下的 ω 对应。

(3) 避免在过薄的区域 (例如小于 $2 \sim 8\xi_s$) 进行观察。因为在

这些区域,许多缺陷由于基体材料对它们的约束应力松弛,将重新分布,甚至从表面逸出一部分。我们对镍基高温合金的工作指出,当操作反射为 $\{111\}$ 时,观察区域厚度不得薄于 $1000 \text{ \AA}$;一般合金钢取 $\{110\}$ 型反射时,不得薄于 $1200 \text{ \AA}$ (以上均指 100 kV 加速电压)。读者可以通过实验确定最佳厚度。总之,不一定找最透明的区域进行观察,特别是当测定位错或空位密度时,尤其如此。一般 100 kV 下,如取低指数反射,观察区域的合适厚度,约为 $5 \sim 8\xi_g$,如果加速电压增高,例如 200 kV ,可以提高到 $\sim 10\xi_g$ 。此外,还应避免在厚度急剧变化的部位(例如在太接近孔洞边缘处)进行观察,因为这些部位受厚度条纹干扰,将使象的轮廓模糊不清。

(4) 为了获得理想的穿透能力,应选择合适的操作反射。例如六方晶系金属, $\{2\bar{2}00\}$ 反射较 $\{1\bar{1}00\}$ 反射有更大的穿透深度。选择操作反射时,可以用一个事先准备好的不同材料消光距离表作参考。一般说来, ξ_g 愈大, $\omega - \xi_g s$ 也愈大,穿透性就较差。

掌握上述条件,对衍衬工作者来说,是十分重要的。一个优秀的衍衬工作者,必须善于判断试样在观察时所处的状态。当试样观察区域接近下述条件时,处于运动学状态:比较薄(特别透明),即小于 $\xi_g/2$ 或 $\omega \gg 0.3$;双束条件,但亮菊池线远离相应反射斑点,即 $\omega \gg 1$ 。可见观察时离不开消光距离 ξ_g ,并应能迅速正确判断衍射谱的倒易面指数和强斑点即操作反射指数。亮菊池线远离斑点时,则试样取向已进入运动学状态。操作反射指数愈高,亮菊池线只要稍微偏离斑点一点点,就足以使 ω 大到进入运动学状态。动力学条件可以粗略地、经验地归纳为:明场 $\omega = 0 \rightarrow 1$,暗场 $\omega = 0 \rightarrow \pm 1$ 。

二、位错布氏矢量的测定

衍衬象上晶体缺陷是否可见的判据,决定于(10-32)式中的位相因子:

$$\alpha = 2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{R} = N(2\pi) \quad (11-9)$$

N 可以为整数、分数或零,这取决于缺陷在晶体中引起的位移矢量 $\mathbf{R}$ 相对于反射矢量的取向关系。当 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R} = 0$ 时, $\mathbf{R}$ 在反射平面

内,即使有点阵位移,对 ϕ_g 也没有贡献,看不出衬度,因为这种位移不能改变反射平面的面间距,从而衍射束与透射束之间的程差也不因 $\mathbf{R}$ 而有所改变,故通常把 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R} = 0$ 作为缺陷是否可见的重要判据。倾斜试样后,缺陷由不可见到显示衬度,正是因为这时 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}$ 已不再等于零。在通常所见缺陷中, $\mathbf{R}$ 是位置的函数;而对层错,对一定类型层错来说, $\mathbf{R}$ 为一常数,即等于层错矢量。

观察时,应倾斜试样,使 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}$ 值足够大,以获得足够的衍射强度 $|\phi_g|^2$,才能显示出缺陷的衬度;通常只要求缺陷处的强度对背景来说,相差10%就可以了。例如要求位错可见, $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} > 1/3$ 即可。非整数值的 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}$,意味着 $\mathbf{b}$ 不是一个点阵平移矢量,在这些位错间常常夹着一片层错,也就是说这些位错多半是不全位错。

衍衬工作中经常遇到的晶体缺陷,例如位错、位错环、共格体缺陷如点缺陷团、空位、共格沉淀质点,面缺陷如层错、畴界(化学、磁、电和有序畴等)、孪晶界和相界面等,其衬度效应都可以利用上述判据进行分析测定。但是,应该指出, $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}$ 判据可以检测这些缺陷存在与否,也可以用来借助明暗场象,确定 $\mathbf{b}$ 。然而关于衬度现象细节的解释,例如强度、衬度随深度的变化,以及在准确布拉格位置下的衬度变化,多束的相互干涉等,则不能简单地依靠上述判据,而须借助于动力学理论。

为了更细致地讨论缺陷的可见性,往往需要把位移矢量 $\mathbf{R}$ 分解为沿倒易坐标的三个轴上的分量,

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_x + \mathbf{R}_y + \mathbf{R}_z \quad (11-10)$$

z 轴平行于电子束入射方向, x 、 y 轴同时垂直于电子束入射方向, x 、 y 、 z 三轴互成直角。

由(11-10)式,电子衍射下, $\mathbf{g}$ 恒垂直于 z 轴,故恒有 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}_z = 0$,因此,只有位于膜平面的两个位移分量对形成衬度才是重要的。螺位错由于 $\mathbf{R} \parallel \mathbf{b}$,因此当 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ 时,位错必定不可见;而对于刃位错,则就不这么简单了。参见图 11-10,只要从图上所示两种特例(电子束垂直和平行于滑移面),就足以说明问题。因为,这时对衬度起重要作用的,是布氏矢量 $\mathbf{b}$ 和位移矢量沿滑移面法线方

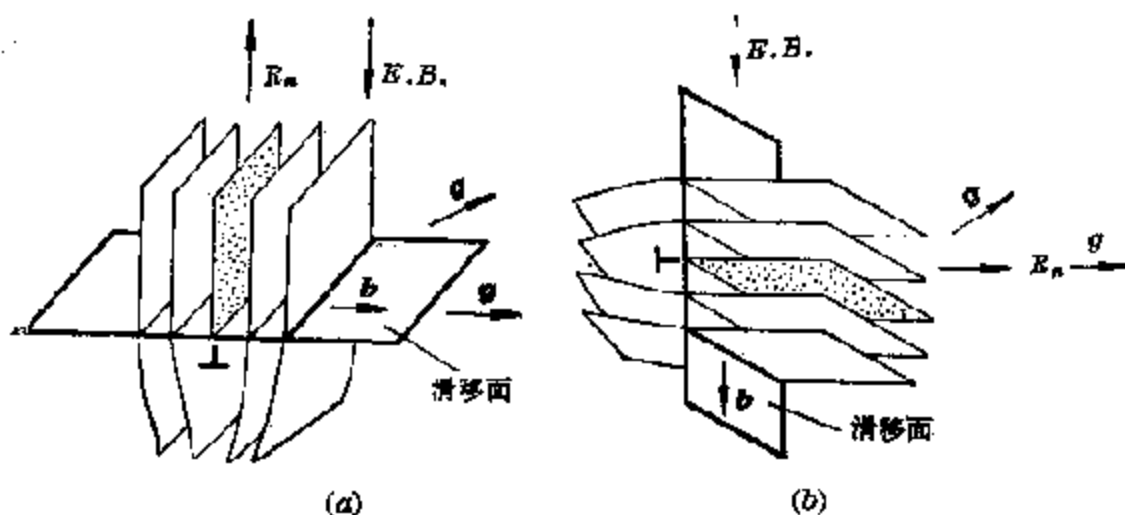


图 11-10 电子束相对于刃位错成不同取向

(a) 电子束 ($E.B.$) 垂直于滑移面; (b) $E.B.$ 平行于滑移面

向的分量 R_n 。在图(a)中, 电子束垂直于滑移面, 也即平行于半平面, 这时 $g \cdot R_n = 0$, $g \cdot b = n$ (整数, 包括 0), 位错仍可能有衬度。但在图(b), 电子束平行于滑移面, 即垂直于半平面, 这时 $g \cdot b = 0$, $g \cdot R_n = n$ (包括 0), 但由于存在着平行于滑移面法线方向的位移分量 R_n , 位错仍然有可能被看到。这就是说, $g \cdot b = 0$ 对刃位错并不一定是不可见的绝对判据, 而除非 $g \cdot b$ 和 $g \cdot R_n$ 同时都等于零。

图 11-10 所讨论的是滑移面垂直和平行于电子束的两种特例, 实际上则常常是滑移面相对于膜表面倾斜一定角度, 因此 $g \cdot b = 0$ 更不能作为位错不可见的唯一判据。

由上述讨论可以理解如图 11-5 所示的由纯刃位错围成的棱柱位错环, 当它们所在平面与膜面平行时, 整个环的各处都满足 $g \cdot b = 0$,

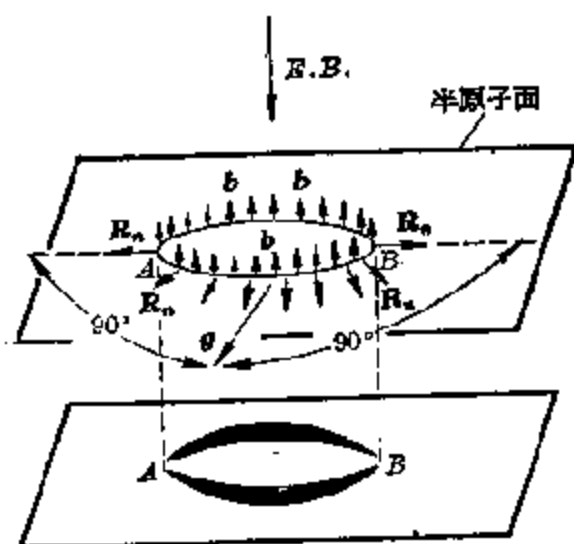


图 11-11 棱柱位错环的衬度效应示意图

但在有些线段还是可以看到“残余衬度”。这从图 11-11 所示的图

内可以得到进一步解释。该图上的 A 、 B 两处由于同时满足 $g \cdot b = 0$ 和 $g \cdot R_n = 0$, 所以不显示出衬度, 位错环在这里中断; 但在其它处, 虽然 $g \cdot b = 0$, 却因 $g \cdot R_n \neq 0$, 所以仍有衬度。这种效应在 Al-4% Cu 合金中已经观察到。Norris 在辐照镍中也观察到这种空位环, 如图 11-12^[98]。

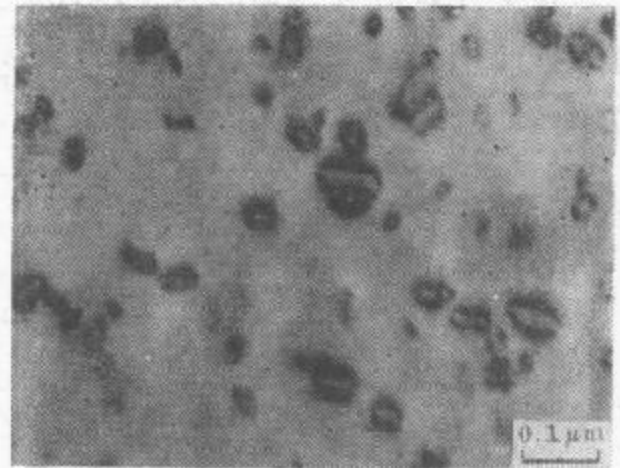


图 11-12 辐照镍中的空位环

同理可以解释当沉淀相在基体中形成球状应变场时, 衍衬象上出现的“零衬度线”衬度效应。这是

因为以沉淀质点为中心且垂直于 g 的平面上的应变分量 R_n 总是垂直于 g 的, 即 $g \cdot R_n = 0$ (如图 8-11)。一旦 g 改变, 此零衬度线的方向亦随之改变, 但始终保持 g 与零衬度线相垂直的关系。实验上时常利用这一点来区别沉淀质点与位错环。前者零衬度线为

白的直线, 且有一定宽度; 后者有衬度位错线段, 且总是呈弧形。

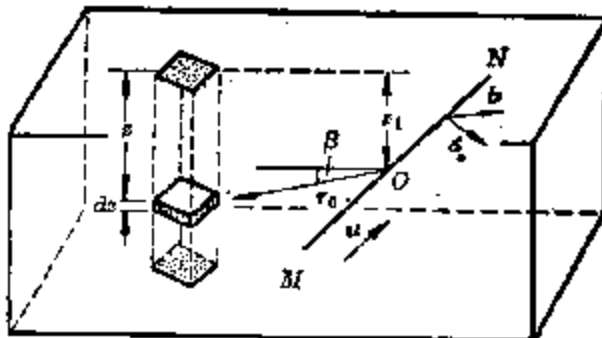


图 11-13 晶体中含有混合位错 MN

(图 11-13 中之 u) 成任意角度。这时位移矢量与布氏矢量的关系是:

$$R = \frac{1}{2\pi} \left[b\beta + \frac{b_e \sin 2\beta}{4(1-\nu)} \right] + \frac{b \wedge u}{2\pi} \left[\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \ln |r_0| + \frac{\cos 2\beta}{4(1-\nu)} \right] \quad (11-11)$$

式中, b_e 是位错布氏矢量的刃型分量; u 是位错在晶体中的方向;

r_0 是位错核心严重畸变区的半径, 一般 $\approx 10^{-8}$ cm; β 是坐标角; ν 是泊松比。

可见任意混合位错的衬度, 取决于 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}$ 、 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_e$ 和 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} \wedge \mathbf{u}$ 。只有当这三个标量积同时等于零时, 混合位错才不可见。如果是刃位错, 因 $\mathbf{b} = \mathbf{b}_e$, 则上式变成:

$$R = \frac{b_e}{2\pi} \left[\beta + \frac{\sin 2\beta}{4(1-\nu)} \right] + \frac{\mathbf{b}_e \wedge \mathbf{u}}{2\pi} \left[\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \ln |r_0| + \frac{\cos 2\beta}{4(1-\nu)} \right] \quad (11-12)$$

只有当 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_e$ 和 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_e \wedge \mathbf{u}$ 同时为零时, 衬度才消失。这就是说, $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ 不是刃位错衬度消失的唯一判据, 而还与位错在晶体中的方向 $\mathbf{u}$ 有关。如果是螺位错, $\mathbf{b} = \mathbf{b}_e$, $\mathbf{b}_e \parallel \mathbf{u}$, $\mathbf{b}_e = 0$, 故(11-11)式右边只剩下 $\frac{1}{2\pi} b\beta$ 一项, 即变成:

$$R = \frac{b}{2\pi} \beta = \frac{b_e}{2\pi} \beta \quad (11-13)$$

只要 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_e = 0$, 即有 $\alpha - 2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{R} - 2\pi \mathbf{g} \cdot \left(\frac{\mathbf{b}_e}{2\pi} \beta \right) = 0$, 位错衬度消失。这个结论在 § 10-3 中也已有指出。

表 11-3 弹性各向同性材料中位错衬度消失的条件

位错类型	位错在试样中的方位	衬度消失条件
螺 型	$\mathbf{u}$ 平行于试样表面	$\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_e = 0$
	$\mathbf{u}$ 倾斜于试样表面	$\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_e = 0$
刃 型	$\mathbf{u}$ 平行于试样表面	$\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_e = 0$
	$\mathbf{b}$ 平行于表面法线	$\left(m = -\frac{1}{\alpha} \right) \mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_e \wedge \mathbf{u} < 0.08$
	$\mathbf{u}$ 平行于试样表面 且 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_e \wedge \mathbf{u} = 0$	$\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_e = 0$
混合型	$\mathbf{u}$ 平行于试样表面	$\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$, 且 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_e = 0$

这里, 我们指出对于混合位错和刃型位错, $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ 不是判定衬度消失的唯一判据, 这当然是在比较严格意义上的结论。事实上, 当 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_e$ 和 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} \wedge \mathbf{u}$ 不等于零时只存在一个残余衬度; 由于衬度很弱, 我们仍把它看作是不可见的, 因而把 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ 仍然视为衬度消失的一个实际可行的有效判据。它在具体应用时也比较简便, 可用米测定近似各向同性材料的 $\mathbf{b}$ 方向。Howie 和 Whelan 在 1962 年曾经归纳了若干关于位错衬度消失的条件, 如表 11-5 所列。

对于弹性各向异性材料, 则对上述结论还必须进行一些修正, 甚至很难找到准确的条件。但是, Nye 在 1957 年曾指出, 即使是各向异性材料, 在某些特殊情况下, 如立方结构材料, 当纯刃型或纯螺型位错垂直于弹性对称平面 $\{110\}$ 和 $\{100\}$; 六方结构材料, 垂直于弹性对称平面基面以及与基面垂直的平面 (也是弹性对称平面) 时, 上述关于各向同性材料位错衬度消失的判据仍近似有效。

利用 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ 判据测定 $\mathbf{b}$ 的实验程序:

一般最少需要拍摄三张衍衬照片以及相应的衍射照片。三张照片对应三个不同的操作反射 $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$ 。 $\mathbf{g}_1$ 对应于某位错存在, $\mathbf{g}_2, \mathbf{g}_3$ 则对应于该位错消失。显然, 此位错的布氏矢量 $\mathbf{b}$ 既在 $(\mathbf{g}_1)$ 上, 也在 $(\mathbf{g}_2)$ 反射面上, 故 $\mathbf{b}$ 一定是 $(\mathbf{g}_2), (\mathbf{g}_3)$ 反射面的晶带轴方向, 即:

$$\mathbf{b} // [\mathbf{g}_2] \wedge [\mathbf{g}_3] \quad (11-14)$$

拍照时, 注意满足 $\omega - \xi_p \leq 1.0$ 的双束条件, 即在选区域电子衍射花样上, 亮菊池线应紧靠相应强衍射斑点的外侧。

例如, 某面心立方金属, 在 $\mathbf{g}_1 = [020]$ 时, 观察到沿 $[011]$ 方向的直线位错; 倾动试样, 在 $\mathbf{g}_2 = [200]$ 时, 上述位错消失; 再次倾动试样, 在 $\mathbf{g}_3 = [11\bar{1}]$ 时, 位错衬度仍消失。试测定 $\mathbf{b}$, 并决定位错的性质。

计算相应于上述三反射的 $\frac{1}{2} \langle 011 \rangle$ 型位错的 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}$ 值, 列于表 11-6。

表 11-6 对于三种不同操作反射 $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ 型位错的可能 $g \cdot b$ 值

照片号	g	b						位错可见与否
		$\frac{1}{2}[110]$	$\frac{1}{2}[101]$	$\frac{1}{2}[011]$	$\frac{1}{2}[\bar{1}01]$	$\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}0]$	$\frac{1}{2}[\bar{1}11]$	
1	020	1	0	1	0	1	-1	可见
2	200	1	1	0	-1	-1	0	不可见
3	11 $\bar{1}$	1	0	0	-1	0	-1	不可见

可见位错是布氏矢量为 $\frac{1}{2}[011]$ 的螺型位错。对 $g_1 = [200]$ 和 $g_2 = [11\bar{1}]$ 都满足 $g \cdot b_s = 0$, $g \cdot b \wedge u = 0$ 的条件。

应用此法测定 b 时应注意: 一是 $\omega \leq 1.0$, 二是尽可能选择低指数反射。Loretto 和 France 在 1969 年曾指出, 如 ω 过大, 即当 $\omega \geq 1.5$ 时, 则有可能使 $g \cdot b = 1$ 与 $g \cdot b = 0$ 的位错混淆。例如, 试样中同时存在两种位错, 对某一反射 g 来说, 一是 $g \cdot b = 1$, 另一为 $g \cdot b = 2$ 。为了使 $g \cdot b = 2$ 的位错明锐清晰, 有较强的衬度, 有时 ω 选值大于 1, 甚至接近 1.5, 这就有可能使 $g \cdot b = 1$ 的位错先于 $g \cdot b = 2$ 的位错消失, 以致把 $g \cdot b = 1$ 的位错误认作 $g \cdot b = 0$ 的位错, 得出错误的判断。因此除注意选择小的 ω 值外, 建议将位错象消失的照片增至三张, 就会有助于显露可能被遗漏的 $g \cdot b = 0$ 的位错。如果反射指数选择过高, 如 $\{310\}$ 、 $\{222\}$ 、 $\{321\}$ 、 $\{311\}$ 、 $\{331\}$ 和 $\{420\}$ 等, 则混淆的可能性, 尤其难于避免。

为便于衍射工作者在实验时进行分析, 现给出几种晶体结构金属低指数反射的可能 $g \cdot b$ 值表, 见表 11-7、11-8、11-9 所列。

对于已知材料, 位错结构大致清楚的布氏矢量, 还可采用简单办法进行测定^[68], 其步骤如下:

- 1) 拍下感兴趣的位错明场象和相应的选区域电子衍射谱。
- 2) 倾动试样使位错或其中某一段衬度消失, 随时观察相应的衍射谱, 直至位错衬度消失, 同时衍射谱上又有明显的操作反射

表 11-7 不同反射下, fcc 金属中 $b = \frac{a}{2} \langle 110 \rangle$ 型位错的可能 $g \cdot b$ 值⁽⁵⁰⁾

反射 g	$b (\times a/2)$					
	$\pm [110]$	$\pm [1\bar{1}0]$	$\pm [101]$	$\pm [10\bar{1}]$	$\pm [011]$	$\pm [01\bar{1}]$
$\frac{111}{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}$	± 1 ∓ 1	0 0	± 1 ∓ 1	0 0	± 1 ∓ 1	0 0
$\frac{\bar{1}\bar{1}1}{11\bar{1}}$	0 0	∓ 1 ± 1	0 0	∓ 1 ± 1	± 1 ∓ 1	0 0
$\frac{1\bar{1}1}{\bar{1}11}$	0 0	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1	0 0	0 0	∓ 1 ± 1
$\frac{11\bar{1}}{\bar{1}\bar{1}1}$	± 1 ∓ 1	0 0	0 0	± 1 ∓ 1	0 0	± 1 ∓ 1
$\frac{200}{\bar{2}00}$	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1	0 0	0 0
$\frac{020}{0\bar{2}0}$	± 1 ∓ 1	∓ 1 ± 1	0 0	0 0	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1
$\frac{002}{00\bar{2}}$	0 0	0 0	± 1 ∓ 1	∓ 1 ± 1	± 1 ∓ 1	∓ 1 ± 1
$\frac{220}{\bar{2}\bar{2}0}$	± 2 ∓ 2	0 0	∓ 1 ± 1	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1
$\frac{2\bar{2}0}{\bar{2}20}$	0 0	± 2 ∓ 2	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1	∓ 1 ± 1	∓ 1 ± 1
$\frac{202}{\bar{2}0\bar{2}}$	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1	± 2 ∓ 2	0 0	± 1 ∓ 1	∓ 1 ± 1
$\frac{20\bar{2}}{\bar{2}02}$	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1	0 0	± 2 ∓ 2	∓ 1 ± 1	± 1 ∓ 1
$\frac{022}{0\bar{2}\bar{2}}$	± 1 ∓ 1	∓ 1 ± 1	± 1 ∓ 1	∓ 1 ± 1	± 2 ∓ 2	0 0
$\frac{0\bar{2}\bar{2}}{022}$	± 1 ∓ 1	∓ 1 ± 1	∓ 1 ± 1	± 1 ∓ 1	0 0	± 2 ∓ 2
$\frac{311}{\bar{3}\bar{1}\bar{1}}$	± 2 ∓ 2	± 1 ∓ 1	± 2 ∓ 2	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1	0 0
$\frac{\bar{3}11}{3\bar{1}\bar{1}}$	∓ 1 ± 1	∓ 2 ± 2	∓ 1 ± 1	∓ 2 ± 2	± 1 ∓ 1	0 0
$\frac{3\bar{1}1}{31\bar{1}}$	± 1 ∓ 1	± 2 ∓ 2	± 2 ∓ 2	± 1 ∓ 1	0 0	∓ 1 ± 1

(续表)

hkl	$b(1/a/3)$					
	$\pm[110]$	$\pm[1\bar{1}0]$	$\pm[101]$	$\pm[10\bar{1}]$	$\pm[011]$	$\pm[01\bar{1}]$
101 $\bar{1}01$	± 2 ∓ 2	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1	± 2 ∓ 2	0	± 1 ∓ 1
$1\bar{1}1$ $\bar{1}1\bar{1}$	± 2 ∓ 2	-1 ± 1	-1 ∓ 1	0	± 2 ∓ 2	-1 ∓ 1
$10\bar{1}$ $1\bar{0}\bar{1}$	± 1 ∓ 1	∓ 2 ± 2	0	∓ 1 ± 1	± 2 ∓ 2	± 1 ∓ 1
$1\bar{1}\bar{0}$ 110	∓ 1 ± 1	± 2 ∓ 2	∓ 1 ± 1	0	∓ 1 ± 1	∓ 2 ± 2
$1\bar{1}1$ $\bar{1}1\bar{1}$	± 2 ∓ 2	± 1 ∓ 1	0	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1	± 2 ∓ 2
$1\bar{1}\bar{0}$ 110	± 1 ∓ 1	0	± 2 ∓ 2	∓ 1 ± 1	± 2 ∓ 2	∓ 1 ± 1
$11\bar{1}$ $1\bar{1}1$	0	∓ 1 ± 1	± 1 ∓ 1	∓ 2 ± 2	± 2 ∓ 2	∓ 1 ± 1
$11\bar{0}$ $1\bar{1}0$	0	± 1 ∓ 1	± 2 ∓ 2	∓ 1 ± 1	± 1 ∓ 1	∓ 2 ± 2
$11\bar{1}$ $1\bar{1}1$	± 1 ∓ 1	0	∓ 1 ± 1	± 2 ∓ 2	∓ 1 ± 1	± 2 ∓ 2
$1\bar{1}\bar{0}$ 110	± 2 ∓ 2	0	± 2 ∓ 2	0	± 2 ∓ 2	0
$1\bar{1}0$ $11\bar{0}$	0	∓ 2 ± 2	0	∓ 2 ± 2	± 2 ∓ 2	0
$1\bar{1}0$ $11\bar{0}$	0	± 2 ∓ 2	± 2 ∓ 2	0	0	∓ 2 ± 2
$1\bar{1}\bar{0}$ 110	± 2 ∓ 2	0	0	± 2 ∓ 2	0	∓ 2 ± 2
$1\bar{1}\bar{0}$ 110	± 2 ∓ 2	± 2 ∓ 2	± 2 ∓ 2	± 2 ∓ 2	0	0
$1\bar{1}\bar{0}$ 110	± 1 ∓ 1	∓ 2 ± 2	0	0	± 2 ∓ 2	∓ 2 ± 2

(续表)

反射 g	$h(\times a/2)$					
	$\pm[110]$	$\pm[1\bar{1}0]$	$+ [101]$	$+ [10\bar{1}]$	$+ [011]$	$[+01\bar{1}]$
004 00 $\bar{4}$	0 0	0 0	± 2 ∓ 2	∓ 2 ± 2	± 2 ∓ 2	∓ 2 ± 2
313 31 $\bar{3}$	± 2 ∓ 2	± 1 ∓ 1	± 3 ∓ 3	0 0	± 2 ∓ 2	∓ 1 ± 1
31 $\bar{2}$ 313	∓ 1 ± 1	∓ 2 ± 2	0 0	∓ 3 ± 3	± 2 ∓ 2	∓ 1 ± 1
3 $\bar{1}$ 3 313	± 1 ∓ 1	± 2 ∓ 2	± 3 ∓ 3	0 0	± 1 ∓ 1	∓ 2 ± 2
313 3 $\bar{1}$ 3	∓ 2 ± 2	± 1 ∓ 1	0 0	± 3 ∓ 3	∓ 1 ± 1	∓ 2 ± 2
33 $\bar{1}$ 331	∓ 3 ± 3	0 0	∓ 2 ± 2	± 1 ∓ 1	∓ 2 ± 2	∓ 1 ± 1
331 33 $\bar{1}$	0 0	∓ 3 ± 3	∓ 1 ± 1	∓ 2 ± 2	± 2 ∓ 2	∓ 1 ± 1
33 $\bar{2}$ 331	± 3 ∓ 3	0 0	± 1 ∓ 1	± 2 ∓ 2	± 1 ∓ 1	∓ 2 ± 2
420 420	∓ 3 ± 3	± 1 ∓ 1	∓ 2 ± 2	± 2 ∓ 2	± 1 ∓ 1	∓ 1 ± 1
420 4 $\bar{2}$ 0	∓ 1 ± 1	∓ 3 ± 3	∓ 2 ± 2	∓ 2 ± 2	∓ 1 ± 1	∓ 1 ± 1
240 240	± 3 ∓ 3	∓ 1 ± 1	± 1 ∓ 1	∓ 1 ± 1	∓ 2 ± 2	∓ 2 ± 2
240 2 $\bar{4}$ 0	∓ 1 ± 1	∓ 3 ± 3	∓ 1 ± 1	∓ 1 ± 1	∓ 2 ± 2	∓ 2 ± 2
204 204	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1	∓ 2 ± 2	∓ 2 ± 2
204 20 $\bar{4}$	∓ 1 ± 1	∓ 1 ± 1	± 1 ∓ 1	∓ 3 ± 3	± 2 ∓ 2	∓ 2 ± 2

表 11-8 不同反射下, bcc 金属中 $b = \frac{a}{2} \langle 111 \rangle$ 和 $\langle 001 \rangle$ 型
位错的可能 $g \cdot b$ 值^[10]

反射 g	$b (\times a)$				
	$\pm \frac{1}{2} [111]$	$\pm \frac{1}{2} [\bar{1}\bar{1}1]$	$\pm \frac{1}{2} [\bar{1}1\bar{1}]$	$\pm \frac{1}{2} [11\bar{1}]$	$[001]$
110	± 1	0	0	± 1	0
$\bar{1}\bar{1}0$	∓ 1	0	0	∓ 1	0
110	0	± 1	∓ 1	0	0
$\bar{1}\bar{1}0$	0	∓ 1	± 1	0	0
101	± 1	± 1	0	0	± 1
$\bar{1}0\bar{1}$	∓ 1	∓ 1	0	0	∓ 1
101	0	0	∓ 1	± 1	∓ 1
$\bar{1}0\bar{1}$	0	0	± 1	∓ 1	± 1
011	± 1	0	± 1	0	± 1
$0\bar{1}\bar{1}$	∓ 1	0	∓ 1	0	∓ 1
011	0	∓ 1	0	± 1	∓ 1
$0\bar{1}\bar{1}$	0	± 1	0	∓ 1	± 1
200	± 1	± 1	∓ 1	± 1	0
$\bar{2}00$	∓ 1	∓ 1	± 1	∓ 1	0
020	± 1	∓ 1	± 1	± 1	0
$0\bar{2}0$	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	0
002	± 1	± 1	± 1	∓ 1	± 2
$00\bar{2}$	∓ 1	∓ 1	∓ 1	± 1	∓ 2
220	± 2	0	0	± 2	0
$\bar{2}\bar{2}0$	∓ 2	0	0	∓ 2	0
$\bar{2}20$	0	± 2	∓ 2	0	0
$2\bar{2}0$	0	∓ 2	± 2	0	0
202	± 2	± 2	0	0	± 2
$\bar{2}0\bar{2}$	∓ 2	∓ 2	0	0	∓ 2
$20\bar{2}$	0	0	∓ 2	± 2	∓ 2
$\bar{2}02$	0	0	± 2	∓ 2	± 2

(续表)

反射 g	$b(\times a)$				
	$\pm \frac{1}{2} [111]$	$\pm \frac{1}{2} [\bar{1}\bar{1}1]$	$\pm \frac{1}{2} [\bar{1}1\bar{1}]$	$\pm \frac{1}{2} [11\bar{1}]$	$[001]$
022	± 2	0	± 2	0	± 2
02 $\bar{2}$	∓ 2	0	∓ 2	0	∓ 2
022	0	∓ 2	0	± 2	∓ 2
02 $\bar{2}$	0	± 2	0	∓ 2	± 2
310	± 2	$\perp 1$	∓ 1	± 2	0
3 $\bar{1}$ 0	∓ 2	∓ 1	± 1	∓ 2	0
310	∓ 1	∓ 2	± 2	∓ 1	0
3 $\bar{1}$ 0	± 1	± 2	∓ 2	± 1	0
301	± 2	± 2	∓ 1	± 1	± 1
30 $\bar{1}$	∓ 2	∓ 2	± 1	∓ 1	∓ 1
301	∓ 1	∓ 1	± 2	∓ 2	± 1
30 $\bar{1}$	± 1	± 1	∓ 2	± 2	∓ 1
013	± 2	± 1	± 2	∓ 1	± 3
01 $\bar{3}$	∓ 2	∓ 1	∓ 2	± 1	∓ 3
013	± 1	± 2	± 1	∓ 2	± 3
01 $\bar{3}$	∓ 1	∓ 2	∓ 1	± 2	∓ 3
130	± 2	∓ 1	± 1	± 2	0
130	∓ 2	± 1	∓ 1	∓ 2	0
130	± 1	∓ 2	± 2	± 1	0
130	∓ 1	± 2	∓ 2	∓ 1	0
103	± 2	± 2	± 1	∓ 1	± 3
10 $\bar{3}$	∓ 2	∓ 2	∓ 1	± 1	∓ 3
103	∓ 1	± 1	± 2	∓ 2	± 3
10 $\bar{3}$	∓ 1	∓ 1	∓ 2	± 2	∓ 3

表 11-9 不同反射下, hcp 结构金属中 $b = \frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$, $\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 和 $\langle 0001 \rangle$ 型位错的可能 $\sigma \cdot b$ 值^[43]

反射 σ	$\pm[11\bar{2}0]$	$\pm[1\bar{2}10]$	$\pm[11\bar{2}3]$	$\pm[1\bar{2}13]$	$\pm[11\bar{2}3]$	$\pm[1\bar{2}13]$	$\pm[2113]$	$\pm[0003]$
$10\cdot0$	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	0
$0\cdot10$	± 1	0	± 1	0	± 1	0	0	0
1100	± 1	± 1	0	± 1	± 1	± 1	± 1	0
0002	0	0	± 2	0	0	± 2	± 2	± 2
$10\bar{1}1$	± 1	∓ 1	0	∓ 1	± 1	0	∓ 1	± 1
$10\bar{1}\bar{1}$	± 1	∓ 1	0	∓ 1	± 1	0	∓ 1	± 1
$0\cdot1\bar{1}$	± 1	0	± 2	∓ 1	± 1	0	∓ 1	± 1
$0\cdot\bar{1}1$	± 1	0	0	± 1	± 1	0	∓ 1	± 1
1101	0	± 1	± 1	0	± 1	0	∓ 1	± 1
$10\bar{1}2$	± 1	∓ 1	± 2	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	± 2
$10\bar{1}3$	± 1	∓ 1	± 2	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	± 2
$0\cdot\bar{1}3$	± 1	∓ 1	± 2	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	± 2
$0\cdot1\bar{3}$	± 1	∓ 1	0	∓ 1	± 1	0	∓ 1	± 2
1102	0	± 1	± 1	0	± 1	0	∓ 1	± 2
1103	0	± 1	± 1	0	± 1	0	∓ 1	± 2
$11\bar{2}0$	± 2	∓ 1	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	0
$1\bar{2}\cdot0$	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	0
$21\cdot0$	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	0
$10\cdot3$	± 1	∓ 1	0	∓ 1	± 1	0	∓ 1	± 2
$10\cdot\bar{3}$	± 1	∓ 1	0	∓ 1	± 1	0	∓ 1	± 2
$01\cdot3$	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	± 2
$01\cdot\bar{3}$	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	± 2
1103	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	± 2
$110\bar{3}$	0	0	± 2	∓ 1	± 1	0	∓ 1	± 2
$11\bar{2}2$	± 2	∓ 1	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	± 2
$11\bar{2}\bar{2}$	± 2	∓ 1	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	± 2
$1\bar{2}\cdot3$	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	± 2
$1\bar{2}\cdot\bar{3}$	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	± 2
$21\cdot2$	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	± 2
$21\cdot\bar{2}$	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	± 1	∓ 1	∓ 1	± 2

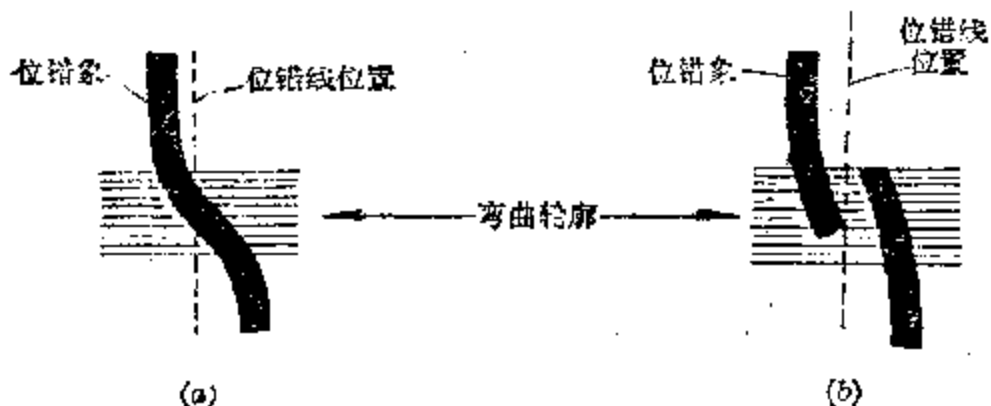


图 11-14 位错象通过消光轮廓时,衬度反向

(a) 当 $g \cdot b = \pm 1$ 时,位错象连续; (b) 当 $g \cdot b = \pm 2$ 时,位错象错开

(强衍射斑点), 拍下此时的明场象和相应的衍射谱。

3) 校正转角, 将第 2) 步获得的显微象和衍射谱按正确方位重迭起来, 标出 g 的方向, b 即在与 g 垂直的方向。

4) 重复 2) 和 3) 步骤, 二至三次, 如 b 方向均一致, 即可认为 b 已确定。但是, 应该注意, 这样得到的 b 方向实际上是 b 在倒易面上的投影; 只有当位错所在平面平行于膜面(或垂直于电子束方向)时, 所求得的与 g 垂直的方向才是布氏矢量的真实方向。应用此法, 有时还能确定位错的性质。此外, 在进行实验前, 还必须将倾动台旋转倾斜对中调整好, 以保证视场在倾动前后, 没有明显变动。同时, 此法一般只适用于测定全位错的 b , 对不全位错不宜采用。

不过上述方法只是确定了 b 的方向, 至于它的大小和符号尚需用下述方法决定:

利用位错象通过弯曲消光轮廓时, 有“反向”特点(如图 11-14 所示)。即反向但位错象连续时, $n = \pm 1$; 反向但位错象错开时, $n = \pm 2 (g \cdot b = n)$ 。

从表 11-7~11-9 可知, 如果选取低指数反射, 在位错明场可见时, $g \cdot b$ 值有很大机会为 ± 1 或 ± 2 。因此利用倾动台, 使一弯曲消光轮廓通过位错象, 这时图象呈图 11-14(a) 情况, 获得一操作反射 g_1 ; 再倾动至另一位置, 使图象呈图 (b) 情况, 又获得一操

作反射 g_2 。于是有 $g_1 \cdot b = \pm 1$, $g_2 \cdot b = \pm 2$, 解此二方程, 可以求得 b 。由于根据上面步骤已经确定 b 的方向, 因此最后决定其大小和符号是不难的。在利用图 11-14 现象决定 b 时, 如结合参照表 11-7~11-9, 也是有帮助的。

关于六方晶系材料全位错布氏矢量的测定, 人们常感到比较困难。实际上由于它的布氏矢量类型仍是有限的, 利用表 11-9, 也可使工作顺利进行。现举例说明如下:

六方晶系材料全位错布氏矢量共十种, 其中 $a/3\langle 2\bar{1}10 \rangle$ 三种, $\langle 0001 \rangle$ 型一种, $a/3\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 型六种, 如表 11-9 中所示。测定布氏矢量时, 操作反射应尽量利用 $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ 、 $\langle 0002 \rangle$ 、 $\langle 10\bar{1}1 \rangle$ 三类 (即表 11-9 中前 10 行)。如为了鉴定某位错, 可先选用 $[\bar{1}100]$ 反射, 这时如果位错消失, 则此位错必是 $a/3[11\bar{2}0]$ 、 $a/3[11\bar{2}3]$ 、 $a/3[\bar{1}123]$ 和 $[0001]$ 四种布氏矢量之一。然后倾动试样, 获得操作反射 $[0002]$, 如果该位错仍不可见, 则基本可肯定此位错的 b 是 $a/3[11\bar{2}0]$ 。虽然 $g = [0002]$, 位错衬度消失, 有可能是 $a/3[11\bar{2}0]$ 、 $a/3[\bar{1}210]$ 和 $a/3[2110]$ 三者之一, 但因 $g = [\bar{1}100]$ 时, 在该处并未显示任何位错衬度, 所以排除了 b 为后两者的可能性。

下面以测定面心立方金属的布氏矢量为例, 进一步说明分析过程中可能遇到的问题。

(1) 设试样表面法线方向为 $[111]$, 先作一个有助于在此取向下分析 b 的 $g \cdot b$ 值表, 如表 11-10 (有关数据可从表 11-7 中查得)。

因为 fcc 金属中的全位错布氏矢量为 $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ 型, 所以能使这种位错衬度消失的反射一定在 $\{110\}^*$ 倒易面中。下表中的 g , 就是 $\{110\}^*$ 中的低指数或较低指数的反射。

(2) 试样膜面法线指数为 $[111]$, 而 $(111)^*$ 中只有表 11-10 中的 $\bar{2}02$ 、 $\bar{2}20$ 和 $02\bar{2}$ 反射, 可利用它们先鉴定一部分位错的 b 。例如使操作反射分别为 $\bar{2}02$ 、 $\bar{2}20$ 和 $02\bar{2}$ 时位错消失, 则此位错的 b 依次为 $\frac{1}{2}[101]$ 、 $\frac{1}{2}[110]$ 和 $\frac{1}{2}[011]$ 。另外三种 b 须借助 $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ 、

表 11-10 fcc 金属膜面取向为 $[111]$ 时应用的 $g \cdot b$ 值

$\begin{matrix} g \\ b \end{matrix}$	$\bar{2}02$	$\bar{2}20$	$02\bar{2}$	$\bar{1}1\bar{1}$	$\bar{1}\bar{1}1$	$\bar{1}11$	$\bar{1}3\bar{1}$
$\frac{1}{2}[\bar{1}01]$	0	-1	-1	-1	0	0	-1
$\frac{1}{2}[\bar{1}10]$	-1	0	1	0	-1	0	1
$\frac{1}{2}[011]$	1	1	0	0	0	1	1
$\frac{1}{2}[\bar{1}0\bar{1}]$	2	1	-1	0	1	1	0
$\frac{1}{2}[\bar{1}10]$	1	2	1	1	0	1	2
$\frac{1}{2}[011]$	-1	1	2	1	-1	0	2

$\bar{1}\bar{1}1$ 、 $\bar{1}11$ 和 $\bar{1}3\bar{1}$ 反射。使 $g = \bar{1}3\bar{1}$ ，衬度消失的位错一定是 $\frac{1}{2}[\bar{1}01]$ 。这样，只剩 $\frac{1}{2}[\bar{1}10]$ 和 $\frac{1}{2}[011]$ 两种 b 有待鉴定。由表 11-10 可知，只需分别取 $\bar{1}\bar{1}1$ 、 $\bar{1}11$ 为 g ，即可肯定在前一种操作下，衬度消失的位错中，一定包含有 $\frac{1}{2}[\bar{1}10]$ 位错；后一种操作反射下，衬度消失的位错中，一定包含有 $\frac{1}{2}[011]$ 位错。通过与前面 $g = \bar{2}02$ 、 $02\bar{2}$ 、 $\bar{2}20$ 时位错消失的照片进行对比，很容易将 $\frac{1}{2}[\bar{1}01]$ 、 $\frac{1}{2}[\bar{1}10]$ 、 $\frac{1}{2}[011]$ 位错挑选出来，明确指出 $\frac{1}{2}[\bar{1}10]$ 、 $\frac{1}{2}[011]$ 位错。

(3) 由于在 $(111)^*$ 中没有 $\bar{1}\bar{1}1$ 、 $\bar{1}\bar{1}1$ 、 $\bar{1}11$ 和 $\bar{1}3\bar{1}$ 反射，所以必须倾动试样，以获得这些反射。但这时又必须考虑倾动台的允许倾角范围，选取最小倾角。决定倾动操作的方法有二。

1) 以 (111) 为极，环绕它作菊池图，如图 11-15。由 $(111)^* \rightarrow (112)^*$ ，以获得 $\bar{1}\bar{1}1$ ；由 $(111)^* \rightarrow (211)^*$ ，以获得 $\bar{1}11$ ；由 $(111)^* \rightarrow$

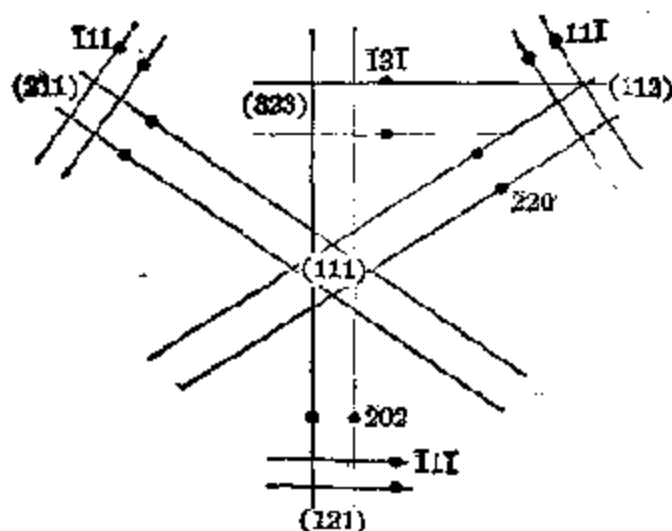


图 11-15 以(111)为中心的菊池图

(121)*, 以获得 $\bar{1}1\bar{1}$ 。以上倾角均为 19.5° 。由 $(111)^* \rightarrow (323)^*$, 以获得 $\bar{1}3\bar{1}$, 倾角为 $\sim 10^\circ$ 。上述操作必须有一个性能良好、误差小的倾动台, 且事先应对中调整好。还要求操作者对晶体学有娴熟的了解, 并有在现场迅速判断反射指数的能力。

2) 借助衍射谱进行旋转操作。如由 $(111)^* \xrightarrow{19.5^\circ} (112)^*$, 以获得 $11\bar{1}$; 由 $(111)^* \xrightarrow{19.5^\circ} (211)^*$, 以获得 $\bar{1}1\bar{1}$ 和 $\bar{1}3\bar{1}$; 由 $(111)^* \xrightarrow{35.27^\circ} (110)^*$ 以获得 $\bar{1}1\bar{1}$ 反射……等。

不论利用菊池图还是衍射谱, 都应使倾动操作的次数尽可能少, 花样易于识别。

(4) 如试样膜面指数不是 $[111]$, 而是 $[001]$, 则考虑到旋转倾动操作方便, $g \cdot b$ 值表中的 g 应另行选择, 如表 11-11, 这是由于在 $(001)^*$ 中, 已具备了四个能使某种 $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle$ 布氏矢量的位错消失的反射, 即: 220 、 220 、 020 、 200 。由 $(001)^* \rightarrow (\bar{1}\bar{1}4)^*$, 只需倾动一次即可提供另外二个使位错消失的反射 311 和 $\bar{1}3\bar{1}$, 如图 11-16。例如由 $(001)^* \rightarrow (\bar{1}\bar{1}4)^*$, 倾角为 19.5° , 在一般倾动台的允许倾角范围内。

以上我们介绍了一般测定布氏矢量的方法。但有必要强调指

表 11-11 fcc 金属膜面取向为 $[001]$ 时应用的 $g \cdot b$ 值

$\begin{array}{c} g \\ b \end{array}$	020	200	311	131	220	220
$\frac{1}{2}[101]$	0	1	2	1	1	1
$\frac{1}{2}[110]$	1	1	2	2	0	2
$\frac{1}{2}[011]$	1	0	1	2	-1	1
$\frac{3}{2}[101]$	0	-1	1	0	1	1
$\frac{1}{2}[1\bar{1}0]$	1	-1	-1	1	-2	0
$\frac{1}{2}[01\bar{1}]$	1	0	0	1	-1	1

出,位错在不同衍射条件下的衬度,是十分复杂的。不能简单地归纳为在某种条件下,其衬度出现;另一种条件下,衬度消失。试样中位错的实际结构(刃型、螺型、混合型)和组态(空间分布),也远比表 11-5 所列的情况复

杂得多。如果再考虑衍射过程的动力学交互作用,其衬度现象更是千变万化。这些都给布氏矢量的测定分析,带来许多困难。因此测定分析工作不是在对拍摄好的照片进行分析才开始的;而是未上电镜前,在设计实验方案时就已经开始了。同时,实验

操作本身也是十分细致的一项工作。例如,有人把实验中观察到的极弱衬度,一律视作 $g \cdot b \approx 0$, 并据此确定 b , 就是不妥当的。因

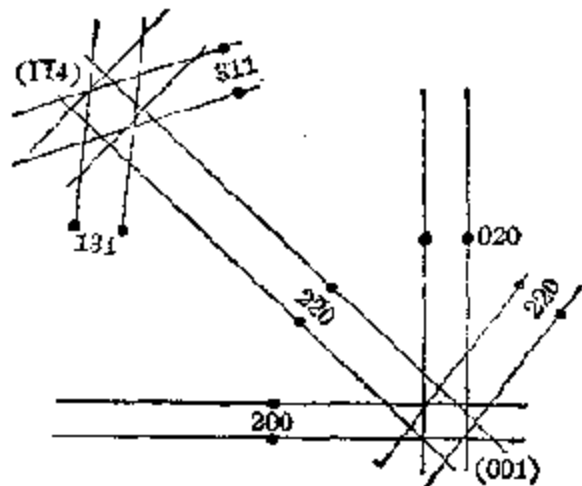


图 11-16 包含 (001) 、 (114) 极点的菊池图

为, 弱的衬度, 固然有可能对应于 $g \cdot b \approx 0$, 但它还与实验时的 s_g 值有很大关系。在 g 和 s_g 的一定配合下, 试样某一深度的位错, 有时在出现 $g \cdot b$ 值为整数时, 也会呈现很弱的衬度。这时如即判定为 $g \cdot b = 0$, 并据此求 b , 就会得出错误结论。其检验方法可稍微改变 s_g , 同时观察位错衬度的变化; 如果稍一改变, 即出现很强的衬度, 则原先呈现的弱衬度, 并不对应于 $g \cdot b = 0$, 而是由于 s_g 的变化有效地改变了消光距离, 从而也改变了衬度随深度变化的起伏周期, 因此大的 s_g 值也可能产生弱的衬度。又如试样薄膜有局部弯曲, 那么在显微照片上, s_g 大的区域位错衬度变弱。倾动试样, 使弯曲消光轮廓迅速扫过视场, 就可以把那些因 s_g 增大而使衬度变弱的位错与真正由于 $g \cdot b \approx 0$ 使衬度变弱的位错加以区别。

还有一种情况应该注意, 对同一类型布氏矢量, 利用同一操作反射, 可以有几种不同 $g \cdot b$ 值的象。例如体心立方有四种可能的 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 布氏矢量, 如果采用 (321) 反射, 可以在衍射象中, 同时存在 $g \cdot b = 0, 1, 2$ 和 3 四种位错象; 其中 $g \cdot b = 2$ 和 3 的位错象宽而强的, $g \cdot b$ 值为 1 的象较弱, 为零的位错象衬度甚弱或不可见。实验中有些工作者为了减少象衬的复杂性, 有意选取较大的 s_g 值, 这时正如前面已经指出的那样, 有可能使 $g \cdot b = 1, 0$ 两种位错衬度同时消失, 以致得出的位错组成不能真实反映实际组成。Lerette 和 Smallman^[82] 指出, 为了避免这种情况, 在观察时应不断测量衍射花样上的 s_g , 如一旦发现 s_g 已超过 $\omega = \xi_g s_g \geq 1$ 中的相应值, 则下一张照片应在较小的 s_g 下拍摄。这样就可保留 $g \cdot b = 1$ 的位错。

另一个区别弱衬度究竟是由于 $g \cdot b \approx 0$, 还是 s_g 过大所造成的方法, 可采用 $1g$ 和 $-g$ 两次成象。若两次成象, 位错象的位置不变, 则此弱衬度对应于 $g \cdot b \approx 0$ 。因 $g \cdot b = 0$ 时, 位错象与真实位错核心位置是相重的。

以上讨论, 主要针对弹性各向同性材料中的位错, 而对各向异性材料中的位错, 则其衬度分析就更为复杂。近十年来发展起来

并日益得到广泛应用的象模拟计算技术,对分析各向异性材料中的位错,是一个有效的方法。它的要点在于:在一系列衍射条件下拍下许多位错衍射象,然后将对应的衍射条件逐一输入电子计算机,唯一可变动的参数是假定不同的布氏矢量。计算所得结果既可表示为象的强度分布,也可直接在荧光屏上显示出位错象。将计算象与实验象进行对比,则其两者相似的布氏矢量即为所求。

输入计算机的信息,除 b 假设值外,还包括实验中采用或出现过的下述参数:衍射矢量 g , 偏离矢量 s_g , 电子束方向 B , 膜面法线方向 N , 位错线方向 u , 以消光距离为单位的膜厚 t , 反常吸收参数 ξ_g/ξ'_g , 以及材料的弹性常数。其中除弹性常数外,其余参数均可利用前面各章介绍的有关测量分析技术求得。

已有许多工作表明,象模拟计算技术(亦称“象计算匹配技术”)计算出的位错象与实验所得的位错象,有良好的相似性,对各向异性材料来说,也许是准确测定位错布氏矢量的比较理想的方法。编制计算程序是一件细致复杂的工作,详见文献[88]。

以上讨论了全位错布氏矢量的测定方法,至于不全位错的有关内容将在层错衍射分析中讨论。

三、位错密度测量

金属材料的形变过程,总是伴随着内部组织结构的变化;从微观上来说,位错组态和位错密度都会发生变化,例如人们在冷加工、疲劳和蠕变过程中所看到的那样。为了了解这些过程的本质,位错密度是重要的参考依据。多年来,衍射工作者就在摸索它的测量方法,但遗憾的是,迄今仍未找到一个十分满意的方法,可以提供准确的数据。到目前为止,文献上发表的各种材料在不同条件下的位错密度数据已相当多,但出入很大,甚至在数量级上取得一致也很困难。造成数据分歧的原因可归纳为:

① 首先,究竟如何定义位错密度,在看法上尚不统一,以致有的测量方法,其本身就不是严格科学的。

② 衍射照片上看到的位错是三维分布在二维平面上的投影,如何把二维信息换算成三维数据,还有一些问题没有解决。例如,

膜厚测量不准。目前广泛应用的根据等厚条纹、消光距离计算的膜厚,只能反映孔洞边缘或膜边缘的厚度,而测量位错时却常常希望选择在校厚的区域。有些工作者在计算位错密度时,其所采用的膜厚数据纯粹是估计的,而且换算时,又大多借用传统的定量金相计算公式,本身就存在问题。

③ 衍衬象是选择衍射成象,只有当选择合适的反射时,位错才显示衬度。因此如果不是选择了足够多的低指数反射成象,则测量结果难免偏高或偏低。并且由于受倾动台性能的限制,事实上也很难办到这一点。Smallman 指出^[84],能使位错衬度消失的百分数,对不同反射也是不同的。为此,他建议在测量位错密度时,应当选择对所有位错都显示衬度的反射;或不同反射下成象,然后迭加起来组成一张合成位错象,再进行测量。可以想象,其工作量确相当巨大。他还以面心立方金属中 $b = \frac{1}{2}[110]$ 位错为例,列举了位错的不可见部分,如表 11-12。其结果表明,在不同反射下,差别很大。同样,体心立方的 $\frac{1}{2}[111]$ 位错相应于 200、110、112 和 222 反射的测量位错密度的修正因子分别为 1、2、1.3 和 1。

表 11-12 fcc 金属中,在不同反射下, $\frac{1}{2}[110]$ 型位错的不可见部分

反 射	111	200	220	311	222	400	331	420
不可见部分	1/3	1/3	1/6	1/6	1/2	1/3	1/6	0

因此,我们认为,迄今为止所获得的位错密度数据,只具有相对比较的意义。故在利用这些数据进行强度或其它性能的定量计算时,应该特别慎重。尽管如此,下面还是将目前流行的一些测量方法进行简要介绍^[85,86,87],以供参考。

对低密度($\sim 1\%$ 应变)位错密度的测量,可以采用下式:

$$\rho = 2n/A \quad (11-15)$$

式中: n 为面积 A 内位错在膜上、下表面的交点数。这个关系式

不要求膜厚数据,也可不必区别上、下表面的交点;而衍衬照片上的位错交点,显然既有与上表面的交点,也有与下表面的交点。

对高密度(10^{10} 根线/ cm^2)位错的测量,则随所观察到的位错分布状态不同,可以采用两种不同方法。如位错以胞结构形式出现,可用下式测量:

$$\rho = (2n)/(Lt) \quad (11-16)$$

式中: n 是位错与任意一组长度为 L 的线条相截的交点数; t 为膜厚。测量时可用透明纸画上一组长度为 L 的线条,覆在衍衬照片上,然后计算位错与这组线的交点 n 。如无胞结构位错,则位错密度用下式测量:

$$\rho = \frac{1}{t} \left(\frac{n_1}{L_1} + \frac{n_2}{L_2} \right) \quad (11-17)$$

式中: n_1 、 n_2 分别为相互正交的两组平行线与位错的交点平均数; L_1 和 L_2 分别为两组平行线的长度; t 为膜厚。

在一系列金属中测量的位错密度表明,位错密度 ρ 与分切应力 τ 之间有如下关系:

$$\tau = \tau_0 + \alpha \mu b \sqrt{\rho} \quad (11-18)$$

式中: μ 为切变模量; b 是布氏矢量。在给定温度下, α 为约等于 0.5 的常数。在面心立方金属中, τ_0 很小或为零;在体心立方金属或陶瓷中, τ_0 值是可观的,与点阵摩擦应力相当。

最后,还应指出,不论采用哪一种方法,均应在试样不同部位,选择不同反射,拍摄足够多的衍衬照片;才能进行测量计算。即在膜的四个不同部位,各拍摄十张衍衬照片,然后根据这四十张照片的测量结果,取其平均位错密度作为最后结果。

四、位错和层错的衍衬分析

本节内容不是严格地从理论上解释位错衬度效应,而是就衍衬工作中经常遇到的衬度现象,作必要的定性解释,以便初学者能够正确识别。因此在作这些解释时,比较注意明晰的几何形象概念,必要时还提供了鉴别这些衬度效应的方法。

(一)简单刃型和螺型位错中心处的原子位移

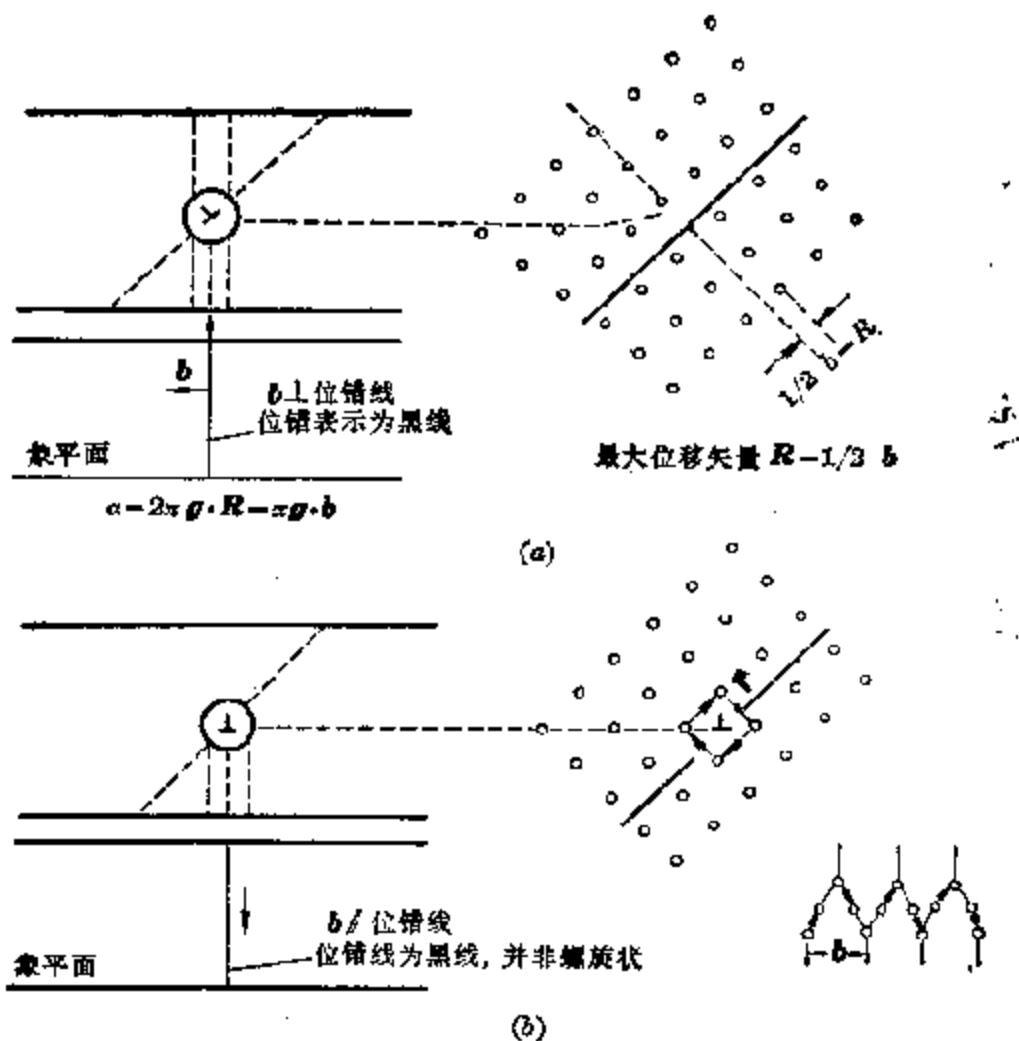


图 11-17 简单位错中心处的原子位移情况
(a) 刃型; (b) 螺型

可以用图 11-17 作一直观解释^[88]。

刃型位错中心原子位移平行于滑移面上的滑移方向, 中心处原子位移量 $R = \frac{1}{2} b$ (见图 11-17a)。滑移面上下原子相对位移量, 从最右面的零逐渐增加, 至中心处 R 达到最大值即 $\frac{1}{2} b$; 从中心向左, 由最大值 $R = \frac{1}{2} b$ 逐渐减小, 至最左面恢复正常, 此处 $R = 0$ 。位错中心处两侧原子面向反方向弯曲倾斜。即使平行于滑移面的原子面, 也略有弯曲。螺型位错的布氏矢量平行于位错线

方向,在图(b)中垂直于图面向内。原子位移沿这个方向,旋转 2π , 位移一个 $\mathbf{b}$, 所以在一般情况下, 旋转 ϕ 角, 相当于 $\mathbf{R} = \frac{\phi}{2\pi} \mathbf{b}$ 。所谓“螺型”主要是指由于 $\mathbf{R}$ 使以位错线为轴的周围的原子成螺旋状排列, 而并非是位错外形成螺旋状。因此, 位错是否为螺型的判据只能是 $\mathbf{b} \parallel$ 位错线, 而不是根据其外形。如果用迹线分析方法确定了位错线方向 $\mathbf{u}$, 又经测定 $\mathbf{b}$, 且 $\mathbf{b} \parallel \mathbf{u}$, 则此位错为螺型位错, 否则就不是。此外晶体中的位错大多为混合型, 但它的某一局部线段如有可能与 $\mathbf{b}$ 平行, 则这一线段即属于螺型位错性质。

(二) 位错象的位置

位错象相对于实际位错线的位置, 取决于 s 的符号。而且, 实际位错并非就在位错象处, 这可以从图 11-18 得到简单解释。图 (a) 令 $s > 0$, 有刃位错取向如图。若反射矢量 $\mathbf{g}$ 向右, 则半原子面左侧的平面, 由于向左倾斜, 使 s 增加, 故 $s \gg 0$; 而半原子面右侧的平面对 s 的影响正好相反, 使 s 减小, 有接近布拉格位置的趋势。在这种情况下, 位错象出现在实际位错的右侧。图 (b) 表示倾斜试样, 使 $s < 0$ 。容易理解, 这时象在真实位错的左方。因此当位错象通过消光轮廓时 (意味着 s 改变符号), 象就从轮廓的一侧转向另一侧, 如图 10-14。

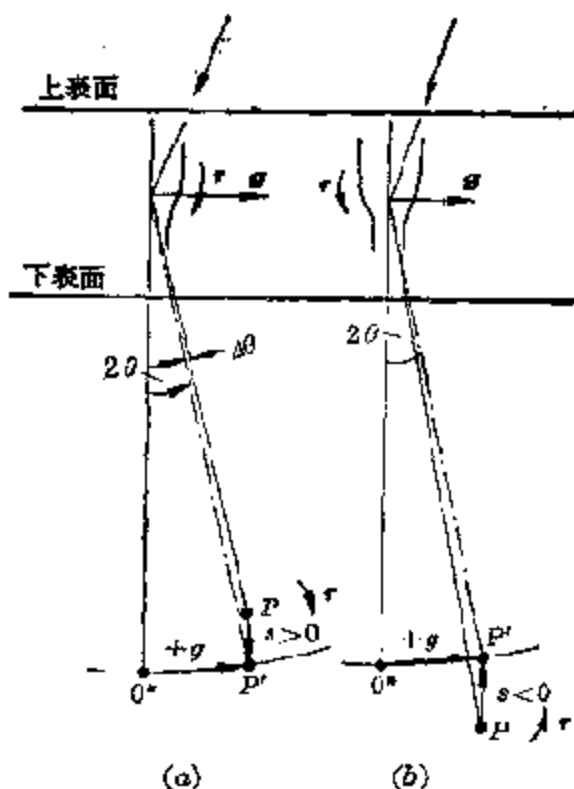


图 11-18 s 的符号改变时对位错核两侧原子面的影响 (相对于入射束衍射条件的改变)
(a) $s > 0$; (b) $s < 0$

当 s 符号不变, 如反射矢量由 $+\mathbf{g} \rightarrow -\mathbf{g}$ 时, 也有同样的效

果。

上述性质可以用来确定位错在试样中的取向。如果事先没有规定布氏矢量的方向,只要 s 的符号和 g 的方向已知,就有可能利用上述衬度随 g 和 s 改变符号而转向的性质,确定位错方向。

(三)位错双象、位错偶和超位错

在衍射象中,常常观察到位错象成对出现的现象。它们或者彼此平行,或者不平行。一般说来,这些位错对不外乎属于下述三种情况:

1. 位错双象

这又有两种情况:一是有两个操作反射成象,与衍射象对应的衍射谱上有两个强衍射斑点;二是在某种特定衍射条件下, $g \cdot b$ 具有特定的大于1的值。这种情况的典型例子是在 hcp 结构中,有些全位错,在低指数反射下, $g \cdot b = 2$,这时位错线的象强度分布上有两个强度峰,因之容易看到一根位错两个象。G. Thomas 指出,正可以利用这一点来鉴别六方晶系中的位错布氏矢量。而 fcc 和 bcc 中, $g \cdot b > 1$ 的情况则是不常见的,除非采用较高指数的反射。换句话说,面心和体心立方结构中的位错双象,多半是由两个操作反射造成的;而六方晶系则还应具体分析。

2. 位错偶(dislocation dipoles)

它是指在相邻且平行的两个滑移面上的两个反号位错,如图 11-19(a)。位错偶的 b 符号相反。由于它们之间的弹性交互作用,彼此联系在一起。它的特点是:①象间距一般 $\geq 300 \text{ \AA}$,当 g 或 s 符号反转时,其间距也发生变化。②在试样中成倾斜取向的位错偶,不论位错间距如何,位错象总存在一个反演对称中心。

位错偶衬度消失与否,其判据与弹性各向异性材料中单个位错的消失判据相同。刃位错偶(非混合型)只在下述条件下,才能完全消失:位错偶垂直于晶体的弹性对称平面: $g \perp u$ 。但即使这样,仍有可能出现微弱衬度。

位错偶布氏矢量的测定,只要两位错线间有足够距离 ($\geq 300 \text{ \AA}$),就可以采用与测定单个位错布氏矢量相同的方法进

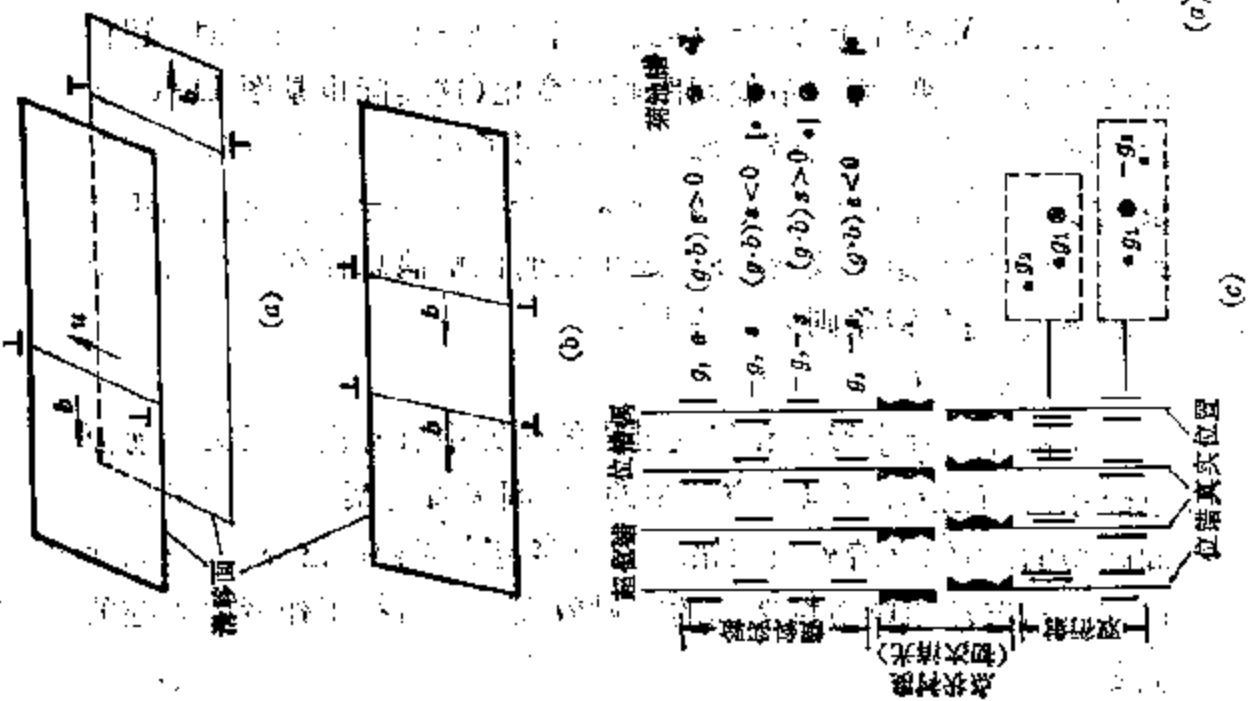


图 11-19 位错象成对出现的几种情况
(a) 位错偶; (b) 超位错; (c) 位错双象、位错偶和超位错的实验鉴别;
(d) Al₃ 合金中的位错双象; (e) Ni-7%Al 合金中的超位错^[7]

行;但如线对过近,因两者的应变场重叠,将使测定发生困难。

3. 超位错(superdislocations)

它是指在短程有序合金中存在的位错对。与位错偶不同之处是超位错的两根位错在同一滑移面内,且其布氏矢量符号相同,如图11-19(b)。两根位错的间距根据材料不同,可以在 $20 \sim 1000 \text{ \AA}$ 之间变化。但当 g 或 s 符号反转时,间距则并不发生变化。其布氏矢量的测定方法与一般单个位错相同。因为 b 同号,两位错结合在一起,对测量的影响只是 b 的大小,而与方向无关。测定超位错间距最好采用弱束法成像。

文献上不同作者对位错双象、位错偶、超位错、位错对四个名称有混用的情况。如J. W. Edington在文献[42]中所指的位错对(dislocation pairs)实际上是G. Thomas在文献[99]中所指的超位错;而Thomas所说的位错对,则包括位错偶和超位错。我们在这里采用位错双象、位错偶和超位错三个名称,比较恰当地反映了这三种位错衍射象的物理实质,而不易发生混淆。

图11-19(c)说明了衍射实验上区别位错偶和超位错的鉴别方法。主要原理在上面已经提到:当 g 或 s 的符号改变时,超位错的象间距不变,而位错偶间距则有变化(这实际也是图11-18所示原理的应用)。此图最下部,同时说明了双衍射成像导致位错双象的形成。中部则除了说明 g 或 s 改变符号将导致位错偶间距的改变(超位错间距不改变)外,还可说明位错偶总存在一个反演中心的特点(超位错象则无此特点)。

(四)位错环

位错环在合金形变和相变过程的研究中有着重要意义。前面已经指出:位错环可以是空位型的,中间夹着内禀层错;也可以是间隙型的,中间夹着外禀层错。如何鉴定这两种位错环,以及如何区别它与沉淀相应力场造成的衍射效应,是衍射工作者感兴趣的问题。

1. 确定位错环布氏矢量的 FS/RH 方法^[90]

Hirth和Tole 1968年曾总结提出了定义位错环的布氏矢

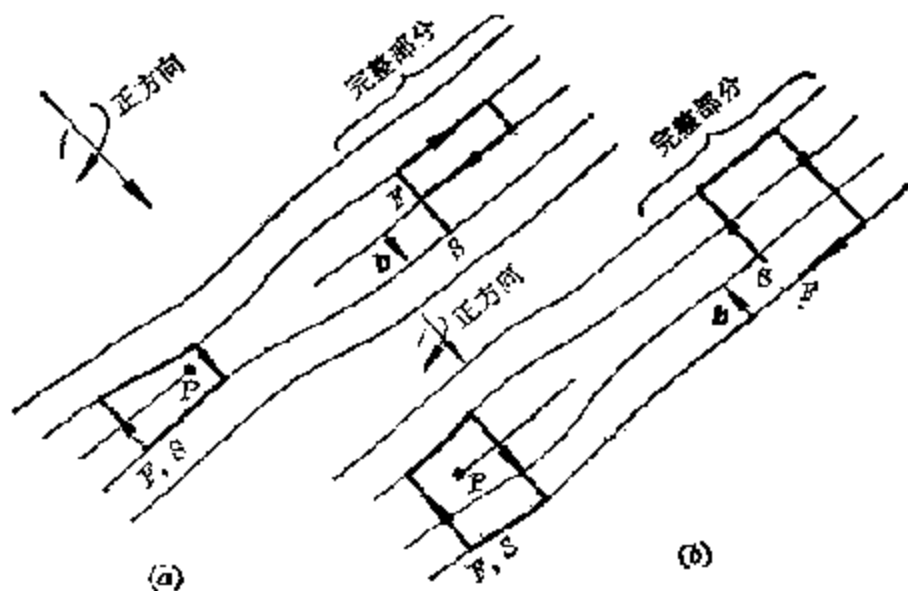


图 11-20 FS/EH 方法确定位错环的布氏矢量
(a) 空位环; (b) 间隙环

量的方法,其要点是(见图 11-20):

(1) 规定位错环的正方向是从上面看位错环的顺时针方向。

(2) 沿位错线正方向观察(图中从 P 点向图内),按右手螺旋规则(RH),绕位错线构成回路,如图(a)、(b)的左下端,其出发点 S 与终点 F 重合,回路封闭。

(3) 在完整晶体(图 a、b 的右上端)部分,再另作同样长度的回路, S 与 F 不重合。于是由 F 引向 S 一矢量 $\overrightarrow{FS}$,并将它定义为位错环的布氏矢量。可见空位环的布氏矢量指向环下;间隙环的布氏矢量则指向环上。

定义环面向上的法线方向为 n ,显然,与图 11-20 所示纯刃型位错环情况不同的切变空位环(b 与环面不正交,斜向下方), b 与 n 成钝角;切变间隙环(b 与环面不正交,斜向上方), b 与 n 成锐角。

2. 纯刃型位错环性质的确定

按照 FS/RH 方法确定纯刃型间隙位错环[图 11-21(a)]的布氏矢量垂直于环面向上;纯刃型空位环[图 11-21(b)]的布氏矢量垂直于环面向下。如果入射束在离位错环较远处(完整晶体)以

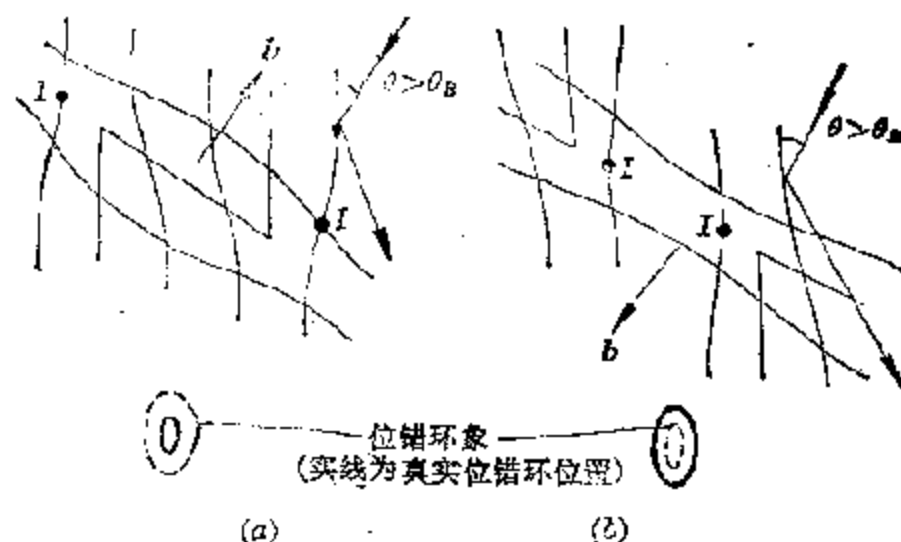


图 11-21 纯刃型位错环周围晶面弯曲情况对衍射条件的影响
(a) 间隙型环; (b) 空位型环

$\theta > \theta_B$ 入射, 则间隙环外侧的晶面弯曲使 θ 角减小而倾向于接近布拉格条件, 从而在外侧(图 a 中 I 处)产生强的衍射, 使其象位于实际位错的外侧, 如图(a)下方所示。在同样 $\theta > \theta_B$ 条件下, 空位环则是环内侧的晶面弯曲也有使 θ 减小的趋势, 从而使其内侧接近满足布拉格条件, 并产生强的衍射。这样, 象便位于实际位错内侧, 如(b)图下方所示。上述讨论均取 g 向右。可见对图(a), g 与 b 成锐角, 即 $g \cdot b > 0$; 对(b)图 g 与 b 成钝角, 即 $g \cdot b < 0$ 。由此可得出根据 $g \cdot b$ 值为正或负来判断纯刃型位错环为间隙型还是空位型的判据, 即: $g \cdot b > 0$, 象在环外, 环为间隙型; $g \cdot b < 0$, 象在环内, 环为空位型。此判据被用来测定 b 的方向和刃型位错环倾斜方位。实验时先分别在 $+g$ 和 $-g$ 下成象, 观察象移动方向便可确定 b 的方向; 再根据 b 的方向, 也就可以判断环的性质。不言而喻, 正确测定 g 的指数和尽可能满足双束条件至关重要。现将实验步骤归纳如下:

① 选择不同 g (下面讨论偏位错时还要提到) 成环的衍衬象, 根据环的象衬特点(有无层错条纹, 衬度强弱), 确定 b 和环的所在平面。对于大尺寸位错环布氏矢量测定方法, 与前面所述一般布氏矢量测定方法相同。

② 再选择适当反射, 在 $+g$ 和 $-g$ 下成像, 观察由 $+g$ 到 $-g$ 过程中, 位错环象是由大变小, 还是由小变大。如果①已判定环面与图 11-21 相似, 上左向下右倾斜, 并取 $+g$ 向右, 则由大变小为间隙型, 由小变大为空位型。如果已经确定了环所在平面, 则此平面向上指的法线 n 亦为已知, 而 b 已在①中求得, 则 $n \cdot b < 0$ 为间隙环, $n \cdot b > 0$ 为空位环^[42]。

3. 一般混合位错环性质的确定

上述方法, 只适用于纯刃型位错环的分析。如果为混合位错环, 则其布氏矢量还存在一个切变分量, 即 b 不与环面正交。对于这种位错环的分析, Maher 和 Eyre 指出^[190], 如果混合位错环的 b 落在由下述边界条件所规定的范围内时, 位错环衬度仍表现出纯刃型位错环的性质。这个边界条件是(B 为电子束方向):

$$\left. \begin{array}{l} n \cdot b = 0 \\ n \cdot B = 0 \end{array} \right\} \quad (11-19)$$

这就是说, 当 b 的切变分量达到某一值以前, 环的衍衬特点仍与纯刃型位错环相同, 故仍可采用上面所介绍的方法进行分析, 确定这种混合位错环的性质。若取向超出上述范围, 象的位置将与图 11-21 所示情况相反。这可以用示意图来表示, 如图 11-22。它表明电子束方向与布氏矢量间夹角越大 (即 φ 越大), n 处于衬度反转区的机率也越大。可见测定混合位错环的性质时, 确定 b 与 n 之间的关系是很重要的。在某些晶体中, b 与 n 有确定的关系, 故有可能选择一个合适的取向, 使 b 与 B 之间的夹角足够小, 以致虽是混合位错环, 却仍表现出纯刃型位错环的衬度特点。因此这时, 仍可

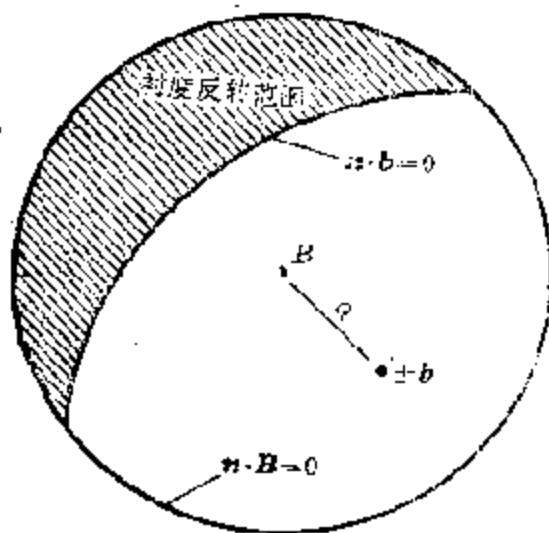


图 11-22 当混合位错环仍具有纯刃型位错环的衍衬特点时, 该位错环应有的取向范围

沿用分析纯刃型位错环的程序进行分析。

例如体心立方金属的混合位错环，当 $B = [011]$ 时，只有 $b = \frac{1}{2}[111]$ 和 $b = \frac{1}{2}[\bar{1}11]$ 的环是可以利用纯刃型位错环分析方法进行分析的。它们的有关晶体学数据如表 11-13。上述两种情况下，由于 B 也是 $[011]$ ， φ 角值 35.27° 均满足要求，故只要是上述两种布氏矢量之一，就是可分析的。这时 g 的选择：若 B 接近 $[011]$ ，取 $g = [01\bar{1}]$ ；若 B 接近 $[012]$ ，取 $g = [\bar{1}2\bar{1}]$ 或 $[12\bar{1}]$ 。

表 11-13

b	滑移面法线方向 n	$n \cdot b$ 夹角
$\frac{1}{2}[111]$	$[110][101][011]$	35.27°
$\frac{1}{2}[\bar{1}11]$	$[\bar{1}10][\bar{1}01][011]$	35.27°

简单计算还表明：若 B 不是 $[011]$ ，而是与 $[011]$ 成 13.27° 的 $[\bar{1}33]$ ，也是可行的，它不会使 $b = \frac{1}{2}[111]$ 位错环进入图 11-22 中的阴影区。此时，先用 $g = [310]$ 成象，看到略大的位错环；再改用 $-g = [\bar{3}10]$ 成象，发现位错环的象变小，这正是图 11-21(a) 的情况， b 相对于环面之上，故可肯定此 $\frac{1}{2}[111]$ 环为间隙型环。

现将大尺寸（指外形明显可辨，不小于 $200 \text{ \AA}$ ）位错环的鉴定程序小结如下：

(1) 求膜面法线方向 FN ：零倾斜下拍摄位错环衍衬像和相应衍射照片，对衍射谱进行标定，求出膜面法线的正确指数 FN ，同时用菊池图或其它方法消除 180° 不唯一性。

(2) 测定布氏矢量 b ：先倾斜试样，使电子束方向沿晶体的某一简单方向，即使 B 取 $[111]$ 、 $[001]$ 、 $[110]$ 等方向。在这种 B 的取向下，易于识别和选取合适的低指数操作反射，以测定 b 。

必要时,在几个不同 B 下,用几组 g 测定 b ,各组测出的结果应是一致的。必须注意前后几个 B 取向,应在同一极图三角形内。

(3) 在 $\pm g$ 下观察环尺寸变形:在简单 B 取向,用几组 $\pm g$ 拍摄位错环的衍衬照片,观察大小变化规律。

(4) 求 n :用迹线分析方法或简单的倾斜技术,求环所在平面的取向 n (可参看 § 9-4)。

(5) 有了上述 b 、 g 、 B 、 n 数据及在 $\pm g$ 下环尺寸的变化规律,就可利用本节 2. 中所述方法,得出位错环性质属于空位型还是间隙型的结论。

以上操作程序可以称为 $\pm g$ 位错环性质鉴定法,简称“ $\pm g$ 法”。

4. 小位错环分析

如果环尺寸很小(例如仅几十埃),它们在 $\omega = \xi_s s_s \gg 1$ 双束衍射条件下,其衍衬是一个黑点;但在 $s_s \approx 0$ 的动力学条件下,则表现为类似共格沉淀应变场的黑白衬度。分析这种小位错环,采用大 s_s 下成弱束像的方法,虽颇为有效,但此处不准备详述。下面仍重点介绍以衬度变化为根据的分析方法,且其中只限于到目前为止已有的若干结果。

双束动力学近似计算指出,对小刃型位错环有如下结果:

① 在距上、下膜表面 $1 \sim 1.5\xi_s$ 距离内,这些环具有花瓣状黑-白衬度。

② 定义矢量 l 为从黑衬度一侧到白衬度一侧的矢量。 $\pm l$ 与 g 的方向无关,但它平行或反向平行于布氏矢量 b ,严格讲是平行或反向平行于 b 在衍衬象上的投影方向。值得指出,这种平行或反平行关系都只是近似的,因此不能根据这点确定 b 。 $\pm l$ 与 g 方向无关,已为许多实验所证实。

③ $g \cdot l$ 的符号与位错环的性质以及环距上、下表面的距离有关。空位环与间隙环的黑-白衬度相反。

④ 将靠近上、下膜面的试样各分为三层:上、下表面至 $0.25\xi_s$ 处为第一层,记作 L_1 ; $0.35\xi_s$ 至 $0.7\xi_s$ 处为第二层,记作 L_2 ;

0.8 ξ_0 至 1.25 ξ_0 处为第三层, 记作 L_3 。层与层之间的间隙约为 0.1 ξ_0 , 间隙中环的黑-白衬度不可辨, 呈黑点状衬度。

⑤ 上表面各层的 BF 与 DF 衬度相同; 下表面各层的 BF 与 DF 衬度相反。

⑥ 反常吸收系数 $ANO = \xi_0/\xi'_0 \approx 0.05 \sim 0.1$ 时, 在 $\omega = 0$ 动力学条件下, 隐约能看到四层花瓣状黑-白衬度的位错环象。再往试样深处, 环的象是黑点。

上述结果, 综合表示如图 11-23。

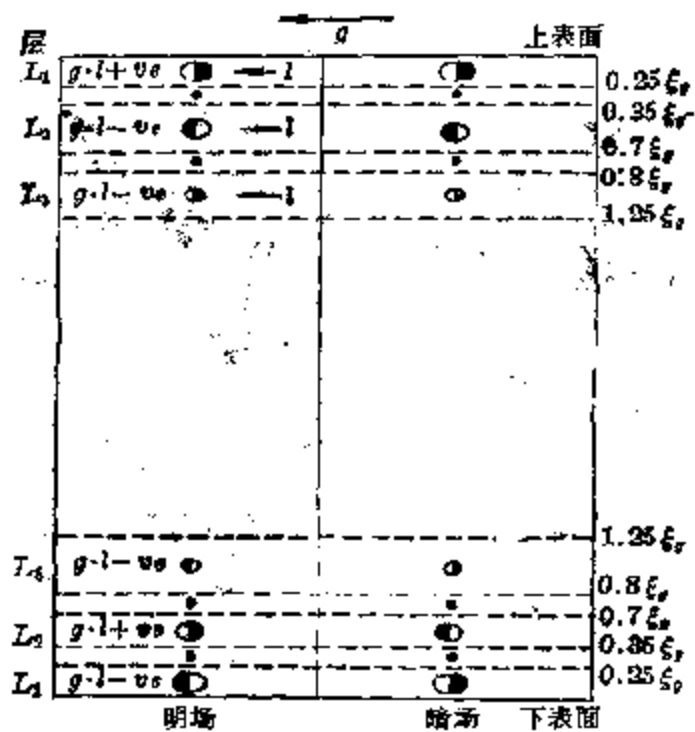
对小混合位错环, 以同样的近似计算, 也得到相似的结果。即: 按层次分, 环象的黑-白衬度规律与小刃型位错环相同, 衬度与 $g \cdot l$ 关系也相同; 只要 n 与 b 夹角不大, 也同样仍可观察到花瓣状黑-白衬度。不过, 上述分析, 要求进行高精度的实验。

为确定小位错环的性质, 首先需要在 $s_0 \approx 0$ 条件下, 拍摄高质量衍衬象, 以求得 $g \cdot l$ 符号(参看图 11-23); 另一关键实验是精确测量环所在处的深度, 可应用立体显微照相法。这是一项十分细致的工作, 测量过程, 可参见文献 [42], 也可参考 Rühle^[41], Ipohorski^[42] 等人关于铜中细小位错环工作的报导。

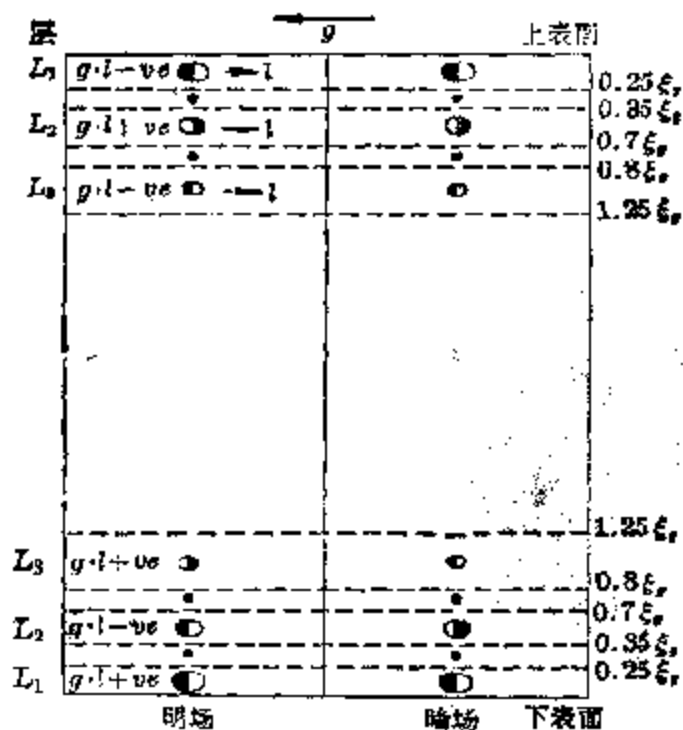
图 11-24 是辐照镍中位错环的衍衬照片。(a) 为间隙型 Frank 环; (b) 为间隙型但未显示层错衬度的位错环^[43]。

(五) 露头位错 (end-on dislocations)

垂直于试样表面、平行于电子束方向的位错, 在衍衬象上只看到位错的端部, 通常称为露头位错, 如图 11-25(a)^[7]。对于这种位错衬度的解释, 最早是 1964 年由 Tunstall、Hirsch 和 Steeds 等人提出来的^[44]。他们认为由于表面应力松弛, 造成了一种从表面开始, 向试样深处发展, 并逐渐减弱的附加径向位移 R_0 , 如图 (b)。此 R_0 导致位错露头附近, 晶体表层原子位置的微小畸变; R_0 随 z 增加而减小, 随 r 减小而增加。这种在表层一定深度处的畸变, 就是露头位错衬度的来源。Tunstall 等在弹性各向同性材料中, 对露头处衬度进行了计算, 其结果示意如图 (c)。他指出衬度表现为对称分布于 g 两侧的黑白衬度瓣, 在两瓣之间, 沿 g 方向存在一



(a)



(b)

图 11-23 小尺寸位错环明暗场象随距上、下表面深度不同, 表现出黑-白衬度反转

(a) 空位型 Frank 环; (b) 间隙型 Frank 环^[42]

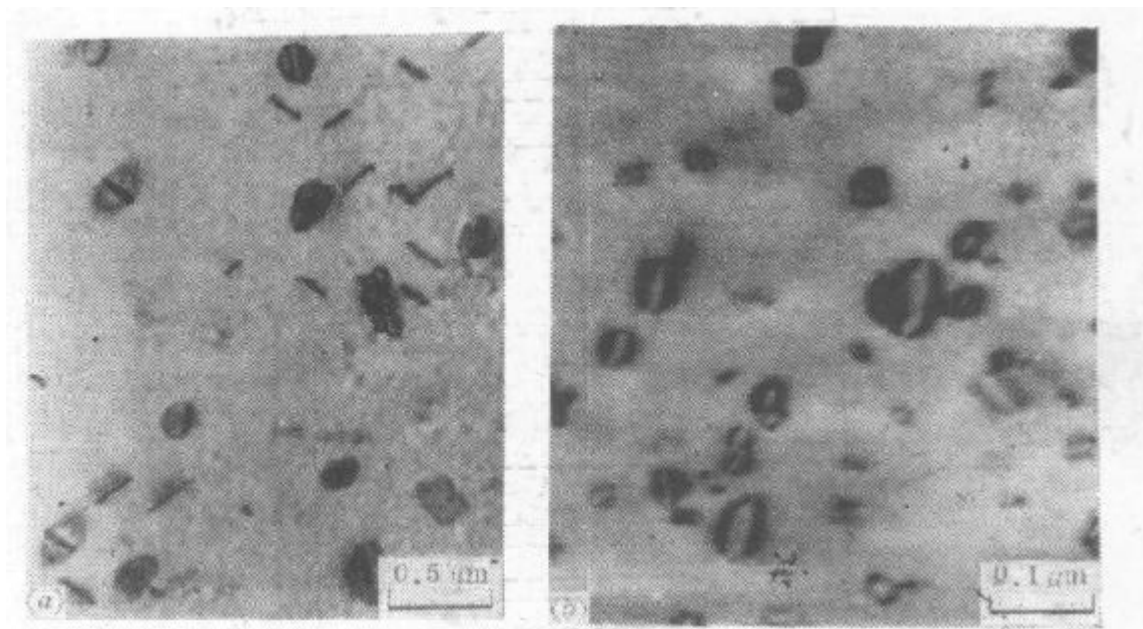


图 11-24 辐照镍中的位错环

(a) 间隙 Frank 环, 显示层错衬度; (b) 间隙环不显示层错衬度

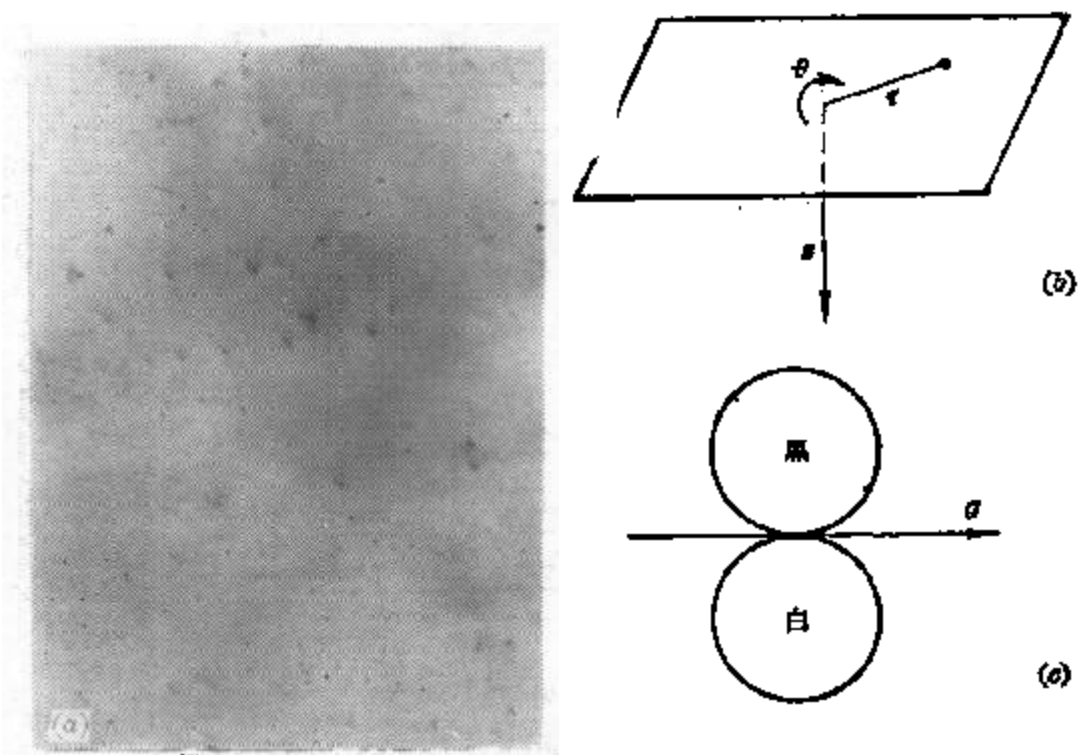


图 11-25 露头位错衍衬象及其解释

(a) 镍铝合金中的露头位错^[7]; (b)、(c) 露头位错象衬解释^[94]

根“无衬度线”。这与位错环及球形质点应变场造成的衬度不同, 后者的“零衬度线”是垂直于 g 的。Tunstall 等人的上述衬度计算, 是按垂直于膜表面的情况计算的。他们指出, 如果是刃位错, 若严格沿着位错线方向(即从露头端部)观察, 衬度很弱, 甚至很难观察到; 略偏离位错线方向入射, 则产生复杂的象衬, 分析比较困难。我们在拍摄图(a)时, $g \cdot b = 0$, 可见衬度确实来自表面松弛效应。因为是螺位错, 它与刃位错不同, 稍稍偏离位错线方向 u 入射, 象衬无明显变化, 黑白衬度瓣仍清晰可见。

Tunstall 等还指出了测定露头螺位错指向(向上还是向下)的方法: 在正片上, 若我们沿着 g 方向看, 黑瓣在 g 左侧, 则从上往下(从电子枪往下)看试样, 位错是右螺旋的; 反之, 如黑瓣在 g 右侧, 则位错是左螺旋的。如果采用 FS/RE 方法确定 b , 则上述第一种情况 b 向下, 第二种情况 b 向上。

(六) 层错和不全位错

在晶体中全位错所要求的滑移过程, 从能量上有利角度考虑, 它可以通过分解为两个不全位错的过程来实现。在两个不全位错中间, 夹着一片堆垛层错, 通常把层错连同其两端的不全位错, 称为扩展位错。全位错分解为不全位错, 是位错反应之一。如前所述, 不同晶体结构材料, 其全位错及由它分解而来的不全位错类型不同, 即布氏矢量不同, 层错性质也不同。它们对于材料的力学性质的影响也各异。研究扩展位错的形成过程及其特征, 是从微观探索强度本质的重要方面, 也是材料工作者和衍射工作者十分关心的问题。从衍射工作角度看, 它包括: 不全位错布氏矢量的测定; 层错性质的确定; 层错的衬度分析; 层错能的测定等问题。现分别进行讨论如下:

1. 不全位错布氏矢量 b_p 的测定

以 fcc 中全位错分解为例, 其不全位错布氏矢量有两种: 肖克莱不全位错, $b_p = \frac{1}{6}\langle 112 \rangle$; 弗兰克不全位错, $b_p = \langle 111 \rangle$ 。

(1) 不全位错是否显示衬度的判据

在衍衬象中决定层错和不全位错是否有衬度的因素是位相因子 $\alpha_F = 2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}_F$ 和 $\alpha_p = 2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_p$ 。因为当 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}_F$ 有整数值时, $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_p$ 也有整数值; 当 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}_F$ 有分数值时, $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_p$ 也有分数值。故通常研究不全位错和层错的衬度时, 考虑 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_p$ 的取值即可。

因面心立方中反射指数为全奇或全偶, 故 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_p$ 可以为零或 $\pm 1, \pm 1/3, \pm 2/3$ 。对于层错, 当 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}_F = 0$ 或 ± 1 时, 层错条纹衬度消失; 当 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}_F = \pm 1/3$ 或 $\pm 2/3$ 时, 层错产生强的衬度。因之, 为了更好鉴定不全位错的衬度, 最好选择使层错条纹消失的衍射条件 (即设法使 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_p = 0$ 或整数)。尽管如下面所述, $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_p = \pm 2/3$ 和 $\pm 1/3$ 也可以作为不全位错是否显示衬度的判据, 但因这时还有层错条纹衬度, 将使不全位错衬度模糊不清。

关于不全位错是否显示衬度的判据, 已有过一些讨论和实验工作, 现概述如下:

1) 层错衬度消失时, 不全位错消失的判据: 在 $\mathbf{g} = \{220\}$ 或 $\{11\bar{3}\}$ 条件下, $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_p = 0$, 可以作为不全位错消失的判据。Howie 和 Whelan^[95]、Silcock^[96] 对此在弹性各向同性条件下进行了衬度计算, 得出如下结论:

① 对螺位错, $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_p = 0$, 不全位错和层错的衬度同时消失。

② 对刃位错, 如果 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_p = 0$, 同时还有 $m = \frac{1}{|\mathbf{g}|} \mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_p \wedge \mathbf{u} = 0.2024$ (在 $\omega \leq 1.0$ 时), 位错不仅有衬度, 而且还显示强的双象。

但他们却还同时指出, 不能把上述结果作为普遍规律, 套用在所有的面心立方材料中。当然如采用不同反射得到几组衍衬象, 并以 ①② 判据进行分析, 结论均相同, 才是可信的; 若出现矛盾, 则还必须借助于图象计算方法进行校验。

如果 $\mathbf{g} = \{220\}$ 或 $\{11\bar{3}\}$, $\omega \leq 1.0$, 使 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = \text{整数}$, 则层错不可见, 而不全位错仍是可见的。

2) 有层错条纹时, 不全位错消失的判据: 这时 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}_p$ 值一定不为零或整数, 可以取 $\pm 1/3, \pm 2/3, 4/3$ 。至于取这些值时不全位错的衬度显示规律, 根据 Howie 和 Whelan^[102], Clarebrough

和 Morton^[81] 等人的工作结果指出,可能是比较复杂的。尽管一般都认为: $g \cdot b_p = \pm 1/3$ 时,不全位错消失; $g \cdot b_p = \pm 2/3$ 时,不全位错显示衬度。但仍然会出现一些特殊情况,需要仔细考虑具体的衍射条件,进行分析。上述文献关于 $g \cdot b_p = \pm 1/3$ 和 $\pm 2/3$ 时不全位错衬度的分析,报导过如下结果,可供参考:

① $g \cdot b_p = \pm 1/3$, $\omega = 0 \sim 1.0$ 和 $g \cdot b_p \wedge u$ 值甚小甚至可忽略时,不论肖克莱或弗兰克不全位错,均不可见。

② $g \cdot b_p = \pm 2/3$ 时,不全位错衬度比较复杂,它与膜厚 t 以及 ω 有关。 $g \cdot b_p = +2/3$, $\omega \rightarrow 0$ 时,衬度可见,也可能消失,决定于膜厚;若 $\omega = 0.5$ 左右,则衬度消失,与膜厚无关; $\omega \rightarrow 0$ 时,衬度弱或不可见,与膜厚有关。至于 $g \cdot b_p = -2/3$, 只有当 $\omega \geq 0.7$ 时,不全位错才是不可见的;而接近动力学条件,即 $\omega \rightarrow 0$ 时,衬度显示或消失,不能确定。文献 [96] 报导了类似的结果:认为 $\omega \leq 0.7$ 时,位错是可见的;大于此值时,则 $g \cdot b_p = -2/3$, 不可见, $g \cdot b_p = +2/3$, 仍然是可见的。

前几年,郭可信、林保军通过对镍铬合金中不全位错的衍射观察指出^[97],用 $g \cdot b_p = \pm 2/3$ 或 $\pm 1/3$ 作为不全位错是否显示衬度判据的不确定性,并且也不够严格。他们也认为应该尽量选择 $\{220\}$ 或 $\{311\}$ 型反射成像,因为这时 $g \cdot b_p$ 值或者为零或者为整数,因此层错将不显示衬度,有利于准确判断不全位错有无衬度。郭可信等还指出了衍射条件偏离布拉格位置的程度(即 ω),是应用此判据检测不全位错衬度不可忽视的因素。

③ 当采用 $\{111\}$ 和 $\{200\}$ 反射时,将出现 $g \cdot b_p = \pm 4/3$ 的情况。Oblak 和 Kear 指出^[98]: 当 $g \cdot b_p = +4/3$ 时,不全位错可见;当 $g \cdot b_p = -4/3$ 时,衬度消失。但此规律也并非适用于一切 $g \cdot b_p = \pm 4/3$ 的情况。对于 $g \cdot b_p = \pm 4/3$ 的衬度效应的研究至今还比较少。

上述 ①、②、③ 三项,应用于当层错位于不全位错的右侧,且位错线方向 u 反转时,则其衬度结论也相反。

由以上介绍可知,关于不全位错衬度消失的可靠判据,还有许

表 11-14 fcc 中不全位错的 $g \cdot b_e$ 值^[90]

位错面	$g \cdot b_p$	200	020	220	220	111	111	422	311
111	$a/6[112]$	-1/3	1/3	0	-2/3	0	-1/3	-1	-1/3
	$a/6[211]$	2/3	1/3	1	1/3	0	2/3	2	2/3
	$a/6[1\bar{1}\bar{1}]$	-1/3	-2/3	-1	1/3	0	-1/3	-1	-1/3
111	$a/6[211]$	2/3	1/3	1	1/3	1/3	1/3	4/3	1
	$a/6[112]$	-1/3	1/3	0	-2/3	-2/3	1/3	1/3	-1
	$a/6[1\bar{1}\bar{1}]$	-1/3	-2/3	-1/3	1/3	1/3	-2/3	-5/6	0
111	$a/6[1\bar{1}\bar{1}]$	-1/3	2/3	1/3	-1	-2/3	1/3	1/3	1
	$a/6[112]$	-1/3	-1/3	-2/3	0	1/3	-2/3	-5/3	0
	$a/6[211]$	2/3	-1/3	1/3	1	1/3	0	4/3	1
111	$a/6[211]$	-2/3	1/3	-1/3	-1	-2/3	0	-2/3	-4/3
	$a/6[1\bar{1}\bar{2}]$	1/3	1/3	2/3	0	1/3	0	1/3	2/3
	$a/6[121]$	1/3	-2/3	-1/3	1	1/3	0	1/3	2/3
111	$a/3[111]$	2/3	-2/3	0	4/3	1	-1/3	0	5/3
111	$a/3[11\bar{1}]$	2/3	-2/3	0	4/3	1/3	-1/3	4/3	1
111	$a/3[1\bar{1}1]$	2/3	2/3	4/3	0	1/3	1/3	4/3	1
111	$a/3[111]$	-2/3	-2/3	-4/3	0	1/3	-1	-8/3	-1/3
111	$a/6[110]$	1/3	1/3	2/3	0	0	1/3	1	1/3
	$a/6[011]$	0	-1/3	-1/3	1/3	0	0	0	0
	$a/6[101]$	1/3	0	1/3	1/3	0	1/3	1	1/3
111	$a/6[101]$	1/3	0	-1/3	-1/3	0	1/3	-1	1/3
	$a/6[110]$	1/3	-1/3	0	2/3	1/3	0	2/3	2/3
	$a/6[011]$	0	-1/3	1/3	1/3	1/3	-1/3	-2/3	1/3
111	$a/6[101]$	1/3	0	1/3	1/3	1/3	0	1/3	2/3
	$a/6[110]$	1/3	1/3	2/3	0	0	1/3	1	1/3
	$a/6[011]$	0	-1/3	-1/3	1/3	1/3	-1/3	-2/3	1/3
111	$a/6[110]$	1/3	-1/3	0	2/3	1/3	0	1/3	2/3
	$a/6[011]$	0	1/3	1/3	-1/3	0	0	0	0
	$a/6[101]$	1/3	0	1/3	1/3	1/3	0	1/3	2/3

[注] $a/6\langle 112 \rangle$: 肖克莱不全位错; $a/3\langle 111 \rangle$: 弗兰克不全位错; $a/6\langle 110 \rangle$: 压杆位错(stair rod dislocations)。

表 11-15 bcc 中不全位错的 $g \cdot b_p$ 值^[100]

层错面	g b_p	110	110	101	101	101	011	011	011	200	020	002	220	220	202	202
$\{211\}$	$a/3[111]$	2/3	0	2/3	0	2/3	2/3	0	2/3	2/3	2/3	2/3	4/3	0	4/3	0
$\{211\}$	$a/6[111]$	1/3	0	1/3	0	1/3	1/3	0	1/3	1/3	1/3	1/3	2/3	0	2/3	0
$\{112\}$	$a/2[110]$	1	0	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1	1	1	0	2	0	1	1
$\{100\}$	$a/2[001]$	0	0	1/2	-1/2	1/2	1/2	-1/2	0	0	0	1	0	0	1	-1
$\{001\}$	$a/2[110]$	1	0	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1	1	1	0	2	0	1	1
$\{110\}$	$a/2[001]$	0	0	1/2	-1/2	1/2	1/2	-1/2	0	0	0	1	0	0	1	-1
$\{110\}$	$a/2[110]$	1	0	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1	1	1	0	2	0	1	1
$\{110\}$	$a/8[111]$	-1/4	0	0	-1/4	0	0	-1/4	-1/4	-1/4	-1/4	1/4	-1/2	0	0	-1/2
$\{110\}$	$a/4[112]$	-1/2	1/4	1/4	-3/4	1/4	1/4	-3/4	-1/2	-1/2	-1/2	1	-1	0	1/2	-3/2
$\{110\}$	$a/8[110]$	-1/4	0	-1/8	-1/8	-1/8	-1/8	-1/8	-1/4	-1/4	-1/4	0	-1/2	0	-1/4	-1/4

表 11-16 六方晶系中不全位错的 $g \cdot b_p$ 值^[19]

(a) $[0001]$ 取向

$g \backslash b_p$	$\frac{1}{3}[11\bar{1}0]$	$\frac{1}{6}[02\bar{2}3]$	$\frac{1}{6}[03\bar{3}3]$
20 $\bar{1}0$	$-2/3$	$-2/3$	$2/3$
2200	$2/3$	$2/3$	$-2/3$
02 $\bar{2}0$	$-4/3$	$-4/3$	$4/3$
21 $\bar{1}0$	0	0	0
12 $\bar{1}0$	-1	-1	1
1 $\bar{1}20$	1	1	-1

(b) $[0001]$ - $[12\bar{2}0]$ 取向

$g \backslash b_p$	$\frac{1}{3}[01\bar{1}0]$	$\frac{1}{6}[02\bar{2}3]$	$\frac{1}{6}[03\bar{3}3]$
21 $\bar{1}0$	0	0	0
3032	1	2	0
3302	-1	0	2

(c) $[0001]$ - $[1\bar{1}03]$ 取向

$g \backslash b_p$	$\frac{1}{3}[01\bar{1}0]$	$\frac{1}{6}[02\bar{2}3]$	$\frac{1}{6}[03\bar{3}3]$
21 $\bar{1}0$	0	0	0
2111	0	$1/2$	$-1/2$
3302	-1	0	0

多工作可做。它与 g 、 u 、 ω 和 t (膜厚) 也均有关系。到目前为止, 即使这些还很不完全的工作, 也都是建立在弹性各向同性介质的假设前提下的。因此不同作者报导的工作结果, 也难免时有出入, 以致有时不得不借助电子计算机进行图象计算, 将实验象与计算象进行对比, 才能得出正确结论。

(2) 测定不全位错布氏矢量的方法

它与全位错布氏矢量的测定, 并无特殊之处。一般也是先估计材料中可能有的不全位错类型, 选定若干低指数反射, 作出 $g \cdot$

b_p 值表备查(参见表 11-14~表 11-16)。实验时注意选择能使层错条纹衬度消失的反射,如面心立方金属,宜选择 $\{220\}$ 和 $\{113\}$ 反射,以获得 $g \cdot b_p = 0$ 条件,当然这也与具体的 b_p 指数有关;六方晶系则宜采用 $(2\bar{1}10)$ 反射。此外,除注意选取 $\omega \leq 1.0$ 外,至少应获得衬度消失的三组衍衬照片,且从它们得到的结论必须是一致的。若简单的倾斜操作不能得到满意的 $g \cdot b_p = 0$ 条件,可利用电子计算机进行模拟计算,将结果与实验象匹配对比,加以确定。

(3) 不全位错分析示例

为了说明不全位错的分析过程,下面以文献 [97] 报导的含 Cr 20% 镍基合金的工作为例。

图 11-26 为不同反射下对同一层错所成的衍衬象;表 11-17 为观察结果和可能的 $g \cdot b_p$ 值。对比表中数据,可以看出不全位错

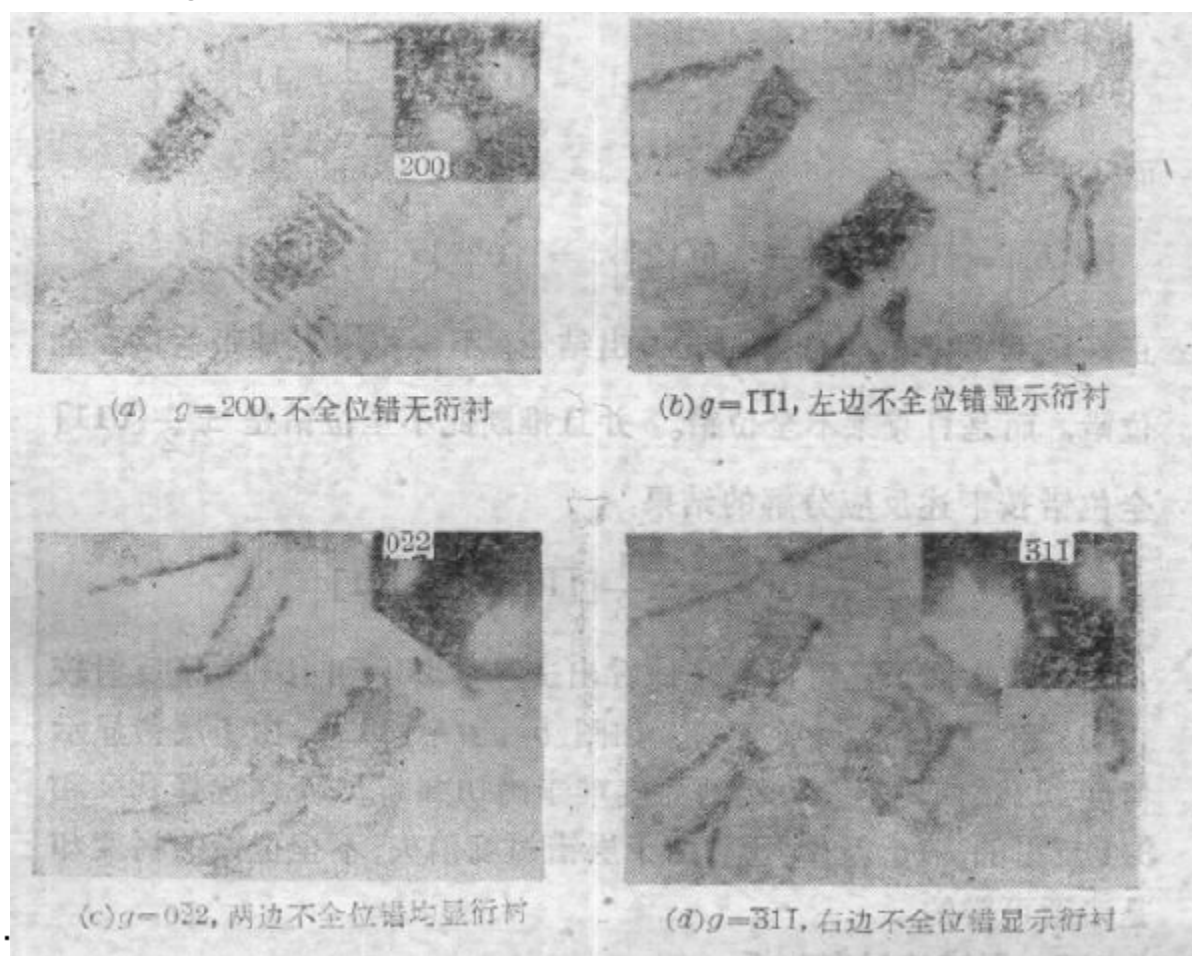


图 11-26 含 Cr 20% 的镍基合金中层错衍衬象

表 11-17 含 Cr 20% 镍基合金层错的衍射分析(相应于图 11-26)

分 图 号	$\begin{matrix} R_F \\ \text{或} \\ b_p \end{matrix}$ g	$g \cdot R_F \text{ 或 } g \cdot b_p$				观察结果		
		$\pm \frac{1}{6} [\bar{1}\bar{1}2]$	$\pm \frac{1}{6} [\bar{1}2\bar{1}]$	$\pm \frac{1}{6} [2\bar{1}\bar{1}]$	$\pm \frac{1}{3} [\bar{1}11]$	层错	不全位错	
							左	右
a	200	$\mp 1/3$	$\mp 1/3$	$\pm 2/3$	$\pm 2/3$	有条纹	无衬度	无衬度
b	$\bar{1}\bar{1}1$	$\pm 2/3$	$\mp 1/3$	$\mp 2/3$	$\pm 2/3$	有条纹	有衬度	无衬度
c	022	∓ 1	± 1	0	0	无条纹	有衬度	有衬度
d	$\bar{3}1\bar{1}$	0	± 1	∓ 1	∓ 1	无条纹	无衬度	有衬度

的布氏矢量只可能是 $\pm \frac{1}{6} [\bar{1}\bar{1}2]$ 及 $\pm \frac{1}{6} [\bar{1}2\bar{1}]$ 。从图(c)的衬度, 也同样可排除 $b_p = \pm \frac{1}{6} [2\bar{1}\bar{1}]$ 及 $\pm \frac{1}{3} [\bar{1}11]$ 的可能性。这是由于在图(c)中, $g = 0\bar{2}2$,

$$g \cdot b_p = [0\bar{2}2] \cdot \left\{ \pm \frac{1}{6} [2\bar{1}\bar{1}] \right\} = [0\bar{2}2] \cdot \left\{ \pm \frac{1}{3} [\bar{1}11] \right\} = 0$$

而

$$|g \cdot b_p| = \left| [0\bar{2}2] \cdot \left\{ \pm \frac{1}{6} [\bar{1}\bar{1}2] \right\} \right| = \left| [0\bar{2}2] \cdot \left\{ \pm \frac{1}{6} [\bar{1}2\bar{1}] \right\} \right| = 1$$

正好显示了衬度。作者由此得出结论, 不全位错不是弗兰克不全位错, 而是肖克莱不全位错。并且推断此不全位错是 $\pm \frac{1}{2} [0\bar{1}1]$ 全位错按下述反应分解的结果:

$$\pm \frac{1}{2} [0\bar{1}1] = \pm \frac{1}{6} [\bar{1}\bar{1}2] + \pm \frac{1}{6} [\bar{1}2\bar{1}]$$

从这个例子还可以清楚地看出选择 $\{220\}$ 和 $\{\bar{3}1\bar{1}\}$ 型反射较 $\{200\}$ 和 $\{\bar{1}11\}$ 型反射有利。如图(b), $g = [\bar{1}\bar{1}1]$, 由于层错显示衬度, 以致两侧不全位错的衬度难于确切判断。而在选择 $0\bar{2}2$ 和 $\bar{3}1\bar{1}$ 反射的图(c)及(d)上, 由于层错衬度消失, 不全位错的衬度却是清晰可辨的。

2. 层错的衬度分析

层错是晶体中最常见的平面缺陷之一, 其它平面缺陷还有片

状沉淀和基体的界面、有序合金中的反相畴边界等。

面心立方和密排六方晶体中，都经常观察到堆垛层错，也是目前研究得较多的层错类型。层错衍射象的最基本特点表现为平行于层错面与膜面交线的明暗相间的条纹。条纹数与膜厚、层错面相对于膜面的取向，以及一定操作反射下材料的消光距离 ξ_g 有关。决定层错象特点的基本因素，是电子束通过层错面时，引起了相位因子 $\alpha = 2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}_F$ 的变化。

(1) 面心立方金属层错的衬度分析

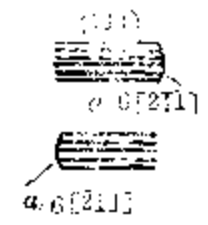
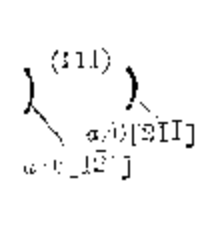
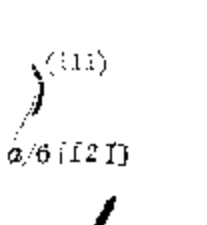
在本章 § 11.2 的二、四、中，已经指出，面心立方金属的层错可以通过两种方式形成：一是全位错在切应力作用下，发生下述分解反应：

$$\frac{a}{2}[\bar{1}01] = \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}2] + \frac{a}{6}[\bar{2}11]$$

在右边两个 $\frac{a}{6}\langle 112 \rangle$ 型不全位错中间夹着一片层错；二是通过空位片或间隙原子片上下基体原子面的崩塌而形成刃型棱柱位错环，环内即为层错，而在层错与周围基体交界处，是布氏矢量为 $a/3\langle 111 \rangle$ 的不全位错。

在平面缺陷中，层错的衬度分析是最简单的。因为只需考虑通过层错面时两部分晶体的相对位移，而这两部分晶体各自还是完整的，且取向相同（即衍射时有相同的 s 和 $\mathbf{g}$ ）。Hirsch 和 Whelan^[101] 首先研究了它的衬度。由于上述特点，它的条纹衬度与楔形晶体的等厚条纹衬度的形成机理相同。在层错面各处，位相角变化 $\alpha = 2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}$ 相同；但离开试样下表面处，各点所获得的衍射振幅却不同，而且呈现周期性变化，因此出现明暗条纹。显然， $\mathbf{R}$ 不能为一个点阵平移矢量，因为这样， $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}$ 为整数， α 为 2π 的整数倍，不会产生相位差引起的衬度。但是对层错来讲，在特定的操作反射 $\mathbf{g}$ 下， $\mathbf{R}$ 即使不是点阵平移矢量，也能使 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}$ 值为整数。例如， $\mathbf{R} = a/6[\bar{2}\bar{1}\bar{1}]$ ，当 $\mathbf{g} = 2\bar{2}0$ 和 $4\bar{2}\bar{2}$ 时， $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}$ 分别等于 1 和 2。这就是说，选择某一特定操作反射，可以使层错不显示

表 11-18 (111) 面层错及不全位错在不同操作反射下的衬度

位错反应		$\frac{a}{2}[1\bar{1}0] = \frac{a}{6}[1\bar{2}1] + \frac{a}{6}[2\bar{1}1]$		$\frac{a}{2}[011] = \frac{a}{6}[1\bar{2}1] + \frac{a}{6}[11\bar{2}]$	
g		200	220	200	220
$g \cdot b$ ($g \cdot b_p$)	全位错	1	2	0	-1
	左不全位错	$+\frac{1}{3}$	1	$-\frac{1}{3}$	-1
	右不全位错	$+\frac{2}{3}$	1	$+\frac{1}{3}$	0
$g \cdot b_p$	200	$\frac{2\pi}{3}$	0	$-\frac{2\pi}{3}$	0
	220	$\frac{2\pi}{3}$	2π	$-\frac{2\pi}{3}$	-2π
	240	$\frac{4\pi}{3}$	2π	$\frac{2\pi}{3}$	0
衬度示意图					
衬度说明		层错可见; 左不全位错消 失; 右不全位错可 见	层错不可见; 左右不全位错 均可见	层错可见; 左右不全位错 均消失	层错不可见; 左不全位错可 见; 右不全位错消 失
衬度可见与 否的规律		层错: $g \cdot R_F$ (或 $g \cdot b_p$) $\rightarrow 0$ 或整数时 (或 $\alpha_{\text{层错}} = 0$ 或 2π 的整数倍时), 衬度消失; $g \cdot R_F$ (或 $g \cdot b_p$) $= +1/3$ 或 $2/3$ 时 (或 $\alpha_{\text{层错}} = \pm \frac{2\pi}{3}$ 时), 层错可见 不全位错: $g \cdot b_p = 0$ 或 $+\frac{1}{3}$ 时, 衬度消失; $g \cdot b_p = \pm \frac{2}{3}$ 或非零整数 时, 不全位错可见 ^[102]			

衬度。由此可见, 只要使 $\alpha = 2\pi g \cdot R$ 中的 R 等于层错矢量 R_F , 同样可以用研究位错衬度的方法, 来研究层错衬度。

面心立方金属中, $R_F = a/6\langle 112 \rangle$ 或 $a/3\langle 111 \rangle$, 故当 R_F 取 $a/6\langle 112 \rangle$ 、 $a/3\langle 111 \rangle$ 时,

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= \frac{2\pi}{6}(h+k+2l) \\ \alpha &= \frac{2\pi}{3}(h+k+l) \end{aligned} \right\} \quad (11-20)$$

或

因此, α 只能为 $\pm \frac{2}{3}\pi$, 或为 2π 的整数倍。其中前一种情况, 层错显示衬度; 后一种情况, 层错不显示衬度。表 11-14 列出了可能的 $g \cdot R_F$ 值 (即表内的 $g \cdot b_p$ 值), 可以帮助我们选择使层错显示或消失的反射 g 。当然这还不能帮助我们区别此层错是切变的 $a/6\langle 112 \rangle$ 型, 还是 $a/3\langle 111 \rangle$ 型的, 而需要借助于更细致的衬度分析。

下面以层错面为 (111) 的层错衍衬象为例, 说明层错及其两端不全位错衬度消失的情况。

由表 11-18 中的衬度示意图可知, 对于 $\frac{a}{2} [1\bar{1}0]$ 全位错分解形成的层错, 以选择 $2\bar{2}0$ 反射为宜; 而对 $\frac{a}{2} [01\bar{1}]$ 全位错分解形成的层错, 则以选择 200 反射为宜。这样选择, 层错与不全位错不会同时显示衬度, 避免两者的相互干扰。读者在实验前, 可仿照该表形式作一类似的表, 以便心中有数。

表 11-18 中第一列的衬度示意图上, 有两种扩展位错组态, 其中下面一种相当于将位错反应 $\frac{a}{2} [1\bar{1}0] = \frac{a}{6} [1\bar{2}1] + \frac{a}{6} [2\bar{1}1]$ 中各项全部反号。在实际衍衬工作中, 有时在一张照片上可同时看到这两种组态, 这说明它们是互为反号的层错。第三列所示情况, 与图 11-4(d) 上所示相同。至于第四列, 由于层错和右边的不全位错均未显示衬度, 因此易将不全位错 $a/6 [\bar{1}2\bar{1}]$ 误认为某种全位错, 必须引起注意。其方法可倾动试样, 改变操作反射, 以揭示有可能被隐没的其它衬度细节。

如何鉴别 $\frac{1}{3}\langle 111 \rangle$ 与 $\frac{1}{6}\langle 112 \rangle$ 型层错, 往往与测定不全位错的右氏矢量工作同时进行, 需要借助于表 11-14, 选择若干操作反射成像, 对衬度进行比较分析, 才可得出结论 (参见图 11-26 的示

例及其分析)。

在层错分析中,除了鉴别 $(1/3)\langle 111 \rangle$ (晶面崩塌或插入间隙原子层)型与 $\frac{1}{6}\langle 112 \rangle$ (切变)型外,有时还要在肯定为 $\frac{1}{3}\langle 111 \rangle$ 型以后,再鉴别其究竟是属于内禀型还是间隙型。下面讨论这种鉴别方法。

依靠衍射动力学理论,可以预言层错上、下表面处的条纹衬度与位相角 α 之间的关系。主要结论是:

明场下,当 α 为正时,第一根条纹是亮的;而 α 为负时,第一根条纹是暗的。若为暗场,则结果相反。如考虑吸收,则这种明、暗场对称性遭到破坏,即只有下表面处条纹衬度的互补性仍得以保持,而上表面处的条纹衬度,明、暗场并不反转。上述结论示意表示如图 11-27。借助图 11-27(b),还可以根据明、暗场象外侧的条纹衬度,确定哪一侧相当于膜的上表面。

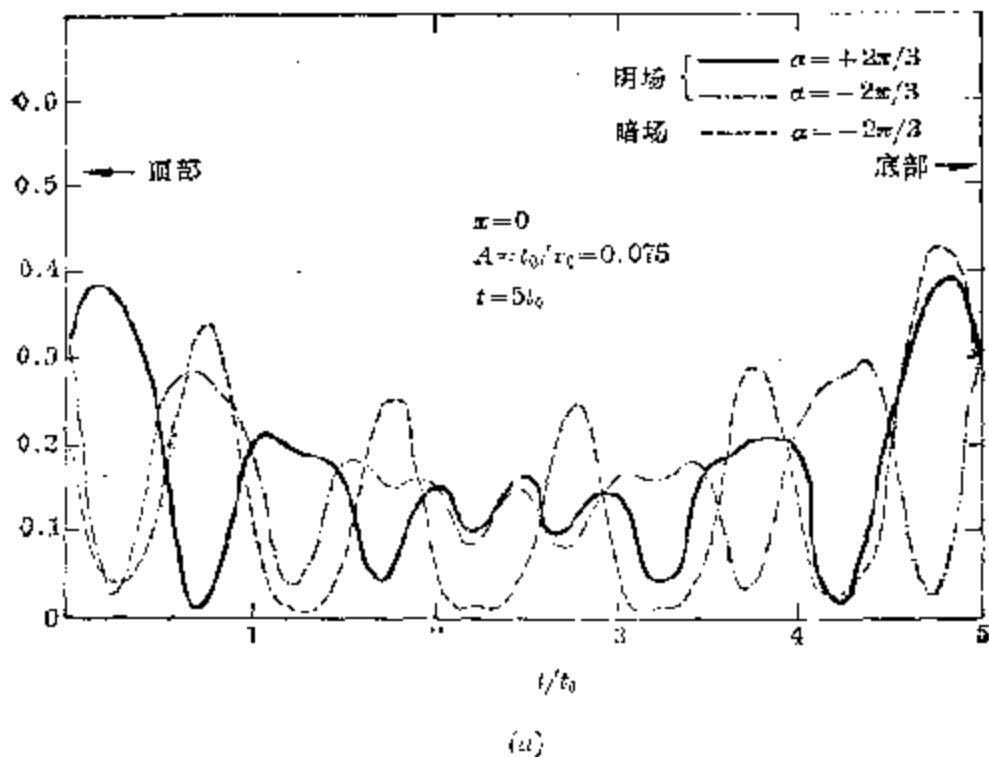
A. Howie, H. Hashimoto 和 S. Amerlinckx 等指出^[108, 104],上述规则可以用来鉴定层错或沉淀片是内禀型还是外禀型的。但作这种鉴定时,还需知道层错面相对于 g 的倾斜指向。

鉴定层错性质的方法很多,主要有:

- ① 明、暗场条纹衬度比较法, Art, 1968^[105];
- ② 仅借助于一张暗场象和衍射谱, Gevers 等, 1963^[104];
- ③ 借助于明场象和衍射谱, Van-Landuyt 等, 1966^[106]。

不论采用何种方法,都必须注意层错条纹衬度对 ϵ 的微小变化都是十分敏感的。试样取向稍不合适,就有可能使第一根条纹的衬度无法辨认,特别是第一根为亮条纹,它与亮的背底相同,以致误认为第一根条纹是暗条纹。采用上述方法,用①法,应取 $\omega=0$;用②法, $\omega \geq 0$;用③法, $\omega \leq 0$ 。现将其中最简单的②法介绍于后。

这个方法的要点:经过转角校正,将操作反射矢量画在 ODP 象上,并使 g 的始点位于条纹象的中心。把面心立方的 g 矢量分成 A 、 B 两组: A 组包括 (200) 、 (222) 和 (440) , B 组包括 (400) 、



正片上的首末条纹衬度

α		$\alpha > 0$	$\alpha < 0$
首末 条纹衬度	不考虑吸收	——— ———	——— ———
	暗场	——— ———	——— ———
考虑吸收	明场	——— ———	——— ———
	暗场	——— ———	——— ———

——— 亮线 ——— 暗线
 * 用 $+g$ 成 ODF; $-g$ 成象, 衬度与此相反

(b)

图 11-27 层错的条纹衬度与位相角 α 之间的关系

(a) $\alpha = \pm 2\pi/3$ 时层错条纹衬度强度分布 (根据双束动力学理论计算, 考虑吸收);

(b) 当 $\alpha < 0$ 或 $\alpha > 0$ 时, 层错首末条纹衬度示意

(111)和(220)。于是可根据图 11-28 的规定,判断层错属于内禀还是外禀。

图 11-28 的规则,也可简洁地总结如表 11-19。

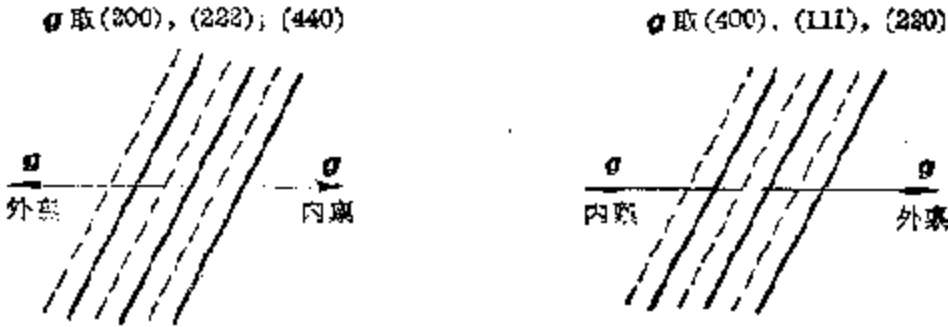


图 11-28 确定面心立方金属中层错性质的 Gevers 方法
(虚线表示亮条纹,实线表示暗条纹。层错相对于膜面取向,也可以与上图不同,例如层错面上部向左倾斜,仍不影响结论)

表 11-19 根据第一根条纹的衬度,决定面心立方金属中层错性质的规则

	g	g 的指向	第一根条纹的衬度(暗场)	
			亮	暗
A	200, 222 440	向左	外禀	内禀
		向右	内禀	外禀
B	400, 220 111	向左	内禀	外禀
		向右	外禀	内禀

现将有助于分析面心立方金属中层错衬度的若干重要结论,概述如下:

1) 明、暗场衬度

明场: 外侧条纹全亮或全暗, 条纹衬度对称。吸收使中心衬度减弱, 以至模糊。双束动力学理论对层错明场象的计算指出^[62]: 最外侧条纹的衬度取决于 $g \cdot R_F$ 值, $g \cdot R_F = +\frac{1}{3}$, 正片上最外侧条纹是亮的; $g \cdot R_F = -\frac{1}{3}$ 时, 最外侧条纹是暗的。层错面向上法线可以通过迹线分析或比较明、暗场象上第一根条纹的衬度来

决定(见下面所述)。试验前可选定一些操作反射,对给定层错逐一计算其 $g \cdot R_F$ 值,然后将根据衍衬照片上最外侧条纹衬度求出的 $g \cdot R_F$ 值与计算表中的 $g \cdot R_F$ 值比较,便可确定层错是内禀还是外禀型。此法可以作为上述 Gevers 方法的补充。

暗场: 条纹衬度不对称, 外侧条纹一亮一暗。如该暗场象是用明场 g 反射形成的(即 $g/3g$ 弱束像), 则明、暗场第一根条纹衬度相同, 最末一根条纹衬度相反; 若该暗场象是用 $-g$ 形成的, 则第一根条纹衬度相反, 最末一根条纹衬度相同。这就是说, 以明场象与 g 暗场象比较, 两者衬度相同的一侧, 相当于膜的上表面; 以明场象与 $-g$ 暗场象比较, 两者衬度相反的一侧相当于膜的上表面。由此即可决定层错面在试样中的倾斜方向。

正片上明场象的衬度, 相对于一定的 g 矢量指向(向左或向右), 第一根条纹衬度的性质, 决定了层错的性质。试验时将经过转角校正后的 g , 重迭在明场衍衬象上(用箭头标出方向), 即可利用图 11-28 或表 11-19 的规则决定层错性质。这个方法的基础是: 在明场象的正片上, 与膜顶部一侧相应的第一根条纹, 当 $g \cdot R_F > 0$ 时, 是亮的; 当 $g \cdot R_F < 0$ 时, 则是暗的。这本身就综合考虑了 g 和 R_F 的相对取向, 再据此归纳出如图 11-28 或表 11-19 所示的规律。

2) 在层错面经过的区域, 若试样厚度发生变化, 则随着厚度 t 的增加, 层错象中心处原有的条纹会出现分叉现象。一般增加一个 ξ_s , 中心处就增加一根条纹, 但外侧条纹不受厚度变化的影响。

3) 当 $s \approx 0$ 时, 暗条纹数目 n 与厚度 t 的关系为:

$$(n-1)\xi_s = t \quad (10-21)$$

$s \neq 0$, 无此关系。

4) 一般当 $g \cdot R_F \geq 0.02$ 时, 就可以观察到层错的条纹衬度。

5) 重迭层错的衬度

如果相邻平行滑移面上的层错, 在沿电子束的方向上重迭, 则对下表面衍射束的位相角 α_F 也会引起迭加, 从而使层错条纹发

生位移,呈现出复杂的衬度。例如当平行的两片层错相重时,由于位相角由一片时的 $\pm 2\pi/3$ (即 120°) 变成 $4\pi/3$ (即 240°), 条纹间距发生变化; 三片层错相重时, 位相角变成 $3 \times (\pm 2\pi/3) = \pm 2\pi$, 这时衬度消失。在面心立方金属中常常观察到这种在一长条层错带中, 局部出现条纹衬度消失的现象, 即属于这种情况。我们在不锈钢的衍衬观察中曾看到过这种现象: 已经出现的上一滑移面上的层错条纹, 由于后继的下一滑移面上不全位错运动产生的层错, 引起两者迭加, 条纹衬度发生变化; 第三滑移面上新生成的层错, 突然使原来观察到的条纹, 局部消失。Bollman 也曾报导过类似的实验结果^[107]。他指出, 即使相邻两片层错相重时, 也有使衬度消失的可能, 这时, 一片层错 $\phi_1 = +120^\circ$, 另一片 $\phi_2 = -120^\circ$ 。关于这一点, 读者还可参阅 Whelan 和 Hirsch 1957 年的文章^[101]。

几年前郭可信等深入细致地分析了面心立方金属中重迭层错的衬度效应^[97], 获得了有意义的结果。他们指出, 在平行滑移面上的层错, 在运动中可以互相重迭, 重迭部分层错条纹相对于未重迭部分的条纹发生位移。重迭层错中内禀层错与外禀层错之间的不全位错, 与一般不全位错的衬度消失准则不同^[109], 在 $g \cdot b_p = \pm 2/3$ 时不显示衬度, 在较强的层错条纹衬度背景下, 表现为亮线; 而在 $g \cdot b_p = \pm 1/3$ 时, 为暗线。文献 [97] 还指出, 层错在运动过程中有时扩展, 也可能收缩。这一点与我们在镍-6.5% Al 合金中观察到的现象十分相似^[77]。重迭部分层错的位相差可以这样考虑: 单个层错相对于基体产生的相差为 $2\pi/3$ 或 $4\pi/3$, 若两层错的相差各为 $2\pi/3$, 则重迭后的合成相差为 $2\pi/3 \times 2 = 4\pi/3$; 若两层错的相差各为 $4\pi/3$, 则重迭后合成相差为 $8\pi/3$, 即 480° 或 120° 。据此, 再考虑下述重迭层错的性质, 就可以定性地分析重迭层错的衬度效应。即: 两个相邻的内禀层错重迭, 重迭部分产生一个外禀层错; 如果两内禀层错中间相隔几层, 则它们重迭后, 衬度仍与外禀层错衬度相似。Head 等曾对重迭层错的衍衬象进行了计算^[83], 结果表明相邻两层间重迭层错的情况与实验较为

符合。故一般可将两个重迭的内禀层错当作外禀层错来处理。

郭可信等对他们所获得的重迭层错衍衬象进行了分析, 示意解释如图 11-29^[97]。

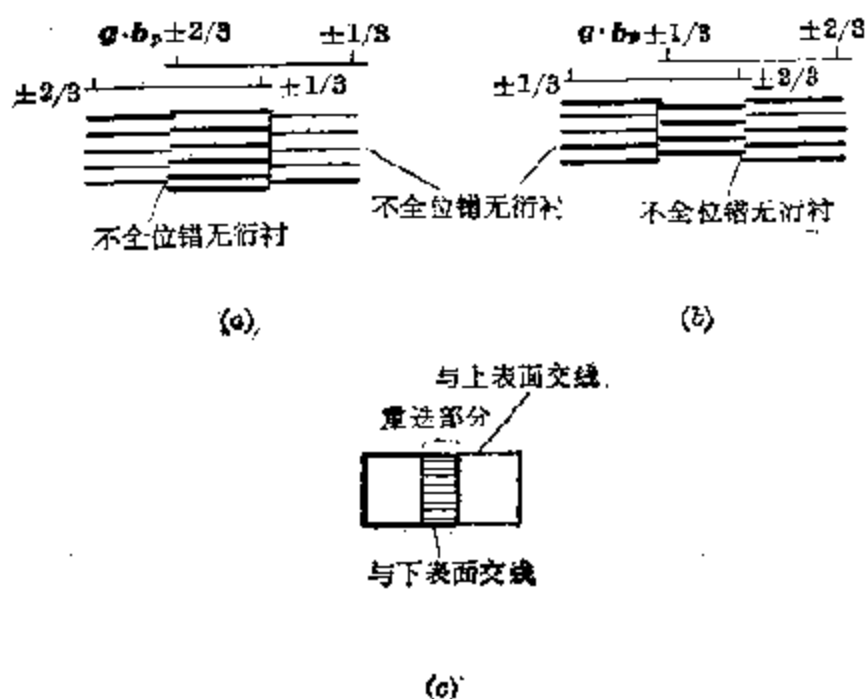


图 11-29 镍铬合金中重迭层错的衍衬分析

不重迭部分: $g \cdot b_p = \pm 2/3$ 时, 不全位错显示暗线衬度;

重迭部分: $g \cdot b_p = \pm 1/3$ 时, 不全位错显示暗线衬度

Thomas 曾对不同情况下, 层错条纹的衬度进行了讨论, 其主要结果是^[99]:

① 若两个同类型层错相重, 因位相角相加: $(2\pi/3) + (2\pi/3) = -2\pi/3$, 故重迭层错处第一根条纹的衬度, 与单个层错衬度相反; 三个同类型层错相重, 合成位相角: $(2\pi/3) \times 3 = 2\pi = 0^\circ$, 故合成后衬度等于零, 层错条纹消失。前者如图 11-30(a); 后者如图 11-30(b)。注意在图(a)的重迭部分仍有条纹, 而图(b)的重迭部分条纹消失。

② 若两重迭层错, 彼此性质不同, 如图(c)。因

$$\alpha_{\text{合成}} = \frac{2\pi}{3} + \left(-\frac{2\pi}{3}\right) = 0$$

其结果与图(a)不同, 重迭部分的衬度将消失。若此不同型层错彼

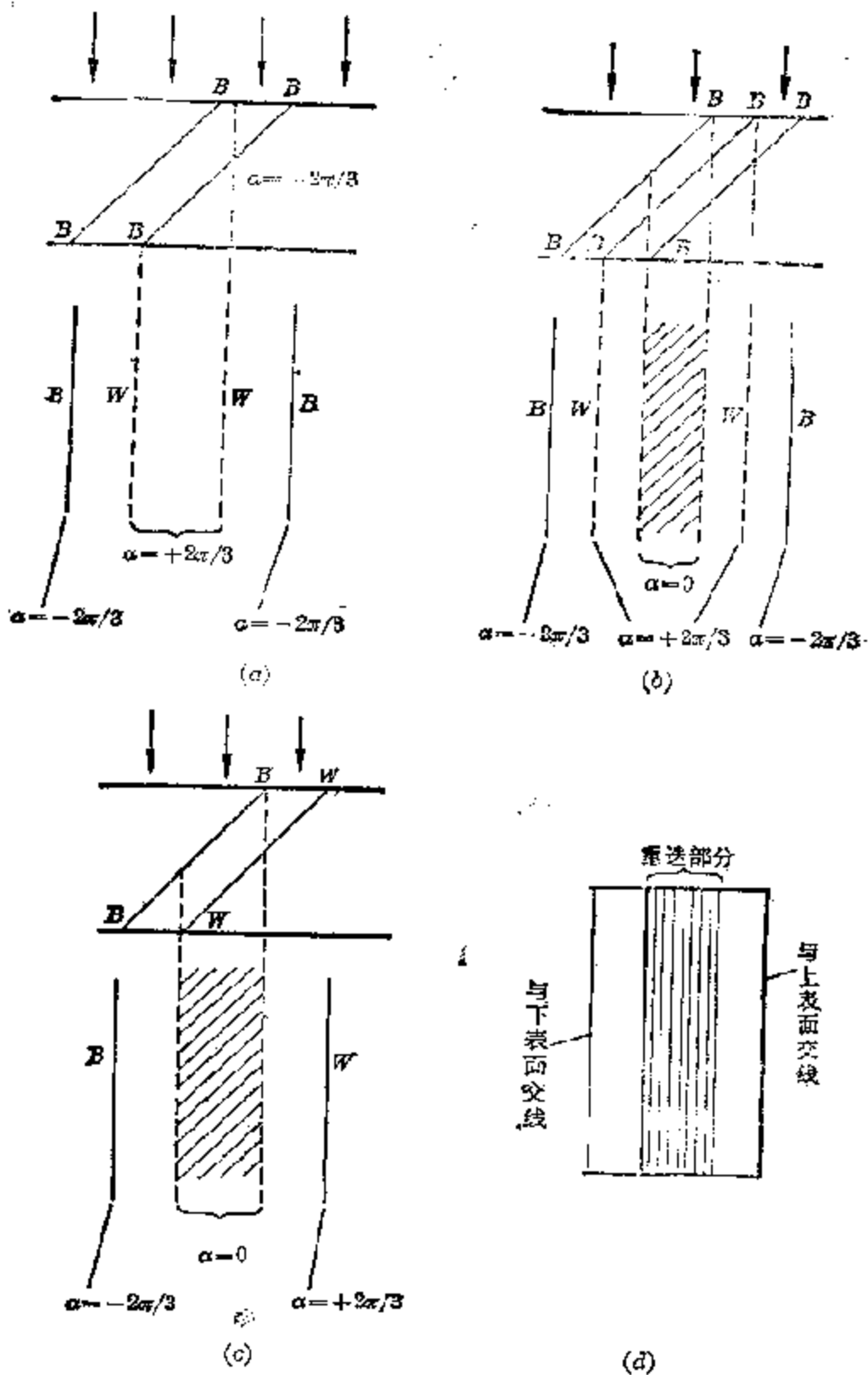


图 11-30 面心立方晶体中重叠层错的条纹衬度

(B—暗条纹, W—亮条纹)

- (a) 两个同类型层错相重; (b) 三个同类型层错相重;
 (c) 两个不同类型层错相重; (d) 从试样顶部看重迭层错

此相距很远(即相距很多层),那么整个层错带的最外侧条纹衬度相反;重迭的中心部分条纹衬度将很弱或全部消失,因两者位相角相抵消。

图 11-29 与图 11-30 重迭层错的空间情况是不同的,分别参见图 11-29(c) 和 11-30(d)。

6) 衍射条件对层错条纹衬度的影响

Humphreys 等^[110,111]曾指出过系列多束和非系列反射对层错条纹花样的影响。系列多束对层错象的主要影响是对中部条纹出现细节变化,而对外侧条纹却并无影响。对中部条纹的影响,表现为在一个强度范围内,可能出现比双束条件下有更多数目的条纹。当然,这些细节变化有时并不是很容易察觉的。

实际工作者有这样的体会:理想的双束条件是多么不容易获得。上述作者指出,对一般衍衬工作来说,在 100 kV 下,只要基本满足下述条件,双束动力学理论还是可以用来解释象衬的。这些条件是:倾斜试样,基本上(而不是十分严格的)达到双束条件(操作反射应较其它反射强得多); s 很小, $\omega \leq 1.0$; 电子束方向不要过份接近某一低指数带轴方向,以避免出现非系列反射;此外,材料的点阵常数不宜过大,过大时也将难于避免非系列反射。

(2) 密排六方金属层错的衬度分析

密排六方晶体中,也可以通过空位片上下原子面崩塌或间隙原子聚集成原子面而形成内禀型或外禀型层错,相应的 R_F 为 $+\frac{1}{2}[0001]$ 和 $-\frac{1}{2}[0001]$ 。可见这两个位移正好相差一个点阵矢量,因之这两种层错一般无法辨认。不过实际上密排六方晶体中的层错却并不是上述位移矢量为 $\frac{1}{2}[0001]$ 和 $-\frac{1}{2}[0001]$ 的纯内禀型和纯外禀型,而总伴随着一定的切变。此外,也还存在着纯切变型层错。

下面我们讨论衍衬工作中如何区别这两种层错。

纯切变型层错,层错矢量: $R_F = \frac{1}{3}\langle 10\bar{1}0 \rangle$ 。

空位或间隙位移加切变形成的层错,层错矢量:

$$\mathbf{R}_F = \frac{1}{2}[\mathbf{0001}] + \frac{1}{3}\langle\mathbf{10\bar{1}0}\rangle = \frac{1}{6}\langle\mathbf{20\bar{2}3}\rangle$$

纯切变 $\frac{1}{3}\langle\mathbf{10\bar{1}0}\rangle$ 层错亦称形变层错,其堆垛顺序为 $ABAB$ $OAOA$, 可以把它看成是全位错 $\frac{1}{3}\langle\mathbf{12\bar{1}0}\rangle$ 分解产生两个不全位错 $\frac{1}{3}\langle\mathbf{10\bar{1}0}\rangle$ (11-14 式) 形成的。后一种层错 ($\frac{1}{6}\langle\mathbf{20\bar{2}3}\rangle$ 层错), 有时亦称为凝固型 (condensation type) 层错, 其堆垛顺序为 $ABABCBBCB\cdots$, 它是由空位或间隙层错环崩塌再加一个肖克莱切变形成的。

这两种层错的区别比较困难, Blank 等指出^[112], 当反射指数 $h-k=0$ 或 $3n$ (n 为整数), 例如 (0002) 时, 这两种层错均不可见。因此, 采用一般方法, 无从鉴别。

Smallman 提出了区别这两种层错的两个方法。

① 利用 $\{03\bar{3}1\}$ 反射成像, 这时由于 $\mathbf{g}\cdot\mathbf{R}_F$ 值对 $\frac{1}{6}\langle\mathbf{20\bar{2}3}\rangle$ 层错来说, 不是整数, 层错显示衬度; 而对 $\frac{1}{3}\langle\mathbf{10\bar{1}0}\rangle$ 纯切变层错来说, $\mathbf{g}\cdot\mathbf{R}_F$ 为整数, 不显示衬度 (详见表 11-20)。故可据此将它们区别开来。

它的主要缺点, 是所用的操作反射 $\{03\bar{3}1\}$ 指数较高, 一则难于获得理想的双束条件, 二则相应的消光距离很大, 因此有可能超

表 11-20 密排六方晶体中两种层错的 $\mathbf{g}\cdot\mathbf{R}_F$ 值

$\mathbf{g}$	$\mathbf{g}\cdot\mathbf{R}_F$	
	$\mathbf{R}_F = \frac{1}{6}\langle\mathbf{20\bar{2}3}\rangle$	$\mathbf{R}_F = \frac{1}{3}\langle\mathbf{10\bar{1}0}\rangle$
03 $\bar{3}$ 1	$+\frac{3}{2} = \frac{1}{2}$	1
30 $\bar{5}$ 1	$+\frac{5}{2} = \frac{1}{2}$	2
3 $\bar{3}$ 01	$+\frac{3}{2} = \frac{1}{2}$	1

过膜厚,以致无法看到层错的条纹衬度。

② 利用较低指数的 $\{01\bar{1}0\}$ 型反射成象,一般选择 $(01\bar{1}0)$ 与 $(01\bar{1}1)$ 分别成象进行对比。先考察用这两个反射对两种不同 R_F 的 $g \cdot R_F$ 值,见表 11-21。由于 R_F 加上或减去一个点阵矢量,对位移条纹性质不发生影响,故用 $(01\bar{1}1)$ 对 $\frac{1}{6}[20\bar{2}3]$ 层错成象,相应的 $g \cdot R_F$ 值 $+\frac{5}{6}$ 与 $-\frac{1}{6}$ 相当。这就是说先后采用反射 $(01\bar{1}0)$ 和 $(01\bar{1}1)$ 对 $\frac{1}{6}[20\bar{2}3]$ 层错成象,其外侧条纹将由亮变暗;而用它们对 $\frac{1}{3}[10\bar{1}0]$ 层错成象,因 $g \cdot R_F$ 均等于 $+\frac{1}{3}$,没有改变,故两张照片上层错的外侧条纹衬度也不变。这样,利用前后两次成象,观察外侧条纹衬度是否有变化,就可以把这两种层错区别开来。

表 11-21 用两个特殊反射对密排六方晶体中
两种层错成象时相应的 $g \cdot R_F$ 值

g	$g \cdot R_F$	
	$R_F = \frac{1}{6}[20\bar{2}3]$	$R_F = \frac{1}{3}[10\bar{1}0]$
$01\bar{1}0$	$+\frac{1}{3}$	$+\frac{1}{3}$
$01\bar{1}1$	$+\frac{5}{6} = -\frac{1}{6}$	$+\frac{1}{3}$

此外,密排六方晶体中,有时偶然也可能出现一种由相邻两个间隙原子层靠拢而形成的特殊类型层错,其有效位移矢量为零。目前对它的衍射衬度研究不多,此处从略。

3. 层错能测定

层错能 (γ) 表征形成单位面积层错面所需的能量,其单位为尔格/厘米²。全位错分解可以降低能量,通过分解生成的两个不全位错间的距离,表示分解过程或层错形成的难易,它决定于层错能的大小。层错能愈高,扩展得愈窄(d 愈小),见图 11-31。

层错能在金属材料的形变过程和力学性质的研究中,有着极

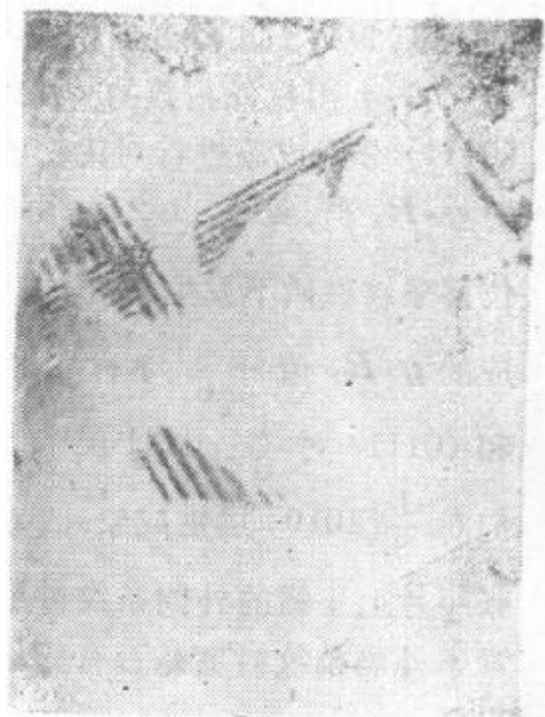
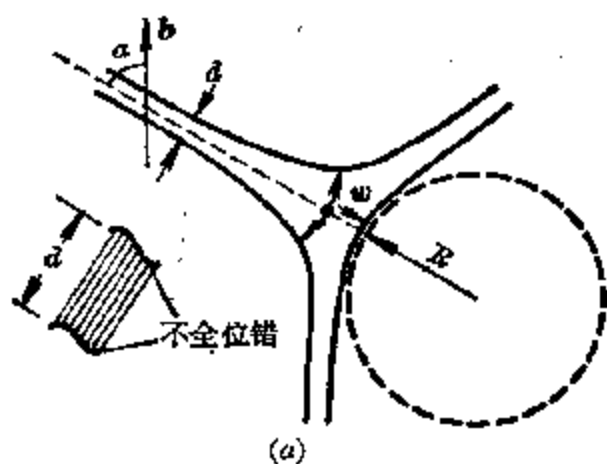


图 11-81 扩展位错节

- (a) 由位错节曲率半径 R 和宽度 w 计算总能量 γ ;
 (b) 不锈钢中的扩展节和收缩节^[59]

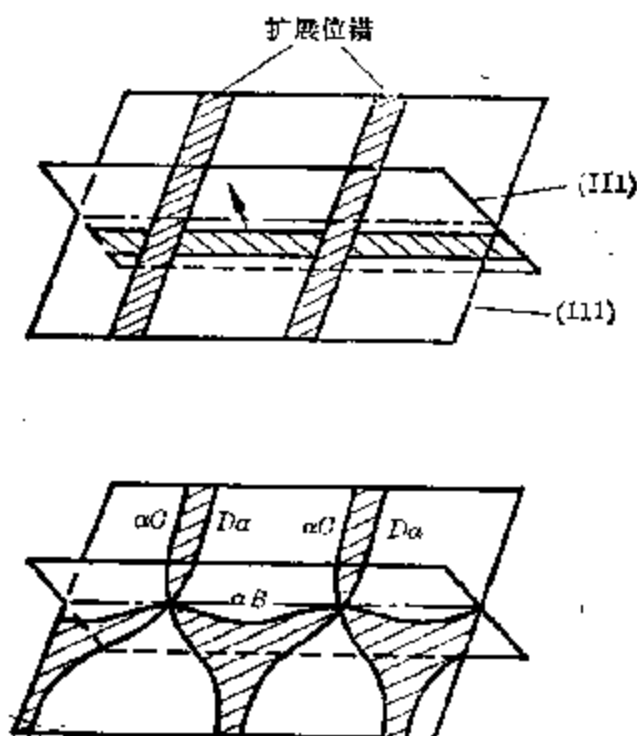


图 11-82 通过扩展、收缩位错节形成六角位错网络

为重要的意义。测量各种材料的 γ 值, 研究各种因素对 γ 值的影响, 是物理工作者 (其中包括电子衍射工作者) 十分关心的问题之一。Whelan^[113] 最早在 1958 年提出了用测量衍射象上扩展位错节的曲率半径推算 γ 的方法, 并第一次以此在不锈钢中进行了测量。它的基本出发点, 是考虑到层错能的大小决定着扩展位错的宽度, 而当扩展位错形成扩展节时, 位错能否扩展的能力将通过扩展节的曲率半径反映出来。扩展节往往是六角位错网络的一部分, 如图 11-32。设面心立方晶体中相交的两个滑移面 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 和 (111) , 分别有两个和一个扩展位错。当 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面的扩展位错向前运动与 (111) 上的两个扩展位错相遇时, 相互作用形成位错节 (dislocation node)。在位错线张力 T 和层错的吸引力的综合作用下, 位错 αB 拉成弧状, 其曲率半径为 R , 则层错能 γ 与 R 之间有如下关系:

$$\gamma = \frac{T}{R} \quad (11-22)$$

作为一级近似, $T = \mu b_p^2/2$, b_p 是不全位错 αB 的布氏矢量, μ 为材料的切变模量, 故:

$$\gamma = (\mu b_p^2)/2R \quad (11-23)$$

实际上线张力除与位错组态有关外, 还与位错的性质 (螺型还是刃型) 有关, 为此, 比较精确的层错能的表达式应为:

$$\gamma = \mu b_p^2 \ln[R/b_p] / (4\pi K \cdot R) \quad (11-24)$$

式中 K 为常数, 对螺位错 $K=1$, 对刃位错 $K=1-\sigma$; 其中 σ 为泊松比。但该式仍是近似的, 因为它没有考虑组成位错节的各不全位错之间的排斥作用, 也没有考虑膜表面对位错节组态的影响。

实际上, 测量节点的宽度 w 比测量曲率半径 R 更为方便, 且易于测准 (参见图 11-31), 这是由于不易准确作出曲率半径圆。如果以 w 代替 R , 则 (11-24) 式取如下简单形式:

$$\gamma = n\mu b_p^2/w \quad (11-25)$$

n 为常数, 对螺位错, $n=0.25$ 。

能够允许测量的最小 R 一般不小于 $200 \text{ \AA}$, 它相当于 $\gamma/\mu b_p$,

$\approx 1.5 \times 10^{-2}$ 或层错能 $\gamma \approx 25$ 尔格/厘米² 材料中的扩展节的曲率半径。这样, 面心立方纯金属中, 似乎就只有银 ($\gamma = 20 \text{ erg/cm}^2$, 见表 11-1) 才能提供可以测量的足够大的扩展节。可见准确测量半径是有困难的。但如改用参数 w 就要方便得多。但是应注意衍射照片上看到的扩展位错节是平面投影。有的作者^[14] 建议采用指向内侧三个不全位错的平均宽度值代入公式 11-25 进行计算。严格说来, 在衍射照片上测得的投影宽度 w_p 与它们在空间的真实宽度 w_t 之间, 还存在下述关系:

$$w_t = w_p [1 + (\sin^2 \phi) \cdot (\sin^2 \varphi) / \cos^2 \varphi]^{1/2} \quad (11-26)$$

式中各符号定义, 如图 11-33 所示。表 11-22 列出了 w_t/w_p 校正因子表, 如果不采用平均值进行计算, 则可以将测得的 w , 乘上表 11-22 中给出的因子, 即可得到 w_t 。

Ruff 还建议: 当扩展位错两不全位错之间的宽度 d (见图 11-81) 足够的话, 也可以采用下式计算层错能:

$$\gamma = \frac{\mu b_p^2}{8\pi d} \left(\frac{2-\sigma}{1-\sigma} \right) \left(1 - \frac{2\sigma}{2-\sigma} \cos 2\alpha \right) \quad (11-27)$$

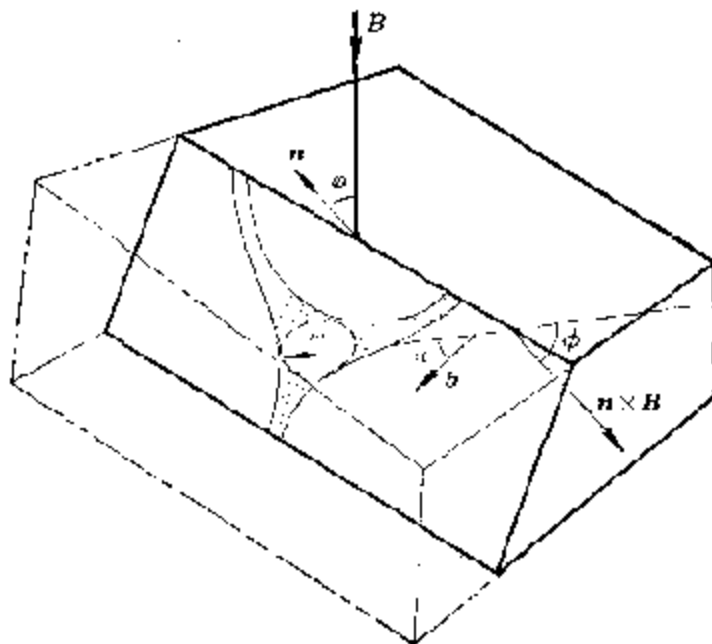


图 11-33 扩展节在试样中的空间图像

B —电子束方向; n —扩展节所在平面 $\{111\}$ 的法线; φ — n 与 B 的夹角; ϕ — $n \wedge B$ 与宽度 w 延长线的夹角; α —与 w 对应的扩展位错在氏矢量 b 与 w 延长线的夹角

表 11-22 $w_l/w_p = [1 + \sin^2\phi \sin^2\varphi / \cos^2\varphi]$ 校正因子值^[11]

φ (度)	ϕ (度)						
	0	15	30	45	60	75	90
	w_l/w_p						
0	1	1	1	1	1	1	1
5	1	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
10	1	1.00	1.00	1.01	1.01	1.01	1.01
15	1	1.00	1.01	1.02	1.03	1.03	
20	1	1.01	1.02	1.03	1.04	1.05	
25	1	1.01	1.03	1.05	1.08	1.09	
30	1	1.01	1.04	1.08	1.12	1.14	
35	1	1.02	1.05	1.12	1.17	1.21	
40	1	1.02	1.06	1.16	1.24	1.29	
45	1	1.03	1.13	1.22	1.32	1.39	
50	1	1.05	1.16	1.31	1.44	1.53	
55	1	1.07	1.23	1.43	1.59	1.70	
60	1	1.10	1.32	1.58	1.80	1.95	

式中 α 为全位错相对于扩展位错中线(图 11-31) 的夹角, 其它符号意义同前。

应用(11-27)式测量层错能时, 应注意不全位错应处于动力学平衡状态, 并且要求无表面应力的作用, 同时也不存在可以察觉的局部温度升高的情况。显然, 这些条件, 很难保证做到。曾经有作者以此法测量了 304 不锈钢中 $\alpha=90^\circ$, 即 b 垂直于层错带中线这种特殊情况下的层错能, 得到 $\gamma=22 \text{ erg/cm}^2$ 。进行这种测量, 要求在视场中进行多次测量, 并取平均值作为结果。例如对上述测量的原始数据如表 11-23。

表 11-23 304 不锈钢层错能的测量结果
(平均 $\gamma=22 \text{ erg/cm}^2$)

γ (尔格/ cm^2)	5~10	10~15	15~20	20~25	25~30	30~45
测量次数	2	6	3	7	5	2

关于层错能计算,还先后提出了其它一些方法,例如借助于多重位错节(dislocation multiple ribbons)、层错四面体(stacking fault tetrahedra)、层错偶极子(faulted dipoles)等,都可间接测得层错能。此处从略,详见 Ruff 的综述性报告^[114]。

体心立方和密排六方金属中的层错能也可通过不全位错的扩展宽度进行测量,其原理相同。

第十二章

第二相和界面的衍衬分析

§ 12-1 引言

在金属材料的研究中,析出相在相变过程中的行为,包括它的形态、分布规律和尺寸,有着重要意义。但是在电子显微镜下用金属薄膜观察到的析出相,其成象机理是衍衬成象,与光学显微镜成象乃至电镜的复型成象都有很大的不同。通常我们所看到的析出相衍衬象,虽然能代表析出相,但其外貌不一定与析出相的真实形态相似,许多特征只是一种衍衬现象,象的外观尺寸也不是在一切情况下都与真实尺寸一致。因此,如何解释析出相的衍衬象,需要具备一定的关于析出相成象的基础知识,特别是关于衍衬理论的基本概念,否则按习惯的光学金相知识,直观地进行解释,往往会造成错觉,甚至得出错误的结论。

界面,在衍衬分析中也是经常遇到的问题,从界面的衍衬图象,可以给我们提供许多有用的结构信息。近年来受到衍衬工作者的普遍重视,已成为一个专门的研究课题。

处理第二相和界面的象衬,从严格的数学角度看,是十分复杂的。但本书的目的,旨在向读者介绍如何识别这两种结构特征的基本概念和方法,以免作出错误判断;而不是从成象理论上探讨它们的衬度现象,故有关数学处理内容从简。

§ 12-2 第二相的各种衬度

基体中的第二相,在透射衍衬成象时,随着第二相本身结构不同以及它与基体的相互关系不同,显示出不同的衬度机制。

一、应变衬度(strain contrast)

质点在基体中的情况, 可以看作在无限大的各向同性的基体点阵中, 嵌进了一个各向同性的错配球。这个球在基体中引起的点阵位移用 $\mathbf{R}$ 表示, 代入(10-35)式, 就可以求得质点在基体中引起的应变衬度。Mott 和 Nabarro 提出的这个基体-错配球简化模型, 实际上认为质点引起的位移是纯径向的^[115]。

计算第二相质点在基体引起的应变场产生的衬度时, 仍需用到下述动力学方程, 即(10-35)式:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\phi_0}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} \cdot \phi_0 + \frac{\pi i}{\xi_g} \cdot \phi_g \exp(2\pi i s z + 2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}) \\ \frac{d\phi_g}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_0} \cdot \phi_g + \frac{\pi i}{\xi_g} \cdot \phi_0 \exp(-2\pi i s z - 2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}) \end{aligned} \right\}$$

考虑反常吸收, 引进吸收参数 ξ'_0 和 ξ'_g , 用复数 $(1/\xi_0) + (i/\xi'_0)$ 代替 $1/\xi_0$, 用复数 $(1/\xi_g) + (i/\xi'_g)$ 代替 $1/\xi_g$, 于是上式变成:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\phi_0}{dz} &= \pi i \left(\frac{1}{\xi_0} + \frac{i}{\xi'_0} \right) \phi_0 \\ &\quad + \pi i \left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi'_g} \right) \phi_g \exp(2\pi i s z + 2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}) \\ \frac{d\phi_g}{dz} &= \pi i \left(\frac{1}{\xi_0} + \frac{i}{\xi'_0} \right) \phi_g \\ &\quad + \pi i \left(\frac{1}{\xi_g} + \frac{i}{\xi'_g} \right) \phi_0 \exp(-2\pi i s z - 2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}) \end{aligned} \right\} \quad (12-1)$$

由于基体嵌进了一个球状质点, 使周围基体点阵发生了畸变, 即存在一个位移场, 近似表示为:

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{R}_n &= \frac{\epsilon r_0^2}{r^2} \quad (r \geq r_0) \\ \mathbf{R}_n &= \epsilon r \quad (r \leq r_0) \end{aligned} \right\} \quad (12-2)$$

式中: r_0 为质点半径; r 为位移场的位置坐标; ϵ 是描述弹性应变场强度的参数, 可表示为:

$$\epsilon = \frac{3K\delta}{3K + 2E/(1+\sigma)} \quad (12-3)$$

其中,

$$\delta = \frac{2(a_1 - a_2)}{a_1 + a_2} \quad (12-4)$$

称为错配度; a_1, a_2 分别为基体和第二相质点的点阵常数(单胞边长); K 是质点的体弹性模量; E 为基体的杨氏模量; σ 为基体的泊松比。(12-2)式认为质点中的应变为纯膨胀应变; 基体中的应变为纯切变。若对一般材料近似取 $\sigma = 1/3$, $K = E$, 则:

$$\varepsilon \approx \frac{2}{3} \delta \quad (12-5)$$

为了有别于错配度 δ , ε 亦有称为错配参数(misfit parameter)(注意 δ 只与两相点阵常数有关)。

不完整晶体衍射理论指出, 当 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R} = 0$ 时, 衬度消失(强度为 0)。而上述简化模型又认为应变场是球形径向对称分布的, 则对任意 $\mathbf{g}$ 矢量, 总可得到 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R} = 0$ 的条件。因此, 倾动试样, 随着操作反射 $\mathbf{g}$ 的改变, 第二相质点衍射象上的“无衬度线”(或称“零衬度线”), 虽将随之改变, 但却始终保持该线与 $\mathbf{g}$ 垂直的关系, 如图

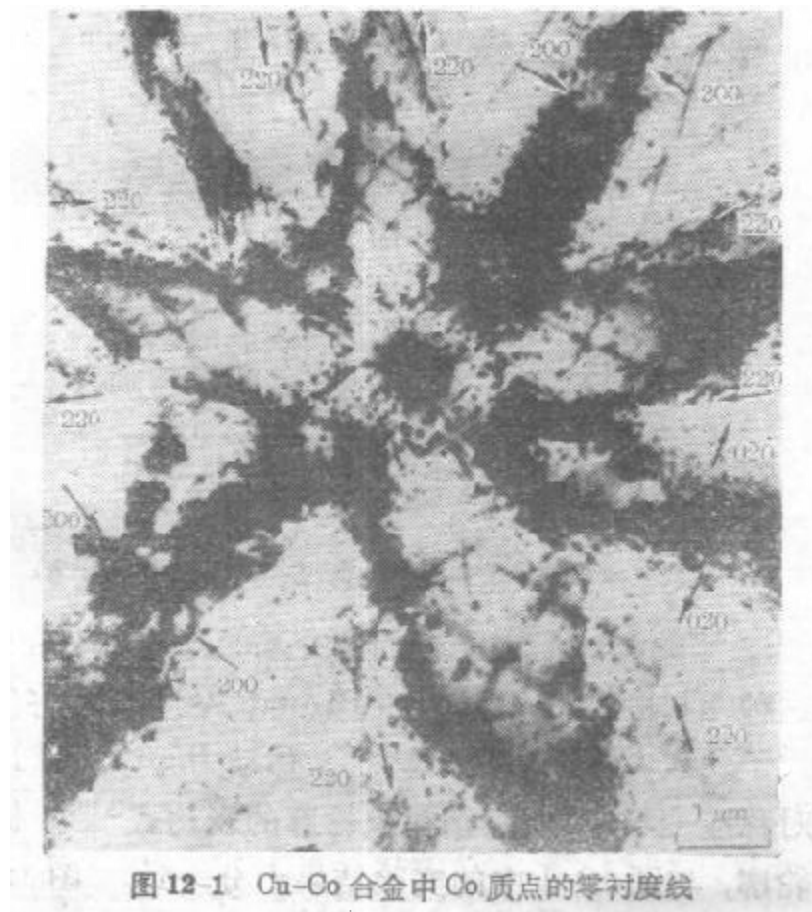


图 12-1 Cu-Co 合金中 Co 质点的零衬度线

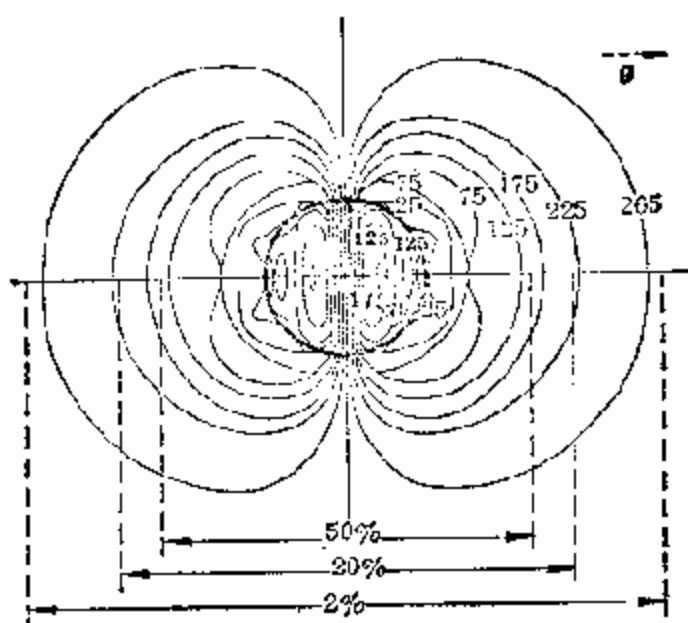


图 12-2 Ashby 等获得的球对称应变质点衍射象轮廓

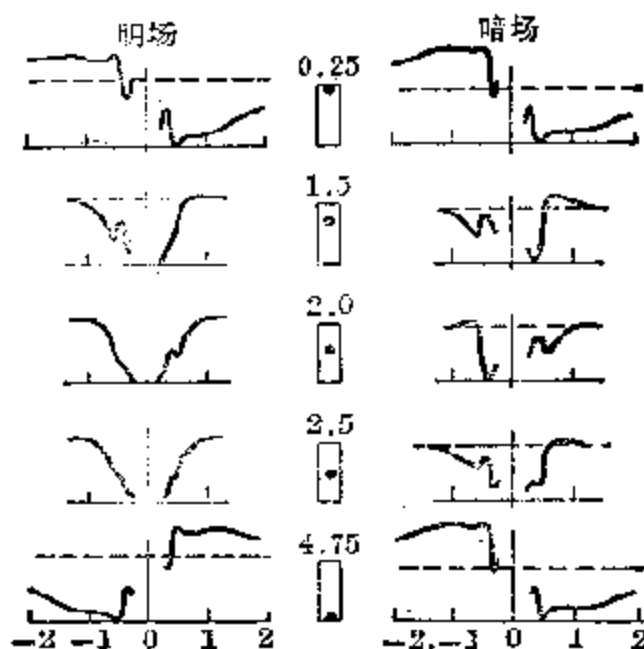


图 12-3 质点象强度轮廓随深度的变化(轮廓截面平行于 σ)

12-1 所示^[21]。当第二相质点产生的应变场呈球对称分布时，总是可以看到这种无衬度线。Ashby 和 Brown 1963 年曾将(12-2)式的第一个式子代入考虑吸收的不完整晶体动力学方程(12-1)式，得到了球对称应变场下，质点衍射象轮廓的表达式^[116]。据此给出的象衬度轮廓，与图 12-1 中的实验结果十分一致。图 12-2 就是

Ashby 等得到的计算象轮廓。图中定义了强度百分比象宽；强度分布曲线上的数字，表示与背景相比的相对强度（背景强度为 272）。图 12-3 是 Ashby 等计算的在试样中不同深度处的第二质点的象强度轮廓。从图中可以看出：暗场象上，质点在膜的上、下表面处象衬相同；明场象，上、下表面的衬度相反，在中心处，象强度轮廓对称（图中左列第四图）。上表面处，明、暗场象轮廓相同；下表面处，明、暗场象轮廓正好相反，这都是由于吸收对入射束和衍射束作用的结果。计算图 12-3 时，设试样厚度为 $5\xi_p$ ，质点半径为 $0.25\xi_p$ 。从图上还可看到：除质点位于上、下表面附近外，在试样中其余各处，象宽大致相同。根据图 12-3，还可以估计质点在试样中的大致深度，尽管这不是很准确的。例如，如果明场下零衬度线两侧强度对称，相应暗场象下两侧强度不对称，则此质点可能在试样中部；明、暗场下，二者两侧强度均不对称，且同偏向一边，则此质点可能在试样顶部；反之，二者不对称，但偏向相反，则质点可能在试样底部。按照 Ashby 的工作结果，还可以利用衍射象衬，测定球形质点周围应变场的大小。（从图上还可看出，除了

质点的象强度轮廓随其所在处的深度变化外，象宽还随衍射条件偏离布拉格位置的程度而略有变化。应该指出，象强度和象宽都随着所选反射及反射级不同而有明显变化。因此如根据象宽大致估计质点尺寸或比较两种不同条件下的

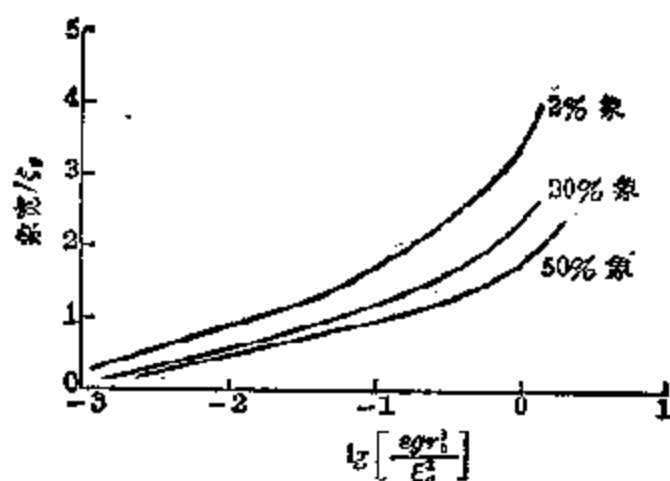


图 12-4 不同象强度的象宽随参数 $\varepsilon gr^3/\xi_p^2$ 的变化曲线

的质点尺寸时，应该选择相同反射下的衍射照片进行比较。为此，他们还同时指出：可以将上述各因素(r_0, g, ξ_p)综合加以考虑，得出象宽随一个无量纲参数 $\varepsilon gr^3/\xi_p^2$ 而变化的结果，并作出了适用于任意球状质点的曲线，如图 12-4 所示。曲线纵坐标为象宽除以

消光距离；横坐标即上述无量纲参数以10为底的对数。可以由图12-4间接估计错配度，这时可以通过测量衍射照片上的象宽和第二相质点半径，估计出 ϵ ，从而再计算近似的错配度 δ 。在进行测量时， g 和 ξ_0 均为已知的。

到目前为止，对应变衬度的分析，只是对上述球状对称应变场的情况，研究得比较细致。至于其它形状的沉淀物引起的应变场，却由于影响因素较多，也比较复杂，特别是它们的取向衬度效应的干扰，给分析带来了困难，因此肯定的结果还不多。

上述对球对称应变场的分析方法，可以谨慎地应用于圆盘状质点和棱柱位错环，但它只适用于主位移沿着盘平面法线方向，而在盘平面内仅有微小应变的情况。小的棱柱位错环的衍射象与小的球状质点的衍射象十分相似，以致有时很难区别，这也说明两者在基体中引起的应变场确有相似之处。若分析时即使应用了倾斜技术还难以鉴别时，可通过电子衍射谱进行分析，因为如果是位错环，就不应该出现第二相的斑点。片状沉淀，特别是圆盘状沉淀显示与位错环相似衬度的例子曾多次观察到。Howie和Whelan 1962年在观察Al-Cu合金时，就曾看到部分共格的 θ' 沉淀，在片平面垂直于电子束方向时，其衬度效应十分类似于Zn中的位错环；其中一些环状衬度，还是由双线组成的，他们对此进行了解释。

值得指出，当对较厚（沿电子束方向）的共格或部分共格沉淀进行衍射观察时，如出现环状衬度，则还是比较容易识别的，因为只要稍作倾斜，这种环状衬度将立即消失，而显示其它沉淀衬度。如果沉淀较薄（薄片状），则即使倾斜，仍然有环状衬度特征，这时要确定它们究竟是位错环还是沉淀片就比较困难了。

总之，由于第二相质点在基体中引起的应变场产生的衬度效应，以致使这些象失去了与真实质点形状的直观对应性，因此在对它们进行衍射分析时，应予充分注意。

二、沉淀衬度(precipitation contrast)

上面讨论的应变衬度，是指以沉淀物为中心，其附近基体的衬度，只考虑来源于沉淀物应变场，而没有考虑沉淀物本身的衬度效

应。这在沉淀物尺寸非常小, (例如 $<1\xi_g$) 时, 当然是可以的。但如第二相尺寸足够大 ($\gg 1\xi_g$) 时, 沉淀物本身以及它与基体间的界面处, 就会显示新的衬度细节。下面将讨论提供这些衬度细节的各种衬度机理。

1. 结构因子衬度

这种衬度的来源是第二相与基体的结构因子的差异。结构因子不同, 消光距离就有差异 (参见 10-17 式), 因而对象强度会受到影响。典型例子示如图 12-5^[118], 它们是铝合金中的 G. P. 区。两种不同晶体结构的物质, 如固溶体中富溶质原子的 G. P. 区和基体中小的有序畴等, 都属于这类例子。结构因子衬度也是唯一能使质点显示均匀衬度的一种衬度类型。如果仍采用柱体近似模型, 则含有质点与不含质点的纯基体的柱体, 在其下表面处, 参与成象的电子射线强度也有不同, 以致有质点处与无质点处的衬度互有差异。设试样某处有直径为 D 的质点, 这相当于在下表面处, 有质点区与相邻无质点区产生了厚度变化 Δt 。

$$\Delta t = \xi_g D \left(\frac{1}{\xi_g^p} - \frac{1}{\xi_g} \right) \quad (12-6)$$

式中: ξ_g^p 是质点中相应于 g 的消光距离; ξ_g 是基体相应于 g 的消光距离。显然, 强度变化取决于 Δt , 也与膜厚及 s 有关。当 $D \ll \xi_g$, $s=0$ 和 $t/\xi_g = n \pm \frac{1}{4}$ (n 为整数) 时, 出现强度极大。定性地说, 哪些部位质点越多, 这些部位增加的附加厚度 Δt 就越大, 从而使消光轮廓倾向于向这些区域移动。这正是在图 12-5(b) 中的消光轮廓前峰处, 所以能看到较多的第二相质点的原因。实际上, 凡是与基体结构因子不同的区域, 包括成分不均匀性和有序结构等都有这种效应。可以设想, 在暗的消光带处, 应含有更多的第二相质点, 只不过衬度被掩盖罢了。

结构因子衬度被用于显示非常细小的第二相质点, 特别是当这些质点在基体中没有引起明显的应变时, 往往能提供清晰的质点像轮廓。为此, 应特别注意观察 $s=0$ 处的低指数消光轮廓中及

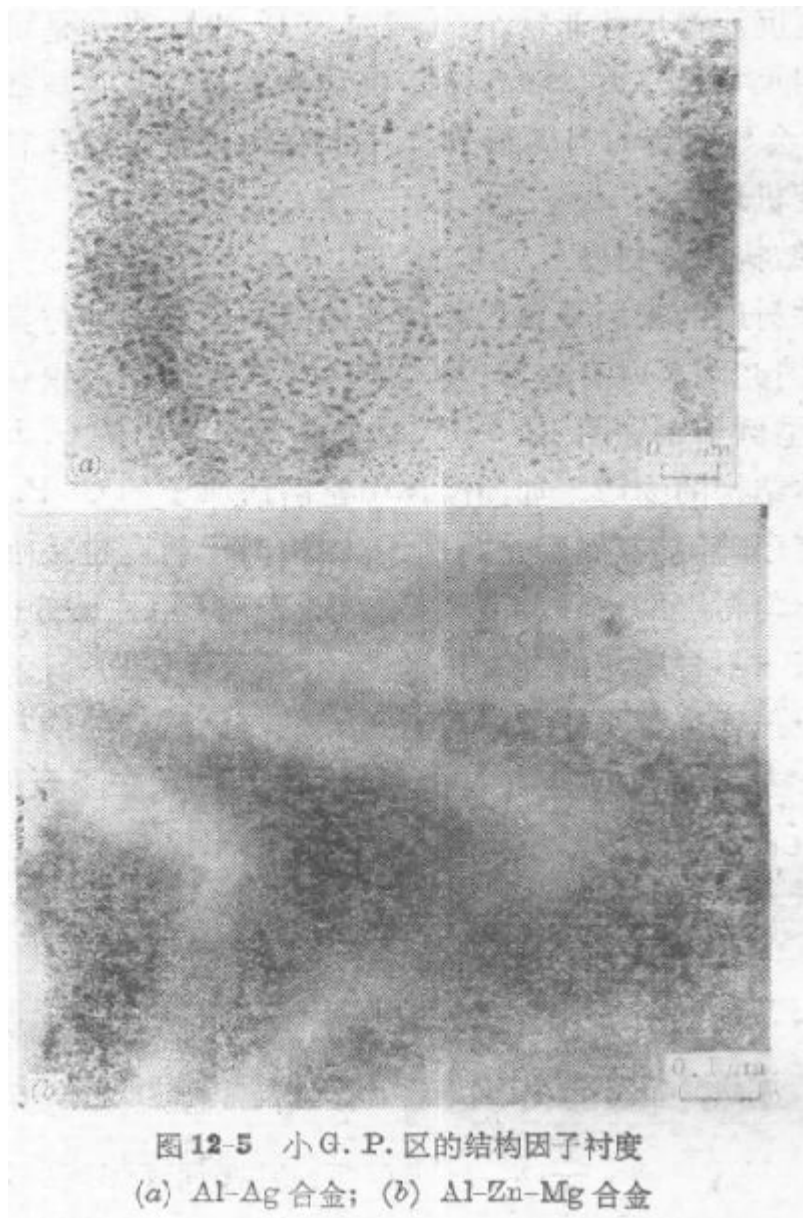


图 12-5 小 G. P. 区的结构因子衬度
(a) Al-Ag 合金; (b) Al-Zn-Mg 合金

其附近处的衬度变化,缓慢倾动试样,并密切跟踪移动着的消光轮廓,注意其中的微小衬度变化。当衍射谱上已出现第二相斑点,而衍衬象上一时还看不到第二相质点时,上述操作是非常必要的。值得注意的是,由于强度变化正比于通过质点的电子束数,故利用结构因子衬度显示质点,并据此测量所占面积时,结果可能偏低。

附加厚度 $4t$, 应使基体和第二相的消光距离小一些, 故可选用低指数和低级反射, 同时也不宜使用过高的加速电压。还应注意尽可能满足 $s=0$ 的条件, 这可从衍射谱上菊池线相对于斑点的位置来判断。此外, 在有多重反射的区域, 亦即消光轮廓交叉的区域, 往往能比较容易地观察到细小质点的衬度。试样厚度当然也是应考虑的因素, 最佳条件是 $t/\xi_g = 0.25, 0.75, \dots$, 如果质点本身尺寸 D 比 ξ_g 小得多时, 则在试样各种深度处, 均能显示均匀的衬度。

2. 取向衬度(orientation contrast)

这是指通过某种途径, 使第二相处于有利的取向位置, 而基体退居不利取向位置, 从而有利于清晰显示第二相的衬度。例如通过倾动试样, 使第二相的某一套点阵平面正处于强衍射位置, 而基体则处于弱衍射位置, 这样, 就会使第二相显示出良好衬度。也可以通过同样方法, 有意显示两相界面处的衬度。虽然所有衍衬成象, 都是对取向敏感的, 但是它对第二相的象衬有着特殊意义。一般说来, 大尺寸第二相, 这种衬度效应总是存在的。这种衬度的特点是均匀亮或均匀暗, 当然有时在大尺寸的沉淀片中, 也可能看到消光轮廓。显示取向衬度的第二相, 大多数是与基体不共格或部分共格的, 它们与基体晶体结构不同, 或虽然结构相同, 但其点阵常数不同。也可以简单认为, 这种衬度是由于第二相与基体相对于入射电子束的点阵平面的取向不同所造成的。

这种成象机理形成的衬度, 质点轮廓清晰, 极少有特殊的附加效应, 不易产生误解, 最适于结合暗场技术, 研究测量质点的外貌、密度和分布。如果试样足够薄, 可以不考虑吸收, 这时用基体反射成暗场象, 那么在暗场象上, 其取向衬度就会明显反转, 因为这种情况下, 明、暗场象强度是互补的。如试样中的第二相只有一种取向, 用基体反射成暗场象即可; 如有几种不同取向, 为了逐个显示它们, 并分类进行测量统计, 则应分别选择不同取向的第二相斑点成暗场象, 这时衬度反转的也只是与所选反射相对应的那一取向的第二相。这是一种非常有用的相分析方法, 因而得到广泛应用。图 12-6 是一组高碳钢中显示珠光体中渗碳体的明、暗场照片。从

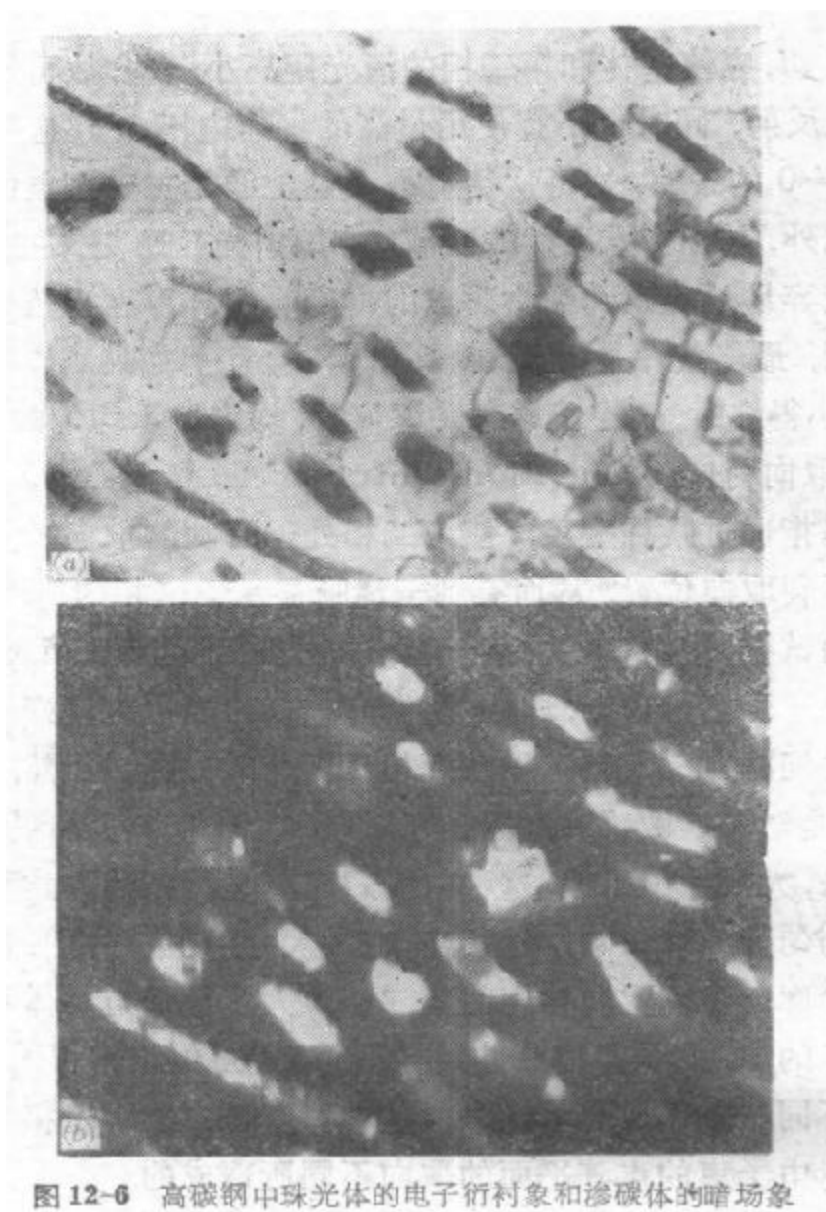


图 12-6 高碳钢中珠光体的电子衍衬象和渗碳体的暗场象

图(b)暗场象可以看出,明场中的长条状和短杆状析出物,都是渗碳体而不是两种析出物。在鉴定含有几种取向魏氏组织的工作中,也广泛应用这一技术。

当沉淀相尺寸较大,且其组分原子序数较基体为高时,则吸收效应是不可忽略的,它对取向衬度有重要影响。这时在沉淀相上看到的暗的衬度,多由吸收所造成。

片状或块状析出物,以取向衬度为主;但在与基体交界处,有时也能看到类似楔形膜出现的周期条纹衬度,其特点是条纹平行,围绕(有时弯曲)第二相的周界,并且在大多数情况下是不对称的

(与层错的条纹衬度相比)。

3. 位移条纹衬度(displacement fringe contrast)

在第二相与基体的界面处或第二相本身,经常可以观察到条纹衬度。但是,这些条纹衬度有许多种情况,细致分析比较,各有特点,应具体分析。有些工作者^[19]把一切有条纹特征的衬度,如波纹图、层错条纹以及被我们称为位移条纹的衬度现象,都称为位移条纹。但是,应该指出,它们成象的物理过程,却是有区别的。

我们所讨论的位移条纹衬度,都是完全由在基体中的电子衍射所造成的,而第二相的作用仅在于它的存在使得基体晶格的不同部分发生了相对位移,至于第二相本身对衬度的贡献却不是重要的。后面将要讨论的波纹图,则同时是由基体和第二相的贡献,包括来自这两部分晶体的衍射电子束的交互作用。层错条纹可以看作是位移条纹的一个特例,但波纹图却与这两者有着根本的不同。下面先讨论位移条纹。

沉淀片使其两侧基体平面发生了位移,当电子束通过时,相位移发生突变,如这时错动了的基体平面,相对于试样表面成倾斜,那么在电子束方向有深度变化,相应的强度就产生周期性变化,呈现类似等厚条纹的条纹衬度。在典型部分共格沉淀片情况下,位移垂直于片的表面,其大小可表示为:

$$|R_n| = \Delta t \cdot \delta - n |b_n| \text{ [注]} \quad (12-7)$$

式中: Δt 为沉淀片厚度; δ 为它与基体的错配度, 见(12-4)式; n 为沉淀片四周结构位错数; b_n 为这些位错的垂直于片表面的布氏矢量分量。显然, 只要 $|R_n|$ 不等于零或不等于沿这个方向的基体点阵矢量, 则沉淀片外侧的基体平面就将从正常位置发生位移, 从而使电子束通过时, 产生位相差 α , 如果沉淀片在试样中稍有倾斜, 就会产生条纹衬度。一般说来, 除非第二相与基体有完全相同的晶体结构和点阵常数, 或虽然晶体结构不同, 但二者不共格且经过退火, 以致在界面处不存在垂直于它的应变分量, 那么只要有沉淀存在, 总会使基体点阵的上一半相对于下一半发生某种程度

[注] 如果是共格盘状沉淀, 则应表示为 $|R_n| = \Delta\delta$ 。

的位移。

将 R_n 代入动力学方程, 当 $s=0$ 时, 可得到透射波即明场象强度为:

$$I = \cos^2\left(\frac{1}{2}\alpha\right)\cos^2(\pi t/\xi_g) + \sin^2\left(\frac{1}{2}\alpha\right)\cos^2(2\pi z/\xi_g) \quad (12-8)$$

式中: $\alpha = 2\pi g \cdot R_n$ 。由此可以看出, 由于 α 作用, 强度将随深度 z 不同而作周期变化, 且周期完全与 α 即 $|R_n|$ 无关, 并等于 $\xi_g/2$ 。这种条纹衬度与层错条纹衬度十分相似, 层错可以看作

$$|R_n| = \frac{a}{3}\langle 111 \rangle$$

的位移条纹的特例。但如简单地把这种位移条纹与层错等同起来是不妥当的。因为出现这种条纹状衬度, 并非由于在沉淀相中或两相界面处存在什么层错(原子堆垛顺序改变), 更没有理由一定要把沉淀片看成是由基体的原子排列作了某些调整演变而来的晶体结构。但是, 它也与层错一样, 随深度变化作周期变化, 并且条纹也平行于片与膜面的交线。尽管如此, 它却不能象层错条纹那样, 能够提供任何关于沉淀片的结构信息, 因为条纹周期只与基体结构有关。值得指出, 这种位移条纹不象层错条纹那样总是直的, 而有时也可能是弯曲的。例如沉淀不是平面片状, 就会在条纹上有所反映, 因此可以根据条纹的外貌, 推知沉淀物的外形特征。但是还应该考虑到试样抛光后, 膜表面并不很平, 也就有可能会影响条纹发生局部弯曲。(12-7)式适用于 $s=0$ 的情况, 如果 $s \neq 0$, 仍然可以看到条纹, 但它们交替衰减很快, 而当 $\xi_g s > 1$ 时, 条纹就看不见了。

位移条纹可以用于测定由沉淀引起的位移矢量 R 的方向和大小, 当沉淀片很薄, 以至无法得到衍射花样时, 甚至还可以用来检测是否有第二相析出。因为某处出现这种条纹, 即暗示该处存在某种沉淀物, 而这时并不一定给出该析出物的明锐的衍射花样。这就是说: 由沉淀引起的位移条纹在检测薄而细小的第二相时, 甚至比衍射花样和其他衬度效应都更为灵敏。 R 的方向可用 $g \cdot R = 0$ 或整数的不可见准则来决定。如果有几个反射使得条纹消失,

就可唯一地确定 R 的方向。这与测定布氏矢量的程序相同^[20]。有一点值得注意的是,如果沉淀片平行于膜的上表面,那么不管 $g \cdot R$ 取什么值,都不会显示条纹衬度;这时,即使倾斜试样也无济于事。因为决定条纹衬度的重要参数——沉淀片上面的基体晶体的厚度是恒定的,而倾斜试样并不能改变这个恒定的厚度。

对于薄的试样,不考虑吸收时,运动学条件能很好满足,这时明、暗场条纹衬度互补,且相对于膜中心($z=0$)是对称的。若为厚晶体,则就不可忽视吸收,这时暗场象条纹也不再对称,利用这一点正可以决定膜的上、下表面,或沉淀片的上表面和底面。此外,明场下外侧条纹为亮或暗,取决于 α 的符号。正片上, α 为正,外侧条纹是亮的; α 为负,外侧条纹是暗的。这个性质也非常重要,只要沉淀片至少交截一个膜表面,就可利用这个性质来决定 R 的向指。这个测量过程与根据条纹衬度测定层错性质的过程无异。

图 12-7 是 Al-Cu 合金中析出相 θ'' 的三种衬度效应^[21]。其中图(a)为结构因子衬度,类似有一定方向性的黑色短棒或黑点; (b)为位移条纹衬度,注意不同取向 θ'' , 条纹数相同,唯间距略异; (c)为类似位错环的衬度,却是 θ'' 。此外照片(a)沉淀片的平面平行于电子束方向;而(b)、(c)沉淀片平面则相对于电子束方向倾斜一个角度。

由于位移条纹总是平行于沉淀片与膜表面的交线,因此利用这一点进行迹线分析,弄清它的空间取向是很方便的。§ 9.4 上所述的那些方法均可应用,此处从略。

4. 波纹图(moiré patterns)

当电子束连续通过两层重迭的晶体,而这两层晶体的晶面间距十分接近,或一个晶面间距为另一个晶面间距的整数倍,两层晶体的晶面或者互相平行,或者互成一小角,在这两种情况下(平行、旋转),都会形成一种新的周期间距的波纹图。在日常生活中也往往会看到类似的现象,例如两层网格相近似的纱窗,当它们平行或转动一定角度重迭在一起而被阳光照射时,就会看到一种不同于原来的新的网格花样,这也可看作是一种波纹图。

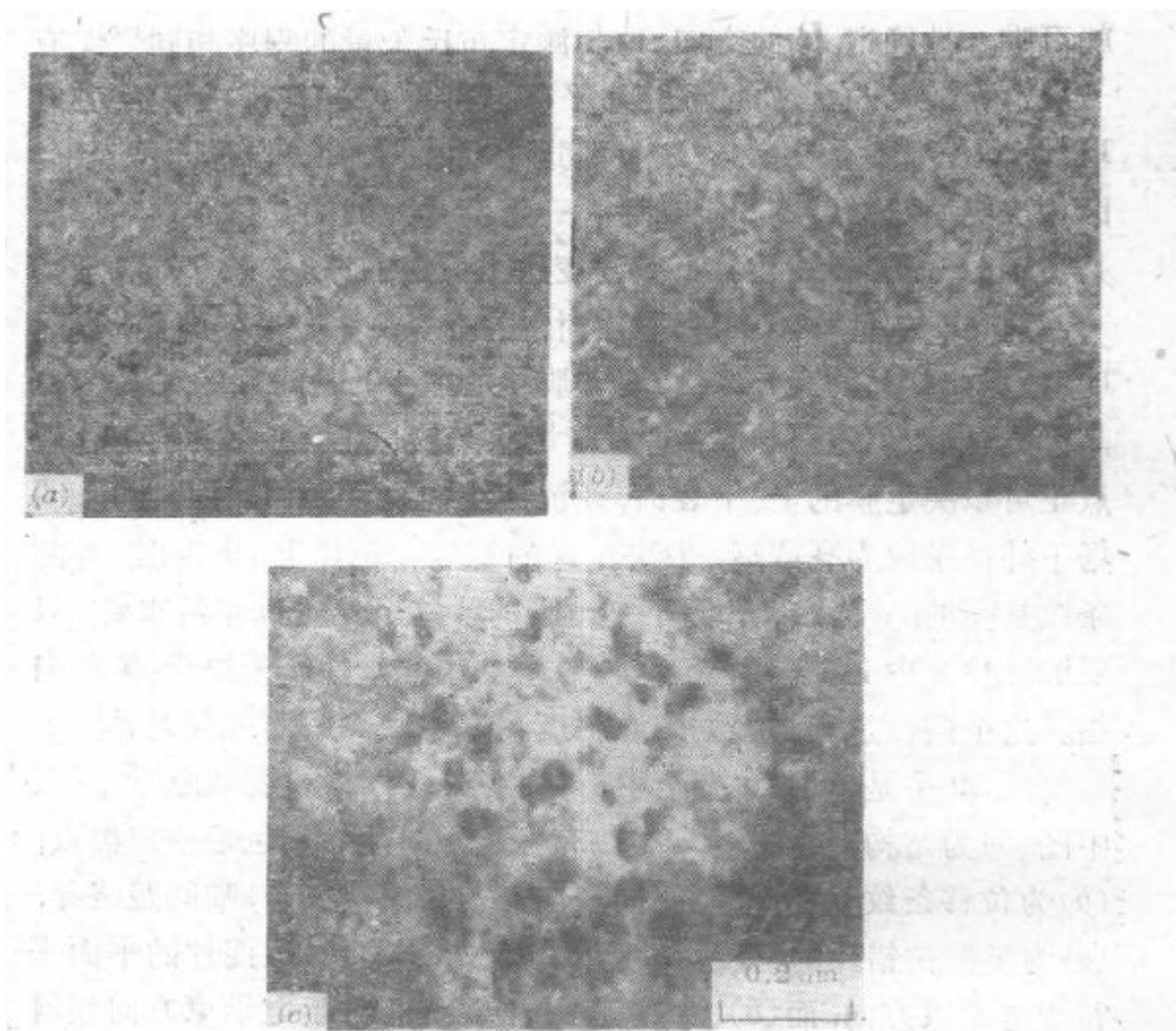


图 12-7 Al-Cu 合金析出相 θ'' 的三种衬度效应(共格应变场衬度)
(a) 结构因子衬度; (b) 位移条纹衬度; (c) 类似位错环衬度

电子显微镜下波纹图形成的机制,先后有不少学者(例如: Gevers 和 Hashimoto 等)运用衍射动力学进行了较严格的处理^[121,122]。但是,对我们来说,只是为了了解如何识别这种花样,故仅从简单的衍射几何角度加以考虑就可以了。

波纹图可以看作是由沉淀相和基体的双衍射所造成的。设两晶体平行重迭,各自操作反射分别为 $g_1(h_1k_1l_1)$ 和 $g_2(h_2k_2l_2)$, 对应的面间距为 d_1, d_2 , 若物镜光栏围住 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$ 成像, 就得到一个暗场平行波纹图, 如图 12-8(a)。如果两层晶体相应于操作反射的面互成一个角度 ϕ , 同样用光栏围住 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$ 成像, 就得到一个暗场旋转波纹图, 如图 12-8(b)。

• 400 •

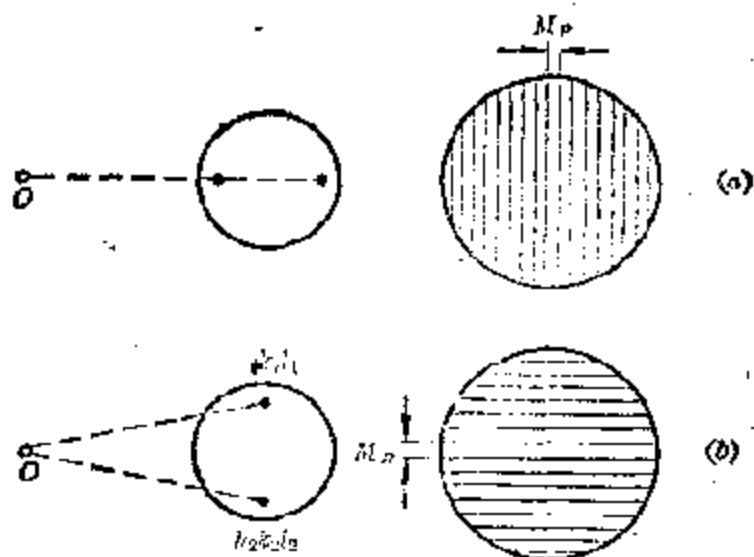


图 12-8 暗场下, 波纹图的形成示意图

(a) 平行波纹图; (b) 旋转波纹图

平行波纹图的间距为:

$$M_p = \frac{\lambda L}{R_{h_1 k_1 l_1} - R_{h_2 k_2 l_2}} = \frac{d_1 d_2}{d_1 - d_2} \quad (12-9)$$

旋转波纹图, 有两种情况, 即: $d_1 = d_2 = d$ 和 $d_1 \neq d_2$ 。它们的间距分别为:

$$M_R = \frac{\lambda L}{2 R_{h_1 k_1 l_1} \sin \phi / 2} \approx \frac{d}{\phi} \quad (12-10)$$

$$M_R = \frac{d_1 d_2}{(d_1^2 + d_2^2 - 2 d_1 d_2 \cos \phi)^{1/2}} \quad (12-11)$$

为了分析实验时所得到的波纹图, 归纳指出如下几点是有益的:

① 明场下由于第二块晶体的双衍射作用, 也会产生波纹图。暗场与明场条纹衬度互补。

② 平行波纹图的条纹平行晶体的反射平面; 旋转波纹图, 若 ϕ 很小, 则其条纹总垂直于晶体的反射平面。

③ 波纹图与位移条纹的基本性质不同: 位移条纹的方向总平行于质点与膜表面的交线, 其间距决定于衍射条件, 并且对衍射条件十分敏感, 例如与 ξ 和 ϵ 有关。而波纹图则不然, 条纹取向决

定于操作反射, 间距决定于原来二晶体的晶面间距及相对配置, 与 s 无关。这种差异, 使我们有可能把两者加以区别。

④ 反常吸收对波纹图条纹间距和方向没有影响, 但是厚晶体的条纹衬度下降^[123]。

⑤ 倾动试样或试样本身有弯曲时, 条纹强度、衬度和位置连续变化。

⑥ 若试样表面存在台阶, 而此台阶高度又为消光距离 ξ_0 的整数倍时, 则不影响条纹的位置和方向; 但若台阶高度为任意值, 则条纹将会受到严重影响, 甚至可能使条纹终止于台阶处。

⑦ 波纹图可应用于晶体缺陷, 这实际上是由于波纹图起着“放大”原有反射面间距的作用^[124, 125]。应用波纹图检测界面处两种点阵的错配情况是一个很有用的方法^[126]。例如用它来检查沉淀相与基体界面处以及衬底与外延生长层间的错配情况。沉淀相的波纹图还有一个重要用途, 就是用来精确测量点阵间距。特别是当沉淀相与基体的点阵参数非常接近, 且由于非常薄而不能获得衍射斑点时, 借助波纹图进行测量, 可获得十分满意的精确度, 为一般电子衍射方法所难于作到。Weatherly^[127] 用这个方法测定 Al-Cu-Mg-Si 合金中细小析出相的点阵常数, 得到了满意的结果。应用波纹图来鉴别钢中的不同碳化物、氮化物和硼化物, 也有其独到之处。

⑧ 原则上讲, 位错与波纹图是可以区别的。因为波纹图的间距和方向随所选反射不同而改变, 而位错的数目和方向特别是方向, 不会随 g 而改变。但是, 如果错配引起条纹分开的程度小于相应位错的宽度, 则要把它们两者区别开来就比较困难^[128]。这时, 采用弱束技术是有用的(详见第十三章)。

§ 12-3 第二相质点密度和尺寸分布的测量

测量第二相质点的密度和尺寸分布有许多方法, 本节只介绍在电子显微图象上如何进行这种测量。测量时有两点必须考虑:

一是显微图象上看到的质点分布,是它在试样中三维空间分布在二维平面上的投影;二是由于试样很薄,看到的质点象,不可避免地有一部分与表面交截的情况,而且有重迭现象。不论用何种方法进行统计分析,上述两个因素都必须加以考虑。下面所介绍的方法,其基本原理与一般定量金相分析方法相同。

如何从二维测量数据推知三维体积分布的真实结果, Scheil^[120]、Smith 和 Guttman^[120] 以及 Fullman^[137] 等均曾进行过探讨,并建立了一套分析方法。下面主要介绍他们的工作。

一、测量质点的体积密度

假定质点在试样(厚度为 t 的薄膜)中均匀分布,设单位体积中的质点数为 N_V ,单位面积上的质点数为 N_A ,质点象平均直径为 R ,则它们之间存在如下关系:

$$\ln\left(\frac{N_A}{t+R}\right) = \ln N_V + mtN_V \quad (12-12)$$

式中: m 为一常数,反映象上质点的重迭程度,具有面积的量纲。由上式可知,如果已知几个厚度薄膜的 N_A 和 R ,便可画出 $\ln(N_A/(t+R))$ 相对于 t 的曲线。它是一条直线,当 $t=0$ 时,截距就是 $\ln N_V$,从而可求得质点的体密度 N_V 。

二、用直线交截质点的方法测量质点的平均直径 R

设 N_L 为检测线单位长度上被质点交截的次数,那么质点平均外径近似为:

$$R \approx \frac{N_L}{2N_A} \quad (12-13)$$

在测量各显微照片上的 N_L 时,应采用同一长度的直线。实际上也可以以任意形状的其他线来代替直线。显然,为了使结果满意,在求 N_L 和 N_A 时,应取得足够多次的测量值,再取其平均值。

三、利用 N_A-t 曲线求 N_V 和 R

当 N_V 不太大,而 t/R 却较大(如大于 2)时,(12-12)式可以简化为:

$$N_A \approx N_V(t+R) \quad (12-14)$$

这时如果测得相应于一系列膜厚的 N_A 值,可作出一条 N_A-t 直线,这样就能从直线的斜率求得 N_V ,从 t 轴上的截距(即 $N_A=0$)求得 R 。这是一个相当简便的方法,一根曲线可同时求得 N_V 和 R ,而且这时没有必要假定质点在膜中均匀分布,由于某种原因使质点消失或有些表面质点被保留下来,这些都会在 R 值中反映出来。

但应该指出,应用 12-14 式的条件是质点的体积密度不太大和 t/R 值又不太小,即重迭因素基本上可以忽略不计时,结果才比较准确,否则误差是很可观的。此外,在应用上述各式时,还有一个前提,即认为质点在各种条件下都是完全可见的;而实际上由于衍衬成像时,有明显的取向衬度效应,在某种衍射条件下,有些取向的质点将不可见,另一些取向的质点衬度很弱。至于测量 R ,因看到的是投影轮廓,则影响更大。因此应采用暗场技术分别显示不同取向质点,分类进行统计分析。在测量 R 时,最好能使质点平面倾斜至垂直于电子束方向。

四、不同直径范围内质点数的分布

采用统计处理方法,分析质点数随不同直径的分布,即可找出何种尺寸质点具有最可机分布。

将质点按直径尺寸分成一些相等间隔,先计算直径最大那部分

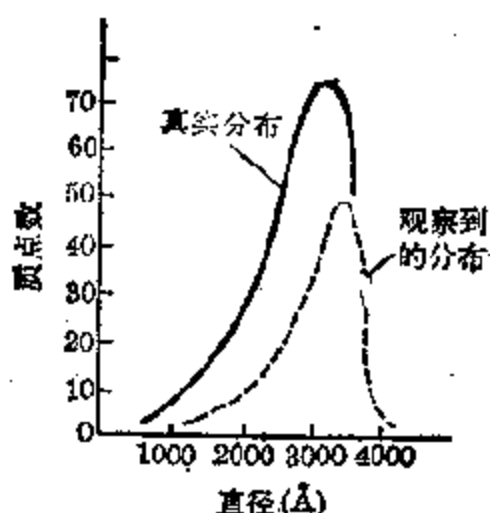


图 12-9 由于象的重迭,真实的与观察到的质点分布曲线的比较

小,说明由于象的重迭使测量值偏低,如图 12-9 所示。

将质点按直径尺寸分成一些相等间隔,先计算直径最大那部分的质点数,再计算次大的,依次分档计算,分别统计,这样便可作出一根质点数(纵坐标)相对于质点直径(横坐标)的分布曲线,从曲线上可以找到最可机分布。

作上述分析时,象的重迭、质点与膜的上下表面相截以及轮廓不清等都会给测量引进误差,对这些因素都有必要加以适当校正。例如, Hilliard 曾发现^[132],当 $t/R > 1$ 时,所观察到的分布往往比真实分布为

§ 12-4 界面衍衬分析

衍衬工作中经常遇到各种界面。例如,从界面两侧对入射电子束引起的位相变化来看,就有 α 边界、 π 边界和 δ 边界;还有通常意义上的界面,如大角晶界、小角晶界和孪晶界;而就析出相与基体之间的界面而言,则又有共格界面、半共格界面和不共格界面;无法归入上述各类且具有本身特殊性质的,还有磁畴界和反相畴界面。所有这些在衍衬象上都有其各自的特征,这些特征都能从界面本身性质及其对成象电子束的位相和振幅的影响得到解释。限于篇幅,本节只能以尽可能简短的叙述,对一些基本概念作定性的说明,至于更细致的处理,请读者查阅有关专门文献。

一、 α 边界、 π 边界、 δ 边界

(一)界面在衍衬象上的特征

1. α 边界

由于这类边界存在,使电子束的位相角 α 发生改变,故得名。边界两侧有一个相对位移 R ,当电子束通过界面时,就会引起相位变化,记作 $\alpha=2\pi g \cdot R$ 。 α 边界就是指能使通过它的电子束产生相位变化的边界。一般说, α 可以在 $0 \sim 2\pi$ 范围内变化;但习惯上有一个约定,即它专门指 $\alpha=\pi$ 以外的其它边界,其中特别是指层错。

2. π 边界

由于当 $\alpha=\pi$ 时,在成象时有其特殊之处,且衍衬象又有不同于一般 α 边界的特征,故将它从 α 边界中分列出来,称为 π 边界。电子束通过这种边界时,位相发生 180° 变化。 π 边界最典型的例子是有序合金中的反相畴界(antiphase domain boundaries, APB),如图12-10。图(a)是晶体未形成APB前的原子排列示意图,XY面处的近邻都是异类原子;当上、下两部分晶体沿XY面上的 P 方向错动一个原子间距时,出现界面处同类原子近邻相对排列情况,如图(b),XY称为反相畴界(APB)。APB的位移矢

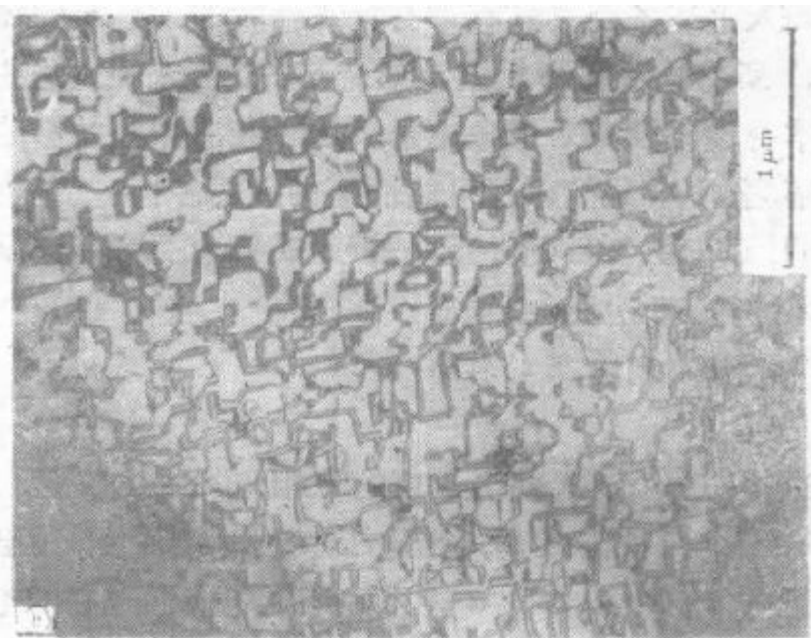
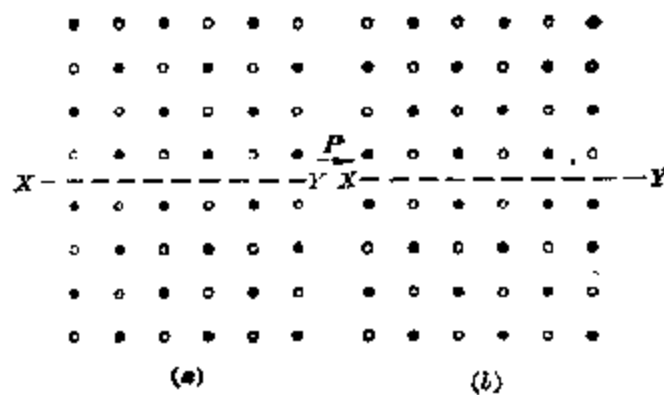


图 12-10 反相畴界 (APB)

(a) 未形成 APB 前的完整晶体; (b) 沿 P 方向上半部原子相对于下半部原子发生位移, 使界面处同类原子相遇; (c) Cu_3Au 超点阵中的反相畴界

量用 P 表示, 故位相角 $\alpha = 2\pi g \cdot P$ 。因为 $P =$ 原子间距, 故对于基本反射来说, $g \cdot P = 0, 1, 2, \dots$ 等整数, 相应地, $\alpha = 0, 2\pi, 4\pi, \dots$ 等 2π 的整数倍, 这时 π 边界 APB 看不到。如欲看到 APB, 应采用超点阵反射成像, 这时, $g \cdot P = 0, 1/2, \dots$ 等值, 相应地, $\alpha = 0, \pi, 3\pi, \dots$ 等, 为 π 的奇数倍, 这时方可显示出花纹状的 APB。表 12-1 为 LL_2 型 Ni_3Al 的 APB (当反相位移矢量 $P = \frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ 时) 的 $\alpha = 2\pi g \cdot P$ 值。

表 12-1 Ni_3Al (Li_2 结构) 当 $P = \frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ 时的 $\alpha - 2\pi g \cdot P$ 值

g	$\langle 100 \rangle$ 型 (超点阵)	$\langle 110 \rangle$ 型 (超点阵)	$\langle 111 \rangle$ 型 (基体反射)	$\langle 200 \rangle$ 型 (基体反射)	$\langle 210 \rangle$ 型 (超点阵)
α	$\pm\pi$ 或 0	$\pm\pi$ 或 0	0	0	$\pm\pi$ 或 0

反相畴显示衬度是由于界面处原子顺序的改变, 使电子束通过界面时受原子散射因子的突然改变, 从而导致位相角发生 π 变化。

APB 成象条件及象的特征 (双束成象条件, $\omega = 0$)

(1) APB 的象由明、暗交替的黑白条纹组成, 条纹平行于畴界面与膜面的交线。

(2) 只有当 $\alpha = \pi$ 时, 才能看到 APB 象。这时, 不用基体反射, 而应采用超点阵反射成象。

(3) 明场象及暗场象的条纹相对于膜中心对称分布。即外侧条纹为全暗或全亮, 亮或暗则取决于膜厚, 可由 ξ_g 计算决定; 条纹间距为 $\frac{1}{2}\xi_g$ 。

$$\xi_g = \frac{\pi a_0^3 \cos \theta}{\lambda F_g} \quad (12-15)$$

式中: a_0 为有序单胞的点阵常数。

上述条纹衬度规律, 是指双束条件下, $\omega = 0$ 的情况。Van Landuyt 指出^[133], 当 $\omega \neq 0$, 即为正或负时, 条纹衬度将复杂化, 暗场象不再对称, $\omega > 0$ 时, 条纹随深度变化的周期不是 $\frac{1}{2}\xi_g$, 而是 ξ_g ; $\omega < 0$, 这时间距可能降低到小于 $\frac{1}{2}\xi_g$ 。可见研究 APB 应在 $\omega = 0$ 下进行, 即当菊池线准确通过 g 斑点时进行。

(4) 双束且 $\omega = 0$ 下, 在膜的整个深度内, 明、暗场象衬度严格互补。

(5) 一般说, APB 的条纹是连续的, 围绕畴界成封闭环。

(6) 求反相位移矢量的方法, 与测定布氏矢量的方法相同; 即

用两个不同的超点阵反射,使 APB 不可见,则此两反射面的带轴方向即 P 的方向。

3. δ 边界

δ 边界与 α 边界(如层错)、 π 边界(APB)都有很大的不同。这种边界的两侧取向略有不同,但还未构成小角晶界。因此在相同的操作反射下,其两侧是以不同的偏离矢量 s 来对衍射提供贡献的。这时在相应的衍射谱上不一定出现两套斑点,也许会看到有些斑点有不严重的分裂现象,分裂后的斑点相对于厄瓦尔德球有不同的 s 量。或者可以这样说,两部分晶体以稍有不同 g 成象。既然两侧晶体的 s 和 g 稍有不同,也就存在着一个界面,而当电子束通过时,同样在其下表面处,显示出强度周期变化,在观察屏上表现为明、暗相间的条纹衬度,示意如图 12-11(a)。

既然这种条纹衬度与两侧的 s 及 g 有关,故不同的 g (即使是略有不同)意味着有不同的 ξ_g 。我们知道, $\omega = \xi_g s$, 通常用

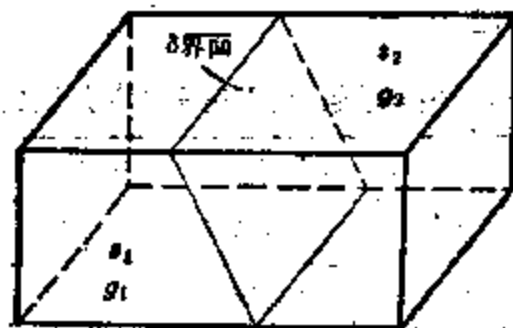
$$\delta = \omega_1 - \omega_2$$

来表示造成这种边界条纹衬度的因素,(当然,也完全可以采用其他符号,只不过沿用迄今,没有必要再加更改。)并把具有这种衬度特点的边界称作 δ 边界^[134]。

实际工作中,有关 δ 边界条纹衬度的报导甚多。例如 Thompson 和 Edington 1971 年在钴-钛合金中的共格析出相与基体之间,观察到典型的 δ 条纹^[135]。Ardell 1967 年在镍基合金的共格析出相与基体之间,也看到过这种衬度^[136]。

关于 δ 条纹衬度, Gervers 等人^[134]曾进行过详细处理。在任意情况下,它的条纹衬度比较复杂;但在对称情况下(即两部分晶体 ξ_g 相同,且 $s_1 = -s_2$),却仍然可以找到一些可供分析参考的规律^[137]:

- (1) 黑白相间,并平行于界面与膜面的交线。
- (2) 明场外侧条纹衬度相反;暗场外侧条纹衬度相同。(注意:这与双束且 $\omega = 0$ 时的 π 边界条纹不同!)
- (3) 明、暗场下相应于上、下表面处的条纹衬度取决于:



(a)

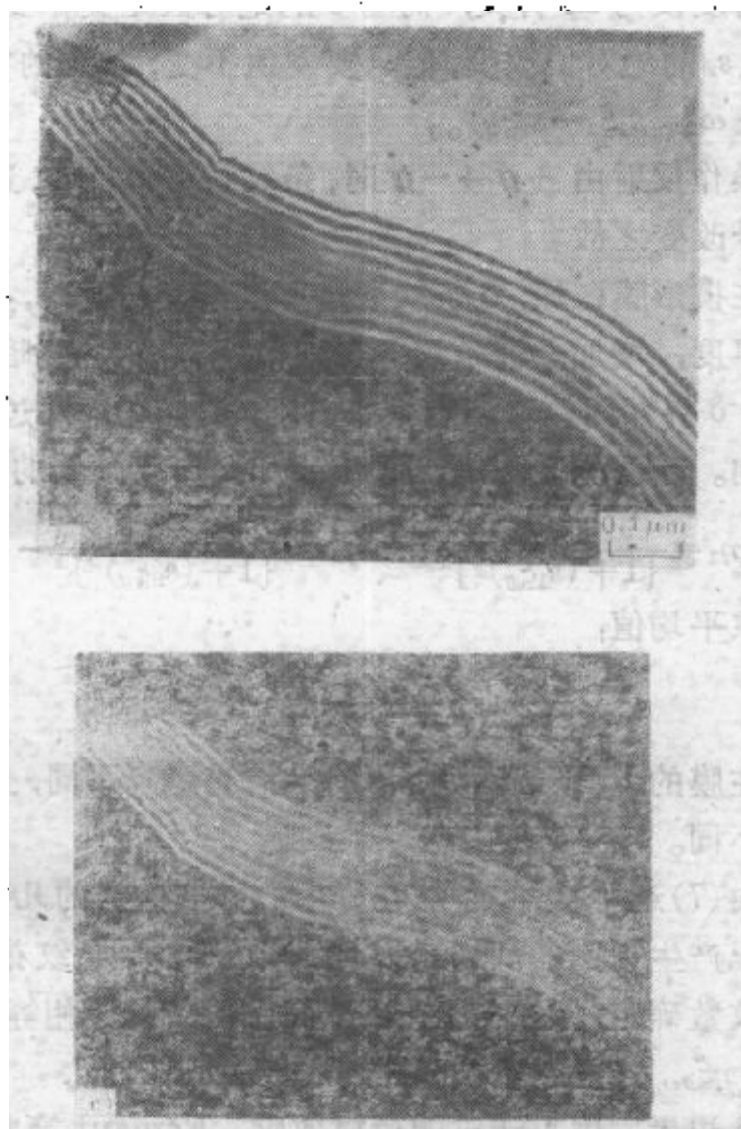


图 12-11 δ 边界

(a) 示意图; (b)、(c) VC 中的 δ 边界(明、暗场)

$$\Delta s = s_1 - s_2$$

的符号, 归纳于表 12-2。

表 12-2 相应于膜上、下表面处 δ 条纹的特征

	明 场 条 纹		暗 场 条 纹	
	上表面	下表面	上表面	下表面
$\Delta s > 0$	亮	暗	亮	亮
$\Delta s < 0$	暗	亮	暗	暗

(4) 衬度仅与 Δs 有关, 而与 s 的绝对值无关。故倾动试样时, 虽然 s_1 、 s_2 的绝对值改变, 但只要 δ 值不变, 条纹的衬度也仍不变 ($\delta = \omega_1 - \omega_2 = s_1 \xi_1 - s_2 \xi_2$)。

(5) 操作反射由 $+g \rightarrow -g$ 时, 条纹衬度也反转, 这是由于 Δs 的前后符号改变之故。

(6) 在楔形膜区域, δ 条纹通过厚度消光轮廓时, 在亮带区每增加一定厚度, 增加一根条纹; 在黑带处有极大值 (暗纹衬度最深)。由于 δ 界面两侧取向有微小差别, 消光轮廓通过 δ 条纹时, 将改变方向。当两侧 ξ_g 相同, 而 $s_1 \neq s_2$ 时, 厚度条纹的周期是:

$$\eta_1 = \frac{\xi_g}{\{1 + (s_1 \xi_g)^2\}^{1/2}}, \quad \eta_2 = \frac{\xi_g}{\{1 + (s_2 \xi_g)^2\}^{1/2}} \quad (12-16)$$

计算时应取平均值:

$$\bar{\eta} = \frac{\eta_1 + \eta_2}{2}$$

(7) 在膜的上、下表面处, 因有效消光距离不同, 故两者的条纹间距也不同。

(8) 由 (7) 还可推知, 条纹花样中心并非试样的几何中心。对非对称情况产生衍射的试样来说, 由于 $g_1 \neq g_2$, 条纹花样的中心, 应根据条纹数确定, 即它与上、下表面间的条纹数相等, 而此处显然有 $\eta \xi_{g_1} \neq \eta \xi_{g_2}$, 故它不等于试样的厚度中心 [28]。

关于 δ 边界发生重迭时的衍衬效应, Remaut 等人曾作过详

[28] 文献 [140] 此处有误。

细研究^[137]。他们分四种重迭情况进行了讨论：一是膜厚中间畴也厚；二是膜厚中间畴薄；三是膜薄中间畴也薄；四是中间畴呈楔形，依次如图 12-12 的(a)、(b)、(c)、(d)所示。每两个畴之间夹着一个 δ 边界，上述四种情况在成象时，都有两个畴界（即 δ 边界）重迭的问题，这时重迭条纹衬度显示出甚为复杂的情况。读者可参阅 Remant 等人的原始文献^[137]，此处不再详述。

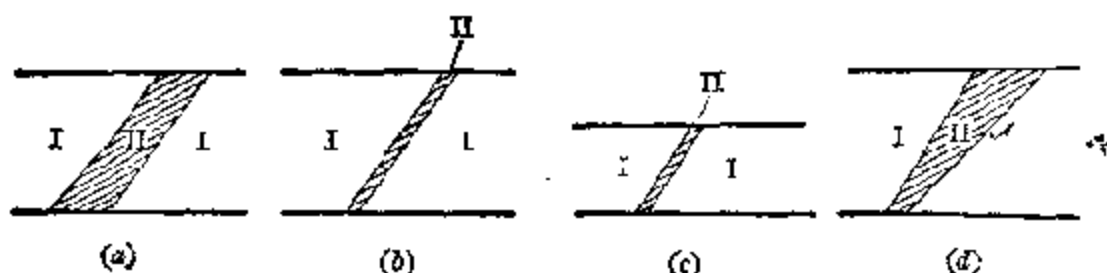


图 12-12 δ 边界重迭的四种情况

此外，Gevers 1965 年还研究过一种称做 α - δ 混合边界的衬度效应^[138]。这种边界多出现于沉淀物与基体的界面。作者认为 α 条纹来自两部分晶体的位相相干，而 δ 条纹特征则来自两块晶体的微小取向差，或消光距离的微小差别。显然这只能出现在基体与第二相晶体结构相同和点阵常数差别不大的情况下。

(二) 研究界面条纹衬度的意义

(1) 从条纹衬度的形成过程，可以推知晶体中这种面缺陷的类型。如是层错？还是反相畴？或仅仅是两侧晶体略有取向差……等等。

(2) 有时还可能获得关于材料的结构信息。例如 Gevers 等人曾据此推导出钛酸钡的四次轴的方向；在镍和钴的氧化物中确定出由于铁磁有序转变造成的点阵收缩方向^[139]。又如 Fourdeaux 等 1967 年在 Co-Cr 合金中，在 fcc-hcp 界面处观察到 δ 条纹衬度，认为这是由于该六方相不具有密排相的严格 c/a 比值的结果，并从条纹象特征，确定出偏离标准 c/a 值 (1.63) 的趋势，即大于 1.63 还是小于 1.63^[140]。此外 Ardell 1967 年对 Ni-Al 合金进行了很有意义的工作，他分析了 γ' 与基体界面处的 δ 条纹，估计出 γ' 在周围基体中造成的畸变大小^[139]。

二、同相界面及异相界面

除了上述按照界面引起位相角变化的大小进行分类外，实用

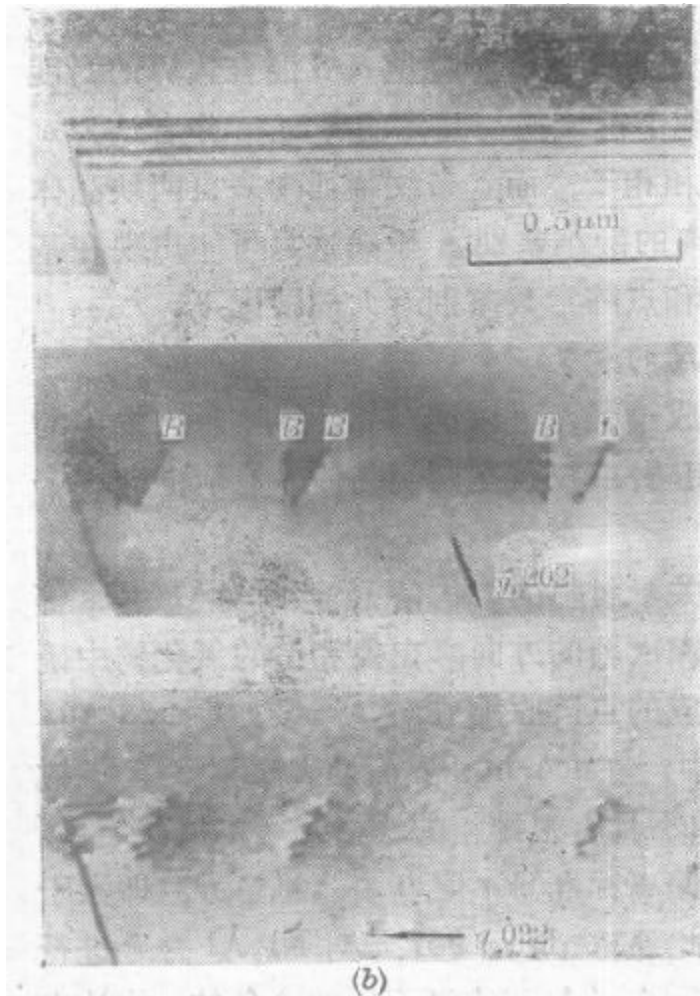
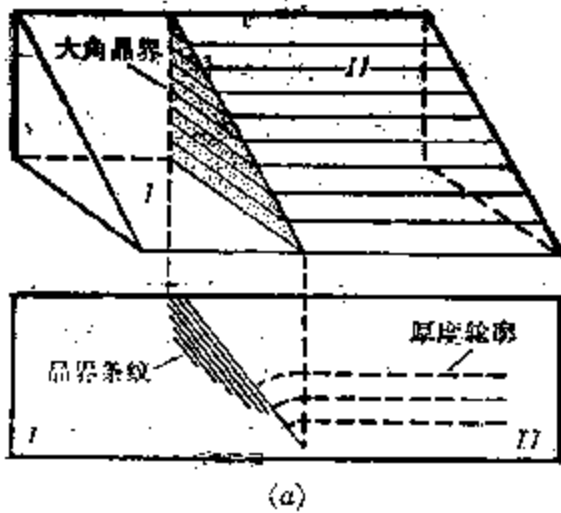


图 12-13 大角晶界

(a) 示意图; (b) 奥氏体不锈钢中的晶界条纹衬度

· 418 ·

上还有根据界面两侧的结构是同相还是异相来分类的。所谓同相界面，指界面两侧是同种晶体结构的物质，如奥氏体、铁素体基体内的晶界；而异相界面，则指界面两侧为不同晶体结构的物质，如基体与析出相之间的界面。它们的衍衬现象可分述如下：

(一) 同相界面

它又分大角晶界、小角晶界、孪晶界，其中孪晶界也可说是大角晶界。

1. 大角晶界

图 12-13(a) 为大角晶界的形成几何示意图；(b) 为奥氏体不锈钢中的晶界厚度条纹。选取不同的操作反射，可以揭露晶界处的微观细节，例如图(b)的中图和下图，分别采用 202 和 022 反射，晶界条纹消失，却显露了晶界处的

界面位错^[153]。

大角晶界指两晶粒的取向差大到足以提供完全不同的两个电子衍射谱的一种晶界。一般说,两晶粒的取向差接近 10° 左右,衍射谱就属于不同晶带的两个倒易面。上述定义是根据衍衬工作实践建议的。因为当两个晶粒取向差小于 10° 时,从衍射谱上无法察觉差别,故称作小角晶界。分析大角晶界的衬度现象,应注意相邻晶粒衍射谱的操作反射,以判断满足动力学条件,还是满足运动学条件。前者有明显的操作反射,且菊池线通过操作反射斑点;后者则无显著操作反射,或有操作反射,但菊池线偏离该斑点,而与其他斑点相应的菊池线也偏离斑点位置。

晶界的条纹间距可由下式计算:

$$\xi_g' = \frac{\xi_g}{(1 + \omega^2)^{1/2}} \quad (12-17)$$

当两侧晶粒均满足动力学条件,特别当 $\xi_{gI} \neq \xi_{gII}$ 时,晶界条纹衬度比较复杂,在厚度条纹通过处,晶界条纹将出现收缩合并现象。注意不要把晶界条纹误认为层错,两者的主要鉴别方法有二:

① 观察条纹的全貌:看它的两端是终止于晶界,还是有一端终止于晶内。如有一端终止于晶内,或两端均不与晶界接触,则多属层错;这时可选择不同操作反射成象,应能看到不全位错出现和消失。

② 利用电子衍射区别:层错两侧的衍射谱相同,并且一般 g 相同, s 也相同;若是两个晶粒,则其两侧应是两个不同的倒易面。

在大角晶界处经常可以观察到许多能够提供有用结构信息的一些现象:

(1) 晶界台阶

其示意图可参见图 12-14(a)。根据晶界条纹错动的距离 d , 可以用下式计算台阶的实际高度 h ^[141]。

$$h = d \sin \varphi \sin \zeta \quad (12-18)$$

式中:晶界面与膜面的夹角 φ 可用第九章所述迹线方法求得。显然,如晶界面与膜表面垂直,即 $\varphi = 90^\circ$, 同时条纹错动方向与条纹

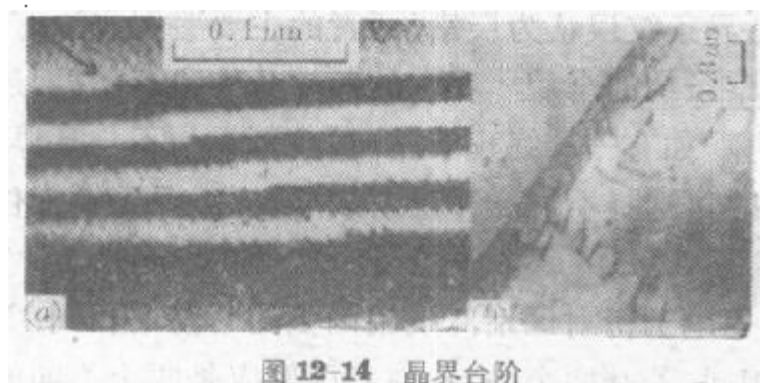
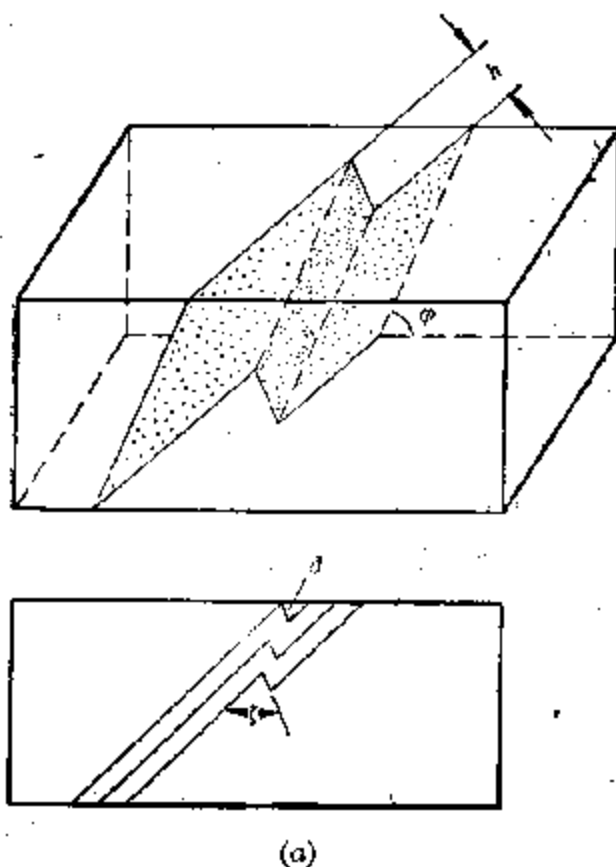


图 12-14 晶界台阶

(a) 示意图; (b) 奥氏体不锈钢中的孪晶界台阶^[147]

之间的夹角 ζ 也等于 90° , 则量得的错动量 d 即为台阶高度。实验时, 倾斜试样使条纹消失, 这时 φ 即等于 90° , 于是有:

$$h = d \sin \zeta \quad (12-19)$$

(2) 晶界条纹与晶界附近的位错象重迭

工作中常常可以看到晶界条纹上迭加一些位错的衬度, 如图 12-15^[7]。这种现象曾被许多作者解释为“晶界吸收的点阵位错”^[148], 这是值得商榷的; 似乎还应细致分析条纹与位错迭加处的

衬度细节,才能得出结论。如果只是两种衬度的简单相加,而看不到两者发生交互作用的明显迹象,则仍应解释为由于滑移面端部被阻于晶界,且晶界面相对于膜面又有倾斜,以致使滑移面端部的位错象与晶界条纹衬度重迭。但也有位错确是形成于晶面处的情况,这时可看到条纹衬度与位错衬度有明显的交互作用,而这种位错已是晶界微观结构的组成部分。图 12-15 正是属于这种情况。



图 12-15 晶界条纹衬度与位错象的重迭

(3) 晶界结构特征花样

在高温合金和不锈钢中还经常观察到一类晶体特征花样,如图 12-16 所示^[147]。它们由类似编织物上的网状条格交织而成,有时比较简单,有时比较复杂,但都与位错衬度有别。这种花样的特点,是条纹或网格的间距随晶界平面的不同而有变化。十余年来,它已引起了人们的广泛注意,且进行了大量的工作^[142~147];但到目前为止,对这种晶界缺陷的本质及其衬度形成的机制却还不清楚。不过可以相信,随着晶界微观结构的进一步被揭示,这一奇异的衬度现象,必将会得到合理的解释。虽然有的文献^[147]上把它称为结构线(structure line),但鉴于它们肯定是晶界微观结构的一种反映,因之我们称它为“晶界结构特征花样”;同时还由于它们不一定都具有线状特征,而往往更为复杂一些。

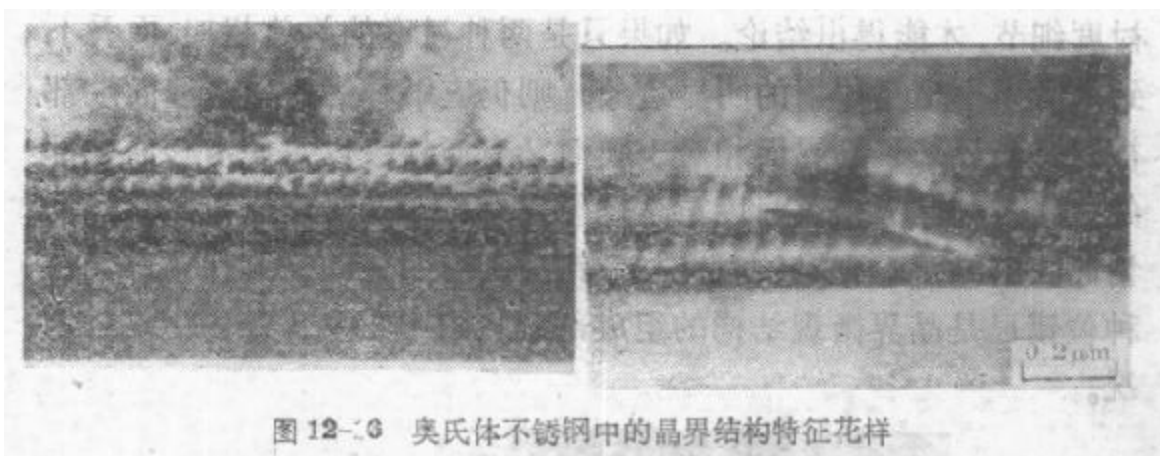


图 12-13 奥氏体不锈钢中的晶界结构特征花样

(4) 波纹花样

波纹花样的形成机制,在§12-2中已有讨论。它与晶界结构特征花样的不同点,是其条纹或网格间距并不随晶界所在平面的不同而有所改变;并且波纹方向与 σ 则有严格的相对关系,如 σ 改变,波纹方向亦随之改变,而晶界结构特征花样并无这种明显规律。此外,波纹花样的形成还与两层晶体的反射面晶面间距有明显关系,即二者相当接近,或互成倍数,晶界结构特征花样也同样没有这个特点。

2. 小角晶界

小角晶界指界面两侧晶粒取向差不大于 5° 的一种晶界^[53]。事实上,这个定义对许多金属工作者来说,并不是严格确定的。小角晶界还可分为倾斜晶界 (tilt boundaries) 和扭转晶界 (twist boundaries)。前者是一种最简单的小角晶界,可以视为由一系列刃位错所组成^[148]。如图 12-17, (a) 和 (b) 是倾斜晶界位错模型示意图; (c) 为超塑性形变 Al-Zn 合金中的倾斜晶界^[42]。由图 (a)、(b) 得知,两晶粒取向差角度 θ 与布氏矢量 $\mathbf{b}$ 之间的关系为:

$$\sin \theta = \frac{|\mathbf{b}|}{\alpha}, \quad \tan \theta = \frac{|\mathbf{b}|}{\beta} \quad (12-20)$$

当 θ 很小时, α 和 β 都近似趋于刃位错间距 d , 因此有:

$$\theta \approx \frac{|\mathbf{b}|}{d} \quad (12-21)$$

倾斜晶界单位面积的能量为^[149, 150]:

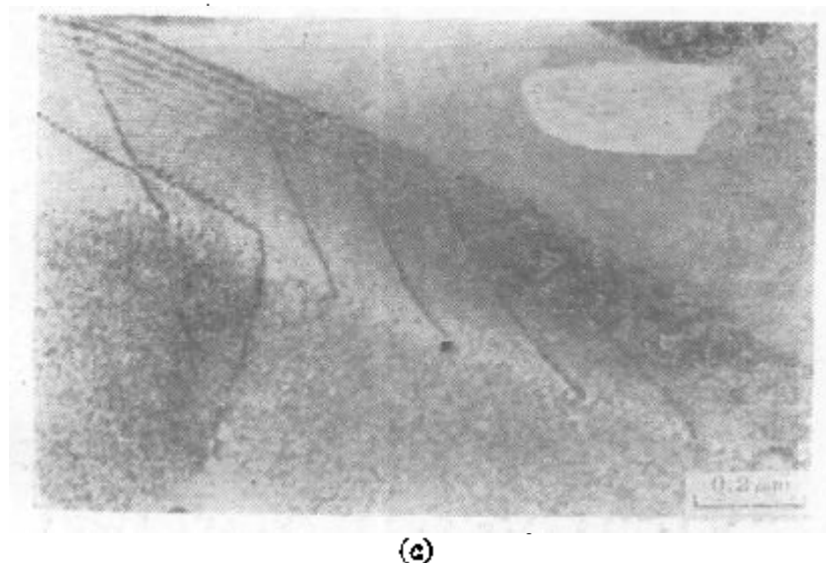
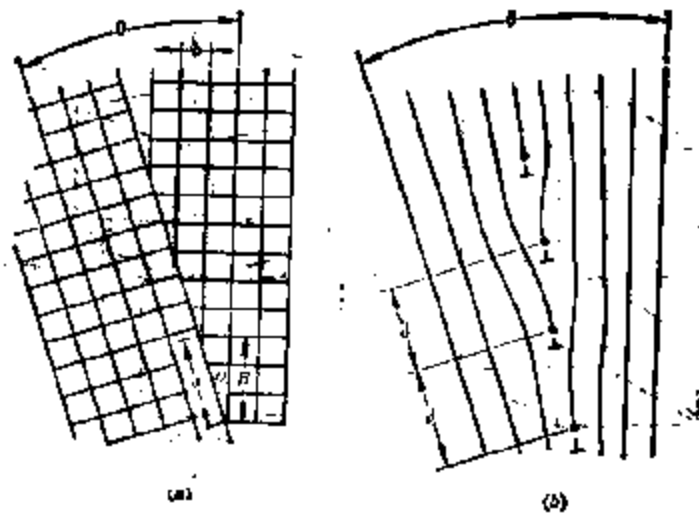


图 12-17 倾斜晶界

(a)、(b) 倾斜晶界的位错模型; (c) 超塑性形变 Al-40(%, 重量)
Zn 合金中的倾斜晶界

$$\gamma_B \approx \frac{G|b|\theta}{4\pi(1-\sigma)} \left[\frac{4\pi(1-\sigma)\gamma_0}{G|b|^2} - \ln \theta \right] \quad (12-22)$$

式中: G 为材料的切变模量; σ 为泊松比。在通过某种方法^[151, 152]测得 γ_B 以后, 便可根据上式求得单个位错核心处的能量 γ_0 。通常要单独求得 γ_0 是困难的, 只有先求晶界表面能量 γ_B 后, 才能求得 γ_0 。反之也可根据单个位错能量的估计值, 计算出单位面积的晶界能量 γ_B 。

另一种小角晶界—扭转晶界, 也可以用位错模型来解释, 如图

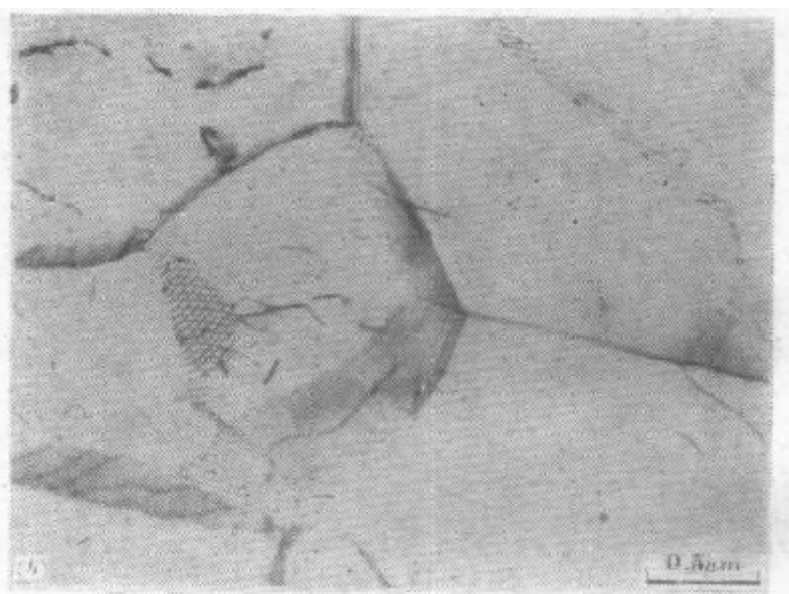
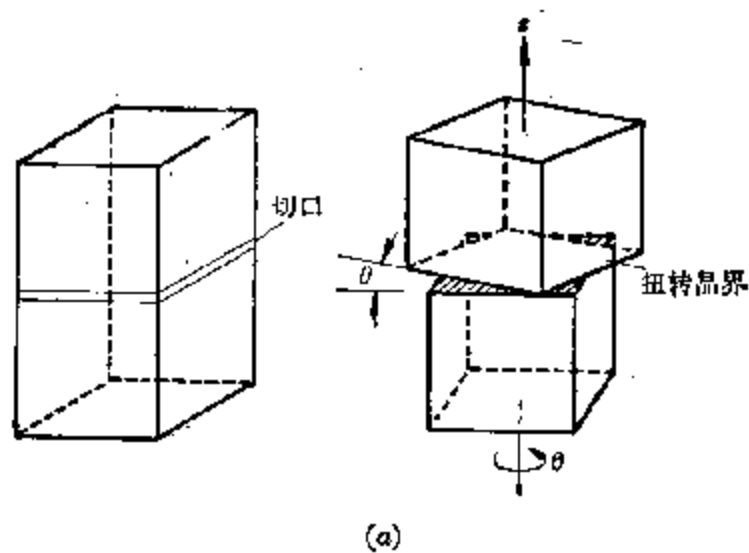


图 12-18 扭转晶界

(a) 形成扭转晶界的模型示意图; (b) 镜中看到的扭转晶界

12-18(a)。将一根晶棒从中部切开, 上、下两部分晶体沿切开的平面绕 Z 轴旋转一 θ 角, 就形成了扭转角为 θ 的扭转晶界(被切开的平面即扭转晶界)。它可以视为由交叉的螺位错网所组成^[48]。这种晶界是最简单的螺型位错晶界。当然, 小角晶界还有更复杂的形式, 这就不能用简单位错模型来解释。

一般大角晶界的能量约为 $500 \sim 600$ 尔格/厘米², 近似为一常数。多数实际金属和合金中, 90% 以上的晶界是大角晶界, 故在

多晶材料的有关计算中,可取 500~600 尔格/厘米²作为平均晶界能。表 12-3 所列的有关数据可供计算时参考^[53]。

表 12-3 用电子显微术测得的某些金属的界面能和层错能值
(单位: erg/cm²)

材 料	温度(°C)	F_s	γ_{cb}	γ_{tb}	γ_{ab}	γ_{TB}	γ_{SF}
钙	1000	1740	620	210	27	365	70
金	1000	1350	380	—	15	—	50
Inconel 600	1060	2150	880	—	19	—	28
镍	1060	2100	840	383	41	583	280
银	950	1100	270	100	8	90	19
304 不锈钢	1060	2080	790	242	18	200	21

- 【注】 1. 此试验温度近似模拟平衡温度。
 2. 银的 γ_{SF} 值为根据 Ni-Cr 合金实验曲线外推值。
 3. 表中各符号意义如下:
 F_s ——表面自由能;
 γ_{cb} ——大角晶界自由能;
 γ_{tb} ——小角晶界(倾斜晶界)自由能(取向差 $< 2^\circ$);
 γ_{ab} ——共格孪晶界自由能;
 γ_{TB} ——非共格孪晶界自由能;
 γ_{SF} ——内禀层错能(自由能)。

由于实验方法不同,表 12-3 与表 11-1 中相应的数据略有出入。

3. 孪晶界

孪晶界衍衬象的重要特点是,当晶界倾斜时出现厚度条纹,鉴别的最可靠的方法,是利用跨在晶界上获得的选区域电子衍射谱,如果是孪晶界,在大多数情况下(或通过适当倾斜),可以看到有规律分布的孪晶斑点。适当的反射下,孪晶的暗场与明场衬度强烈反转。从孪晶界的衍衬象上不能得到更多的定量信息。但是值得注意的是,孪晶界面上常有某些界面位错存在,它们由于晶界条纹衬度干扰,往往被掩盖。这时,可选择基体和孪晶公有的反射成明场象,使条纹消失,位错就会显露出来,如图 12-13(b)。然后再采

用第十一章所述方法,测定这些位错的布氏矢量,并分析它们的来源。

Whelan^[153]和Hull^[154]曾分别报导过fcc和bcc金属中层错条纹与孪晶界厚度条纹相重叠的现象。在fcc中,

$$b_p = \frac{1}{6} \langle 112 \rangle$$

在bcc中,
$$b_p = \frac{1}{6} \langle 111 \rangle$$

若有 n 个层错在此处相重,则在附加位相角 $\alpha = (2n\pi)/3$ 作用下,晶界条纹将每次位移半个条纹间距。这个规律与只有层错重叠时的衬度变化相似,只不过要考虑到它上面晶界条纹的迭加效果罢了。

孪晶界又可分为共格孪晶界[图12-19(a)]和部分共格孪晶界[图12-19(b)]。前一种孪晶界的界面是对称面(反映面),界面处晶格点阵完全匹配,无点阵畸变;后一种孪晶界的界面为非对称面,相当于从对称面旋转了 ϕ 角,这时错配度是 ϕ 的函数,可表为:

$$\delta = \frac{a_1 - a_2}{a_1} \quad (12-23)$$

在孪晶界处常常可以观察到某些结构细节,读者可参见Pumphrey和Bowkett等人的工作^[155]。

(二) 异相界面

合金基体与析出相之间,根据界面两侧晶体点阵的匹配情况,晶界又可分为:共格界面、半共格界面和非共格界面。只要第二相达到一定尺寸,当这些界面与膜面成倾斜时,一般都可以观察到条纹衬度,因此前述对条纹衬度的分析和鉴别方法,以及迹线分析方法,都可应用。下面分别扼要介绍它们的衬度特点及有关分析方法。

实际上,共格界面并非只在异相金属中存在,而在同相金属中(如孪晶共格界面)也有存在,不过为了叙述方便,均在此一并讨论。

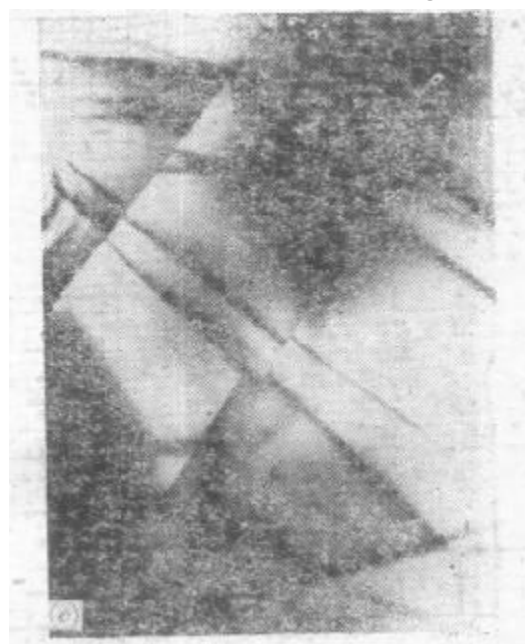
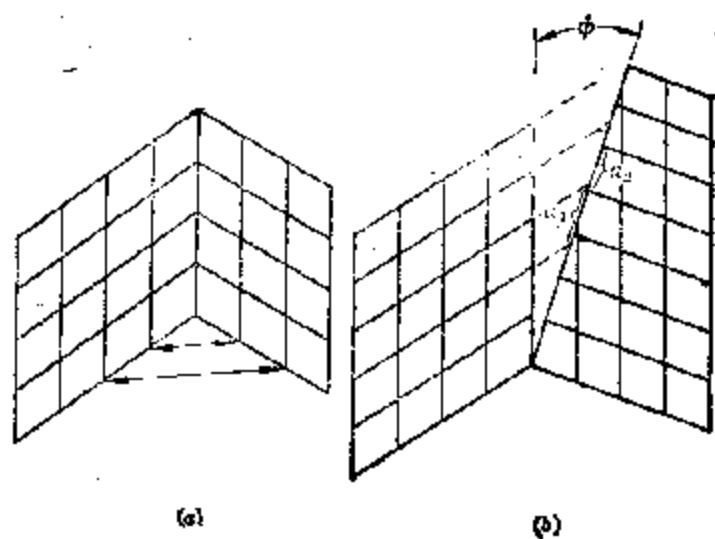


图 12-19 孪晶界结构及衍衬象

(a) 共格孪晶界面示意图; (b) 部分共格孪晶界面示意图;
(c) Ni-Al 合金中的孪晶衍衬明场象^[7]

这三种界面的简单示意图如图 12-20。图(a)为非共格界面 (incoherent boundaries), 界面处不存在点阵匹配的任何规律性, 通常的大角晶界就是非共格界面。这种界面, 两侧晶面无须弯曲去适应另一点阵, 因而由点阵畸变引起的畸变能低, 而反映化学键数和强度变化的化学能则很高。图(b)为共格界面 (完全共格界面, fully coherent boundaries), 界面两侧晶体点阵要相互迁就适应, 以维持阵点排列的连续性, 以致使界面附近的晶面要发生弯曲, 晶

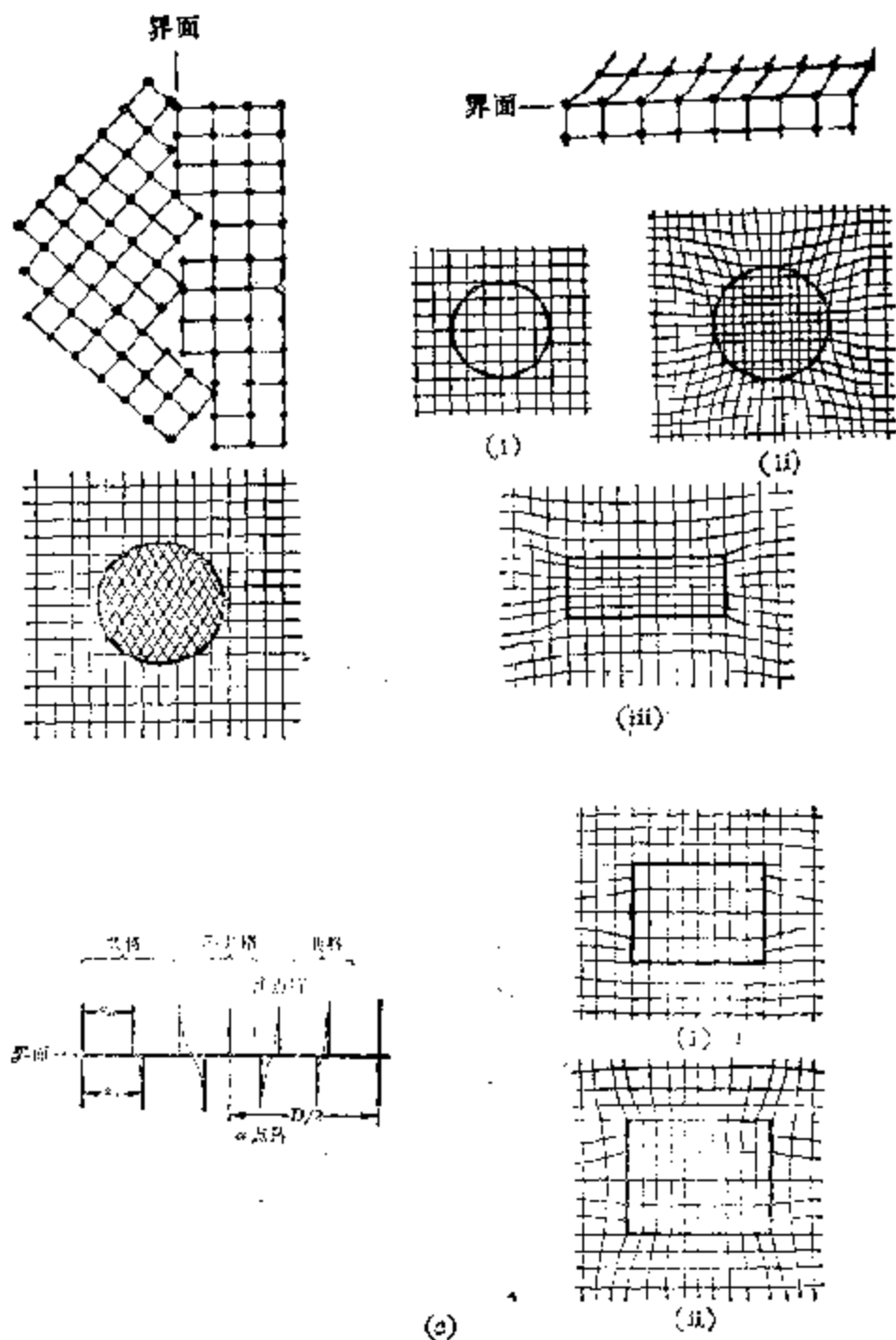


图 12-20 界面两侧晶体点阵的不同匹配情况

(a) 非共格界面，下图为球状不共格质点(如 Cu 中的 Cu_2O)；
 (b) 共格界面，下图：(i) 无错配的球状质点(如 Al-Ag 合金中的 G. P. 区)；(ii) 具有小的负错配的球状质点(如 Cu-Co 中的 G. P. 区)；(iii) 具有小的负错配的盘状质点(如 Al-Cu 中的 G. P. 区)；
 (c) 部分共格界面，右图：(i) 具有小的正错配(垂直于盘平面)的盘状质点(如 Fe-Ni)；(ii) 有大的正错配(垂直于盘平面)和小的负错配(在盘平面内)的盘状质点(如 Fe-C 中的 ϵ 碳化物)

格点阵有了位移,故畸变能高而化学能低。图(c)为部分共格界面 (partially coherent boundaries),其特点是每隔一定原子面,出现两种点阵的原子面正好对应,而在其中间某处,在一相中出现一多余半原子面,即有一刃位错。在刃位错与两相对齐的原子面之间,两相原子面发生弯曲以彼此适应,这就是共格区;在刃位错周围则为不共格区。在共格区中,界面能中以畸变能为主要成分;在位错附近的不共格区,则以化学能为主要成分。

实际上,合金中第二相与母相之间,为完全共格关系的情况很少,一般多为部分共格(半共格, semicoherent)或不共格。共格区中界面畸变能大于大角晶界,因而它们的畸变场所提供的阻碍位

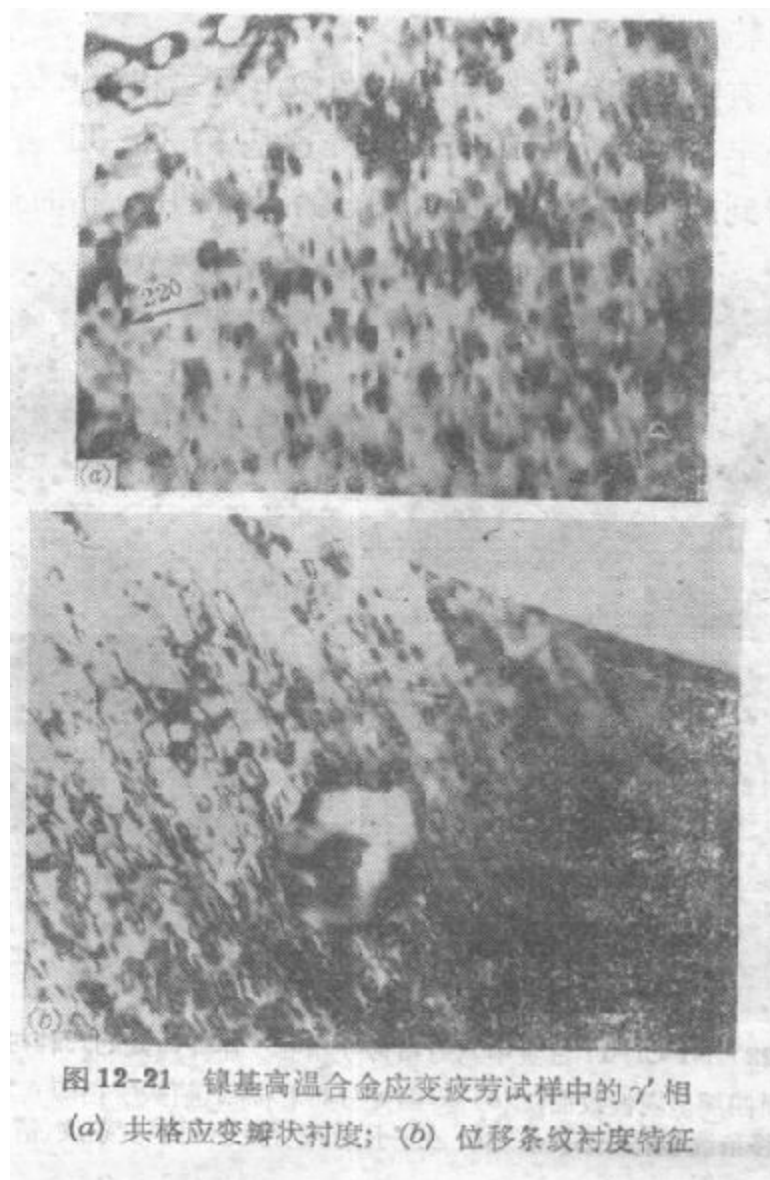


图 12-21 镍基高温合金应变疲劳试样中的 γ' 相
(a) 共格应变瓣状衬度; (b) 位移条纹衬度特征

错运动的作用也大得多。这正是在基体中生成共格或半共格第二相将引起合金强化的基本原理。

如果第二相与母相点阵常数甚为接近,而彼此成共格关系,则错配度小[见(12-4)式],可能出现 δ 条纹。反之,若析出相与母相之间错配度大,则可能出现 α 条纹。若第二相是极薄的片,出现二次衍射,在适当条件下,将看到波纹图。

在实际工作中,如镍基高温合金中的 γ' 相质点,在不同的衍射条件和 γ' 的不同尺寸下,显示出不同的衬度效应,如图12-21所示^[51]。图(a) $g=220$ 垂直于零衬度线,可明显看出共格应变衬度效应;而在图(b)中,则具有位移条纹衬度的特征。因此,解释这些图像应当特别小心。

另一个有趣的实例,说明衍衬图像上第二相与基体间的衬度现象是十分丰富的,如图12-22^[51]。这是Ni-Cr-Ti合金中 η 相与基体间看到的多种衬度类型。图(a)沿着两片 η 相的边界,出现

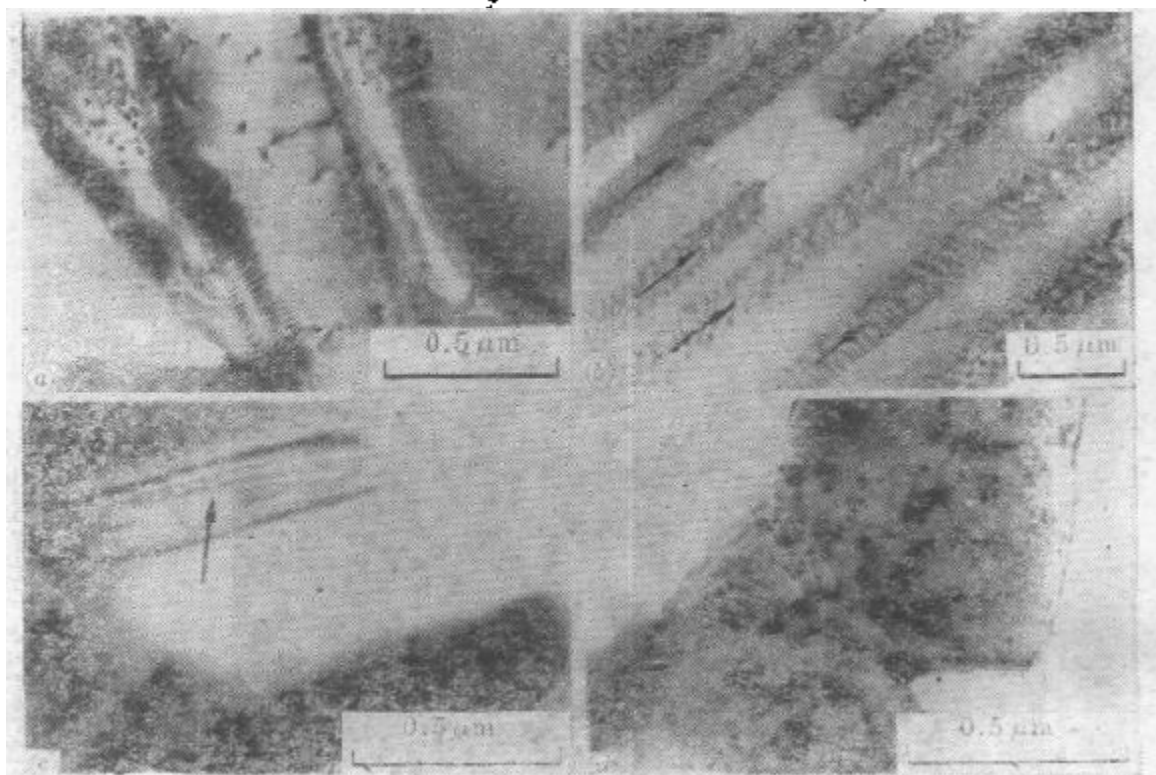


图12-22 Ni-Cr-Ti合金中六方结构 η 相与基体界面处的几种衬度现象

- (a) 界面四周呈现波纹图; (b) 界面处分布着位错(箭头所指即 η 片方向);
(c) 位移条纹(箭头所示); (d) 在一片 η 周界处出现厚度条纹(箭头所示)

了波纹图,显然是已经完全长成定型的 η 相。在精确测得每一部分的反射条件后,可以通过计算波纹的间距,估算出 η 相与基体间的错配度。可见这些条纹是一种非常有意义的信息。已经有许多工作表明,当第二相与基体的错配度不太大时,这种错配导致的位错,在适当衍射条件下(当 $g \cdot b \neq 0$),是可以看见的。图(b)中就看到了这种错配界面位错,通过它们勾画出了 η 片的轮廓。图(d)除了能看到边沿的厚度条纹外,还可看到其中的位错环等细节。

分析中常遇到的一个问题,是如何区别波纹图与其它衬度条纹。认识波纹图的下述性质,对进行鉴别大有好处:即由(12-9), (12-10), (12-11)等式可知,波纹图的条纹间距与电子波长无关,因此在观察时如改变加速电压,条纹间距仍保持恒定;如为其它条纹(如位移条纹),就没有这个性质。当然,必须注意,改变加速电压时,仍应保持原放大倍数不变;且所谓条纹间距,也是指其真实间距。另一个有用的判据是,波纹图条纹方向总是垂直于两成像操作反射斑点的连线;而其它条纹衬度的方向却总是平行于界面与膜面的交线。

无论是材料工作者或衍射工作者,研究第二相问题时,其着眼点主要是第二相的存在对材料强度的贡献,因此我们对第二相的尺寸分布及其与基体的联结方式感兴趣。上面所讨论的共格、不共格或半共格(部分共格)就属于后一类问题。在界面研究中,近年来,许多作者对界面位错都给予很大注意,并把界面位错作为两相不共格的一种判据。但是不共格界面却不一定都能看到界面位错。这是因为要看到位错,还必须满足一定的衍射条件。如不满足§11-8中所给出的条件,则即使存在界面位错,也仍看不到。此外,还应指出,只有当基体与第二相的衬度十分接近时,才较易看到界面处的位错。关于共格界面,前面讨论的基体应变衬度,是较能直观地反映质点与基体的共格性的[如图12-21(a)],因此被广泛用来作为两相间存在某种程度共格性的依据。

Ashby 和 Brown^[150]曾对界面位错在两相由共格转变为不共格过程中的作用进行了半定量的讨论。他们认为存在着一个使两

相共格性开始受到破坏的第二相质点的临界尺寸(r_0)。这个概念对于设计沉淀强化合金时,如何控制第二相尺寸是有意义的。它假设如果界面存在 n 个布氏矢量为 b 的位错,相应地,令质点半径增大到 r_0 时,可使平行于 b 方向测得的应变量由 s 降至 s' , 即当:

$$s' = s - \frac{n|b|}{r_0} \quad (12-24)$$

趋于零时,两相才完全失去共格。这就是说,沿布氏矢量方向的应变极限值为 $\frac{n|b|}{r_0}$ 。 (12-24)式把界面位错密度和质点临界尺寸 r_0 与维持共格的应变量 s 联系起来。如果作出一根相应于临界尺寸 r_0 的 s 曲线,当 r_0 达到某一值时,曲线突然下降,这时即标志着共格完全受到破坏。这当然是假定整个质点在各个方向同时失去共格,然而事实上却并不是这样,而是先在某个方向失去共格,即共格的破坏有一个发展过程。如何在电镜上观察这个过程,也就成为衍衬工作者需要解决的一个新课题。可以设想,如果能在电镜中借助高温台使合金薄膜发生相变,同时进行定点跟踪观察,那么上述动态过程的研究还是可以实现。

第十三章

弱束成象技术

§ 13-1 引言

晶体缺陷理论应用于材料强度本质的研究, 显示出其所具有的强大生命力; 反过来也推动了晶体缺陷理论向纵深发展, 要求人们对晶体缺陷作更深入的了解, 特别是对单个缺陷的几何特性及其与基体或其它缺陷相互作用时的行为, 作更透彻的了解。虽然, 透射电镜常规明暗场技术在这方面已作了大量工作, 但实践表明, 它也受到限制。例如用常规技术研究位错核心附近的特征、早期沉淀过程以及十分靠近的两个缺陷(如超位错)等仅有 $10\text{\AA}$ 左右甚至更小的细节, 则几乎是不可能的。困难来自两个方面: 一是仪器电子光学系统的误差; 二是常规成象时衍射衬度引起的象宽过大。例如位错象宽近似等于 $\left(\frac{1}{3} \sim \frac{1}{5}\right)\xi_g$, 而 ξ_g 反比于特定反射下两支色散面之间的能量差 ΔE 。如以奥氏体的 220 反射为例, 在 200 kV 下, $\xi_g = 565\text{\AA}$, 位错线的宽度往往就在 $100\text{\AA}$ 以上。这时, 间距仅为几十埃的超位错或其它位错对就无法分开。同样, 合金的早期时效, 沉淀质点尺寸一般也仅几十埃, 要察觉它们在位错上的形核, 当然也是不可能的。解决这个问题, 一方面有待电子光学工作者(包括电镜设计师们)从仪器分辨性能上加以改进; 另一方面衍射工作者也必须从成象技术上探索新的途径。弱束技术的建立, 就是属于后一方面的努力。

弱束成象方法最早是由 Cockayne 等人^[157, 158]在 1968 年提出来的。经过近十多年来许多工作者的不断完善, 目前已经比较成熟, 并且成功地应用于许多方面, 有些结果是十分鼓舞人心的。

应用领域包括: 早期沉淀过程, 特别是在位错线上的早期形核; 加工硬化过程中位错的交互作用; 层错能的测定; 合金的有序无序转变; 超位错、位错偶、反相畴的结构; 形变过程的位错反应和孪晶界的精细结构等。

§ 13-2 弱束成像原理简述

在第十章, 我们曾经得到了含有缺陷晶体的双束动力学方程, 即(10-86)式:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\phi'_0}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_g} \phi'_g \\ \frac{d\phi'_g}{dz} &= \frac{\pi i}{\xi_g} \phi'_0 + 2\pi i \left(s + \mathbf{g} \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dz} \right) \phi'_g \end{aligned} \right\}$$

并且指出, 位错引起的应变场体现在 $\mathbf{g} \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dz}$ 项, 通过它对衍射振幅的变化 $\frac{d\phi'_g}{dz}$ 施加影响; 就是说, 位错的存在使偏离矢量由 s 变成了 $s + \mathbf{g} \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dz}$, 这意味着位错使反射平面局部发生了旋转。

令 $s_{eff} = s + \mathbf{g} \cdot d\mathbf{R}/dz$, 称为有效偏离参量, 在一定条件下, s_{eff} 取决于 $\mathbf{g} \cdot d\mathbf{R}/dz$, 即位移场变化率在操作反射矢量方向上的分量。

当 s_{eff} 中的 s 项 ≈ 0 时, 透射波(ϕ_0)与衍射波(ϕ_g)之间有强烈作用; 如果 s 很大, 即衍射条件偏离布拉格反射位置很远, 则 ϕ_0 与 ϕ_g 之间的交互作用很弱。有些文献上把这种交互作用称作“耦合”, 指的是这两支波间的能量传递。

下面以晶体中含有一根刃位错的简单情况为例, 说明上述分析在实验上的意义, 并引出弱束成像方法。如图 13-1, 晶体中有刃位错垂直于图面。从整个晶体说, 入射电子束相对于晶体以 $s > 0$ 方向入射, 那么在位错中心处, 位错使邻近晶面向外旋转, 入射角 θ 也随之减小, 以致有可能接近布拉格角 θ_B 。就是说, 晶面旋转使位错中心附近的有效偏离参量 s_{eff} 可能为 0, 因而在这里产生

布拉格衍射。但是只有在为位错应变场所决定的中心这个小区内(图中以黑点的小圆表示),才满足 $s_{eff}=0$ 这个条件;而在小圆以外区域,因为 ϕ_o 与 ϕ_p 耦合作用减弱($\therefore s_{eff}>0$),不能产生强的布拉格衍射。这样,由于中心小范围内与周围环境衍射作用的强烈差别,就把位错衬度明显地显示出来。

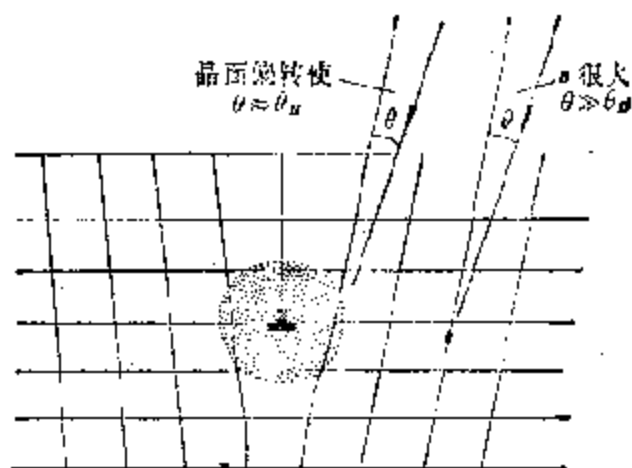


图 13-1 弱束成像原理示意图

由此可以得出:采用某一 $s \neq 0$ 的衍射束成暗场象,将使位错的象宽变窄,这便是弱束暗场成像原理的基础。

设有一位错,其布氏矢量为 $\mathbf{b}$,那么在距位错中心 x 处,所引起的点阵面旋转 $\Delta\theta$ 近似为^[59]:

$$\Delta\theta = \frac{|\mathbf{b}|}{2\pi x} \quad (13-1)$$

当 $\Delta\theta$ 值足够大时,导致该处晶面满足布拉格条件,产生强衍射。将这时的 $\Delta\theta$ 作为形成位错有效衬度所必需的点阵面旋转值。于是由 $\Delta\theta \approx s/g$,可得象宽表达式:

$$2x = \frac{\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}}{\pi s} \quad (13-2)$$

在通常双束条件下,应以有效偏离参量

$$s_{eff} = \frac{1}{\xi_g} (1 + \omega_g^2)^{1/2}$$

代替 s ,消光距离 ξ_g 可由(10-17)式求出。可见减小 ξ_g ,增大 s ,可使象宽变窄。对Ni而言,若取 $\mathbf{g}=220$,在200kV下, $\xi_g=523 \text{ \AA}$,作近似估计,取象宽为 $\xi_g/3$,则在正常衍射条件下,象宽将达 $175 \text{ \AA}$,这显然是一个可观的数字。但如取 $s_g \geq 2 \times 10^{-1} \text{ nm}^{-1}$ 成弱束象,则据(13-1)和(13-2)式计算,象宽将可减至 $17 \text{ \AA}$ 。

在 s_g 很大的情况下成弱束象,运动学条件还能得到很好满足。

下面就从运动学角度,进一步作些讨论。

我们曾建立过有缺陷的运动学条件衍射振幅方程(10-22):

$$\phi_0 = \frac{\pi i}{\xi_g} \int_{\text{晶体}} \exp[-2\pi i(sz + \mathbf{g} \cdot \mathbf{R})] dz$$

此式右边积分这一项,表示振幅位相角随深度 z 的变化。如果在晶体中沿 z 方向,存在着这样一个范围,在这范围内位相角等于常数,即:

$$\alpha = -2\pi(sz + \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}) = \text{常数} \quad (13-3)$$

那么有:

$$s_{\text{eff}} = s + \frac{d}{dz}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}) = 0 \quad (13-4)$$

这时,在此范围内相位变化对振幅变化的贡献可以忽略不计。但是,如果同时有:

$$\frac{d^2}{dz^2}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}) = 0 \quad (13-5)$$

则对振幅变化的贡献是最大的。这样,可以把(13-4)和(13-5)式作为弱束象位置的判据。实际上,从(13-4)式即可直观地看出,这个象位于 s 与 $\frac{d}{dz}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{R})$ 符号相反、数值相等的地方。只需对应变场作简单的微分,就可以确定象强度最大处距位错中心的距离。

以上分析,讨论了象峰的位置,应用运动学理论同样可以计算出象的强度分布线型,这只要积分(10-22)式即可^[20]。计算线型的更精确的方法,是积分多束方程,如 Cockayne 所作的那样^[100]。他指出:①只在试样中某一深度处,存在着一个最窄的象宽;②选择适当的反射和 s_g 值,象宽可达到近似 $20 \text{ \AA}$ 的理想情况;③强度峰的位置随深度变化不大,而象宽随深度变化比较明显;④位错的弱束暗场象表现为暗的背景上的亮线;⑤因背景甚弱,故衬度很高;⑥因为采用 $s \neq 0$ 的衍射束成象,故象本身强度很弱。

上述结论,很好地概括了弱束象的一些基本特点。

§ 13-3 弱束暗场象技术

总的要求是:在暗场下用 $s_g \neq 0$ 的弱 g 成暗场象。这时使 $2g$ 、

$3g, 4g, 5g, \dots$ 处于布拉格位置, 即菊池线通过 $2g, 3g, 4g, 5g$ 等单晶斑点(实验时最好稍微偏离该斑点外侧)。此外, 因为弱束或象, 其强度弱, 暗场下无法辨别象的轮廓, 所以只能在明场下聚焦。使明、暗场预先对中, 待明场聚焦后, 再直接转向暗场, 然后长时间曝光(有时长达一分钟)。为保证成象质量, 电镜应精确调整, 对中处于良好状态, 如电流中心、电压中心、倾动台的合轴以及象散的消除等, 都必须事先调好。

一、 $g/3g$ 弱束暗场象的实验步骤

(1) 明场下获得 g 的双束条件。先选择视场, 将感兴趣的研究对象移至屏的中心; 再转至衍射位置, 稍微倾动试样, 观察斑点变化, 直至除透射斑点 T 外, g 最强, 而且是 ng 的系列反射; 然后回到明场图象位置, 不要再倾动试样, 以物镜聚焦试样。

(2) 转至暗场衍射位置, 并用束偏转装置使强 g 移至中心。这时因 g 偏离布拉格位置, 故很弱; 而 $3g$ 正处于布拉格位置。如能看到菊池线, 应使 $3g$ 的亮菊池线略为偏向 $3g$ 斑点外侧; 如无菊池线, 则也可根据经验, 微动倾动台角度, 直至看到的 g 变得更弱, 亦即使 s_g 更大一些。

(3) 回到明场, 再次检查一下视场。如研究对象仍处于视场中心, 且聚焦良好, 即可转至暗场图象位置。用物镜光栏围住在中心的 g , 曝光约一分钟, 拍下 $g/3g$ 弱束暗场象。由于此时用于成象的 g 束电子束强度较弱, 在屏上几乎看不到图象, 所以像的质量, 基本上决定于明场的聚焦状态和 s_g 值的选择。

上述步骤示意如图 13-2 的左图。但尚需说明:

① 符号 $g/3g$ 表示 $3g$ 处于布拉格位置, 用弱的 g (厄瓦尔德球截 g 倒易杆于端部, 见左图下) 成暗场象。如果暗场象下 $4g, 5g$ 处于布拉格位置, 用弱 g 成暗场象, 则分别成为 $g/4g, g/5g$ 弱束暗场象, 余类推。有些文献亦有记作 $g(3g), g(4g), g(5g)$ 。通过倾斜试样, 获得上述衍射条件。

② 偏离参数 s_g 的计算, 可采用计算公式:

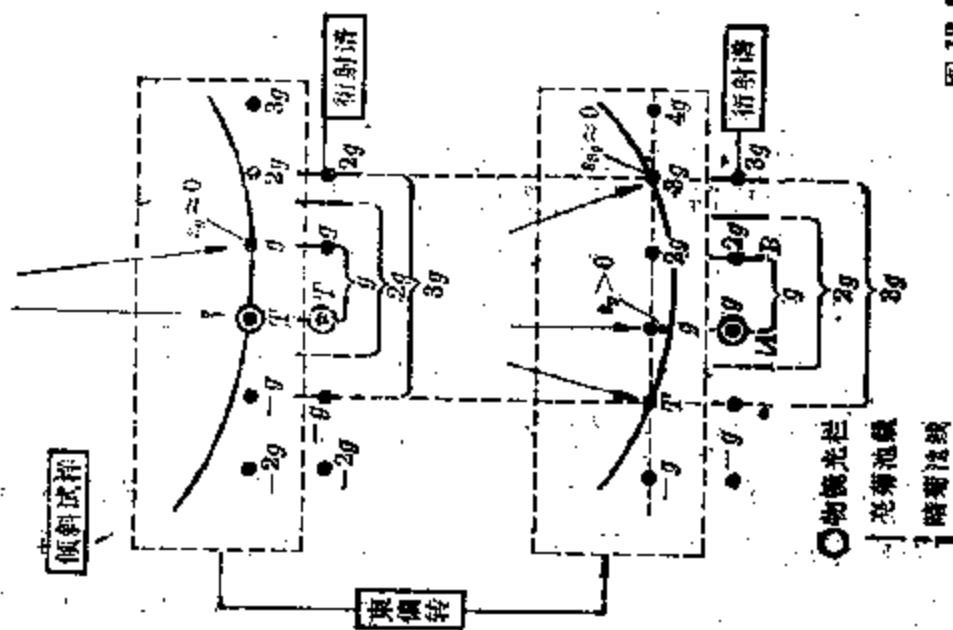
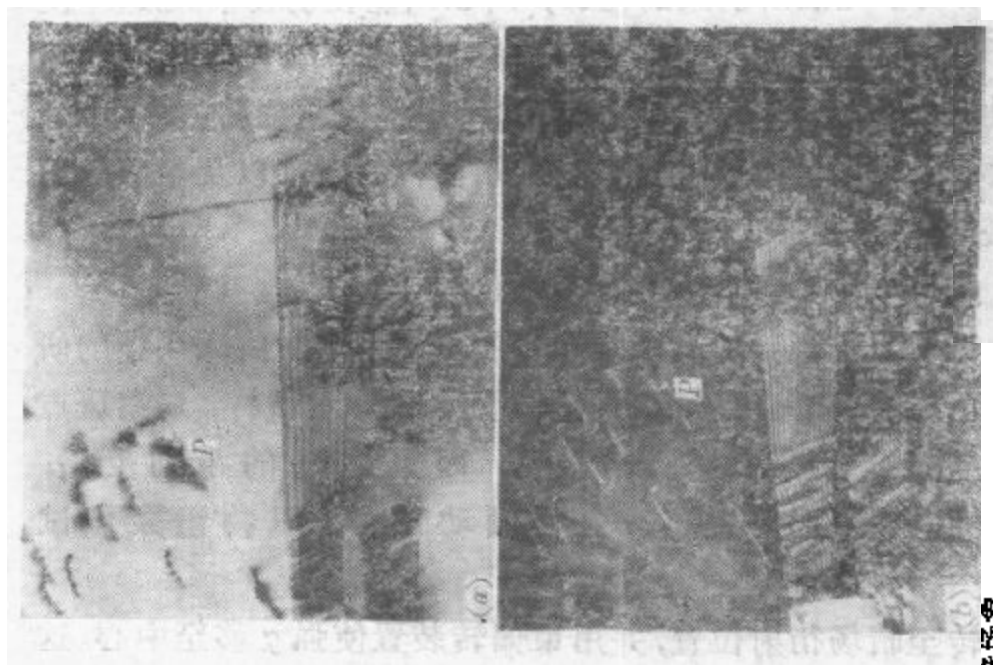


图 13-2 弱束暗场象

左图为 $0/8g$ 弱束暗场象的实验操作示意图,其中:上图 g 处于布拉格位置;下图为束偏转后 g 偏离布拉格位置,而 $3g$ 处于布拉格位置;右图为Ni-Al合金中位错组态,其中:
(a)为 $0 \rightarrow 111$ 明场象; (b)为 $111/444$ 弱束暗场象(均在13.1kV下)

$$\left. \begin{aligned} s_g &= \frac{(n-1)g^2}{2k} = \frac{(n-1)}{2} g^2 \lambda \\ s_g &= \frac{n-1}{2} (d_g^2 \lambda) \end{aligned} \right\} \quad (13-6a)$$

或
式中: n 为与厄瓦尔德球相交的反射级数; g 为系列反射中一级反射的倒易矢长度(单位: $\text{\AA}^{-1}$): $g = d_g^{-1}$; k 为波矢长度, $|k| = \left| \frac{1}{\lambda} \right|$; λ 为电子波长(单位 $\text{\AA}$)。

实用上,也可采用下式计算对应任意反射的偏离参数:

$$s_g = g^2 \lambda \frac{4x}{x} \quad (13-6b)$$

式中: $4x$ 为欲求偏离参数的反射的亮菊池线至该反射斑点之间的距离,如欲求 s_g , 则 $4x$ 即图 13-2 左下图中的 AB ;

x 恒为一阶 g 菊池线线对间的距离,亦即图中的 AB 。

可见, $g/3g$ 下, s_g 最大 $= g^2 \lambda$ (单位: $\text{\AA}^{-1}$ 或 nm^{-1}), 而 $s_{3g} \approx 0$ 。

③ 从图 13-2 右(a)、(b)两张照片的对比,可明显看出,弱束暗场象(此处为 $g/4g$, $s_g = 0.125 \text{ nm}^{-1}$)比普通 $g = 1\bar{1}1$ 的明场象,显示了更多的细节,位错和层错的衬度均有明显改善。如果 s_g 再大一些(如取 0.2 nm^{-1}),则效果更好。

④ 用束偏转移动衍射束时,斑点(即衍射束)可以运动,而菊池线却好象固定在试样上一样^[60]。这时由于并非倾动试样,故上、下图中菊池线的相对位置没有变动,这是由菊池线的性质决定的(参见 § 8-2)。由此读者不难仿照该图确定 $4g$ 、 $5g$ 、 $\cdots$ 等高阶菊池线的位置,并推测出形成高阶弱束暗场象时,斑点和菊池线的相对位置。这个知识也是进行弱束实验所必不可少的。

二、对称弱束暗场象的实验步骤

实用上还经常用到另一种对称弱束暗场象。所谓对称弱束暗场象,即 $g/2g$ 和 $-g/-2g$ 弱束暗场象,与此相应的明场象则是对称弱束明场象。为此必须先了解下述衍射谱位置,至于具体操作步骤可仿照 $g/3g$ 进行。

① 对称弱束明场象: 在衍射谱上 g 与 $-g$ 相对于 T (透射束) 成对称的弱强度分布, 即它们的倒易杆端部截厄瓦尔德球于等强部位, 这时 $s_g = -0.5g^2\lambda$, 如图 13-3 所示。

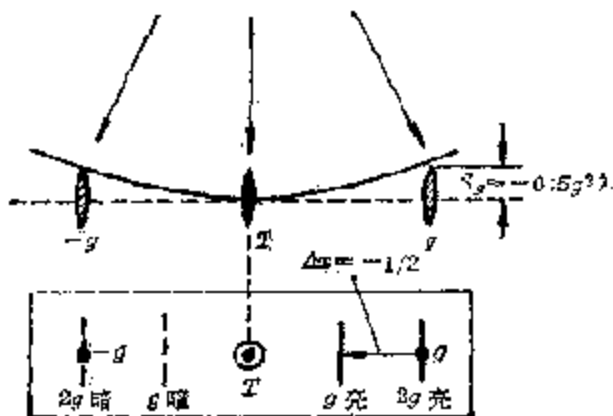


图 13-3 $-g/+g$ 弱束明场象

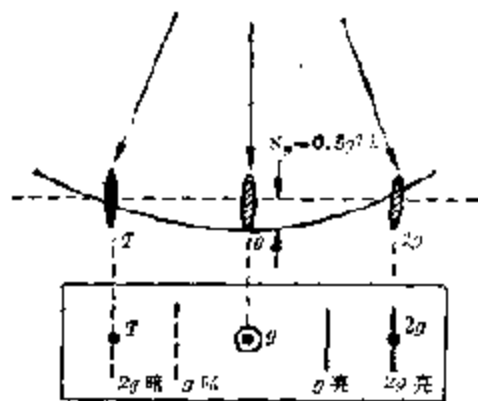


图 13-4 $g/2g$ 弱束暗场象

② $g/2g$ 弱束暗场象: 在获得上述衍射谱条件下, 利用束偏转使 g 衍射束(衍射谱上的 g 斑点)移至中心, 并注意菊池线的位置仍应与图 13-3 一致, 而用来成象的 g 很弱, $2g$ 处于准确布拉格位置, 这时 $s_g = 0.5g^2\lambda$, 如图 13-4。

③ $-g/-2g$ 弱束暗场象: 其方法与以上 ② 相同, 只不过利用束偏转将 $-g$ 衍射束(衍射谱上的 $-g$ 斑点)移至中心, 用弱的 $-g$ 成象, $-2g$ 处于准确布拉格位置, 这时 $s_{-g} = 0.5g^2\lambda$, 如图 13-5。

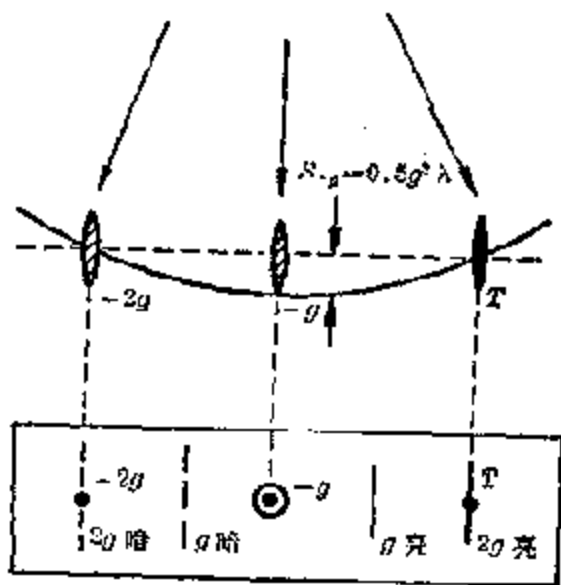


图 13-5 $-g/-2g$ 弱束暗场象

在以上图 13-2~13-5 中, 均将 ng 亮菊池线画成准确通过 ng 斑点。但在实验时, 均应让亮菊线略偏离该斑点, 而在其外侧($s>0$)通过。

三、弱束暗场技术中的若干问题

1. 实验条件

(1) 应尽可能消除各种象差的影响。对电镜的要求,除了消象散器以外,还要求有一个好的束偏转系统,以便能使成象衍射束准确沿轴向通过物镜光栏。老式的电镜采用机械方法平移电子束,往往不能保证这一点;近代电镜均采用电磁偏转装置,在设定的衍射条件下,能很方便地转至暗场成象,这对弱束技术尤其是不可缺少的。

(2) 偏转线圈的设计和稳定性直接关系到弱束象的质量。要求平移电子束后,在照象过程中,仅有尽可能小的束漂移,否则将导致大的视场漂移(与原来明场下选择的视场不对应),并且由于曝光时间很长,图象漂移的影响,将更为严重。同时,也要求物镜稳定。因为从物镜聚焦到曝光完毕,即使操作熟练,也需要好几分钟时间,且在暗场下又不可能再聚焦。如果漂移发生在明场聚焦时,为了等待稳定,必将使试样照射时间过长,引起严重污染(即使有良好的抗污染装置,也难完全避免)。

(3) 照明条件。最好能获得平行照明条件,但实际上很难符合理想。由于电子束的强度正比于 $1/s^2$, s 愈大,强度愈弱;加以近代电镜的物镜都是浸没型透镜,因此往往要求第一聚光镜的励磁很低,以致电子束不能很好会聚,束流密度很低;因此,设法增大束流密度,选用感光快的底片,以缩短曝光时间,就成为关键问题。一般可以通过增大栅偏压来解决。同时第二聚光镜不要正聚焦,并选用适当大小的第一、第二聚光镜光栏(但也不宜太小)。通过上述措施,将有助于增大束流密度,达到缩短曝光时间的目的。

(4) 试样的热稳定性问题。试样愈薄,固然穿透性好,但热稳定性差,在电子束照射下容易发生局部弯曲,也会导致成象模糊。至于观察区域的合适厚度,主要取决于材料性质和选用的加速电压。

(5) 放大倍数不宜过大。根据经验,30000~60000 倍之间即可。如有需要,可再进行光学放大。放大倍数的选择还与所研究的细节及底片乳胶颗粒尺寸有关。一般以通过所选放大倍数使细

节被放大到约等于乳胶颗粒尺寸的 10 倍为合适, 如再大也无意义。而且放大倍数愈高, 亮度愈差, 曝光时间不得不延长。

(6) 底片感光速度, 也并不是愈快愈好。实践表明, 对于要求显示 $10\text{ \AA}$ 左右数量级的细节来说, 不必采用感光极快的底片。有时反而会不必要地记录了十分缓慢的试样漂移, 也有坏处。对弱束象底片的显影, 也应予以注意。首先应保证研究细节的足够衬度; 如采用两次显影, 既要考虑背景和细节的对比度, 又要考虑不损失细节。

(7) 倾动台的稳定性和试样污染问题。倾动要求平稳缓慢, 速度最好能优于 $0.3\text{ \AA}/\text{秒}$, 且仅有尽可能小的滞后现象。至于污染, 除上面已提到的照射时间过长外, 还与真空度不良有关。若试样室装有液氮冷却装置, 正可以改善这种情况。污染的后果, 主要将会掩盖观察细节; 它和因不同区域热平衡干扰而导致试样漂移一样, 都会使成象模糊, 甚至完全失去所要观察的细节。特别是在利用弱束象技术研究许多衍射问题时, 由于往往要拍摄大量照片 (如拍下数十张弱束象和衍射照片), 需连续好几个小时; 污染物在这样长的时间内, 甚至可以达到上百埃的数量级, 这确是一个十分严重的问题, 尤应高度重视。

(8) 物镜光栏尺寸的选择, 也颇有讲究。光栏尺寸的选择与所要求分辨能力有关。例如在铜试样观察中, 如选 $g = (220)$ 反射成象, 要求 $10\text{ \AA}$ 分辨率, 则屏上光栏尺寸应小于衍射谱上看到的 220 到 440 之间的距离的 $1/4$ 。考虑的出发点, 是为了减少非弹性散射, 降低背底强度, 提高象的衬度。不过, 太小也并不好, 因为亮度减弱, 势必延长曝光时间。

(9) 加速电压的选择。低的加速电压, 取较小的 s 值。对一般定量分析工作来说, 目前大多数电镜上 120 kV 加速电压, 也可进行弱束工作。此外, 还可以根据实验要求来决定电压 (显然还与试样材料有关)。

(10) 关于试样制备。主要考虑两个问题: ① 从所试验的样品中得到的信息, 其代表性如何? ② 是否有利于测得精确取向。

当然, 还需要考虑给定加速电压下电子束的穿透力大小。如试样太厚, 透明度差, 谈不上观察细节; 太薄, 所观察到的结构特征又不能代表大块材料的性质, 也看不到菊池线, 对精确测量取向不利。例如一般面心立方材料, 合适厚度可能是 $2\sim 3\xi_0$, 但这个厚度不易看到菊池线, 因此可取 $4\sim 5\xi_0$ 。经验指出, 电解减薄时经常出现一些小圆孔, 孔四周包围着较厚的材料, 则选择这些圆孔四周观察是有利的。因为这些部位不易弯曲, 同时可减少试样漂移。制膜时, 当孔将穿孔前, 加断电流 (脉冲电流) 有利于获得这种可供观察

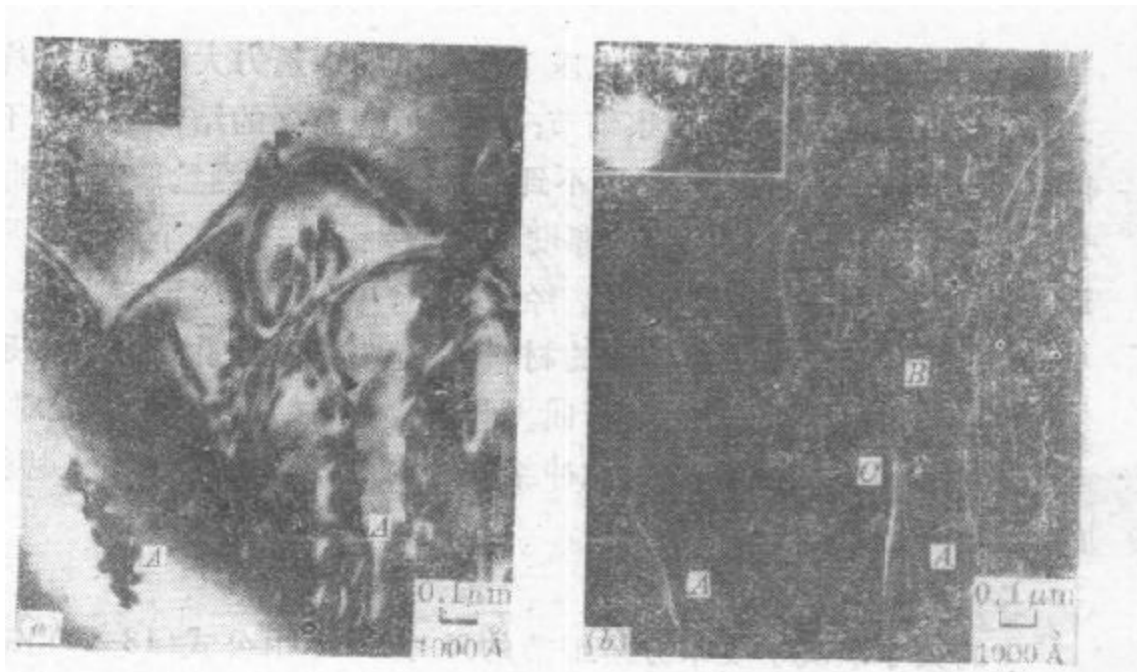


图 13-4 形变硅中的位错组态

(a) 常规强束暗场象, $g = [220]$; (b) $220/440 \sim 660$ 弱束暗场象, $s_{220} \approx 0.15 \text{ nm}^{-1}$

$[440]$ 和 $[660]$ 之间处于布拉格位置, 试样取向近似 $[220]$, $s_{220} \approx 0.15 \text{ nm}^{-1}$ 。可以看出: 弱束象(b)较常规象(a)的分辨率有很大改善, 原来分不开的两根位错已被分开, 位错象宽度约 $20 \text{ \AA}$, $g \cdot b_p = 1$ 。作者指出: 如果要确证位错是联结层错的肖克莱不全位错, 则还应该取更高的 s 值。他们测得材料的层错能为 51 ± 5 尔格/厘米²。

如果研究 fcc 结构的位错分解反应, 要求两个不全位错同时可见, 而层错衬度消失, 可用公式(13-4)和(13-5), 选择适当的反射。如果全位错是 (111) 面上的 $\frac{1}{2}[202]$ 位错, 可以取反射 $[202]$ 成弱束象, 就比取 $\{111\}$ 反射为好。

§ 13-4 弱束技术的应用

自从 Cockayne 和 Ray 等人在 1968 年首次提出弱束成像的方法, 十多年来经过许多工作者的不断完善发展, 这一技术已广泛应用于晶体微观结构的研究, 并取得一些有意义的结果, 也使我们的

对这些微观现象的本质,在某些方面有了新的认识。应用这种技术无须增添新的设备,只要在成象的衍射条件上稍加讲究,就可以极大地改善分辨细节的能力。它的优越性还在于下述几方面:

(1) 可以根据对研究细节的具体要求,由实验人员预先选择反射及合适的偏离布拉格位置的程度,以获得所需分辨率。例如,对低层错能材料;研究其位错扩展情况, s 值可以选择得稍大一些;反之,如果要求分辨有序合金中的超位错细节,则 s 不应太小。这方面,已有一些作者报导了他们的实践经验。

(2) 由于象宽减小,十分有利于研究高密度缺陷的组态和密度。

(3) 衬度较常规暗场象要好得多。

(4) 对各向同性材料,在第十一章中所介绍的

$$g \cdot b = 0, \quad g \cdot b_s = 0, \quad g \cdot b \wedge u = 0$$

可以使位错衬度消失的判据仍有效。

(5) 缺陷象衬度最强的位置,比较接近于该缺陷附近最大应变场的中心,因此象的位置接近于缺陷的真实位置,虽然它仍偏于真实位置一侧。

(6) 与通常的动力学暗场象相比,所显示细节要多得多,这也是由于象宽大大减小。最佳条件下,可使位错象宽达到 $10 \text{ \AA}$ 左右的水平;而动力学暗场象一般不会小于 $\xi_g/3$, 即 $100 \sim 200 \text{ \AA}$ 。正因为这样,弱束技术,近年来还被广泛应用于研究位错上的早期沉淀,这时由于沉淀尺寸甚小,采用其他方法一般不易察觉。

当然,它也存在一些缺点。例如:对电镜各方面的稳定性要求都较高;由于象强度弱,曝光时间长(几十秒到一分钟),不易获得好的照片。此外,对试样漂移也要求很严,而要完全避免漂移则又是很难办到的。

一、关于位错的研究

Clockayne 1972 和 1973 一年的工作指出^[163], 如果 $|s| \gg 0.2 \text{ nm}^{-1}$, $|\omega| - |s\xi_g| \gg 5$, 且系列反射中无其它强反射时,位错象具有如下特点:

- ① 位错象在位错核附近的 $\sim 20 \text{ \AA}$ 范围内;
- ② 象强度峰半宽高可接近 $15 \text{ \AA}$;
- ③ 全位错的象位置随位错所在处的深度不同, 变化不大, $< \pm 5 \text{ \AA}$; 但不全位错的象则随深度发生明显变化, 并且有可能在一定深度处消失。

如果只是为了较好地分辨高密度缺陷, 那么适当选择一个 s 值即可; 但是若要求据此进行定量计算, 则就必须根据(13-2)式和研究对象两个细节可能靠近的程度, 比较精确地确定 s 值。

弱束下研究位错, 同样要借助于 $g \cdot b$ 值 (包括 $g \cdot b$ 和 $g \cdot b_p$) 的选择。例如, 对面心立方金属, 如果要精确测定两个不全位错分开的距离, 最好使层错条纹消失, 因此应取 $g \cdot b_s = 2$, 并选择使两个不全位错同时存在的 $g \cdot b_p$ 。这时只要它们的间距不小于 $10 \text{ \AA}$, 就可用测微光度计进行检测。测量间距 s_D 与真实间距 s_T 之间有如下关系:

$$s_D = \left(s_T + \frac{4}{C^2} \right)^{1/2} \quad (13-7)$$

若材料各向同性, 则:

$$C = -s \frac{g \cdot b_p}{2} \left\{ 1 + \frac{1}{2(1-\sigma)} \right\} \quad (13-8)$$

Stobbs 等指出^[104], 上述定量测量, 一般只对间距大于 $60 \text{ \AA}$ 者比较准确。因为 s_T 愈小, 要求 s 愈大, 从而像也愈弱, 就会给测量带来很大困难。他们还指出, 测量时必须考虑表面应力松弛的影响, 因此, 不能在太薄的边沿区进行测量。离上、下表面的深度下限为 $300 \text{ \AA}$, 它意味着测量区的膜厚不得小于 $600 \text{ \AA}$, 这是从对铜的研究实验中得出的结论。对其它材料, 当然也同样存在一个最低厚度极限, 它可以根据所用仪器稳定性能够允许的曝光时间及材料的性质予以确定。^[105]

当 $g \cdot b_s = 1$ 时, 层错可见, 这一点往往被用来校验 $g \cdot b_s = 2$, $g \cdot b_p = 1$ 时所作出的判断。因在 $g \cdot b_s = 1$ 时, 看到层错条纹, 说明那两根位错确是由全位错分解而来的不全位错。Ray 和 Cockayne 曾用这种方法成功地分析了硅中的位错结构, 观察到用常规方法

所无法确定的扩展得很窄的全位错分解现象^[160]。但此法用于测层错能精度不高,因为两个不全位错靠得太近,并且往往有一根不全位错的衬度很弱,几乎难于察觉。至于利用 $g \cdot b$ 值的大小研究位错象,则弱束象与强束象并无大的区别,分析方法亦同。

二、关于位错环的研究

应用弱束技术,可以充分发挥它分辨细节能力高的优点。测定位错环的布氏矢量和尺寸,关键是选择合适的 s 值和操作反射。一般认为当环直径 $\leq 50 \text{ \AA}$ 时, s 值不得小于 0.2 nm^{-1} ; 若环直径较大,则 s 可适当小一些,以获得较好的象宽。操作反射的选择则与位错环的性质有关。1973年 Perrin 和 Elyre 曾用弱束技术研究过铜中的全位错环^[165],发现 $g \cdot b = 0$ 的位错有时不易与有衬度的 $g \cdot b = 1$ 或 2 的位错环区别;但是 $g \cdot b = 0$ 的位错环有一个十分重要的性质,即当它们获得强的象时,其象与位错核位置相重。因此用 $g \cdot b = 0$ 的象估计位错环的尺寸和形状是比较理想的。如果能较好地满足 $g \cdot b = 2$, $s \geq 0.2 \text{ nm}^{-1}$ 条件,并且无任何强反射时,甚至可以准确地获得 $50 \text{ \AA}$ 的位错环的内侧或外侧衬度。但 Perrin 等指出,要判断其性质是属于空位型或间隙型,则由于惯习面不易测准,仍比较困难。

Kelly 等用对称弱束技术测定钛中位错环的布氏矢量^[166],弱束象的衍射条件是, $+g$ 和 $-g$ 处于相对厄瓦尔德球来说是等强的部位,且有大的负 s 值(参看 § 13-3)。Bicknell^[167]用弱束技术测定了铋中棱柱位错环的布氏矢量。

三、层错观察及层错能测定

(一)对层错的观察

我们曾对 Ni-6.5% Al 合金中的层错结构进行弱束象观察,获得了一些有意义的结果^[161],如图 13-2 右和 13-7。这些结果是:

(1) 图 13-2 右, (a) 为强 $g(1\bar{1}1)$ 双束明场象; (b) 为 $1\bar{1}1/444$, $s_{1\bar{1}1} = 0.125 \text{ nm}^{-1}$ 的弱束暗场象。可明显看出 (b) 中的位错和层错细节,比 (a) 要清晰得多,所显示内容也更为丰富。例如:

左上角位错衬度的强度起伏效应, 弱束下十分明显, 但明场下却几乎看不出; P 处原有两根位错, 但明场下混为一根, 而弱束象中却分开了。此外, 层错条纹数, 在弱束象中明显增多; 同时, 厚度条纹数也有增多, 从而可形象地看出试样从左到右厚度变化的渐增趋势, 而明场照片则几乎看不出这种厚度变化。所有这些都说明, 由于 s_g 增大, 使有效消光距离变小, 衬度揭示结构细节的能力有所增高。

(2) 图 13-7, (a) 为 $g=00\bar{2}$ 的明场象; (b) 为 $g=004$ 的高阶明场象; (c) 为 $00\bar{2}/00\bar{6}$ 弱束暗场象; (d) 为 $002/00\bar{2}$ 对称弱束明场象。比较上述各图, 可以看出: 高阶明场象 (b) 比低指数明场象 (a), 具有较强的显示细节的能力; 图 (d) 由于采用对称弱束明场成像, 超位错的衬度特点 (强度摆动峰同侧) 被显示出来, 有助于确定这种成对位错的性质, 而用一般明场象, 就难于分辨出这个细节; 图 (c) 由于取较大的 s 值 ($s_{00\bar{2}} \approx 0.2 \text{ nm}^{-1}$), 中部不同滑移面上的位错列的衬度层次更加清楚, 还可看到厚度条纹对层错条纹衬度的明显影响, 而这在图 (a) 中是看不到的。

(二) 关于层错能测量

在第十一章中, 曾介绍了层错能的测定方法, 其中最流行的是测量两根不全位错的间距, 然后再进行推算。最早应用弱束技术测量层错能的工作是由 Cockayne, Ray 和 Whelan 等进行的, 他们测量了 Cu-Al 合金中的层错能^[157, 158]。Ray, Crawford 和 Cockayne^[108] 观察高度有序 Fe-35at% Al 合金中 B 2 型超点阵位错的分解, 测定了此合金的反相畴界能为 $105 \pm 15 \text{ erg} \cdot \text{cm}^{-2}$ 。Ray 等测定了砷中的层错能^[169]。Cockayne, Jenkins 等^[170] 测定了银和铜的层错能分别为 16.8 ± 1.7 和 $41 \pm 9 \text{ erg} \cdot \text{cm}^{-2}$ 。Jenkins^[171] 完成了铜、银、金等一系列金属的层错能测定工作, 其中金的层错能为 $32 \pm 5 \text{ erg} \cdot \text{cm}^{-2}$, 比传统的 $45 \text{ erg} \cdot \text{cm}^{-2}$ 要低很多。Crawford, Ray 等观察了 DO3 型有序 Fe-26at% Al 合金中超点阵位错的四次分解, 得到了第一和次最邻反相畴界能分别为 77 ± 12 和 $85 \pm 16 \text{ erg} \cdot \text{cm}^{-2}$ ^[172, 173]。Ray 和 Cockayne 还测量了

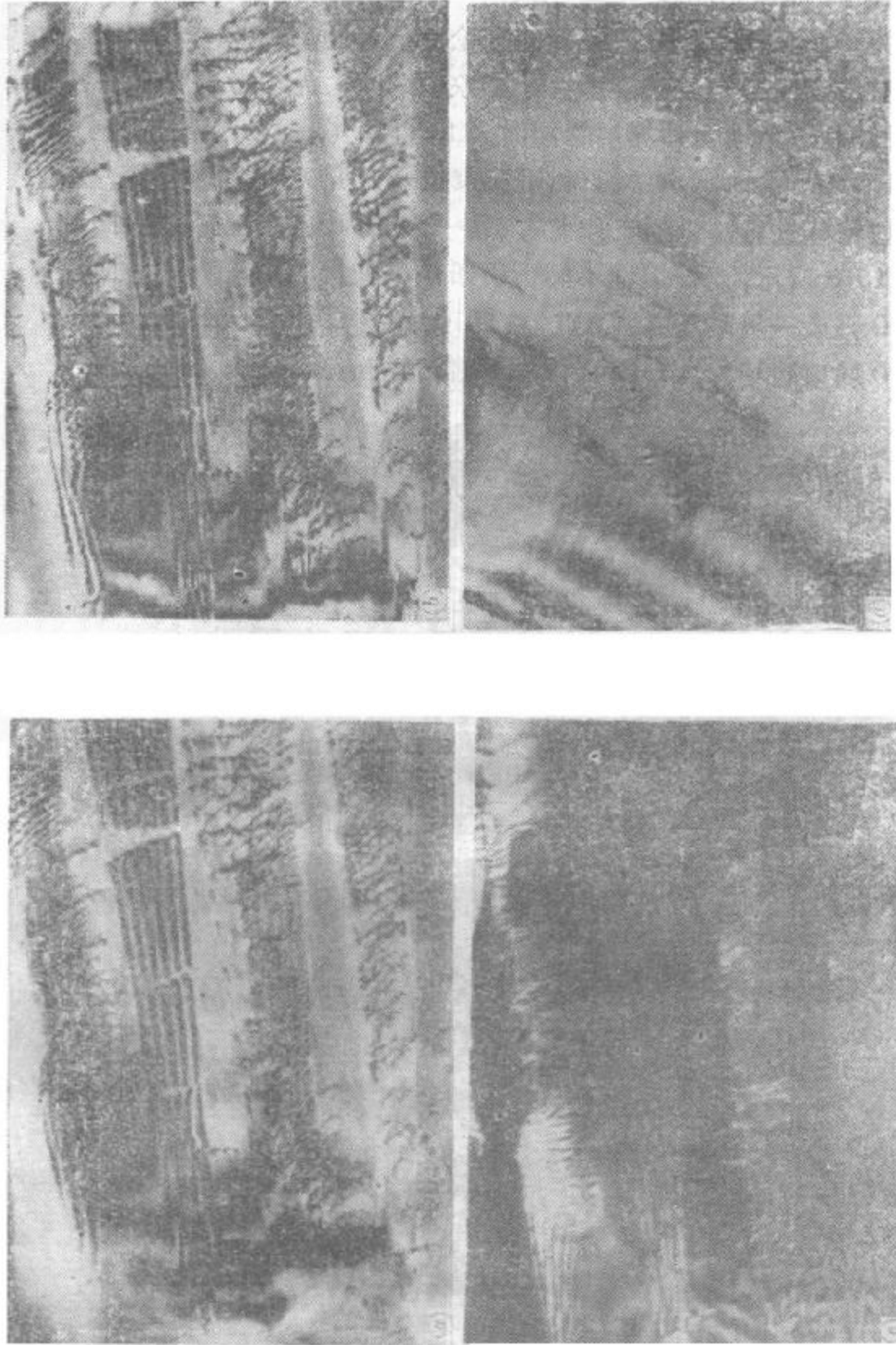


图 14-7 Ni-0.3Al 合金位错、层错结构的弱束现象观察^[10]
(a) $g=002$ 明场象; (b) $g=001$ 高阶明场象; (c) $002/006$ 弱束暗场象; (d) $002/002$ 对称弱束明场象

半导体 Ge 的层错能为 $60 \pm 8 \text{ erg} \cdot \text{cm}^{-2}$ [174]。

关于弱束技术测量层错能的理论处理问题, Stobbs^[164] 指出, 虽然对给定的不全位错模型在计算象轮廓时, 无须考虑材料的各向异性问题; 然而当计算层错能时, 却不能不考虑这一点。

Ray 和 Cockayne 关于利用弱束技术研究硅中扩展位错, 并对其层错能进行测量的工作^[162], 是一个颇为人称道的典型例子。如图 13-8 所示, 是一组在不同衍射条件下获得的位错照片: 图(a) 为 $2\bar{2}0$ 强束一般暗场象, 节点(左)和位错线轮廓均不清楚; 图(b) 为 $2\bar{2}0$ 弱束暗场象, 节点和两根不全位错均清晰可见, 还可看到夹

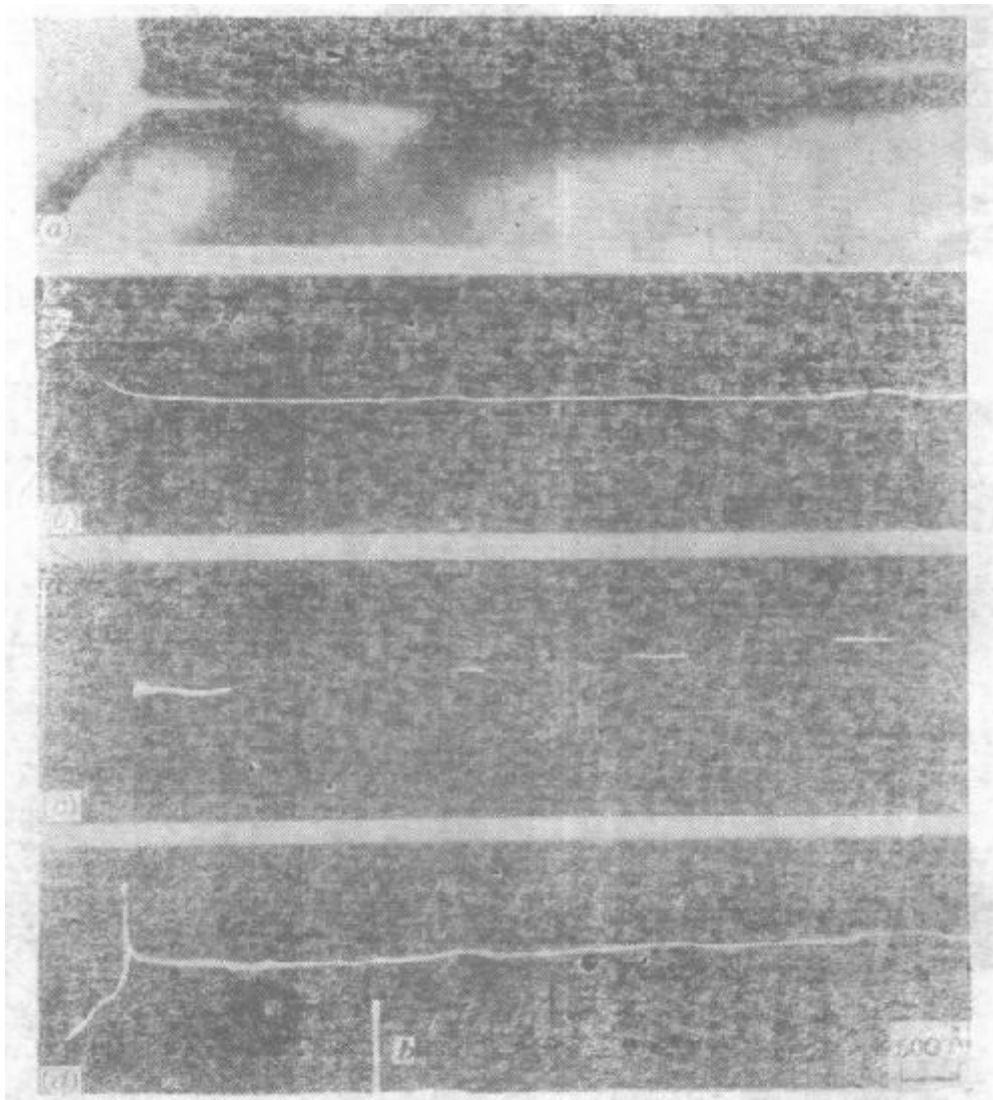


图 3-8 硅中的收缩位错节

(a) 强 $2\bar{2}0$ 暗场象; (b) 弱 $2\bar{2}0$ 暗场象; (c) 弱 $11\bar{1}$ 暗场象; (d) 弱 $02\bar{2}$ 暗场象

在全位错间的层错; (c) 为 (111) 弱束暗场象, $g \cdot b_p = 0$, 只显示层错; (d) 图为 022 弱束暗场象, 因

$$g \cdot b_p = [022] \cdot \frac{1}{6} [2\bar{1}1] = 0,$$

下侧不全位错消失。对这种不全位错间距如此小的扩展位错, 如用一般方法测量层错能, 几乎是不可能的。

四、其它方面的应用

弱束技术也可应用于第二相、小的聚集体和点缺陷的研究, 已报导过许多这方面的工作。

关于在基体中产生应变场的第二相, 其衍衬效应在第 § 12-2 中曾进行过讨论, 得到了描述半径为 r_0 的质点在基体中的应变场的公式 (12-2):

$$\left. \begin{aligned} R_H &= \frac{\epsilon r_0^2}{r^2} & (r \geq r_0) \\ R_H &= \epsilon r & (r \leq r_0) \end{aligned} \right\}$$

由这个应变场引起的明场象宽, 主要取决于无量纲参数 $\epsilon_g r_0^3 / \xi_g^2$ 。同时从 (12-3), (12-4) 式可知, ϵ 还与质点的体弹性模量 K 、基体的杨氏模量 E 、基体的泊松比 σ 及两者的点阵常数 a_1, a_2 都有关。可见决定象宽的应变场测量精确度主要取决于质点半径 r_0 的测量精确度。弱束技术有助于获得比较能反映质点实际形状的质点轮廓象。Brown 指出^[475], 估计出一个 ϵ 值, 只要选取 $s > g\epsilon$, 那么弱束象就基本上能反映球形质点的轮廓, 为此他还进行了一些实验测定^[476]。

分析还指出: 有可能利用弱束技术, 观察到由于两相点阵常数差异造成的波纹图; 但如果用明场成象, 则这种波纹图可能因较强的 Ashby-Brown 衬度 (即应变衬度) 而被弄得模糊不清。观察波纹图成弱束象时, 可以用 $g/3g$, 但还应另有一高阶非系列强反射被激发, 这时波纹图的条纹方向与非系列强反射方向近似垂直。曾有人用这个方法观察到铜中钴质点的波纹图。

至于用弱束技术观察非常小的质点或质点聚集体, 从已有的工作来看, 还没有有很明显的效果, 至少它还不及用于位错观察那样

明显。Stobbs 认为^[158]，这可能由于用常规方法观察这种质点或聚集体，其分辨能力和清晰度本来就已不亚于位错的观察；因此若期望有更大的改善，则只有采用比一般弱束象更大的 s 值。他还指出，用弱束法研究小质点聚集体在膜中的分布情况时，必须特别注意其可见度还与它们在膜中的深度有关，在统计计算时应加考虑。

参 考 文 献

- [1] K. Yada and T. Hibi: *J. Electron Microscopy*, **18**(1969)266.
- [2] 西门纪业、葛肇生:《电子显微镜的原理与设计》, 1979.
- [3] 郭可信: 关于电子光学问题的未发表资料, 金属研究所.
- [4] 郭可信: “电子光学微观分析仪器概述”见《显微分析技术资料汇编》, 1978.
- [5] 大冶钢厂技术资料(未发表).
- [6] 黄孝琰:《电子衍射分析方法》, 金属材料研究丛书, 1976.
- [7] 黄孝琰: “镍铝合金中位错组态的电子衍射研究”, 金属学报, **21**(1985), A34~39.
- [8] 中国科学院金属研究所,《技术资料——电子衍射(基础部分)》.
- [9] B. K. Vainstein: 《Structural Analysis by Electron Diffraction》, 1964, p. 42.
- [10] 杨国力、艾宝瑞:《单晶高压电子衍射分析法——特征基本平行四边形分析法》, 科学出版社, 1979.
- [11] B. T. Duggen, R. L. Segall: *Acta Met.*, **19**(1971)317.
- [12] M. von Heintendahl: *Practical Metallography*, **8**(1971)279.
- [13] 黄孝琰、刘曼朗: 中国电子显微镜学会成立大会上的报告, 钢铁研究总院技术报告, 1980.
- [14] 黄孝琰、刘曼朗:《六方晶系电子衍射谱标定数据表》, 钢铁研究总院技术资料, 1980.
- [15] K. W. Andrews: 《Interpretation of Electron Diffraction Patterns》, 1971.
- [16] R. R. Dayal, J. A. Gard and F. I. Glasser: *Acta Cryst.*, **18**(1965)574.
- [17] 陈乾惕: 金属学报, **14**(1978), 430.
- [18] 郭可信: 转引自文献[17].
- [19] H. Holloway, K. Wollmann and A. S. Joseph: *Phil. Mag.*, **11**(1965)263.
- [20] 陈箴: 未发表工作。转引自徐温崇: “高阶劳厄区分析方法在高温合金中的应用”, 钢铁研究总院内部资料, 1979.

- [21] P. B. Hirsch, A. Howie, R. B. Nicholson, D. W. Pashley and M. J. Whelan: «Electron Microscopy of Thin Crystals» 1977.
- [22] 李春志: 物理学报, **28**(1979)314.
- [23] S. Kikuchi: *Jap. J. Phys.*, **5**(1928)23.
- [24] Y. Kainuma: *Acta Cryst.*, **8**(1955)247.
- [25] G. Thomas and W. L. Bell: Proceedings of the European Electron Microscopy Congress, Rome, 1968, p. 285.
- [26] T. Y. Tan, W. L. Bell and G. Thomas: *Phil. Mag.*, **24** (1971) 417.
- [27] E. Levine, W. L. Bell and G. Thomas: *J. Appl. Phys.*, **37** (1966) 2141.
- [28] P. R. Okamoto, E. Levine and G. Thomas: *J. Appl. Phys.*, **38** (1967) 289.
- [29] 潘大喜、黄孝琰: “3% Si 钢微观结构的电子衍射观察”, 钢铁研究院技术报告, 1979.
- [30] G. Thomas, M. J. Goringe: «Transmission Electron Microscopy of Materials», 1979.
- [31] G. Thomas: *Trans. AIME*, **233**(1965)1608.
- [32] P. R. Okamoto and G. Thomas: *Acta Met.*, **15**(1967)1325.
- [33] R. Uyeda, M. Noneyama and M. Kogiso: *J. Electron Microscopy (Jap.)*, **14**(1965)296.
- [34] D. Watanabe, R. Uyeda and A. Fukubara: *Acta Cryst.*, **A24** (1968)580; **A 25**(1969)138.
- [35] J. S. Lally, C. J. Humphreys, A. J. F. Metherell and R. M. Fisher: *Phil. Mag.*, **26**(1972)321.
- [36] J. S. Lally, G. Thomas and R. M. Fisher: Proceedings of the 1973 Conference of the Electron Microscope Society of America, Claitors, Baton Rouge, LA 1973, p. 4.
- [37] E. P. Butler: *Phys. Status Solidi.*, **18**(1973)71.
- [38] W. L. Bell and G. Thomas: «Electron Microscopy and Structure of Materials» (Ed. G. Thomas), University of California Press, Berkeley, 1971, p. 23.
- [39] R. M. Fisher: 同上, p. 60.
- [40] D. Watanabe, R. Uyeda and M. Kogiso: *Acta cryst.*, **A 24** (1968)249.

- [41] M. Fuentes et. al.: *Metallography*, **12**(1979)215.
- [42] J. W. Edington: «Practical Electron Microscopy in Materials Science», Part III.
- [43] G. J. Cocks and D. W. Borland: *Metal Science*, **2**(1975) 384.
- [44] 中国科学院金属研究所, «技术资料——电子衍射(应用部分)», 第七章.
- [45] C. Laird, E. Klehen: *J. Appl. Phys.*, **37**(1966)2225.
- [46] M. A. Jawsan, J. A. Wheeler: *Acta Cryst.*, **1**(1946) 216.
- [47] 徐祖饬: «马氏体相变与马氏体», 1980, p. 384.
- [48] 李春志: 金属学报, **28**(1979)314.
- [49] А. М. Утсвский: Дифракционная Электронная Микроскопия в Металловедении, 1973.
- [50] G. Thomas et. al.: «The Stereographic Projection and Its Applications».
- [51] 申晖廷、潘天喜、黄孝瑛、蔡其珉: 钢铁, **19** (1984) 42.
- [52] Liu Manlang, Huang Xiao-Ying (黄孝瑛) et al.: New Trends of Electron Microscopy in Atom Resolution, Materials Science and Biology, Proceedings of The First Chinese-Japanese E. M. Seminar, 1981. Edited by H. Hashimoto, K. H. Kao(郭可信) and T. Ko(柯炎), p. 120. 亦见金属学报, **18**(1982)689.
- [53] L. E. Murr: «Electron Optical Applications in Materials Science», 1970.
- [54] 赵伯麟: «薄晶体电子显微象的衬度理论», 上海科学技术出版社, 1980.
- [55] R. D. Heidenreich: «Fundamentals of Transmission Electron Microscopy», 1964.
- [56] B. von Borries: *Z. Naturforsch.*, **4a**(1949)51.
- [57] C. E. Hall: «Introduction to Electron Microscopy», 1966, p. 210.
- [58] 转引自康操川、赵伯麟: “电镜中的衬度分析”, 见《国外金属材料》, 1978 年第一期, p. 59~79.
- [59] 潘天喜、黄孝瑛: 金属材料研究, **8** (1982) 10.
- [60] R. K. Ham: *Phil. Mag.*, **7**(1962)1177.
- [61] 钱端升、杨顺华: «晶体缺陷和金属强度»上册, 1962.
- [62] R. E. Smallman: «Modern Physical Metallurgy», 1973, 第三

版中译本, 张人佺译.

[63] F. R. N Nabarro: «Dislocation in Solids», vol. 2, 1979.

[64] 李庆生: 冶金部钢铁研究总院研究生硕士论文, 1981.

[65] S. Amelinckx, W. Bontinck, W. Dekeyser and F. Seitz: *Phil. Mag.*, **2**(1957)355.

[66] R. B. Nicholson, G. Thomas, J. Nutting: *J. Inst. Metals*, **87** (1958~59)499.

[67] R.B. Nicholson: The Proceedings of the European Regional Conference on E. M., Delft, 1960. ed. A. L. Houwink, B. J. Spit, (De Nederlandse Vereniging voor Electronen microscopie, 1961) vol. I, p. 375.

[68] N. Thompson: *Proc. Phys. Soc.*, **B66**(1953)481.

[69] D. T. H. Cockayne, M. J. Jenkis and I. L. F. Ray: *Phil. Mag.*, **24**(1971)1383.

[70] M. J. Jenkis: *Phil. Mag.*, **26**(1972)747.

[71] I. L. F. Ray and D. J. H. Cockayne: *J. of Microscopy*, **98** (1973)170.

[72] I. L. F. Ray and D. J. H. Cockayne: *Proc. Roy. Soc., London*, **A325** (1971)543.

[73] G. S. Lartly: *Phil. Mag.*, **14**(1966)7.

[74] P. B. Hirsch and H. M. Orte: *Acta Cryst.*, **10**(1957)447.

[75] T. E. Mitchell: *Phil. Mag.*, **17**(1968)1169.

[76] F. R. N. Nabarro, Z. S. Basinski and D. B. Holt: *Adv. Phys.*, **13**(1964)193.

[77] W. L. Bell and G. Thomas: *Phys. Stat. Sol.*, **12**(1965)843.

[78] R. Siems, P. Delavignette and S. Amelinckx: *Phys. Stat. Sol.*, **2**(1962)421.

[79] M. von Heimendahl: *Electron Micro.*, **4**(1973)111.

[80] 据文献[42], 由本书作者作了补充.

[81] L. M. Clarebrough and A. J. Morton: *Aust. J. Phys.*, **22** (1969)351; **22**(1969)371.

[82] M. H. Lerette, R. E. Smallman: «Defects Analysis in Electron Microscopy», 1975.

[83] A. K. Head, P. Humble, L. M. Clarebrough, A. J. Morton and C. T. Forwood: «Computed Electron Micrographs and Defects»,

1973.

[84] R. E. Smallman, "Deformation Studies", 见 J. A. Belk 等编: «Electron Microscopy and Microanalysis of Metals» 1968, p. 79.

[85] J. Bailey and P. B. Hirsch: *Phil. Mag.*, **5**(1960)485.

[86] R. K. Ham, et al., *Phil. Mag.*, **6**(1961)1188.

[87] A. S. Keh: *J. Appl. Phys.*, **31**(1960)1501.

[88] K. W. Andrews: «Physical Metallurgy Techniques and Appendices», vol. II.

[89] T. P. Hirth and J. Lothe: «Theory of Dislocations», 1968, McGraw Hill, New York.

[90] D. M. Maher and B. L. Eyre: *Phil. Mag.*, **23**(1971)409.

[91] M. P. Röhle, F. von Haussermann: Proc. 4th European Reg. Conf. on E. M., 1968, Rome, vol. I p. 377.

[92] M. Ipechorski and L. M. Brown: *Phil. Mag.*, **22**(1970)931.

[93] J. L. R. Norris: Electron Irradiation Damage in Metals (From "E. M. in Materials Science", Third Course of the International School of E. M. Part III, p. 1115).

[94] W. J. Tanstall, P. B. Hirsch and J. Steeds: *Phil. Mag.*, **9**(1964)95.

[95] A. Howie and M. J. Whelan: *Proc. Roy. Soc., A* **262** (1961) 217.

[96] J. M. Silcock and W. J. Tanstall: *Phil. Mag.*, **13** (1964)661.

[97] 郭可信, 林保军: 物理学报, **29**(1980)494.

[98] J. M. Oklač and B. H. Kear: Electron Microscopy and Structure of Materials (eds. G. Thomas, R. M. Pabst, and R. M. Fisher), 1972, p. 566.

[99] G. Thomas: "Introduction to Transmission Electron Microscopy" (见 «E. M. in Material Science», 1975 Third course of the International School of E. M.).

[100] 黄孝琰: "立方晶系材料不含位错布氏矢量测定", 见本文[4-12].

[101] M. J. Whelan and P. B. Hirsch, *Phil. Mag.*, **2**(1957)1121.

[102] A. Howie and M. J. Whelan: *Proc. Roy. Soc., A* **267** (1962) 206.

[103] H. Hashimoto, A. Howie and M. J. Whelan: *Proc. Roy. Soc., London, A* **269**(1962)80.

- [104] R. Gevers, A. Art and S. Amelinckx: *Phys. Stat. Sol.*, **3** (1963)1563.
- [105] A. Art, R. Gevers and S. Amelinckx: *Phys. Stat. Sol.*, **3** (1963)697.
- [106] J. Van Landuyt, R. Gevers and S. Amelinckx: *Phys. Stat. Sol.*, **13**(1966)167.
- [107] W. Bollman: Electron Microscopy. Proc. Stockholm Conf., 1956, p. 316. Almquist and Wiksell, Stockholm, 1957.
- [108] J. Friedel: «Dislocations», 1964.
- [109] P. C. J. Gallagher: *Phys. Stat. Sol.*, **16**(1966)95.
- [110] C. J. Humphreys, A. Howie and G. R. Booker: *Phil. Mag.*, **15**(1967)507.
- [111] A. J. F. Motherell and R. M. Fisher: *Phys. Stat. Sol.*, **32** (1969) 217.
- [112] H. Blank, P. Delavignette, R. Gevers, and S. Amelinckx: *Phys. Stat. Sol.*, **7**(1964)747.
- [113] M. J. Whelan: *Proc. Roy. Soc.*, **A 249**(1958)114.
- [114] A. W. Ruff: *Metallurgical Transaction*, **1**(1970)2891.
- [115] N. F. Mott and F. R. N. Nabarro: *Proc. Phys. Soc.*, **52** (1940) 86.
- [116] M. F. Ashby and L. M. Brown: *Phil. Mag.*, **8**(1963)1083.
- [117] 黄孝瑛: “30 CrMnSiA 钢中的相结构分析”, 钢铁研究总院技术报告, 1975.
- [118] J. D. Embury and R. B. Nicholson: *Acta Met.*, **13** (1965) 408.
- [119] R. B. Nicholson: “Precipitation Studies” 见 J. A. Biele 等编 «Electron Microscopy and Microanalysis of Metals», 1968, p. 89.
- [120] R. I. Garrod and H. L. Wain: *Phil. Mag.*, **13**(1965)199.
- [121] R. Gevers: *Phil. Mag.*, **7** (1962) 1681; *Phys. Stat. Sol.*, **3** (1963) 1214.
- [122] H. Hashmoto, M. Mannami and T. Naiki: *Phil. Trans. Roy. Soc.*, **A 252**(1961)459.
- [123] R. Gevers: *Phil. Mag.*, **7**(1962)1681.
- [124] J. W. Menter: *Advan. Phys.*, **7**(1958)299.
- [125] G. A. Bassett, J. W. Menter and D. W. Pashley: *Proc. Roy.*

Sci., **A 246**(1958)345.

[126] D. K. Bowen and C. R. Hall, «Microscopy of Materials, Modern Imaging Methods Using Electron, X-Ray and Ion Beam» 1975, p. 191.

[127] G. C. Weatherly: *Ph. D. Thesis*, Cambridge University, 1966.

[128] A. R. Tholen: *Solid Stat Phys.* (a), **2**(1970)537.

[129] E. Scheil: *Z. Metallk.*, **27**(1965)199.

[130] C. S. Smith and L. Guttman: *Trans. AIME.*, **197**(1953) 81.

[131] R. L. Fullman: *J. Appl. Phys.*, **22**(1951)448.

[132] J. E. Hilliard: *Trans. AIME.*, **224**(1962)906.

[133] Van Landuyt, R. Gevers and S. Amelinckx: *Phys. Stat. Sol.*, **7**(1964)519.

[134] R. Gevers, P. Delavignette, H. Blank and S. Amelinckx: *Phys. Stat. Sol.*, **4**(1964)383.

[135] M. N. Thompson and J. W. Edington: 1971(未发表), 此处据 Edington:«Practical Electron Microscopy in Materials Science» Part III.

[136] A. J. Ardell: *Phil. Mag.*, **16**(1967)147.

[137] G. Remaut, R. Gevers, S. Amelinckx and A. Lagasse: *Phys. Stat. Sol.* **10**(1965)121; **13**(1966)125.

[138] R. Gevers, J. Van Landuyt and S. Amelinckx: *Phys. Stat. Sol.*, **11**(1965)689.

[139] R. Gevers, P. Delavignette, H. Blank and S. Amelinckx: *Phys. Stat. Sol.*, **5**(1964)595.

[140] A. Fourdeaux, R. Gevers and S. Amelinckx: *Phys. Stat. Sol.*, **24**(1967)195.

[141] H. Gleiter: *Acta Met.*, **17**(1969)565.

[142] P. H. Pumphrey and J. W. Edington: *Acta Met.*, **22** (1974) 89.

[143] R. Gevers, J. Van Landuyt and S. Amelinckx: *Phys. Stat. Sol.*, **18**(1966)325.

[144] T. Schober: *Phil. Mag.*, **22**(1970)1063.

[145] T. Schober and R. W. Balluffi: *Phil. Mag.*, **21** (1970) 109; *Phys. Stat. Sol.*, **B 44**(1971)115.

[146] T. Schober and D. H. Warrington: *Phys. Stat. Sol.*, **A 6**

(1971) 103.

[147] P. H. Pumphrey: *Scripta Met.*, **6**(1972)107.

[148] W. T. Read: «Dislocations in Crystals», 1953.

[149] J. Weertman and J. R. Weertman: «Elementary Dislocation Theory», 1964.

[150] P. Hirth and Jens Lothe: «Theory of Dislocations», 1968.

[151] L. E. Murr: *Acta Met.*, **16**(1968)1127.

[152] L. E. Murr, P. J. Smith and C. M. Gilmore: *Phil. Mag.*, **17**(1968) 89.

[153] M. J. Whelan: *J. Inst. Met.*, **87**(1959)392.

[154] D. Hull: Proc. 5th Intern. Congr. for Electron Microscopy, Philadelphia, vol. I, Academic Press. New York, B-9.

[155] P. H. Pumphrey and K. M. Bowkett: *Phil. Mag.*, **24** (1971) 225.

[156] M. F. Ashby and L. M. Brown: *Phil. Mag.*, **8**(1963)1083.

[157] D. J. H. Cockayne, I. L. F. Ray and M. J. Whelan: 1968 Proc. 4th Eur. Conf. E. M., Rome 1968, ed. Bocciarelli DS (Rome: Soc. Ital. Microscopia Elettronica) vol 1. p. 129.

[158] D. J. H. Cockayne, I. L. F. Ray. and M. J. Whelan: *Phil. Mag.*, **20**(1969)1265.

[159] W. M. Stobbs: "The weak beam technique" (From «E. M. in Material Science», 1975, Third Course of the International School of E. M. Part II, p. 593).

[160] D. J. H. Cockayne: 博士论文, 牛津大学, 1970.

[161] 黄孝瑛: Ni-Al 合金的弱束衍射观察, 电子显微学报, **4** (1985) No. 2, 10.

[162] I. L. F. Ray and D. J. H. Cockayne: *Proc. Roy. Soc., London*, **A325**(1971)543.

[163] D. J. H. Cockayne: *Z. Naturforsch.*, **27a** (1972) 452; *J. Microscopy*, **98** (1973) 116.

[164] W. M. Stobbs and C. H. Sworn: *Phil. Mag.*, **24**(1971)1365.

[165] R. C. Parrin and B. L. Byers: *J. Microscopy*, **98**(1973)200.

[166] P. M. Kelley and R. G. Blake: *Phil. Mag.*, **28** (1973) 415; 475.

[167] R. Bicknell: *J. Microscopy*, **98** (1973)165.

- 454 -

- [168] I. L. F. Ray, R. C. Crawford and D. J. H. Cockayne: *Phil. Mag.*, **21**(1970)1027.
- [169] I. L. F. Ray and D. J. H. Cockayne: *Phil. Mag.*, **22**(1970) 858.
- [170] D. J. H. Cockayne, M. J. Jenkins and I. L. F. Ray: *Phil. Mag.*, **24**(1971)1383.
- [171] M. J. Jenkins: *Phil. Mag.*, **26**(1972)747.
- [172] R. C. Crawford, I. L. F. Ray and D. J. H. Cockayne: *J. Microscopy*, **98**(1973)196.
- [173] R. C. Crawford, I. L. F. Ray and D. J. H. Cockayne: *Phil. Mag.*, **27**(1973)1.
- [174] I. L. F. Ray and D. J. H. Cockayne: *J. Microscopy*, **98**(1973)170.
- [175] L. M. Brown: «E. M. in Material Sciences», p. 361.
- [176] G. R. Woolhouse and L. M. Brown: *J. Int. Metals*, **95**(1970) 106.
- [177] 黄孝瑛: 钢铁研究总院学报, **8**(1984)69.
- [178] 黄孝瑛: 物理冶金测试, 1984, No. 6, 37.
- [179] 刘文西: 物理学报, **30**(1981)1533.
- [180] 黄孝瑛: 材料科学与工程, 1985 第 4 期, 1986 第 1 期.
- [181] 黄孝瑛: «电子衍射原理及其应用», 宇航出版社, 待出.

附录一 加速电压和电子波长

V (V)	λ (Å)	λ^{-1} (Å ⁻¹)	$\frac{m}{m_0}$	$\frac{m_{rel}}{m_0}$	$\frac{v}{c}$	$\frac{v}{v_{100}}$	$\left(\frac{v}{c}\right)^2$
1	12.26	0.0815	1.0000090	1.196	0.0020	0.0036	0.0000090
10	3.878	0.2579	1.0000196	1.196	0.0063	0.0124	0.0000391
100	1.226	0.8154	1.0001957	1.195	0.0198	0.0361	0.0003913
500	0.5483	1.824	1.0009785	1.195	0.0492	0.0906	0.001954
1000	0.3876	2.580	1.00196	1.193	0.0625	0.1139	0.003902
2000	0.2740	3.650	1.00301	1.191	0.0882	0.1609	0.007782
3000	0.2226	4.473	1.00587	1.189	0.1079	0.1968	0.01161
4000	0.1935	5.167	1.00788	1.186	0.1244	0.2269	0.01547
5000	0.1730	5.780	1.00978	1.184	0.1389	0.2433	0.01929
6000	0.1579	6.335	1.01173	1.182	0.1519	0.2771	0.02308
7000	0.1461	6.845	1.01370	1.179	0.1638	0.2989	0.02684
8000	0.1366	7.322	1.01566	1.177	0.1749	0.3190	0.03059
9000	0.1287	7.770	1.01761	1.175	0.1852	0.3379	0.03432
10000	0.1220	8.194	1.01957	1.173	0.1950	0.3557	0.03802
2·10 ⁴	0.0659	11.64	1.0351	1.151	0.2719	0.4959	0.07321
3·10 ⁴	0.0698	14.33	1.0587	1.129	0.3284	0.5990	0.1378
4·10 ⁴	0.0602	16.62	1.0783	1.109	0.3741	0.6823	0.1399
5·10 ⁴	0.0536	18.67	1.0978	1.089	0.4127	0.7528	0.1703
6·10 ⁴	0.0487	20.55	1.1174	1.070	0.4462	0.8139	0.1991
7·10 ⁴	0.0448	22.30	1.1370	1.052	0.4759	0.8680	0.2264
8·10 ⁴	0.0418	23.95	1.1566	1.034	0.5024	0.9164	0.2524
9·10 ⁴	0.0392	25.52	1.1761	1.017	0.5264	0.9602	0.2771
1·10 ⁵	0.0370	27.02	1.1957	1.0000	0.5482	1.0000	0.3005
2·10 ⁵	0.0251	39.87	1.3914	0.8594	0.6053	1.368	0.4645
3·10 ⁵	0.0197	50.80	1.5871	0.7534	0.7765	1.416	0.6030
4·10 ⁵	0.0161	60.83	1.7828	0.6707	0.8279	1.510	0.6854
5·10 ⁵	0.0142	70.36	1.9785	0.6014	0.8629	1.574	0.7445
6·10 ⁵	0.0126	79.57	2.1742	0.5500	0.8879	1.620	0.7884
7·10 ⁵	0.0113	88.56	2.3698	0.5043	0.9066	1.654	0.8219
8·10 ⁵	0.0103	97.38	2.5655	0.4661	0.9209	1.686	0.8481
9·10 ⁵	0.0094	106.1	2.7612	0.4330	0.9321	1.700	0.8688
1·10 ⁶	0.0087	114.7	2.9560	0.4044	0.9411	1.717	0.8856
2·10 ⁶	0.0050	198.2	4.0138	0.2438	0.9791	1.786	0.9586
4·10 ⁶	0.0028	357.1	8.8277	0.1354	0.9936	1.812	0.9872
6·10 ⁶	0.0019	523.2	12.742	0.0938	0.9969	1.818	0.9928
8·10 ⁶	0.0015	633.2	16.655	0.0718	0.9982	1.821	0.9964
1·10 ⁷	0.0012	836.8	20.560	0.0581	0.9988	1.822	0.9976

附录二 电子的原子散射因子 $f_{el}(\mu)$ (Å)

元素 符号	原子 序数 Z	$\mu = \sin \theta / \lambda$														
		0.00	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25	0.30	0.35	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.90	1.00
H	1	0.53	0.51	0.45	0.38	0.31	0.25	0.20	0.16	0.13	0.09	0.06	0.05	0.04	0.03	0.02
He	2	0.45	0.43	0.40	0.37	0.33	0.29	0.25	0.22	0.19	0.14	0.11	0.09	0.07	0.06	0.05
Li	3	3.31	2.78	1.88	1.17	0.75	0.53	0.40	0.31	0.26	0.19	0.14	0.11	0.09	0.08	0.06
Be	4	3.09	2.82	2.23	1.53	1.16	0.83	0.61	0.47	0.37	0.25	0.19	0.15	0.13	0.10	0.08
B	5	2.82	2.62	2.24	1.78	1.37	1.04	0.80	0.62	0.50	0.33	0.24	0.18	0.14	0.12	0.10
C	6	2.45	2.26	2.09	1.74	1.43	1.15	0.93	0.74	0.60	0.41	0.30	0.23	0.18	0.14	0.13
N	7	2.20	2.10	1.91	1.58	1.44	1.20	1.00	0.83	0.69	0.43	0.35	0.27	0.21	0.17	0.14
O	8	2.01	1.95	1.80	1.62	1.42	1.23	1.04	0.88	0.75	0.54	0.40	0.31	0.24	0.19	0.16
F	9	1.81	1.77	1.69	1.58	1.38	1.20	1.05	0.91	0.78	0.59	0.44	0.35	0.27	0.22	0.18
Ne	10	1.66	1.59	1.53	1.43	1.30	1.17	1.04	0.92	0.80	0.63	0.48	0.38	0.30	0.24	0.20
Na	11	4.89	4.21	2.97	2.11	1.59	1.23	1.09	0.95	0.83	0.64	0.51	0.40	0.33	0.27	0.22
Mg	12	5.01	4.60	3.59	2.63	1.95	1.50	1.21	1.01	0.87	0.67	0.53	0.43	0.35	0.29	0.24
Al	13	4.13	5.36	4.21	3.13	2.30	1.73	1.36	1.11	0.94	0.70	0.55	0.45	0.36	0.30	0.25
Si	14	6.00	5.26	4.40	3.41	2.59	1.97	1.54	1.23	1.02	0.74	0.58	0.47	0.38	0.32	0.27
P	15	5.40	5.07	4.08	3.55	2.79	2.17	1.70	1.36	1.12	0.80	0.61	0.49	0.40	0.33	0.28
S	16	4.70	4.40	4.00	3.46	2.87	2.32	1.86	1.50	1.22	0.83	0.64	0.51	0.42	0.35	0.30
Cl	17	4.60	4.31	4.00	3.53	2.99	2.47	2.01	1.63	1.31	0.93	0.69	0.54	0.44	0.37	0.31
Ar	18	4.71	4.40	4.07	3.56	3.03	2.52	2.07	1.71	1.42	1.00	0.74	0.58	0.46	0.38	0.32

(续表)

元素 符号	原子 序数 Z	$\mu = \sin \theta / \lambda$														
		0.00	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25	0.30	0.35	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.90	1.00
K	19	9.00	7.00	5.43	4.10	3.15	2.60	2.14	1.90	1.49	1.07	0.73	0.61	0.49	0.40	0.34
Ca	20	5.40	5.08	4.57	3.85	3.13	2.53	2.06	1.72	1.45	1.07	0.82	0.65	0.53	0.44	0.37
Sc	21	6.60	6.27	4.72	3.98	3.24	2.61	2.14	1.78	1.51	1.12	0.86	0.68	0.55	0.45	0.38
Ti	22	5.80	5.46	4.88	4.12	3.35	2.70	2.21	1.85	1.57	1.16	0.89	0.71	0.57	0.47	0.40
V	23	5.91	5.65	5.06	4.24	3.45	2.79	2.29	1.91	1.62	1.20	0.93	0.74	0.60	0.49	0.41
Cr	24	6.16	5.84	5.17	4.37	3.56	2.88	2.36	1.98	1.68	1.25	0.96	0.76	0.62	0.51	0.43
Mn	25	6.19	5.93	5.34	4.49	3.66	2.97	2.43	2.04	1.73	1.29	0.99	0.79	0.64	0.53	0.45
Fe	26	6.38	6.13	5.48	4.62	3.76	3.05	2.51	2.10	1.79	1.33	1.03	0.82	0.66	0.55	0.46
Co	27	6.51	6.32	5.62	4.73	3.87	3.14	2.58	2.16	1.84	1.37	1.06	0.84	0.69	0.57	0.48
Ni	28	6.70	6.41	5.74	4.85	3.97	3.23	2.65	2.23	1.89	1.41	1.09	0.87	0.71	0.59	0.49
Cu	29	6.80	6.51	5.89	4.97	4.06	3.30	2.72	2.29	1.95	1.45	1.13	0.90	0.73	0.60	0.51
Zn	30	7.00	6.70	6.03	5.08	4.16	3.38	2.79	2.35	2.00	1.49	1.15	0.92	0.75	0.62	0.52
Ga	31	7.21	6.89	6.15	5.20	4.25	3.46	2.86	2.41	2.05	1.53	1.19	0.95	0.77	0.64	0.54
Ge	32	7.30	7.09	6.29	5.32	4.35	3.54	2.93	2.46	2.10	1.57	1.22	0.97	0.79	0.66	0.56
As	33	7.59	7.18	6.41	5.43	4.44	3.62	2.99	2.52	2.15	1.61	1.25	1.00	0.82	0.68	0.57
Se	34	7.60	7.37	6.56	5.58	4.54	3.70	3.06	2.58	2.20	1.65	1.28	1.02	0.84	0.70	0.59
Br	35	7.80	7.47	6.68	5.63	4.63	3.78	3.13	2.64	2.25	1.69	1.32	1.05	0.86	0.71	0.60
Kr	36	7.88	7.56	6.80	5.74	4.71	3.85	3.19	2.69	2.31	1.73	1.35	1.08	0.88	0.73	0.62
Rb	37	8.00	7.75	6.93	5.85	4.80	3.93	3.26	2.75	2.35	1.77	1.38	1.10	0.90	0.75	0.63
Sr	38	8.22	7.85	7.03	5.90	4.89	4.00	3.32	2.80	2.40	1.80	1.41	1.13	0.92	0.77	0.65
Y	39	8.30	8.04	7.16	6.06	4.98	4.07	3.38	2.86	2.45	1.84	1.44	1.15	0.91	0.78	0.66
Zr	40	8.49	8.14	7.28	6.16	5.06	4.13	3.45	2.91	2.50	1.88	1.47	1.17	0.96	0.80	0.68

(续表)

元素符号	原子序数 Z	$\mu = \sin \varphi / \lambda$														
		0.00	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25	0.30	0.35	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.90	1.00
Nb	41	8.6	8.23	7.90	6.27	5.25	4.22	3.51	2.97	2.54	1.92	1.50	1.20	0.98	0.82	0.69
Mo	42	8.7	8.42	7.92	6.30	5.24	4.29	3.57	3.03	2.59	1.95	1.53	1.22	1.00	0.84	0.71
Tc	43	8.9	8.52	7.68	6.47	5.31	4.36	3.63	3.08	2.64	1.99	1.56	1.25	1.02	0.85	0.72
Ru	44	9.0	8.62	7.75	6.56	5.40	4.43	3.69	3.13	2.68	2.03	1.58	1.27	1.04	0.87	0.74
Rh	45	9.1	8.81	7.86	6.66	5.48	4.50	3.75	3.18	2.73	2.07	1.61	1.30	1.06	0.89	0.75
Pd	46	9.3	8.90	7.97	6.75	5.56	4.57	3.81	3.23	2.77	2.10	1.64	1.32	1.08	0.90	0.77
Ag	47	9.4	9.00	8.07	6.85	5.64	4.64	3.87	3.28	2.82	2.13	1.67	1.34	1.10	0.92	0.78
Cd	48	9.5	9.19	8.19	6.95	5.72	4.71	3.93	3.34	2.86	2.17	1.71	1.37	1.12	0.94	0.79
In	49	9.6	9.20	8.31	7.03	5.80	4.73	3.99	3.39	2.91	2.20	1.73	1.38	1.14	0.95	0.81
Sn	50	9.8	9.38	8.40	7.13	5.88	4.84	4.05	3.44	2.95	2.24	1.76	1.41	1.16	0.97	0.82
Sb	51	9.9	9.48	8.50	7.22	5.95	4.91	4.10	3.49	3.00	2.27	1.79	1.44	1.18	0.99	0.84
Te	52	10.0	9.57	8.62	7.31	6.03	4.97	4.16	3.57	3.04	2.31	1.81	1.46	1.20	1.00	0.85
I	53	10.1	9.77	8.71	7.39	6.11	5.04	4.22	3.59	3.08	2.34	1.84	1.48	1.22	1.02	0.87
Xe	54	10.2	9.86	8.81	7.49	6.19	5.10	4.27	3.64	3.13	2.38	1.87	1.51	1.24	1.04	0.88
Cs	55	10.4	9.96	8.93	7.57	6.26	5.17	4.33	3.68	3.17	2.41	1.90	1.53	1.26	1.05	0.89
Ba	56	10.5	10.05	9.02	7.66	6.34	5.23	4.39	3.73	3.21	2.45	1.93	1.55	1.28	1.07	0.91
La	57	10.6	10.15	9.12	7.75	6.40	5.30	4.44	3.78	3.26	2.48	1.95	1.57	1.30	1.09	0.92
Ce	58	10.7	10.24	9.21	7.84	6.49	5.36	4.50	3.83	3.30	2.51	1.98	1.60	1.32	1.10	0.94
Pr	59	10.8	10.44	9.31	7.92	6.56	5.42	4.55	3.88	3.34	2.55	2.01	1.62	1.33	1.12	0.95
Nd	60	10.9	10.53	9.41	8.01	6.63	5.48	4.60	3.93	3.38	2.58	2.03	1.64	1.35	1.13	0.96

(续表)

元 素 符 号	原 子 序 数 Z	$\mu = \sin \theta / \lambda$														
		0.00	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25	0.30	0.35	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.90	1.00
Pm	61	11.0	10.63	9.58	8.10	6.70	5.55	4.63	3.97	3.43	2.91	2.46	2.06	1.66	1.37	1.00
Bm	62	11.1	10.73	9.62	8.17	6.77	5.61	4.71	4.02	3.47	2.95	2.50	2.09	1.69	1.39	0.98
Bu	63	11.2	10.82	9.72	8.25	6.85	5.67	4.77	4.07	3.51	2.99	2.54	2.11	1.71	1.41	1.00
Gd	64	11.4	10.92	9.79	8.34	6.91	5.73	4.82	4.11	3.55	2.71	2.14	1.73	1.43	1.20	1.03
Tl	65	11.5	11.01	9.88	8.42	6.98	5.79	4.87	4.16	3.59	2.74	2.17	1.75	1.45	1.21	1.03
Dy	66	11.6	11.11	9.98	8.50	7.05	5.85	4.92	4.20	3.63	2.78	2.19	1.77	1.47	1.23	1.05
Ho	67	11.7	11.20	10.08	8.58	7.12	5.91	4.98	4.25	3.67	2.81	2.22	1.80	1.48	1.25	1.06
Er	68	11.8	11.30	10.17	8.65	7.19	5.97	5.03	4.30	3.71	2.84	2.25	1.82	1.50	1.26	1.07
Tm	69	11.9	11.49	10.27	8.74	7.25	6.03	5.08	4.34	3.75	2.87	2.27	1.84	1.52	1.28	1.09
Yb	70	12.0	11.59	10.36	8.82	7.33	6.09	5.13	4.39	3.79	2.91	2.30	1.86	1.54	1.29	1.10
Lu	71	12.1	11.68	10.44	8.90	7.40	6.15	5.18	4.43	3.83	2.94	2.32	1.89	1.56	1.31	1.11
Hf	72	12.2	11.78	10.53	8.98	7.46	6.20	5.23	4.48	3.87	2.97	2.35	1.90	1.58	1.32	1.13
Ta	73	12.3	11.87	10.63	9.06	7.53	6.26	5.28	4.52	3.91	3.00	2.38	1.93	1.59	1.34	1.14
W	74	12.4	11.97	10.72	9.13	7.59	6.32	5.33	4.56	3.95	3.03	2.40	1.95	1.61	1.35	1.15
Re	75	12.5	12.06	10.79	9.21	7.68	6.38	5.38	4.61	3.99	3.06	2.43	1.97	1.63	1.37	1.17
Os	76	12.6	12.16	10.89	9.29	7.72	6.43	5.43	4.65	4.03	3.09	2.45	1.99	1.65	1.38	1.18
Ir	77	12.7	12.26	10.98	9.36	7.79	6.49	5.48	4.70	4.07	3.12	2.48	2.01	1.66	1.40	1.19
Pt	78	12.8	12.35	11.05	9.44	7.85	6.55	5.53	4.74	4.11	3.16	2.50	2.03	1.68	1.42	1.21
Au	79	12.9	12.45	11.13	9.51	7.92	6.60	5.58	4.78	4.14	3.19	2.53	2.05	1.70	1.43	1.23
Hg	80	13.0	12.54	11.23	9.58	7.98	6.66	5.63	4.83	4.18	3.22	2.55	2.07	1.72	1.45	1.23

(续表)

元素符号	原子序数	$u = \sin \theta / \lambda$															
		0.00	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25	0.30	0.35	0.40	0.45	0.50	0.55	0.60	0.65	0.70	0.75
Tl	81	13.1	12.64	11.32	9.63	8.05	6.71	5.68	4.87	4.22	3.27	2.58	2.10	1.74	1.46	1.25	1.00
Pb	82	13.2	12.69	11.39	9.74	8.17	6.77	5.72	4.91	4.26	3.28	2.60	2.12	1.75	1.48	1.26	1.00
Bi	83	13.3	12.75	11.48	9.81	8.18	6.82	5.77	4.95	4.30	3.31	2.63	2.14	1.77	1.49	1.27	1.00
Po	84	13.3	12.83	11.56	9.87	8.24	6.88	5.82	4.99	4.33	3.34	2.67	2.16	1.79	1.51	1.28	1.00
At	85	13.4	12.93	11.66	9.95	8.30	6.93	5.87	5.01	4.37	3.37	2.68	2.18	1.81	1.52	1.30	1.00
Ra	86	13.5	13.02	11.73	10.02	8.36	6.98	5.92	5.08	4.41	3.40	2.70	2.20	1.82	1.54	1.31	1.00
Fr	87	13.6	13.12	11.80	10.10	8.42	7.04	5.96	5.12	4.44	3.43	2.73	2.23	1.84	1.55	1.32	1.00
Ra	88	13.7	13.22	11.90	10.16	8.49	7.09	6.01	5.16	4.48	3.46	2.75	2.24	1.86	1.56	1.34	1.00
Ac	89	13.8	13.31	11.97	10.24	8.53	7.14	6.06	5.20	4.52	3.49	2.78	2.27	1.87	1.58	1.35	1.00
Th	90	13.9	13.41	12.04	10.30	8.61	7.20	6.10	5.24	4.55	3.52	2.80	2.29	1.89	1.59	1.36	1.00
Pa	91	14.0	13.50	12.14	10.37	8.67	7.25	6.15	5.28	4.59	3.55	2.82	2.31	1.91	1.61	1.37	1.00
U	92	14.1	13.60	12.21	10.43	8.73	7.31	6.19	5.33	4.63	3.58	2.85	2.33	1.93	1.62	1.39	1.00
Np	93	14.2	13.69	12.28	10.51	8.79	7.35	6.24	5.37	4.66	3.61	2.87	2.35	1.94	1.64	1.40	1.00
Pu	94	14.3	13.77	12.35	10.59	8.85	7.41	6.28	5.41	4.70	3.63	2.90	2.37	1.96	1.65	1.41	1.00
Am	95	14.4	13.83	12.45	10.65	8.91	7.46	6.33	5.45	4.74	3.66	2.92	2.39	1.98	1.67	1.43	1.00
Cm	96	14.4	13.90	12.52	10.71	8.97	7.51	6.38	5.49	4.77	3.69	2.94	2.41	1.99	1.68	1.44	1.00
Bk	97	14.5	13.98	12.59	10.79	9.03	7.56	6.42	5.53	4.81	3.72	2.97	2.43	2.01	1.70	1.45	1.00
Cf	98	14.6	14.08	12.69	10.83	9.09	7.61	6.47	5.57	4.84	3.75	2.99	2.45	2.03	1.71	1.46	1.00
Es	99	14.7	14.17	12.76	10.92	9.14	7.67	6.51	5.6	4.88	3.78	3.01	2.47	2.04	1.73	1.48	1.00
Fm	100	14.8	14.27	12.83	10.99	9.20	7.72	6.56	5.65	4.91	3.81	3.04	2.49	2.06	1.74	1.49	1.00

附录三 立方晶系常见孪晶和基体取向关系

晶系	序号	基本晶带轴	孪晶面	孪晶迹线方向	孪晶品带轴
bcc	1	[0 0 1]	$(1\ 1\ 2)$ $(1\ 1\ \bar{2})$ $(\bar{1}\ 2\ 1)$ $(2\ 1\ 1)$ $(1\ \bar{2}\ 1)$ $(2\ \bar{1}\ 1)$	$[\bar{1}\ 1\ 0]$ $[\bar{1}\ 1\ 0]$ $[2\ \bar{1}\ 0]$ $[\bar{1}\ 2\ 0]$ $[2\ 1\ 0]$ $[1\ 2\ 0]$	$[2\ 2\ 1]$ $[2\ 2\ 1]$ $[\bar{1}\ 2\ \bar{2}]$ $[2\ 1\ \bar{2}]$ $[1\ 2\ \bar{2}]$ $[2\ \bar{1}\ \bar{2}]$
	2	[0 0 1]	$(\bar{1}\ 1\ 2)$ $(1\ \bar{1}\ 2)$ $(1\ 2\ 1)$ $(2\ 1\ 1)$ $(2\ 1\ 1)$ $(1\ 2\ \bar{1})$	$[\bar{1}\ \bar{1}\ 0]$ $[1\ 1\ 0]$ $[2\ 1\ 0]$ $[\bar{1}\ 2\ 0]$ $[1\ 2\ 0]$ $[2\ 1\ 0]$	$[2\ 2\ 1]$ $[2\ 2\ 1]$ $[1\ 2\ \bar{2}]$ $[2\ 1\ \bar{2}]$ $[2\ 1\ 2]$ $[1\ 2\ \bar{2}]$
	3	[1 1 0]	$(\bar{1}\ 1\ 2)$ $(1\ 2\ 1)$ $(2\ 1\ \bar{1})$	$[2\ 2\ 2]$ $[2\ \bar{2}\ 2]$ $[2\ \bar{2}\ 2]$	$[1\ 1\ 0]$ $[0\ 1\ 1]$ $[1\ 0\ \bar{1}]$
	4	[1 1 0]	$(2\ 1\ 1)$ $(1\ \bar{1}\ 2)$ $(1\ 2\ 1)$	$[2\ 2\ \bar{2}]$ $[2\ \bar{2}\ \bar{2}]$ $[2\ 2\ \bar{2}]$	$[1\ 0\ 1]$ $[\bar{1}\ \bar{1}\ 0]$ $[0\ 1\ \bar{1}]$
	5	[1 1 0]	$(1\ 1\ 2)$ $(\bar{1}\ \bar{1}\ 2)$ $(\bar{1}\ 2\ 1)$ $(1\ \bar{2}\ 1)$ $(2\ 1\ 1)$ $(2\ \bar{1}\ 1)$	$[1\ \bar{1}\ 0]$ $[1\ \bar{1}\ 0]$ $[1\ \bar{1}\ 3]$ $[1\ 1\ 3]$ $[1\ \bar{1}\ 3]$ $[\bar{1}\ 1\ 3]$	$[\bar{1}\ \bar{1}\ 4]$ $[\bar{1}\ \bar{1}\ 4]$ $[2\ \bar{1}\ 1]$ $[4\ \bar{1}\ \bar{1}]$ $[\bar{1}\ 4\ \bar{1}]$ $[\bar{1}\ 4\ 1]$
	6	[1 2 0]	$(1\ 1\ 2)$ $(\bar{1}\ 2\ 1)$ $(2\ \bar{1}\ 1)$	$[4\ 2\ \bar{1}]$ $[2\ \bar{1}\ 4]$ $[2\ \bar{1}\ 5]$	$[0\ \bar{1}\ 2]$ $[2\ 0\ 1]$ $[\bar{1}\ 2\ 0]$

(续表)

晶系	序号	基体晶带轴	孪晶面	孪晶迹线方向	孪晶晶带轴
bcc	7	[120]	(112) (111) (121)	[421] [215] [214]	[012] [120] [201]
	8	[120]	(211) (112) (121) (121) (112) (211)	[213] [423] [210] [210] [423] [213]	[524] [452] [245] [245] [452] [524]
	9	[113]	(112) (121) (211)	[512] [741] [251]	[131] [113] [211]
	10	[113]	(121) (211) (112) (112) (211) (121)	[543] [453] [110] [110] [273] [723]	[755] [575] [557] [771] [717] [177]
	11	[113]	(121) (211) (112)	[521] [471] [152]	[131] [113] [311]
	12	[111]	(121) (112) (211)	[101] [110] [011]	[111] [111] [111]
	13	[111]	(121) (211) (112)	[123] [213] [110]	[511] [151] [115]
	14	[111]	(211) (112) (121)	[011] [512] [521]	[511] [151] [115]
	15	[111]	(121) (211) (112)	[101] [231] [132]	[151] [115] [511]

(续表)

晶系	序号	基体晶带轴	孪晶面	孪晶迹线方向	孪晶晶带轴
fcc	16	[0 0 1]	(1 1 1) ($\bar{1}$ $\bar{1}$ 1)	[2 2 0] [2 2 0]	[2 2 1] [2 2 1]
	17	[0 0 1]	(1 1 1) (1 $\bar{1}$ $\bar{1}$)	[2 2 0] [2 2 0]	[2 2 1] [2 2 1]
	18	[1 1 0]	(1 1 1) ($\bar{1}$ 1 1)	[2 2 0] [2 2 0]	[1 1 4] [1 1 4]
	19	[1 1 0]	(1 1 1) (1 $\bar{1}$ 1)	[2 2 4] [2 2 4]	[1 $\bar{1}$ 0] [1 $\bar{1}$ 0]
	20	[1 1 2]	(1 1 1)	[2 2 0]	[5 5 2]
	21	[1 1 2]	($\bar{1}$ $\bar{1}$ 1)	[2 2 0]	[1 $\bar{1}$ 2]
	22	[1 1 2]	(1 1 1)	[2 2 4]	[7 1 2]
	23	[1 1 2]	(1 $\bar{1}$ 1)	[2 2 4]	[1 7 2]
	24	[1 2 0]	(1 1 1)	[4 2 2]	[1 0 2]
	25	[1 2 0]	($\bar{1}$ 1 1) (1 $\bar{1}$ $\bar{1}$)	[2 2 8] [4 2 6]	[5 4 2] [5 4 2]
	26	[1 2 0]	($\bar{1}$ $\bar{1}$ 1)	[4 2 2]	[1 0 2]
	27	[1 2 0]	(1 1 1) ($\bar{1}$ 1 1)	[6 2 4] [0 2 8]	[5 1 8] [7 5 4]
	28	[1 2 0]	($\bar{1}$ $\bar{1}$ 1) (1 1 1)	[6 2 4] [6 2 8]	[5 1 8] [7 5 4]
	29	[1 2 3]	(1 1 1)	[4 8 4]	[3 2 1]
	30	[1 2 3]	($\bar{1}$ $\bar{1}$ 1)	[10 8 2]	[1 2 3]
	31	[1 2 3]	($\bar{1}$ 1 1) (1 $\bar{1}$ 1)	[2 8 8] [10 4 6]	[11 2 1] [1 10 6]

: 464 :

附录四 立方晶系电子衍射花样

特征平行四边形表

(一) 简单立方特征基本平行四边形表

序 号	r_2/r_1	r_3/r_1	d_{hkl}	膜 面	$h-k_1l_1$	$h_2k_2l_2$
1	1.000	1.000	$a/1.414$	[1 1 1]	(1 0 $\bar{1}$)	(0 1 $\bar{1}$)
2	1.000	1.095	$a/2.236$	[1 2 4]	(2 $\bar{1}$ 0)	(0 $\bar{2}$ 1)
3	1.000	1.183	$a/3.162$	[1 3 9]	(3 $\bar{1}$ 0)	(0 $\bar{3}$ 1)
4	1.000	1.291	$a/2.449$	[1 3 5]	(1 $\bar{2}$ 1)	($\bar{2}$ $\bar{1}$ 1)
5	1.000	1.414	$a/1.000$	[0 0 1]	(1 0 0)	(0 1 0)
6	1.000	1.038	$a/3.605$	[4 6 9]	(0 3 $\bar{2}$)	($\bar{3}$ 2 0)
7	1.000	1.054	$a/3.000$	[2 5 6]	(1 2 $\bar{2}$)	($\bar{2}$ 2 $\bar{1}$)
8	1.038	1.209	$a/3.605$	[6 7 9]	(3 0 $\bar{2}$)	(2 $\bar{3}$ 1)
9	1.038	1.387	$a/3.605$	[6 8 9]	(3 0 2)	(1 $\bar{3}$ 2)
10	1.049	1.140	$a/3.162$	[2 3 9]	(0 $\bar{3}$ 1)	($\bar{3}$ $\bar{1}$ 1)
11	1.049	1.364	$a/3.162$	[3 4 9]	(3 0 $\bar{1}$)	(1 $\bar{3}$ 1)
12	1.054	1.106	$a/3.000$	[1 3 8]	(2 2 $\bar{1}$)	(0 $\bar{1}$ 0)
13	1.054	1.374	$a/3.000$	[2 6 7]	(1 2 $\bar{2}$)	(3 $\bar{1}$ 0)
14	1.087	1.128	$a/3.316$	[1 6 9]	(3 1 $\bar{1}$)	(0 3 2)
15	1.087	1.414	$a/3.316$	[5 6 9]	($\bar{3}$ 1 1)	(0 3 $\bar{2}$)
16	1.095	1.342	$a/2.236$	[2 3 4]	(2 0 $\bar{1}$)	(1 $\bar{2}$ 1)
17	1.095	1.483	$a/2.236$	[1 2 5]	(2 $\bar{1}$ 0)	(1 2 $\bar{1}$)
18	1.105	1.247	$a/3.000$	[1 5 8]	(2 $\bar{2}$ 1)	(3 1 $\bar{1}$)
19	1.105	1.247	$a/3.000$	[4 5 7]	(1 2 $\bar{2}$)	(3 $\bar{1}$ $\bar{1}$)
20	1.128	1.243	$a/3.316$	[5 7 8]	($\bar{3}$ 1 1)	($\bar{1}$ 3 2)
21	1.140	1.304	$a/3.162$	[2 6 9]	(3 $\bar{1}$ 0)	(0 3 2)
22	1.183	1.183	$a/3.162$	[3 5 9]	(3 0 $\bar{1}$)	(1 3 $\bar{2}$)
23	1.183	1.433	$a/3.162$	[3 7 9]	(3 0 $\bar{1}$)	(1 3 2)
24	1.202	1.247	$a/3.000$	[4 6 7]	(2 1 $\bar{2}$)	(3 2 0)
25	1.225	1.472	$a/2.449$	[1 4 6]	(2 1 $\bar{1}$)	(2 2 1)
26	1.225	1.354	$a/2.449$	[3 4 5]	(1 $\bar{2}$ 1)	($\bar{2}$ $\bar{1}$ 2)
27	1.225	1.581	$a/1.414$	[1 1 2]	(1 $\bar{1}$ 0)	(1 1 $\bar{1}$)
28	1.247	1.374	$a/3.000$	[2 7 8]	(1 2 $\bar{2}$)	(3 2 $\bar{1}$)

(续表)

序 号	r_2/r_1	r_3/r_1	d_1	膜 面	$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$
29	1.247	1.458	$a/3.000$	[3 7 8]	(2 2 1)	(3 1 2)
30	1.247	1.527	$a/3.000$	[5 6 8]	(2 1 2)	(2 3 1)
31	1.291	1.414	$a/1.732$	[1 2 3]	(1 1 1)	(2 1 0)
32	1.291	1.527	$a/2.449$	[1 3 7]	(1 2 1)	(3 1 0)
33	1.304	1.378	$a/3.162$	[3 8 9]	(3 0 1)	(2 3 2)
34	1.342	1.414	$a/2.236$	[1 2 6]	(2 1 0)	(2 2 1)
35	1.342	1.673	$a/2.236$	[2 4 5]	(2 1 0)	(1 2 2)
36	1.354	1.472	$a/2.449$	[2 3 7]	(2 1 1)	(1 3 1)
37	1.354	1.683	$a/2.449$	[1 4 7]	(1 2 1)	(3 1 1)
38	1.374	1.563	$a/3.000$	[2 8 9]	(1 2 2)	(4 1 0)
39	1.414	1.458	$a/3.000$	[4 7 9]	(1 2 2)	(4 1 1)
40	1.414	1.458	$a/2.236$	[1 3 6]	(0 2 1)	(3 1 0)
41	1.414	1.612	$a/2.236$	[2 3 6]	(0 2 1)	(3 0 1)
42	1.414	1.732	$a/1.000$	[0 1 1]	(1 0 0)	(0 1 1)
43	1.453	1.700	$a/3.000$	[5 8 9]	(2 1 2)	(3 3 1)
44	1.472	1.653	$a/2.449$	[2 3 8]	(1 2 1)	(3 2 0)
45	1.472	1.683	$a/2.449$	[4 5 6]	(1 2 1)	(3 0 2)
46	1.483	1.673	$a/2.236$	[1 2 7]	(2 1 0)	(1 3 1)
47	1.527	1.527	$a/2.449$	[1 5 7]	(2 1 1)	(1 3 2)
48	1.527	1.732	$a/2.449$	[3 5 7]	(1 2 1)	(3 1 2)
49	1.581	1.581	$a/1.414$	[1 2 2]	(0 1 1)	(2 0 1)
50	1.612	1.673	$a/2.236$	[3 4 6]	(2 0 1)	(0 3 2)
51	1.673	1.844	$a/2.236$	[1 2 8]	(2 1 0)	(2 3 1)
52	1.673	1.844	$a/2.236$	[2 4 7]	(2 1 0)	(1 3 2)
53	1.673	1.949	$a/2.236$	[3 5 6]	(2 0 1)	(1 3 2)
54	1.683	1.871	$a/2.449$	[1 6 8]	(2 1 1)	(2 3 2)
55	1.683	1.779	$a/2.449$	[1 4 9]	(1 2 1)	(4 1 0)
56	1.683	1.683	$a/2.449$	[2 5 8]	(1 2 1)	(3 2 2)
57	1.732	1.732	$a/1.414$	[1 1 3]	(1 1 0)	(1 2 1)
58	1.732	1.826	$a/1.732$	[1 3 4]	(1 1 1)	(2 2 1)
59	1.732	1.915	$a/2.449$	[1 5 9]	(1 2 1)	(4 1 1)
60	1.779	1.871	$a/2.449$	[2 5 9]	(2 1 1)	(3 3 1)
61	1.779	1.871	$a/2.449$	[5 6 7]	(1 2 1)	(3 1 3)
62	1.844	1.897	$a/2.236$	[1 4 8]	(0 2 1)	(4 1 0)
63	1.897	1.949	$a/2.236$	[1 2 9]	(2 1 0)	(1 4 1)

(续表)

序 号	r_2/r_1	r_3/r_1	d_1	膜 面	$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$
64	1.897	2.049	$a/2.236$	[3 4 8]	(0 2 1)	(4 1 1)
65	1.915	2.082	$a/2.449$	[1 7 9]	(2 1 1)	(3 3 2)
66	1.919	2.098	$a/2.236$	[3 6 7]	(2 1 0)	(1 3 3)
67	2.011	2.198	$a/2.449$	[6 7 8]	(1 3 1)	(4 0 3)
68	2.019	2.098	$a/2.236$	[2 4 9]	(2 1 0)	(1 3 2)
69	2.019	2.280	$a/2.236$	[4 5 8]	(2 0 1)	(1 4 2)
70	2.082	2.160	$a/1.732$	[2 3 5]	(1 1 1)	(3 2 0)
71	2.082	2.236	$a/2.449$	[5 7 9]	(1 2 1)	(4 1 3)
72	2.098	2.236	$a/2.236$	[3 6 8]	(2 1 0)	(2 3 3)
73	2.121	2.121	$a/1.414$	[2 2 3]	(1 1 0)	(1 2 2)
74	2.121	2.313	$a/1.414$	[1 1 4]	(1 1 0)	(2 2 1)
75	2.160	2.381	$a/1.732$	[1 4 5]	(1 1 1)	(3 2 1)
76	2.236	2.236	$a/1.414$	[1 3 3]	(0 1 1)	(3 0 1)
77	2.236	2.449	$a/1.000$	[0 1 2]	(1 0 0)	(0 2 1)
78	2.280	2.408	$a/2.236$	[4 7 8]	(2 0 1)	(1 4 3)
79	2.345	2.415	$a/2.449$	[7 8 9]	(1 2 1)	(4 1 4)
80	2.345	2.549	$a/1.414$	[2 3 3]	(0 1 1)	(3 1 1)
81	2.569	2.608	$a/2.236$	[4 8 9]	(2 1 0)	(1 4 4)
82	2.646	2.646	$a/1.414$	[1 1 5]	(1 1 0)	(2 3 1)
83	2.646	2.708	$a/1.732$	[1 5 6]	(1 1 1)	(4 2 1)
84	2.887	2.944	$a/1.732$	[3 4 7]	(1 1 1)	(4 3 0)
85	2.916	2.916	$a/1.414$	[2 2 5]	(1 1 0)	(2 3 2)
86	2.916	2.916	$a/1.414$	[1 4 4]	(0 1 1)	(4 0 1)
87	2.916	3.082	$a/1.414$	[3 3 4]	(1 1 0)	(2 2 3)
88	2.944	3.109	$a/1.732$	[2 5 7]	(1 1 1)	(4 3 1)
89	3.082	3.240	$a/1.414$	[1 1 6]	(1 1 0)	(3 3 1)
90	3.109	3.163	$a/1.732$	[1 6 7]	(1 1 1)	(4 3 2)
91	3.163	3.317	$a/1.000$	[0 1 3]	(1 0 0)	(0 3 1)
92	3.240	3.240	$a/1.414$	[3 4 4]	(0 1 1)	(1 1 2)
93	3.317	3.366	$a/1.732$	[3 5 8]	(1 1 1)	(4 4 1)
94	3.317	3.317	$a/1.414$	[3 3 5]	(1 1 0)	(2 3 3)
95	3.559	3.697	$a/1.732$	[1 7 8]	(1 1 1)	(5 3 2)
96	3.605	3.605	$a/1.414$	[1 1 7]	(1 1 0)	(3 3 1)
97	3.605	3.605	$a/1.414$	[1 5 5]	(0 1 1)	(5 0 1)
98	3.605	3.742	$a/1.000$	[0 2 3]	(1 0 0)	(0 3 2)

(续表)

序 号	r_2/r_1	r_3/r_1	d_{r1}	膜 面	$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$
99	3.674	3.808	$a/1.414$	[2 5 5]	(0 1 1)	(5 1 1)
100	3.697	3.742	$a/1.732$	[4 5 9]	(1 1 1)	(5 4 0)
101	3.808	3.808	$a/1.414$	[2 2 7]	(1 1 0)	(3 4 2)
102	3.808	3.808	$a/1.414$	[4 4 5]	(1 1 0)	(2 3 4)
103	3.873	3.916	$a/1.732$	[2 7 9]	(1 1 1)	(5 4 2)
104	3.873	3.873	$a/1.414$	[3 5 5]	(0 1 1)	(5 1 2)
105	4.041	4.082	$a/1.732$	[1 8 9]	(1 1 1)	(6 3 2)
106	4.062	4.183	$a/1.414$	[1 1 8]	(1 1 0)	(4 4 1)
107	4.062	4.183	$a/1.414$	[4 5 5]	(0 1 1)	(5 2 2)
108	4.123	4.123	$a/1.414$	[3 3 7]	(1 1 0)	(4 3 3)
109	4.123	4.243	$a/1.000$	[0 1 4]	(1 0 0)	(0 4 1)
110	4.301	4.301	$a/1.414$	[1 6 6]	(0 1 1)	(6 0 1)
111	4.527	4.527	$a/1.414$	[4 4 7]	(1 1 0)	(3 4 4)
112	4.527	4.637	$a/1.414$	[3 3 8]	(1 1 0)	(4 4 5)
113	4.582	4.582	$a/1.414$	[1 1 9]	(1 1 0)	(4 5 1)
114	4.637	4.744	$a/1.414$	[5 5 8]	(1 1 0)	(3 3 5)
115	4.744	4.744	$a/1.414$	[2 2 9]	(1 1 0)	(4 5 2)
116	4.950	4.950	$a/1.414$	[5 8 6]	(0 1 1)	(6 2 3)
117	5.000	5.000	$a/1.414$	[1 7 7]	(0 1 1)	(7 1 0)
118	5.000	5.000	$a/1.414$	[5 5 7]	(1 1 0)	(4 3 5)
119	5.000	5.099	$a/1.000$	[0 3 4]	(1 0 0)	(0 4 3)
120	5.049	5.147	$a/1.414$	[2 7 7]	(0 1 1)	(7 1 1)
121	5.099	5.196	$a/1.000$	[0 1 5]	(1 0 0)	(0 5 1)
122	5.196	5.196	$a/1.414$	[3 7 7]	(0 1 1)	(7 2 1)
123	5.338	5.338	$a/1.414$	[4 4 9]	(1 1 0)	(4 5 4)
124	5.338	5.431	$a/1.414$	[4 7 7]	(0 1 1)	(7 2 2)
125	5.338	5.481	$a/1.414$	[5 5 8]	(1 1 0)	(4 4 5)
126	5.335	5.478	$a/1.000$	[0 2 5]	(1 0 0)	(0 5 2)
127	5.522	5.522	$a/1.414$	[6 6 7]	(1 1 0)	(3 4 6)
128	5.568	5.568	$a/1.414$	[5 7 7]	(0 1 1)	(7 2 3)
129	5.700	5.700	$a/1.414$	[1 8 8]	(0 1 1)	(8 1 0)
130	5.745	5.745	$a/1.414$	[5 5 9]	(1 1 0)	(4 5 5)
131	5.787	5.874	$a/1.414$	[6 7 7]	(0 1 1)	(7 3 3)
132	5.831	5.916	$a/1.000$	[0 3 5]	(1 0 0)	(0 5 3)
133	5.874	5.874	$a/1.414$	[3 8 8]	(0 1 1)	(8 2 1)

(续表)

序 号	r_2/r_1	r_3/r_1	d_{r1}	膜 面	$h_1k_1i_1$	$h_2k_2i_2$
134	6.088	6.164	$a/1.000$	[0 1 6]	(1 0 0)	(0 6 1)
135	6.204	6.204	$a/1.414$	[5 8 8]	(0 1 1)	(8 2 3)
136	6.353	6.441	$a/1.414$	[7 7 8]	(1 1 0)	(4 4 7)
137	6.403	6.403	$a/1.414$	[1 9 9]	(0 1 1)	(9 1 0)
138	6.493	6.481	$a/1.000$	[0 4 5]	(1 0 0)	(0 5 4)
139	6.441	6.519	$a/1.414$	[2 9 9]	(0 1 1)	(9 1 1)
140	6.670	6.670	$a/1.414$	[7 8 8]	(0 1 1)	(8 3 4)
141	6.670	6.745	$a/1.414$	[4 9 9]	(0 1 1)	(9 2 2)
142	6.708	6.708	$a/1.414$	[7 7 9]	(1 1 0)	(4 5 7)
143	6.855	6.855	$a/1.414$	[5 9 9]	(0 1 1)	(9 2 3)
144	7.071	7.141	$a/1.000$	[0 1 7]	(1 0 0)	(0 7 1)
145	7.236	7.246	$a/1.414$	[8 8 9]	(1 1 0)	(5 4 8)
146	7.279	7.349	$a/1.000$	[0 2 7]	(1 0 0)	(0 7 2)
147	7.279	7.279	$a/1.414$	[7 9 9]	(0 1 1)	(9 3 4)
148	7.517	7.583	$a/1.414$	[8 9 9]	(0 1 1)	(9 4 4)
149	7.615	7.680	$a/1.000$	[0 3 7]	(1 0 0)	(0 7 3)
150	7.810	7.874	$a/1.000$	[0 5 6]	(1 0 0)	(0 6 5)
151	8.062	8.124	$a/1.000$	[0 1 8]	(1 0 0)	(0 8 1)
152	8.062	8.124	$a/1.000$	[0 4 7]	(1 0 0)	(0 7 4)
153	8.544	8.603	$a/1.000$	[0 3 8]	(1 0 0)	(0 8 3)
154	8.602	8.660	$a/1.000$	[0 5 7]	(1 0 0)	(0 7 5)
155	9.056	9.110	$a/1.000$	[0 1 9]	(1 0 0)	(0 9 1)
156	9.230	9.274	$a/1.000$	[0 2 9]	(1 0 0)	(0 9 2)
157	9.230	9.274	$a/1.000$	[0 6 7]	(1 0 0)	(0 7 6)
158	9.483	9.487	$a/1.000$	[0 5 8]	(1 0 0)	(0 8 5)
159	9.849	9.900	$a/1.000$	[0 4 9]	(1 0 0)	(0 9 4)
160	10.290	10.340	$a/1.000$	[0 5 9]	(1 0 0)	(0 9 5)
161	10.630	10.680	$a/1.000$	[0 7 8]	(1 0 0)	(0 8 7)
162	11.400	11.440	$a/1.000$	[0 7 9]	(1 0 0)	(0 9 7)
163	12.040	12.080	$a/1.000$	[0 8 9]	(1 0 0)	(0 9 8)

(二) 面心立方特征基本平行四边形表

序 号	r_2/r_1	r_3/r_1	d_{h_1}	膜 面	$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$
1	1.000	1.000	$a/2.828$	[1 1 1]	(2 0 2)	(0 2 2)
2	1.000	1.026	$a/4.359$	[3 5 6]	(1 3 3)	(3 3 1)
3	1.000	1.038	$a/7.211$	[4 6 9]	(6 4 0)	(0 6 4)
4	1.000	1.054	$a/6.000$	[2 5 6]	(4 4 2)	(2 4 4)
5	1.000	1.095	$a/4.472$	[1 2 4]	(0 4 2)	(4 2 0)
6	1.000	1.155	$a/1.732$	[0 1 1]	(1 1 1)	(1 1 1)
7	1.000	1.183	$a/6.324$	[1 3 9]	(6 2 0)	(0 6 2)
8	1.000	1.291	$a/4.839$	[1 2 5]	(4 2 2)	(2 4 2)
9	1.000	1.414	$a/2.000$	[0 0 1]	(2 0 0)	(0 2 0)
10	1.026	1.192	$a/4.359$	[1 2 3]	(3 3 1)	(4 2 0)
11	1.026	1.357	$a/4.359$	[3 6 7]	(1 3 3)	(4 2 0)
12	1.038	1.387	$a/7.211$	[6 8 9]	(6 0 4)	(2 6 4)
13	1.054	1.374	$a/3.000$	[2 6 7]	(2 4 4)	(6 2 0)
14	1.095	1.341	$a/4.472$	[2 3 4]	(4 0 2)	(2 4 2)
15	1.124	1.192	$a/4.359$	[1 4 0]	(3 3 1)	(2 4 2)
16	1.124	1.357	$a/4.359$	[2 5 9]	(3 3 1)	(4 2 2)
17	1.124	1.357	$a/4.359$	[5 6 7]	(3 1 3)	(2 4 2)
18	1.140	1.304	$a/6.324$	[2 6 9]	(6 2 0)	(0 6 4)
19	1.173	1.173	$a/2.828$	[1 1 4]	(2 2 0)	(3 1 1)
20	1.173	1.541	$a/2.828$	[2 3 3]	(0 2 2)	(3 1 1)
21	1.183	1.183	$a/6.324$	[3 5 9]	(6 0 2)	(2 6 4)
22	1.183	1.483	$a/6.324$	[3 7 9]	(6 0 2)	(2 6 4)
23	1.192	1.376	$a/4.359$	[3 7 8]	(1 3 3)	(5 1 1)
24	1.202	1.247	$a/6.000$	[4 6 7]	(4 2 4)	(6 4 0)
25	1.207	1.338	$a/4.899$	[7 8 9]	(2 4 2)	(5 1 3)
26	1.225	1.472	$a/4.899$	[1 4 6]	(4 2 2)	(4 4 2)
27	1.247	1.374	$a/6.000$	[2 7 8]	(2 4 4)	(6 4 2)
28	1.247	1.527	$a/6.000$	[5 6 8]	(4 2 4)	(4 6 2)
29	1.291	1.527	$a/4.899$	[1 3 7]	(2 4 2)	(6 2 0)
30	1.314	1.348	$a/3.316$	[1 3 6]	(3 1 1)	(3 3 1)
31	1.314	1.477	$a/3.316$	[3 4 5]	(3 1 1)	(1 3 3)
32	1.341	1.414	$a/4.472$	[1 2 6]	(4 2 0)	(4 4 2)
33	1.341	1.673	$a/4.472$	[2 4 5]	(4 2 0)	(2 4 4)
34	1.348	1.567	$a/3.316$	[1 2 7]	(1 3 1)	(4 2 0)
35	1.357	1.376	$a/4.359$	[4 7 9]	(3 3 1)	(5 1 3)

(续表)

序 号	r_2/r_1	r_3/r_1	d_{r_1}	膜 面	$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$
36	1.357	1.451	$a/4.359$	[2 8 9]	(1 3 8)	(5 3 1)
37	1.357	1.654	$a/4.359$	[6 7 9]	(1 3 8)	(5 3 1)
38	1.374	1.563	$a/6.000$	[2 8 9]	(2 4 4)	(8 2 0)
39	1.376	1.638	$a/4.359$	[5 8 9]	(3 3 1)	(4 2 4)
40	1.414	1.612	$a/4.472$	[2 3 6]	(0 4 2)	(6 0 2)
41	1.472	1.683	$a/4.899$	[2 3 8]	(2 4 2)	(6 2 0)
42	1.472	1.683	$a/4.899$	[4 5 6]	(2 4 2)	(6 0 4)
43	1.477	1.567	$a/3.316$	[2 3 7]	(1 3 1)	(4 2 2)
44	1.477	1.784	$a/3.316$	[1 4 7]	(3 1 1)	(2 2 2)
45	1.527	1.527	$a/4.899$	[1 5 7]	(4 2 2)	(2 6 4)
46	1.527	1.732	$a/4.899$	[3 5 7]	(2 4 2)	(6 2 4)
47	1.541	1.541	$a/2.828$	[3 3 4]	(2 2 0)	(3 1 3)
48	1.541	1.337	$a/2.828$	[1 1 6]	(2 2 0)	(3 3 1)
49	1.567	1.809	$a/3.316$	[1 3 8]	(1 3 1)	(5 1 1)
50	1.581	1.581	$a/2.828$	[1 2 2]	(0 2 2)	(4 0 2)
51	1.612	1.673	$a/4.472$	[3 4 6]	(4 0 2)	(0 6 4)
52	1.633	1.915	$a/1.732$	[1 1 2]	(1 1 1)	(2 2 0)
53	1.658	1.658	$a/2.000$	[0 1 3]	(2 0 0)	(1 3 1)
54	1.673	1.844	$a/4.472$	[1 2 8]	(4 2 0)	(4 6 2)
55	1.673	1.844	$a/4.472$	[2 4 7]	(4 2 0)	(2 6 4)
56	1.683	1.683	$a/4.899$	[2 5 8]	(2 4 2)	(6 4 4)
57	1.683	1.871	$a/4.899$	[1 6 8]	(4 2 2)	(4 6 4)
58	1.732	1.732	$a/2.828$	[1 1 3]	(2 2 0)	(2 4 2)
59	1.732	1.915	$a/4.899$	[1 5 9]	(2 4 2)	(8 2 2)
60	1.784	1.809	$a/3.316$	[1 5 8]	(3 1 1)	(1 5 3)
61	1.784	1.907	$a/3.316$	[2 3 9]	(3 1 1)	(3 5 1)
62	1.784	1.809	$a/3.316$	[4 5 7]	(3 1 1)	(1 5 3)
63	1.837	2.091	$a/2.828$	[2 5 5]	(0 2 2)	(5 1 1)
64	1.844	1.897	$a/4.472$	[1 4 8]	(0 4 2)	(8 2 0)
65	1.897	2.049	$a/4.472$	[3 4 8]	(0 4 2)	(8 2 2)
66	1.907	1.977	$a/3.316$	[3 4 9]	(1 3 1)	(6 0 2)
67	1.915	2.081	$a/4.899$	[1 7 9]	(4 2 2)	(6 6 4)
68	1.977	2.174	$a/3.316$	[1 6 9]	(3 1 1)	(3 5 3)
69	2.000	2.153	$a/3.316$	[1 2 5]	(3 1 1)	(2 6 2)
70	2.041	2.198	$a/4.899$	[6 7 8]	(2 4 2)	(8 0 6)

(续表)

序 号	r_2/r_1	r_2/r_1	d_{r2}	膜 面	$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$
71	2.049	2.098	$a/4.472$	[2 4 9]	(4 2 0)	(2 3 4)
72	2.049	2.280	$a/4.472$	[4 5 8]	(4 0 2)	(2 3 4)
73	2.091	2.236	$a/4.899$	[5 7 9]	(2 2 2)	(3 2 6)
74	2.091	2.091	$a/2.828$	[1 1 8]	(2 2 0)	(5 3 1)
75	2.091	2.091	$a/2.828$	[4 5 5]	(0 2 2)	(5 3 3)
76	2.098	2.236	$a/4.472$	[3 6 8]	(4 2 0)	(4 6 6)
77	2.121	2.121	$a/2.828$	[2 2 3]	(2 2 0)	(2 4 4)
78	2.153	2.256	$a/3.316$	[5 7 8]	(3 1 1)	(1 5 5)
79	2.172	2.316	$a/3.316$	[5 6 9]	(3 1 1)	(0 6 4)
80	2.236	2.236	$a/2.828$	[1 3 3]	(0 2 2)	(6 0 2)
81	2.236	2.449	$a/2.000$	[0 1 2]	(2 0 0)	(0 4 2)
82	2.280	2.402	$a/4.472$	[4 7 8]	(4 0 2)	(2 8 6)
83	2.312	2.318	$a/2.828$	[3 3 8]	(2 2 0)	(3 5 3)
84	2.318	2.525	$a/2.828$	[5 5 6]	(2 2 0)	(2 3 5)
85	2.517	2.582	$a/1.732$	[1 2 3]	(1 1 1)	(5 3 1)
86	2.523	2.715	$a/2.828$	[2 7 7]	(0 2 2)	(7 1 1)
87	2.563	2.607	$a/4.472$	[4 8 9]	(4 2 0)	(2 8 8)
88	2.598	2.598	$a/2.000$	[0 1 5]	(2 0 0)	(1 5 1)
89	2.646	2.646	$a/2.828$	[1 1 5]	(2 2 0)	(4 6 2)
90	2.715	2.715	$a/2.828$	[4 7 7]	(0 2 2)	(7 3 1)
91	2.715	2.715	$a/2.828$	[5 5 8]	(2 2 0)	(5 5 5)
92	2.894	3.062	$a/2.828$	[0 7 7]	(0 2 2)	(7 3 3)
93	2.915	2.915	$a/2.828$	[1 4 4]	(0 2 2)	(8 0 2)
94	2.915	2.915	$a/2.828$	[2 2 5]	(2 2 0)	(4 6 4)
95	2.958	2.958	$a/2.000$	[0 3 5]	(2 0 0)	(1 5 3)
96	3.221	3.221	$a/2.828$	[7 7 8]	(2 2 0)	(3 5 7)
97	3.221	3.372	$a/2.828$	[2 9 9]	(0 2 2)	(9 1 1)
98	3.240	3.240	$a/2.828$	[3 4 4]	(0 2 2)	(8 2 4)
99	3.317	3.317	$a/2.828$	[3 3 5]	(2 2 0)	(4 6 6)
100	3.372	3.372	$a/2.828$	[4 0 9]	(0 2 2)	(9 3 1)
101	3.415	3.464	$a/1.732$	[1 3 4]	(1 1 1)	(5 3 1)
102	3.570	3.570	$a/2.000$	[0 1 7]	(2 0 0)	(1 5 1)
103	3.605	3.605	$a/2.828$	[1 5 5]	(0 2 2)	(10 0 2)
104	3.605	3.741	$a/2.000$	[0 2 3]	(2 0 0)	(0 6 4)
105	3.605	3.605	$a/2.828$	[1 1 7]	(2 2 0)	(6 8 2)

(续表)

序 号	r_2/r_1	r_3/r_1	d_{r1}	膜 面	$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$
103	3.791	3.791	$a/2.828$	[8 9 9]	(0 2 3)	(9 3 5)
107	3.897	3.897	$a/2.828$	[4 4 5]	(2 2 0)	(4 3 8)
108	3.897	3.897	$a/2.828$	[2 2 7]	(2 2 0)	(6 8 4)
109	3.849	3.849	$a/2.000$	[0 3 7]	(2 0 0)	(1 7 3)
110	3.873	3.873	$a/2.828$	[3 5 5]	(0 2 2)	(10 2 4)
111	4.123	4.123	$a/2.828$	[3 3 7]	(2 2 0)	(8 6 3)
112	4.123	4.123	$a/1.732$	[2 3 5]	(1 1 1)	(5 5 1)
113	4.123	4.243	$a/2.000$	[0 1 4]	(2 0 0)	(0 8 2)
114	4.301	4.301	$a/2.828$	[1 5 6]	(0 2 2)	(12, 0, 2)
115	4.320	4.431	$a/1.732$	[1 4 5]	(1 1 1)	(6 4 2)
116	4.330	4.330	$a/2.000$	[0 5 7]	(2 0 0)	(1 7 5)
117	4.528	4.528	$a/2.828$	[4 4 7]	(2 2 0)	(6 8 5)
118	4.555	4.555	$a/2.000$	[0 1 9]	(2 0 0)	(1 9 1)
119	4.582	4.582	$a/2.828$	[1 1 9]	(2 2 0)	(8, 10, 2)
120	4.743	4.743	$a/2.828$	[2 2 9]	(2 2 0)	(8, 10, 4)
121	4.950	4.950	$a/2.828$	[5 6 6]	(0 2 2)	(12 4 6)
122	5.000	5.000	$a/2.828$	[1 7 7]	(0 2 2)	(14 2 0)
123	5.000	5.000	$a/2.828$	[5 5 7]	(2 2 0)	(8 6 10)
124	5.000	5.009	$a/2.000$	[0 3 4]	(2 0 0)	(0 8 6)
125	5.172	5.172	$a/2.000$	[0 5 9]	(2 0 0)	(1 9 5)
126	5.196	5.196	$a/2.828$	[3 7 7]	(0 2 2)	(14 4 2)
127	5.300	5.391	$a/1.732$	[1 5 6]	(1 1 1)	(7 5 3)
128	5.328	5.328	$a/2.828$	[4 4 9]	(2 2 0)	(8 10 8)
129	5.335	5.477	$a/2.000$	[0 2 5]	(2 0 0)	(0 10 4)
130	5.522	5.522	$a/2.828$	[6 6 7]	(2 2 0)	(6 8 12)
131	5.568	5.568	$a/2.828$	[5 7 7]	(0 2 2)	(14 4 6)
132	5.701	5.701	$a/2.828$	[1 3 8]	(0 2 2)	(16 2 0)
133	5.722	5.722	$a/2.000$	[0 7 9]	(2 0 0)	(1 9 7)
134	5.745	5.774	$a/1.732$	[3 4 7]	(1 1 1)	(7 7 1)
135	5.745	5.745	$a/2.828$	[5 5 9]	(2 2 0)	(8 10 10)

(续表)

序 号	r_2/r_1	r_3/r_1	d_{r1}	膜 面	$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$
136	5.874	5.874	$a/2.828$	[3 8 8]	(0 2 2)	($\overline{16}$ 4 2)
137	5.888	5.973	$a/1.732$	[2 5 7]	(1 1 $\overline{1}$)	(8 $\overline{8}$ 2)
138	6.082	6.163	$a/2.000$	[0 1 6]	(2 0 0)	(0, 12, $\overline{2}$)
139	6.191	6.319	$a/1.732$	[1 6 7]	(1 1 $\overline{1}$)	(9 5 3)
140	6.205	6.205	$a/2.828$	[5 8 8]	(0 2 2)	(16 4 $\overline{8}$)
141	6.403	6.403	$a/2.828$	[1 9 9]	(0 2 2)	($\overline{18}$ 2 0)
142	6.403	6.480	$a/2.000$	[0 4 5]	(2 0 0)	(0, 10, $\overline{8}$)
143	6.609	6.634	$a/1.732$	[3 5 8]	(1 1 $\overline{1}$)	(9 7 1)
144	6.671	6.671	$a/2.828$	[7 3 8]	(0 2 2)	(16 $\overline{8}$ 8)
145	6.709	6.709	$a/2.828$	[7 7 9]	(2 $\overline{2}$ 0)	(8 $\overline{10}$ 14)
146	6.856	6.856	$a/2.828$	[5 9 9]	(0 2 2)	(18 4 $\overline{8}$)
147	7.117	7.188	$a/1.732$	[1 7 8]	(1 1 $\overline{1}$)	(10 $\overline{8}$ 4)
148	7.246	7.246	$a/2.828$	[8 8 9]	(2 $\overline{2}$ 0)	(10, 8, $\overline{16}$)
149	7.279	7.347	$a/2.000$	[0 2 7]	(2 0 0)	(0, 14, 4)
150	7.280	7.280	$a/2.838$	[7 9 9]	(0 2 2)	(18 $\overline{8}$ 8)
151	7.371	7.394	$a/1.732$	[4 5 9]	(1 1 $\overline{1}$)	(9 9 $\overline{1}$)
152	7.724	7.746	$a/1.732$	[2 7 9]	(1 1 $\overline{1}$)	(11 7 3)
153	7.810	7.873	$a/2.000$	[0 5 6]	(2 0 0)	(0, 12, $\overline{10}$)
154	8.063	8.126	$a/2.000$	[0 1 8]	(2 0 0)	(0, 16, 2)
155	8.063	8.126	$a/2.000$	[0 4 7]	(2 0 0)	(0, 14, 8)
156	8.063	8.083	$a/1.732$	[1 8 9]	(1 1 $\overline{1}$)	($\overline{11}$ 7 5)
157	8.545	8.603	$a/2.000$	[0 3 8]	(2 0 0)	(0, 16, $\overline{8}$)
158	9.221	9.275	$a/2.000$	[0 2 9]	(2 0 0)	(0, 18, 4)
159	9.231	9.275	$a/2.000$	[0 6 7]	(2 0 0)	(0, 14, $\overline{12}$)
160	9.435	9.488	$a/2.000$	[0 5 8]	(2 0 0)	(0 $\overline{16}$ 10)
161	9.850	9.900	$a/2.000$	[0 4 9]	(2 0 0)	(0 $\overline{18}$ 8)
162	10.63	10.69	$a/2.000$	[0 7 8]	(2 0 0)	(0, 16, $\overline{14}$)
163	12.04	12.68	$a/2.000$	[0 8 9]	(2 0 0)	(0 $\overline{18}$ 16)

(三) 体心立方特征基本平行四边形表

序 号	r_2/r_1	r_3/r_1	$\bar{a}_1$	膜 面	$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$
1	1.000	1.000	$a/1.414$	[1 1 1]	(1 0 1)	(0 1 1)
2	1.000	1.183	$a/3.162$	[1 8 9]	(3 1 0)	(0 3 1)
3	1.000	1.195	$a/3.741$	[2 4 5]	(3 1 2)	(1 2 2)
4	1.000	1.291	$a/2.449$	[1 3 5]	(2 1 1)	(1 2 1)
5	1.000	1.414	$a/1.414$	[0 0 1]	(1 1 0)	(1 1 0)
6	1.049	1.140	$a/4.472$	[3 6 7]	(4 2 0)	(3 2 3)
7	1.049	1.225	$a/4.472$	[2 4 9]	(4 2 0)	(3 3 2)
8	1.049	1.378	$a/4.472$	[3 6 5]	(4 2 0)	(2 3 3)
9	1.054	1.202	$a/4.242$	[1 4 3]	(4 1 1)	(0 4 2)
10	1.054	1.291	$a/4.242$	[1 2 9]	(1 1 1)	(4 2 0)
11	1.054	1.374	$a/4.242$	[3 4 8]	(4 1 1)	(0 4 2)
12	1.074	1.177	$a/5.099$	[5 8 9]	(1 4 3)	(5 2 1)
13	1.080	1.225	$a/3.464$	[2 3 5]	(2 2 2)	(2 3 1)
14	1.080	1.472	$a/3.464$	[1 4 5]	(2 2 2)	(3 2 1)
15	1.087	1.414	$a/4.690$	[5 6 9]	(3 2 3)	(3 4 1)
16	1.095	1.183	$a/3.162$	[1 3 4]	(3 1 0)	(3 2 2)
17	1.134	1.195	$a/3.741$	[1 2 7]	(3 2 1)	(1 4 1)
18	1.140	1.140	$a/4.472$	[4 5 8]	(4 0 2)	(1 4 3)
19	1.140	1.449	$a/4.472$	[4 7 8]	(4 0 2)	(1 4 3)
20	1.168	1.279	$a/4.690$	[2 8 9]	(3 2 3)	(5 1 2)
21	1.183	1.183	$a/3.162$	[3 5 9]	(3 0 1)	(1 3 3)
22	1.183	1.483	$a/3.162$	[3 7 9]	(3 0 1)	(1 3 2)
23	1.195	1.253	$a/3.741$	[3 4 6]	(2 3 1)	(4 0 2)
24	1.195	1.464	$a/3.741$	[1 2 8]	(2 3 1)	(4 2 0)
25	1.195	1.464	$a/3.741$	[2 4 7]	(1 3 2)	(4 2 0)
26	1.195	1.558	$a/3.741$	[3 5 6]	(1 3 2)	(4 0 2)
27	1.225	1.225	$a/2.000$	[0 1 2]	(2 0 0)	(1 2 1)
28	1.291	1.414	$a/2.449$	[1 2 3]	(1 2 1)	(3 0 1)
29	1.291	1.527	$a/2.449$	[1 3 7]	(1 2 1)	(3 1 0)
30	1.504	1.449	$a/4.472$	[4 8 9]	(4 3 0)	(3 3 4)
31	1.341	1.414	$a/3.162$	[1 2 6]	(0 3 1)	(4 1 1)
32	1.354	1.472	$a/3.464$	[1 5 8]	(2 2 2)	(3 3 2)
33	1.363	1.604	$a/3.741$	[1 5 8]	(1 3 2)	(3 1 0)
34	1.363	1.604	$a/3.741$	[4 5 7]	(2 3 1)	(4 1 3)
35	1.414	1.453	$a/4.242$	[4 7 9]	(4 1 1)	(2 4 4)

(续表)

序 号	r_2/r_1	r_3/r_1	d_{r1}	取 面	$h_2k_1l_1$	$h_3k_2l_2$
36	1.414	1.483	$a/3.162$	[1 3 6]	(3 1 0)	(0 4 2)
37	1.414	1.612	$a/3.162$	[2 3 6]	(3 0 1)	(0 4 2)
38	1.414	1.732	$a/1.414$	[0 1 1]	(0 1 1)	(2 0 0)
39	1.414	1.604	$a/3.741$	[4 6 7]	(1 3 2)	(5 1 2)
40	1.472	1.581	$a/3.464$	[3 4 7]	(2 2 2)	(3 4 1)
41	1.472	1.779	$a/3.464$	[2 5 7]	(2 2 2)	(4 3 1)
42	1.527	1.527	$a/2.449$	[1 5 7]	(2 1 1)	(1 3 2)
43	1.527	1.732	$a/2.449$	[3 5 7]	(1 2 1)	(3 1 2)
44	1.527	1.826	$a/2.449$	[1 2 4]	(2 1 1)	(2 0 1)
45	1.558	1.773	$a/3.741$	[1 6 9]	(3 2 1)	(3 4 3)
46	1.581	1.871	$a/2.000$	[0 1 3]	(2 0 0)	(0 3 1)
47	1.581	1.633	$a/3.464$	[1 6 7]	(2 2 2)	(3 2 1)
48	1.604	1.647	$a/3.741$	[2 7 8]	(3 2 1)	(2 4 4)
49	1.604	1.732	$a/3.741$	[3 7 8]	(2 1 2)	(4 4 2)
50	1.604	1.813	$a/3.741$	[5 6 8]	(2 3 1)	(4 3 4)
51	1.612	1.897	$a/3.162$	[2 5 6]	(3 0 1)	(1 2 3)
52	1.647	1.927	$a/3.741$	[4 6 9]	(3 1 2)	(3 5 2)
53	1.683	1.779	$a/3.464$	[3 5 8]	(2 2 2)	(5 3 0)
54	1.732	1.775	$a/3.741$	[5 7 8]	(1 3 2)	(5 1 1)
55	1.732	1.732	$a/1.414$	[1 1 3]	(1 1 0)	(1 2 1)
56	1.732	1.897	$a/3.162$	[1 3 8]	(3 1 0)	(1 5 2)
57	1.732	1.915	$a/2.449$	[1 5 9]	(1 2 1)	(4 1 1)
58	1.779	2.041	$a/3.464$	[1 7 8]	(2 2 2)	(5 3 2)
59	1.826	1.915	$a/2.449$	[2 3 4]	(1 2 1)	(4 0 2)
60	1.826	2.081	$a/2.449$	[1 2 5]	(1 2 1)	(4 2 0)
61	1.871	1.871	$a/2.000$	[0 2 3]	(2 0 0)	(1 3 2)
62	1.871	1.558	$a/3.464$	[4 5 9]	(2 2 2)	(4 5 1)
63	1.890	1.927	$a/3.741$	[6 7 9]	(2 3 1)	(4 3 5)
64	1.897	2.049	$a/3.162$	[2 6 7]	(3 1 0)	(2 4 4)
65	1.915	2.082	$a/2.449$	[1 7 9]	(2 1 1)	(3 3 2)
66	1.927	2.105	$a/3.741$	[6 8 9]	(1 3 2)	(6 0 4)
67	1.949	2.098	$a/3.162$	[2 2 9]	(0 3 1)	(6 1 1)
68	1.958	2.041	$a/3.464$	[2 7 9]	(2 2 2)	(3 3 1)
69	2.041	2.121	$a/3.464$	[1 8 9]	(2 2 2)	(5 4 3)
70	2.082	2.236	$a/2.449$	[5 7 9]	(1 2 1)	(4 1 3)

(续表)

序 号	r_2/r_1	r_3/r_1	d_{q1}	膜 面	h_1/h_{11}	h_2/h_{22}
71	2.098	2.145	$a/3.162$	[3 4 9]	(3 0 1)	(2 6 2)
72	2.121	2.121	$a/2.000$	[0 1 4]	(2 0 3)	(1 4 1)
73	2.236	2.280	$a/3.162$	[2 6 9]	(3 2 5)	(3 5 2)
74	2.236	2.236	$a/1.414$	[1 3 3]	(0 1 1)	(3 0 1)
75	2.380	2.449	$a/2.449$	[3 4 5]	(1 2 1)	(5 0 3)
76	2.449	2.516	$a/2.449$	[1 4 6]	(2 1 1)	(4 1 2)
77	2.449	2.646	$a/1.414$	[1 1 2]	(1 1 0)	(2 2 2)
78	2.490	2.608	$a/3.162$	[3 8 9]	(3 0 1)	(1 6 5)
79	2.550	2.550	$a/2.000$	[0 3 4]	(2 0 0)	(1 4 3)
80	2.550	2.739	$a/2.000$	[0 1 5]	(2 0 0)	(0 5 1)
81	2.646	2.646	$a/1.414$	[1 1 5]	(1 1 0)	(2 3 1)
82	2.646	2.708	$a/2.449$	[2 3 7]	(2 1 1)	(4 5 1)
83	2.708	2.887	$a/2.449$	[1 4 7]	(1 1 1)	(6 2 2)
84	2.739	2.739	$a/2.000$	[0 2 5]	(2 0 0)	(1 5 2)
85	2.915	3.082	$a/2.000$	[0 3 5]	(2 0 0)	(0 5 3)
86	2.944	3.000	$a/2.449$	[2 3 8]	(1 2 1)	(6 4 0)
87	2.944	3.000	$a/2.449$	[4 5 6]	(1 2 1)	(6 0 4)
88	3.000	3.162	$a/1.414$	[1 2 2]	(0 1 1)	(4 1 1)
89	3.082	3.082	$a/2.000$	[0 1 6]	(2 0 0)	(1 6 1)
90	3.215	3.366	$a/2.449$	[2 5 8]	(1 2 1)	(7 2 3)
91	3.240	3.240	$a/2.000$	[0 4 5]	(2 0 0)	(1 5 4)
92	3.317	3.317	$a/1.414$	[2 3 5]	(1 1 0)	(2 3 3)
93	3.317	3.366	$a/2.449$	[1 4 9]	(1 2 1)	(7 4 1)
94	3.366	3.416	$a/2.449$	[1 5 8]	(2 1 1)	(4 6 4)
95	3.512	3.559	$a/2.449$	[2 5 9]	(2 1 1)	(7 7 3)
96	3.512	3.559	$a/2.449$	[5 6 7]	(1 2 1)	(7 0 5)
97	3.536	3.674	$a/2.000$	[0 1 7]	(2 0 0)	(0 7 1)
98	3.605	3.605	$a/1.414$	[1 5 5]	(0 1 1)	(5 0 1)
99	3.605	3.605	$a/1.414$	[1 7 7]	(1 1 0)	(8 4 1)
100	3.674	3.674	$a/2.000$	[0 2 7]	(2 0 0)	(1 7 2)
101	3.840	3.840	$a/2.000$	[0 3 7]	(2 0 0)	(1 7 3)
102	3.873	3.873	$a/1.414$	[3 5 5]	(0 1 1)	(5 1 2)
103	3.937	3.937	$a/2.000$	[0 5 6]	(2 0 0)	(1 6 5)
104	4.062	4.062	$a/2.000$	[0 1 8]	(2 0 0)	(1 8 1)
105	4.062	4.062	$a/2.000$	[0 4 7]	(2 0 0)	(1 7 4)

(续表)

序 号	r_2/r_1	r_3/r_1	d_{r1}	膜 面	h_1/h_1	h_2/h_2
106	4.083	4.123	$a/2.449$	[5 7 8]	(1 3 1)	(8 0 8)
107	4.123	4.123	$a/1.414$	[3 3 7]	(1 1 0)	(4 3 3)
108	4.123	4.842	$a/1.414$	[2 2 3]	(1 1 0)	(3 3 4)
109	4.242	4.859	$a/1.414$	[1 1 4]	(1 1 0)	(4 4 2)
110	4.301	4.801	$a/2.000$	[0 3 8]	(2 0 0)	(1 3 3)
111	4.301	4.416	$a/2.000$	[0 5 7]	(2 0 0)	(0 7 5)
112	4.528	4.637	$a/2.000$	[0 1 9]	(2 0 0)	(0 9 1)
113	4.582	4.582	$a/1.414$	[1 1 9]	(1 1 0)	(4 5 1)
114	4.637	4.637	$a/2.000$	[0 2 9]	(2 0 0)	(1 9 2)
115	4.637	4.637	$a/2.000$	[0 6 7]	(2 0 0)	(1 7 6)
116	4.655	4.690	$a/2.449$	[7 8 9]	(1 3 1)	(9 0 7)
117	4.690	4.795	$a/1.414$	[2 3 3]	(0 1 1)	(3 2 2)
118	4.742	4.742	$a/2.000$	[0 5 8]	(2 0 0)	(1 8 5)
119	4.950	4.950	$a/2.000$	[0 4 9]	(2 0 0)	(1 9 4)
120	5.000	5.000	$a/1.414$	[1 7 7]	(0 1 1)	(7 1 0)
121	5.000	5.000	$a/1.414$	[5 5 7]	(1 1 0)	(4 3 3)
122	5.147	5.242	$a/2.000$	[0 5 9]	(2 0 0)	(0 9 5)
123	5.196	5.196	$a/1.414$	[3 7 7]	(0 1 1)	(7 2 1)
124	5.338	5.338	$a/2.000$	[0 7 8]	(2 0 0)	(1 8 7)
125	5.568	5.568	$a/1.414$	[5 7 7]	(0 1 1)	(7 2 5)
126	5.701	5.788	$a/2.000$	[0 7 9]	(2 0 0)	(0 9 7)
127	5.745	5.745	$a/1.414$	[5 5 9]	(1 1 0)	(4 3 5)
128	5.745	5.831	$a/1.414$	[1 4 4]	(0 1 1)	(3 1 1)
129	5.745	5.831	$a/1.414$	[2 2 5]	(1 1 0)	(5 3 4)
130	5.831	5.913	$a/1.414$	[3 3 4]	(1 1 0)	(4 3 3)
131	6.041	6.041	$a/2.000$	[0 8 9]	(2 0 0)	(1 9 8)
132	6.164	6.245	$a/1.414$	[1 1 6]	(1 1 0)	(6 6 2)
133	6.404	6.404	$a/1.414$	[1 9 9]	(0 1 1)	(9 1 0)
134	6.404	6.480	$a/1.414$	[3 4 4]	(0 1 1)	(3 3 3)
135	6.708	6.708	$a/1.414$	[7 7 9]	(1 1 0)	(4 3 7)

(续表)

序 号	r_2/r_1	r_3/r_1	d_1	膜 面	$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$
136	6.855	6.855	$a/1.414$	[5 9 9]	(0 1 $\bar{1}$)	(9 $\bar{2}$ $\bar{3}$)
137	7.279	7.279	$a/1.414$	[7 9 9]	(0 1 $\bar{1}$)	(9 $\bar{3}$ $\bar{4}$)
138	7.348	7.416	$a/1.414$	[2 5 5]	(0 1 $\bar{1}$)	($\bar{10}$ 2 2)
139	7.549	7.615	$a/1.414$	[4 4 5]	(1 $\bar{1}$ 0)	(5 5 8)
140	7.549	7.615	$a/1.414$	[2 2 7]	($\bar{1}$ 1 0)	(7 7 4)
141	8.124	8.185	$a/1.414$	[4 5 5]	(0 1 $\bar{1}$)	(10 $\bar{4}$ $\bar{4}$)
142	8.124	8.185	$a/1.414$	[1 1 8]	($\bar{1}$ 1 0)	(8 8 $\bar{2}$)
143	8.543	8.602	$a/1.414$	[1 6 6]	(0 1 $\bar{1}$)	($\bar{12}$ 1 1)
144	8.909	9.056	$a/1.414$	[4 4 7]	($\bar{1}$ 1 0)	(7 7 8)
145	9.056	9.109	$a/1.414$	[3 3 8]	(1 $\bar{1}$ 0)	(8 8 $\bar{6}$)
146	9.273	9.327	$a/1.414$	[5 5 6]	(1 $\bar{1}$ 0)	(6 6 $\bar{10}$)
147	9.433	9.486	$a/1.414$	[2 2 9]	($\bar{1}$ 1 0)	($\bar{9}$ $\bar{9}$ 4)
148	9.848	9.890	$a/1.414$	[5 6 6]	(0 1 $\bar{1}$)	($\bar{13}$ 5 5)
149	10.10	10.15	$a/1.414$	[2 7 7]	(0 1 $\bar{1}$)	(14 2 2)
150	10.63	10.68	$a/1.414$	[4 4 9]	(1 $\bar{1}$ 0)	(9 9 $\bar{8}$)
151	10.68	10.72	$a/1.414$	[4 7 7]	(0 1 $\bar{1}$)	(14 $\bar{4}$ $\bar{4}$)
152	10.68	10.72	$a/1.414$	[5 5 8]	(1 $\bar{1}$ 0)	(8 8 $\bar{10}$)
153	11.00	11.04	$a/1.414$	[6 6 7]	(1 $\bar{1}$ 0)	(7 7 $\bar{12}$)
154	11.36	11.40	$a/1.414$	[1 8 8]	(0 1 $\bar{1}$)	(16 $\bar{1}$ $\bar{1}$)
155	11.58	11.62	$a/1.414$	[6 7 7]	(0 1 $\bar{1}$)	(14 $\bar{6}$ $\bar{6}$)
156	11.70	11.75	$a/1.414$	[3 8 8]	(0 1 $\bar{1}$)	(16 $\bar{3}$ $\bar{3}$)
157	12.37	12.41	$a/1.414$	[5 8 8]	(0 1 $\bar{1}$)	($\bar{16}$ $\bar{5}$ $\bar{5}$)
158	12.73	12.77	$a/1.414$	[7 7 8]	(1 $\bar{1}$ 0)	(8 8 $\bar{14}$)
159	12.88	12.92	$a/1.414$	[2 9 9]	(0 1 $\bar{1}$)	(18 2 2)
160	13.30	13.34	$a/1.414$	[7 8 8]	(0 1 $\bar{1}$)	(16 7 7)
161	13.34	13.38	$a/1.414$	[4 9 9]	(0 1 $\bar{1}$)	(13 $\bar{4}$ $\bar{4}$)
162	14.46	14.49	$a/1.414$	[8 8 9]	(1 $\bar{1}$ 0)	($\bar{9}$ $\bar{9}$ 16)
163	15.03	15.07	$a/1.414$	[8 9 9]	(0 1 $\bar{1}$)	($\bar{18}$ 8 8)

附录五 立方晶系晶面夹角表

$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$	$(h_1k_1l_1)$ 与 $(h_2k_2l_2)$ 之间的夹角(度)
100	100	0.00 90.00
	110	45.00 90.00
	111	54.73
	210	26.56 68.43 90.00
	211	35.26 65.90
	221	48.19 70.53
	310	18.43 71.56 90.00
	311	24.24 72.43
	320	55.69 56.3 90.00
	321	33.70 57.69 74.50
	322	43.31 60.98
	331	46.51 76.74
	332	50.24 64.76
	410	14.04 75.96 90.00
	411	19.47 76.37
	421	29.20 64.12 77.40
	420	26.87 53.13 90.00
	421	38.33 53.96 73.69
	422	42.03 53.14 63.20
	423	43.69 53.04
	441	45.87 79.98
	443	51.34 62.06
	510	11.31 78.69 90.00
	511	15.79 78.90
	520	21.80 63.20 90.00
	521	24.09 68.58 79.48
	522	29.50 69.62
	520	30.96 59.01 90.00
	531	32.31 59.58 80.27
	532	35.80 60.88 71.07
	533	40.32 63.77
	540	38.66 51.33 90.00
	541	39.51 51.89 81.12
	542	41.81 53.40 72.65
	543	45.00 55.55 64.90
	544	48.53 58.01
	551	45.56 81.95

(续表)

$k_1k_2l_1$	$k_2b_2l_2$	$(h_1k_2l_1)$ 与 $(h_2k_2l_2)$ 之间的夹角(度)
100	552	47.12 74.21
	553	49.38 67.01
	554	52.01 60.50
110	110	0.00 60.00 90.00
	111	35.26 90.00
	210	18.43 50.77 71.56
	211	30.00 54.74 73.23 90.00
	321	19.47 45.00 76.37 90.00
	310	26.56 47.87 63.43 77.03
	311	31.48 64.76 90.00
	320	11.31 53.96 66.91 73.69
	321	11.11 40.89 55.46 67.79 79.11
	322	50.96 46.69 80.12 90.00
	401	13.26 29.54 71.07 90.00
	333	25.14 41.08 81.33 90.00
	410	30.96 46.60 59.04 82.12
	411	34.56 60.00 70.53 90.00
	421	22.21 39.51 62.42 72.02 81.13
	430	2.13 55.55 64.90 81.87
	431	13.90 46.10 56.31 63.43 73.90 82.03
	432	23.20 38.02 48.96 74.77 82.45
	433	31.91 43.31 83.03 90.00
	441	19.02 52.01 68.33 90.00
	443	27.94 39.37 83.66 90.00
	510	33.69 46.10 56.31 82.03
	511	35.26 57.02 74.21 90.00
	520	23.20 48.96 60.80 74.77
	521	25.85 39.23 58.91 67.21 82.53
	522	30.50 60.50 68.33 90.00
	530	14.04 52.67 60.87 75.96
	531	17.02 44.18 61.44 76.17
	532	23.41 36.59 55.00 69.87 73.74 83.41
	533	30.38 49.68 77.54 90.00
	540	6.34 56.48 63.78 83.66
	541	10.89 49.11 56.94 64.12 70.89 83.74

(续表)

$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$	$(h_1k_1l_1)$ 与 $(h_2k_2l_2)$ 之间的夹角(度)							
110	542	18.43	42.45	50.77	71.56	77.83	83.95		
	543	25.84	36.87	45.57	78.46				
	544	32.55	41.47	84.62	90.00				
	551	8.05	53.55	66.67	90.00				
	552	15.79	47.66	73.22	90.00				
	553	22.00	42.57	79.39	90.00				
	554	29.50	38.43	85.01	90.00				
	111	0.00	70.53						
111	210	39.23	75.04						
	211	19.47	61.87	90.00					
	221	15.79	54.74	78.90					
	310	43.09	68.58						
	311	29.50	58.52	79.98					
	320	36.81	80.78						
	321	22.21	51.89	72.02	90.00				
	322	11.42	61.56	81.95					
	331	22.00	48.53	82.39					
	332	10.02	60.50	75.75					
	410	45.56	65.16						
	411	35.26	57.02	74.21					
	421	28.12	50.95	67.79	82.76				
	420	36.07	83.37						
	431	25.06	47.20	76.91	90.00				
	432	15.22	57.58	71.24	83.84				
	423	8.05	60.67	78.58					
	441	25.24	45.29	84.23					
	443	7.33	63.20	74.30					
	510	47.20	63.07						
	511	38.94	56.25	70.53					
	520	41.37	71.24						
	521	32.51	50.77	65.06	77.83				
	522	25.24	59.83	84.23					
	530	37.62	78.58						
	531	28.56	46.91	72.98	84.40				
	532	20.51	55.81	68.00	90.00				

(续表)

$h_1 k_1 l_1$	$h_2 k_2 l_2$	$(h_1 k_1 l_1)$ 与 $(h_2 k_2 l_2)$ 之间的夹角(度)
111	533	14.42 63.88 84.95
	540	35.76 84.83
	541	27.02 44.54 79.74 90.00
	542	18.78 52.95 75.01 85.06
	543	11.54 60.67 70.94 80.60
	544	6.21 67.52 76.74
	551	27.21 43.31 85.36
	552	19.47 51.06 80.96
	553	12.27 58.25 76.97
	554	5.76 64.76 73.48
210	210	0.00 36.87 53.12 66.42 78.46 90.00
	211	24.09 43.09 53.79 79.48 90.00
	221	20.56 41.81 53.40 63.43 72.65 90.00
	310	8.13 31.95 45.00 64.90 73.57 81.87
	311	19.29 47.61 63.14 82.25
	320	7.12 29.74 41.91 60.25 68.15 75.64 82.87
	321	17.02 33.21 53.30 61.44 68.99 83.14 90.00
	332	29.80 40.60 49.40 64.29 77.47 83.77
	331	22.57 44.10 59.14 72.07 84.11
	333	30.89 40.29 48.13 67.53 73.78 84.53
211	210	12.53 29.80 40.60 49.40 64.29 77.47 83.77
	211	18.42 42.45 53.57 71.57 77.83 83.95
	211	0.00 33.56 43.19 60.00 70.53 80.40
	221	17.72 35.26 47.12 65.90 74.21 82.13
	310	26.35 40.21 53.91 75.04 82.58
	311	10.02 42.39 60.50 75.75 90.00
	320	25.06 37.57 53.52 63.07 83.50
	321	10.80 10.20 40.20 49.11 59.64 70.84 77.40 83.74 90.00
	322	8.05 26.98 53.55 60.32 72.72 78.58 84.32
	331	20.51 41.47 63.00 79.20
410	332	16.78 29.50 52.46 64.20 69.62 79.98 85.01
	410	23.98 43.12 53.55 60.32 72.72 78.58
	411	15.80 39.67 47.66 54.73 61.24 73.22 84.48

(续表)

h_1, l_1	h_2, l_2	(h_1, l_1) 与 (h_2, l_2) 之间的夹角(度)
221	221	0.00 17.27 33.94 63.61 83.62 90.00
	310	32.51 12.45 58.19 65.06 83.95
	311	25.24 45.29 59.83 72.45 84.23
	320	22.41 42.30 49.67 68.30 79.34 84.70
	321	11.49 27.02 30.70 57.69 63.55 74.50 79.74 84.89
	322	14.04 27.21 49.70 66.16 71.13 75.96 90.00
	331	8.21 27.21 57.64 67.52 85.61
	332	5.77 22.50 44.71 60.17 69.19 81.83 85.92
	410	36.06 43.31 55.53 60.98 80.69
	411	30.20 45.00 51.06 56.64 66.87 71.63 90.00
310	310	0.00 25.84 36.87 53.13 72.54 84.28 90.00
	311	17.55 40.39 55.10 67.58 79.01 90.00
	320	15.26 37.87 52.12 58.25 74.74 79.90
	321	21.62 32.31 40.48 47.46 53.73 59.58 65.00 75.31 85.15 90.00
	322	32.47 46.35 52.15 57.53 72.13 76.70
	331	29.47 43.49 54.52 64.20 90.00
	332	36.00 42.13 52.64 61.84 66.14 73.33
	410	4.40 23.02 32.47 72.13 57.53 73.70 85.60
	411	14.31 34.93 58.55 72.65 81.43 83.73
311	311	0.00 35.10 50.48 62.96 84.78
	320	23.09 41.18 54.17 65.28 75.47 85.20
	321	14.76 36.31 42.86 61.09 71.20 80.72
	322	18.07 38.45 48.84 59.21 68.55 85.81
	331	26.94 40.46 51.50 61.04 69.70 78.02
	332	25.85 39.52 50.00 59.05 67.31 72.50 90.00
	410	18.07 36.45 59.21 68.55 85.81
	411	5.77 31.48 44.72 55.35 64.76 81.83 90.00

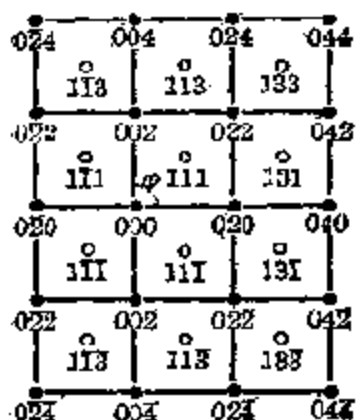
(续表)

$h_1k_1l_1$ 与 $h_2k_2l_2$ 之间的夹角(度)	
320	310 0.00 22.62 46.19 62.51 67.38 72.08 90.00
	321 15.50 27.19 25.38 48.15 53.63 58.74 68.24 72.75 77.15 85.75 90.00
	322 29.02 36.18 47.73 70.35 82.27 90.00
	331 17.36 45.58 55.06 63.55 79.00
	332 27.56 39.76 44.80 72.80 79.78 90.00
	410 19.55 36.18 42.27 47.73 59.42 70.35 78.36 82.27
	411 23.77 44.02 49.18 70.92 86.25
321	321 0.00 21.79 31.06 38.21 44.41 49.99 60.00 64.62 69.07 73.40 81.79 85.90
	322 13.51 24.84 32.57 44.52 49.59 63.01 71.09 78.79 82.55 86.28
	331 11.19 30.85 42.63 52.18 60.63 68.42 75.80 82.96 90.00
	332 14.38 24.26 31.27 42.20 55.26 59.15 62.88 73.45 80.16 83.46 86.73
	410 21.89 32.57 44.52 49.54 54.31 63.01 67.11 71.09 82.55 86.28
	411 19.11 35.02 40.89 46.14 50.95 55.46 67.79 71.64 75.41 79.11 86.29
322	322 0.00 19.75 58.02 61.93 73.29 86.63
	331 18.93 38.42 43.67 59.95 73.85 80.39 86.81
	332 10.74 21.45 55.33 68.78 71.92 87.04
	410 31.57 49.68 53.97 69.32 73.90
	411 23.85 42.00 46.89 59.04 62.78 68.41 80.13
331	331 0.00 26.52 37.96 61.73 80.91 83.98
	332 11.98 28.31 38.50 54.06 72.98 84.39 90.00
	410 33.42 43.67 52.26 59.95 67.08 83.81
	411 30.10 40.80 57.27 64.37 77.51 83.78
332	332 0.00 17.34 50.48 65.85 79.52 82.16
	420 39.11 43.62 55.33 58.86 62.26 73.02
410	410 0.00 19.75 28.07 61.93 76.39 83.63 90.00
	411 13.63 30.96 62.78 73.39 80.13 90.00
	331 33.42 43.67 52.26 59.95 67.08 83.81
420	420 0.00 19.52 28.07 61.93 76.39 83.63 90.00

附录六 高阶、零阶劳厄区斑点重迭图形

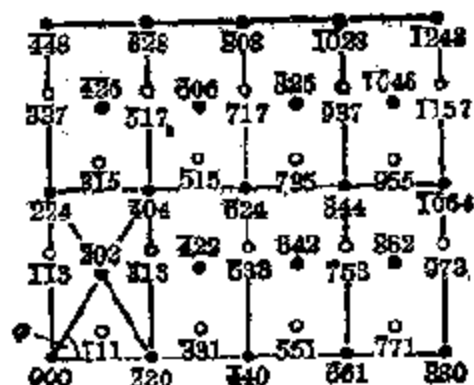
- 零阶劳厄区
- 一阶劳厄区
- ◐ 零阶劳厄区禁止反射
- ◐ 一阶劳厄区禁止反射

(一) 面心立方



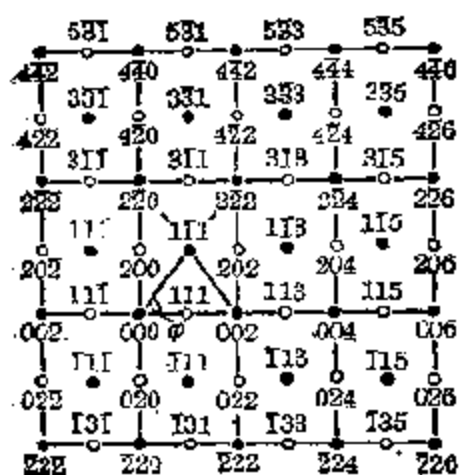
$(100)^*$

$(N=0, 1) \quad \varphi=90^\circ$
 $r_{002}/r_{000}=1, r_{111}=0.5[022]$



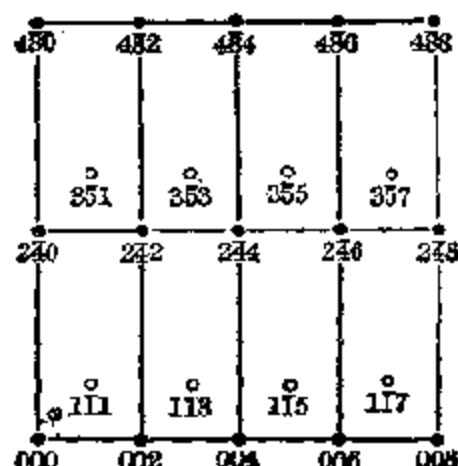
$(111)^*$

$(N=0, 1) \quad \varphi=60^\circ$
 $r_{111}/r_{000}=1.732, r_{113}=0.666[224]$



$(110)^*$

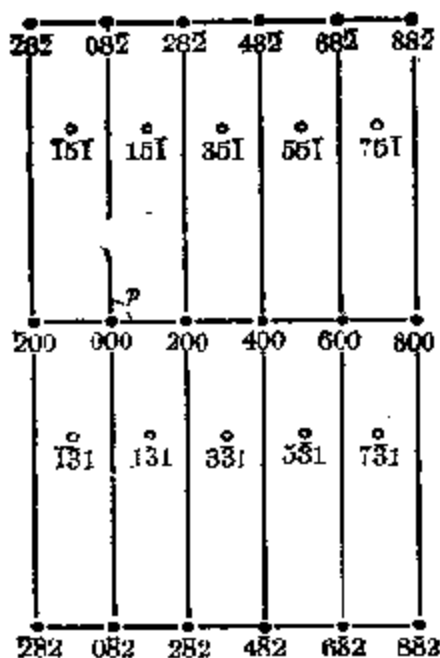
$(N=0, 2) \quad \varphi=54.73^\circ$
 $r_{220}/r_{000}=1.414, r_{111}=0.5[002]$



$(210)^*$

$(N=0, 1) \quad \varphi=90^\circ$

$r_{210}/r_{000}=2.236, r_{111}=0.5[002]+0.3[240]$

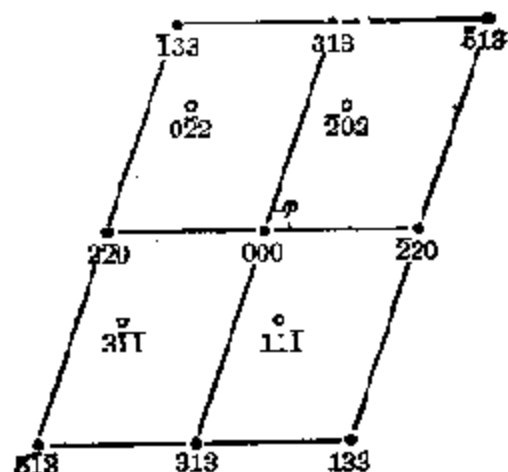


(014)*

(N=0, 2) $\varphi=90^\circ$

$r_{082}/r_{200}=4.123$,

$r_{151}=0.5[200]-0.3823[082]$

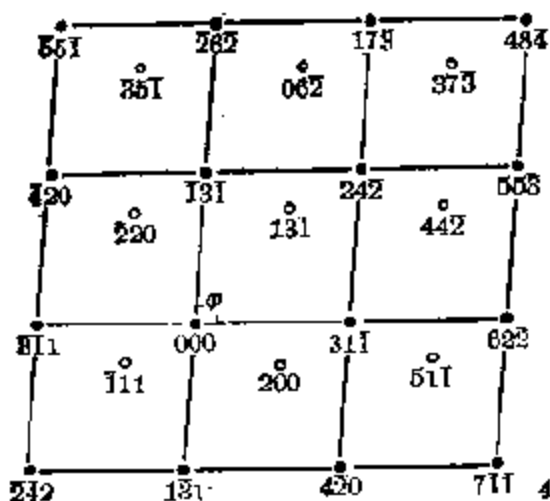


(334)*

(N=0, 2) $\varphi=71.07^\circ$

$r_{313}/r_{220}=1.541$,

$r_{111}=0.2059[220]+0.4117[313]$

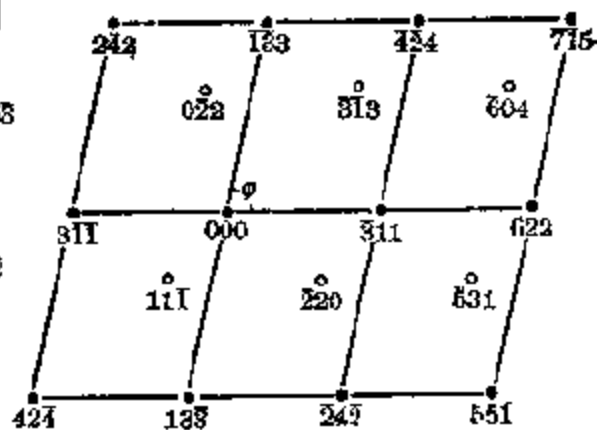


(125)*

(N=0, 2) $\varphi=84.78^\circ$

$r_{131}/r_{311}=1$,

$r_{200}=0.5667[311]+0.2333[131]$

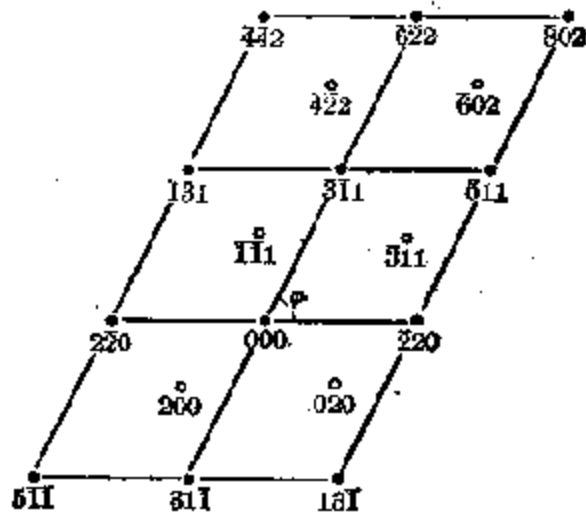


(345)*

(N=0, 2) $\varphi=78.02^\circ$

$r_{133}/r_{311}=1.314$,

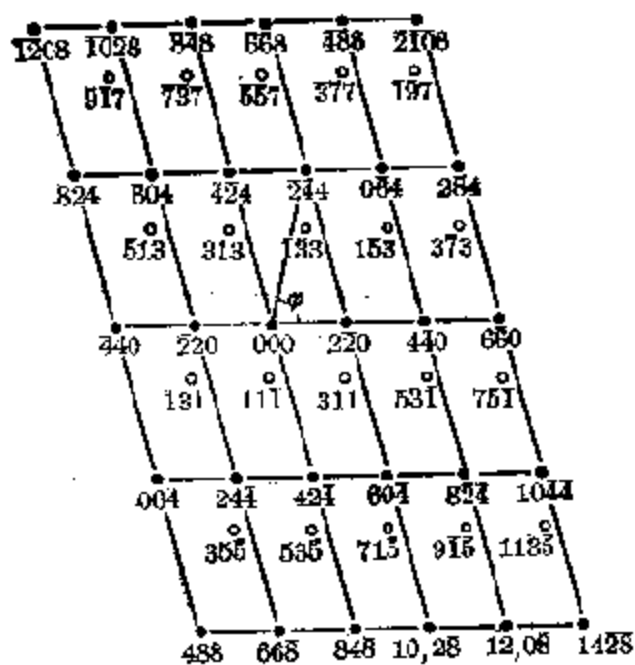
$r_{111}=0.18[311]+0.34[133]$



$(114)^*$

$(N=0, 2) \quad \varphi=64.77^\circ$

$r_{311}/r_{200}=1.173, \quad r_{200}=0.977[220] \rightarrow 0.445[311]$

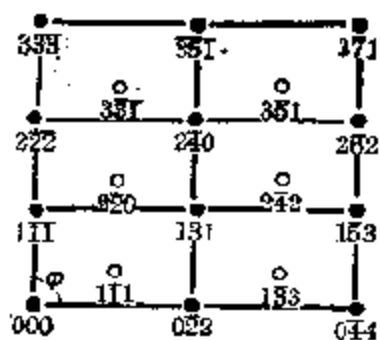


$(223)^*$

$(N=0, 1) \quad \varphi=76.3^\circ$

$r_{244}/r_{200}=2.121,$

$r_{111}=0.1472[220]+0.2041[42]$

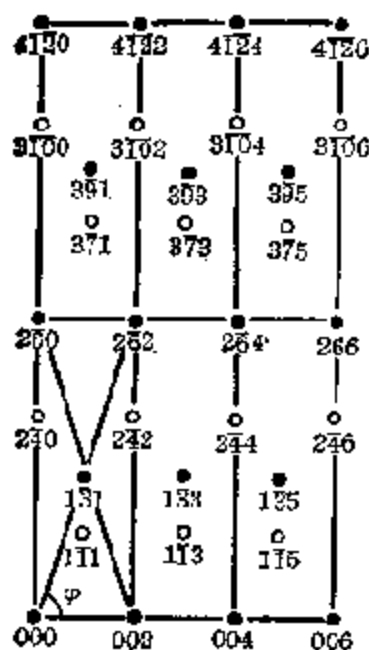


$(211)^*$

$(N=0, 2) \quad \varphi=90^\circ$

$r_{042}/r_{111}=1.623,$

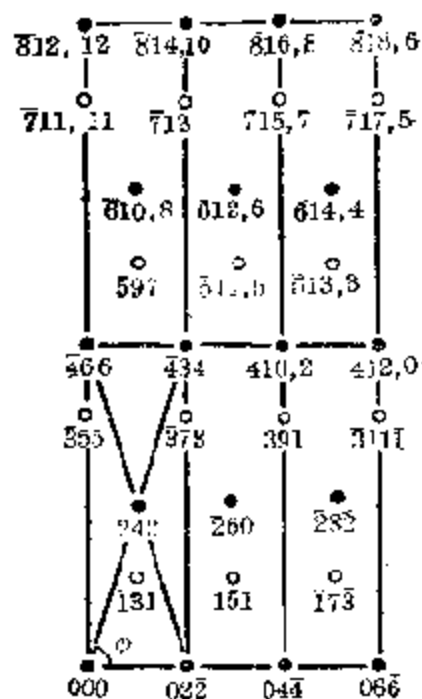
$r_{111}=0.5[022]+0.5[111]$



$(310)^*$

$(N=0, 2) \quad \varphi=72.45^\circ$

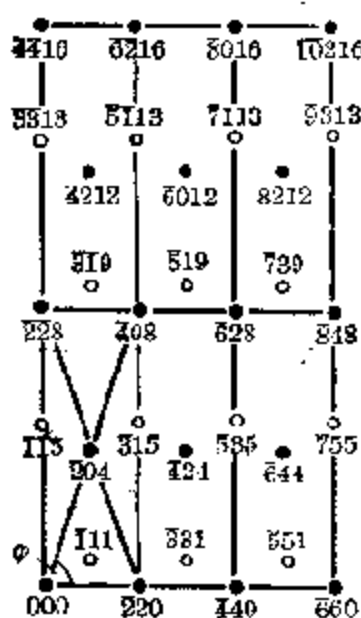
$r_{250}/r_{002}=3.162, r_{230}=0.7[250]$



$(311)^*$

$(N=0, 1) \quad \varphi=73.92^\circ$

$r_{466}/r_{022}=3.317, r_{355}=0.311[466]$

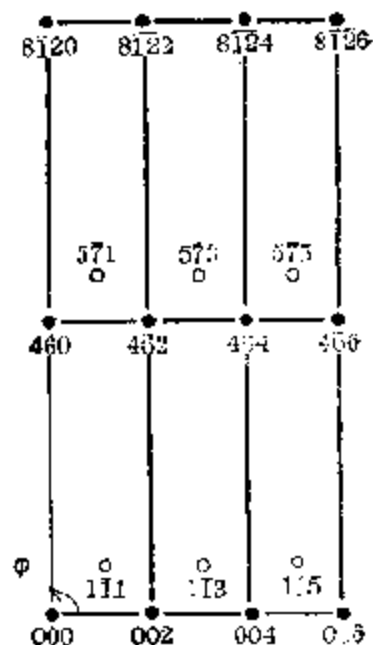


$(221)^*$

$(N=0, 1) \quad \varphi=77.56^\circ$

$r_{424}/r_{220}=3,$

$r_{111}=0.611[228]$

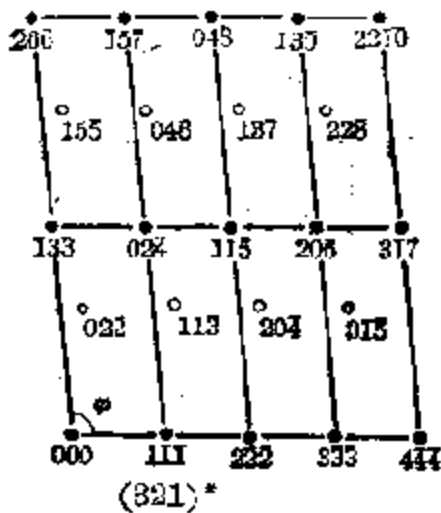


$(320)^*$

$(N=0, 1) \quad \varphi=90^\circ$

$r_{460}/r_{002}=3.606,$

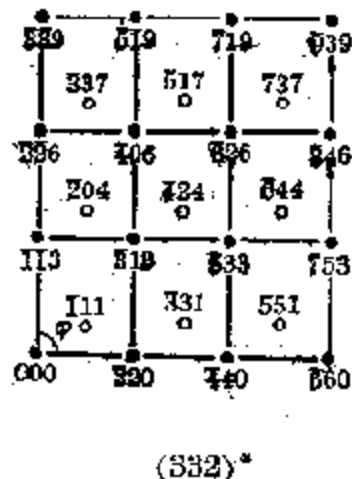
$r_{111}=0.5[002]+0.193[460]$



$$(N=0, 2) \quad \varphi=97.61^\circ$$

$$r_{155}/r_{111}=2.517,$$

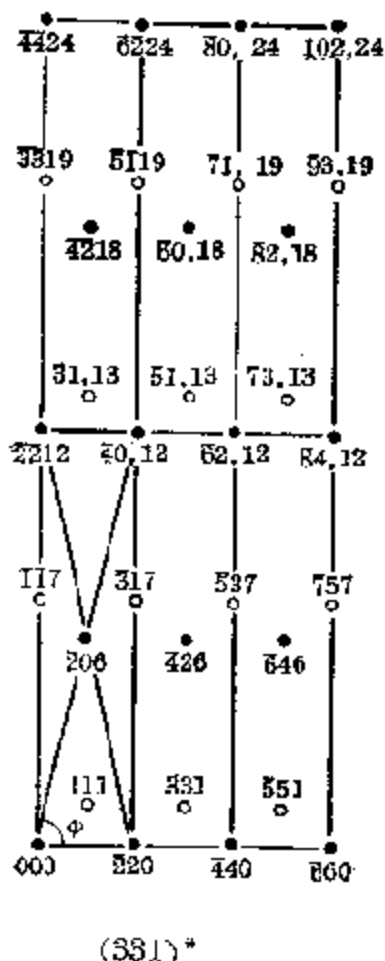
$$r_{022}=0.214[111]+0.643[133]$$



$$(N=0, 2) \quad \varphi=90^\circ$$

$$r_{113}/r_{330}=1.172,$$

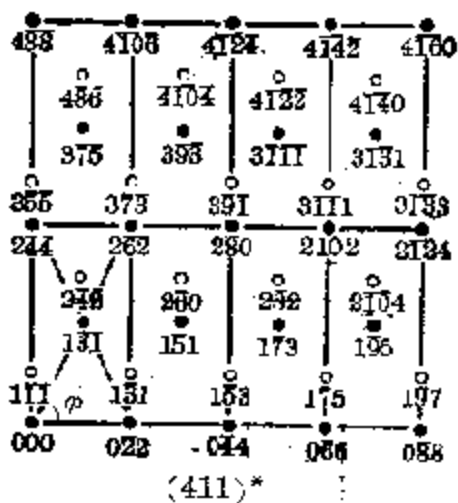
$$r_{111}=0.5[220]+0.272[113]$$



$$(N=0, 1) \quad \varphi=77.09^\circ$$

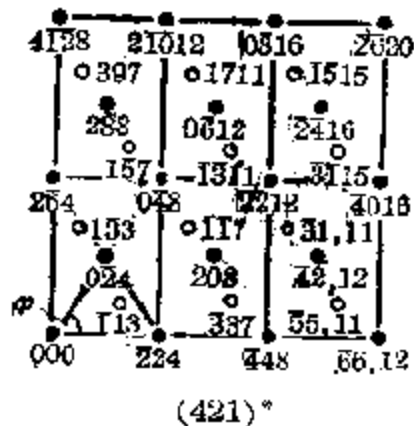
$$r_{212}/r_{220}=4.359,$$

$$r_{117}=0.58[2212]$$



$$(N=0, 2) \quad \varphi=64.76^\circ$$

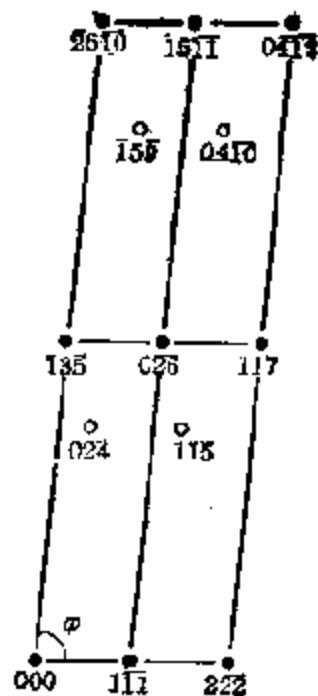
$$r_{244}/r_{022}=2.121, \quad r_{111}=0.278[244]$$



$$(N=0, 1) \quad \varphi=56.79^\circ$$

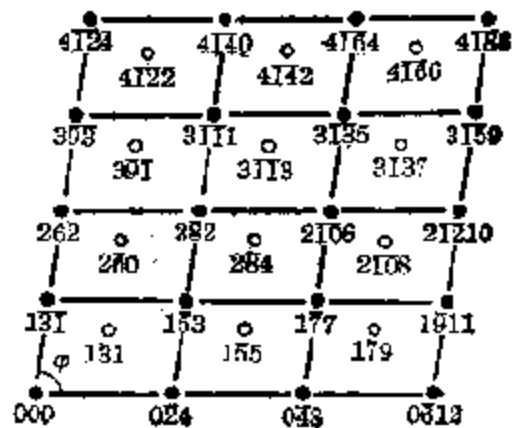
$$r_{221}/r_{221}=1.528,$$

$$r_{155}=0.167[224]+0.571[264]$$



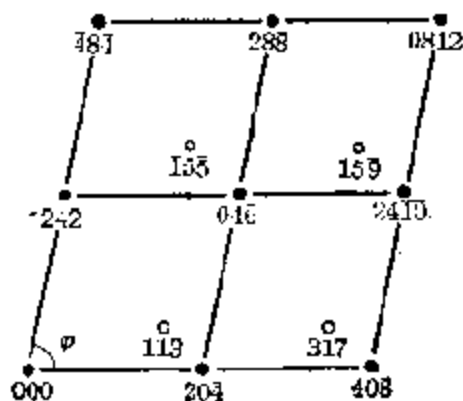
(481)*

$$\begin{aligned} (N=0, 2) \quad \varphi &= 84.40^\circ \\ r_{155}/r_{111} &= 3.416, \\ r_{024} &= 0.423[111] + 0.73[135] \end{aligned}$$



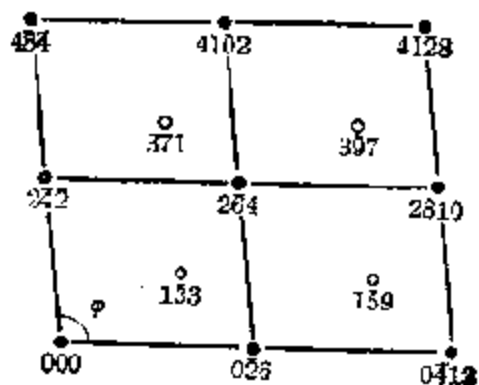
(721)*

$$\begin{aligned} (N=0, 2) \quad \varphi &= 82.25^\circ \\ r_{024}/r_{131} &= 1.348, \\ r_{131} &= 0.426[024] + 0.74[131] \end{aligned}$$



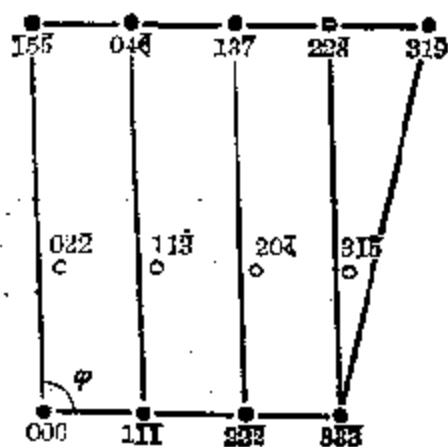
(432)*

$$\begin{aligned} (N=0, 1) \quad \varphi &= 79.48^\circ \\ r_{113}/r_{204} &= 1.095, \\ r_{159} &= 0.655[204] + 0.224[242] \end{aligned}$$



(731)*

$$\begin{aligned} (N=0, 1) \quad \varphi &= 97.42^\circ \\ r_{025}/r_{133} &= 1.291, \\ r_{133} &= 0.644[025] + 0.441[242] \end{aligned}$$

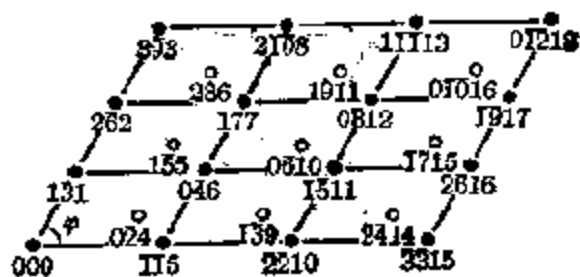


(532)*

$$(N=0, 2) \quad \varphi=94.34^\circ$$

$$r_{155}/r_{111}=4.123,$$

$$r_{022}=0.132[111]+0.394[155]$$

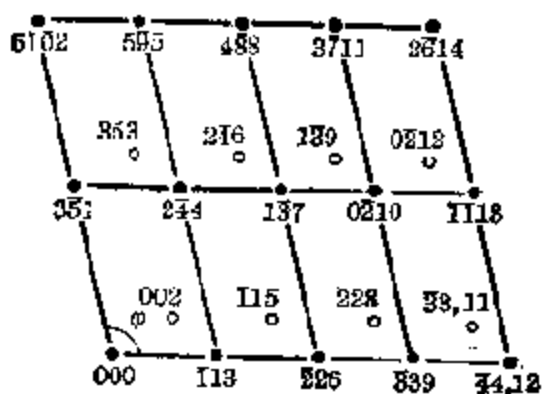


(732)*

$$(N=0, 2) \quad \varphi=60.03^\circ$$

$$r_{115}/r_{131}=1.566,$$

$$r_{024}=0.693[115]+0.466[131]$$



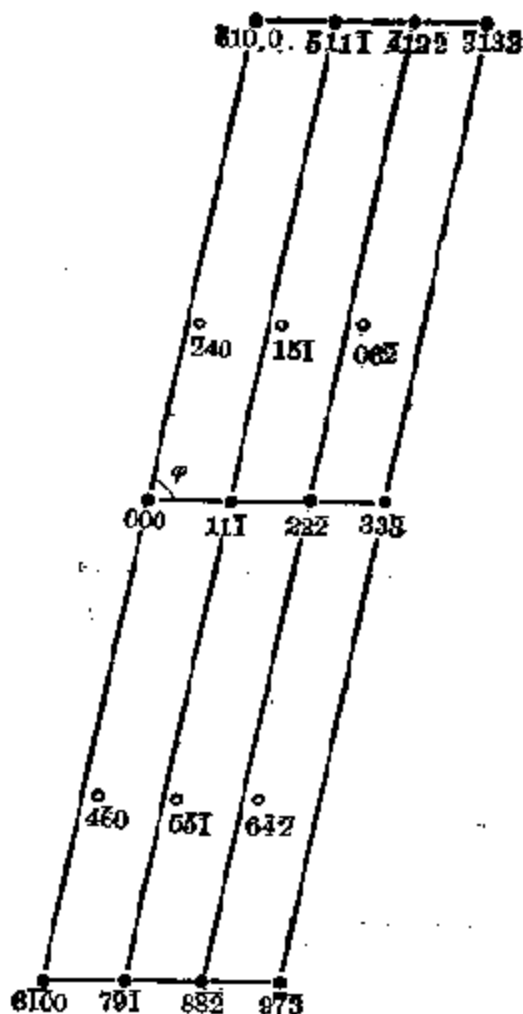
(651)*

$$(N=0, 2) \quad \varphi=104.76^\circ$$

$$r_{351}/r_{113}=1.784,$$

$$r_{002}=0.611[113]+0.144[351]$$

•493•



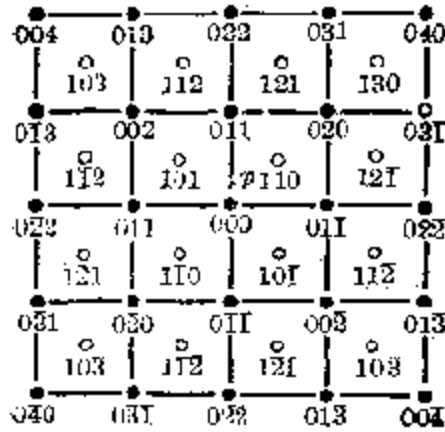
(538)*

$$(N=0, 2) \quad \varphi=78.58^\circ$$

$$r_{610,0}/r_{111}=6.7332,$$

$$r_{40}=0.378[610,0]+0.163[111]$$

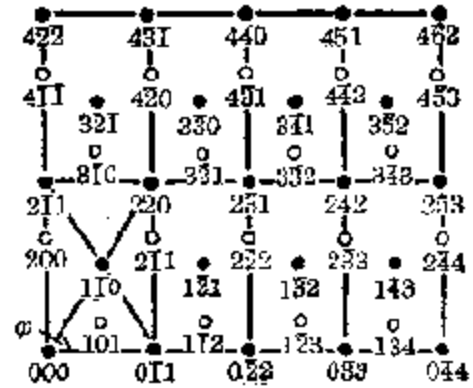
(二) 体心立方



(100)*

(N=0, 1) $\varphi=90^\circ$

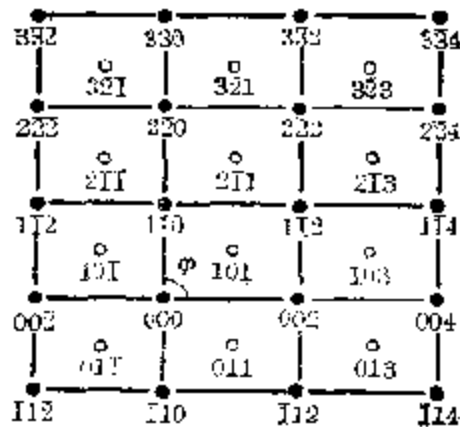
$\tau_{011}/\tau_{010}=1$, $\tau_{110}=0.5[020]$



(111)*

(N=0, 2) $\varphi=60^\circ$

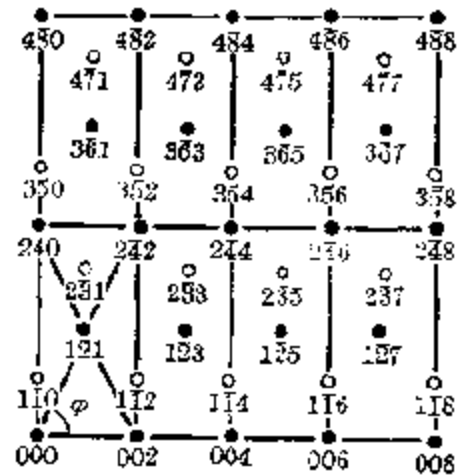
$\tau_{211}/\tau_{011}=1.732$, $\tau_{200}=0.667[211]$



(110)*

(N=0, 1) $\varphi=90^\circ$

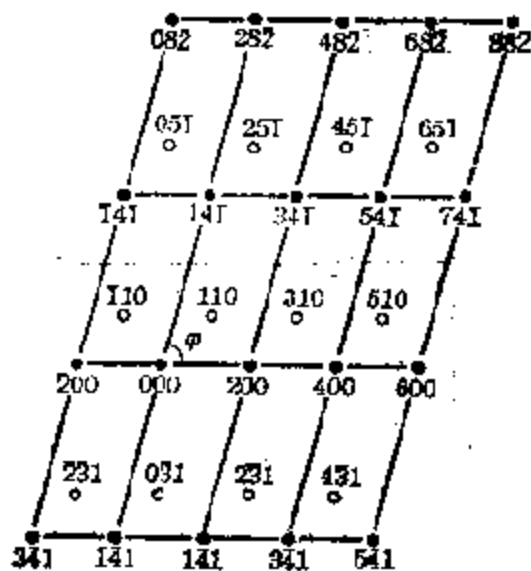
$\tau_{002}/\tau_{110}=2.414$, $\tau_{101}=0.5[112]$



(210)*

(N=0, 1) $\varphi=65.91^\circ$

$\tau_{210}/\tau_{002}=2.236$, $\tau_{110}=0.5[240]$

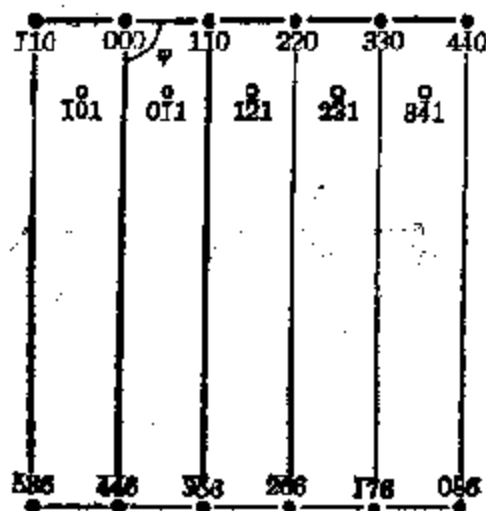


(014)*

(N=0, 1) $\varphi=76.37^\circ$

$$r_{141}/r_{200}=2.121,$$

$$r_{031}=0.382[200]+0.7642[\bar{1}\bar{1}1]$$

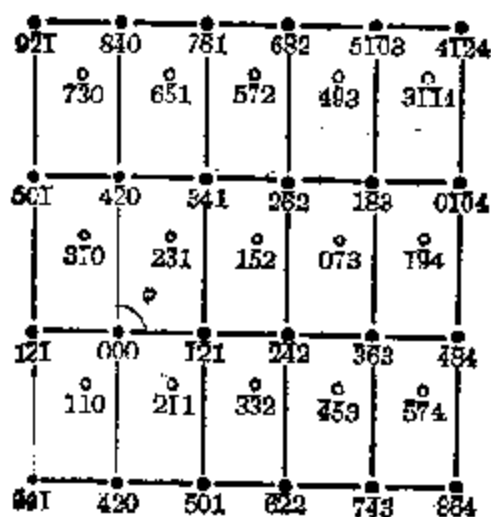


(334)*

(N=0, 1) $\varphi=90^\circ$

$$r_{446}/r_{110}=5.831,$$

$$r_{011}=0.5001[110]+0.1471[\bar{4}\bar{4}6]$$

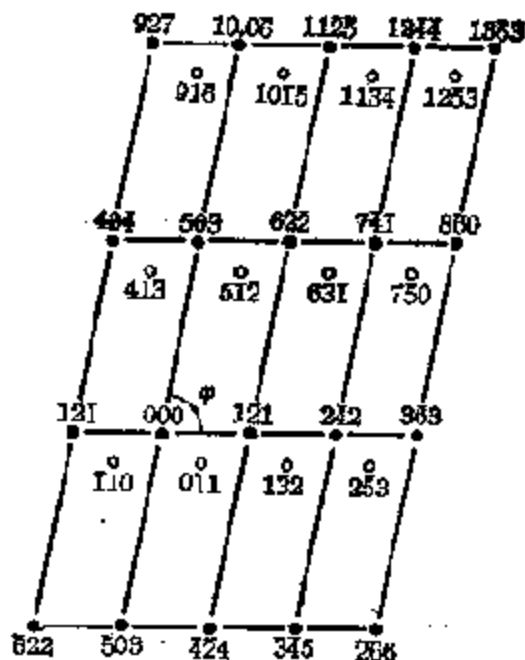


(125)*

(N=0, 1) $\varphi=90^\circ$

$$r_{840}/r_{111}=1.826,$$

$$r_{120}=0.1668[121]+0.8[120]$$

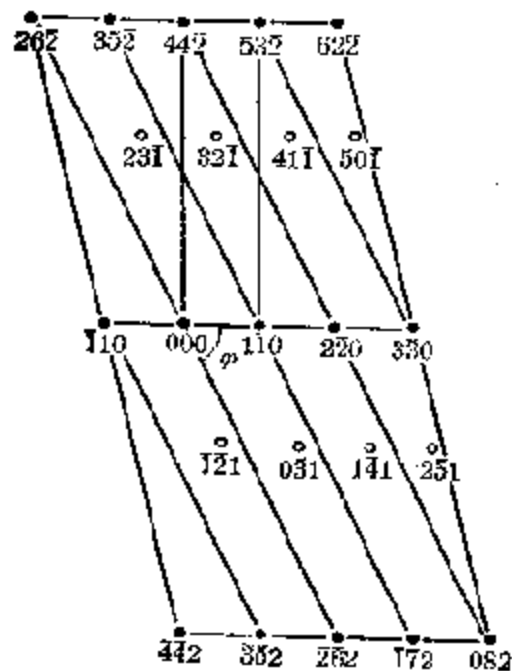


(345)*

(N=0, 1) $\varphi=79.85^\circ$

$$r_{603}/r_{121}=2.380,$$

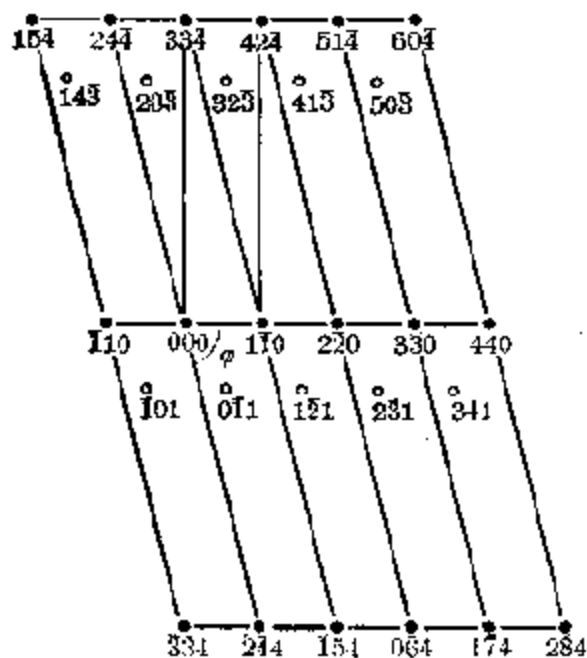
$$r_{411}=0.54[121]+0.12[503]$$



(114)*

(N=0, 1) $\varphi=64.76^\circ$

$$r_{455}/r_{110} = 4.242, r_{081} = 0.7225[1\bar{1}0] + 0.389[2\bar{6}2]$$

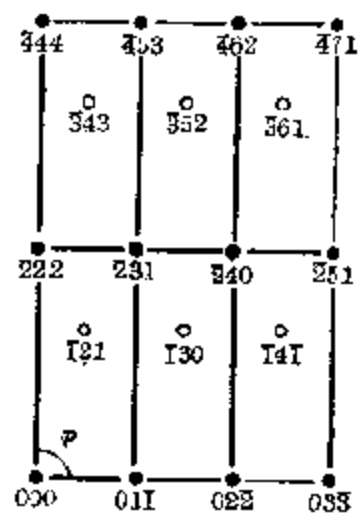


(223)*

(N=0, 1) $\varphi=73.4^\circ$

$$r_{254}/r_{110} = 4.123,$$

$$r_{101} = 0.7063[1\bar{1}0] + 0.2057[\bar{2}44]$$

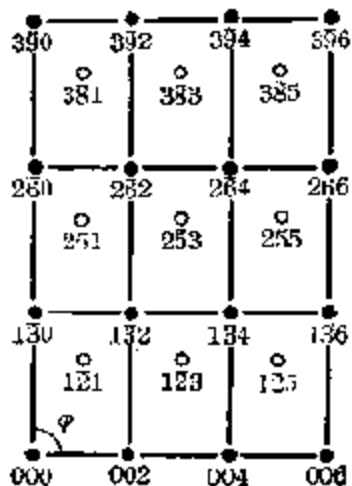


(211)*

(N=0, 1) $\varphi=90^\circ$

$$r_{222}/r_{011} = 2.449,$$

$$r_{111} = 0.5[01\bar{1}] + 0.667[\bar{2}22]$$

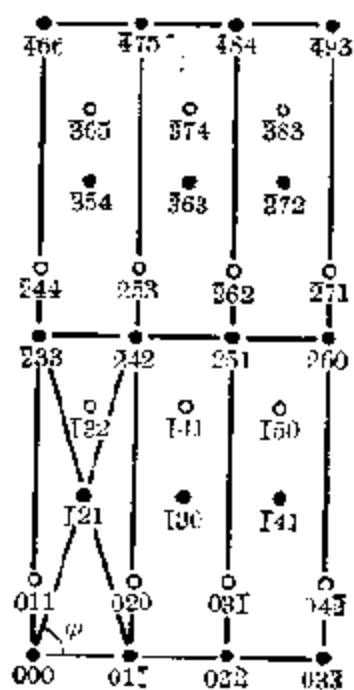


$(310)^*$

$(N=0, 1) \quad \varphi=90^\circ$

$r_{130}/r_{002}=1.581,$

$r_{111}=0.5[002]+0.7[130]$

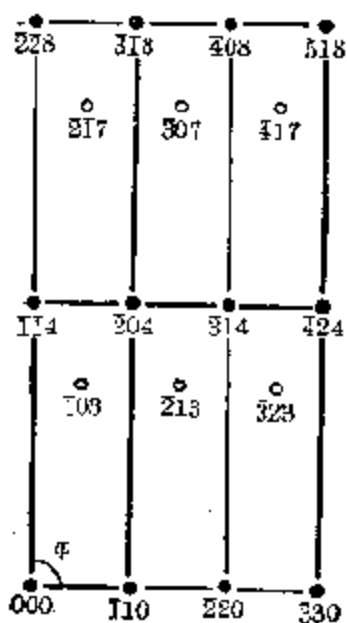


$(311)^*$

$(N=0, 2) \quad \varphi=73.22^\circ$

$r_{223}/r_{011}=3.317,$

$r_{011}=0.972[233]$

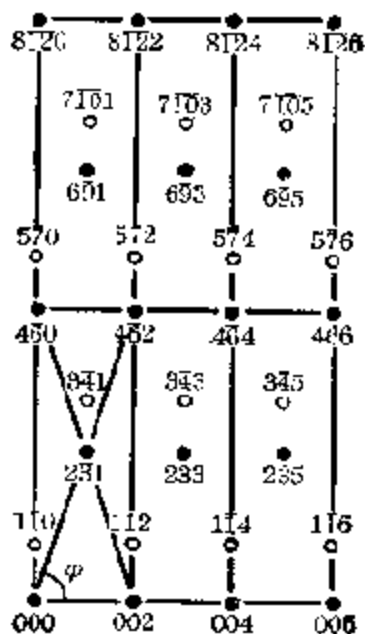


$(221)^*$

$(N=0, 1) \quad \varphi=90^\circ$

$r_{114}/r_{110}=3,$

$r_{103}=0.5[110]+0.723[114]$

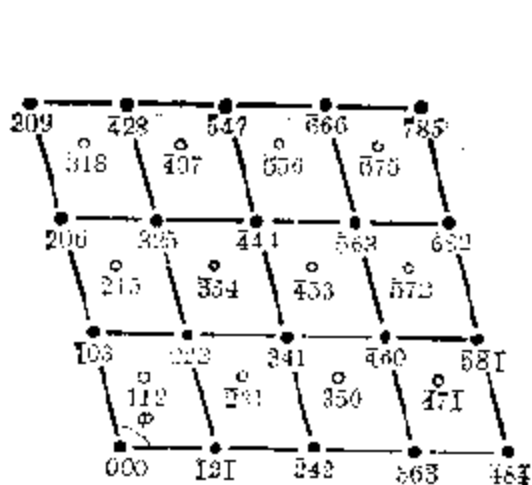


$(320)^*$

$(N=0, 1) \quad \varphi=74.50^\circ$

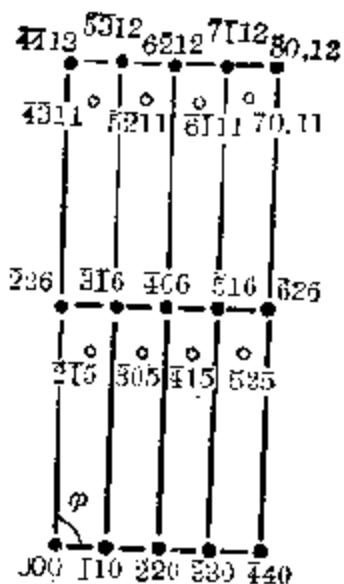
$r_{460}/r_{002}=3.606,$

$r_{110}=0.192[460]$



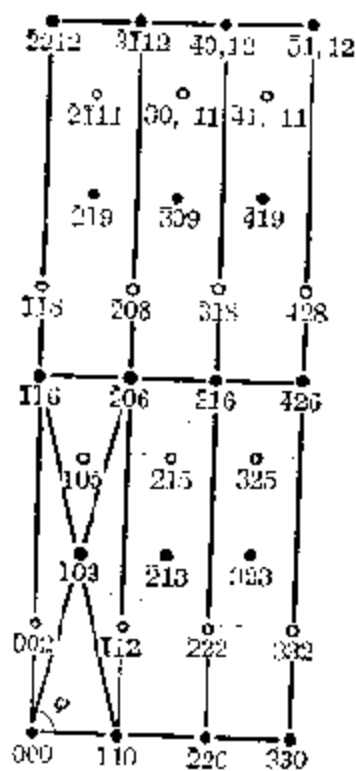
(041)*

(N=0, 1) $\varphi \sim 104.96^\circ$
 $\tau_{103}/\tau_{121} = 1.291$,
 $\tau_{112} = 0.43[121] + 0.13[103]$



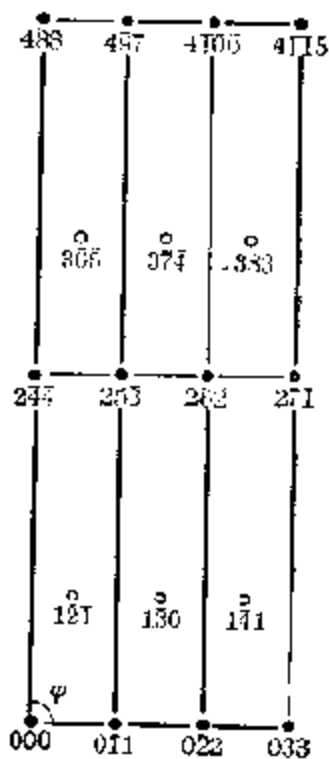
(052)*

(N=0, 1) $\varphi = 90^\circ$
 $\tau_{225}/\tau_{110} = 4.690$,
 $\tau_{215} = 0.5[110] + 0.818[220]$



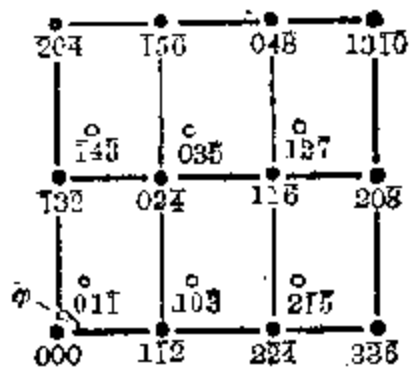
(331)*

(N=0, 2) $\varphi = 77.05^\circ$
 $\tau_{114}/\tau_{110} = 4.350$,
 $\tau_{002} = 0.816[110]$



(411)*

(N=0, 1) $\varphi \sim 90^\circ$
 $\tau_{244}/\tau_{011} = 4.243$,
 $\tau_{121} = 0.5[011] + 0.39[244]$

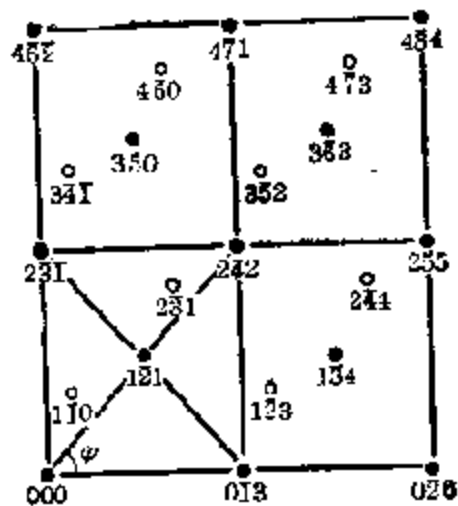


(421)*

(N=0, 1) $\varphi=90^\circ$

$$r_{132}/r_{11} = 1.528,$$

$$r_{011} = 0.166[112] + 0.357[132]$$

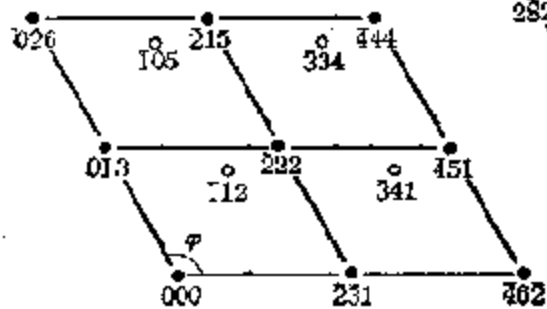


(531)*

(N=0, 2) $\varphi=49.8^\circ$

$$r_{231}/r_{013} = 1.183,$$

$$r_{110} = 0.1[013] + 0.357[231]$$

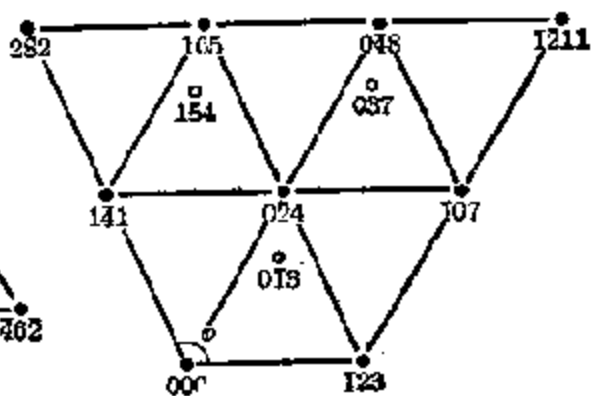


(431)*

(N=0, 1) $\varphi=120.47^\circ$

$$r_{231}/r_{013} = 1.183,$$

$$r_{112} = 0.938[231] + 0.846[013]$$

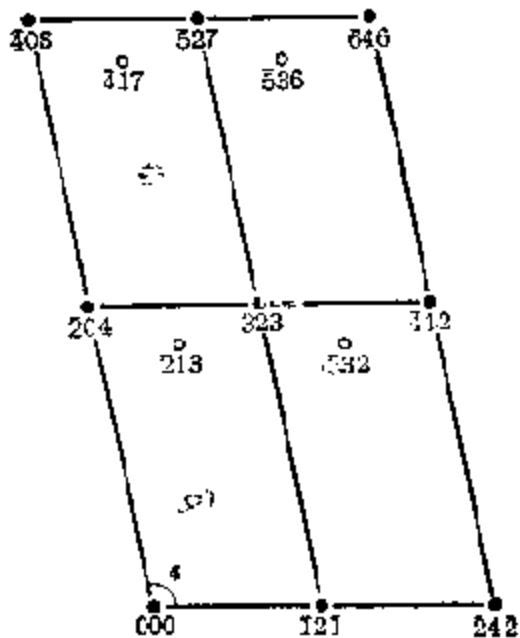


(721)*

(N=0, 1) $\varphi=61.44^\circ$

$$r_{141}/r_{123} = 1.184,$$

$$r_{013} = 0.130[123] + 0.648[034]$$

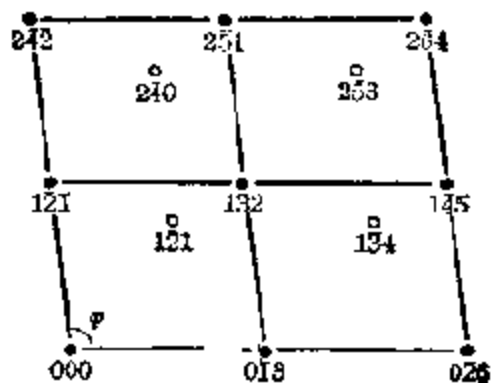


(452)*

(N=0, 1) $\varphi=100.52^\circ$

$r_{012}/r_{12} = 1.826,$

$r_{213} = 0.448[121] + 0.845[204]$

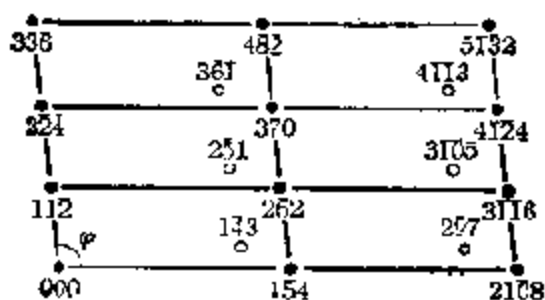


(731)*

(N=0, 2) $\varphi=97.42^\circ$

$r_{012}/r_{13} = 1.291,$

$r_{121} = 0.576[013] + 0.762[121]$

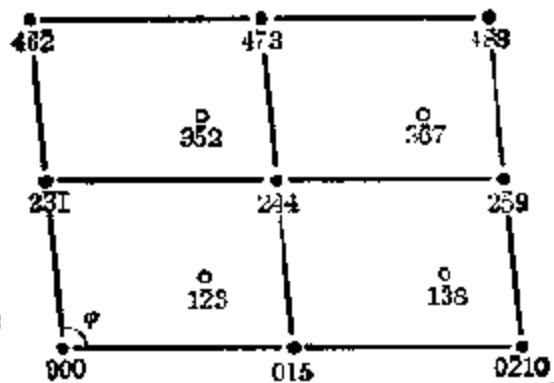


(732)*

(N=0, 1) $\varphi=97.24^\circ$

$r_{154}/r_{12} = 2.646,$

$r_{113} = 0.79[154] + 0.097[112]$

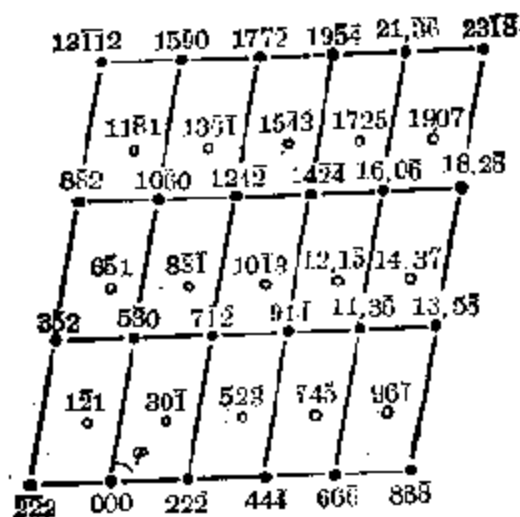


(851)*

(N=0, 1) $\varphi=96.02^\circ$

$r_{012}/r_{211} = 1.362,$

$r_{133} = 0.7[015] + 0.455[231]$



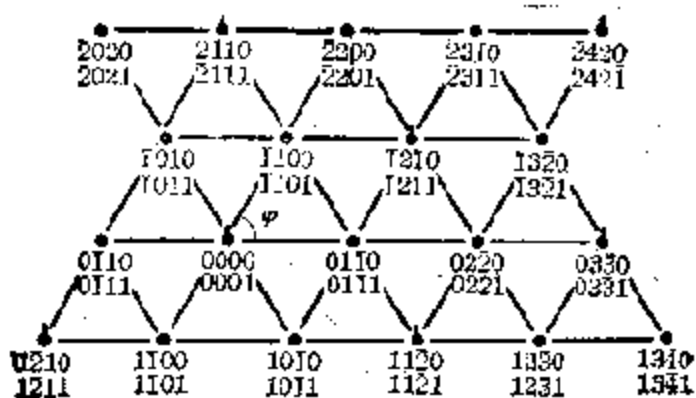
(958)*

(N=0, 1) $\varphi = 78.55^\circ$

$r_{350}/r_{213} = 1.965$, $r_{30} = 0.3775[530] + 0.5408[222]$

(三) 六方晶系

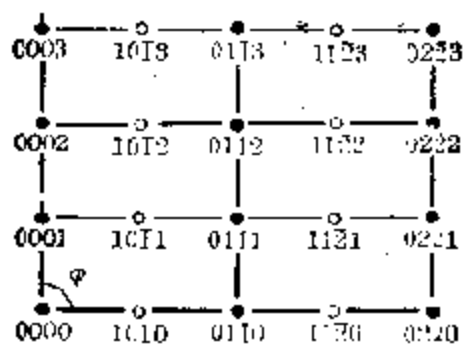
($c/a = 1.633$)



(001)* (0001)*

$\varphi = 60^\circ$

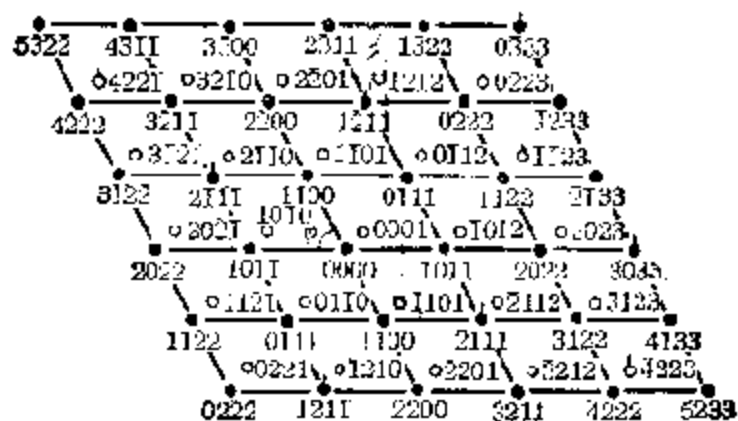
$r_{100}/r_{010} = 1$, $r_{001} = 0$



$$(100)^* (2110)^*$$

$$\varphi = 90^\circ$$

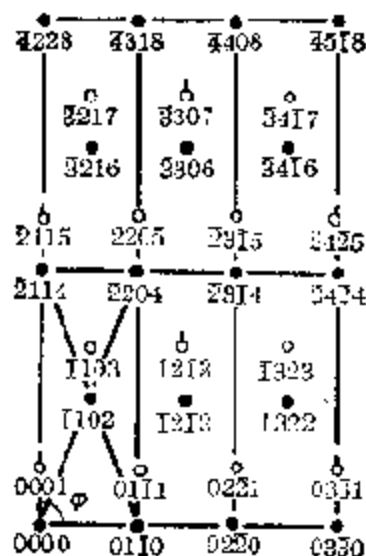
$$r_{001}/r_{010} = 0.5, r_{1010} = 0.5[0110]$$



$$(111)^* (1123)^*$$

$$\varphi = 63.33^\circ$$

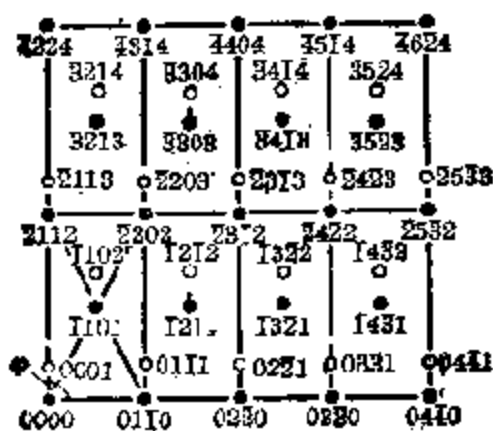
$$r_{1011}/r_{110} = 1.1369, r_{1011} = 0.719 \cdot 10^{-1} + 0.141[1100]$$



$$(201)^* (4223)^*$$

$$\varphi = 90^\circ$$

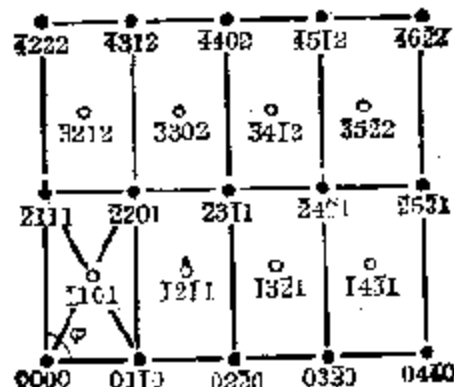
$$r_{211}/r_{0110} = 2.7, r_{0001} = 0.15[2114]$$



$$(101)^*(2113)^*$$

$$\varphi=90^\circ$$

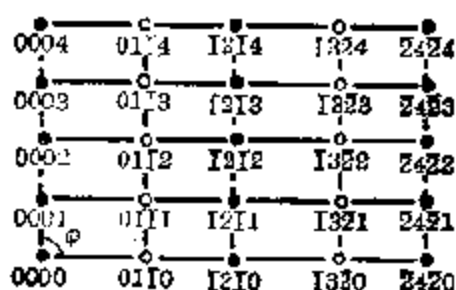
$$\tau_{2112}/\tau_{0110}=2, \\ \tau_{0001}=-0.136[2112]$$



$$(102)^*(2116)^*$$

$$\varphi=90^\circ$$

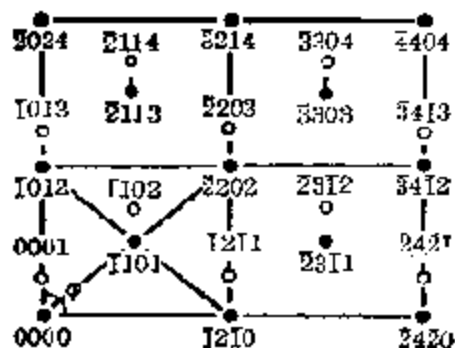
$$\tau_{2111}/\tau_{0110}=1.8, \\ \tau_{1101}=0.5[2201]+0.0417[2111]$$



$$(210)^*(1010)^*$$

$$\varphi=90^\circ$$

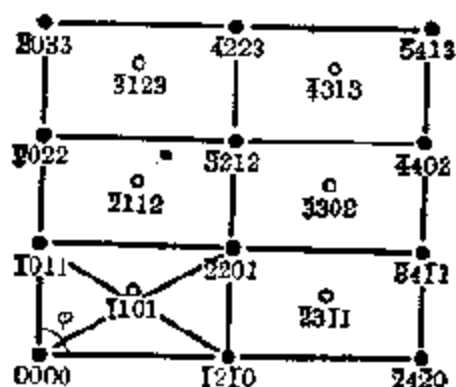
$$\tau_{0001}/\tau_{1210}=0.3, \tau_{0110}=0.5[1210]$$



$$(211)^*(1011)^*$$

$$\varphi=90^\circ$$

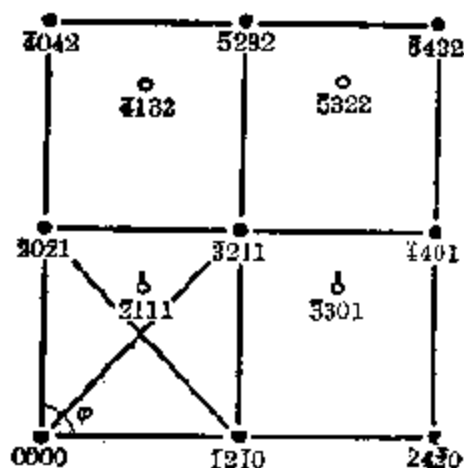
$$\tau_{1012}/\tau_{1210}=0.82, \tau_{0001}=0.265[1012]$$



$$(212)^*(1012)^*$$

$$\varphi=90^\circ$$

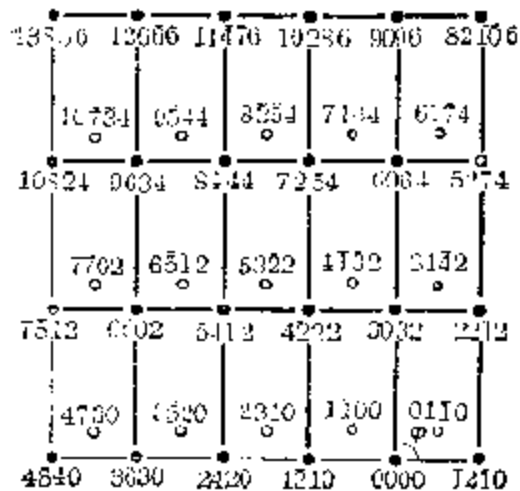
$$\tau_{1011}/\tau_{1210}=0.6, \\ \tau_{1101}=0.5[2201]+0.11[1011]$$



$$(214)^*(1014)^*$$

$$\varphi=90^\circ$$

$$\tau_{2021}/\tau_{1210}=1.2, \\ \tau_{2111}=0.5[1210]+0.766[2021]$$

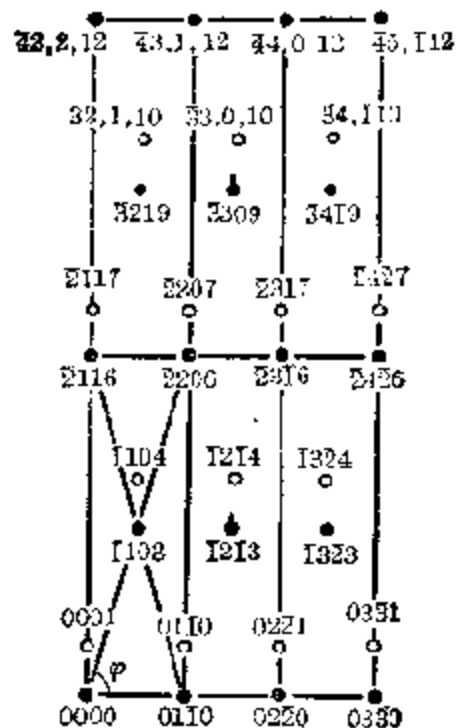


$$(213)^*(1113)^*$$

$$\varphi = 90^\circ$$

$$\tau_{3032}/\tau_{1210} = 1.833,$$

$$\tau_{0110} = 0.5[1210] + 0.1481[3032]$$

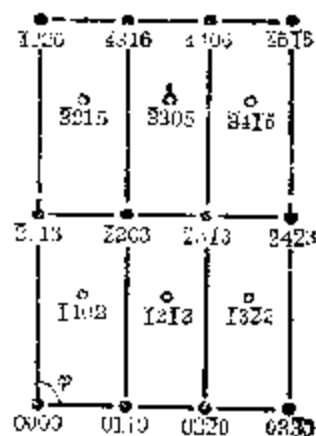


$$(301)^*(2111)^*$$

$$\varphi = 90^\circ$$

$$\tau_{2111}/\tau_{0110} = 3.6,$$

$$\tau_{0001} = 0.13[2111]$$

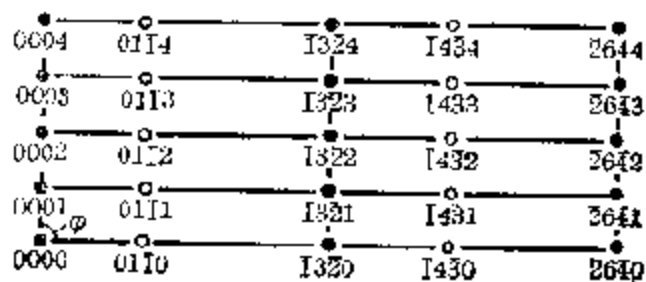


$$(300)^*(2112)^*$$

$$\varphi = 90^\circ$$

$$\tau_{2111}/\tau_{0110} = 2.36,$$

$$\tau_{1102} = 0.5[2208] + 0.79[2113]$$

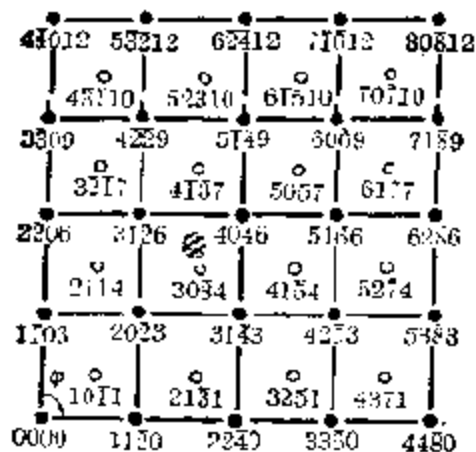


$$(310)^*(5340)^*$$

$$\varphi = 90^\circ$$

$$\tau_{0001}/\tau_{1320} = 0.2,$$

$$\tau_{0110} = 0.359[1320]$$

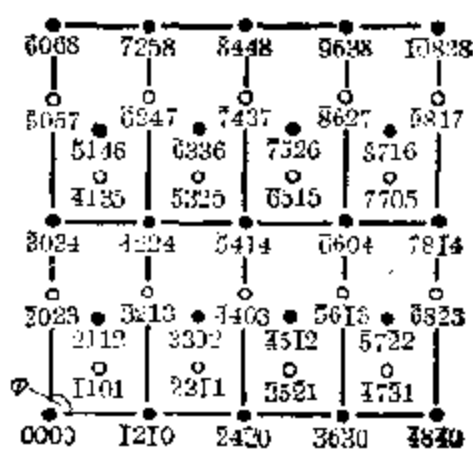


$$(352)^* (3702)^*$$

$$\varphi = 90^\circ$$

$$r_{1102}/r_{110} = 1.1,$$

$$r_{1101} = 0.501[1120] + 0.3803[1103]$$

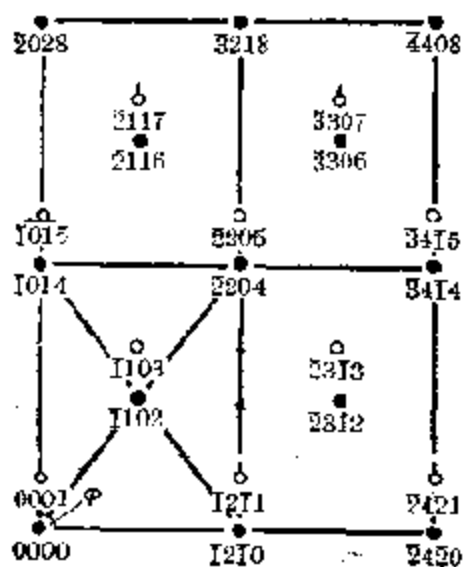


$$(423)^* (2023)^*$$

$$\varphi = 90^\circ$$

$$r_{2034}/r_{1210} = 2.1,$$

$$r_{2023} = 0.094[2034]$$

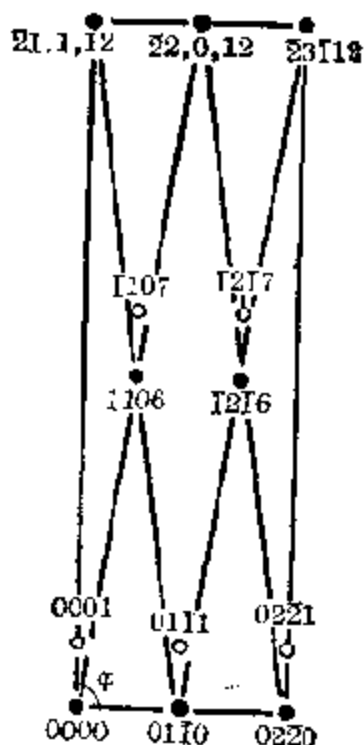


$$(421)^* (2021)^*$$

$$\varphi = 90^\circ$$

$$r_{1014}/r_{1210} = 1.35,$$

$$r_{0001} = 0.204[1014]$$

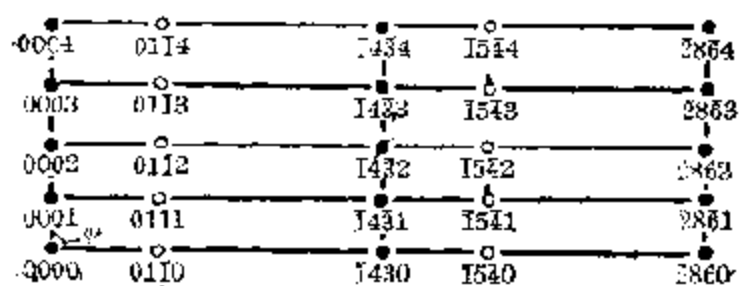


$$(601)^* (4221)^*$$

$$\varphi = 90^\circ$$

$$r_{11.1,12}/r_{0110} = 0.6,$$

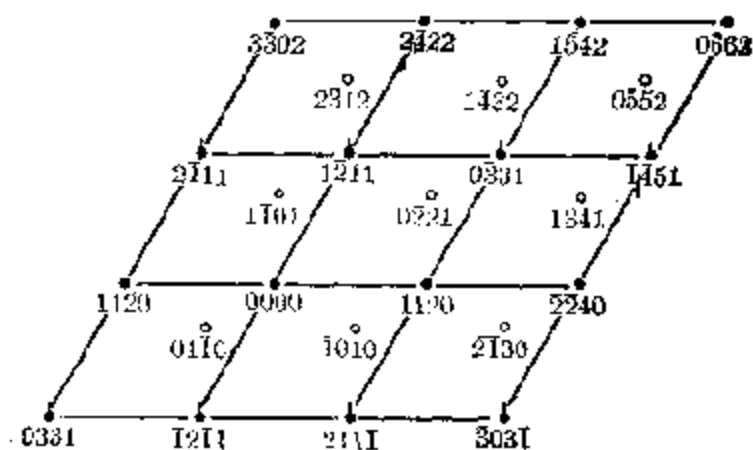
$$r_{0001} = 0.077[21.1,12]$$



$$(410)^* (7.5)^*$$

$$\varphi = 90^\circ$$

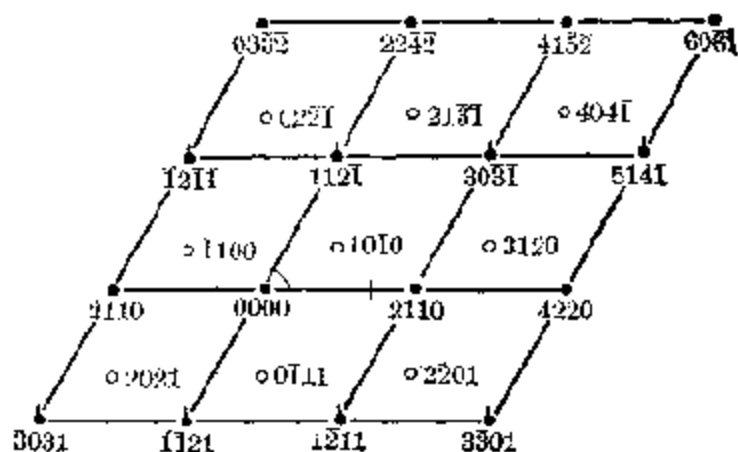
$$r_{0001}/r_{1430} = 0.12, r_{0110} = 0.27[1430]$$



$$(113)^* (1103)^*$$

$$\varphi = 61.44^\circ$$

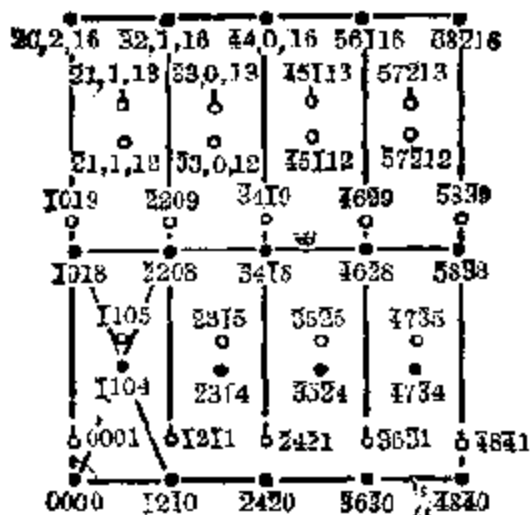
$$r_{3302}/r_{1120} = 1.8, r_{0110} = 0.3517[1130] + 0.296[1211]$$



$$(123)^* (0113)^*$$

$$\varphi = 61.44^\circ$$

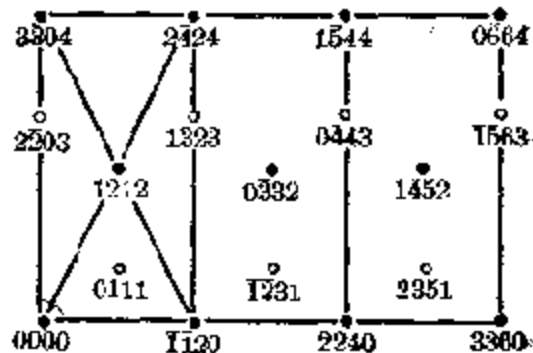
$$r_{0332}/r_{2110} = 1.8, r_{1100} = 0.5[2\bar{1}10] + 0.148[0332]$$



(841)*(4041)*

$\varphi = 90^\circ$

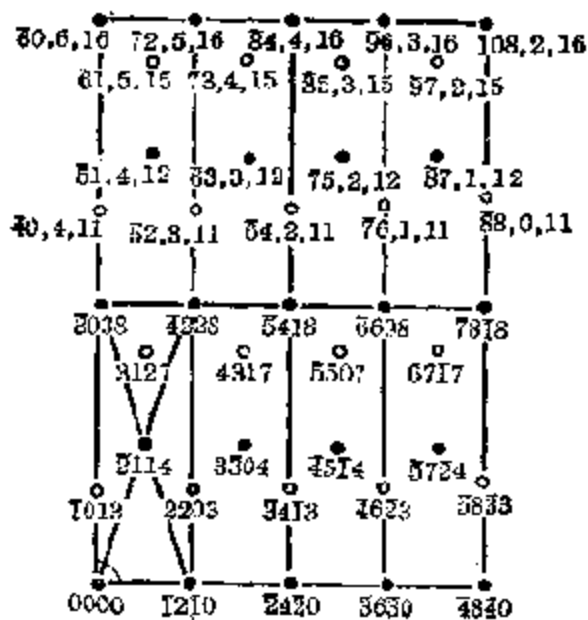
$r_{1018}/r_{1210} = 2.5$,
 $r_{0001} = 0.118 [1018]$



(233)*(2203)*

$\varphi = 90^\circ$

$r_{3304}/r_{1120} = 2.1$,
 $r_{0111} = 0.5 [1120] + 0.193 [3304]$



(843)*(4043)*

$\varphi = 90^\circ$

$r_{1033}/r_{1210} = 3.0$, $r_{1213} = 0.361 [3033]$

附录七 孪晶衍射位置表

(一) (111)孪晶衍射位置表

h	k	l	hkl	h'	k'	l'	$h'k'l'$	h''	k''	l''	$h''k''l''$
0	6	6	$\bar{4}2\bar{4}$	$\frac{2}{3}(1, 5, 1)$	5	2	5	1	5	7	255
0	0	6	$\bar{4}\bar{4}2$	$\frac{4}{3}(1, 5, 1)$	4	4	4	$\frac{1}{3}(1, 7, 7)$	3	1	1
0	0	6	$44\bar{2}$	$\frac{4}{3}(1, 5, 1)$	4	4	4	$\frac{1}{3}(1, 7, 7)$	3	1	1
0	6	0	$4\bar{2}4$	1, 1, 5	3	2	3	$\frac{1}{3}(1, 11, 11)$	5	1	1
0	4	4	$04\bar{4}$	1, 5, 1	3	3	3	$\frac{1}{3}(1, 11, 11)$	5	1	1
0	4	4	$0\bar{4}4$	1, 1, 5	3	3	3	$\frac{1}{3}(1, 11, 11)$	5	1	1
0	2	4	$\bar{4}20$	1, 5, 3	5	1	3	$\frac{1}{3}(1, 11, 11)$	5	1	1
0	4	2	$\bar{4}0\bar{2}$	1, 3, 5	5	3	1	$\frac{1}{3}(1, 11, 7)$	1	3	3
0	2	4	420	1, 5, 3	1	3	5	$\frac{1}{3}(1, 7, 11)$	1	3	3
0	4	2	$40\bar{2}$	1, 3, 5	1	5	3	$\frac{1}{3}(1, 7, 11)$	1	3	3
0	2	2	$02\bar{2}$	1, 5, 3	1	5	3	$\frac{1}{3}(1, 7, 11)$	1	3	3
0	2	2	$0\bar{2}2$	1, 3, 5	1	3	5	$\frac{1}{3}(1, 7, 11)$	1	3	3
1	1	1	111	1, 5, 3	5	1	3	$\frac{1}{3}(1, 11, 7)$	1	3	3
1	1	1	$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$	1, 3, 5	5	3	1	$\frac{1}{3}(1, 11, 7)$	1	3	3
1	5	1	$1\bar{1}3$	$\frac{4}{3}(1, 1, 5)$	4	4	4	$\frac{1}{3}(1, 13, 1)$	3	1	3
1	1	3	$\bar{1}31$	$\frac{4}{3}(1, 1, 5)$	4	4	4	$\frac{1}{3}(1, 1, 13)$	3	3	1
1	1	3	$3\bar{1}1$	$\frac{4}{3}(1, 5, 1)$	4	4	4	$\frac{1}{3}(1, 1, 13)$	3	3	1
1	5	1	$\bar{3}1\bar{1}$	$\frac{4}{3}(1, 5, 1)$	5	5	5	$\frac{1}{3}(1, 13, 1)$	3	1	3
$\frac{1}{3}(1, 5, 1)$	1	1	111	$\frac{5}{3}(1, 1, 5)$	5	5	5	$\frac{1}{3}(1, 17, 13)$	1	5	3
$\frac{1}{3}(1, 1, 5)$	1	1	$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$	$\frac{5}{3}(1, 1, 5)$	5	5	5	$\frac{1}{3}(1, 17, 13)$	1	5	3
$\frac{1}{3}(1, 1, 5)$	1	1	111	$\frac{5}{3}(1, 5, 1)$	5	5	5	$\frac{1}{3}(1, 17, 5)$	5	1	3
$\frac{1}{3}(1, 5, 1)$	1	1	$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$	1, 3, 7	3	5	5	$\frac{1}{3}(1, 5, 17)$	5	3	1
$\frac{2}{3}(1, 5, 1)$	2	2	$2\bar{2}2$	1, 1, 7	5	5	1	$\frac{1}{3}(1, 5, 17)$	5	3	1
$\frac{2}{3}(1, 1, 5)$	2	2	$22\bar{2}$	1, 7, 1	5	1	5	$\frac{1}{3}(1, 17, 5)$	5	1	3
$\frac{2}{3}(1, 1, 5)$	2	2	$2\bar{2}2$	1, 7, 3	5	5	5	$\frac{1}{3}(1, 17, 5)$	5	1	3
$\frac{2}{3}(1, 1, 5)$	2	2	$2\bar{2}2$	1, 7, 5	5	5	5	$\frac{1}{3}(1, 17, 13)$	1	5	5

(续表)

h^i	k^i	l^i	hkl	h^i	k^i	l^i	hkl	h^i	k^i	l^i	hkl
$\frac{1}{3}(1, \overline{13}, 17)$	1	5	5	$\frac{2}{3}(2, \overline{4}, \overline{4})$	4	0	0	5, 5, 3	1	1	3
$\frac{1}{3}(1, 13, \overline{17})$	1	5	5	$\frac{1}{3}(2, 8, 2)$	2	0	2	2, 3, 3	1	1	5
$\frac{1}{3}(\overline{1}, \overline{19}, 5)$	3	3	5	$\frac{1}{3}(2, 2, 8)$	2	2	0	3, 3, 3	1	5	1
$\frac{1}{3}(1, 19, \overline{5})$	3	3	5	$\frac{1}{3}(2, 8, \overline{2})$	2	0	2	3, 3, 3	5	1	1
$\frac{1}{3}(1, \overline{5}, 19)$	3	5	3	$\frac{1}{3}(2, 2, \overline{8})$	2	2	0	3, 5, 1	3	1	5
$\frac{1}{3}(\overline{1}, 5, \overline{19})$	5	5	3	$\frac{2}{3}(2, 8, 2)$	4	0	4	3, 1, 5	3	5	1
$\frac{1}{3}(1, 1, \overline{23})$	5	5	3	$\frac{2}{3}(2, 2, 8)$	4	4	0	3, 5, 1	5	5	1
$\frac{1}{3}(\overline{1}, \overline{1}, 23)$	5	5	3	$\frac{2}{3}(2, 8, \overline{2})$	4	0	4	3, 1, 5	5	1	3
$\frac{1}{3}(1, \overline{23}, 1)$	5	3	5	$\frac{2}{3}(2, 2, \overline{8})$	4	4	0	3, 5, 1	5	3	1
$\frac{1}{3}(\overline{1}, 23, \overline{1})$	5	3	5	$\frac{1}{3}(\overline{2}, \overline{14}, 4)$	2	2	4	3, 1, 5	5	3	1
2, 2, 2	2	2	2	$\frac{1}{3}(\overline{2}, 4, 14)$	2	4	2	3, 5, 1	5	1	5
2, 0, 2	2	0	2	$\frac{1}{3}(2, \overline{4}, 14)$	2	4	2	3, 1, 5	5	3	1
2, 2, 0	2	2	0	$\frac{1}{3}(2, 14, \overline{4})$	2	2	4	3, 5, 1	5	1	5
2, 0, 2	2	0	2	$\frac{1}{3}(2, 16, 8)$	2	4	4	3, 1, 5	5	3	1
2, 2, 0	2	2	0	$\frac{1}{3}(2, 8, 16)$	2	4	4	3, 5, 1	5	1	5
2, 2, 2	2	2	2	$\frac{1}{3}(2, 8, \overline{16})$	2	4	4	3, 1, 5	5	3	1
2, 4, 0	2	0	4	$\frac{1}{3}(2, \overline{16}, 8)$	2	4	4	3, 5, 1	5	1	5
2, 0, 4	2	4	0	3, 3, 3	3	3	3	4, 0, 2	0	4	2
2, 4, 0	2	0	4	3, 3, 3	3	3	3	4, 4, 0	4	4	0
2, 0, 4	2	4	0	3, 1, 1	1	1	3	4, 0, 4	4	0	4
2, 4, 2	2	4	2	3, 1, 5	1	3	1	4, 4, 4	4	4	4
2, 2, 4	2	2	4	3, 5, 3	3	5	3	4, 4, 0	4	4	0
2, 4, 2	2	4	2	3, 5, 3	3	5	3	4, 2, 0	0	2	4
$\frac{1}{3}(2, 4, 4)$	2	0	0	3, 5, 3	3	5	3	4, 2, 0	0	2	4
$\frac{1}{3}(2, \overline{4}, \overline{4})$	2	0	0	3, 1, 1	1	1	3	4, 2, 2	4	2	2
$\frac{1}{3}(2, 4, 4)$	4	0	0	3, 1, 5	1	3	1	4, 2, 2	4	2	2
				3, 5, 3	3	5	3	$\frac{1}{3}(4, 4, \overline{2})$	0	0	2
				3, 5, 3	3	5	3	$\frac{1}{3}(4, 2, 4)$	0	2	0
				3, 5, 3	3	5	3	$\frac{1}{3}(1, 2, 2)$	0	0	2
				3, 5, 3	3	5	3	$\frac{1}{3}(4, 2, 4)$	0	2	0

(续表)

h'	k'	l'	hkl	h''	k''	l''	hkl	h'	k'	l'	hkl
$\frac{2}{3}(4, 4, 2)$			0 0 4	5, 1, 3			1 5 8	$\frac{1}{3}(5, 11, \overline{18})$			1 3 5
$\frac{2}{3}(4, \overline{2}, 4)$			0 4 0	5, $\overline{3}$, 1			$\overline{3}$ 5 1	$\frac{1}{3}(5, \overline{13}, 11)$			1 5 3
$\frac{2}{3}(4, 4, \overline{2})$			0 0 $\overline{4}$	$\overline{5}$, 1, 3			3 1 5	$\frac{1}{3}(5, 17, \overline{7})$			3 1 5
$\frac{2}{3}(4, 2, \overline{4})$			0 $\overline{4}$ 0	$\overline{5}$, 3, 1			3 5 1	$\frac{1}{3}(5, 1, 17)$			3 5 1
$\frac{1}{3}(4, 10, 8)$			0 $\overline{2}$ 4	5, 1, 3			1 5 3	$\frac{1}{3}(\overline{5}, 1, 17)$			3 5 1
$\frac{1}{3}(4, \overline{10}, 8)$			0 2 $\overline{4}$	$\frac{4}{3}(5, 1, 1)$			4 4 $\overline{4}$	$\frac{1}{3}(5, 17, 1)$			3 1 5
$\frac{1}{3}(4, 8, \overline{10})$			0 $\overline{4}$ 2	$\frac{5}{3}(5, 1, 1)$			5 5 5	$\frac{1}{3}(5, 17, \overline{1})$			5 3 3
$\frac{1}{3}(4, \overline{8}, 10)$			0 4 $\overline{2}$	$\frac{5}{3}(5, 1, 1)$			$\overline{5}$ 5 5	$\frac{1}{3}(5, 19, \overline{1})$			5 3 3
$\frac{1}{3}(4, 10, \overline{10})$			4 2 2	$\frac{1}{3}(5, 7, 5)$			1 3 1	$\frac{1}{3}(5, 19, 1)$			5 3 3
$\frac{1}{3}(4, \overline{10}, \overline{10})$			4 2 $\overline{2}$	$\frac{1}{3}(5, 5, 7)$			1 1 5	$\frac{1}{3}(5, 1, 19)$			5 3 3
$\frac{1}{3}(4, 14, 2)$			4 2 2	$\frac{1}{3}(5, 5, 7)$			1 1 3	$\frac{1}{3}(5, 1, \overline{19})$			5 3 3
$\frac{1}{3}(4, \overline{2}, \overline{14})$			4 $\overline{2}$ 2	$\frac{1}{3}(5, 11, 5)$			3 1 3	8, 0, 0			2 4 4
$\frac{1}{3}(7, 2, 14)$			4 2 $\overline{2}$	$\frac{1}{3}(5, 11, 5)$			$\overline{3}$ 1 3	$\overline{5}$, 0, 0			2 4 4
$\frac{1}{3}(4, 14, 2)$			4 $\overline{2}$ 2	$\frac{1}{3}(5, 5, 11)$			3 1 3	7, 1, 3			5 3 5
5, 5, 5			5 5 5	$\frac{1}{3}(5, 5, 11)$			$\overline{3}$ 1 3	7, $\overline{3}$, 1			5 5 3
$\frac{1}{3}(5, 1, 1)$			1 1 1	$\frac{1}{3}(5, 5, 11)$			3 3 1	7, 1, 1			1 5 5
$\frac{1}{3}(5, 1, 1)$			1 1 1	$\frac{1}{3}(5, 13, 11)$			3 3 1	7, 1, 1			1 5 5
$\frac{2}{3}(5, 1, 1)$			2 2 2	$\frac{1}{3}(5, 13, 7)$			1 5 3	$\frac{1}{3}(7, 5, 5)$			3 1 1
$\frac{2}{3}(5, 1, 1)$			2 2 2	$\frac{1}{3}(5, 7, 13)$			5 1 1	$\frac{1}{3}(7, 1, 7)$			1 3 1
$\frac{4}{3}(5, 1, 1)$			4 4 4	$\frac{1}{3}(5, 7, 13)$			5 1 1	$\frac{1}{3}(7, 7, 1)$			1 1 3
5, 1, 1			3 3 3	$\frac{1}{3}(5, 7, 13)$			5 1 1	$\frac{1}{3}(7, 1, 7)$			1 3 1
5, 1, 1			3 3 3	$\frac{1}{3}(5, 13, 7)$			5 1 1	$\frac{1}{3}(7, 5, 5)$			3 1 1
5, 3, 1			1 3 5	$\frac{1}{3}(5, 11, 13)$			1 3 5				

(续表)

$k^s \ k^t \ l^s$	hkl	$k^s \ k^t \ l^s$	hkl	$k^s \ k^t \ l^s$	hkl
$\frac{1}{3}(7, 11, \bar{1})$	3 3 1	$\frac{1}{3}(8, \bar{4}, 10)$	4 0 2	$\frac{1}{3}(11, \bar{1}, 11)$	1 5 1
$\frac{1}{3}(7, \bar{1}, 11)$	3 1 5	$\frac{1}{3}(8, 10, 4)$	4 2 0	$\frac{1}{3}(\bar{11}, \bar{11}, 1)$	1 1 5
$\frac{1}{3}(7, 1, \bar{11})$	3 1 5	$\frac{1}{3}(8, 4, 10)$	4 0 2	$\frac{1}{3}(\bar{11}, 1, \bar{11})$	1 5 1
$\frac{1}{3}(7, \bar{11}, 1)$	3 3 1	$\frac{1}{3}(8, 10, 4)$	4 2 0	$\frac{1}{3}(11, \bar{1}, 7)$	3 1 3
$\frac{1}{3}(7, 13, 5)$	1 1 5	$\frac{1}{3}(8, 14, 8)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(11, 7, \bar{7})$	3 3 1
$\frac{1}{3}(7, 5, 13)$	1 5 1	$\frac{1}{3}(8, 8, 14)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(\bar{11}, 1, 7)$	3 1 3
$\frac{1}{3}(7, 5, \bar{13})$	1 5 1	$\frac{1}{3}(8, \bar{14}, 8)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(11, 5, 5)$	1 3 3
$\frac{1}{3}(7, \bar{13}, 5)$	1 1 5	$\frac{1}{3}(8, 8, \bar{14})$	4 4 2	$\frac{1}{3}(\bar{11}, 5, 5)$	1 3 3
$\frac{1}{3}(7, 13, 13)$	5 3 3	$\frac{1}{3}(8, 16, 2)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(11, 7, 1)$	3 3 1
$\frac{1}{3}(7, \bar{13}, \bar{13})$	5 3 3	$\frac{1}{3}(8, 2, 16)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(11, 5, \bar{13})$	3 1 5
$\frac{1}{3}(7, 17, 7)$	3 5 3	$\frac{1}{3}(8, 2, \bar{16})$	4 2 4	$\frac{1}{3}(11, \bar{13}, 5)$	3 5 1
$\frac{1}{3}(7, 7, 17)$	3 3 5	$\frac{1}{3}(8, 16, 2)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(\bar{11}, 13, \bar{5})$	3 5 1
$\frac{1}{3}(7, 7, \bar{17})$	3 3 5	$\frac{1}{3}(10, 4, 8)$	2 0 4	$\frac{1}{3}(11, 5, \bar{13})$	3 1 5
$\frac{1}{3}(7, \bar{17}, 7)$	3 5 3	$\frac{1}{3}(10, 8, 4)$	2 4 0	$\frac{1}{3}(\bar{11}, \bar{11}, \bar{17})$	5 5 3
$\frac{1}{3}(7, \bar{19}, 7)$	5 1 5	$\frac{1}{3}(10, \bar{4}, 8)$	2 0 4	$\frac{1}{3}(11, 17, \bar{11})$	5 3 5
$\frac{1}{3}(7, 7, \bar{19})$	3 5 1	$\frac{1}{3}(10, 8, 4)$	2 4 0	$\frac{1}{3}(11, 11, 17)$	5 5 3
$\frac{1}{3}(7, 19, 7)$	5 1 5	$\frac{1}{3}(10, 10, 4)$	2 2 4	$\frac{1}{3}(11, 17, 11)$	5 3 5
$\frac{1}{3}(8, 2, 2)$	0 2 2	$\frac{1}{3}(10, 4, 10)$	2 4 2	$\frac{1}{3}(13, \bar{11}, \bar{5})$	5 3 1
$\frac{1}{3}(8, 2, \bar{2})$	0 2 2	$\frac{1}{3}(10, \bar{10}, \bar{4})$	2 2 4	$\frac{1}{3}(13, 7, 5)$	1 1 5
$\frac{2}{3}(5, 2, 2)$	0 4 4	$\frac{1}{3}(10, 2, 10)$	2 4 2	$\frac{1}{3}(13, 5, 7)$	1 5 1
$\frac{2}{3}(5, 2, \bar{2})$	0 4 4	$\frac{1}{3}(11, 11, \bar{1})$	1 1 5	$\frac{1}{3}(\bar{13}, \bar{7}, 5)$	1 1 5

(续表)

$h^* \ k^* \ l^*$	hkl	$h^* \ k^* \ l^*$	hkl	$h^* \ k^* \ l^*$	hkl
$\frac{1}{3}(\bar{3}, 5, \bar{7})$	1 5 7	$\frac{1}{3}(14, \bar{2}, 2)$	2 4 2	$\frac{1}{3}(17, 11, 11)$	3 5 5
$\frac{1}{2}(13, 1, 1)$	1 3 3	$\frac{1}{3}(14, \bar{2}, 4)$	2 2 4	$\frac{1}{3}(17, 11, \bar{11})$	3 5 5
$\frac{1}{3}(13, \bar{1}, \bar{1})$	1 3 3	$\frac{1}{3}(14, 4, \bar{2})$	2 4 2	$\frac{1}{3}(17, 1, 13)$	3 1 5
$\frac{1}{3}(13, \bar{5}, 11)$	5 1 3	$\frac{1}{3}(14, 8, 8)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(17, 13, \bar{1})$	5 5 1
$\frac{1}{3}(13, 5, 11)$	5 1 3	$\frac{1}{3}(14, \bar{8}, \bar{8})$	2 4 4	$\frac{1}{3}(17, \bar{1}, 13)$	5 1 5
$\frac{1}{3}(13, 11, 5)$	5 3 1	$\frac{1}{3}(16, 8, 8)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(17, \bar{5}, 1)$	1 3 5
$\frac{1}{3}(13, 13, 1)$	3 3 3	$\frac{1}{3}(16, 2, 8)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(19, 5, \bar{1})$	3 5 3
$\frac{1}{3}(13, 7, 13)$	3 5 3	$\frac{1}{3}(16, 8, 2)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(19, 1, 5)$	3 3 5
$\frac{1}{3}(13, 13, \bar{7})$	3 3 3	$\frac{1}{3}(16, 2, 8)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(19, \bar{5}, 1)$	3 5 3
$\frac{1}{3}(13, 7, \bar{13})$	3 5 3	$\frac{1}{3}(17, 1, 5)$	1 5 3	$\frac{1}{3}(19, 7, 7)$	1 5 5
$\frac{1}{2}(13, 17, 1)$	5 2 1	$\frac{1}{3}(17, 5, 1)$	1 3 5	$\frac{1}{3}(19, \bar{7}, \bar{7})$	1 3 5
$\frac{1}{3}(13, 11, \bar{1})$	5 3 1	$\frac{1}{3}(17, 7, \bar{7})$	5 3 3	$\frac{1}{3}(20, 1, 1)$	3 3 5
$\frac{1}{2}(13, 1, 17)$	5 1 5	$\frac{1}{3}(17, 7, 7)$	5 3 3	$\frac{1}{3}(23, 1, 1)$	3 5 5
$\frac{1}{3}(13, 1, 17)$	5 1 5	$\frac{1}{3}(17, 13, \bar{1})$	5 5 1		
$\frac{1}{3}(14, 2, 4)$	2 2 4	$\frac{1}{3}(17, 1, \bar{5})$	1 3 5		

(二) $(\bar{1}11)$ 孪晶衍射位置表

h'	k'	l'	hkl	h'	k'	l'	hkl	h'	k'	l'	hkl
0, 0, 6	4 4 2		1, 3, 5	1 5 3		1, 3, 1	5 1 1				
0, 6, 0	4 2 4		1, 3, 5	5 3 1		1, 3, 1	1 1 3				
0, 0, 0	4 2 4		1, 5, 3	5 1 3		1, 3, 1	3 1 1				
0, 0, 6	4 4 2	$\frac{5}{3}(1, 1, 5)$	5 5 5			1, 1, 3	5 1 1				
0, 2, 4	4 2 0	$\frac{5}{3}(1, 5, 1)$	5 5 5			1, 1, 1	1 1 1				
0, 4, 2	4 0 2	$\frac{5}{3}(1, 5, 1)$	5 5 5			$\frac{1}{3}(1, 23, 1)$	5 5 5				
0, 4, 2	4 0 2	$\frac{5}{3}(1, 5, 1)$	5 5 5			1, 1, 3	1 5 1				
0, 2, 4	0 4 4	$\frac{5}{3}(1, 1, 5)$	5 5 5			$\frac{1}{3}(\bar{1}, 7, \bar{11})$	1 5 3				
0, 4, 4	0, 4, 4	$\frac{4}{3}(1, 1, 5)$	4 4 4			$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{11}, 7)$	1 5 3				
0, 2, 2	0 2 2	$\frac{4}{3}(1, 5, 1)$	4 4 4			$\frac{1}{3}(1, 11, 7)$	1 5 3				
0, 2, 2	0 2 2	$\frac{4}{3}(1, 5, 1)$	4 4 4			$\frac{1}{3}(1, 7, 11)$	1 5 3				
$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{11}, \bar{11})$	5 1 1	$\frac{4}{3}(1, 5, 1)$	4 4 4			$\frac{1}{3}(1, 7, 11)$	1 5 3				
$\frac{1}{3}(1, 11, 11)$	5 1 1	$\frac{4}{3}(1, 5, 1)$	4 4 4			$\frac{1}{3}(1, \bar{1}, \bar{13})$	3 3 1				
1, 5, 3	3 5 5	1, 5, 1	3 3 3			$\frac{1}{3}(1, \bar{13}, 1)$	3 1 3				
1, 3, 7	3 5 5	1, 1, 5	3 3 3			$\frac{1}{3}(1, 13, 1)$	3 1 3				
1, 3, 7	3 5 5	1, 5, 1	3 3 3			$\frac{1}{3}(1, 1, 13)$	3 3 1				
1, 7, 3	3 5 5	1, 1, 5	3 3 3			$\frac{1}{3}(1, 1, 13)$	3 3 1				
1, 1, 7	5 5 1	$\frac{2}{3}(1, 1, 5)$	2 2 2			$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{5}, \bar{17})$	5 5 1				
1, 7, 1	5 7 5	$\frac{2}{3}(1, 5, 1)$	2 2 2			$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{17}, \bar{5})$	5 1 3				
1, 7, 1	5 1 5	$\frac{2}{3}(1, 5, 1)$	2 2 2			$\frac{1}{3}(1, 17, 5)$	5 1 3				
1, 1, 7	5 5 1	$\frac{2}{3}(1, 1, 5)$	2 2 2			$\frac{1}{3}(1, 5, 17)$	5 3 1				
$\frac{1}{3}(1, 7, 7)$	3 1 1	$\frac{1}{3}(1, 1, 5)$	1 1 1			$\frac{1}{3}(\bar{1}, 13, \bar{17})$	1 5 5				
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 7, 7)$	3 1 1	$\frac{1}{3}(1, 5, 1)$	1 1 1			$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{17}, 13)$	1 5 5				
1, 5, 3	5 1 3	$\frac{1}{3}(1, 5, 1)$	1 1 1			$\frac{1}{3}(1, 17, \bar{13})$	1 5 5				
1, 3, 5	5 3 1	$\frac{1}{3}(1, 5, 1)$	1 1 1			$\frac{1}{3}(1, \bar{13}, 17)$	1 5 5				
1, 3, 1	1 1 3	$\frac{1}{3}(1, 1, 5)$	1 1 1								
1, 3, 5	1 3 5	1, 1, 3	3 1 1								
1, 5, 3	1 3 5	1, 1, 3	1 3 1								

(5.4)

k^1 k^2 k^3	hkl	k^1 k^2 k^3	hkl	k^1 k^2 k^3	hkl
$\frac{1}{3}(1, 5, 19)$	3 5 3	$\frac{1}{3}(2, 8, 2)$	2 0 2	3, 5, 1	3 1 5
$\frac{1}{3}(1, 19, 5)$	3 3 5	$\frac{1}{3}(2, 2, 8)$	2 2 0	3 1 5	5 1 3
$\frac{1}{3}(1, 1\bar{9}, 5)$	3 5 3	$\frac{2}{3}(2, 8, 2)$	4 0 4	3 5 1	5 3 1
$\frac{1}{3}(1, 5, \bar{19})$	3 3 3	$\frac{2}{3}(2, 2, 8)$	4 4 0	3, 5, 1	5 3 1
$\frac{1}{3}(1, 23, 1)$	5 3 5	$\frac{2}{3}(2, 8, 2)$	4 0 4	3, 1, 5	5 1 3
$\frac{1}{3}(1, \bar{1}, 23)$	5 5 3	$\frac{2}{3}(2, 2, 8)$	4 4 0	3, 5, 1	5 1 3
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 1, \bar{23})$	5 5 3	$\frac{2}{3}(2, 8, 2)$	4 0 4	3, 1, 5	5 1 3
$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{23}, 1)$	5 3 5	$\frac{2}{3}(2, 2, 8)$	4 4 0	3, 7, 1	5 3 3
2 0 2	2 0 2	$\frac{2}{3}(2, 2, 8)$	4 4 0	3, 1, 7	5 3 5
2, 2, 0	2 2 0	$\frac{1}{3}(2, 4, \bar{14})$	2 4 2	3, 7, 1	5 3 3
2, 0, 2	2 0 2	$\frac{1}{3}(2, 14, 4)$	2 2 4	$\frac{1}{3}(4, 2, 14)$	2 2 2
2, 2, 0	2 2 0	$\frac{1}{3}(2, 14, \bar{2})$	2 2 4	$\frac{1}{3}(4, 4, 2)$	0 0 2
2, 2, 2	2 2 2	$\frac{1}{3}(2, 4, 14)$	2 4 2	$\frac{1}{3}(4, 2, 4)$	0 2 0
2, 2, 2	2 2 2	$\frac{1}{3}(2, 8, 10)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(4, 4, 2)$	0 0 2
$\frac{1}{3}(2, 4, 4)$	2 0 0	$\frac{1}{3}(2, \bar{16}, 8)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(4, 2, \bar{4})$	0 2 0
$\frac{1}{3}(2, 4, 4)$	2 0 0	$\frac{1}{3}(2, 16, 8)$	2 4 4	$\frac{2}{3}(4, 4, 2)$	0 0 4
$\frac{2}{3}(2, 4, 4)$	4 0 0	$\frac{1}{3}(2, 8, 16)$	2 4 4	$\frac{2}{3}(4, 2, 4)$	0 4 0
$\frac{2}{3}(2, 4, 4)$	4 0 0	3 3 3	3 3 3	$\frac{2}{3}(4, 4, 2)$	0 0 4
2, 4, 0	2 0 4	3 3 3	3 3 3	$\frac{2}{3}(4, 2, 2)$	0 4 0
2, 0, 4	2 4 0	3 1 1	1 1 3	4, 0, 4	4 0 4
2, 4, 0	2 0 4	3 1 1	1 3 1	4, 4, 0	4 4 0
2, 0, 4	2 4 0	3, 1, 1	1 3 1	4, 0, 4	4 0 4
2, 2, 4	2 2 4	3, 3, 3	5 1 1	4, 4, 0	4 4 0
2, 4, 2	2 4 2	3 3 3	1 1 5	2, 2, 0	0 2 4
2, 4, 2	2 4 2	3, 3, 3	1 5 1	4, 2, 0	0 2 4
2, 2, 1	2 2 4	3, 3, 3	1 5 1	2, 0, 2	0 4 2
$\frac{1}{3}(2, 2, 8)$	2 2 0	3, 3, 3	1 1 5	4, 0, 2	0 2 2
		3, 1, 5	3 5 1	4, 4, 4	4 4 4

(续表)

h'	k'	l'	hkl	h'	k'	l'	hkl	h'	k'	l'	hkl
4, 4, 4	4 4 4		5, 1, 3	3 1 5			$\frac{1}{3}(5, 1, 17)$	3 5 1			
4, 2, 2	4 2 2		5, 2, 1	3 5 1			$\frac{1}{3}(5, \overline{17}, 1)$	3 1 5			
4, 2, 2	4 2 2		5, 3, 1	1 3 5			$\frac{1}{3}(5, 17, 1)$	5 1 5			
$\frac{1}{3}(4, 10, 8)$	0 2 4		5, 1, 1	1 5 3			$\frac{1}{3}(5, 17, 1)$	5 5 1			
$\frac{1}{3}(4, 10, 8)$	0 2 4		5, 1, 3	3 1 5			$\frac{1}{3}(5, 1, 17)$	5 3 3			
$\frac{1}{3}(4, 8, \overline{10})$	0 3 2		5, 3, 1	3 5 1			$\frac{1}{3}(5, 19, 1)$	5 3 3			
$\frac{1}{3}(4, 8, 10)$	0 4 2		$\frac{1}{3}(5, 5, 7)$	1 1 3			$\frac{1}{3}(5, \overline{19}, 1)$	5 3 3			
$\frac{1}{3}(4, 10, 10)$	4 2 2		$\frac{1}{3}(5, 7, 5)$	1 3 1			$\frac{1}{3}(5, 1, \overline{19})$	5 3 3			
$\frac{1}{3}(4, \overline{10}, \overline{10})$	4 2 2		$\frac{1}{3}(5, 7, \overline{5})$	3 1 3			0, 0, 0	2 4 4			
$\frac{1}{3}(4, 2, \overline{14})$	4 2 2		$\frac{1}{3}(5, 5, 7)$	1 1 3			6, 0, 0	2 4 4			
$\frac{1}{3}(4, 14, 2)$	4 2 2		$\frac{1}{3}(5, 11, 5)$	3 1 3			$\frac{1}{3}(7, 5, 5)$	3 1 1			
$\frac{1}{3}(4, 14, 2)$	4 2 2		$\frac{1}{3}(5, 5, 11)$	3 3 1			$\frac{1}{3}(7, 7, 1)$	1 1 3			
$\frac{1}{3}(5, 1, 1)$	1 1 1		$\frac{1}{3}(5, \overline{11}, \overline{5})$	3 1 3			$\frac{1}{3}(7, 1, 7)$	1 3 1			
$\frac{1}{3}(5, 1, 1)$	1 1 1		$\frac{1}{3}(5, 5, 11)$	3 3 1			$\frac{1}{3}(7, 7, \overline{1})$	1 3 1			
$\frac{2}{3}(5, 1, 1)$	2 2 2		$\frac{1}{3}(5, 7, \overline{13})$	5 1 1			$\frac{1}{3}(7, 1, 7)$	1 3 1			
$\frac{2}{3}(5, 1, 1)$	2 2 2		$\frac{1}{3}(5, \overline{13}, 7)$	5 1 1			$\frac{1}{3}(7, 7, 1)$	1 3 1			
5, 1, 1	3 3 3		$\frac{1}{3}(5, 13, 7)$	5 1 1			$\frac{1}{3}(7, 5, 5)$	3 1 1			
5, 1, 1	3 3 3		$\frac{1}{3}(5, 7, 13)$	5 1 1			7, 1, 1	1 5 5			
$\frac{4}{3}(5, 1, 1)$	4 4 4		$\frac{1}{3}(5, 11, 13)$	1 3 5			7, 1, 1	1 5 5			
$\frac{4}{3}(5, 1, 1)$	4 4 4		$\frac{1}{3}(5, 13, 11)$	1 5 3			7, 1, 3	5 3 5			
$\frac{5}{3}(5, 1, 1)$	5 5 5		$\frac{1}{3}(5, 11, 13)$	1 3 5			7, 3, 1	5 3 5			
5, 5, 5	5, 5, 5		$\frac{1}{3}(5, 13, 11)$	1 5 3			7, 3, 1	5 3 5			
5, 5, 5	5, 5, 5		$\frac{1}{3}(5, 11, 13)$	1 3 5			$\frac{1}{3}(7, 1, \overline{11})$	3 1 3			
$\frac{5}{3}(5, 1, 1)$	5 5 5		$\frac{1}{3}(5, \overline{11}, 13)$	1 3 5			$\frac{1}{3}(7, \overline{11}, 1)$	3 3 1			

(续表)

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
$\frac{1}{3}(7, 11, \bar{1})$	3 5 1	$\frac{1}{3}(8, 10, \bar{4})$	4 2 0	$\frac{1}{3}(11, \bar{11}, 1)$	1 1 5
$\frac{1}{3}(7, \bar{1}, 11)$	3 1 3	$\frac{1}{3}(8, 4, 10)$	4 0 2	$\frac{1}{3}(11, 1, \bar{11})$	1 5 1
$\frac{1}{3}(7, 5, \bar{13})$	1 5 1	$\frac{1}{3}(8, 10, 4)$	4 2 0	$\frac{1}{3}(\bar{11}, \bar{1}, \bar{7})$	3 1 3
$\frac{1}{3}(7, \bar{13}, 5)$	1 1 5	$\frac{1}{3}(8, 14, 8)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(\bar{11}, \bar{7}, \bar{1})$	3 3 1
$\frac{1}{3}(7, 13, \bar{5})$	1 1 5	$\frac{1}{3}(8, 8, 14)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(\bar{11}, 5, 5)$	1 3 3
$\frac{1}{3}(7, 5, 13)$	1 5 1	$\frac{1}{3}(8, \bar{14}, \bar{8})$	4 2 4	$\frac{1}{3}(11, 5, 5)$	1 3 3
$\frac{1}{3}(7, 13, 13)$	5 3 3	$\frac{1}{3}(8, \bar{8}, \bar{14})$	4 4 2	$\frac{1}{3}(11, 1, 7)$	3 1 3
$\frac{1}{3}(7, \bar{13}, \bar{13})$	5 3 3	$\frac{1}{3}(8, 2, \bar{16})$	4 2 4	$\frac{1}{3}(11, 7, 1)$	3 3 1
$\frac{1}{3}(7, 7, 17)$	3 3 5	$\frac{1}{3}(8, \bar{16}, 2)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(\bar{11}, 5, \bar{13})$	3 1 5
$\frac{1}{3}(7, \bar{17}, 7)$	3 5 3	$\frac{1}{3}(8, 16, \bar{2})$	4 4 2	$\frac{1}{3}(\bar{11}, \bar{13}, 5)$	3 5 1
$\frac{1}{3}(7, 17, \bar{7})$	3 5 3	$\frac{1}{3}(8, \bar{2}, \bar{16})$	4 2 4	$\frac{1}{3}(11, 13, 5)$	3 5 1
$\frac{1}{3}(7, 7, 17)$	3 3 5	$\frac{1}{3}(10, 4, \bar{8})$	2 0 4	$\frac{1}{3}(11, 5, 13)$	3 1 5
$\frac{1}{3}(7, \bar{7}, \bar{19})$	5 5 1	$\frac{1}{3}(10, \bar{8}, 4)$	2 4 0	$\frac{1}{3}(\bar{11}, 17, 11)$	5 3 5
$\frac{1}{3}(7, \bar{19}, \bar{7})$	5 1 5	$\frac{1}{3}(10, 4, 8)$	2 0 4	$\frac{1}{3}(11, 11, 17)$	5 5 3
$\frac{1}{3}(7, 7, 19)$	5 5 1	$\frac{1}{3}(10, 8, \bar{4})$	2 4 0	$\frac{1}{3}(11, \bar{17}, \bar{11})$	5 3 5
$\frac{1}{3}(7, 19, 7)$	5 1 5	$\frac{1}{3}(10, 10, 4)$	2 2 4	$\frac{1}{3}(11, \bar{11}, \bar{17})$	5 5 3
$\frac{1}{3}(8, 2, 2)$	0 2 2	$\frac{1}{3}(10, 4, 10)$	2 4 2	$\frac{1}{3}(\bar{13}, 1, \bar{17})$	5 1 5
$\frac{2}{3}(8, \bar{2}, \bar{2})$	0 2 2	$\frac{1}{3}(10, \bar{10}, \bar{4})$	2 2 4	$\frac{1}{3}(\bar{13}, \bar{17}, 1)$	5 5 1
$\frac{2}{3}(8, 2, 2)$	0 4 4	$\frac{1}{3}(10, 4, \bar{10})$	2 4 2	$\frac{1}{3}(13, 17, 1)$	5 5 1
$\frac{2}{3}(8, \bar{2}, \bar{2})$	0 4 4	$\frac{1}{3}(11, 11, \bar{1})$	1 1 5	$\frac{1}{3}(13, \bar{1}, 17)$	5 1 5
$\frac{1}{3}(8, 4, 10)$	4 0 2	$\frac{1}{3}(11, \bar{1}, 11)$	1 5 1	$\frac{1}{3}(\bar{13}, 7, \bar{5})$	1 1 5

(续表)

$h^* \ k^* \ l^*$	hkl	$h^* \ k^* \ l^*$	hkl	$h^* \ k^* \ l^*$	hkl
$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{5}, 7)$	1 5 1	$\frac{1}{3}(14, \overline{2}, 4)$	2 2 4	$\frac{1}{3}(17, 1, 13)$	5 1 5
$\frac{1}{3}(13, 7, 5)$	1 5 5	$\frac{1}{3}(14, 4, \overline{2})$	2 4 2	$\frac{1}{3}(17, 13, 1)$	5 5 1
$\frac{1}{3}(13, 5, 7)$	1 5 1	$\frac{1}{3}(\overline{14}, 8, 8)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(17, \overline{7}, \overline{7})$	5 3 3
$\frac{1}{3}(\overline{13}, 1, 1)$	1 3 3	$\frac{1}{3}(14, 8, 8)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(17, 7, 7)$	5 3 3
$\frac{1}{3}(13, \overline{7}, \overline{1})$	1 3 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{2}, \overline{8})$	4 2 4	$\frac{1}{3}(17, 11, 11)$	3 5 5
$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{5}, \overline{11})$	5 1 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{8}, \overline{2})$	4 4 2	$\frac{1}{3}(17, 11, \overline{11})$	3 5 5
$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{11}, 5)$	5 3 1	$\frac{1}{3}(16, 2, 8)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(19, 5, 1)$	5 5 3
$\frac{1}{3}(13, 5, 11)$	5 1 3	$\frac{1}{3}(16, 8, 2)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(19, 7, 5)$	3 3 5
$\frac{1}{3}(13, 11, 5)$	5 3 1	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 5, \overline{1})$	1 3 5	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{5}, 1)$	3 5 3
$\frac{1}{3}(13, 13, 7)$	3 3 5	$\frac{1}{3}(17, \overline{1}, 5)$	1 5 3	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 1, \overline{5})$	3 3 5
$\frac{1}{3}(13, 7, \overline{13})$	3 5 3	$\frac{1}{3}(17, 5, 1)$	1 3 5	$\frac{1}{3}(19, 7, 7)$	1 5 5
$\frac{1}{3}(13, \overline{13}, \overline{7})$	3 5 3	$\frac{1}{3}(17, 1, 5)$	1 5 3	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 7, ?)$	1 5 5
$\frac{1}{3}(13, \overline{7}, \overline{13})$	3 5 3	$\frac{1}{3}(17, 1, \overline{13})$	5 1 5	$\frac{1}{3}(23, 1, ?)$	5 5 5
$\frac{1}{3}(\overline{14}, 2, \overline{4})$	2 2 4	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{13}, \overline{1})$	5 5 1		
$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{4}, 2)$	2 4 2				

(三) $(1\bar{1}1)$ 孪晶衍射位置表

h^s	k^s	l^s	hkl	h^s	k^s	l^s	hkl	h^s	k^s	l^s	hkl
0, 6, 0	4 2 4		$\bar{1}, \bar{5}, \bar{1}$	3 3 3		$\frac{1}{3}(1, 11, 7)$	1 3 3				
0, 0, 6	4 4 2		1, $\bar{1}, \bar{5}$	$\bar{3} \bar{3} \bar{3}$		$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{1}\bar{1}, 11)$	5 $\bar{1}$ 1				
0, 0, 0	4 4 2		$\bar{1}, 1, \bar{5}$	3 3 3		$\frac{1}{3}(1, \bar{1}\bar{1}, \bar{1}\bar{1})$	5 $\bar{1}$ 1				
0, 2, 0	4 2 4		1, 5, 1	$\bar{3} \bar{3} \bar{3}$		$\frac{1}{3}(1, 11, \bar{1}\bar{1})$	5 $\bar{1}$ 1				
0, 2, 4	4 2 0		$\frac{4}{3}(1, \bar{5}, \bar{1})$	4 4 4		$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{1}\bar{1}, \bar{7})$	1 3 3				
0, 4, 2	$\bar{4}$ 0 $\bar{2}$		$\frac{4}{3}(1, 1, 5)$	4 4 4		$\frac{1}{3}(1, \bar{1}\bar{1}, \bar{7})$	1 3 3				
0, 2, 4	$\bar{4}$ 2 0		$\frac{4}{3}(1, 1, 5)$	4 4 4		$\frac{1}{3}(1, 7, 11)$	1 3 3				
0, 4, 2	4 0 2		$\frac{4}{3}(1, 1, 5)$	4 $\bar{4}$ 4		$\frac{1}{3}(1, 7, 11)$	1 3 3				
0, 4, 4	0 4 4		$\frac{4}{3}(1, 5, 1)$	4 $\bar{4}$ 4		$\frac{1}{3}(1, 7, 11)$	1 3 3				
0, 4, 4	0 4 4		$\frac{4}{3}(1, 5, 1)$	$\bar{4}$ 4 4		$\frac{1}{3}(\bar{1}, 1, \bar{1}\bar{3})$	3 3 1				
0, 2, 2	0 $\bar{2}$ $\bar{2}$		$\frac{5}{3}(1, \bar{5}, \bar{1})$	5 5 5		$\frac{1}{3}(1, \bar{1}\bar{3}, 1)$	3 1 3				
0, $\bar{2}$, $\bar{2}$	0 2 2		$\frac{5}{3}(1, \bar{5}, \bar{1})$	5 5 5		$\frac{1}{3}(1, \bar{1}, \bar{1}\bar{3})$	3 3 1				
1, 7, 1	1 $\bar{1}$ 1		$\frac{5}{3}(1, 1, \bar{5})$	$\bar{5}$ $\bar{5}$ $\bar{5}$		$\frac{1}{3}(1, \bar{1}\bar{3}, 1)$	3 1 3				
$\bar{1}, 7, 1$	$\bar{1}$ 1 $\bar{1}$		$\frac{5}{3}(1, 1, \bar{5})$	$\bar{5}$ $\bar{5}$ $\bar{5}$		$\frac{1}{3}(1, \bar{1}, \bar{1}\bar{3})$	3 3 1				
1, 3, 7	1 1 3		$\frac{5}{3}(1, 1, 5)$	5 $\bar{5}$ $\bar{5}$		$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{1}\bar{3}, \bar{1})$	3 1 3				
$\bar{1}, 3, 1$	3 1 1		$\frac{5}{3}(1, 5, 1)$	5 $\bar{5}$ $\bar{5}$		$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{1}\bar{7}, \bar{5})$	5 1 5				
$\bar{1}, 3, 1$	3 1 1		1, 5, 3	1 3 5		$\frac{1}{3}(1, 5, 17)$	5 3 1				
1, 1, 3	1 3 1		$\bar{1}, 3, 5$	1 5 3		$\frac{1}{3}(1, 5, 17)$	5 3 1				
1, 1, 3	3 1 1		1, 5, 3	5 1 3		$\frac{1}{3}(1, 5, 17)$	5 3 1				
$\bar{1}, 1, 3$	3 1 1		$\bar{1}, 3, 5$	3 3 1		$\frac{1}{3}(1, 5, 17)$	5 3 1				
$\bar{1}, 3, 1$	1 3 1		$\bar{1}, 5, 3$	5 1 3		$\frac{1}{3}(1, 17, 5)$	5 1 3				
1, 3, 7	3 1 1		1, 3, 5	1 5 3		$\frac{1}{3}(1, 17, 13)$	1 5 5				
$\frac{1}{3}(1, 5, 1)$	1 1 1		$\frac{1}{3}(1, 7, 7)$	3 1 1		$\frac{1}{3}(1, 18, 17)$	1 5 5				
$\frac{1}{3}(1, 1, 5)$	1 1 1		$\frac{1}{3}(1, 7, 7)$	3 1 1		$\frac{1}{3}(1, 18, 17)$	1 5 5				
$\frac{1}{3}(1, 1, 5)$	1 1 1		1, 7, 1	5 1 5		$\frac{1}{3}(1, 19, 5)$	3 3 5				
$\frac{1}{3}(1, 5, 1)$	1 1 1		$\bar{1}, 1, 7$	5 5 1		$\frac{1}{3}(1, 17, 13)$	1 5 5				
$\frac{2}{3}(1, 5, 1)$	2 2 2		$\bar{1}, 7, 1$	5 1 5		$\frac{1}{3}(1, 19, 5)$	3 3 5				
$\frac{2}{3}(1, 1, 5)$	2 2 2		1, $\bar{1}, 7$	5 5 1		$\frac{1}{3}(1, 17, 13)$	1 5 5				
$\frac{2}{3}(1, 1, 5)$	2 2 2		$\bar{1}, 7, 1$	5 1 5		$\frac{1}{3}(1, 19, 5)$	3 3 5				
$\frac{2}{3}(1, 1, 5)$	2 2 2		1, 3, 7	3 5 5		$\frac{1}{3}(1, 5, 19)$	3 5 3				
$\frac{2}{3}(1, 5, 1)$	2 2 2		1, 3, 7	3 5 5		$\frac{1}{3}(1, 5, 19)$	3 5 3				
$\frac{2}{3}(1, 5, 1)$	2 2 2		1, 7, 3	3 5 5							

(续表)

$h^1 \ k^1 \ l^1$	hkl	$h^1 \ k^1 \ l^1$	hkl	$h^1 \ k^1 \ l^1$	hkl
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 19, 5)$	5 3 5	$\frac{2}{3}(\bar{2}, 8, \bar{2})$	3 0 3	5, 1, 1	1 1 3
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 13, 1)$	5 3 5	$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{14}, \bar{4})$	2 2 4	3, 1, 1	1 3 7
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 1, 23)$	5 5 3	$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{4}, \bar{14})$	2 4 2	3, 1, 1	1 3 1
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 1, 23)$	5 5 3	$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{4}, \bar{14})$	2 2 2	3, 3, 3	1 5 1
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 23, 1)$	5 3 5	$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{14}, \bar{4})$	2 2 4	3, 3, 3	5 1 1
$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{4}, \bar{4})$	2 0 0	$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{16}, \bar{8})$	2 4 4	3, 3, 3	1 1 5
$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{4}, \bar{4})$	2 0 0	$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{8}, \bar{16})$	2 4 4	3, 3, 3	3 1 1
$\frac{2}{3}(\bar{2}, \bar{4}, \bar{4})$	4 0 0	$\frac{1}{3}(\bar{2}, 8, 16)$	2 4 4	3, 3, 3	1 1 5
$\frac{2}{3}(\bar{2}, \bar{4}, \bar{4})$	4 0 0	$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{16}, \bar{8})$	2 4 4	3, 3, 3	1 5 1
2, 4, 0	2 0 4	2, 2, 0	2 2 0	$\frac{1}{3}(4, \bar{10}, \bar{8})$	0 2 4
2, 0, 4	2 4 0	2, 0, 2	2 0 2	$\frac{1}{3}(4, 10, 8)$	0 2 4
2, 0, 4	2 4 0	2, 0, 2	2 0 2	$\frac{1}{3}(4, \bar{8}, \bar{10})$	0 4 2
2, 4, 0	2 0 4	2, 2, 0	2 2 0	$\frac{1}{3}(4, 8, 10)$	0 2 2
2, 4, 2	2 4 2	2, 2, 2	2 2 2	$\frac{1}{3}(4, \bar{10}, 10)$	4 2 2
2, 2, 4	2 2 4	2, 2, 2	2 2 2	$\frac{1}{3}(4, 10, 10)$	4 2 2
2, 2, 4	2 2 4	3, 5, 1	5 3 1	$\frac{1}{3}(4, 14, 2)$	4 2 2
2, 4, 2	2 4 2	3, 1, 5	3 1 3	$\frac{1}{3}(4, 2, \bar{14})$	4 2 2
2, 4, 2	2 4 2	3, 5, 1	3 5 1	$\frac{1}{3}(4, \bar{2}, \bar{14})$	4 2 2
$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{8}, \bar{2})$	2 0 2	3, 1, 5	3 1 5	$\frac{1}{3}(4, 2, 14)$	4 2 2
$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{2}, \bar{8})$	2 2 0	3, 5, 1	3 5 1	$\frac{1}{3}(4, \bar{2}, \bar{14})$	4 2 2
$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{2}, \bar{8})$	2 2 0	3, 1, 5	3 1 5	$\frac{1}{3}(4, 14, 2)$	4 2 2
$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{2}, \bar{8})$	2 2 0	3, 5, 1	3 5 1	$\frac{1}{3}(4, \bar{14}, \bar{2})$	4 2 2
$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{8}, \bar{2})$	2 0 2	3, 1, 5	3 1 5	$\frac{1}{3}(4, 1, \bar{2})$	0 0 2
$\frac{2}{3}(\bar{2}, \bar{8}, \bar{2})$	4 0 4	3, 5, 1	3 5 1	$\frac{1}{3}(4, \bar{1}, \bar{2})$	0 0 2
$\frac{2}{3}(\bar{2}, \bar{2}, \bar{8})$	4 4 0	3, 1, 7	3 1 7	$\frac{1}{3}(4, 2, 4)$	0 2 0
$\frac{2}{3}(\bar{2}, \bar{2}, \bar{8})$	4 4 0	3, 1, 7	3 1 7	$\frac{1}{3}(4, 4, 2)$	0 0 2
$\frac{2}{3}(\bar{2}, \bar{2}, \bar{8})$	4 4 0	3, 7, 1	3 7 1	$\frac{1}{3}(4, 2, 4)$	0 2 0
$\frac{2}{3}(\bar{2}, \bar{2}, \bar{8})$	4 4 0	3, 7, 1	3 7 1	$\frac{2}{3}(4, \bar{4}, \bar{2})$	0 0 4
$\frac{2}{3}(\bar{2}, \bar{2}, \bar{8})$	4 4 0	3, 3, 3	3 3 3		
$\frac{2}{3}(\bar{2}, \bar{2}, \bar{8})$	4 4 0	3, 3, 3	3 3 3		

(续表)

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
$\frac{2}{3}(4, 2, 1)$	0 4 0	$\frac{1}{3}(5, \overline{13}, \overline{11})$	1 5 3	$\frac{5}{3}(5, 1, 1)$	5 5 5
$\frac{2}{3}(4, 4, 2)$	0 0 $\overline{4}$	$\frac{1}{3}(5, \overline{11}, \overline{13})$	$\overline{1}$ 3 5	5, 5, 5	5 5 5
$\frac{2}{3}(4, 2, 4)$	0 $\overline{4}$ 0	$\frac{1}{3}(5, \overline{13}, 7)$	5 1 1	5, 3, 1	1 3 5
4, 4, 0	4 4 0	$\frac{1}{3}(5, 13, 11)$	1 5 3	5, 1, 3	3 1 5
4, 0, 4	$\overline{4}$ 0 4	$\frac{1}{3}(5, \overline{17}, \overline{1})$	3 1 5	5, 2, 1	3 5 1
4, 0, 4	4 0 $\overline{4}$	$\frac{1}{3}(5, \overline{1}, \overline{17})$	3 5 1	5, 3, 1	3 5 1
4, 4, 0	$\overline{4}$ $\overline{4}$ 0	$\frac{1}{3}(5, \overline{1}, \overline{17})$	3 5 1	5, 2, 1	1 3 5
4, 2, 0	0 2 4	$\frac{1}{3}(5, 1, 17)$	3 5 1	5, 1, 3	1 5 3
4, 2, 0	0 2 $\overline{4}$	$\frac{1}{3}(5, 1, 17)$	3 5 1	5, 1, 3	3 1 5
4, 0, 2	0 $\overline{4}$ 2	$\frac{1}{3}(5, 17, 1)$	3 1 5	6, 0, 0	2 4 4
4, 0, 2	0 4 2	$\frac{1}{3}(5, 17, 1)$	3 1 5	6, 0, 0	2 4 4
4, 4, 4	4 4 4	$\frac{1}{3}(6, \overline{19}, 1)$	5 3 3	$\frac{1}{3}(7, 1, 11)$	3 1 3
4, 4, 4	$\overline{4}$ $\overline{4}$ $\overline{4}$	$\frac{1}{3}(5, 1, \overline{19})$	5 3 3	$\frac{1}{3}(7, \overline{11}, \overline{1})$	3 3 1
4, 2, 2	4 2 2	$\frac{1}{3}(5, 1, 19)$	5 3 3	$\frac{1}{3}(7, 1, \overline{11})$	3 1 3
$\frac{1}{3}(5, 7, 5)$	1 3 1	$\frac{1}{3}(5, 19, 1)$	5 3 3	$\frac{1}{3}(7, 11, 1)$	3 3 1
$\frac{1}{3}(5, 5, 7)$	$\overline{1}$ 1 3	$\frac{1}{3}(5, 7, 1)$	1 1 1	$\frac{1}{3}(7, 13, 5)$	1 1 5
$\frac{1}{3}(5, 5, 7)$	1 $\overline{1}$ 3	$\frac{1}{3}(5, 1, 1)$	1 1 1	$\frac{1}{3}(7, 5, \overline{13})$	1 5 1
$\frac{1}{3}(5, 7, 5)$	$\overline{1}$ 3 $\overline{1}$	$\frac{2}{3}(5, 1, 1)$	2 2 2	$\frac{1}{3}(7, 5, 13)$	1 5 1
$\frac{1}{3}(5, \overline{11}, 5)$	3 1 3	$\frac{2}{3}(5, 1, 1)$	2 2 2	$\frac{1}{3}(7, 13, 5)$	1 1 5
$\frac{1}{3}(5, 5, 11)$	3 3 1	5, 1, 1	3 3 3	$\frac{1}{3}(7, \overline{13}, 13)$	5 3 3
$\frac{1}{3}(5, 11, 5)$	3 1 3	5, 1, 1	3 3 3	$\frac{1}{3}(7, 13, \overline{13})$	5 3 3
$\frac{1}{3}(5, 5, \overline{11})$	3 3 $\overline{1}$	$\frac{4}{3}(5, 1, 1)$	4 4 4	$\frac{1}{3}(7, \overline{17}, \overline{7})$	3 5 3
$\frac{1}{3}(5, 7, \overline{13})$	5 1 1	$\frac{4}{3}(5, 1, 1)$	4 4 4	$\frac{1}{3}(7, 7, \overline{17})$	3 3 5
$\frac{1}{3}(5, 7, 13)$	5 1 1	5, 5, 5	5 5 5	$\frac{1}{3}(7, 7, 17)$	3 3 5
$\frac{1}{3}(5, 13, 7)$	5 1 1	$\frac{5}{3}(5, 1, 1)$	5 5 5		

(续表)

[illegible]

(续表)

k^1, k^2, k^3	hkl	k^1, k^2, k^3	hkl	k^1, k^2, k^3	hkl
$\frac{1}{3}(13, 7, 5)$	$\overline{1} \overline{1} 5$	$\frac{1}{3}(14, \overline{8}, 8)$	$2 \ 4 \ 4$	$\frac{1}{3}(17, 1, \overline{13})$	$5 \ \overline{1} \ 5$
$\frac{1}{3}(13, 5, 7)$	$\overline{1} \ 5 \ 1$	$\frac{1}{3}(\overline{14}, 8, \overline{8})$	$2 \ 4 \ 4$	$\frac{1}{3}(17, 13, \overline{1})$	$5 \ 5 \ 1$
$\frac{1}{3}(13, 7, 1)$	$\overline{1} \ 5 \ 3$	$\frac{1}{3}(16, 2, 8)$	$4 \ 2 \ \overline{4}$	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{7}, 7)$	$5 \ 3 \ 3$
$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{5}, 11)$	$5 \ 1 \ 5$	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{8}, 2)$	$4 \ 4 \ \overline{2}$	$\frac{1}{3}(17, 7, 7)$	$5 \ 3 \ 3$
$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{11}, 5)$	$5 \ 3 \ \overline{1}$	$\frac{1}{3}(16, 2, 8)$	$4 \ 2 \ 4$	$\frac{1}{3}(17, 11, \overline{11})$	$3 \ 5 \ 5$
$\frac{1}{3}(13, 5, \overline{11})$	$5 \ \overline{1} \ 3$	$\frac{1}{3}(16, 8, 2)$	$\overline{4} \ \overline{4} \ 2$	$\frac{1}{3}(17, 11, 11)$	$3 \ \overline{5} \ 5$
$\frac{1}{3}(13, 11, 5)$	$5 \ 3 \ 1$	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 5, 1)$	$1 \ 3 \ 5$	$\frac{1}{3}(19, 7, 7)$	$1 \ 5 \ 5$
$\frac{1}{3}(13, \overline{13}, 7)$	$3 \ 3 \ 5$	$\frac{1}{3}(17, 5, \overline{1})$	$\overline{1} \ 3 \ 5$	$\frac{1}{3}(19, 7, \overline{7})$	$\overline{1} \ 5 \ 5$
$\frac{1}{3}(13, 7, 13)$	$3 \ 5 \ 3$	$\frac{1}{3}(17, 1, 5)$	$1 \ 5 \ 3$	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 1, 5)$	$3 \ 3 \ 5$
$\frac{1}{3}(\overline{13}, 13, \overline{7})$	$\overline{3} \ 3 \ 3$	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 5, 1)$	$1 \ 3 \ 5$	$\frac{1}{3}(19, \overline{5}, \overline{1})$	$3 \ 5 \ 3$
$\frac{1}{3}(\overline{13}, 7, \overline{13})$	$\overline{3} \ 5 \ 3$	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{1}, 5)$	$1 \ 5 \ 3$	$\frac{1}{3}(19, 1, 5)$	$3 \ 3 \ 5$
$\frac{1}{3}(\overline{14}, 2, 4)$	$2 \ 2 \ \overline{4}$	$\frac{1}{3}(17, \overline{1}, \overline{13})$	$5 \ 1 \ 5$	$\frac{1}{3}(19, 5, 1)$	$5 \ 5 \ 3$
$\frac{1}{3}(14, 4, \overline{2})$	$2 \ 4 \ 2$	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{1}, 13)$	$5 \ 1 \ 5$	$\frac{1}{3}(23, 1, \overline{1})$	$3 \ 3 \ 5$
$\frac{1}{3}(14, \overline{2}, \overline{4})$	$2 \ \overline{2} \ 4$	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{13}, 1)$	$5 \ 5 \ \overline{1}$	$\frac{1}{3}(23, 1, 1)$	$3 \ 5 \ 5$
$\frac{1}{3}(14, 4, 2)$	$2 \ 4 \ 2$				

(四) $(11\bar{1})$ 孪晶衍射位置表

[illegible]

(续表)

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
$\frac{1}{3}(\overline{1}, \overline{19}, \overline{5})$	$\overline{5} \overline{3} \overline{5}$	$\frac{2}{3}(2, 2, \overline{8})$	$4 \ 4 \ 0$	$3, 1, 7$	$\overline{5} \ \overline{3} \ \overline{5}$
$\frac{1}{3}(1, 19, 5)$	$3 \ 3 \ 3$	$\frac{2}{3}(2, 8, \overline{2})$	$4 \ 0 \ 4$	$3, 3, \overline{8}$	$3 \ 3 \ \overline{3}$
$\frac{1}{3}(1, 5, 19)$	$\overline{3} \ \overline{5} \ \overline{3}$	$\frac{2}{3}(2, \overline{2}, 8)$	$\overline{4} \ \overline{4} \ 0$	$\overline{3}, \overline{8}, 3$	$\overline{3} \ \overline{3} \ 3$
$\frac{1}{3}(\overline{1}, \overline{1}, \overline{23})$	$\overline{5} \ \overline{5} \ \overline{3}$	$\frac{1}{3}(2, \overline{4}, \overline{14})$	$2 \ 4 \ 2$	$\overline{3}, \overline{1}, \overline{1}$	$1 \ \overline{1} \ 3$
$\frac{1}{3}(1, \overline{23}, \overline{1})$	$\overline{5} \ 3 \ 5$	$\frac{1}{3}(2, \overline{14}, \overline{4})$	$\overline{2} \ 2 \ 4$	$\overline{3}, 1, 7$	$1 \ 3 \ 1$
$\frac{1}{3}(1, 23, 1)$	$5 \ \overline{3} \ \overline{5}$	$\frac{1}{3}(2, 14, 4)$	$2 \ 2 \ \overline{4}$	$3, 1, 1$	$\overline{1} \ 1 \ \overline{3}$
$\frac{1}{3}(1, 1, 23)$	$5 \ 5 \ 3$	$\frac{1}{3}(2, 4, 14)$	$\overline{2} \ 4 \ \overline{2}$	$3, \overline{1}, \overline{1}$	$1 \ 3 \ \overline{1}$
$\frac{1}{3}(\overline{2}, 4, \overline{4})$	$2 \ 0 \ 0$	$\frac{1}{3}(\overline{2}, \overline{8}, \overline{16})$	$2 \ 4 \ 4$	$\overline{3}, \overline{3}, \overline{3}$	$1 \ 1 \ \overline{5}$
$\frac{1}{3}(2, \overline{4}, 4)$	$\overline{2} \ 0 \ 0$	$\frac{1}{3}(2, \overline{16}, 8)$	$2 \ 4 \ \overline{4}$	$3, \overline{3}, 3$	$\overline{1} \ \overline{5} \ 1$
$\frac{2}{3}(2, 4, \overline{4})$	$4 \ 0 \ 0$	$\frac{1}{3}(2, 8, 16)$	$\overline{2} \ 4 \ \overline{4}$	$3, 3, 3$	$1 \ 3 \ 1$
$\frac{2}{3}(2, \overline{4}, 4)$	$\overline{4} \ 0 \ 0$	$\frac{1}{3}(2, 8, 16)$	$\overline{2} \ 4 \ \overline{4}$	$\frac{1}{3}(\overline{4}, \overline{10}, \overline{8})$	$0 \ 2 \ 4$
$2, 0, 4$	$2 \ 4 \ 0$	$2, 0, 2$	$2 \ 0 \ 2$	$\frac{1}{3}(4, 10, 8)$	$0 \ \overline{2} \ 4$
$\overline{2}, \overline{4}, 0$	$\overline{2} \ 0 \ 4$	$2, \overline{2}, 0$	$\overline{2} \ 2 \ 0$	$\frac{1}{3}(4, 8, 10)$	$0 \ 4 \ 2$
$2, 4, 0$	$2 \ 0 \ \overline{4}$	$2, 2, 0$	$2 \ \overline{2} \ 0$	$\frac{1}{3}(4, 8, 10)$	$0 \ \overline{4} \ \overline{2}$
$\overline{2}, 0, 4$	$\overline{2} \ \overline{4} \ 0$	$2, 0, 2$	$\overline{2} \ 0 \ \overline{2}$	$\frac{1}{3}(4, 10, \overline{10})$	$4 \ 2 \ \overline{2}$
$\overline{2}, \overline{2}, \overline{4}$	$\overline{2} \ 2 \ 4$	$2, 2, \overline{2}$	$2 \ 2 \ \overline{2}$	$\frac{1}{3}(\overline{4}, \overline{10}, 10)$	$\overline{4} \ \overline{2} \ 2$
$2, 4, 2$	$2 \ 4 \ 2$	$\overline{2}, \overline{2}, 2$	$\overline{2} \ 2 \ 2$	$\frac{1}{3}(\overline{4}, 2, \overline{14})$	$4 \ 2 \ 2$
$\overline{2}, 4, 2$	$\overline{2} \ 4 \ \overline{2}$	$\overline{2}, 1, 5$	$5 \ 1 \ 3$	$\frac{1}{3}(4, \overline{14}, 2)$	$\overline{4} \ 2 \ 2$
$2, 2, 4$	$2 \ 2 \ 4$	$3, 5, 1$	$5 \ 3 \ 1$	$\frac{1}{3}(4, 14, \overline{2})$	$4 \ 2 \ \overline{2}$
$\frac{1}{3}(2, 2, 8)$	$2 \ 2 \ 0$	$3, 5, \overline{1}$	$3 \ 1 \ \overline{5}$	$\frac{1}{3}(4, \overline{2}, 14)$	$\overline{4} \ 2 \ 2$
$\frac{1}{3}(\overline{2}, \overline{8}, 2)$	$\overline{2} \ 0 \ 2$	$3, 1, 5$	$3 \ 5 \ 1$	$\frac{1}{3}(4, 2, 2)$	$0 \ 0 \ 2$
$\frac{1}{3}(2, 8, \overline{2})$	$2 \ 0 \ \overline{2}$	$3, \overline{5}, 1$	$5 \ \overline{5} \ 1$	$\frac{1}{3}(4, \overline{2}, \overline{4})$	$0 \ 2 \ 0$
$\frac{1}{3}(\overline{2}, \overline{2}, 8)$	$\overline{2} \ \overline{2} \ 0$	$3, 1, 7$	$5 \ 3 \ 5$	$\frac{1}{3}(4, 4, 2)$	$0 \ 0 \ \overline{2}$
$\frac{2}{3}(2, 8, 2)$	$4 \ 0 \ 4$	$3, 7, \overline{1}$	$3 \ 5 \ \overline{3}$	$\frac{1}{3}(\overline{4}, 2, 4)$	$0 \ \overline{2} \ 0$
		$3, 7, 1$	$5 \ 5 \ 3$		

(续表)

$h^1 \ k^1 \ l^1$	hkl	$h^2 \ k^2 \ l^2$	hkl	$h^3 \ k^3 \ l^3$	hkl
$\frac{2}{3}(4, 4, 2)$	0 0 4	$\frac{1}{3}(5, 13, 7)$	5 7 1	5, 3, 1	3 5 1
$\frac{2}{3}(4, 2, 4)$	0 4 0	$\frac{1}{3}(5, 7, 13)$	5 1 1	5, 3, 1	1 3 5
$\frac{2}{3}(4, 4, 2)$	0 0 4	$\frac{1}{3}(5, 11, 13)$	1 3 5	5, 1, 3	1 5 3
$\frac{2}{3}(4, 2, 4)$	0 4 0	$\frac{1}{3}(5, 13, 1)$	1 5 3	5, 1, 3	3 1 5
4, 0, 4	4 0 4	$\frac{1}{3}(5, 13, 11)$	1 5 3	5, 3, 1	3 5 1
4, 4, 0	4 4 0	$\frac{1}{3}(5, 11, 13)$	1 3 5	$\frac{4}{3}(5, 1, 1)$	4 4 4
4, 0, 4	4 0 4	$\frac{1}{3}(5, 11, 13)$	1 3 5	$\frac{4}{3}(5, 1, 1)$	4 4 4
4, 2, 0	0 2 4	$\frac{1}{3}(5, 1, 17)$	3 5 1	$\frac{5}{3}(5, 1, 1)$	5 5 5
4, 2, 0	0 2 4	$\frac{1}{3}(5, 17, 1)$	3 1 5	$\frac{5}{3}(5, 1, 1)$	5 5 5
4, 0, 2	0 4 2	$\frac{1}{3}(5, 17, 1)$	3 1 5	6, 0, 0	2 4 4
4, 0, 2	0 4 2	$\frac{1}{3}(5, 17, 1)$	3 1 5	6, 0, 0	2 4 4
4, 4, 4	4 4 4	$\frac{1}{3}(5, 1, 17)$	3 5 1	$\frac{1}{3}(7, 1, 11)$	3 1 3
4, 4, 4	4 4 4	$\frac{1}{3}(5, 1, 19)$	5 3 3	$\frac{1}{3}(7, 11, 1)$	3 3 1
4, 2, 2	4 2 2	$\frac{1}{3}(5, 1, 19)$	5 3 3	$\frac{1}{3}(7, 11, 1)$	3 3 1
4, 2, 2	4 2 2	$\frac{1}{3}(5, 19, 1)$	5 3 3	$\frac{1}{3}(7, 11, 1)$	3 3 1
$\frac{1}{3}(5, 5, 7)$	1 1 3	$\frac{1}{3}(5, 19, 1)$	5 3 3	$\frac{1}{3}(7, 1, 11)$	3 1 3
$\frac{1}{3}(5, 7, 5)$	1 3 1	$\frac{1}{3}(5, 19, 1)$	5 3 3	$\frac{1}{3}(7, 5, 13)$	1 5 1
$\frac{1}{3}(5, 7, 5)$	1 3 1	$\frac{1}{3}(5, 1, 19)$	1 1 1	$\frac{1}{3}(7, 13, 13)$	5 3 3
$\frac{1}{3}(5, 5, 7)$	1 1 3	$\frac{1}{3}(5, 1, 1)$	1 1 1	$\frac{1}{3}(7, 13, 13)$	5 3 3
$\frac{1}{3}(5, 11, 3)$	3 1 5	$\frac{2}{3}(5, 1, 1)$	2 2 2	$\frac{1}{3}(7, 7, 17)$	3 3 5
$\frac{1}{3}(5, 5, 11)$	3 3 1	$\frac{2}{3}(5, 1, 1)$	2 2 2	$\frac{1}{3}(7, 7, 17)$	3 3 5
$\frac{1}{3}(5, 11, 5)$	3 1 3	5, 1, 1	3 3 3	$\frac{1}{3}(7, 7, 17)$	3 3 5
$\frac{1}{3}(5, 5, 11)$	3 3 1	5, 1, 1	3 3 3	$\frac{1}{3}(7, 17, 7)$	3 5 3
$\frac{1}{3}(5, 7, 13)$	5 1 1	5, 5, 5	5 5 5		
$\frac{1}{3}(5, 13, 7)$	5 1 1	5, 5, 5	5 5 5		
		5, 1, 3	3 1 5		

(续表)

h^1, h^2, l^3	$h^1 l^1$	h^1, h^2, l^3	$h^1 l^1$	h^1, h^2, l^3	$h^1 l^1$
$\frac{1}{3}(7, 17, 7)$	3 5 3	$\frac{1}{3}(8, 8, \overline{14})$	4 4 2	$\frac{1}{3}(11, 5, 13)$	3 1 5
$\frac{1}{3}(7, 19, 7)$	5 1 5	$\frac{1}{3}(8, \overline{14}, 8)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(11, 7, 11)$	5 3 5
$\frac{1}{3}(7, 7, \overline{19})$	5 5 1	$\frac{1}{3}(8, 2, 16)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(11, \overline{11}, \overline{17})$	5 3 3
$\frac{1}{3}(\overline{7}, \overline{19}, 7)$	5 1 5	$\frac{1}{3}(8, \overline{16}, 2)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(11, 11, \overline{17})$	5 5 3
$\frac{1}{3}(7, 7, 19)$	5 5 1	$\frac{1}{3}(8, 16, 2)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(11, 11, 1)$	1 1 5
$\frac{1}{3}(7, 5, 5)$	3 1 1	$\frac{1}{3}(8, 2, 16)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(11, 1, 11)$	1 5 1
$\frac{1}{3}(7, 7, \overline{1})$	1 1 3	$\frac{1}{3}(8, 2, 2)$	0 2 2	$\frac{1}{3}(11, \overline{11}, \overline{1})$	5 5 5
$\frac{1}{3}(7, 1, 7)$	1 3 1	$\frac{1}{3}(8, 2, 2)$	0 2 2	$\frac{1}{3}(11, 1, 11)$	5 5 1
$\frac{1}{3}(7, 7, 1)$	1 1 3	$\frac{1}{3}(8, 2, 2)$	0 4 4	$\frac{1}{3}(11, 1, 7)$	3 5 3
$\frac{1}{3}(7, 1, 7)$	1 3 1	$\frac{1}{3}(8, 2, 2)$	0 4 4	$\frac{1}{3}(11, 7, \overline{1})$	3 3 1
$\frac{1}{3}(7, 5, 5)$	3 1 1	$\frac{1}{3}(10, \overline{4}, 8)$	2 0 4	$\frac{1}{3}(11, 5, 5)$	1 3 3
7, 1, 1	1 5 5	$\frac{1}{3}(10, 8, \overline{4})$	2 4 0	$\frac{1}{3}(11, \overline{5}, 5)$	1 3 3
7, 1, 1	1 5 5	$\frac{1}{3}(10, 8, 4)$	2 4 0	$\frac{1}{3}(11, 1, 7)$	3 1 3
7, 1, 3	5 3 5	$\frac{1}{3}(10, 4, 8)$	2 0 4	$\frac{1}{3}(11, 7, 1)$	5 3 1
7, 3, 1	5 5 3	$\frac{1}{3}(10, 10, \overline{4})$	2 2 4	$\frac{1}{3}(13, 1, 17)$	5 1 5
7, 1, 3	5 3 5	$\frac{1}{3}(10, 4, 10)$	2 4 2	$\frac{1}{3}(13, \overline{17}, \overline{1})$	5 5 1
7 3 1	5 3 3	$\frac{1}{3}(10, \overline{10}, 4)$	2 2 4	$\frac{1}{3}(13, 17, 1)$	5 5 1
$\frac{1}{3}(8, 4, \overline{10})$	4 0 2	$\frac{1}{3}(10, 4, 10)$	2 4 2	$\frac{1}{3}(13, 1, 17)$	5 1 5
$\frac{1}{3}(8, \overline{10}, 4)$	4 2 0	$\frac{1}{3}(11, \overline{5}, \overline{13})$	3 1 5	$\frac{1}{3}(13, 7, 5)$	1 1 5
$\frac{1}{3}(8, 4, 10)$	4 0 2	$\frac{1}{3}(11, \overline{13}, \overline{5})$	3 5 1	$\frac{1}{3}(13, 5, 7)$	1 5 1
$\frac{1}{3}(8, 10, \overline{4})$	4 2 0	$\frac{1}{3}(11, 13, 5)$	3 5 1	$\frac{1}{3}(13, 7, 5)$	1 1 5
$\frac{1}{3}(8, 8, 14)$	4 4 2				
$\frac{1}{3}(8, 14, 8)$	4 2 4				

(续表)

k^1 k^2 k^3	hkl	k^1 k^2 k^3	hkl	k^1 k^2 k^3	hkl
$\frac{1}{3}(13, \bar{5}, 7)$	$\bar{1} \ 5 \ \bar{1}$	$\frac{1}{3}(14, \bar{4}, 2)$	$\bar{2} \ 4 \ \bar{2}$	$\frac{1}{3}(17, \bar{1}, 13)$	$\bar{5} \ 1 \ \bar{5}$
$\frac{1}{3}(13, \bar{1}, 1)$	$\bar{1} \ \bar{3} \ 3$	$\frac{1}{3}(14, 8, \bar{8})$	$\bar{2} \ 4 \ \bar{1}$	$\frac{1}{3}(17, \bar{13}, 1)$	$\bar{5} \ \bar{5} \ \bar{1}$
$\frac{1}{3}(13, 1, \bar{1})$	$\bar{1} \ 3 \ \bar{3}$	$\frac{1}{3}(14, 8, 8)$	$\bar{2} \ \bar{4} \ 4$	$\frac{1}{3}(\bar{17}, 7, \bar{7})$	$\bar{5} \ 3 \ 3$
$\frac{1}{3}(13, 5, 11)$	$\bar{5} \ \bar{1} \ 3$	$\frac{1}{3}(\bar{16}, 2, \bar{8})$	$4 \ \bar{2} \ 4$	$\frac{1}{3}(\bar{17}, \bar{11}, 11)$	$3 \ \bar{5} \ 5$
$\frac{1}{3}(13, 11, 5)$	$\bar{5} \ 3 \ 1$	$\frac{1}{3}(\bar{16}, 8, \bar{2})$	$4 \ \bar{1} \ 2$	$\frac{1}{3}(17, 11, \bar{11})$	$8 \ 5 \ \bar{5}$
$\frac{1}{3}(13, \bar{3}, 11)$	$\bar{3} \ 1 \ \bar{5}$	$\frac{1}{3}(16, \bar{2}, 8)$	$\bar{4} \ 2 \ 4$	$\frac{1}{3}(19, 7, 7)$	$1 \ 5 \ \bar{5}$
$\frac{1}{3}(13, \bar{11}, 5)$	$\bar{3} \ 3 \ \bar{1}$	$\frac{1}{3}(16, 8, 2)$	$\bar{4} \ 4 \ 2$	$\frac{1}{3}(\bar{19}, \bar{7}, 7)$	$\bar{1} \ \bar{5} \ 5$
$\frac{1}{3}(13, 13, 7)$	$3 \ 3 \ \bar{5}$	$\frac{1}{3}(17, \bar{5}, 1)$	$1 \ \bar{3} \ \bar{5}$	$\frac{1}{3}(\bar{19}, \bar{1}, \bar{5})$	$3 \ \bar{3} \ \bar{5}$
$\frac{1}{3}(13, 7, 13)$	$3 \ 5 \ \bar{3}$	$\frac{1}{3}(17, 1, 5)$	$1 \ \bar{5} \ 3$	$\frac{1}{3}(19, 5, 1)$	$3 \ \bar{5} \ 3$
$\frac{1}{3}(\bar{13}, \bar{13}, 7)$	$\bar{3} \ \bar{3} \ 5$	$\frac{1}{3}(17, 5, 1)$	$\bar{1} \ 3 \ \bar{5}$	$\frac{1}{3}(19, 1, 5)$	$\bar{3} \ 3 \ \bar{5}$
$\frac{1}{3}(\bar{13}, \bar{7}, 13)$	$\bar{3} \ \bar{5} \ 3$	$\frac{1}{3}(17, 1, 5)$	$1 \ 5 \ 3$	$\frac{1}{3}(19, \bar{5}, \bar{1})$	$\bar{3} \ \bar{5} \ \bar{1}$
$\frac{1}{3}(14, \bar{2}, 4)$	$2 \ \bar{2} \ 4$	$\frac{1}{3}(17, 7, 7)$	$\bar{5} \ 3 \ \bar{5}$	$\frac{1}{3}(23, \bar{1}, 1)$	$\bar{3} \ \bar{5} \ \bar{3}$
$\frac{1}{3}(\bar{14}, 4, 2)$	$\bar{2} \ \bar{4} \ 2$	$\frac{1}{3}(\bar{17}, 1, \bar{13})$	$\bar{5} \ \bar{1} \ \bar{5}$	$\frac{1}{3}(\bar{23}, 1, \bar{1})$	$3 \ \bar{5} \ \bar{5}$
$\frac{1}{3}(14, 2, 4)$	$2 \ 2 \ \bar{4}$	$\frac{1}{3}(\bar{17}, 13, \bar{1})$	$\bar{5} \ \bar{5} \ 1$		

(五) (112) 孪晶衍射位置表

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
0, 4, 2	0 4 2	$\frac{1}{3}(1, 10, 5)$	2 1 3	$\frac{1}{3}(1, 20, 7)$	4 8 5
0, 1, 1	1 0 1	1, 2, 1	2 1 1	$\frac{1}{3}(1, 4, 19)$	4 5 1
0, 3, 3	1 4 1	1, 2, 3	2 1 3	1, 0, 7	4 5 3
0, 5, 1	1 4 3	$\frac{1}{3}(1, 2, 11)$	2 2 1	1, 8, 1	4 5 5
0, 2, 4	2 4 0	1, 2, 3	2 3 1	$\frac{1}{3}(1, 11, 16)$	5 1 4
0, 3, 0	2 4 4	1, 2, 3	2 3 1	1, 5, 4	5 1 4
0, 1, 5	3 4 1	$\frac{1}{3}(1, 14, 1)$	2 5 3	1, 1, 6	5 3 2
0, 7, 1	3 4 5	1, 6, 1	2 5 5	1, 7, 20	5 3 4
0, 0, 6	4 4 2	1, 2, 5	2 5 1	$\frac{1}{3}(1, 1, 23)$	5 5 2
0, 1, 7	5 4 3	$\frac{1}{3}(1, 10, 13)$	2 5 1	1, 1, 6	5 5 4
$\frac{1}{3}(1, 8, 5)$	0 5 1	1, 6, 1	2 5 3	$\frac{1}{3}(2, 2, 10)$	2 2 2
1, 4, 3	0 5 1	$\frac{1}{3}(1, 22, 1)$	2 5 5	$\frac{1}{3}(2, 10, 2)$	2 2 2
$\frac{1}{3}(1, 16, 7)$	0 5 3	$\frac{1}{3}(1, 5, 10)$	3 1 2	2, 2, 2	2 2 2
1, 0, 1	0 5 1	1, 3, 2	3 1 2	$\frac{1}{3}(2, 1, 7)$	1 2 1
$\frac{1}{3}(1, 1, 4)$	1 1 0	1, 3, 4	3 1 4	2, 1, 1	1 2 1
1, 1, 0	1 1 0	$\frac{1}{3}(1, 13, 3)$	3 1 4	$\frac{1}{3}(2, 7, 1)$	1 2 1
1, 1, 2	1 1 2	$\frac{1}{3}(1, 1, 14)$	3 3 2	$\frac{1}{3}(2, 5, 5)$	1 2 1
$\frac{1}{3}(1, 7, 2)$	1 1 2	$\frac{1}{3}(1, 17, 4)$	3 3 4	2, 1, 2	1 2 3
$\frac{1}{3}(1, 5, 8)$	1 3 0	$\frac{1}{3}(1, 7, 16)$	3 5 0	$\frac{1}{3}(2, 11, 1)$	1 2 3
$\frac{1}{3}(1, 13, 2)$	1 3 2	1, 1, 6	3 5 2	$\frac{1}{3}(2, 1, 11)$	3 2 1
1, 3, 2	1 3 2	1, 7, 0	3 5 4	2, 3, 1	3 2 1
1, 5, 0	1 3 4	$\frac{1}{3}(1, 8, 13)$	4 1 5	2, 1, 3	3 2 1
$\frac{1}{3}(1, 4, 1)$	0 1 1	1, 4, 5	4 1 5	$\frac{1}{3}(2, 5, 13)$	3 2 3
1, 3, 4	1 5 0	1, 4, 5	4 1 5	$\frac{1}{3}(2, 13, 5)$	3 2 3
1, 5, 2	2 5 2	$\frac{1}{3}(1, 16, 11)$	4 1 5	2, 3, 5	3 2 5
$\frac{1}{3}(1, 18, 10)$	1 5 2	1, 0, 5	4 3 1	$\frac{1}{3}(2, 17, 7)$	3 2 5
$\frac{1}{3}(1, 12, 4)$	1 5 4	$\frac{1}{3}(1, 4, 17)$	4 3 3		
$\frac{1}{3}(1, 2, 7)$	2 1 1				

(续表)

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
2, 3, 1	1 1 3	$\frac{1}{3}(4, 13, 11)$	3 0 5	$\frac{1}{3}(4, 23, 7)$	5 4 5
$\frac{1}{3}(2, \bar{4}, 4)$	0 2 0	4, 3, 1	$\bar{1}$ 0 5	4, $\bar{1}$, 3	$\bar{1}$ 4 3
2, 5, 1	1 2 5	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 2, 4)$	2 0 0	5, 1, 0	3 1 4
$\bar{2}$, 0, 4	4 2 0	$\frac{1}{3}(\bar{4}, \bar{13}, 7)$	1 4 3	$\frac{1}{3}(5, 8, 1)$	0 $\bar{1}$ 3
$\frac{1}{3}(2, 8, 16)$	4 2 4	4, $\bar{3}$, 1	$\bar{3}$ 4 1	5, $\bar{1}$, 4	$\bar{1}$ 5 4
$\frac{1}{3}(\bar{2}, 16, 8)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(4, 7, 13)$	3 4 $\bar{1}$	$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{17}, 8)$	1 5 4
3, 1, 5	5 2 1	$\frac{1}{3}(4, 1, 17)$	3 4 3	$\frac{1}{3}(5, 13, 2)$	3 3 2
$\frac{1}{3}(3, 7, 17)$	5 2 3	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 17, 1)$	3 4 3	$\frac{1}{3}(5, 5, 16)$	3 3 4
2, 5, 3	5 2 3	$\frac{1}{3}(4, 10, 8)$	2 0 4	5, $\bar{3}$, 2	3 5 2
$\frac{1}{3}(2, 11, 19)$	5 2 5	4, $\bar{5}$, 3	3 4 $\bar{5}$	$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{11}, 14)$	3 5 2
$\frac{1}{3}(2, 19, 11)$	5 2 5	4, 2, 0	2 0 4	5, $\bar{5}$, 3	3 5 3
2, 4, 0	0 2 4	4, 1, 5	1 4 5	$\frac{1}{3}(5, 4, 11)$	4 1 1
3, 2, 1	2 3 1	$\frac{1}{3}(4, 8, 10)$	4 0 2	$\frac{1}{3}(5, 5, 2)$	1 1 2
3, 2, 5	2 3 5	4, 0, 2	4 0 2	5, 0, $\bar{1}$	4 1 3
3, 3, 0	1 1 $\bar{1}$	$\frac{1}{3}(4, 4, 2)$	0 0 2	$\frac{1}{3}(5, 7, 4)$	$\bar{1}$ 3 0
3, $\bar{5}$, 3	2 5 5	$\frac{1}{3}(4, 1, 1)$	$\bar{1}$ 0 1	$\frac{1}{3}(5, 1, 10)$	1 3 2
3, $\bar{1}$, 2	3 1 2	4, $\bar{1}$, 3	5 0 1	5, 2, 1	2 1 5
3, 4, 1	0 $\bar{1}$ 5	$\frac{1}{3}(4, 11, 13)$	5 0 3	$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{14}, 11)$	2 5 3
3, 5, 4	3 5 4	$\frac{1}{3}(4, 5, 11)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(5, 10, 1)$	2 3 1
3, 0, 3	4 1 $\bar{1}$	$\frac{1}{3}(4, 11, 5)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(5, 13, 5)$	4 3 3
3, $\bar{1}$, 2	$\bar{1}$ 3 2	$\frac{1}{3}(4, 7, 5)$	1 0 3	$\frac{1}{3}(5, 8, 19)$	4 3 5
3, 4, 1	4 3 1	$\frac{1}{3}(4, 7, 19)$	5 4 1	5, 4, 3	4 3 5
3, 1, 4	1 3 4	4, 5, 1	5 4 1	5, 4, 1	4 5 1
3, 4, 5	4 5 3	4, 3, 5	5 4 3	$\frac{1}{3}(5, 8, 17)$	4 5 $\bar{1}$
3, 1, 4	5 1 0	$\frac{1}{3}(4, 7, 25)$	5 4 5	$\frac{1}{3}(5, 2, 13)$	2 5 3
3, 2, 1	2 1 3				
3, 5, 2	5 3 2				
3, 3, 6	5 5 2				
$\frac{1}{3}(4, 19, \bar{1})$	1 4 5				
$\frac{1}{3}(4, 5, 7)$	3 0 1				

(续表)

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
$\frac{1}{3}(5, 7, 4)$	5 1 2	$\frac{1}{3}(7, 7, 8)$	1 1 4	$\frac{1}{3}(8, 17, 5)$	1 4 5
5, 1, 2	5 1 2	$\frac{1}{3}(7, 5, 14)$	1 5 2	$\frac{1}{3}(8, 7, 7)$	7 4 1
$\frac{1}{3}(5, 2, 5)$	2 1 1	$\frac{1}{3}(7, 7, 10)$	3 3 2	$\frac{1}{3}(8, 5, 19)$	3 4 5
$\frac{1}{3}(5, 4, 7)$	0 3 1	$\frac{1}{3}(7, 20, 1)$	4 5 3	$\frac{1}{3}(8, 2, 16)$	2 4 4
$\frac{1}{3}(5, 11, 4)$	1 1 4	$\frac{1}{3}(7, 4, 23)$	4 5 5	$\frac{1}{3}(8, 1, 5)$	3 0 1
$\frac{1}{3}(5, 19, 8)$	5 3 4	$\frac{1}{3}(7, 13, 4)$	1 3 4	$\frac{1}{3}(8, 13, 1)$	3 4 1
5, 4, 4	5 3 4	$\frac{1}{3}(7, 11, 10)$	5 1 2	$\frac{1}{3}(8, 5, 17)$	5 4 1
$\frac{1}{3}(5, 1, 8)$	3 1 0	$\frac{1}{3}(7, 4, 5)$	0 1 3	$\frac{1}{3}(8, 19, 5)$	5 2 3
$\frac{1}{3}(5, 14, 7)$	2 1 5	$\frac{1}{3}(7, 1, 2)$	1 1 2	$\frac{1}{3}(8, 14, 8)$	2 4 4
6, 1, 1	3 2 5	$\frac{1}{3}(7, 1, 16)$	5 3 0	$\frac{1}{3}(8, 4, 10)$	0 4 2
6, 0, 0	4 2 4	$\frac{1}{3}(7, 10, 7)$	2 3 3	8, 1, 1	5 4 5
6, 1, 1	5 2 3	7, 1, 0	3 3 4	$\frac{1}{3}(8, 5, 1)$	1 0 3
6, 3, 3	5 2 5	$\frac{1}{3}(7, 10, 11)$	2 1 5	$\frac{1}{3}(8, 1, 13)$	1 4 3
$\frac{1}{3}(7, 14, 5)$	2 5 1	$\frac{1}{3}(7, 5, 4)$	3 1 0	$\frac{1}{3}(10, 2, 2)$	2 2 2
$\frac{1}{3}(7, 17, 2)$	3 5 2	$\frac{1}{3}(7, 23, 4)$	5 5 4	$\frac{1}{3}(10, 7, 11)$	1 2 5
$\frac{1}{3}(7, 1, 20)$	3 5 4	$\frac{1}{3}(8, 11, 11)$	3 4 5	$\frac{1}{3}(10, 11, 7)$	5 2 1
$\frac{1}{3}(7, 2, 17)$	2 5 3	$\frac{1}{3}(8, 10, 4)$	2 4 0	$\frac{1}{3}(10, 1, 13)$	5 2 1
$\frac{1}{3}(7, 8, 7)$	4 1 1	$\frac{1}{3}(8, 16, 2)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(10, 5, 1)$	3 2 1
$\frac{1}{3}(7, 2, 1)$	2 1 1	$\frac{1}{3}(8, 8, 14)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(10, 1, 5)$	1 2 3
$\frac{1}{3}(7, 8, 11)$	0 5 1	$\frac{1}{3}(8, 11, 7)$	1 0 5	$\frac{1}{3}(10, 7, 7)$	3 2 3
$\frac{1}{3}(7, 11, 8)$	1 5 0	$\frac{1}{3}(8, 7, 11)$	5 0 1	$\frac{1}{3}(10, 3, 4)$	4 2 0
$\frac{1}{3}(7, 4, 13)$	4 3 7				
$\frac{1}{3}(7, 16, 1)$	0 3 5				
7, 0, 1	4 3 5				

(续表)

h' k' l'	hkl	h' k' l'	hkl	h' k' l'	hkl
$\frac{1}{3}(10, \overline{13}, 1)$	1 2 5	$\frac{1}{3}(13, 1, 8)$	$\overline{1} 3 4$	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{13}, 13)$	5 4 5
$\frac{1}{3}(10, 4, 8)$	0 2 4	$\frac{1}{3}(13, 4, \overline{11})$	0 3 5	$\frac{1}{3}(16, 8, 2)$	4 4 2
$\frac{1}{3}(11, \overline{4}, \overline{5})$	4 1 1	$\frac{1}{3}(13, \overline{2}, 5)$	2 3 3	$\frac{1}{3}(16, \overline{5}, 5)$	3 4 3
$\frac{1}{3}(11, 7, 8)$	5 1 0	$\frac{1}{3}(13, \overline{11}, \overline{4})$	3 3 0	$\frac{1}{3}(16, 1, 7)$	5 0 3
$\frac{1}{3}(11, 7, 10)$	$\overline{1} 5 2$	$\frac{1}{3}(13, \overline{4}, 7)$	4 1 3	$\frac{1}{3}(17, 2, 7)$	2 3 5
$\frac{1}{3}(11, \overline{1}, 16)$	1 5 4	$\frac{1}{3}(13, \overline{7}, 4)$	3 1 $\overline{4}$	$\frac{1}{3}(17, 4, 1)$	4 3 3
$\frac{1}{3}(11, \overline{4}, \overline{13})$	0 5 3	$\frac{1}{3}(13, 1, 10)$	5 1 2	$\frac{1}{3}(17, 7, \overline{2})$	5 3 2
$\frac{1}{3}(11, \overline{11}, 8)$	3 3 4	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{16}, 13)$	4 5 5	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{5}, 8)$	5 1 4
$\frac{1}{3}(11, \overline{10}, 7)$	2 5 1	$\frac{1}{3}(13, \overline{5}, 2)$	3 3 2	$\frac{1}{3}(17, \overline{1}, 4)$	3 3 4
$\frac{1}{3}(11, 2, 1)$	2 1 3	$\frac{1}{3}(13, 8, \overline{1})$	3 3 1	$\frac{1}{3}(17, 8, 5)$	4 1 5
$\frac{1}{3}(11, 5, 4)$	$\overline{1} 1 4$	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{13}, 16)$	5 5 4	$\frac{1}{3}(19, 4, \overline{1})$	4 1 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 16, \overline{1})$	4 5 1	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{8}, 8)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(19, \overline{11}, 2)$	5 5 2
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{5}, 16)$	5 3 2	$\frac{1}{3}(14, \overline{1}, 1)$	3 2 3	$\frac{1}{3}(19, 1, 4)$	5 1 4
$\frac{1}{3}(11, 8, 7)$	0 1 5	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{11}, 5)$	3 2 5	$\frac{1}{3}(19, \overline{2}, 11)$	2 5 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{14}, 5)$	2 3 5	$\frac{1}{3}(14, 7, 5)$	5 2 1	$\frac{1}{3}(19, 8, 5)$	4 5 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{8}, 11)$	4 3 5	$\frac{1}{3}(14, \overline{5}, 11)$	5 2 5	$\frac{1}{3}(19, 5, 8)$	3 5 4
$\frac{1}{3}(11, 2, 19)$	2 5 5	$\frac{1}{3}(14, 5, 7)$	$\overline{1} 2 5$	$\frac{1}{3}(20, \overline{10}, 7)$	3 4 5
$\frac{1}{3}(11, \overline{13}, 4)$	3 5 0	$\frac{1}{3}(16, \overline{11}, \overline{1})$	5 4 1	$\frac{1}{3}(20, 7, 1)$	5 4 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 19, 2)$	5 3 2	$\frac{1}{3}(16, 7, \overline{1})$	3 0 5	$\frac{1}{3}(23, 1, \overline{1})$	5 2 5
$\frac{1}{3}(11, \overline{1}, 2)$	3 1 2	$\frac{1}{3}(16, 1, 10)$	$\overline{1} 4 5$	$\frac{1}{3}(23, \overline{4}, 7)$	4 5 5
$\frac{1}{3}(13, \overline{10}, 1)$	2 1 5	$\frac{1}{3}(16, \overline{2}, 8)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(23, 7, 4)$	5 5 4

(六) (112) 李晶衍射位置表

h'	k'	l'	hkl	h'	k'	l'	hkl	h'	k'	l'	hkl
0, 4, 2	0 4 2		I, 2, 3	2 1 3			$\frac{1}{3}(1, \bar{4}, 19)$	4 5 1			
0, 1, 1	I 0 1		$\frac{1}{3}(1, \bar{10}, \bar{5})$	2 1 3			1, 0, 7	2 5 3			
0, 5, 3	1 4 1		$\frac{1}{3}(I, 2, 11)$	2 3 1			I, 8, I	4 5 5			
0, 2, 3	3 4 0		I, 2, 5	2 5 1			$\frac{1}{3}(1, 12, 16)$	3 1 4			
0, 6, 5	2 4 4		$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{14}, \bar{1})$	2 3 3			1 6 I	5 1 4			
0, I, 5	3 4 1		1, 6, I	2 3 5			1, 1, 6	5 3 2			
0, 7, I	3 4 5		I, 2, 5	2 5 1			$\frac{1}{3}(I, 7, 20)$	6 3 4			
0, 0, 6	4 4 2		$\frac{1}{3}(\bar{1}, 10, \bar{13})$	2 5 1			$\frac{1}{3}(1, \bar{1}, 22)$	5 5 2			
0, 1, 7	5 4 3		I, 0, 1	2 5 3			I, 1, 8	5 5 4			
$\frac{1}{3}(1, 5, 5)$	0 3 1		$\frac{1}{3}(1, 22, 1)$	2 5 5			$\frac{1}{3}(2, 2, 10)$	5 2 2			
1 4 3	0 3 1		$\frac{1}{3}(1, 5, 10)$	3 1 2			2, 2, 2	2 2 2			
$\frac{1}{3}(I, 10, 7)$	0 5 3		I, 3, 2	3 1 2			$\frac{1}{3}(2, \bar{10}, 2)$	2 2 2			
I, 0, 1	0 1 1		I, 3, 4	3 1 4			3, I, 1	1 2 1			
I, I, 0	1 1 0		$\frac{1}{3}(1, 13, 8)$	3 1 4			$\frac{1}{3}(2, I, 7)$	1 2 1			
$\frac{1}{3}(1, I, 4)$	I 1 0		$\frac{1}{3}(I, 1, 14)$	3 3 2			$\frac{1}{3}(3, 5, 3)$	1 2 1			
I, 1, 2	I 1 2		$\frac{1}{3}(I, 17, \bar{4})$	3 3 4			$\frac{1}{3}(2, 7, 1)$	1 2 1			
$\frac{1}{3}(1, 7, 2)$	1 1 2		$\frac{1}{3}(1, 7, 16)$	3 5 0			2, 1, 3	I 2 3			
$\frac{1}{3}(I, 5, 8)$	I 3 0		I, I, 6	3 5 2			3, 3, I	1 2 3			
I, 3, 2	1 3 2		I, 7, 0	3 5 4			$\frac{1}{3}(2, 1, 11)$	1 2 1			
$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{11}, 2)$	1 3 2		$\frac{1}{3}(1, 8, 13)$	4 1 3			2, 1, 3	3 2 1			
1, 5, 0	1 3 4		1, 4, 5	4 1 3			2, 3, 7	3 2 1			
$\frac{1}{3}(I, 4, I)$	0 I 1		1, 4, 5	4 1 5			$\frac{1}{3}(2, 5, 13)$	3 2 3			
1, 3, 4	I 5 0		$\frac{1}{3}(1, 16, 11)$	4 1 5			$\frac{1}{3}(2, \bar{13}, \bar{5})$	3 2 3			
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 13, \bar{10})$	1 5 2		1, 0, 5	4 3 1			2, 3, 5	3 2 5			
I, 5, 2	1 5 2		$\frac{1}{3}(I, 4, 17)$	4 3 3			$\frac{1}{3}(2, 17, \bar{7})$	3 2 5			
$\frac{1}{3}(1, 15, 1)$	1 5 4		$\frac{1}{3}(\bar{1}, 20, 7)$	4 3 5			$\frac{1}{3}(2, 11, \bar{1})$	1 2 3			
$\frac{1}{3}(1, 2, 7)$	2 1 1										
I, 2, I	2 1 I										

(续表)

h^i k^i l^i	hkl	h^i k^i l^i	hkl	h^i k^i l^i	hkl
$\frac{1}{3}(2, \bar{4}, 4)$	0 2 0	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 13, 11)$	3 0 5	$\frac{1}{3}(\bar{4}, \bar{23}, \bar{7})$	5 4 5
2, 5, 7	1 2 5	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 13, 7)$	1 4 3	$\bar{4}, \bar{1}, 3$	1 4 3
2, 0, 4	$\bar{4}$ 2 0	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 7, 5)$	1 0 3	$\frac{1}{3}(\bar{5}, 8, 1)$	0 7 3
$\frac{1}{3}(2, 8, 16)$	$\bar{4}$ 2 4	$\bar{4}$ 3 1	1 0 5	5, 1, 0	3 1 4
$\frac{1}{3}(2, \bar{16}, \bar{8})$	4 2 4	$\frac{1}{3}(\bar{4}, \bar{2}, \bar{4})$	2 0 0	5, $\bar{1}$, 4	1 5 4
2, 1, 5	5 2 1	$\bar{4}$ 3 1	3 4 1	$\frac{1}{3}(\bar{5}, 17, 8)$	1 5 4
$\frac{1}{3}(2, 7, 17)$	5 2 3	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 7, \bar{13})$	3 4 1	$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{13}, \bar{2})$	3 3 2
2, 5, 5	6 2 3	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 1, 17)$	3 4 3	$\frac{1}{3}(\bar{5}, 5, 16)$	3 3 4
$\frac{1}{3}(2, \bar{1}, 19)$	5 2 5	$\frac{1}{3}(\bar{4}, \bar{17}, \bar{1})$	3 4 5	$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{11}, \bar{4})$	1 1 4
$\frac{1}{3}(2, \bar{19}, \bar{11})$	5 2 5	$\bar{4}$ 5 3	3 4 5	5 2 3	2 5 3
5, 4, 0	0 2 4	$\bar{4}$, 2, 0	2 0 4	5 3 2	3 5 2
3, 2, 1	2 3 1	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 10, 8)$	2 0 4	$\frac{1}{3}(\bar{5}, 11, \bar{14})$	3 5 2
3, 2, 5	2 3 5	$\bar{4}$, 6, 2	4 0 2	$\frac{1}{3}(\bar{5}, 14, \bar{11})$	2 5 3
3, 3, 0	1 7 4	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 8, 10)$	4 0 2	$\frac{1}{3}(\bar{5}, 4, 11)$	4 1 1
3, 6, 3	2 5 5	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 4, 2)$	0 0 2	5, 0, 7	4 1 3
3, 1, 2	3 1 2	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 1, \bar{1})$	1 0 1	$\frac{1}{3}(\bar{5}, 7, 4)$	1 3 0
3, 4, 1	0 1 5	$\bar{4}$, 1, 3	5 0 1	$\frac{1}{3}(\bar{5}, 4, 7)$	0 3 1
3, 5, 4	3 5 4	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 11, 13)$	5 0 3	$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{1}, 10)$	7 3 2
3, 0, 3	4 1 1	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 5, 11)$	7 4 1	$\frac{1}{3}(\bar{5}, 2, 5)$	2 7 1
3, 1, 2	1 3 2	$\frac{1}{3}(\bar{4}, \bar{11}, 5)$	1 4 7	$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{16}, \bar{5})$	4 3 3
3, 4, 1	4 3 7	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 7, 19)$	5 4 1	$\frac{1}{3}(\bar{5}, 8, 10)$	4 3 5
3, 1, 4	7 3 4	$\bar{4}$, 5, 7	5 4 7	5, 4, 3	4 3 5
3, 4, 5	4 5 3	$\bar{4}$, 3, 5	5 4 3	5, 4, 1	4 5 1
3 1 4	5 1 0	$\frac{1}{3}(\bar{4}, 7, 23)$	5 4 5	$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{10}, \bar{1})$	2 3 7
3, 2, 7	2 7 3				
3 5 2	5 3 2				
3 3 5	5 5 2				
4 1 5	7 4 5				
$\frac{1}{3}(4, \bar{19}, 1)$	1 4 5				
$\frac{1}{3}(4, 5, 7)$	3 0 1				

(续表)

h	k	l	hkl	h	k	l	hkl	h	k	l	hkl
$\frac{1}{3}(\bar{5}, 8, \bar{17})$			4 5 1	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 7, \bar{10})$			3 3 2	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 17, \bar{5})$			1 4 5
$\frac{1}{3}(\bar{5}, 2, \bar{13})$			2 3 3	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 13, \bar{4})$			1 3 4	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 7, \bar{11})$			3 0 1
$\frac{1}{3}(\bar{5}, 1, \bar{2})$			5 1 2	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 20, \bar{7})$			4 5 3	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 7, \bar{7})$			2 4 1
$\frac{1}{3}(\bar{5}, 7, \bar{14})$			5 1 2	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 4, \bar{23})$			4 5 5	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{1}, \bar{5})$			3 0 1
$\frac{1}{3}(\bar{5}, 5, \bar{2})$			1 1 2	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 16, \bar{1})$			0 3 5	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 11, \bar{7})$			1 0 5
$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{14}, \bar{7})$			2 1 5	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 11, \bar{10})$			5 1 2	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 5, \bar{19})$			3 4 5
$\frac{1}{3}(\bar{5}, 3, \bar{4})$			5 3 4	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 1, \bar{2})$			1 1 2	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 5, \bar{1})$			1 0 3
$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{19}, \bar{8})$			5 3 4	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 5, \bar{11})$			0 5 1	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{13}, \bar{1})$			3 4 1
$\frac{1}{3}(\bar{5}, 2, \bar{1})$			2 1 5	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 10, \bar{7})$			2 3 3	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 5, \bar{17})$			5 4 1
$\frac{1}{3}(\bar{5}, 1, \bar{8})$			3 1 0	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{1}, \bar{16})$			5 3 0	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 10, \bar{4})$			2 4 0
$\frac{1}{3}(\bar{5}, 1, \bar{1})$			3 2 5	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 7, \bar{8})$			1 1 4	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 11, \bar{11})$			3 4 3
$\frac{1}{3}(\bar{5}, 0, \bar{0})$			4 2 4	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{1}, \bar{0})$			5 3 4	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{19}, \bar{5})$			5 4 3
$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{1}, \bar{1})$			5 2 3	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 4, \bar{5})$			0 1 3	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{1}, \bar{1})$			5 4 5
$\frac{1}{3}(\bar{5}, 3, \bar{3})$			5 2 5	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 5, \bar{4})$			3 1 0	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{1}, \bar{13})$			1 4 3
$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{14}, \bar{5})$			2 5 1	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 11, \bar{8})$			1 5 0	$\frac{1}{3}(\bar{10}, 4, \bar{8})$			0 2 4
$\frac{1}{3}(\bar{7}, 5, \bar{19})$			1 5 2	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 23, \bar{4})$			5 5 4	$\frac{1}{3}(\bar{10}, 2, \bar{2})$			2 2 2
$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{17}, \bar{2})$			3 5 2	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 4, \bar{10})$			0 4 2	$\frac{1}{3}(\bar{10}, 1, \bar{5})$			1 2 3
$\frac{1}{3}(\bar{7}, 1, \bar{20})$			3 5 4	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 14, \bar{8})$			2 4 4	$\frac{1}{3}(\bar{10}, 13, \bar{1})$			1 2 5
$\frac{1}{3}(\bar{7}, 2, \bar{17})$			2 5 3	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 8, \bar{14})$			4 4 2	$\frac{1}{3}(\bar{10}, 1, \bar{12})$			5 2 1
$\frac{1}{3}(\bar{7}, 10, \bar{11})$			2 1 5	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 16, \bar{2})$			4 4 2	$\frac{1}{3}(\bar{10}, 11, \bar{7})$			5 2 1
$\frac{1}{3}(\bar{7}, 8, \bar{7})$			4 1 1	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 2, \bar{16})$			2 4 4	$\frac{1}{3}(\bar{10}, 7, \bar{7})$			3 2 3
$\frac{1}{3}(\bar{7}, 2, \bar{1})$			2 1 1								
$\frac{1}{3}(\bar{7}, 4, \bar{13})$			4 3 1								
$\frac{1}{3}(\bar{7}, 0, \bar{1})$			4 3 5								

(续表)

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
$\frac{1}{3}(\overline{10}, \overline{8}, \overline{4})$	4 2 0	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{7}, \overline{4})$	3 1 4	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{1}, \overline{11})$	1 4 5
$\frac{1}{3}(\overline{10}, \overline{7}, \overline{11})$	1 2 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{10}, \overline{1})$	2 1 5	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{10}, \overline{13})$	5 2 5
$\frac{1}{3}(\overline{10}, \overline{5}, \overline{1})$	3 2 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{8}, \overline{1})$	4 3 1	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{1}, \overline{7})$	5 0 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{4}, \overline{5})$	4 1 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{11}, \overline{4})$	5 3 0	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{8}, \overline{2})$	4 4 2
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{14}, \overline{5})$	2 3 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{16}, \overline{13})$	4 5 5	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{2}, \overline{8})$	2 4 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{7}, \overline{8})$	5 1 0	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{4}, \overline{7})$	4 1 3	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{1}, \overline{4})$	3 3 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{7}, \overline{10})$	1 5 2	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{1}, \overline{10})$	5 1 2	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{7}, \overline{2})$	5 3 2
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{11}, \overline{8})$	3 3 4	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{5}, \overline{2})$	3 3 2	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{8}, \overline{5})$	4 1 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{2}, \overline{1})$	3 1 3	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{1}, \overline{8})$	1 3 4	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{2}, \overline{7})$	2 3 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{5}, \overline{4})$	1 1 4	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{2}, \overline{5})$	2 3 3	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{5}, \overline{8})$	5 1 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{16}, \overline{1})$	4 5 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{4}, \overline{11})$	0 3 5	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{4}, \overline{1})$	4 3 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{8}, \overline{7})$	0 1 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{13}, \overline{16})$	5 5 4	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{2}, \overline{11})$	2 5 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{1}, \overline{16})$	1 5 4	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{11}, \overline{5})$	3 2 5	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{11}, \overline{2})$	5 5 2
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{2}, \overline{19})$	2 5 5	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{1}, \overline{1})$	3 2 3	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{4}, \overline{1})$	4 1 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{5}, \overline{14})$	5 3 3	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{5}, \overline{7})$	1 2 5	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{5}, \overline{8})$	3 5 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{4}, \overline{18})$	0 5 3	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{7}, \overline{5})$	5 2 1	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{1}, \overline{4})$	5 1 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{10}, \overline{7})$	2 5 1	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{8}, \overline{8})$	4 2 4	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{8}, \overline{5})$	4 5 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{8}, \overline{11})$	4 3 3	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{5}, \overline{11})$	5 2 3	$\frac{1}{3}(\overline{20}, \overline{1}, \overline{7})$	3 4 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{13}, \overline{4})$	3 5 0	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{11}, \overline{1})$	5 4 1	$\frac{1}{3}(\overline{20}, \overline{7}, \overline{1})$	5 4 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{1}, \overline{2})$	3 1 2	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{7}, \overline{1})$	3 0 5	$\frac{1}{3}(\overline{22}, \overline{1}, \overline{1})$	5 2 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{19}, \overline{2})$	5 5 2	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{5}, \overline{5})$	3 4 3	$\frac{1}{3}(\overline{23}, \overline{7}, \overline{4})$	5 5 4
				$\frac{1}{3}(\overline{23}, \overline{4}, \overline{7})$	4 5 5

(七) (112) 孪晶衍射位置表

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
0, 4, 2	0 4 2	$\frac{1}{3}(1, \overline{10}, 5)$	2 1 3	$\frac{1}{3}(1, 4, 19)$	4 5 1
0, 1, 1	1 0 1	2, 2, 3	2 1 3	1, 0, 7	4 5 3
0, 3, 3	1 4 1	1, 2, 3	2 3 1	1, 8, 1	4 5 5
0, 5, 1	1 4 3	$\frac{1}{3}(1, 2, 1)$	2 3 1	1, 5, 4	5 1 4
0, 2, 4	2 4 0	$\frac{1}{3}(1, \overline{14}, 1)$	2 3 3	$\frac{1}{3}(1, \overline{11}, 16)$	5 1 4
0, 6, 0	2 4 4	1, 6, 1	2 3 5	1, 1, 6	5 3 2
0, 1, 5	3 4 1	$\frac{1}{3}(1, 10, 13)$	2 5 1	$\frac{1}{3}(1, 7, 20)$	5 3 4
0, 7, 1	3 4 5	1, 2, 5	2 5 1	$\frac{1}{3}(1, 1, 22)$	5 5 2
0, 0, 6	4 4 2	1, 6, 1	2 5 3	1, 1, 3	5 5 4
0, 1, 7	5 4 3	$\frac{1}{3}(1, 22, 1)$	2 5 5	$\frac{1}{3}(2, \overline{10}, 2)$	2 2 2
$\frac{1}{3}(1, 8, 5)$	0 3 1	1, 3, 2	3 1 2	2, 2, 2	2 2 2
1, 4, 3	0 5 1	$\frac{1}{3}(1, 8, 10)$	3 1 2	$\frac{1}{3}(2, 2, 10)$	2 2 2
$\frac{1}{3}(1, 16, 7)$	0 5 3	$\frac{1}{3}(1, \overline{13}, 8)$	3 1 4	$\frac{1}{3}(2, 7, 1)$	1 2 1
$\frac{1}{3}(1, 4, 1)$	0 1 1	1, 3, 4	3 1 4	$\frac{1}{3}(2, 5, 5)$	1 2 1
1, 1, 0	1 1 0	$\frac{1}{3}(1, 1, 14)$	3 3 2	$\frac{1}{3}(2, 1, 7)$	1 2 1
$\frac{1}{3}(1, 1, 4)$	1 1 0	$\frac{1}{3}(1, 17, 4)$	3 3 4	2, 1, 1	1 2 1
$\frac{1}{3}(1, 7, 2)$	1 1 2	$\frac{1}{3}(1, 7, 16)$	3 5 0	$\frac{1}{3}(2, \overline{11}, 1)$	1 2 3
1, 1, 2	1 1 2	1, 1, 6	3 5 2	2, 3, 1	1 2 3
$\frac{1}{3}(1, 5, 8)$	1 3 0	1, 7, 0	3 5 4	2, 1, 3	1 2 3
$\frac{1}{3}(1, 11, 2)$	1 3 2	1, 4, 3	4 1 3	2, 3, 1	3 2 1
1 3 2	1 3 2	$\frac{1}{3}(1, 8, 12)$	4 1 3	2, 1, 3	3 2 1
1, 5, 0	1 3 4	$\frac{1}{3}(1, \overline{16}, 11)$	4 1 5	$\frac{1}{3}(3, 1, 11)$	3 2 1
1, 0, 1	0 1 1	1, 4, 5	4 1 5	$\frac{1}{3}(2, \overline{15}, 5)$	3 2 3
1, 3, 4	1 5 0	1, 0, 5	4 3 1	$\frac{1}{3}(2, 5, 13)$	3 2 3
1, 5, 2	1 5 2	$\frac{1}{3}(1, 4, 17)$	4 3 3	$\frac{1}{3}(2, \overline{17}, 7)$	3 2 5
$\frac{1}{3}(1, 13, 10)$	1 5 2	$\frac{1}{3}(1, 20, 7)$	4 3 5	2, 3, 5	3 2 5
$\frac{1}{3}(1, 19, 4)$	1 5 4				
1, 2, 1	2 1 1				
$\frac{1}{3}(1, 2, 7)$	2 1 1				

(续表)

h^s h^s l^s	hkl	h^s h^s l^s	hkl	h^s h^s l^s	hkl
2, 5, 1	1 2 5	$\frac{1}{3}(4, \overline{13}, 11)$	3 0 5	$\frac{1}{3}(4, 7, 23)$	5 4 5
$\frac{1}{3}(2, \overline{4}, \overline{4})$	0 2 0	$\frac{1}{3}(4, \overline{19}, \overline{1})$	1 4 5	$\frac{1}{3}(4, \overline{13}, 7)$	1 4 3
2, 0, 4	4 2 0	4 3 1	1 0 5	5, 1, 0	3 1 4
$\frac{1}{3}(2, \overline{16}, 8)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(4, \overline{4}, 2)$	0 0 2	$\frac{1}{3}(5, 17, 8)$	2 5 4
$\frac{1}{3}(2, 8, 16)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(4, 2, 4)$	2 0 0	5, 1, 4	2 5 4
2, 4, 0	0 2 4	$\frac{1}{3}(4, \overline{10}, 8)$	2 0 4	$\frac{1}{3}(5, \overline{12}, 2)$	3 3 2
2, 1, 5	5 2 1	$\frac{1}{3}(4, 7, \overline{13})$	3 4 1	$\frac{1}{3}(5, 5, 16)$	3 5 4
2, 5, 3	5 2 3	4, 3, 1	3 4 1	$\frac{1}{3}(5, \overline{14}, 11)$	2 5 3
$\frac{1}{3}(2, 7, 17)$	5 2 3	$\frac{1}{3}(4, 17, 1)$	3 4 3	$\frac{1}{3}(5, 11, \overline{14})$	3 5 2
$\frac{1}{3}(2, \overline{19}, 11)$	5 2 5	$\frac{1}{3}(4, \overline{1}, 17)$	3 4 3	5, 5, 2	3 5 2
$\frac{1}{3}(2, \overline{11}, 19)$	5 2 5	4, 2, 0	2 0 4	5, 5, 5	2 5 2
3, 2, 1	2 3 1	4, 5, 3	3 4 5	$\frac{1}{3}(5, \overline{10}, \overline{1})$	2 3 1
3, 3, 0	1 1 4	$\frac{1}{3}(4, 8, 10)$	4 0 2	$\frac{1}{3}(5, 4, 11)$	4 1 1
3, 2, 5	2 3 5	4, 0, 2	4 0 2	$\frac{1}{3}(5, 7, 4)$	1 3 0
3, 4, 1	0 1 5	$\frac{1}{3}(4, \overline{1}, \overline{1})$	1 0 1	5, 0, 1	4 1 3
3, 6, 3	2 5 5	4, 1, 3	5 0 1	$\frac{1}{3}(5, 2, 5)$	2 1 1
3, 1, 3	3 1 3	$\frac{1}{3}(4, \overline{11}, 13)$	5 0 3	$\frac{1}{3}(5, 4, 7)$	0 3 1
3, 5, 4	3 5 4	$\frac{1}{3}(4, \overline{11}, 5)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(5, 1, 10)$	1 3 2
3, 0, 3	4 1 1	$\frac{1}{3}(4, 7, 5)$	1 0 3	$\frac{1}{3}(5, \overline{16}, 5)$	4 3 3
3, 4, 1	4 3 1	$\frac{1}{3}(4, 5, 11)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(5, \overline{11}, 4)$	1 1 4
3, 1, 2	1 3 2	4, 5, 1	5 4 1	5, 2, 3	4 3 5
3, 4, 5	4 5 3	$\frac{1}{3}(4, 1, 19)$	5 4 1	$\frac{1}{3}(5, 3, 19)$	4 3 5
3, 1, 4	1 3 4	4, 3, 3	3 4 3	$\frac{1}{3}(5, 8, \overline{17})$	4 5 1
3, 1, 2	5 1 0	$\frac{1}{3}(4, \overline{23}, 7)$	5 4 5		
3, 2, 1	2 1 3				
3, 5, 2	5 3 2				
3, 3, 6	5 3 2				
4, 1, 5	1 4 5				
4, 1, 5	1 4 3				
$\frac{1}{3}(4, 5, 7)$	3 0 1				

(续表)

h^i k^i l^i	hkl	h^i k^i l^i	hkl	h^i k^i l^i	hkl
5, 4, 1	4 5 1	$\frac{1}{3}(7, 2, 1)$	2 1 1	$\frac{1}{3}(8, \overline{14}, \overline{8})$	2 4 4
5, 2, 1	2 1 5	$\frac{1}{3}(7, \overline{13}, \overline{4})$	1 3 4	$\frac{1}{3}(8, 5, 19)$	3 4 5
$\frac{1}{3}(5, 7, 1)$	5 1 2	$\frac{1}{3}(7, \overline{20}, 1)$	4 5 3	$\frac{1}{3}(8, 7, 11)$	5 0 1
5, 1, 2	5 1 2	$\frac{1}{3}(7, 10, 11)$	2 1 5	$\frac{1}{3}(8, \overline{2}, 13)$	1 4 3
$\frac{1}{3}(5, 3, 2)$	1 1 2	$\frac{1}{3}(7, 4, 23)$	4 5 5	$\frac{1}{3}(8, \overline{13}, \overline{1})$	5 4 1
$\frac{1}{3}(5, 2, 13)$	2 3 3	$\frac{1}{3}(7, 10, 7)$	2 3 3	$\frac{1}{3}(8, 5, 1)$	1 0 3
$\frac{1}{3}(5, \overline{14}, 7)$	2 1 5	$\frac{1}{3}(7, \overline{11}, 10)$	5 1 2	$\frac{1}{3}(8, \overline{2}, \overline{5})$	0 0 1
$\frac{1}{3}(5, \overline{10}, 8)$	5 3 1	$\frac{1}{3}(7, 8, 11)$	0 5 1	$\frac{1}{3}(8, 7, 7)$	1 4 1
5, 3, 4	5 3 4	$\frac{1}{3}(7, \overline{14}, \overline{5})$	2 5 1	$\frac{1}{3}(8, \overline{10}, \overline{4})$	2 4 0
$\frac{1}{3}(5, 1, 8)$	3 1 0	$\frac{1}{3}(7, \overline{1}, \overline{15})$	5 3 0	$\frac{1}{3}(8, 5, \overline{17})$	5 4 1
$\frac{1}{3}(5, 5, \overline{1})$	0 1 3	7, 1, 0	5 3 4	$\frac{1}{3}(8, \overline{19}, 5)$	5 4 3
0 0 0	4 2 4	$\frac{1}{3}(7, 5, 4)$	3 1 0	$\frac{1}{3}(8, \overline{17}, \overline{5})$	1 4 5
0 1 1	5 2 3	$\frac{1}{3}(7, 11, \overline{8})$	1 5 0	8 1 1	5 4 5
6 3 3	5 2 5	$\frac{1}{3}(7, 7, 8)$	1 1 4	$\frac{1}{3}(8, \overline{11}, \overline{11})$	5 4 3
$\frac{1}{3}(7, \overline{17}, \overline{2})$	3 5 2	$\frac{1}{3}(7, \overline{23}, 4)$	5 5 4	$\frac{1}{3}(10, \overline{8}, 4)$	4 2 0
$\frac{1}{3}(7, 5, 14)$	1 5 2	$\frac{1}{3}(7, 4, 5)$	0 1 3	$\frac{1}{3}(10, 1, 5)$	1 2 3
$\frac{1}{3}(7, 1, 29)$	3 5 4	$\frac{1}{3}(8, 4, 19)$	0 4 2	$\frac{1}{3}(10, \overline{13}, \overline{1})$	1 2 5
$\frac{1}{3}(7, 2, 17)$	2 5 3	$\frac{1}{3}(8, \overline{13}, 7)$	1 0 5	$\frac{1}{3}(10, 7, 11)$	1 2 5
$\frac{1}{3}(7, 8, 7)$	4 1 1	$\frac{1}{3}(8, 3, 15)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(10, \overline{5}, 1)$	3 3 1
$\frac{1}{3}(7, \overline{10}, \overline{1})$	0 3 5	$\frac{1}{3}(8, \overline{16}, 2)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(10, \overline{1}, \overline{13})$	5 2 1
$\frac{1}{3}(7, 1, 2)$	1 1 2	$\frac{1}{3}(8, 8, \overline{14})$	4 4 2		
$\frac{1}{3}(7, 4, 13)$	4 3 1				
$\frac{1}{3}(7, 7, 10)$	3 3 2				
7 0 1	4 3 5				

(续表)

$k^1 k^2 k^3$	hkl	$k^1 k^2 k^3$	hkl	$k^1 k^2 k^3$	hkl
$\frac{1}{3}(10, \overline{7}, \overline{7})$	3 2 2	$\frac{1}{3}(12, \overline{5}, \overline{3})$	3 3 2	$\frac{1}{3}(16, \overline{7}, \overline{1})$	3 0 5
$\frac{1}{3}(10, \overline{4}, 8)$	0 2 4	$\frac{1}{3}(13, \overline{8}, \overline{1})$	4 3 1	$\frac{1}{3}(16, \overline{11}, \overline{1})$	5 4 1
$\frac{1}{3}(10, \overline{2}, \overline{2})$	2 2 2	$\frac{1}{3}(13, \overline{16}, \overline{13})$	4 5 5	$\frac{1}{3}(10, \overline{1}, \overline{7})$	5 0 3
$\frac{1}{3}(11, \overline{16}, \overline{1})$	4 5 1	$\frac{1}{3}(13, \overline{11}, \overline{4})$	5 3 0	$\frac{1}{3}(16, \overline{13}, \overline{13})$	5 4 3
$\frac{1}{3}(11, \overline{7}, \overline{10})$	1 5 2	$\frac{1}{3}(13, \overline{4}, \overline{7})$	2 1 3	$\frac{1}{3}(16, \overline{8}, \overline{2})$	4 4 2
$\frac{1}{3}(11, \overline{2}, \overline{19})$	2 5 5	$\frac{1}{3}(13, \overline{2}, \overline{5})$	2 3 3	$\frac{1}{3}(17, \overline{4}, \overline{1})$	4 3 3
$\frac{1}{3}(11, \overline{7}, \overline{8})$	5 1 0	$\frac{1}{3}(13, \overline{1}, \overline{8})$	1 3 4	$\frac{1}{3}(17, \overline{7}, \overline{2})$	5 3 2
$\frac{1}{3}(11, \overline{13}, \overline{4})$	3 5 0	$\frac{1}{3}(13, \overline{1}, \overline{10})$	5 1 2	$\frac{1}{3}(17, \overline{5}, \overline{8})$	5 1 4
$\frac{1}{3}(11, \overline{1}, \overline{2})$	3 1 3	$\frac{1}{3}(13, \overline{7}, \overline{4})$	5 1 4	$\frac{1}{3}(17, \overline{2}, \overline{7})$	2 3 5
$\frac{1}{3}(11, \overline{11}, \overline{8})$	5 3 4	$\frac{1}{3}(13, \overline{10}, \overline{1})$	2 1 5	$\frac{1}{3}(17, \overline{8}, \overline{3})$	4 1 5
$\frac{1}{3}(11, \overline{4}, \overline{5})$	4 1 1	$\frac{1}{3}(13, \overline{4}, \overline{11})$	0 3 5	$\frac{1}{3}(17, \overline{1}, \overline{4})$	3 3 4
$\frac{1}{3}(11, \overline{14}, \overline{5})$	2 3 5	$\frac{1}{3}(13, \overline{13}, \overline{16})$	5 5 4	$\frac{1}{3}(19, \overline{2}, \overline{11})$	2 5 5
$\frac{1}{3}(11, \overline{2}, \overline{1})$	2 1 3	$\frac{1}{3}(14, \overline{7}, \overline{5})$	5 2 1	$\frac{1}{3}(19, \overline{8}, \overline{5})$	4 5 3
$\frac{1}{3}(11, \overline{5}, \overline{14})$	5 5 2	$\frac{1}{3}(14, \overline{5}, \overline{11})$	5 2 3	$\frac{1}{3}(19, \overline{11}, \overline{2})$	5 5 2
$\frac{1}{3}(11, \overline{8}, \overline{11})$	4 3 3	$\frac{1}{3}(14, \overline{11}, \overline{5})$	5 2 5	$\frac{1}{3}(19, \overline{5}, \overline{8})$	3 5 4
$\frac{1}{3}(11, \overline{8}, \overline{7})$	0 1 5	$\frac{1}{3}(14, \overline{5}, \overline{7})$	1 2 5	$\frac{1}{3}(19, \overline{1}, \overline{4})$	5 1 4
$\frac{1}{3}(11, \overline{5}, \overline{4})$	1 1 4	$\frac{1}{3}(14, \overline{8}, \overline{3})$	4 2 4	$\frac{1}{3}(19, \overline{4}, \overline{1})$	4 1 5
$\frac{1}{3}(11, \overline{1}, \overline{16})$	1 5 4	$\frac{1}{3}(14, \overline{1}, \overline{1})$	3 2 5	$\frac{1}{3}(20, \overline{1}, \overline{1})$	3 4 5
$\frac{1}{3}(11, \overline{4}, \overline{13})$	0 3 3	$\frac{1}{3}(16, \overline{2}, \overline{3})$	2 4 4	$\frac{1}{3}(20, \overline{7}, \overline{1})$	5 4 3
$\frac{1}{3}(11, \overline{10}, \overline{1})$	2 5 1	$\frac{1}{3}(16, \overline{5}, \overline{5})$	3 4 5	$\frac{1}{3}(23, \overline{1}, \overline{1})$	5 2 5
$\frac{1}{3}(11, \overline{19}, \overline{2})$	5 5 2	$\frac{1}{3}(16, \overline{1}, \overline{11})$	1 4 5	$\frac{1}{3}(23, \overline{4}, \overline{7})$	4 5 5
				$\frac{1}{3}(23, \overline{7}, \overline{4})$	5 5 4

(八) (112) 孪晶衍射位置表

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
0, 4, 2	0 4 2	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{10}, 5)$	2 1 3	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 4, \bar{19})$	4 5 1
0, 1, 1	1 0 1	1, 2, 5	2 1 5	1, 0, 7	4 5 3
0, 5, 3	1 4 1	1, 2, 3	2 3 1	1, 8, 1	4 5 5
0, 5, 1	1 4 3	$\frac{1}{3}(1, 2, \bar{11})$	2 3 1	1, 5, 4	5 1 4
0, 2, 4	2 4 0	$\frac{1}{3}(1, 2, \bar{11})$	2 3 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 11, \bar{10})$	5 1 4
0, 3, 0	2 4 4	$\frac{1}{3}(1, \bar{1}, 1)$	2 3 3	1, 1, 6	5 3 2
0, 1, 5	3 4 1	1, 6, 1	2 3 5	$\frac{1}{3}(1, 7, \bar{20})$	5 3 4
0, 7, 1	3 4 3	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{10}, \bar{13})$	2 5 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{1}, \bar{22})$	5 5 2
0, 0, 6	4 4 2	1, 2, 5	2 5 1	1, 1, 8	5 5 4
0, 1, 7	5 4 3	1, 8, 1	2 5 3	2, 2, 3	2 2 2
$\frac{1}{3}(1, 8, 5)$	0 3 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{22}, \bar{1})$	2 5 5	$\frac{1}{3}(2, \bar{10}, 2)$	2 2 2
1, 4, 5	0 5 1	1, 5, 2	3 1 2	$\frac{1}{3}(2, 2, \bar{10})$	2 2 2
$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{16}, \bar{7})$	0 5 3	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 5, \bar{10})$	3 1 2	$\frac{1}{3}(2, 5, 5)$	1 2 1
$\frac{1}{3}(1, 4, 1)$	0 1 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{13}, 8)$	3 1 4	$\frac{1}{3}(2, 7, 1)$	1 2 1
$\frac{1}{3}(1, 1, 4)$	1 1 0	1, 3, 4	3 3 2	2, 1, 1	1 2 1
1, 1, 0	1 1 0	$\frac{1}{3}(1, 1, \bar{14})$	3 3 4	$\frac{1}{3}(2, 1, 7)$	1 2 1
$\frac{1}{3}(1, 7, 2)$	1 1 2	$\frac{1}{3}(1, \bar{17}, 4)$	3 5 0	2, 3, 1	1 2 3
1, 1, 2	1 1 2	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 7, \bar{16})$	3 5 2	$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{11}, 1)$	1 2 3
$\frac{1}{3}(1, 5, 5)$	1 3 0	1, 1, 6	3 5 4	2, 1, 3	3 2 1
1, 3, 5	1 3 2	1, 7, 0	4 1 3	$\frac{1}{3}(\bar{2}, 1, \bar{11})$	3 2 1
$\frac{1}{3}(1, \bar{11}, \bar{2})$	1 3 2	1, 4, 3	4 1 5	$\frac{1}{3}(2, \bar{13}, 5)$	3 2 3
1, 5, 0	1 3 4	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 8, \bar{13})$	4 1 5	$\frac{1}{3}(2, 5, \bar{19})$	3 2 3
1, 0, 1	0 1 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{10}, \bar{11})$	4 3 1	$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{17}, 7)$	3 2 5
1, 8, 3	1 5 0	1, 4, 5	4 3 3	2, 3, 5	3 2 5
$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{13}, \bar{10})$	1 5 2	1, 0, 5	4 3 5	2, 1, 3	1 2 3
1, 5, 2	1 5 2	$\frac{1}{3}(1, 4, \bar{17})$			
$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{19}, \bar{4})$	1 5 4	$\frac{1}{3}(1, 20, 7)$			
1, 2, 1	2 1 1				
$\frac{1}{3}(1, 2, 7)$	2 1 1				

(续表)

$h^* \ k^* \ l^*$	hkl	$h^* \ k^* \ l^*$	hkl	$h^* \ k^* \ l^*$	hkl
$\frac{1}{3}(2, \bar{4}, \bar{4})$	0 2 0	$\frac{1}{3}(4, \bar{5}, 7)$	3 0 1	$\frac{1}{3}(4, 7, 23)$	5 4 3
$\bar{2}, \bar{5}, 1$	1 2 5	$\frac{1}{3}(4, \bar{13}, 11)$	3 0 5	$\frac{1}{3}(4, \bar{13}, \bar{7})$	1 4 3
$\bar{2}, 0, \bar{4}$	4 2 0	$\frac{1}{3}(4, 7, 5)$	1 0 3	$\bar{5}, \bar{1}, 0$	3 1 4
$\frac{1}{3}(2, \bar{10}, 8)$	4 2 4	$\bar{4}, \bar{3}, 1$	1 0 5	$\frac{1}{3}(5, \bar{17}, \bar{5})$	1 5 4
$\frac{1}{3}(2, 8, \bar{16})$	4 2 4	$\frac{1}{3}(4, \bar{4}, 2)$	0 0 2	$\bar{5}, 1, 4$	1 5 4
$\bar{2}, \bar{4}, 0$	0 2 4	$\frac{1}{3}(4, 2, 4)$	2 0 0	$\frac{1}{3}(5, \bar{13}, 2)$	3 3 2
$\bar{2}, 1, \bar{5}$	5 2 1	$\frac{1}{3}(4, 7, \bar{18})$	3 4 1	$\frac{1}{3}(5, 5, \bar{16})$	3 3 4
$\bar{2}, \bar{5}, 3$	5 2 3	$\bar{4}, 3, 1$	3 4 1	$\frac{1}{3}(5, \bar{14}, \bar{11})$	2 5 3
$\frac{1}{3}(2, 7, \bar{17})$	5 2 5	$\frac{1}{3}(4, \bar{17}, 1)$	3 4 3	$\bar{5}, 2, 3$	2 5 3
$\frac{1}{3}(2, \bar{10}, 11)$	5 2 5	$\frac{1}{3}(4, 1, \bar{17})$	3 4 3	$\frac{1}{3}(5, \bar{11}, \bar{14})$	3 5 2
$\frac{1}{3}(2, 11, 19)$	5 2 5	$\bar{4}, \bar{5}, \bar{3}$	3 4 3	$\bar{5}, 3, 2$	3 5 2
$\bar{3}, 2, 1$	2 3 1	$\bar{4}, 2, 0$	2 0 4	$\frac{1}{3}(5, 4, 11)$	4 1 1
$\bar{3}, \bar{3}, 0$	1 1 4	$\frac{1}{3}(4, \bar{10}, 8)$	2 0 4	$\bar{5}, 0, \bar{1}$	4 1 3
$\bar{3}, 2, 5$	2 3 5	$\bar{4}, 0, 2$	4 0 2	$\frac{1}{3}(5, 7, \bar{4})$	1 3 0
$\bar{3}, \bar{4}, 1$	0 1 5	$\frac{1}{3}(4, \bar{8}, 10)$	4 0 2	$\frac{1}{3}(5, 2, 5)$	2 1 1
$\bar{3}, \bar{0}, \bar{3}$	2 5 5	$\frac{1}{3}(4, \bar{1}, \bar{1})$	1 0 1	$\frac{1}{3}(5, \bar{10}, \bar{1})$	3 3 1
$\bar{3}, 1, \bar{2}$	3 1 2	$\bar{5}, 1, \bar{3}$	5 0 1	$\frac{1}{3}(5, \bar{14}, 7)$	3 1 5
$\bar{3}, \bar{5}, \bar{1}$	3 5 4	$\frac{1}{3}(4, 11, \bar{13})$	5 0 3	$\frac{1}{3}(5, \bar{16}, 5)$	1 3 3
$\bar{3}, 0, 3$	4 1 1	$\frac{1}{3}(4, \bar{11}, 5)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(5, \bar{1}, \bar{16})$	1 3 3
$\bar{3}, \bar{7}, 1$	4 3 1	$\frac{1}{3}(4, \bar{5}, 11)$	3 4 1	$\bar{5}, \bar{4}, \bar{3}$	1 3 5
$\bar{3}, 1, 3$	1 3 2	$\bar{4}, \bar{6}, 1$	5 4 1	$\frac{1}{3}(5, 8, \bar{10})$	4 2 5
$\bar{3}, 2, 5$	4 3 3	$\frac{1}{3}(4, 1, 19)$	5 4 1	$\frac{1}{3}(5, \bar{9}, \bar{2})$	1 1 2
$\bar{3}, 1, \bar{4}$	1 3 4	$\bar{4}, 3, 5$	5 4 3	$\frac{1}{3}(5, \bar{8}, \bar{17})$	4 5 1
$\bar{3}, 1, \bar{4}$	5 1 0	$\frac{1}{3}(4, \bar{23}, 7)$	5 4 5	$\bar{5}, 4, 1$	1 5 1
$\bar{3}, \bar{3}, 1$	2 1 3				
$\bar{3}, \bar{5}, 2$	3 3 2				
$\bar{3}, \bar{3}, \bar{6}$	5 5 2				
$\bar{4}, 1, 3$	1 4 3				
$\frac{1}{3}(4, \bar{19}, \bar{1})$	1 4 5				
$\bar{4}, 1, \bar{5}$	1 4 5				

(续表)

h^i k^i l^i	hkl	h^i k^i l^i	hkl	h^i k^i l^i	hkl
5, 2, 1	2 1 5	$\frac{1}{3}(7, 4, 13)$	4 3 1	$\frac{1}{3}(8, 2, 16)$	2 4 4
$\frac{1}{3}(5, 11, 4)$	1 1 4	$\frac{1}{3}(7, 13, 4)$	1 3 4	$\frac{1}{3}(8, 7, 11)$	5 0 1
5, 1, 2	5 1 2	7, 0, 1	4 5 5	$\frac{1}{3}(8, 5, 1)$	1 0 3
$\frac{1}{3}(5, 7, 14)$	5 1 2	$\frac{1}{3}(7, 7, 19)$	3 3 2	$\frac{1}{3}(8, 1, 5)$	3 0 1
$\frac{1}{3}(5, 4, 7)$	0 5 1	$\frac{1}{3}(7, 20, 1)$	4 5 3	$\frac{1}{3}(8, 13, 1)$	3 4 1
$\frac{1}{3}(5, 2, 13)$	2 3 3	$\frac{1}{3}(7, 10, 7)$	2 3 3	$\frac{1}{3}(8, 7, 7)$	1 4 1
5, 3, 4	5 3 4	$\frac{1}{3}(7, 4, 23)$	4 5 5	$\frac{1}{3}(8, 5, 17)$	5 4 1
$\frac{1}{3}(5, 19, 8)$	5 3 4	$\frac{1}{3}(7, 11, 10)$	5 1 2	$\frac{1}{3}(8, 10, 4)$	2 4 0
$\frac{1}{3}(5, 1, 8)$	3 1 0	$\frac{1}{3}(7, 7, 8)$	1 1 4	$\frac{1}{3}(8, 11, 11)$	3 4 3
$\frac{1}{3}(5, 3, 1)$	0 1 3	$\frac{1}{3}(7, 1, 2)$	1 1 2	$\frac{1}{3}(8, 19, 5)$	3 4 3
6, 0, 0	4 2 4	$\frac{1}{3}(7, 1, 16)$	5 3 0	(8, 1, 1)	5 4 5
6, 1, 1	3 2 5	$\frac{1}{3}(7, 14, 5)$	2 5 1	$\frac{1}{3}(8, 14, 8)$	2 4 4
6, 1, 1	5 2 3	7, 1, 0	5 3 4	$\frac{1}{3}(8, 17, 5)$	1 4 5
6, 3, 3	5 2 5	$\frac{1}{3}(7, 4, 5)$	0 1 3	$\frac{1}{3}(10, 7, 11)$	1 2 5
$\frac{1}{3}(7, 17, 2)$	3 5 2	$\frac{1}{3}(7, 5, 4)$	3 1 0	$\frac{1}{3}(10, 13, 1)$	1 2 5
$\frac{1}{3}(7, 1, 20)$	3 5 4	$\frac{1}{3}(7, 23, 4)$	5 5 4	$\frac{1}{3}(10, 1, 13)$	5 2 1
$\frac{1}{3}(7, 2, 17)$	2 5 3	$\frac{1}{3}(8, 4, 10)$	0 4 2	$\frac{1}{3}(10, 11, 7)$	5 2 1
$\frac{1}{3}(7, 8, 11)$	0 5 1	$\frac{1}{3}(8, 5, 19)$	3 4 5	$\frac{1}{3}(10, 1, 5)$	1 2 3
$\frac{1}{3}(7, 8, 7)$	4 1 1	$\frac{1}{3}(8, 11, 7)$	1 0 5	$\frac{1}{3}(10, 5, 1)$	3 2 1
$\frac{1}{3}(7, 5, 14)$	1 5 2	$\frac{1}{3}(8, 1, 18)$	1 4 3	$\frac{1}{3}(10, 7, 7)$	3 2 3
$\frac{1}{3}(7, 16, 1)$	0 3 5	$\frac{1}{3}(8, 8, 14)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(10, 8, 4)$	4 2 0
$\frac{1}{3}(7, 11, 8)$	1 5 0	$\frac{1}{3}(8, 16, 2)$	4 4 2		
$\frac{1}{3}(7, 10, 11)$	2 1 5				
$\frac{1}{3}(7, 2, 1)$	2 1 1				

(续表)

h^* k^* l^*	hkl	h^* k^* l^*	hkl	h^* k^* l^*	hkl
$\frac{1}{3}(\overline{10}, \overline{4}, 8)$	0 2 4	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 2, 5)$	2 3 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{1}, \overline{11})$	1 4 5
$\frac{1}{3}(\overline{10}, 2, 2)$	2 2 2	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{4}, \overline{7})$	4 1 3	$\frac{1}{3}(\overline{15}, \overline{13}, \overline{13})$	5 4 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 7, 10)$	1 3 2	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{10}, \overline{1})$	2 1 5	$\frac{1}{3}(\overline{15}, 8, 2)$	4 4 2
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 4, \overline{5})$	4 1 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{4}, \overline{11})$	0 3 5	$\frac{1}{3}(\overline{15}, 5, 5)$	3 4 2
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 2, \overline{19})$	2 5 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{11}, 4)$	5 3 0	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{2}, 7)$	2 3 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 7, 8)$	5 1 0	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{1}, 8)$	1 3 4	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 1, 4)$	3 6 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 1, \overline{2})$	3 1 2	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{7}, \overline{4})$	3 1 4	$\frac{1}{4}(\overline{17}, 4, 1)$	4 3 3
$\frac{1}{8}(\overline{11}, \overline{5}, 4)$	1 1 4	$\frac{1}{8}(\overline{13}, \overline{1}, \overline{10})$	5 1 2	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 5, 9)$	5 1 4
$\frac{1}{8}(\overline{11}, \overline{16}, \overline{1})$	4 5 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{16}, \overline{13})$	4 5 5	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 7, \overline{2})$	5 3 2
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{2}, 1)$	2 1 3	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 8, \overline{1})$	4 3 1	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{8}, \overline{5})$	4 1 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{5}, \overline{14})$	5 3 2	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{13}, \overline{16})$	5 5 4	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{2}, \overline{1})$	4 1 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{8}, \overline{11})$	4 3 3	$\frac{1}{3}(\overline{14}, 7, \overline{5})$	5 2 1	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 8, 5)$	4 3 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{8}, 7)$	0 1 5	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{5}, \overline{11})$	6 2 3	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 5, 8)$	3 3 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 4, 13)$	0 5 3	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{11}, \overline{5})$	3 2 5	$\frac{1}{8}(\overline{19}, 11, 2)$	5 5 2
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{1}, \overline{16})$	1 5 4	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{5}, 7)$	1 2 5	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 2, 11)$	2 5 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{11}, \overline{8})$	3 3 4	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{8}, \overline{8})$	4 2 4	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{1}, \overline{4})$	3 1 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{13}, \overline{4})$	3 5 0	$\frac{1}{3}(\overline{14}, 1, 1)$	3 2 3	$\frac{1}{3}(\overline{20}, 1, 7)$	2 4 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{14}, 5)$	2 3 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 2, 8)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(\overline{20}, 7, 1)$	5 4 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{19}, 2)$	5 5 2	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{1}, \overline{7})$	5 0 3	$\frac{1}{3}(\overline{22}, \overline{1}, \overline{1})$	5 2 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 10, 7)$	2 5 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 7, \overline{1})$	3 0 5	$\frac{1}{3}(\overline{23}, 7, 4)$	5 5 4
$\frac{1}{3}(\overline{13}, 5, 2)$	3 3 2	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{11}, \overline{1})$	5 4 1	$\frac{1}{3}(\overline{23}, 4, 7)$	4 5 5

(九) (121) 孪晶衍射位置表

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
0, 2, 4	0 2 4	$\frac{1}{3}(1, 11, 2)$	2 1 3	$\frac{1}{3}(1, 11, 10)$	4 5 1
0, 1, 1	1 1 0	$\bar{1} 3 2$	2 1 3	$\frac{1}{3}(1, 7, 20)$	4 5 3
0, 3, 3	1 1 4	1 3 2	2 1 5	$\bar{1}, 1, 3$	4 5 5
0, 1, 5	1 3 4	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 13, \bar{10})$	3 1 5	$\bar{1} 6 1$	5 2 3
0, 4, 2	2 0 4	1, 3, 2	2 3 1	$\frac{1}{3}(1, 22, \bar{1})$	5 2 5
0, 0, 0	3 4 4	$\frac{1}{3}(1, 5, 10)$	2 3 1	$\frac{1}{3}(1, 16, 11)$	5 4 1
0, 5, 1	3 1 4	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 1, 14)$	2 3 3	1 4 5	5 4 1
0, 1, 7	3 5 4	$\bar{1}, \bar{1}, 6$	1 3 5	$\frac{1}{3}(1, 20, 7)$	5 4 3
0, 6, 0	4 2 4	1, 1, 6	2 3 5	1, 8, 1	5 4 5
0, 7, 1	5 3 4	$\frac{1}{3}(1, 1, 32)$	2 3 5	2, 1, 5	1 5 2
$\frac{1}{3}(1, 7, 16)$	0 3 5	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 16, 7)$	3 0 5	$\bar{2}, 0, 4$	0 3 2
$\frac{1}{3}(1, 4, 1)$	1 0 1	1, 3, 4	0 1 5	$\frac{1}{3}(2, 7, \bar{1})$	1 1 2
1, 0, 1	$\bar{1} 0 1$	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 10, 3)$	3 2 1	2, 1, 1	$\bar{1} 1 2$
$\frac{1}{3}(1, 8, 5)$	2 0 3	$\bar{1}, 2, 8$	3 2 1	$\frac{1}{3}(2, 5, 5)$	1 1 2
1, 4, 3	3 0 5	$\frac{1}{3}(1, 14, 1)$	3 2 3	$\frac{1}{3}(2, 1, 7)$	1 1 2
1, 1, 0	0 1 1	$\bar{1}, 6, \bar{1}$	3 2 5	$\frac{1}{3}(2, 10, 2)$	2 2 2
$\frac{1}{3}(1, 1, 4)$	0 1 1	1, 4, 3	3 4 1	$\bar{2}, 2, 2$	2 2 2
1, 2, 1	1 2 1	$\frac{1}{3}(1, 8, 13)$	3 4 1	$\frac{1}{3}(2, 2, 10)$	2 2 3
$\frac{1}{3}(1, 2, 7)$	2 2 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 4, 17)$	3 4 3	$\frac{1}{3}(2, 11, 1)$	3 1 2
$\bar{1}, 2, 3$	2 2 3	1, 0, 7	3 4 5	$\bar{2}, 3, \bar{1}$	3 1 2
$\frac{1}{3}(1, 2, 11)$	1 2 3	$\bar{1}, 5, 0$	4 1 3	$\bar{2}, 1, 3$	3 1 2
$\frac{1}{3}(1, 10, 13)$	1 2 5	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 19, 4)$	4 1 5	$\frac{1}{3}(2, 13, 5)$	3 3 2
$\bar{1}, 2, 5$	1 2 5	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 13, 8)$	4 3 1	$\frac{1}{3}(2, 5, 13)$	3 3 2
1, 0, 5	2 4 3	$\bar{1}, 3, 4$	4 3 1	2, 5, 3	3 5 2
$\frac{1}{3}(1, 2, 19)$	2 4 5	$\frac{1}{3}(1, 17, 4)$	4 3 3	$\frac{1}{3}(2, 7, 17)$	3 5 2
$\frac{1}{3}(1, 5, 8)$	0 1 3	1, 7, 6	4 3 5	$\bar{2}, 4, 0$	4 0 2
$\frac{1}{3}(1, 7, 2)$	2 1 1	1, 5, 4	4 5 1		
$\bar{1}, 1, 2$	2 1 1				

(续表)

h^1	h^2	h^3	$h^1 h^2$	h^1	h^2	h^3	$h^1 h^2$	h^1	h^2	h^3	$h^1 h^2$
2, 3, 1	1 3 2	$\frac{1}{3}(4, 7, 5)$	3 1 0	$\frac{1}{3}(4, 7, 23)$	5 5 4						
2, 1, 3	1 3 2	4, 1, 3	3 1 4	5, 3, 2	2 3 5						
$\frac{1}{3}(2, 1, 11)$	1 3 2	$\frac{1}{3}(4, 13, 7)$	3 1 4	$\frac{1}{3}(5, 10, 1)$	1 2 3						
$\frac{1}{3}(2, 16, 8)$	4 4 2	4, 1, 3	1 5 0	$\frac{1}{8}(5, 2, 13)$	3 2 3						
$\frac{1}{8}(2, 8, 16)$	4 4 2	4, 5, 1	1 5 4	$\frac{1}{3}(5, 7, 3)$	0 3 1						
2, 5, 1	5 1 2	$\frac{1}{3}(4, 17, 1)$	3 3 4	5, 2, 3	3 2 5						
$\frac{1}{3}(2, 17, 7)$	5 3 2	$\frac{1}{8}(4, 1, 17)$	3 3 4	$\frac{1}{3}(5, 14, 11)$	3 2 5						
2, 3, 5	5 3 2	$\frac{1}{3}(4, 11, 13)$	3 5 0	5, 0, 1	3 4 1						
$\frac{1}{3}(2, 4, 4)$	0 0 2	$\frac{1}{8}(4, 7, 19)$	1 5 4	$\frac{1}{3}(5, 16, 5)$	3 4 3						
$\frac{1}{3}(2, 19, 11)$	5 5 2	4, 3, 3	3 5 4	5, 1, 2	2 5 1						
$\frac{1}{3}(2, 11, 19)$	5 5 2	$\frac{1}{3}(4, 2, 4)$	0 2 0	$\frac{1}{3}(5, 7, 14)$	2 5 1						
3, 1, 2	2 3 1	$\frac{1}{8}(4, 4, 2)$	2 0 0	$\frac{1}{3}(5, 11, 4)$	4 1 1						
3, 5, 2	2 5 3	$\frac{1}{3}(4, 11, 3)$	1 1 4	5, 1, 4	4 1 5						
3, 7, 4	0 3 1	$\frac{1}{3}(4, 5, 7)$	1 3 0	$\frac{1}{3}(5, 17, 8)$	4 1 5						
3, 3, 3	2 5 5	$\frac{1}{3}(4, 10, 8)$	4 2 0	5, 7, 0	4 3 1						
3, 2, 7	3 2 1	4, 2, 0	4 2 0	$\frac{1}{3}(5, 5, 10)$	4 3 3						
3, 4, 5	3 4 5	4, 3, 7	1 3 4	$\frac{1}{8}(5, 4, 7)$	1 0 3						
3, 3, 0	4 1 1	$\frac{1}{3}(4, 7, 13)$	1 3 4	$\frac{1}{3}(5, 5, 2)$	2 1 1						
3, 1, 4	4 1 3	4, 3, 7	5 1 0	$\frac{1}{3}(5, 19, 8)$	4 5 3						
5, 5, 4	4 3 5	$\frac{1}{3}(4, 7, 13)$	1 3 4	5, 3, 4	4 5 3						
3, 4, 1	5 0 1	4, 3, 7	5 1 0	$\frac{1}{3}(5, 7, 4)$	0 1 3						
3, 2, 5	5 2 3	$\frac{1}{3}(4, 7, 1)$	1 1 0	$\frac{1}{3}(5, 8, 1)$	3 0 1						
3, 6, 3	5 2 5	$\frac{1}{3}(4, 19, 7)$	5 1 4	$\frac{1}{3}(5, 2, 5)$	1 2 1						
3, 1, 3	2 1 3	4, 1, 5	5 1 4	$\frac{1}{3}(5, 14, 7)$	5 2 1						
3, 0, 3	1 4 1	$\frac{1}{3}(4, 13, 11)$	5 3 0								
3, 4, 1	1 4 3	4, 5, 3	5 3 4								
$\frac{1}{3}(4, 5, 11)$	1 1 4	$\frac{1}{3}(4, 23, 7)$	5 5 4								
$\frac{1}{3}(4, 3, 10)$	2 4 0										
4, 0, 2	2 4 0										

h^1 k^1 l^1	hkl	h^2 k^2 l^2	hkl	h^3 k^3 l^3	hkl
$5, 2, \bar{1}$	$\bar{5} 2 1$	$\frac{1}{3}(7, 2, 1)$	$\bar{1} 2 1$	$\frac{1}{3}(8, \bar{1}, 13)$	$3 1 \bar{4}$
$\frac{1}{3}(5, 13, 2)$	$2 3 3$	$\frac{1}{3}(7, 23, 4)$	$4 5 5$	$\frac{1}{3}(8, 13, \bar{1})$	$1 3 4$
$\frac{1}{3}(5, 11, 14)$	$2 \bar{3} 5$	$\frac{1}{3}(7, 16, \bar{1})$	$5 0 3$	$\frac{1}{3}(8, 7, 11)$	$1 5 0$
$5, 4, \bar{1}$	$\bar{1} 4 5$	$\frac{1}{3}(7, \bar{4}, \bar{5})$	$\bar{3} 0 1$	$\frac{1}{3}(8, 8, 14)$	$2 4 4$
$\frac{1}{3}(5, 4, 11)$	$1 4 \bar{1}$	$\frac{1}{3}(7, 11, 8)$	$0 1 5$	$\frac{1}{3}(8, 7, \bar{7})$	$1 1 4$
$5, 4, 3$	$5 \bar{4} 3$	$\frac{1}{3}(7, 10, 17)$	$5 2 \bar{1}$	$\frac{1}{3}(8, 11, 7)$	$5 1 0$
$\frac{1}{3}(5, 8, 19)$	$5 4 3$	$\frac{1}{3}(7, 8, 7)$	$1 4 1$	$\frac{1}{3}(8, 17, \bar{5})$	$5 \bar{1} 4$
$\frac{1}{3}(5, \bar{1}, 10)$	$2 1 \bar{3}$	$\frac{1}{3}(7, 11, 10)$	$2 5 1$	$\frac{1}{3}(8, 11, 11)$	$3 3 4$
$\frac{1}{3}(5, 8, 17)$	$1 \bar{4} 5$	$\frac{1}{3}(7, 20, 1)$	$3 4 5$	$\frac{1}{3}(8, 3, \bar{17})$	$1 3 4$
$6, 1, 1$	$\bar{3} 5 2$	$\frac{1}{3}(7, 7, \bar{10})$	$2 3 3$	$\frac{1}{3}(8, \bar{3}, \bar{1})$	$3 1 0$
$6, 0, 0$	$\bar{4} 4 2$	$\frac{1}{3}(7, 14, \bar{5})$	$1 2 5$	$\frac{1}{3}(8, 5, 19)$	$5 3 4$
$6, \bar{1}, \bar{1}$	$\bar{5} 3 2$	$\frac{1}{3}(7, 4, \bar{13})$	$1 \bar{4} 3$	$\frac{1}{3}(8, 1, 5)$	$1 3 0$
$6, 3, \bar{5}$	$5 5 2$	$\frac{1}{3}(7, 17, \bar{2})$	$2 3 5$	$8, 1, \bar{1}$	$6 5 1$
$\frac{1}{3}(7, 5, 4)$	$0 3 1$	$7, 0, \bar{1}$	$5 4 3$	$\frac{1}{3}(10, 5, 1)$	$\bar{1} 3 2$
$\frac{1}{3}(7, 1, \bar{16})$	$0 \bar{5} 3$	$\frac{1}{3}(7, 4, 23)$	$5 4 5$	$\frac{1}{3}(10, 8, 4)$	$0 4 2$
$\frac{1}{3}(7, 7, 8)$	$4 1 \bar{1}$	$\frac{1}{3}(8, 10, \bar{4})$	$0 2 4$	$\frac{1}{3}(10, 4, 8)$	$\bar{1} 0 2$
$\frac{1}{3}(7, 5, 14)$	$2 1 \bar{5}$	$\frac{1}{3}(8, 14, 8)$	$4 2 4$	$\frac{1}{3}(10, 7, \bar{7})$	$3 3 2$
$\frac{1}{3}(7, 13, \bar{2})$	$4 \bar{1} 3$	$\frac{1}{3}(8, 2, 16)$	$4 2 \bar{4}$	$\frac{1}{3}(10, 11, 7)$	$1 5 2$
$\frac{1}{3}(7, 10, 7)$	$3 \bar{2} 3$	$\frac{1}{3}(8, 4, 10)$	$\bar{2} 0 4$	$\frac{1}{3}(10, 13, \bar{1})$	$5 \bar{1} 2$
$\frac{1}{3}(7, 8, 11)$	$1 0 5$	$\frac{1}{3}(8, 16, 2)$	$2 4 4$	$\frac{1}{3}(10, 7, 11)$	$5 1 5$
$\frac{2}{3}(7, 1, 20)$	$4 3 5$	$\frac{1}{3}(8, 19, 5)$	$3 5 4$	$\frac{1}{3}(10, 2, \bar{2})$	$\bar{2} 2 2$
$\frac{1}{3}(7, 1, 2)$	$2 1 1$				
$\frac{1}{3}(7, \bar{2}, 17)$	$3 2 \bar{5}$				
$7, 1, 0$	$\bar{4} 5 3$				

(续表)

$k^1 \ k^2 \ k^3$	hkl	$k^1 \ k^2 \ k^3$	hkl	$k^1 \ k^2 \ k^3$	hkl
$\frac{1}{3}(10, 1, \overline{13})$	1 5 2	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 10, \overline{1})$	5 2 1	$\frac{1}{3}(16, 11, 1)$	1 5 4
$\frac{1}{3}(20, \overline{1}, 5)$	5 1 2	$\frac{1}{3}(13, 5, \overline{2})$	2 3 3	$\frac{1}{3}(16, 7, \overline{1})$	5 3 0
$\frac{1}{3}(11, 8, 7)$	5 0 1	$\frac{1}{3}(13, \overline{4}, \overline{11})$	5 0 3	$\frac{1}{3}(16, \overline{1}, \overline{11})$	3 1 4
$\frac{1}{3}(\overline{1}, 11, \overline{3})$	4 3 3	$\frac{1}{3}(13, \overline{1}, 3)$	3 1 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, 13, \overline{13})$	5 3 4
$\frac{1}{3}(11, 4, \overline{13})$	3 0 5	$\frac{1}{3}(13, 11, 4)$	0 5 3	$\frac{1}{3}(17, 2, 7)$	5 2 3
$\frac{1}{3}(11, 5, \overline{4})$	4 1 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 1, 10)$	2 5 1	$\frac{1}{3}(17, 1, \overline{4})$	1 3 3
$\frac{1}{3}(11, 5, 14)$	2 5 3	$\frac{1}{3}(13, 2, \overline{5})$	3 2 3	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 5, \overline{8})$	4 3 1
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 11, \overline{5})$	5 2 3	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 4, 7)$	3 4 1	$\frac{1}{3}(17, 4, \overline{1})$	3 4 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 4, 5)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(13, 8, 1)$	1 4 3	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 8, \overline{5})$	5 4 1
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 2, 19)$	5 2 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 16, \overline{13})$	5 1 5	$\frac{1}{3}(17, 7, 2)$	5 5 3
$\frac{1}{3}(11, 16, \overline{1})$	1 4 5	$\frac{1}{3}(13, 7, \overline{4})$	4 3 1	$\frac{1}{3}(19, 2, \overline{11})$	5 2 5
$\frac{1}{3}(11, 1, 2)$	2 3 1	$\frac{1}{3}(\overline{14}, 5, 10)$	3 5 2	$\frac{1}{3}(19, 5, 8)$	4 3 5
$\frac{1}{3}(11, 7, \overline{10})$	2 1 5	$\frac{1}{3}(14, 1, \overline{1})$	3 3 2	$\frac{1}{3}(19, 8, 5)$	5 4 5
$\frac{1}{3}(11, 7, 8)$	0 5 1	$\frac{1}{3}(\overline{14}, 11, 5)$	5 3 2	$\frac{1}{3}(19, 11, 2)$	2 5 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 8, \overline{11})$	3 4 3	$\frac{1}{3}(14, 5, 7)$	5 1 2	$\frac{1}{3}(19, \overline{1}, 4)$	4 5 1
$\frac{1}{3}(11, 10, 7)$	1 3 5	$\frac{1}{3}(\overline{14}, 8, \overline{3})$	4 4 2	$\frac{1}{3}(19, 4, \overline{1})$	5 4 1
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{1}, 16)$	4 1 5	$\frac{1}{3}(14, 7, 5)$	1 5 2	$\frac{1}{3}(20, 7, \overline{1})$	5 5 4
$\frac{1}{3}(11, 3, \overline{1})$	3 2 1	$\frac{1}{3}(16, 2, 3)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(20, 1, 7)$	5 3 4
$\frac{1}{3}(11, 19, 2)$	2 5 5	$\frac{1}{3}(13, 8, \overline{2})$	3 4 4	$\frac{1}{3}(22, \overline{1}, \overline{1})$	5 5 2
$\frac{1}{3}(11, 13, \overline{3})$	0 3 5	$\frac{1}{3}(16, \overline{1}, 7)$	3 5 0	$\frac{1}{3}(23, 7, 4)$	4 5 5
$\frac{1}{3}(\overline{13}, 13, \overline{16})$	4 5 5	$\frac{1}{3}(16, 5, \overline{3})$	3 3 4	$\frac{1}{3}(23, 4, 7)$	5 4 5

(十) ($\bar{1}21$) 孪晶衍射位置表

h^0 h^1 h^2	hkl	h^0 h^1 h^2	hkl	h^0 h^1 h^2	hkl
0, 2, 4	0 2 4	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 11, \bar{2})$	2 1 3	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{11}, \bar{10})$	4 0 1
0, 1, 1	1 1 0	1, 3, 2	2 1 3	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 7, 20)$	4 5 3
0, 3, 3	1 1 3	1, 5, 3	2 1 5	1, 1, 3	4 5 5
0, 1, 3	1 3 4	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{13}, 10)$	2 1 5	1, 6, 1	5 2 3
0, 1, 2	2 0 4	1, 3, 2	2 1 5	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 22, 7)$	5 2 5
0, 0, 3	2 3 4	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{5}, \bar{10})$	2 3 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 16, 11)$	5 4 1
0, 3, 1	3 1 4	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 1, 14)$	2 3 1	1, 4, 3	5 4 1
0, 1, 7	3 3 4	1, 1, 3	2 3 5	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 20, 7)$	5 4 3
0, 3, 0	3 3 4	1, 1, 3	2 3 5	1, 8, 1	5 4 5
0, 7, 1	3 3 4	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 1, 29)$	2 3 5	2, 1, 3	1 5 2
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 7, 10)$	0 3 5	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 13, 7)$	3 0 5	2, 0, 4	0 4 2
1, 0, 1	1 0 1	1, 3, 2	0 1 5	2, 1, 1	1 1 2
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 4, \bar{1})$	1 0 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 10, 5)$	3 2 1	$\frac{1}{3}(\bar{2}, 7, \bar{1})$	1 3 2
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 8, \bar{5})$	1 0 3	1, 5, 3	3 2 1	$\frac{1}{3}(\bar{2}, 1, 7)$	1 1 2
1, 4, 3	1 0 5	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 11, 1)$	3 2 3	$\frac{1}{3}(\bar{2}, 5, 5)$	1 1 2
1, 1, 0	0 1 1	1, 0, 1	3 2 5	$\frac{1}{3}(\bar{2}, 10, 2)$	2 2 2
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 1, \bar{4})$	0 1 1	1, 4, 3	3 4 1	$\frac{1}{3}(\bar{2}, 13, 5)$	3 3 2
1, 2, 1	1 2 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 17, 4)$	4 3 1	$\frac{1}{3}(\bar{2}, 5, \bar{13})$	3 3 2
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 2, \bar{15})$	1 2 3	1, 5, 4	4 3 3	2, 5, 3	3 5 2
1, 2, 3	1 2 5	1, 7, 0	4 3 5	$\frac{1}{3}(\bar{2}, 7, \bar{17})$	3 5 2
1, 2, 5	1 2 5	1, 5, 4	4 5 1	2, 4, 0	4 0 2
$\frac{2}{3}(\bar{1}, 19, 13)$	1 2 5				
1, 0, 3	1 3 3				
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 4, 19)$	1 3 5				
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 5, 5)$	0 1 3				
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 7, 2)$	2 1 1				
1, 1, 3	2 1 1				

(续表)

h^0	k^0	l^0	hkl	h^*	k^*	l^*	hkl	h^*	k^*	l^*	hkl
2, 3, 1			1 3 2	$\frac{1}{3}(4, 7, 5)$			3 1 0	$\frac{1}{3}(4, 23, 7)$			5 5 4
$\frac{1}{3}(2, \overline{1}, 11)$			1 3 2	$\overline{4}, 1, 3$			3 1 4	$\frac{1}{3}(4, \overline{7}, 20)$			5 5 4
2, 1, 3			1 3 2	$\frac{1}{3}(4, \overline{13}, 7)$			3 1 4	$\frac{1}{3}(5, 2, 5)$			1 2 1
$\frac{1}{3}(2, 10, 8)$			$\overline{4} \pm 2$	$\overline{4}, 1, 3$			1 5 0	$\frac{1}{3}(5, 10, 1)$			1 2 3
$\frac{1}{3}(2, \overline{8}, \overline{16})$			4 7 2	$4, 5, 1$			$\overline{1} \pm 4$	$\frac{1}{3}(5, 2, 13)$			3 3 3
2, 5, 1			5 1 2	$\frac{1}{3}(4, 17, 1)$			3 3 4	$\frac{1}{3}(5, 2, 3)$			3 2 5
$\frac{1}{3}(2, 17, 7)$			5 3 2	$\frac{1}{3}(4, \overline{1}, \overline{17})$			3 3 4	$\frac{1}{3}(5, \overline{1}, 8)$			0 3 1
2, 3, 5			5 3 2	$\frac{1}{3}(4, 11, 13)$			3 3 0	$\frac{1}{3}(5, 14, 11)$			3 2 5
$\frac{1}{3}(3, 4, \overline{5})$			0 0 2	$\frac{1}{3}(4, 1, 10)$			1 5 4	$\frac{1}{3}(5, 0, 1)$			3 4 1
$\frac{1}{3}(3, 19, 11)$			5 5 2	$\frac{1}{3}(4, 2, 4)$			0 2 0	$\frac{1}{3}(5, 16, 5)$			3 4 3
$\frac{1}{3}(2, \overline{11}, 10)$			5 5 2	$4, 3, 5$			3 5 4	$\frac{1}{3}(5, 4, 7)$			1 0 3
3, 1, 2			2 3 1	$\frac{1}{3}(4, 4, \overline{5})$			2 0 0	$\frac{1}{3}(5, 1, 2)$			2 5 1
3, 5, 2			2 5 3	$\frac{1}{3}(4, 5, 7)$			1 1 0	$\frac{1}{3}(5, \overline{7}, \overline{14})$			2 5 1
3, 1, 2			0 3 1	$3, 2, 0$			1 2 0	$\frac{1}{3}(5, 11, 4)$			4 1 1
3, 3, 0			2 5 5	$\frac{1}{3}(4, 10, 8)$			4 2 0	$\frac{1}{3}(5, 1, 4)$			4 1 5
3, 3, 1			2 3 1	$\frac{1}{3}(4, 11, 5)$			1 1 4	$\frac{1}{3}(5, 17, 8)$			4 3 1
3, 3, 0			3 1 3	$\frac{1}{3}(4, 1, 1)$			1 1 0	$\frac{1}{3}(5, 1, 0)$			4 3 3
3, 3, 4			4 3 5	$4, 3, \overline{1}$			1 3 2	$\frac{1}{3}(5, \overline{5}, \overline{16})$			1 4 5
3, 4, 1			5 6 1	$\frac{1}{3}(4, 7, 13)$			1 3 4	$\frac{1}{3}(5, 8, 17)$			4 5 3
3, 2, 5			5 5 3	$\overline{4}, 3, \overline{1}$			5 1 0	$\frac{1}{3}(5, 10, 8)$			0 1 3
3, 0, 5			5 2 5	$\frac{1}{3}(4, 10, 1)$			3 1 4	$\frac{1}{3}(5, 5, 2)$			2 1 1
3, 1, 1			2 1 3	$\overline{4}, 1, 5$			5 1 4				
3, 0, 5			1 4 1	$\frac{1}{3}(4, 13, 11)$			3 3 0				
3, 4, 1			1 4 3	$\frac{1}{3}(4, 5, \overline{11})$			1 1 4				
3, 0, 2			2 4 0	$\overline{4}, 5, 3$			5 3 4				
$\frac{1}{3}(4, 8, 10)$			2 4 0								

(续表)

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
$\frac{1}{3}(5, 8, 1)$	3 0 1	$\frac{1}{3}(7, 1, 2)$	2 1 1	$\frac{1}{3}(8, 19, 5)$	3 5 4
5, 2, 1	5 2 1	$\frac{1}{3}(7, 1, 20)$	4 3 5	$\frac{1}{3}(8, 13, 1)$	1 3 4
$\frac{1}{3}(5, 14, 7)$	5 2 1	$\frac{1}{3}(7, 4, 13)$	1 4 3	$\frac{1}{3}(8, 11, 7)$	5 1 0
$\frac{1}{3}(5, 13, 2)$	2 3 3	$\frac{1}{3}(7, 2, 17)$	3 2 5	$\frac{1}{3}(8, 13, 2)$	2 4 4
5, 4, 1	1 4 5	7, 1, 0	4 5 3	$\frac{1}{3}(8, 17, 5)$	5 1 4
$\frac{1}{3}(5, 1, 10)$	2 1 3	$\frac{1}{3}(7, 23, 4)$	4 5 5	$\frac{1}{3}(8, 1, 5)$	1 3 0
$\frac{1}{3}(5, 11, 14)$	2 3 5	$\frac{1}{3}(7, 8, 11)$	1 0 5	$\frac{1}{3}(8, 7, 7)$	1 1 4
$\frac{1}{3}(5, 4, 11)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(7, 16, 1)$	5 0 3	$\frac{1}{3}(8, 8, 14)$	2 4 4
$\frac{1}{3}(5, 8, 19)$	5 4 3	$\frac{1}{3}(7, 4, 5)$	3 0 1	$\frac{1}{3}(8, 5, 1)$	3 1 0
5, 4, 3	5 4 3	$\frac{1}{3}(7, 11, 8)$	0 1 5	$\frac{1}{3}(8, 11, 11)$	3 3 4
5, 3, 2	2 3 5	$\frac{1}{3}(7, 10, 11)$	5 2 1	$\frac{1}{3}(8, 5, 19)$	5 3 4
6, 1, 1	3 5 2	$\frac{1}{3}(7, 8, 7)$	2 4 1	$\frac{1}{3}(8, 7, 11)$	1 5 0
6, 0, 0	4 4 2	$\frac{1}{3}(7, 14, 5)$	1 2 5	$\frac{1}{3}(8, 5, 17)$	1 5 4
3, 1, 1	5 3 2	$\frac{1}{3}(7, 7, 10)$	2 3 3	8, 1, 1	5 5 4
6, 3, 3	3 5 2	7, 0, 1	5 4 3	$\frac{1}{3}(10, 4, 8)$	4 0 2
$\frac{1}{3}(7, 11, 10)$	2 5 1	$\frac{1}{3}(7, 4, 23)$	5 4 5	$\frac{1}{3}(10, 2, 2)$	2 2 2
$\frac{1}{3}(7, 1, 16)$	0 5 3	$\frac{1}{3}(7, 20, 1)$	3 4 5	$\frac{1}{3}(10, 5, 1)$	1 3 2
$\frac{1}{3}(7, 7, 8)$	4 1 1	$\frac{1}{3}(8, 10, 4)$	0 2 4	$\frac{1}{3}(10, 7, 11)$	5 1 2
$\frac{1}{3}(7, 13, 4)$	4 1 3	$\frac{1}{3}(8, 2, 16)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(10, 13, 1)$	5 1 2
$\frac{1}{3}(7, 17, 2)$	2 3 5	$\frac{1}{3}(8, 14, 8)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(10, 7, 7)$	3 3 2
$\frac{1}{3}(7, 5, 14)$	2 1 5	$\frac{1}{3}(8, 4, 10)$	2 0 4	$\frac{1}{3}(10, 8, 4)$	0 4 2
$\frac{1}{3}(7, 10, 7)$	3 2 3	$\frac{1}{3}(8, 1, 18)$	3 1 4		
$\frac{1}{3}(7, 2, 1)$	1 2 1				
$\frac{1}{3}(7, 5, 4)$	0 3 1				

(23)

h^1 k^1 l^1	hkl	h^2 k^2 l^2	hkl	h^3 k^3 l^3	hkl
$\frac{1}{3}(\overline{10}, \overline{1}, 13)$	1 5 2	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{7}, 4)$	4 3 1	$\frac{1}{3}(\overline{16}, 11, 1)$	1 5 4
$\frac{1}{3}(\overline{10}, \overline{1}, \overline{5})$	3 1 2	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{1}, \overline{8})$	4 1 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, 8, \overline{2})$	2 4 4
$\frac{1}{3}(\overline{10}, 11, 7)$	1 5 2	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{10}, 1)$	5 2 1	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{1}, 11)$	5 1 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{5}, \overline{4})$	4 1 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 5, \overline{2})$	2 3 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, 5, 5)$	3 3 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{8}, \overline{7})$	5 0 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{4}, 11)$	5 0 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{13}, 13)$	5 5 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 1, 2)$	2 3 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 11, 4)$	0 5 3	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{8}, 5)$	5 4 1
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 19, 2)$	2 5 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 2, 5)$	3 2 3	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{7}, 2)$	2 5 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 4, \overline{13})$	3 0 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 8, 1)$	1 4 3	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 1, \overline{4})$	4 3 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 4, 5)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{4}, 7)$	3 4 1	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 4, \overline{1})$	3 4 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 14, 5)$	5 2 3	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 16, 13)$	5 4 5	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{2}, \overline{7})$	5 2 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{2}, \overline{19})$	5 2 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{1}, 10)$	2 5 1	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{5}, 8)$	4 5 1
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{5}, 14)$	2 5 3	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{13}, 16)$	4 5 5	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{1}, 4)$	4 5 1
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{11}, 8)$	4 3 3	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{11}, 5)$	5 3 2	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 2, \overline{11})$	5 2 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{2}, \overline{1})$	3 2 1	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{8}, 8)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{4}, 1)$	3 5 1
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 19, \overline{7})$	1 2 5	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{5}, \overline{7})$	5 1 2	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 11, \overline{2})$	2 5 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 13, \overline{4})$	0 3 5	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{5}, 11)$	3 5 2	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 5, \overline{8})$	4 3 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 1, \overline{16})$	4 1 5	$\frac{1}{3}(\overline{14}, 7, 5)$	1 5 2	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 8, \overline{5})$	3 4 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 16, \overline{1})$	1 4 5	$\frac{1}{3}(\overline{14}, 1, \overline{1})$	3 3 2	$\frac{1}{3}(\overline{20}, 7, \overline{1})$	3 5 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 7, \overline{10})$	2 1 5	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{1}, 7)$	3 5 0	$\frac{1}{3}(\overline{20}, 1, \overline{7})$	5 3 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{8}, 12)$	3 4 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{7}, 1)$	5 3 0	$\frac{1}{3}(\overline{22}, \overline{1}, 1)$	5 5 2
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 7, 8)$	0 5 1	$\frac{1}{3}(\overline{16}, 2, \overline{8})$	4 2 4	$\frac{1}{3}(\overline{23}, 4, \overline{7})$	5 4 5
				$\frac{1}{3}(\overline{23}, 7, \overline{4})$	4 5 5

(十一) (121) 孪晶衍射位置表

h	k	l	hkl	h	k	l	hkl	h	k	l	hkl
0, 1, 1	1 1 0		$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{16}, 11)$	5 4 1		$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{1}, 22)$	2 5 5				
0, 2, 4	0 2 4		1, 1, 8	2 5 3		$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{16}, 7)$	3 0 5				
0, 4, 0	4 2 4		1, 2, 3	1 2 3		$\frac{1}{3}(\bar{1}, 22, \bar{1})$	5 2 5				
0, 4, 2	2 0 4		1, 5, 0	4 1 3		$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{10}, \bar{13})$	1 2 5				
0, 5, 1	3 1 4		1, 5, 1	5 2 3		$\frac{1}{3}(\bar{1}, 7, \bar{16})$	0 3 5				
0, 1, 7	3 5 4		1, 5, 2	2 1 3		$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{19}, 4)$	4 1 5				
0, 1, 5	1 3 4		1, 0, 5	1 4 3		$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{4}, \bar{19})$	1 4 5				
0, 0, 6	2 4 4		$\frac{1}{3}(1, \bar{2}, \bar{11})$	1 2 3		$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{13}, \bar{10})$	2 1 5				
0, 5, 3	1 1 4		$\frac{1}{3}(1, \bar{14}, 1)$	3 3 3		$\frac{1}{3}(2, \bar{5}, \bar{5})$	1 1 2				
0, 7, 1	5 3 4		$\frac{1}{3}(1, 4, \bar{17})$	3 4 3		$\frac{1}{3}(2, \bar{1}, 7)$	1 1 2				
$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{4}, \bar{1})$	1 0 1		$\frac{1}{3}(1, 5, \bar{5})$	1 0 3		$\frac{1}{3}(2, 7, 1)$	1 1 2				
1, 0, 1	1 0 1		$\frac{1}{3}(1, \bar{17}, 4)$	4 3 3		$\frac{1}{3}(2, 2, \bar{10})$	2 2 2				
$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{1}, 3)$	0 1 1		$\frac{1}{3}(1, 7, \bar{20})$	4 5 3		$\frac{1}{3}(2, \bar{10}, 2)$	2 3 2				
1, 1, 0	0 1 1		$\frac{1}{3}(1, 5, 8)$	0 1 3		$\frac{1}{3}(2, 1, 3)$	3 1 2				
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 2, 7)$	1 2 1		$\frac{1}{3}(1, 1, \bar{14})$	2 3 3		$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{11}, 1)$	3 1 2				
1, 2, 1	1 2 1		$\frac{1}{3}(1, \bar{11}, \bar{2})$	2 1 3		$\frac{1}{3}(2, 5, \bar{13})$	3 3 2				
1, 1, 2	2 1 1		$\frac{1}{3}(1, \bar{20}, 7)$	5 4 3		$\frac{1}{3}(2, \bar{13}, 5)$	3 3 2				
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 7, 2)$	2 1 1		1, 1, 8	2 3 5		$\frac{1}{3}(\bar{2}, 7, \bar{17})$	3 5 2				
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 5, \bar{10})$	2 3 1		1, 5, 2	2 1 5		$\frac{1}{3}(2, 5, 3)$	3 5 2				
1, 5, 2	2 3 1		1, 7, 0	4 3 5		$\frac{1}{3}(2, 1, \bar{11})$	1 3 2				
1, 2, 3	3 2 1		1, 6, 1	3 2 5		$\frac{1}{3}(2, 8, \bar{16})$	4 4 2				
$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{10}, 5)$	3 2 1		1, 1, 8	2 5 5							
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 6, \bar{13})$	3 4 1		1, 4, 3	1 0 5							
1, 4, 3	3 4 1		1, 5, 4	0 1 5							
1, 3, 4	4 3 1		1, 2, 5	1 2 5							
$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{13}, 8)$	4 3 1		1, 5, 1	5 4 5							
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 11, \bar{16})$	5 5 1		1, 0, 7	3 4 5							
1, 5, 4	4 5 1										
1, 4, 5	5 4 1										

(续表)

h^i h^j l^i	hkl	h^i h^j l^i	hkl	h^i h^j l^i	hkl
$\frac{1}{2}(2, \overline{16}, 8)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(4, 7, \overline{5})$	3 1 0	$\frac{1}{3}(4, \overline{23}, 7)$	5 $\overline{5}$ 4
2, 5, $\overline{5}$	$\overline{5}$ 3 2	$\frac{1}{3}(\overline{4}, \overline{13}, \overline{7})$	3 1 4	$\overline{4}, \overline{8}, \overline{5}$	3 5 4
$\frac{1}{3}(\overline{2}, \overline{17}, 7)$	5 3 2	$\overline{4}, 1, 3$	3 1 $\overline{4}$	$\overline{4}, \overline{8}, \overline{5}$	5 3 4
$\frac{1}{3}(2, \overline{4}, \overline{4})$	0 0 2	$\overline{4}, 1, 3$	1 5 0	$\frac{1}{3}(\overline{5}, \overline{14}, \overline{11})$	3 2 5
1		$\frac{1}{3}(\overline{4}, 1, 19)$	$\overline{1}$ 5 4	$\overline{5}, 2, 3$	3 2 $\overline{5}$

(续表)

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
$\bar{5}, 4, 3$	5 4 3	$\frac{1}{3}(7, 4, \bar{5})$	$\bar{5} 0 1$	$\frac{1}{3}(8, \bar{1}, \bar{12})$	$\bar{5} 1 4$
$\frac{1}{3}(5, \bar{4}, 7)$	1 0 3	$\frac{1}{3}(7, \bar{8}, \bar{11})$	1 0 5	$\frac{1}{3}(8, 11, 7)$	$\bar{5} 1 0$
$\frac{1}{3}(5, \bar{19}, 8)$	4 5 3	$\frac{1}{3}(7, 1, \bar{11})$	$\bar{5} 2 1$	$\frac{1}{3}(8, \bar{19}, 5)$	3 5 4
$\frac{1}{3}(5, \bar{1}, \bar{10})$	2 1 3	$\frac{1}{3}(7, \bar{23}, 4)$	4 5 5	$\frac{1}{3}(8, 1, 5)$	1 3 0
$\frac{1}{3}(5, 8, 19)$	$\bar{5} 4 3$	$\frac{1}{3}(7, 2, 17)$	$\bar{5} 2 5$	$\frac{1}{3}(8, 2, \bar{16})$	4 2 4
$\frac{1}{3}(5, \bar{10}, 1)$	1 2 3	$\frac{1}{3}(7, 4, \bar{23})$	$\bar{5} 4 5$	$\frac{1}{3}(8, 5, 1)$	3 1 0
$\bar{5}, 1, 0$	4 3 1	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{13}, \bar{4})$	4 1 3	$\frac{1}{3}(8, 5, \bar{19})$	$\bar{5} 3 4$
$\bar{5}, 2, 1$	$\bar{5} 2 1$	$\frac{1}{3}(7, \bar{8}, 7)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(8, 7, 11)$	1 5 0
$\bar{5}, 0, 1$	3 4 1	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{7}, \bar{10})$	2 3 3	$\frac{1}{3}(8, \bar{12}, \bar{8})$	4 2 4
$\bar{5}, 1, 2$	2 5 1	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{16}, \bar{1})$	5 0 3	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 5, \bar{17})$	1 5 4
$\frac{1}{3}(5, 13, 2)$	2 3 3	$\frac{1}{3}(7, 1, \bar{16})$	0 5 3	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 8, \bar{14})$	2 4 4
$\bar{5}, 1, 1$	5 3 2	$\frac{1}{3}(7, 10, 7)$	3 2 3	$\frac{1}{3}(8, 17, 5)$	5 1 4
$\bar{5}, 0, 0$	4 4 2	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{4}, \bar{13})$	1 4 3	$\frac{1}{3}(8, \bar{11}, \bar{11})$	3 3 4
$\bar{5}, 1, 1$	3 5 2	$\bar{7}, 0, 1$	5 4 3	$\bar{8}, 1, 1$	5 5 4
$\bar{5}, \bar{5}, \bar{5}$	5 5 2	$\frac{1}{3}(7, \bar{11}, \bar{8})$	0 1 5	$\frac{1}{3}(10, \bar{1}, 5)$	3 1 2
$\frac{1}{3}(7, \bar{11}, 10)$	2 5 1	$\frac{1}{3}(7, \bar{17}, \bar{2})$	2 3 5	$\frac{1}{3}(10, 7, \bar{11})$	$\bar{5} 1 2$
$\frac{1}{3}(7, 7, \bar{8})$	4 1 1	$\frac{1}{3}(8, 10, \bar{4})$	0 2 4	$\frac{1}{3}(10, 4, 8)$	4 0 2
$\frac{1}{3}(7, \bar{2}, 1)$	3 4 5	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 7, 7)$	1 1 2	$\frac{1}{3}(10, 2, 2)$	2 2 2
$\frac{1}{3}(7, 2, 1)$	1 2 1	$\frac{1}{3}(8, \bar{13}, \bar{1})$	1 3 4	$\frac{1}{3}(10, \bar{11}, 7)$	1 5 2
$\frac{1}{3}(7, \bar{5}, \bar{14})$	2 1 5	$\frac{1}{3}(8, 4, \bar{10})$	$\bar{2} 0 4$	$\frac{1}{3}(10, 5, \bar{1})$	1 3 2
$\frac{1}{3}(7, 5, 4)$	0 3 1	$\frac{1}{3}(8, \bar{16}, 2)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(10, 8, 4)$	0 4 2
$\frac{1}{3}(7, \bar{14}, \bar{5})$	1 2 5				
$\bar{7}, 1, 0$	4 5 3				
$\frac{1}{3}(7, 1, 2)$	2 1 2				
$\frac{1}{3}(7, 1, \bar{20})$	4 3 5				

(续表)

h' k' l'	hkl	h' k' l'	hkl	h' k' l'	hkl
$\frac{1}{3}(\overline{10}, \overline{13}, \overline{1})$	5 1 2	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 4, \overline{1})$	5 0 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, 5, 5)$	3 3 4
$\frac{1}{3}(\overline{10}, \overline{1}, \overline{13})$	1 5 2	$\frac{1}{3}(\overline{16}, 2, 5)$	3 2 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{1}, \overline{11})$	5 1 4
$\frac{1}{3}(\overline{10}, \overline{7}, \overline{7})$	3 3 2	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{1}, 8)$	4 1 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, 8, 2)$	2 4 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{7}, \overline{10})$	2 1 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{7}, \overline{4})$	4 3 1	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{11}, \overline{1})$	1 5 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 2, 1)$	3 2 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 5, 2)$	2 3 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{13}, \overline{13})$	5 5 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{1}, \overline{16})$	4 1 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{11}, 4)$	0 3 3	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 1, 4)$	4 3 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{5}, 4)$	4 1 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{4}, \overline{7})$	3 4 1	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 4, 1)$	3 4 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{13}, \overline{4})$	0 3 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{1}, \overline{16})$	2 5 1	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 5, 2)$	4 5 1
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 2, \overline{19})$	5 2 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{10}, \overline{1})$	5 2 1	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{8}, \overline{5})$	5 4 1
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{16}, \overline{1})$	1 4 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 8, \overline{1})$	1 4 3	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{2}, 7)$	5 2 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 8, 7)$	5 0 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{16}, \overline{13})$	5 4 5	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 7, \overline{2})$	2 5 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{10}, 7)$	1 2 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{13}, \overline{16})$	4 5 5	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 5, 8)$	4 3 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 4, \overline{16})$	3 0 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{5}, \overline{11})$	3 5 2	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 2, \overline{11})$	5 2 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{11}, 7)$	2 3 1	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{8}, \overline{8})$	4 4 2	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 8, 5)$	3 4 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{19}, 2)$	2 5 5	$\frac{1}{3}(\overline{14}, 7, \overline{5})$	1 5 2	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{4}, \overline{1})$	5 4 1
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 7, 8)$	0 5 1	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{11}, \overline{5})$	5 3 2	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{1}, \overline{4})$	4 5 1
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{5}, \overline{14})$	2 5 3	$\frac{1}{3}(\overline{14}, 1, 1)$	3 3 2	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{11}, 2)$	2 5 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{11}, \overline{8})$	4 3 3	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{5}, 7)$	5 1 2	$\frac{1}{3}(\overline{20}, 7, 1)$	3 5 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{8}, \overline{11})$	3 4 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{1}, \overline{7})$	3 5 0	$\frac{1}{3}(\overline{20}, 1, 7)$	5 3 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{14}, \overline{5})$	5 2 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, 7, 1)$	5 3 0	$\frac{1}{3}(\overline{22}, \overline{1}, \overline{1})$	5 5 2
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 4, \overline{5})$	1 4 1	$\frac{1}{3}(\overline{16}, 2, 8)$	2 2 4	$\frac{1}{3}(\overline{23}, 4, 7)$	5 4 5
				$\frac{1}{3}(\overline{23}, 7, 4)$	2 5 5

(十二) (121) 孪晶衍射位置表

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
0, 2, 4	0 2 4	$\frac{1}{3}(1, 11, 2)$	2 1 3	1, 5, 7	4 5 1
0, 1, 1	1 1 0	$\frac{1}{3}(1, \bar{1}3, \bar{1}0)$	2 1 5	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 7, 20)$	4 5 3
0, 3, 3	1 1 4	1, 5, 2	2 1 5	$\Gamma, 1, 8$	4 5 5
0, 1, 5	1 3 4	$\frac{1}{3}(1, 5, \bar{1}0)$	2 3 1	$\Gamma, 6, 1$	5 2 3
0, 4, 2	2 0 4	1, 2, 2	2 3 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 22, 1)$	5 2 5
0, 0, 6	2 4 4	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 1, \bar{1}4)$	2 3 3	1, 4, 5	5 4 1
0, 5, 1	2 1 4	$\Gamma, 1, 6$	2 3 5	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 13, \bar{1}1)$	5 4 1
0, 1, 7	3 5 4	$\Gamma, 3, 4$	0 1 5	$\frac{1}{3}(1, 20, 7)$	5 4 3
0, 6, 0	4 2 4	1, 1, 6	2 5 3	1, 8, 1	5 4 5
0, 7, 1	5 3 4	$\frac{1}{3}(1, \bar{1}, \bar{2}2)$	2 5 5	2, 0, 4	0 4 2
$\frac{1}{3}(1, 7, \bar{1}6)$	0 3 5	$\frac{1}{3}(1, \bar{1}6, \bar{7})$	3 0 5	2, 1, 5	1 5 2
$\Gamma, 0, 1$	1 0 1	$\Gamma, 2, 3$	3 2 1	$\frac{1}{3}(2, 1, 7)$	1 1 2
$\frac{1}{3}(1, 4, 1)$	Γ 0 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 10, 5)$	3 2 1	$\frac{1}{3}(2, 5, 5)$	1 1 2
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 8, 3)$	Γ 0 3	$\frac{1}{3}(1, 11, 1)$	3 2 3	2, 1, 1	1 1 2
$\Gamma, 4, 3$	Γ 0 5	1, 6, 1	3 2 5	$\frac{1}{3}(2, 7, 1)$	1 1 2
$\frac{1}{3}(1, 7, 4)$	0 1 1	$\frac{1}{3}(1, 8, \bar{1}3)$	3 4 1	$\frac{1}{3}(\bar{2}, 2, \bar{1}0)$	2 2 2
$\Gamma, 1, 0$	0 1 1	1, 4, 3	3 4 1	2 2 2	2 2 2
$\frac{1}{3}(1, 2, 7)$	1 2 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 4, \bar{1}7)$	3 4 3	$\frac{1}{3}(2, 10, 2)$	2 2 3
1, 2, 1	1 2 1	$\Gamma, 0, 7$	3 4 5	2, 1, 2	3 1 2
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 2, \bar{1}1)$	1 2 3	$\Gamma, 5, 0$	4 1 5	2, 3, 1	3 1 2
1, 2, 3	Γ 2 3	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 19, 4)$	4 1 5	$\frac{1}{3}(2, 11, 1)$	3 1 2
$\Gamma, 2, 5$	1 2 5	$\Gamma, 3, 4$	4 3 1	$\frac{1}{3}(2, 5, 13)$	3 3 2
$\frac{1}{3}(1, \bar{1}0, \bar{1}3)$	Γ 2 5	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 13, 3)$	4 3 1	$\frac{1}{3}(2, 13, 5)$	3 3 2
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 5, 8)$	0 1 3	$\frac{1}{3}(1, 17, 4)$	4 3 3	$\frac{1}{3}(2, 7, \bar{1}7)$	3 5 2
1, 0, 5	1 4 3	1, 7, 0	4 3 5	2 5 3	3 5 2
$\frac{1}{3}(1, 4, \bar{1}9)$	1 4 5	$\frac{1}{3}(1, 11, \bar{1}6)$	4 5 1	2 4 0	4 0 2
$\Gamma, 1, 2$	2 1 1				
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 7, 2)$	2 1 1				
1, 3, 2	2 1 3				

(续表)

$h^* \ k^* \ l^*$	hkl	$h^* \ k^* \ l^*$	hkl	$h^* \ k^* \ l^*$	hkl
$\frac{1}{3}(\overline{2}, \overline{3}, \overline{4})$	0 0 2	$\frac{1}{3}(\overline{4}, 7, \overline{5})$	3 1 0	$\frac{1}{3}(\overline{4}, 7, \overline{23})$	5 5 4
$\frac{1}{3}(2, 3, \overline{11})$	2 2 2	$\frac{1}{3}(4, \overline{13}, 7)$	$\overline{3}$ 1 4	$\frac{1}{3}(4, \overline{23}, 7)$	5 5 4
2, $\overline{1}$, 3	1 3 2	4, 1, 3	3 1 4	5, 3, 2	2 3 5
2, 3, $\overline{1}$	1 3 2	$\frac{1}{3}(4, 1, 19)$	1 5 4	$\frac{1}{3}(\overline{5}, 2, \overline{13})$	3 2 3
$\frac{1}{3}(\overline{2}, 8, \overline{6})$	4 4 2	$\frac{1}{3}(\overline{4}, 1, \overline{17})$	3 3 4	5, 4, 1	1 4 5
$\frac{1}{3}(2, 16, \overline{5})$	4 4 2	$\frac{1}{3}(4, 17, \overline{1})$	3 3 4	$\frac{1}{3}(5, \overline{14}, \overline{11})$	3 2 5
2, 5, $\overline{1}$	5 1 2	$\frac{1}{3}(\overline{4}, 5, 11)$	1 1 4	5, 2, 3	3 2 5
$\overline{2}$ 3 5	5 3 2	$\frac{1}{3}(4, 11, \overline{13})$	3 5 0	$\frac{1}{3}(5, 10, 1)$	1 2 5
$\frac{1}{3}(\overline{2}, 17, 7)$	5 3 2	4, 5, $\overline{1}$	1 5 4	$\frac{1}{3}(5, 1, 8)$	0 3 1
$\frac{1}{3}(\overline{2}, 11, \overline{10})$	5 5 2	$\frac{1}{3}(4, 2, \overline{5})$	0 2 0	3, 0, 1	3 4 1
$\frac{1}{3}(2, 19, \overline{11})$	5 5 2	4, 3, 5	3 5 4	$\frac{1}{3}(\overline{5}, 4, 7)$	1 0 3
3, 4, $\overline{1}$	1 4 5	$\frac{1}{3}(\overline{4}, 4, 2)$	2 0 0	$\frac{1}{3}(5, 16, \overline{5})$	3 4 3
3, $\overline{1}$, 2	2 3 1	$\frac{1}{3}(4, 5, 7)$	1 3 0	$\frac{1}{3}(5, 7, 14)$	2 5 1
3, 1, $\overline{4}$	0 5 1	$\frac{1}{3}(\overline{4}, 10, 8)$	4 2 0	5, $\overline{1}$, 2	2 5 1
3, 5, 2	2 5 3	4, 2, 0	4 2 0	$\frac{1}{3}(5, 2, 5)$	1 2 1
3, 3, 3	2 5 5	$\frac{1}{3}(4, \overline{1}, \overline{1})$	1 1 0	$\frac{1}{3}(5, 11, 4)$	4 1 1
3, 2, $\overline{1}$	3 2 1	$\frac{1}{3}(4, 7, \overline{13})$	1 3 4	$\frac{1}{3}(5, \overline{17}, 8)$	4 1 5
3, 2, $\overline{1}$	1 2 3	4, 3, 1	1 3 4	5, $\overline{1}$, 4	4 1 5
3, 3, 5	3 4 5	4, 1, 5	5 1 4	$\frac{1}{3}(5, 7, 4)$	0 1 3
3, 3, 0	4 1 1	$\frac{1}{3}(\overline{4}, 19, 1)$	5 1 4	5, 1, 0	4 3 1
3, 1, 4	4 1 3	$\frac{1}{3}(\overline{4}, 13, \overline{11})$	5 3 0	$\frac{1}{3}(5, 5, \overline{16})$	4 3 3
3, 5, 4	4 3 5	$\frac{1}{3}(4, 11, 5)$	1 1 4	$\frac{1}{3}(5, 5, 2)$	2 1 1
3, 4, 1	5 0 1	4, 5, 3	5 3 4	5, 3, 4	4 5 3
3, 2, 3	5 2 3			$\frac{1}{3}(5, 19, 8)$	4 5 3
3, 3, 3	3 2 5				
3, 0, 3	1 4 1				
3, $\overline{1}$, 2	2 1 3				
$\frac{1}{3}(4, 8, \overline{10})$	2 4 0				
4, 0, 2	2 4 0				
4, 1, 3	5 0 0				

(续表)

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{1}, \bar{10})$	2 1 3	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{1}, \bar{2})$	2 1 1	$\frac{1}{3}(8, 19, \bar{5})$	3 5 4
$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{8}, \bar{1})$	3 0 1	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{5}, \bar{4})$	0 3 1	$\frac{1}{3}(8, \bar{5}, 17)$	1 5 4
$\bar{5}, \bar{2}, \bar{1}$	5 2 1	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 17, \bar{2})$	2 3 5	$\frac{1}{3}(8, 13, \bar{1})$	1 3 4
$\frac{1}{3}(\bar{5}, 14, \bar{7})$	5 2 1	$\bar{7}, \bar{1}, 0$	4 3 3	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{7}, \bar{7})$	1 1 4
$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{4}, \bar{11})$	1 4 1	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 23, \bar{1})$	4 5 5	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 11, \bar{7})$	5 1 0
$\frac{1}{3}(\bar{5}, 13, \bar{2})$	2 3 3	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 16, \bar{1})$	5 0 3	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 11, 11)$	3 3 4
$\frac{1}{3}(\bar{5}, 12, 14)$	2 3 5	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{4}, \bar{5})$	3 0 1	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 17, \bar{5})$	5 1 4
$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{8}, \bar{19})$	5 4 3	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 10, \bar{11})$	5 2 1	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 16, \bar{2})$	2 4 4
$\bar{5}, \bar{1}, \bar{8}$	5 4 3	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{7}, \bar{10})$	2 3 3	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{1}, \bar{13})$	3 1 4
$\frac{1}{3}(\bar{5}, \bar{8}, \bar{17})$	1 4 5	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{1}, \bar{16})$	0 5 3	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{5}, \bar{19})$	5 3 4
$\bar{5}, \bar{1}, \bar{1}$	3 5 2	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 14, \bar{5})$	1 2 5	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{5}, \bar{1})$	3 1 0
$\bar{5}, 0, 0$	4 4 2	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{8}, \bar{7})$	1 4 1	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{10}, \bar{4})$	0 3 4
$\bar{5}, \bar{1}, \bar{1}$	5 3 2	$\bar{7}, 0, \bar{1}$	5 4 3	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{1}, \bar{5})$	1 3 0
$0, \bar{3}, \bar{3}$	5 5 2	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{8}, \bar{11})$	1 0 5	$\bar{8}, \bar{1}, \bar{1}$	5 5 4
$\frac{1}{3}(\bar{7}, 20, \bar{1})$	3 4 5	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{4}, \bar{23})$	5 4 5	$\frac{1}{3}(\bar{10}, \bar{4}, \bar{8})$	4 0 2
$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{10}, \bar{7})$	3 2 3	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{4}, \bar{13})$	1 4 3	$\frac{1}{3}(\bar{10}, \bar{8}, \bar{4})$	0 4 2
$\frac{1}{3}(\bar{7}, 11, \bar{10})$	2 5 1	$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{5}, \bar{14})$	2 1 5	$\frac{1}{3}(\bar{10}, \bar{7}, \bar{11})$	5 1 2
$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{7}, \bar{8})$	4 1 1	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{7}, \bar{11})$	1 5 0	$\frac{1}{3}(\bar{10}, \bar{13}, \bar{1})$	5 1 2
$\frac{1}{3}(\bar{7}, 13, \bar{4})$	4 1 3	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{2}, \bar{16})$	4 2 4	$\frac{1}{3}(\bar{10}, \bar{5}, \bar{1})$	1 3 2
$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{2}, 17)$	3 2 5	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{14}, \bar{8})$	4 2 4	$\frac{1}{3}(\bar{10}, \bar{2}, \bar{2})$	2 2 2
$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{2}, \bar{1})$	1 2 1	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{4}, \bar{10})$	2 0 4	$\frac{1}{3}(\bar{10}, \bar{1}, \bar{5})$	3 1 2
$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{11}, \bar{8})$	0 1 5	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{8}, \bar{14})$	2 4 4		
$\frac{1}{3}(\bar{7}, \bar{1}, \bar{20})$	4 3 5				

(续表)

h' k' l'	hkl	h' k' l'	hkl	h' k' l'	hkl
$\frac{1}{3}(10, 11, \bar{7})$	1 5 2	$\frac{1}{3}(\bar{13}, 4, \bar{11})$	5 0 3	$\frac{1}{3}(16, \bar{7}, \bar{1})$	3 2 0
$\frac{1}{3}(10, \bar{7}, \bar{7})$	3 3 2	$\frac{1}{3}(13, \bar{10}, \bar{1})$	5 2 1	$\frac{1}{3}(\bar{16}, \bar{5}, \bar{5})$	3 2 4
$\frac{1}{3}(10, \bar{1}, \bar{13})$	1 5 2	$\frac{1}{3}(\bar{13}, \bar{11}, 4)$	0 5 3	$\frac{1}{3}(\bar{16}, 1, \bar{11})$	5 2 4
$\frac{1}{3}(\bar{11}, \bar{7}, 8)$	0 5 1	$\frac{1}{3}(\bar{13}, \bar{5}, \bar{2})$	2 3 3	$\frac{1}{3}(16, \bar{13}, \bar{13})$	5 5 4
$\frac{1}{3}(11, \bar{5}, \bar{14})$	2 5 3	$\frac{1}{3}(13, \bar{4}, 7)$	3 4 1	$\frac{1}{3}(\bar{16}, \bar{11}, 1)$	1 5 4
$\frac{1}{3}(11, 8, \bar{7})$	5 0 1	$\frac{1}{3}(\bar{13}, \bar{8}, 1)$	1 4 3	$\frac{1}{3}(\bar{17}, \bar{7}, 2)$	2 5 3
$\frac{1}{3}(11, \bar{7}, \bar{10})$	2 1 5	$\frac{1}{3}(13, \bar{1}, \bar{10})$	2 5 1	$\frac{1}{3}(\bar{17}, \bar{4}, 1)$	3 4 3
$\frac{1}{3}(11, \bar{13}, 4)$	0 3 5	$\frac{1}{3}(13, \bar{7}, \bar{4})$	4 3 1	$\frac{1}{3}(\bar{17}, 2, \bar{7})$	5 2 3
$\frac{1}{3}(11, \bar{11}, 8)$	4 3 3	$\frac{1}{3}(\bar{13}, 1, \bar{8})$	4 1 3	$\frac{1}{3}(17, 5, 8)$	4 5 1
$\frac{1}{3}(11, \bar{4}, \bar{15})$	3 0 5	$\frac{1}{3}(13, \bar{16}, \bar{13})$	5 4 5	$\frac{1}{3}(\bar{17}, \bar{1}, \bar{4})$	4 3 3
$\frac{1}{3}(\bar{11}, 5, \bar{4})$	4 1 1	$\frac{1}{3}(13, \bar{13}, \bar{10})$	4 5 5	$\frac{1}{3}(17, 8, 5)$	5 4 1
$\frac{1}{3}(11, \bar{14}, \bar{5})$	3 2 3	$\frac{1}{3}(\bar{13}, \bar{2}, \bar{5})$	3 2 3	$\frac{1}{3}(\bar{19}, \bar{11}, \bar{2})$	2 5 5
$\frac{1}{3}(\bar{11}, 2, \bar{19})$	5 2 5	$\frac{1}{3}(14, \bar{11}, \bar{5})$	5 3 2	$\frac{1}{3}(\bar{19}, \bar{5}, \bar{8})$	4 3 5
$\frac{1}{3}(11, \bar{1}, 2)$	2 3 1	$\frac{1}{3}(\bar{14}, 5, \bar{7})$	5 1 2	$\frac{1}{3}(\bar{19}, 1, 4)$	4 5 1
$\frac{1}{3}(11, \bar{16}, 1)$	1 4 5	$\frac{1}{3}(14, \bar{5}, \bar{11})$	3 5 2	$\frac{1}{3}(19, 8, \bar{5})$	3 4 5
$\frac{1}{3}(11, \bar{4}, 5)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(\bar{14}, \bar{1}, \bar{1})$	3 3 2	$\frac{1}{3}(\bar{19}, \bar{2}, \bar{11})$	5 3 5
$\frac{1}{3}(11, 2, \bar{1})$	3 2 1	$\frac{1}{3}(14, \bar{3}, 8)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(19, 4, 1)$	5 4 1
$\frac{1}{3}(\bar{11}, 10, 7)$	1 2 5	$\frac{1}{3}(\bar{14}, \bar{7}, 5)$	1 5 2	$\frac{1}{3}(\bar{20}, 1, \bar{7})$	5 3 4
$\frac{1}{3}(\bar{11}, \bar{1}, \bar{16})$	4 1 5	$\frac{1}{3}(16, \bar{1}, 7)$	3 5 0	$\frac{1}{3}(\bar{20}, \bar{7}, 1)$	3 5 4
$\frac{1}{3}(11, \bar{8}, \bar{11})$	3 4 3	$\frac{1}{3}(\bar{16}, \bar{8}, 2)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(\bar{22}, 1, 1)$	5 5 2
$\frac{1}{3}(11, 10, \bar{2})$	2 5 5	$\frac{1}{3}(16, \bar{2}, \bar{8})$	4 2 4	$\frac{1}{3}(\bar{23}, \bar{7}, \bar{4})$	4 5 5
				$\frac{1}{3}(\bar{23}, \bar{4}, \bar{7})$	5 4 5

(十三) (211)孪晶衍射位置表

h^* k^* l^*	hkl	h^* k^* l^*	hkl	h^* k^* l^*	hkl
0, 0, 6	4 2 $\bar{4}$	$\bar{1}$, 0, 5	3 1 $\bar{4}$	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 13, 8)$	1 $\bar{4}$ 3
0, 1, $\bar{1}$	0 $\bar{1}$ 1	$\frac{1}{3}(1, \bar{4}, \bar{1})$	$\bar{1}$ 1 0	$\frac{1}{3}(1, 14, 1)$	3 3 2
0, 1, 5	4 1 3	1, 4, $\bar{3}$	1 $\bar{3}$ 4	$\frac{1}{3}(1, 16, 7)$	5 3 0
0, $\bar{1}$, 4	4 3 5	$\bar{1}$, $\bar{4}$, 3	5 1 0	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 16, \bar{11})$	1 $\bar{5}$ 4
0, 2, $\bar{4}$	$\bar{4}$ 0 2	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 4, 19)$	5 1 $\bar{4}$	$\frac{1}{3}(1, 17, 4)$	3 4 3
0, 5, 5	$\bar{4}$ 1 1	1, 5, $\bar{2}$	1 $\bar{4}$ 5	$\frac{1}{3}(1, 19, 4)$	5 4 1
0, $\bar{4}$, 2	$\bar{4}$ 2 0	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 5, 10)$	1 2 5	$\frac{1}{3}(1, 20, 7)$	3 $\bar{5}$ 4
0, 5, 1	4 $\bar{3}$ 1	$\bar{1}$, 5, 0	3 4 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 22, 1)$	5 $\bar{5}$ 2
0, 6, 0	4 $\bar{1}$ 2	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 6, 1)$	3 $\bar{5}$ 2	2, $\bar{2}$, 2	2 2 2
0, 7, $\bar{1}$	4 $\bar{5}$ 3	$\frac{1}{3}(1, 7, 20)$	3 4 5	$\frac{1}{3}(2, 2, 10)$	2 2 $\bar{2}$
1, 1, 0	1 0 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 7, 2)$	1 $\bar{2}$ 1	2, 0, 4	2 0 4
$\frac{1}{3}(1, 1, 4)$	$\bar{1}$ 0 1	1, 0, 7	5 3 4	2, 5, $\bar{1}$	2 3 1
1, 0, 1	1 1 0	$\frac{1}{3}(1, \bar{7}, \bar{16})$	5 3 2	2, 5, 5	2 5 3
1, $\bar{1}$, 2	1 2 $\bar{1}$	$\frac{1}{3}(1, 8, 13)$	1 3 4	2, 1, 1	2 1 1
$\frac{1}{3}(1, \bar{1}, 14)$	3 2 3	$\frac{1}{3}(1, 8, 5)$	3 1 0	$\frac{1}{3}(2, 1, 7)$	2 1 $\bar{1}$
$\bar{1}$, $\bar{1}$, 6	5 2 3	1, 8, $\bar{1}$	5 5 4	2, $\bar{1}$, 5	2 1 3
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 1, 22)$	5 2 5	$\frac{1}{3}(1, 10, \bar{13})$	5 1 2	2, 2, $\bar{1}$	2 $\bar{1}$ 2
1, 1, 6	5 2 3	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 10, 5)$	1 3 2	2, 4, 0	2 4 0
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 1, 32)$	5 2 5	$\frac{1}{3}(\bar{1}, 11, 16)$	1 4 5	$\frac{1}{3}(2, \bar{1}, 11)$	2 1 3
1, $\bar{1}$, 8	5 4 5	$\frac{1}{3}(1, 11, 2)$	3 2 1	$\frac{1}{3}(2, 5, 5)$	2 1 1
1, 2, 7	1 1 2	$\frac{1}{3}(1, 13, 10)$	5 2 1	$\frac{1}{3}(2, 5, 13)$	2 3 5
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 2, 7)$	1 1 $\bar{2}$				
1, 2, 5	5 1 2				
1, 3, 3	1 3 3				
1, 3, 4	1 4 3				
1, 3, 5	5 2 1				
1, 3, 2	1 2 3				
$\bar{1}$, 3, 4	5 0 1				
$\frac{1}{3}(1, 4, 17)$	3 3 4				
1, 4, 5	1 5 4				

(续表)

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
$\frac{1}{3}(2, 7, 1)$	2 1 1	$\frac{1}{3}(4, 5, 11)$	4 1 1	$\frac{1}{3}(4, 19, 1)$	4 5 1
$\frac{1}{3}(2, 7, 17)$	2 3 5	4, 5, 1	4 1 5	$\frac{1}{3}(4, 23, 7)$	4 5 5
$\frac{1}{3}(2, 8, 16)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(4, 5, 7)$	0 1 3	5, 3, 4	3 4 5
$\frac{1}{3}(2, 10, 2)$	2 3 2	4, 5, 1	4 5 3	$\frac{1}{3}(5, 5, 16)$	3 4 3
$\frac{1}{3}(2, 11, 1)$	2 3 1	4, 3, 1	4 1 3	$\frac{1}{3}(5, 5, 2)$	1 2 1
$\frac{1}{3}(2, 11, 19)$	2 5 5	$\frac{1}{3}(4, 2, 4)$	0 0 2	$\frac{1}{3}(5, 4, 7)$	3 1 0
$\frac{1}{3}(2, 13, 5)$	2 3 3	4, 3, 5	4 3 5	5, 1, 2	1 2 5
$\frac{1}{3}(2, 13, 8)$	2 4 4	4, 0, 2	0 2 4	$\frac{1}{3}(5, 1, 10)$	3 2 1
$\frac{1}{3}(2, 17, 7)$	2 5 3	4, 2, 0	0 2 2	5, 3, 2	5 2 3
$\frac{1}{3}(2, 19, 11)$	2 5 5	$\frac{1}{3}(4, 1, 1)$	0 1 1	5, 4, 3	3 5 4
3, 1, 2	1 2 3	$\frac{1}{3}(4, 7, 13)$	4 1 3	$\frac{1}{3}(5, 2, 5)$	1 1 2
3, 3, 5	5 2 5	$\frac{1}{3}(4, 7, 5)$	0 2 1	$\frac{1}{3}(5, 7, 4)$	3 0 1
3, 3, 0	1 4 1	4, 3, 1	0 3 1	$\frac{1}{3}(5, 7, 14)$	1 2 5
3, 2, 1	3 1 2	$\frac{1}{3}(4, 7, 23)$	4 5 5	$\frac{1}{3}(5, 8, 19)$	3 5 4
3, 4, 1	1 5 0	$\frac{1}{3}(4, 1, 19)$	4 1 5	5, 2, 1	1 5 2
3, 4, 7	3 1 4	$\frac{1}{3}(4, 8, 10)$	0 2 4	$\frac{1}{3}(5, 8, 17)$	5 1 4
3, 4, 5	5 3 4	4, 1, 3	4 3 1	$\frac{1}{3}(5, 8, 17)$	1 3 0
3, 5, 2	3 2 5	$\frac{1}{3}(4, 10, 8)$	0 4 2	$\frac{1}{3}(5, 2, 13)$	3 3 2
3, 5, 5	3 5 2	$\frac{1}{3}(4, 1, 17)$	4 3 3	$\frac{1}{3}(5, 10, 1)$	3 1 2
3, 1, 2	3 2 1	$\frac{1}{3}(4, 11, 13)$	0 3 5	5, 4, 1	5 1 4
3, 5, 1	5 4 3	$\frac{1}{3}(4, 11, 5)$	4 1 1	$\frac{1}{3}(5, 11, 1)$	5 2 3
3, 1, 4	1 0 5	4, 1, 5	4 5 1	5, 0, 1	1 3 4
3, 5, 3	5 5 2	$\frac{1}{3}(4, 13, 11)$	0 5 3	$\frac{1}{3}(5, 11, 4)$	1 4 1
3, 3, 1	3 4 1	$\frac{1}{3}(4, 13, 7)$	4 3 1	5, 1, 0	1 4 3
3, 0, 3	1 1 4	$\frac{1}{3}(4, 17, 1)$	4 3 3		
$\frac{1}{3}(4, 4, 2)$	0 2 0				
4, 1, 3	0 1 5				

(续表)

h^*	k^*	l^*	hkl	h^*	k^*	l^*	hkl	h^*	k^*	l^*	hkl
5, 2, 3	5	3	2	$\frac{1}{3}(7, 11, 8)$	5	0	1	$\frac{1}{3}(8, 1, 13)$	4	2	$\bar{1}$
$\frac{1}{3}(5, \bar{4}, 11)$	1	1	$\bar{4}$	7, 0, 1	3	5	4	$\frac{1}{3}(8, 7, \bar{11})$	0	$\bar{1}$	5
$\frac{1}{3}(5, 13, \bar{2})$	3	2	3	$\frac{1}{3}(7, 2, \bar{1})$	1	1	2	$\frac{1}{3}(8, 11, 7)$	0	5	1
$\frac{1}{3}(5, \bar{14}, \bar{11})$	5	2	3	$\frac{1}{3}(7, 11, \bar{10})$	1	2	5	$\frac{1}{3}(8, \bar{11}, \bar{11})$	4	3	3
$\frac{1}{3}(5, 14, 7)$	1	5	2	$\frac{1}{3}(7, \bar{13}, \bar{4})$	3	4	1	$\frac{1}{3}(8, \bar{2}, \bar{16})$	4	4	2
$\frac{1}{3}(5, 16, 5)$	2	3	4	$\frac{1}{3}(7, \bar{1}, \bar{16})$	3	0	5	$\frac{1}{3}(8, 5, 19)$	4	5	3
5, 1, 4	5	4	1	$\frac{1}{3}(7, 5, 14)$	5	2	$\bar{1}$	$\frac{1}{3}(8, \bar{5}, 1)$	0	3	1
$\frac{1}{3}(5, \bar{7}, \bar{8})$	5	4	1	$\frac{1}{3}(7, 14, 5)$	5	$\bar{1}$	2	$\frac{1}{3}(8, 13, 1)$	4	1	3
$\frac{1}{3}(5, 19, 8)$	3	4	5	$\frac{1}{3}(7, \bar{16}, \bar{1})$	3	5	0	8, 1, 1	4	5	5
$\frac{1}{3}(5, \bar{1}, 8)$	$\bar{1}$	0	3	$\frac{1}{3}(7, 2, 17)$	5	3	2	$\frac{1}{3}(8, \bar{14}, \bar{8})$	4	4	2
6, 1, 1	2	5	3	$\frac{1}{3}(7, \bar{1}, 2)$	1	2	1	$\frac{1}{3}(8, 16, \bar{2})$	4	2	4
6, 0, 0	2	4	4	$\frac{1}{3}(7, 17, 2)$	5	2	3	$\frac{1}{3}(8, 7, 7)$	4	1	1
6, 3, 3	2	5	5	$\frac{1}{3}(7, 20, \bar{1})$	5	3	4	$\frac{1}{3}(8, \bar{17}, \bar{5})$	4	5	1
6, 1, $\bar{1}$	2	3	5	$\frac{1}{3}(7, \bar{1}, 20)$	5	4	3	$\frac{1}{3}(8, 19, \bar{5})$	4	3	5
$\frac{1}{3}(7, \bar{7}, \bar{10})$	3	2	3	$\frac{1}{3}(7, \bar{4}, 23)$	5	5	4	$\frac{1}{3}(10, 11, 7)$	2	$\bar{1}$	5
$\frac{1}{3}(7, 5, \bar{4})$	1	0	3	$\frac{1}{3}(7, 23, \bar{4})$	5	4	5	$\frac{1}{3}(10, \bar{1}, \bar{13})$	2	1	5
$\frac{1}{3}(7, \bar{4}, 5)$	1	0	3	$\frac{1}{3}(8, \bar{8}, \bar{14})$	4	2	4	$\frac{1}{3}(10, 7, 11)$	2	5	$\bar{1}$
$\frac{1}{3}(7, 7, 8)$	1	4	$\bar{1}$	$\frac{1}{3}(8, 1, 5)$	0	1	3	$\frac{1}{3}(10, 5, 1)$	2	1	3
7, 1, 0	3	4	5	$\frac{1}{3}(8, 4, 10)$	4	2	0	$\frac{1}{3}(10, 13, 1)$	2	5	1
$\frac{1}{3}(7, 8, 7)$	1	$\bar{1}$	4	$\frac{1}{3}(8, \bar{5}, \bar{17})$	4	1	5	$\frac{1}{3}(10, 7, 7)$	2	3	3
$\frac{1}{3}(7, 8, \bar{11})$	5	1	0	$\frac{1}{3}(9, 10, 4)$	4	0	2	$\frac{1}{3}(10, \bar{4}, 8)$	2	4	0
$\frac{1}{3}(7, \bar{4}, \bar{13})$	3	1	4								
$\frac{1}{3}(7, 10, 11)$	1	5	2								
$\frac{1}{3}(7, 10, 7)$	3	3	2								

(续表)

$k^i \ k^j \ l^i$	hkl	$k^i \ k^j \ l^i$	hkl	$k^i \ k^j \ l^i$	hkl
$\frac{1}{3}(10, 8, \bar{4})$	2 0 4	$\frac{1}{3}(13, \bar{4}, 11)$	3 5 0	$\frac{1}{3}(16, \bar{1}, 7)$	0 3 5
$\frac{1}{3}(10, 2, 2)$	2 2 2	$\frac{1}{3}(13, 11, \bar{4})$	3 0 5	$\frac{1}{3}(16, 8, 2)$	4 2 4
$\frac{1}{3}(10, \bar{1}, 5)$	2 3 1	$\frac{1}{3}(13, \bar{1}, 7)$	$\bar{1}$ 3 4	$\frac{1}{3}(16, \bar{1}, 11)$	4 5 1
$\frac{1}{3}(11, 1, \bar{2})$	1 2 3	$\frac{1}{3}(13, 5, 2)$	3 2 3	$\frac{1}{3}(16, \bar{13}, \bar{13})$	4 5 5
$\frac{1}{3}(11, 10, 7)$	5 1 2	$\frac{1}{3}(13, \bar{13}, \bar{16})$	5 4 5	$\frac{1}{3}(16, 11, \bar{1})$	4 1 5
$\frac{1}{3}(11, \bar{11}, 8)$	3 4 3	$\frac{1}{3}(13, 8, \bar{1})$	3 1 4	$\frac{1}{3}(17, 8, 5)$	$\bar{1}$ 5 4
$\frac{1}{3}(11, \bar{8}, \bar{11})$	3 3 4	$\frac{1}{3}(13, \bar{1}, 8)$	3 4 1	$\frac{1}{3}(17, 4, 1)$	3 3 4
$\frac{1}{3}(11, 13, 4)$	5 0 3	$\frac{1}{3}(13, \bar{1}, \bar{10})$	$\bar{1}$ 2 5	$\frac{1}{3}(17, 2, 7)$	3 5 2
$\frac{1}{3}(11, 4, 13)$	5 3 0	$\frac{1}{3}(13, \bar{16}, \bar{13})$	5 5 4	$\frac{1}{3}(17, 1, 4)$	3 4 3
$\frac{1}{3}(11, 4, 5)$	1 1 4	$\frac{1}{3}(13, 2, 5)$	3 3 2	$\frac{1}{3}(17, 5, \bar{8})$	$\bar{1}$ 4 5
$\frac{1}{3}(11, 5, \bar{14})$	3 2 5	$\frac{1}{3}(13, 10, \bar{1})$	$\bar{1}$ 5 2	$\frac{1}{3}(17, 7, \bar{2})$	3 2 5
$\frac{1}{3}(11, 7, 10)$	5 2 1	$\frac{1}{3}(13, 7, 4)$	$\bar{1}$ 4 3	$\frac{1}{3}(19, 11, 2)$	5 2 5
$\frac{1}{3}(11, \bar{14}, \bar{5})$	3 5 2	$\frac{1}{3}(14, 5, 7)$	2 5 1	$\frac{1}{3}(19, 2, 11)$	5 5 2
$\frac{1}{3}(11, 5, 4)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(14, 1, 1)$	2 3 3	$\frac{1}{3}(19, 8, 5)$	5 3 4
$\frac{1}{3}(11, 8, 7)$	1 5 0	$\frac{1}{3}(14, \bar{5}, \bar{11})$	2 3 5	$\frac{1}{3}(19, \bar{1}, \bar{4})$	1 4 5
$\frac{1}{3}(11, 16, 1)$	5 $\bar{1}$ 4	$\frac{1}{3}(14, \bar{11}, \bar{5})$	2 5 3	$\frac{1}{3}(19, \bar{1}, \bar{1})$	1 5 4
$\frac{1}{3}(11, \bar{2}, 1)$	1 3 2	$\frac{1}{3}(14, 8, 8)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(19, 5, 8)$	5 4 3
$\frac{1}{3}(11, \bar{2}, 19)$	5 5 2	$\frac{1}{3}(14, 7, \bar{5})$	3 1 5	$\frac{1}{3}(20, 1, 7)$	4 5 3
$\frac{1}{3}(11, 19, \bar{2})$	5 2 5	$\frac{1}{3}(16, 7, \bar{1})$	0 5 3	$\frac{1}{3}(20, 7, 1)$	4 3 5
$\frac{1}{3}(11, 1, \bar{6})$	5 4 $\bar{1}$	$\frac{1}{3}(16, 5, 5)$	1 3 3	$\frac{1}{3}(22, \bar{1}, \bar{1})$	2 5 5
$\frac{1}{3}(11, 7, \bar{8})$	1 0 5	$\frac{1}{3}(18, 2, 8)$	4 4 2	$\frac{1}{3}(23, 7, 4)$	5 4 5
				$\frac{1}{3}(23, 4, 7)$	5 5 4

(十四) (211) 率晶衍射位置表

$h^* \quad k^* \quad l^*$	hkl	$h^* \quad k^* \quad l^*$	hkl	$h^* \quad k^* \quad l^*$	hkl
0, 1, $\bar{1}$	0 $\bar{1}$ 1	1, 4, $\bar{5}$	1 $\bar{5}$ 4	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{7}, \bar{16})$	5 0 3
0, 4, 2	4 2 0	$\bar{1}$, $\bar{3}$, 3	3 1 2	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{16}, \bar{7})$	5 3 0
0, $\bar{3}$, $\bar{4}$	4 0 1	$\bar{1}$, 0, $\bar{5}$	3 $\bar{1}$ 4	$\frac{1}{3}(1, 13, 10)$	5 2 1
0, $\bar{5}$, $\bar{1}$	4 3 $\bar{1}$	$\bar{1}$, 1, $\bar{6}$	3 $\bar{2}$ 5	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{4}, \bar{19})$	5 $\bar{1}$ 4
0, $\bar{6}$, 0	4 4 $\bar{2}$	$\bar{1}$, $\bar{6}$, 1	3 3 $\bar{2}$	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{22}, \bar{1})$	5 5 2
0, 7, $\bar{1}$	4 5 $\bar{3}$	$\bar{1}$, 3, 2	2 2 1	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{1}, \bar{22})$	5 4 $\bar{1}$
0, $\bar{1}$, $\bar{6}$	4 $\bar{1}$ 3	$\bar{1}$, 5, 0	3 4 $\bar{1}$	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{19}, \bar{4})$	2 2 $\bar{2}$
0, 0, $\bar{6}$	4 $\bar{2}$ 4	$\frac{1}{3}(1, \bar{17}, 4)$	3 4 3	$\frac{1}{3}(2, \bar{16}, 2)$	2 5 3
0, 3, $\bar{2}$	4 1 1	$\frac{1}{3}(1, 8, 5)$	3 1 0	$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{17}, 7)$	2 1 1
0, 1, 7	4 $\bar{3}$ 5	$\frac{1}{3}(1, 11, 2)$	3 2 $\bar{1}$	$\frac{1}{3}(2, 5, 5)$	2 1 $\bar{1}$
$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{1}, 4)$	1 0 1	$\frac{1}{3}(1, 5, 8)$	3 0 1	$\frac{1}{3}(2, 7, \bar{1})$	2 $\bar{1}$ 3
$\bar{1}$, 1, 0	$\bar{1}$ 0 1	$\frac{1}{3}(1, \bar{12}, 7)$	3 3 $\bar{2}$	$\frac{1}{3}(\bar{2}, 1, \bar{11})$	2 1 3
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 4, 1)$	1 1 0	$\frac{1}{3}(1, 2, 11)$	3 $\bar{1}$ 2	2, 3, 1	2 1 3
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 7, 2)$	1 2 $\bar{1}$	$\frac{1}{3}(1, 1, \bar{14})$	3 $\bar{2}$ 3	$\frac{1}{3}(2, 4, \bar{4})$	2 0 0
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 2, 7)$	1 $\bar{1}$ 2	$\frac{1}{3}(1, 7, \bar{20})$	3 4 5	$\frac{1}{3}(\bar{2}, \bar{11}, 1)$	2 3 $\bar{1}$
1, 2, 1	1 1 2	1, 4, 3	5 1 0	$\frac{1}{3}(\bar{2}, 7, \bar{17})$	2 3 5
$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{10}, 5)$	1 3 $\bar{2}$	1, 3, $\bar{4}$	5 0 1	3, 1, 1	2 1 1
$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{13}, 8)$	1 4 3	1, 5, 2	5 2 $\bar{1}$	$\frac{1}{3}(2, \bar{13}, 5)$	2 3 3
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 5, \bar{10})$	1 2 3	1, 3, 5	5 $\bar{1}$ 2	$\frac{1}{3}(2, \bar{1}, 7)$	2 $\bar{1}$ 1
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 16, 11)$	1 5 4	1, 5, $\bar{1}$	5 3 $\bar{2}$	2, 5, 3	2 3 5
$\bar{1}$, 0, 1	$\bar{1}$ 1 0	1, 7, $\bar{6}$	5 $\bar{2}$ 3	$\frac{1}{3}(2, \bar{16}, 8)$	2 4 4
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 8, \bar{13})$	1 3 4	1, 0, 7	5 3 4	$\frac{1}{3}(2, 2, 10)$	2 2 2
$\frac{1}{3}(\bar{1}, 11, 16)$	1 4 5	1, 7, 0	5 4 5		
1, 3, 2	1 2 3	1, 5, 1	5 5 4		
1, 1, 2	1 $\bar{2}$ 1	1, 1, 8	5 4 5		
1, 4, 3	1 3 4	$\frac{1}{3}(\bar{1}, \bar{10}, \bar{13})$	5 1 2		
1, 2, 3	1 5 2				
1, 5, 4	1 4				
1, 3, 4	1 4 3				

(续表)

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
2, 1, 3	2 3 1	$\frac{1}{3}(4, 11, 5)$	4 1 1	$\frac{1}{3}(4, 7, 21)$	4 5 5
$\frac{1}{3}(2, 19, 11)$	2 5 5	$\frac{1}{3}(4, \bar{1}, 19)$	4 1 5	4, 5, 5	4 5 3
$\frac{1}{3}(2, 5, 13)$	2 3 3	$\frac{1}{3}(4, 5, 7)$	0 1 3	4, 5, 5	4 3 5
$\frac{1}{3}(2, 8, 16)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(4, 7, 13)$	4 1 3	$\frac{1}{3}(5, 10, \bar{1})$	3 1 2
2, 3, 5	2 5 3	$\frac{1}{3}(4, 2, 4)$	0 0 2	$\frac{1}{3}(5, 13, 2)$	3 2 3
$\frac{1}{3}(2, 11, 19)$	2 5 5	7, 0, 5	0 2 4	$\frac{1}{3}(5, 11, 14)$	5 2 3
2, 1, 5	2 1 5	4, 2, 0	0 4 2	$\frac{1}{3}(5, 7, 4)$	3 0 1
2, 5, 1	2 5 1	$\frac{1}{3}(4, 1, 1)$	0 1 1	5, 4, 1	5 1 4
2, 7, 5	2 1 3	4, 3, 1	4 1 3	$\frac{1}{3}(5, 8, 17)$	5 1 4
2, 4, 0	2 4 0	$\frac{1}{3}(4, 7, 5)$	0 3 1	5, 3, 2	5 2 3
2, 0, 4	2 0 4	4, 5, 1	0 5 1	$\frac{1}{3}(5, 11, 11)$	5 3 2
2, 2, 2	2 2 2	$\frac{1}{3}(4, 13, 7)$	4 5 5	$\frac{1}{3}(5, 19, 8)$	3 4 5
2, 5, 1	2 3 1	4, 5, 1	4 1 5	5, 2, 3	5 3 2
3, 4, 1	3 1 4	$\frac{1}{3}(4, 8, 10)$	0 2 4	$\frac{1}{3}(5, 17, 8)$	5 4 1
3, 5, 2	3 2 5	$\frac{1}{3}(4, \bar{13}, 7)$	4 3 1	5, 1, 4	5 4 1
3, 2, 1	3 1 2	$\frac{1}{3}(4, 10, 8)$	0 4 2	$\frac{1}{3}(5, 1, 5)$	1 0 3
3, 1, 4	3 4 1	$\frac{1}{3}(4, 17, 1)$	4 3 3	$\frac{1}{3}(5, 8, 1)$	1 3 0
3, 2, 5	3 5 2	$\frac{1}{3}(4, 11, 13)$	0 3 5	$\frac{1}{3}(5, 11, 4)$	1 4 1
3, 1, 2	3 2 1	$\frac{1}{3}(4, 5, 11)$	4 1 1	5, 3, 4	3 4 5
3, 1, 2	1 2 3	$\frac{1}{3}(4, 19, 1)$	4 5 1	$\frac{1}{3}(5, 4, 11)$	1 1 4
3, 0, 3	1 1 4	$\frac{1}{3}(4, 13, 11)$	0 5 3	$\frac{1}{3}(5, 14, 7)$	1 5 2
3, 3, 0	1 4 1	4, 1, 3	4 3 1	5, 4, 3	3 5 4
3, 4, 1	1 5 0	$\frac{1}{3}(4, 1, 17)$	4 3 3	$\frac{1}{3}(5, 2, 5)$	1 1 2
3, 2, 1	1 3 2	4, 1, 5	4 5 1	$\frac{1}{3}(5, 7, 13)$	1 2 5
3, 1, 4	1 0 5				
3, 3, 5	5 2 5				
3, 5, 5	5 5 2				
3, 4, 5	5 3 4				
3, 5, 4	5 4 3				
$\frac{1}{3}(4, 4, 2)$	0 2 0				
4, 1, 3	0 1 5				

(续表)

k^1 k^2 k^3	hkl	k^1 k^2 k^3	hkl	k^1 k^2 k^3	hkl
$\frac{1}{3}(5, 4, 7)$	3 1 0	$\frac{1}{3}(7, 11, 8)$	5 0 1	$\frac{1}{3}(8, 11, 7)$	0 5 1
$\frac{1}{3}(5, 5, 8)$	1 2 1	$\frac{1}{3}(7, 2, \bar{1})$	$\bar{1}$ 1 2	$\frac{1}{3}(8, 10, 1)$	$\bar{1}$ 0 2
$\frac{1}{3}(5, 1, 10)$	3 $\bar{2}$ 1	$\frac{1}{3}(7, \bar{17}, \bar{2})$	$\bar{5}$ 2 5	$\frac{1}{3}(8, 7, 7)$	$\bar{4}$ 1 1
$\frac{1}{3}(5, 2, \bar{13})$	3 $\bar{3}$ 2	$\frac{1}{3}(7, 8, 11)$	5 1 0	$\frac{1}{3}(8, \bar{8}, 1)$	0 3 1
$\frac{1}{3}(5, \bar{16}, 5)$	3 3 $\bar{4}$	$\frac{1}{3}(7, 10, \bar{11})$	1 $\bar{5}$ 2	$\frac{1}{3}(8, 4, 10)$	$\bar{4}$ 2 0
$\frac{1}{3}(5, 5, \bar{16})$	3 $\bar{4}$ 3	$\frac{1}{3}(7, \bar{14}, \bar{5})$	5 1 $\bar{2}$	$\frac{1}{3}(8, \bar{1}, \bar{18})$	1 $\bar{3}$ 1
$\frac{1}{3}(5, 8, \bar{19})$	3 $\bar{5}$ 4	$\frac{1}{3}(7, \bar{16}, 1)$	3 5 0	$\frac{1}{3}(8, 2, \bar{16})$	4 $\bar{4}$ 2
5, 0, 1	1 3 4	$\frac{1}{3}(7, \bar{1}, \bar{7})$	3 0 5	$\frac{1}{3}(8, 5, \bar{19})$	4 5 3
5, 1, 2	$\bar{1}$ 2 5	$\frac{1}{3}(7, \bar{11}, 10)$	1 2 5	$\frac{1}{3}(8, \bar{11}, \bar{11})$	1 3 3
5, 2, 1	$\bar{1}$ 5 2	$\frac{1}{3}(7, 7, 10)$	3 2 3	$\frac{1}{3}(8, \bar{14}, \bar{8})$	4 4 2
5, 1, 0	$\bar{1}$ 4 5	$\frac{1}{3}(7, \bar{4}, \bar{3})$	3 1 4	$\frac{1}{3}(8, 8, 14)$	4 2 4
5, 1, 1	2 3 5	$\frac{1}{3}(7, \bar{18}, \bar{4})$	3 4 1	$\frac{1}{3}(8, \bar{17}, 5)$	4 5 1
5, 1, 1	2 5 3	$\frac{1}{3}(7, 5, \bar{14})$	5 $\bar{2}$ 1	8, 1, 1	$\bar{4}$ 5 5
5, 0, 0	2 4 4	$\frac{1}{3}(7, \bar{10}, \bar{7})$	3 3 2	$\frac{1}{3}(8, 5, \bar{17})$	4 1 5
5, 3, 3	2 5 5	$\frac{1}{3}(7, 20, 1)$	5 3 $\bar{4}$	$\frac{1}{3}(10, 2, 2)$	2 2 2
$\frac{1}{3}(7, 4, 5)$	$\bar{1}$ 3 0	$\frac{1}{3}(7, 5, \bar{4})$	$\bar{1}$ 0 3	$\frac{1}{3}(10, 7, \bar{11})$	2 5 1
$\frac{1}{3}(7, 2, \bar{17})$	5 3 2	$\frac{1}{3}(8, 1, 5)$	0 1 3	$\frac{1}{3}(10, \bar{4}, 8)$	2 4 0
7, 1, 0	3 4 5	$\frac{1}{3}(8, \bar{16}, 3)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(10, 8, \bar{4})$	2 0 4
$\frac{1}{3}(7, 1, \bar{20})$	5 4 3	$\frac{1}{3}(8, \bar{13}, \bar{1})$	4 1 3	$\frac{1}{3}(10, 1, 5)$	2 3 1
$\frac{1}{3}(7, \bar{1}, 2)$	$\bar{1}$ 2 1	$\frac{1}{3}(8, \bar{19}, 5)$	4 3 5	$\frac{1}{3}(10, \bar{11}, 7)$	2 1 5
$\frac{1}{3}(7, 7, 8)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(8, 7, \bar{11})$	0 $\bar{1}$ 5	$\frac{1}{3}(10, 5, \bar{1})$	2 1 3
$\frac{1}{3}(7, 4, \bar{23})$	5 $\bar{5}$ 4				
7, 0, 1	3 5 4				
$\frac{1}{3}(7, \bar{23}, 4)$	5 4 5				
$\frac{1}{3}(7, 8, 7)$	1 1 4				

(续表)

h	k	l	hkl	h'	k'	l'	hkl	h''	k''	l''	$h''k''l''$
$\frac{1}{3}(\overline{10}, \overline{13}, 1)$			2 5 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{7}, \overline{4})$			1 4 3	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{1}, \overline{7})$			0 3 5
$\frac{1}{3}(\overline{10}, \overline{7}, \overline{7})$			2 3 3	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{4}, \overline{11})$			3 5 0	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{11}, \overline{1})$			4 1 5
$\frac{1}{3}(\overline{10}, 1, \overline{13})$			2 1 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 8, \overline{1})$			3 1 4	$\frac{1}{3}(\overline{16}, 5, 5)$			4 3 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{8}, 7)$			1 5 0	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{4}, \overline{7})$			1 3 4	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{1}, \overline{11})$			4 5 1
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 4, \overline{13})$			5 3 0	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{1}, \overline{10})$			1 2 5	$\frac{1}{3}(\overline{16}, 8, 2)$			4 2 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{5}, 4)$			1 4 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 2, 5)$			3 3 2	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 7, 2)$			3 2 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 1, \overline{16})$			5 4 1	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{10}, \overline{1})$			1 5 2	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{2}, \overline{7})$			3 5 2
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 2, \overline{19})$			5 5 2	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{1}, 8)$			3 4 1	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 4, 1)$			3 3 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 7, 8)$			1 0 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{11}, \overline{4})$			3 0 5	$\frac{1}{3}(\overline{17}, \overline{5}, \overline{8})$			1 4 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{19}, 2)$			5 2 5	$\frac{1}{3}(\overline{13}, 5, 2)$			3 2 3	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 8, 5)$			1 5 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{13}, 4)$			5 0 3	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{13}, \overline{16})$			5 4 5	$\frac{1}{3}(\overline{17}, 1, 4)$			3 4 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{10}, 7)$			5 1 2	$\frac{1}{3}(\overline{13}, \overline{16}, \overline{13})$			5 5 4	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 2, \overline{11})$			5 3 2
$\frac{1}{2}(\overline{11}, 1, \overline{2})$			1 2 3	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{5}, 7)$			2 5 1	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 8, 5)$			5 3 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 7, \overline{10})$			5 2 1	$\frac{1}{3}(\overline{14}, 1, 1)$			2 3 3	$\frac{1}{3}(\overline{19}, 5, 8)$			5 4 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{8}, \overline{11})$			3 3 4	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{11}, 5)$			2 5 3	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{1}, \overline{4})$			1 4 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{14}, \overline{5})$			3 5 2	$\frac{1}{3}(\overline{14}, 8, 8)$			2 4 4	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{11}, 2)$			5 2 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{11}, \overline{8})$			3 4 3	$\frac{1}{3}(\overline{14}, 7, \overline{5})$			3 1 5	$\frac{1}{3}(\overline{19}, \overline{4}, \overline{1})$			1 5 4
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{5}, \overline{14})$			3 2 5	$\frac{1}{3}(\overline{14}, \overline{5}, \overline{11})$			2 3 5	$\frac{1}{3}(\overline{20}, 1, 7)$			4 5 3
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{2}, 1)$			1 3 2	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{7}, \overline{1})$			0 5 3	$\frac{1}{3}(\overline{20}, 7, 1)$			4 2 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, \overline{16}, \overline{1})$			5 1 4	$\frac{1}{3}(\overline{16}, \overline{13}, \overline{13})$			4 5 5	$\frac{1}{3}(\overline{22}, \overline{1}, 1)$			2 5 5
$\frac{1}{3}(\overline{11}, 4, 5)$			1 1 4	$\frac{1}{3}(\overline{16}, 2, 8)$			4 4 2	$\frac{1}{3}(\overline{23}, 4, 7)$			5 5 4
								$\frac{1}{3}(\overline{23}, 7, 4)$			5 4 5

(十五) (211) 单晶衍射位置表

h^*	k^*	l^*	hkl	h^*	k^*	l^*	hkl	h^*	k^*	l^*	hkl
	0, 1, 1		0 1 1		1, 4, 5		1 5 4		$\frac{1}{3}(1, 1, \bar{2}\bar{2})$		5 2 5
	0, 2, 4		4 0 2		$\frac{1}{3}(1, 5, 8)$		3 0 1		$\frac{1}{3}(1, \bar{1}\bar{6}, 7)$		5 3 0
	0, 3, 3		4 1 1		$\frac{1}{3}(1, 8, 5)$		3 1 0		1, 6, 1		5 3 2
	0, 1, 5		4 1 3		$\frac{1}{3}(1, 2, 1)$		3 1 2		1, 0, 7		5 3 4
	0, 4, 2		4 2 0		1, 2, 1		3 1 2		$\frac{1}{3}(1, \bar{1}\bar{9}, 4)$		6 4 1
	0, 0, 6		4 2 4		1, 2, 3		3 1 4		1, 7, 0		5 4 3
	0, 5, 1		4 3 1		1, 0, 6		3 1 4		1, 1, 8		5 4 5
	0, 1, 7		4 3 5		$\frac{1}{3}(1, \bar{1}\bar{1}, 2)$		3 2 1		$\frac{1}{3}(1, \bar{2}\bar{2}, 1)$		5 5 2
	0, 6, 0		4 4 2		1, 3, 2		3 2 1		1, 8, 1		5 5 4
	0, 7, 1		4 5 3		$\frac{1}{3}(1, \bar{1}, \bar{1}\bar{4})$		3 2 3		$\frac{1}{3}(2, \bar{4}, 4)$		2 0 0
	1, 1, 0		1 0 1		1, 1, 6		3 2 5		2, 0, 4		3 0 4
$\frac{1}{3}(1, 1, \bar{4})$			1 0 1		$\frac{1}{3}(1, \bar{1}\bar{4}, \bar{1})$		3 3 2		$\frac{1}{3}(2, 7, 1)$		2 1 1
$\frac{1}{3}(1, \bar{5}, 1)$			1 1 0		$\frac{1}{3}(1, \bar{4}, \bar{1}\bar{7})$		3 3 4		$\frac{1}{3}(3, 1, 7)$		2 1 1
1, 0, 1			1 1 0		1, 5, 0		3 4 1		2, 1, 1		2 1 1
1, 2, 1			1 1 2		$\frac{1}{3}(1, \bar{1}\bar{7}, \bar{4})$		3 4 3		$\frac{1}{3}(3, \bar{5}, 5)$		2 1 1
$\frac{1}{3}(1, \bar{2}, \bar{7})$			1 1 2		$\frac{1}{3}(1, \bar{7}, \bar{2}\bar{0})$		3 4 5		2, 3, 1		2 1 3
$\frac{1}{3}(1, \bar{7}, \bar{2})$			1 2 1		1, 6, 1		3 5 2		$\frac{1}{3}(2, \bar{1}, \bar{1}\bar{3})$		2 1 3
1, 1, 2			1 2 1		$\frac{1}{3}(1, \bar{2}\bar{9}, \bar{7})$		3 5 4		2, 1, 3		2 1 5
1, 3, 2			1 2 3		1, 3, 4		5 0 1		$\frac{1}{3}(2, \bar{1}\bar{0}, \bar{2})$		2 2 2
$\frac{1}{3}(1, 5, 10)$			1 2 3		$\frac{1}{3}(1, 7, \bar{1}\bar{6})$		5 0 3		$\frac{1}{3}(2, \bar{2}, \bar{1}\bar{6})$		2 2 2
$\frac{1}{3}(1, 10, 5)$			1 3 2		1, 4, 3		5 1 0		2, 2, 2		2 2 2
1, 2, 3			1 3 2		1, 2, 5		5 1 2		$\frac{1}{3}(2, \bar{1}\bar{1}, \bar{1})$		2 3 1
1, 4, 3			1 3 4		$\frac{1}{3}(1, 10, 13)$		5 1 2		2, 1, 3		2 3 1
$\frac{1}{3}(1, \bar{8}, 13)$			1 3 4		$\frac{1}{3}(1, 4, \bar{1}\bar{9})$		5 1 4		2, 3, 1		2 3 1
$\frac{1}{3}(1, 13, 8)$			1 4 3		1, 5, 2		5 2 1		$\frac{1}{3}(2, \bar{1}\bar{3}, \bar{5})$		2 3 3
1, 3, 4			1 4 3		$\frac{1}{3}(1, \bar{1}\bar{3}, 10)$		5 2 1				
1, 5, 4			1 4 5		1, 1, 6		5 2 3				
$\frac{1}{3}(1, \bar{1}\bar{1}, 16)$			1 4 5								
$\frac{1}{3}(1, \bar{1}\bar{6}, \bar{1}\bar{1})$			1 5 4								

(续表)

$h^s \ k^s \ l^s$	hkl	$h^s \ k^s \ l^s$	hkl	$h^s \ k^s \ l^s$	hkl
$\frac{1}{3}(2, 5, 19)$	$\bar{2} \ 3 \ 3$	$\frac{1}{3}(4, 13, 11)$	$0 \ 5 \ 3$	$\frac{1}{3}(4, 7, 23)$	$4 \ 5 \ 5$
$2, 5, 5$	$2 \ 3 \ 5$	$\frac{1}{3}(4, 10, 8)$	$0 \ 4 \ 2$	$\frac{1}{3}(1, 7, 5)$	$0 \ 3 \ 1$
$\frac{1}{3}(2, 7, 17)$	$\bar{3} \ 3 \ 5$	$4, 2, 0$	$0 \ 4 \ 2$	$\frac{1}{3}(5, 4, 11)$	$\bar{1} \ 1 \ 4$
$2, 7, 0$	$2 \ 4 \ 0$	$\frac{1}{3}(4, 2, 4)$	$0 \ 0 \ 2$	$5, 2, 1$	$1 \ 5 \ 2$
$\frac{1}{3}(2, 16, 8)$	$2 \ 4 \ 4$	$\frac{1}{3}(4, 11, 5)$	$4 \ 1 \ 1$	$\frac{1}{3}(5, 1, 10)$	$5 \ 2 \ 1$
$\frac{1}{3}(2, 8, 16)$	$\bar{2} \ 4 \ 4$	$\frac{1}{3}(4, 5, 11)$	$4 \ 1 \ 1$	$\frac{1}{3}(5, 13, 2)$	$3 \ 2 \ 3$
$2, 8, 1$	$2 \ 5 \ 1$	$\frac{1}{3}(4, 1, 1)$	$0 \ 1 \ 1$	$\frac{1}{3}(5, 5, 2)$	$1 \ 2 \ 1$
$\frac{1}{3}(2, 17, 7)$	$2 \ 5 \ 3$	$\frac{1}{3}(4, 5, 7)$	$0 \ 1 \ 3$	$\frac{1}{3}(5, 2, 13)$	$3 \ 3 \ 2$
$2, 5, 5$	$2 \ 5 \ 3$	$4, 3, 1$	$4 \ 1 \ 3$	$\frac{1}{3}(5, 16, 5)$	$3 \ 3 \ 4$
$\frac{1}{3}(2, 19, 11)$	$2 \ 5 \ 5$	$\frac{1}{3}(4, 7, 13)$	$4 \ 1 \ 3$	$\frac{1}{3}(5, 5, 16)$	$3 \ 4 \ 3$
$\frac{1}{3}(2, 11, 19)$	$3 \ 5 \ 5$	$4, 5, 1$	$4 \ 1 \ 5$	$\frac{1}{3}(5, 19, 8)$	$3 \ 4 \ 5$
$3, 4, 1$	$1 \ 5 \ 0$	$\frac{1}{3}(4, 1, 19)$	$4 \ 1 \ 5$	$3, 3, 4$	$3 \ 4 \ 5$
$3, 2, 1$	$3 \ 1 \ 2$	$4, 1, 3$	$0 \ 1 \ 5$	$\frac{1}{3}(5, 7, 14)$	$1 \ 2 \ 5$
$3, 4, 1$	$3 \ 1 \ 4$	$4, 1, 3$	$4 \ 1 \ 1$	$\frac{1}{3}(5, 3, 10)$	$5 \ 5 \ 4$
$3, 0, 3$	$1 \ 1 \ 4$	$\frac{1}{3}(4, 13, 7)$	$4 \ 3 \ 1$	$5, 4, 3$	$3 \ 5 \ 2$
$3, 1, 2$	$3 \ 1 \ 1$	$\frac{1}{3}(4, 17, 1)$	$4 \ 3 \ 3$	$\frac{1}{3}(5, 14, 7)$	$1 \ 5 \ 2$
$3, 5, 2$	$3 \ 2 \ 5$	$\frac{1}{3}(4, 1, 17)$	$1 \ 3 \ 3$	$\frac{1}{3}(5, 7, 4)$	$3 \ 0 \ 1$
$3, 1, 4$	$3 \ 4 \ 1$	$\frac{1}{3}(4, 4, 2)$	$0 \ 2 \ 0$	$\frac{1}{3}(5, 2, 5)$	$1 \ 1 \ 2$
$3, 1, 2$	$1 \ 2 \ 3$	$4, 3, 5$	$4 \ 3 \ 5$	$\frac{1}{3}(5, 4, 1)$	$3 \ 1 \ 0$
$3, 2, 5$	$3 \ 5 \ 2$	$\frac{1}{3}(4, 8, 10)$	$0 \ 2 \ 4$	$\frac{1}{3}(5, 10, 1)$	$3 \ 1 \ 2$
$3, 2, 1$	$1 \ 3 \ 2$	$\frac{1}{3}(4, 19, 1)$	$4 \ 5 \ 1$	$5, 1, 2$	$1 \ 2 \ 5$
$3, 3, 6$	$5 \ 2 \ 6$	$4, 1, 5$	$4 \ 5 \ 1$	$\frac{1}{3}(5, 8, 1)$	$1 \ 3 \ 0$
$3, 4, 5$	$5 \ 3 \ 1$	$4, 0, 2$	$0 \ 2 \ 4$	$5, 4, 1$	$5 \ 1 \ 4$
$3, 5, 4$	$5 \ 4 \ 3$	$4, 5, 3$	$4 \ 5 \ 3$		
$3, 8, 0$	$1 \ 4 \ 1$	$\frac{1}{3}(4, 23, 7)$	$4 \ 5 \ 5$		
$3, 8, 3$	$5 \ 5 \ 2$				
$3, 1, 4$	$1 \ 0 \ 5$				
$\frac{1}{3}(4, 11, 18)$	$1 \ 3 \ 5$				
$4, 3, 1$	$0 \ 3 \ 1$				

(续表)

h^* k^* l^*	hkl	h^* k^* l^*	hkl	h^* k^* l^*	hkl
$\frac{1}{3}(5, 8, 17)$	5 1 4	$\frac{1}{3}(7, 4, 13)$	3 1 4	$\frac{1}{3}(8, 1, 18)$	4 3 1
5, 3, 2	5 3 3	$\frac{1}{3}(7, 8, 11)$	5 1 0	$\frac{1}{3}(8, 11, 11)$	4 3 3
$\frac{1}{3}(5, 11, 14)$	5 2 5	$\frac{1}{3}(7, 14, 5)$	5 1 2	$\frac{1}{3}(8, 19, 5)$	4 3 5
$\frac{1}{3}(5, 1, 8)$	1 0 3	$\frac{1}{3}(7, 4, 5)$	1 2 0	$\frac{1}{3}(8, 2, 16)$	4 4 2
5, 0, 1	1 3 4	$\frac{1}{3}(7, 8, 7)$	1 1 4	$\frac{1}{3}(8, 14, 8)$	4 4 2
5, 2, 3	5 3 2	$\frac{1}{3}(7, 10, 7)$	3 3 2	$\frac{1}{3}(8, 17, 5)$	4 5 1
$\frac{1}{3}(5, 14, 11)$	5 3 3	$\frac{1}{3}(7, 5, 14)$	5 2 1	$\frac{1}{3}(8, 5, 10)$	4 5 3
$\frac{1}{3}(5, 11, 4)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(7, 17, 2)$	5 2 3	8, 1, 1	4 5 5
5, 1, 0	1 4 3	$\frac{1}{3}(7, 5, 1)$	1 0 3	$\frac{1}{3}(8, 10, 4)$	4 0 2
5, 1, 4	5 4 1	$\frac{1}{3}(7, 2, 17)$	5 3 2	$\frac{1}{3}(8, 5, 1)$	0 3 1
$\frac{1}{3}(5, 17, 8)$	5 4 1	$\frac{1}{3}(7, 20, 1)$	5 3 4	$\frac{1}{3}(8, 7, 7)$	4 1 1
6, 1, 1	2 5 3	$\frac{1}{3}(7, 13, 4)$	3 4 1	$\frac{1}{3}(8, 12, 7)$	4 1 3
6, 3, 3	2 5 5	$\frac{1}{3}(7, 7, 8)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(8, 12, 7)$	0 5 1
7, 1, 0	3 4 5	$\frac{1}{3}(7, 1, 20)$	5 4 3	$\frac{1}{3}(8, 5, 17)$	4 1 5
$\frac{1}{3}(7, 16, 1)$	3 5 0	$\frac{1}{3}(7, 23, 4)$	5 4 5	$\frac{1}{3}(10, 11, 7)$	2 1 5
$\frac{1}{3}(7, 11, 10)$	1 2 5	$\frac{1}{3}(7, 4, 23)$	5 5 4	$\frac{1}{3}(10, 5, 1)$	2 1 3
7, 0, 1	3 5 4	$\frac{1}{3}(8, 1, 5)$	0 1 3	$\frac{1}{3}(10, 1, 5)$	2 3 1
$\frac{1}{3}(7, 10, 11)$	1 5 2	$\frac{1}{3}(8, 4, 10)$	4 2 0	$\frac{1}{3}(10, 4, 8)$	2 4 0
$\frac{1}{3}(7, 7, 10)$	3 2 3	$\frac{1}{3}(8, 16, 2)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(10, 7, 11)$	2 5 1
$\frac{1}{3}(7, 2, 1)$	1 1 2	$\frac{1}{3}(8, 7, 11)$	0 1 5	$\frac{1}{3}(10, 13, 1)$	2 5 1
$\frac{1}{3}(7, 1, 16)$	3 0 5	$\frac{1}{3}(8, 8, 14)$	4 2 4	$\frac{1}{3}(10, 1, 13)$	2 3 5
$\frac{1}{3}(7, 1, 2)$	1 2 1				
$\frac{1}{3}(7, 11, 3)$	5 0 1				

(续表)

k^1 k^2 l^3	hkl	k^1 k^2 l^3	hkl	k^1 k^2 l^3	hkl
$\frac{1}{3}(10, \bar{8}, \bar{4})$	2 0 4	$\frac{1}{3}(13, \bar{8}, \bar{1})$	3 1 4	$\frac{1}{3}(16, \bar{5}, \bar{5})$	4 5 3
$\frac{1}{3}(10, \bar{7}, \bar{7})$	2 3 3	$\frac{1}{3}(13, \bar{1}, 10)$	1 2 5	$\frac{1}{3}(16, \bar{13}, 13)$	4 5 5
$\frac{1}{3}(10, \bar{2}, \bar{2})$	2 2 2	$\frac{1}{3}(13, \bar{4}, \bar{11})$	3 5 0	$\frac{1}{3}(16, \bar{11}, \bar{1})$	4 1 5
$\frac{1}{3}(11, \bar{4}, \bar{5})$	1 1 4	$\frac{1}{3}(13, \bar{5}, \bar{2})$	3 2 3	$\frac{1}{3}(16, \bar{8}, \bar{2})$	4 2 4
$\frac{1}{3}(11, \bar{5}, 14)$	3 2 5	$\frac{1}{3}(13, \bar{4}, \bar{7})$	1 3 4	$\frac{1}{3}(16, \bar{7}, \bar{1})$	0 5 3
$\frac{1}{3}(11, \bar{13}, \bar{4})$	5 0 5	$\frac{1}{3}(13, \bar{11}, \bar{4})$	3 0 5	$\frac{1}{3}(17, \bar{5}, \bar{8})$	1 4 5
$\frac{1}{3}(11, \bar{10}, \bar{7})$	5 1 2	$\frac{1}{3}(13, \bar{1}, \bar{8})$	3 1 1	$\frac{1}{3}(17, \bar{7}, \bar{2})$	3 2 5
$\frac{1}{3}(11, \bar{16}, \bar{1})$	5 1 4	$\frac{1}{3}(13, \bar{13}, \bar{16})$	5 4 5	$\frac{1}{3}(17, \bar{8}, \bar{5})$	1 5 4
$\frac{1}{3}(11, \bar{11}, \bar{8})$	3 4 5	$\frac{1}{3}(13, \bar{2}, \bar{5})$	3 3 2	$\frac{1}{3}(17, \bar{2}, \bar{7})$	3 5 2
$\frac{1}{3}(11, \bar{2}, \bar{1})$	1 3 2	$\frac{1}{3}(13, \bar{10}, \bar{1})$	1 5 2	$\frac{1}{3}(17, \bar{1}, \bar{4})$	3 4 3
$\frac{1}{3}(11, \bar{7}, 10)$	5 2 1	$\frac{1}{3}(13, \bar{7}, \bar{4})$	1 4 3	$\frac{1}{3}(17, \bar{4}, \bar{1})$	3 3 4
$\frac{1}{3}(11, \bar{19}, \bar{2})$	5 2 5	$\frac{1}{3}(13, \bar{16}, 13)$	5 5 4	$\frac{1}{3}(19, \bar{4}, \bar{1})$	1 5 4
$\frac{1}{3}(11, \bar{8}, 11)$	3 3 4	$\frac{1}{3}(14, \bar{11}, \bar{5})$	2 5 3	$\frac{1}{3}(19, \bar{5}, \bar{8})$	5 4 3
$\frac{1}{3}(11, \bar{4}, \bar{13})$	5 3 0	$\frac{1}{3}(14, \bar{8}, \bar{8})$	2 4 4	$\frac{1}{3}(19, \bar{1}, \bar{4})$	1 4 5
$\frac{1}{3}(11, \bar{1}, \bar{16})$	5 4 1	$\frac{1}{3}(14, \bar{5}, \bar{7})$	2 5 1	$\frac{1}{3}(19, \bar{2}, \bar{11})$	5 5 2
$\frac{1}{3}(11, \bar{1}, \bar{2})$	1 2 3	$\frac{1}{3}(14, \bar{1}, \bar{1})$	2 3 3	$\frac{1}{3}(19, \bar{8}, \bar{5})$	5 3 4
$\frac{1}{3}(11, \bar{5}, \bar{4})$	1 4 1	$\frac{1}{3}(14, \bar{7}, \bar{5})$	2 1 5	$\frac{1}{3}(19, 11, \bar{2})$	5 2 5
$\frac{1}{3}(11, \bar{8}, \bar{7})$	1 5 0	$\frac{1}{3}(14, \bar{5}, 11)$	2 3 5	$\frac{1}{3}(20, \bar{1}, \bar{7})$	4 5 3
$\frac{1}{3}(11, \bar{14}, \bar{5})$	3 5 2	$\frac{1}{3}(16, \bar{1}, \bar{7})$	0 3 5	$\frac{1}{3}(20, \bar{7}, \bar{1})$	4 3 5
$\frac{1}{3}(11, \bar{7}, \bar{8})$	1 0 5	$\frac{1}{3}(16, \bar{1}, 11)$	4 5 1	$\frac{1}{3}(22, \bar{1}, \bar{1})$	2 5 5
$\frac{1}{3}(11, \bar{2}, \bar{19})$	5 5 2	$\frac{1}{3}(16, \bar{2}, \bar{8})$	4 4 2	$\frac{1}{3}(23, \bar{4}, \bar{7})$	5 5 4
				$\frac{1}{3}(23, \bar{7}, \bar{4})$	5 4 5

(十六) (211) 孪晶衍射位置表

h^* k^* l^*	hkl	h^* k^* l^*	hkl	h^* k^* l^*	hkl
0, 1, 1	0 1 1	$\frac{1}{3}(1, \overline{10}, \overline{11})$	1 5 4	$\frac{1}{3}(1, 7, \overline{16})$	5 0 3
0, 2, 2	2 2 0	1, 2, 3	3 1 2	$\frac{1}{3}(1, 10, \overline{13})$	5 1 2
0, 0, 6	4 2 4	1, 0, 5	4 1 4	$\frac{1}{3}(1, 4, \overline{19})$	5 1 4
0, 5, 1	4 3 1	1, 3, 2	3 2 1	$\frac{1}{3}(1, 12, \overline{10})$	5 2 1
0, 1, 7	4 3 5	1, 1, 6	3 2 5	$\frac{1}{3}(1, 1, \overline{22})$	5 2 5
0, 6, 0	4 4 2	1, 6, 1	3 4 1	$\frac{1}{3}(1, \overline{16}, 7)$	5 3 0
0, 7, 1	4 5 3	$\frac{1}{3}(1, 11, 2)$	3 2 1	$\frac{1}{3}(1, \overline{19}, 4)$	5 4 1
0, 2, 4	4 0 2	$\frac{1}{3}(1, 1, \overline{14})$	3 2 3	$\frac{1}{3}(1, \overline{22}, 1)$	5 5 2
0, 3, 5	4 1 1	$\frac{1}{3}(1, \overline{14}, \overline{1})$	3 3 2	$\frac{1}{3}(2, 4, \overline{4})$	2 0 0
0, 4, 5	4 1 3	$\frac{1}{3}(1, 4, \overline{17})$	3 3 4	$\frac{1}{3}(2, 1, 7)$	2 1 1
$\frac{1}{3}(1, 1, \overline{4})$	1 0 1	$\frac{1}{3}(1, \overline{17}, \overline{4})$	3 4 3	$\frac{1}{3}(2, 7, 1)$	2 1 1
1, 1, 0	1 0 1	$\frac{1}{3}(1, 7, \overline{20})$	3 4 5	$\frac{1}{3}(2, 5, 5)$	2 1 1
1, 0, 1	1 1 0	$\frac{1}{3}(1, \overline{20}, 7)$	3 5 4	$\frac{1}{3}(2, 1, 1)$	2 1 1
$\frac{1}{3}(1, 4, 1)$	1 1 0	$\frac{1}{3}(1, 5, 8)$	3 0 1	$\frac{1}{3}(2, 1, \overline{11})$	2 1 3
$\frac{1}{3}(1, 2, 7)$	1 1 2	$\frac{1}{3}(1, 8, 5)$	3 1 0	$\frac{1}{3}(2, 2, 10)$	2 2 2
1, 2, 1	1 1 2	$\frac{1}{3}(1, 2, 11)$	3 1 2	$\frac{1}{3}(2, \overline{10}, \overline{2})$	2 2 3
1, 1, 2	1 2 1	1, 3, 4	5 0 1	2, 1, 3	2 3 1
$\frac{1}{3}(1, 7, 2)$	1 2 1	1, 4, 3	5 1 0	$\frac{1}{3}(2, \overline{11}, \overline{1})$	2 3 3
$\frac{1}{3}(1, 5, \overline{10})$	1 2 3	1, 2, 5	5 1 2	$\frac{1}{3}(2, 5, \overline{13})$	2 3 3
1, 3, 2	1 2 3	1, 5, 2	5 2 1	$\frac{1}{3}(2, \overline{13}, 5)$	2 3 5
$\frac{1}{3}(1, 10, \overline{5})$	1 3 2	1, 1, 3	5 2 3	$\frac{1}{3}(2, 7, \overline{17})$	2 3 5
$\frac{1}{3}(1, 8, 13)$	1 3 4	1, 6, 1	5 3 2	2, 5, 3	2 3 5
1, 4, 3	1 3 4	1, 0, 7	5 3 4		
$\frac{1}{3}(1, 13, 8)$	1 4 3	1, 7, 0	5 4 3		
$\frac{1}{3}(1, 11, \overline{16})$	1 4 5	1, 1, 8	5 4 5		
1, 5, 4	1 4 5	1, 8, 1	5 5 4		
1, 4, 5	1 5 4				

(续表)

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
$\frac{1}{3}(2, 8, 16)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(4, 13, 11)$	0 5 3	$\frac{1}{3}(4, 7, 5)$	0 3 1
$\frac{1}{3}(2, 16, 8)$	2 4 4	$\frac{1}{3}(4, 10, 8)$	0 4 2	4, 5, 3	4 5 3
2, 8, 5	2 5 3	4, 2, 0	0 4 2	4, 3, 5	4 3 5
$\frac{1}{3}(3, 17, 7)$	2 5 3	$\frac{1}{3}(4, 2, 4)$	0 0 2	$\frac{1}{3}(5, 4, 7)$	3 1 0
$\frac{1}{3}(2, 11, 19)$	2 5 5	$\frac{1}{3}(4, 5, 11)$	4 1 1	$\frac{1}{3}(5, 13, 2)$	3 2 3
$\frac{1}{3}(2, 19, 11)$	2 5 5	$\frac{1}{3}(4, 11, 5)$	4 1 1	$\frac{1}{3}(5, 2, 13)$	3 3 2
2, 1, 6	2 1 5	$\frac{1}{3}(4, 1, 1)$	0 1 1	$\frac{1}{3}(5, 16, 5)$	3 3 4
2, 7, 3	2 1 3	$\frac{1}{3}(4, 3, 7)$	0 1 3	$\frac{1}{3}(5, 10, 1)$	3 1 2
2, 3, 1	2 3 1	$\frac{1}{3}(4, 7, 13)$	4 1 3	$\frac{1}{3}(5, 5, 10)$	3 4 3
2, 4, 0	2 4 0	4, 3, 1	4 1 3	$\frac{1}{3}(5, 19, 8)$	3 4 5
2, 5, 1	2 5 1	$\frac{1}{3}(4, 1, 19)$	4 1 5	$\frac{1}{3}(5, 8, 19)$	3 5 4
2, 0, 4	2 0 4	4, 5, 1	4 1 5	$\frac{1}{3}(5, 8, 17)$	5 1 1
2, 2, 2	2 2 2	4, 1, 3	0 1 5	5, 4, 1	5 1 4
3, 2, 1	3 1 2	$\frac{1}{3}(4, 13, 7)$	4 3 1	$\frac{1}{3}(5, 11, 14)$	5 2 3
3, 3, 1	3 1 4	4, 1, 3	4 3 1	5, 3, 2	5 2 3
3, 1, 2	3 2 1	$\frac{1}{3}(4, 1, 17)$	4 3 3	$\frac{1}{3}(5, 14, 11)$	5 3 2
3, 5, 3	3 2 5	$\frac{1}{3}(4, 17, 1)$	4 3 3	5, 2, 3	5 3 2
3, 1, 4	3 4 1	$\frac{1}{3}(4, 4, 2)$	0 2 0	$\frac{1}{3}(5, 17, 8)$	5 4 1
3, 2, 5	3 5 2	$\frac{1}{3}(4, 8, 10)$	0 2 4	5, 1, 4	5 4 1
3, 0, 3	1 1 4	4, 1, 5	4 5 1	5, 3, 4	3 4 5
3, 2, 1	1 3 2	$\frac{1}{3}(4, 19, 1)$	4 5 1	$\frac{1}{3}(5, 7, 14)$	1 2 5
3, 1, 3	1 3 3	4, 0, 2	0 2 4	5, 4, 5	3 5 4
3, 3, 0	1 4 1	$\frac{1}{3}(4, 7, 23)$	4 5 5	$\frac{1}{3}(5, 14, 7)$	1 5 2
3, 4, 1	1 5 0	$\frac{1}{3}(4, 23, 7)$	4 5 5	$\frac{1}{3}(5, 2, 5)$	1 1 2
3, 1, 4	1 0 5				
3, 5, 3	5 4 3				
3, 6, 3	5 5 2				
3, 4, 5	5 3 4				
3, 3, 8	5 2 5				
$\frac{1}{3}(4, 11, 13)$	0 3 5				
4, 3, 1	0 5 1				

(续表)

$k^1 k^2 k^3$	Nkl	$k^1 k^2 k^3$	Nkl	$k^1 k^2 k^3$	Nkl
$\frac{1}{3}(5, 5, \bar{5})$	1 2 1	7, 0, $\bar{1}$	3 5 2	$\frac{1}{3}(8, 4, \bar{10})$	4 2 0
$\frac{1}{3}(5, 8, \bar{1})$	1 3 0	$\frac{1}{3}(7, 2, \bar{17})$	5 3 2	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{16}, \bar{2})$	4 2 4
$\frac{1}{3}(5, 4, \bar{11})$	1 1 4	$\frac{1}{3}(7, \bar{20}, \bar{1})$	5 3 4	$\frac{1}{3}(8, \bar{1}, \bar{13})$	4 3 1
$\frac{1}{3}(5, \bar{1}, 8)$	1 0 3	$\frac{1}{3}(7, 1, \bar{20})$	5 4 3	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{19}, \bar{5})$	2 3 5
$\frac{1}{3}(5, 11, 4)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(7, \bar{23}, \bar{4})$	5 4 5	$\frac{1}{3}(8, 5, \bar{1})$	0 3 1
$\frac{1}{3}(5, 7, 4)$	3 0 1	$\frac{1}{3}(7, \bar{10}, \bar{11})$	1 5 2	$\frac{1}{3}(8, \bar{2}, \bar{16})$	4 4 2
$\frac{1}{3}(5, \bar{1}, \bar{10})$	3 2 1	$\frac{1}{3}(7, 4, \bar{23})$	5 5 4	$\frac{1}{3}(8, \bar{5}, \bar{10})$	4 5 3
5, 1, 2	1 2 5	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 4, \bar{13})$	3 1 4	$\frac{1}{3}(8, \bar{11}, \bar{7})$	0 5 1
5, 0, 1	1 3 4	$\frac{1}{3}(7, 7, \bar{8})$	1 4 1	$\frac{1}{3}(8, 17, \bar{5})$	4 5 1
5, 2, $\bar{1}$	1 5 2	$\frac{1}{3}(7, \bar{16}, \bar{1})$	3 5 0	$\frac{1}{3}(8, 14, \bar{8})$	4 4 2
5, $\bar{1}$, 0	1 4 3	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 7, \bar{10})$	3 2 3	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 11, \bar{11})$	4 3 3
6, $\bar{1}$, $\bar{1}$	2 5 3	$\frac{1}{3}(\bar{7}, 1, \bar{16})$	3 0 5	8, 1, $\bar{1}$	4 5 5
6, 0, 0	2 4 2	$\frac{1}{3}(7, 13, \bar{4})$	3 4 1	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 5, \bar{17})$	4 1 5
6, 1, 1	2 3 5	$\frac{1}{3}(7, 10, \bar{7})$	3 3 2	$\frac{1}{3}(\bar{8}, 8, \bar{14})$	4 2 4
6, 3, 3	2 5 5	$\frac{1}{3}(7, \bar{8}, \bar{7})$	1 1 4	$\frac{1}{3}(10, \bar{1}, \bar{5})$	2 3 1
$\frac{1}{3}(7, \bar{3}, \bar{5})$	1 3 0	$\frac{1}{3}(7, 2, \bar{1})$	1 1 2	$\frac{1}{3}(10, 5, \bar{1})$	2 1 3
$\frac{1}{3}(7, \bar{1}, \bar{2})$	1 2 1	$\frac{1}{3}(8, \bar{1}, \bar{5})$	0 1 3	$\frac{1}{3}(10, \bar{7}, \bar{11})$	2 5 1
7, 1, 0	3 4 5	$\frac{1}{3}(\bar{8}, \bar{10}, \bar{4})$	2 0 2	$\frac{1}{3}(10, 2, \bar{2})$	2 2 2
$\frac{1}{3}(7, \bar{11}, 8)$	5 0 1	$\frac{1}{3}(8, 7, \bar{7})$	4 1 1	$\frac{1}{3}(\bar{10}, \bar{11}, \bar{7})$	2 1 5
$\frac{1}{3}(7, 8, \bar{11})$	5 1 0	$\frac{1}{3}(8, 7, 11)$	0 1 5	$\frac{1}{3}(\bar{10}, \bar{8}, \bar{4})$	2 0 4
$\frac{1}{3}(7, 11, \bar{10})$	1 2 5	$\frac{1}{3}(8, 13, \bar{1})$	2 1 3	$\frac{1}{3}(10, \bar{4}, \bar{8})$	2 4 0
$\frac{1}{3}(7, \bar{14}, \bar{5})$	5 1 2				
$\frac{1}{3}(7, \bar{5}, \bar{4})$	1 0 3				
$\frac{1}{3}(7, 5, \bar{14})$	5 2 1				
$\frac{1}{3}(7, \bar{17}, \bar{2})$	5 2 3				

(续表)

$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl	$h^* k^* l^*$	hkl
$\frac{1}{3}(10, 13, \bar{1})$	2 5 1	$\frac{1}{3}(13, 5, \bar{2})$	3 2 3	$\frac{1}{3}(16, \bar{1}, \bar{11})$	4 5 1
$\frac{1}{3}(10, 7, \bar{7})$	2 3 3	$\frac{1}{3}(13, \bar{11}, \bar{4})$	3 0 5	$\frac{1}{3}(16, 8, \bar{2})$	4 2 4
$\frac{1}{3}(10, 1, \bar{13})$	2 1 5	$\frac{1}{3}(13, 10, \bar{1})$	1 5 2	$\frac{1}{3}(16, 13, \bar{13})$	4 5 5
$\frac{1}{3}(11, 4, \bar{13})$	3 3 0	$\frac{1}{3}(13, 7, \bar{4})$	1 4 3	$\frac{1}{3}(16, 11, \bar{1})$	4 1 5
$\frac{1}{3}(11, \bar{13}, 4)$	3 0 3	$\frac{1}{3}(13, \bar{1}, \bar{8})$	3 4 1	$\frac{1}{3}(16, 7, \bar{1})$	0 5 3
$\frac{1}{3}(11, 3, \bar{7})$	1 5 0	$\frac{1}{3}(13, 4, \bar{7})$	1 3 4	$\frac{1}{3}(17, 1, \bar{4})$	3 4 3
$\frac{1}{3}(11, 1, 2)$	1 2 3	$\frac{1}{3}(13, 1, \bar{10})$	1 2 5	$\frac{1}{3}(17, 2, \bar{7})$	3 5 2
$\frac{1}{3}(11, 1, \bar{16})$	5 4 1	$\frac{1}{3}(13, 2, \bar{5})$	3 3 2	$\frac{1}{3}(17, 8, \bar{5})$	1 5 4
$\frac{1}{3}(11, 4, 5)$	1 1 4	$\frac{1}{3}(13, 3, \bar{1})$	3 1 4	$\frac{1}{3}(17, 5, \bar{8})$	1 4 5
$\frac{1}{3}(11, \bar{2}, \bar{19})$	5 5 2	$\frac{1}{3}(13, 4, \bar{11})$	3 5 0	$\frac{1}{3}(17, 4, \bar{1})$	3 3 4
$\frac{1}{3}(11, 3, \bar{1})$	1 3 2	$\frac{1}{3}(13, 16, \bar{13})$	5 5 4	$\frac{1}{3}(17, 7, \bar{2})$	3 2 5
$\frac{1}{3}(11, 10, \bar{7})$	5 1 3	$\frac{1}{3}(13, 13, \bar{16})$	5 4 5	$\frac{1}{3}(19, 3, \bar{1})$	1 5 4
$\frac{1}{3}(11, \bar{16}, 1)$	5 1 4	$\frac{1}{3}(14, 3, \bar{11})$	2 3 5	$\frac{1}{3}(19, 5, \bar{8})$	5 4 3
$\frac{1}{3}(11, 7, \bar{10})$	5 2 1	$\frac{1}{3}(14, 8, \bar{8})$	2 4 4	$\frac{1}{3}(19, \bar{1}, 4)$	1 4 5
$\frac{1}{3}(11, \bar{19}, 2)$	3 2 5	$\frac{1}{3}(14, 3, \bar{7})$	2 5 1	$\frac{1}{3}(19, 8, \bar{5})$	5 3 4
$\frac{1}{3}(11, 5, \bar{14})$	3 2 5	$\frac{1}{3}(14, 1, \bar{1})$	2 3 3	$\frac{1}{3}(19, 2, \bar{11})$	5 5 3
$\frac{1}{3}(11, 14, \bar{5})$	3 5 2	$\frac{1}{3}(14, 7, \bar{5})$	2 1 5	$\frac{1}{3}(19, 11, \bar{2})$	5 2 5
$\frac{1}{3}(11, 11, \bar{8})$	3 4 3	$\frac{1}{3}(14, 11, \bar{5})$	2 3 3	$\frac{1}{3}(20, 1, \bar{7})$	4 5 3
$\frac{1}{3}(11, 3, \bar{11})$	3 3 4	$\frac{1}{3}(16, 1, \bar{7})$	0 3 5	$\frac{1}{3}(20, 7, \bar{1})$	4 3 3
$\frac{1}{3}(11, 5, 4)$	1 4 1	$\frac{1}{3}(16, 5, \bar{5})$	4 3 3	$\frac{1}{3}(22, \bar{1}, 1)$	2 5 5
$\frac{1}{3}(11, 7, \bar{8})$	1 0 5	$\frac{1}{3}(16, 2, \bar{8})$	4 4 2	$\frac{1}{3}(23, 7, \bar{4})$	5 4 5
				$\frac{1}{3}(23, 4, \bar{7})$	5 5 4

附录八 若干金属材料的光学距离

(一) 面心立方材料的消光距离(λ)

加速电压 (kV)	Al ($\lambda=13$)	γ -Fe (26)	Inconel (27.2)	不锈钢 (25.8)	β -Co (27)	Ni (28)
75	489 591 939	229 261 396	215 233 382	228 264 397	218 266 383	211 244 369
100	548 662 1052	250 296 446	245 284 428	256 295 444	244 285 429	236 273 413
125	595 719 1142	278 321 484	267 308 465	278 321 483	265 305 466	256 297 448
150	634 766 1217	296 342 516	284 328 495	296 342 514	283 330 496	273 316 478
200	695 850 1332	325 375 565	311 360 543	324 374 564	310 361 544	299 346 523
300	776 957 1489	363 418 631	347 402 606	362 418 623	346 403 607	334 387 584
400	827 999 1587	387 445 673	370 428 646	386 446 671	369 430 647	356 412 623
500	863 1041 1654	403 465 704	386 446 673	402 464 693	384 448 675	371 430 649
600	887 1071 1702	415 478 722	397 459 693	414 478 712	393 461 694	382 442 668
700	905 1094 1738	423 488 727	406 469 707	422 485 725	404 471 709	390 459 682
800	920 1111 1767	430 496 748	412 476 718	429 496 745	410 478 720	396 459 693
900	931 1121 1787	435 502 757	417 482 727	434 502 755	415 484 729	401 464 701
1000	940 1125 1804	439 507 765	421 487 734	438 506 762	419 486 736	405 469 708

(续表)

加速 电压 (kV)	Cu(29)		Eu(45)		Ag(47)		Au(79.2)		Pb(82)		Ir(77)	
	111	200	220	111	200	220	111	200	220	111	200	220
75	215	249	372	176	202	291	223	257	381	182	209	300
100	241	279	417	197	226	326	250	288	426	204	234	336
125	262	303	453	214	245	354	271	313	463	221	254	364
150	279	323	482	228	261	377	289	333	493	236	271	388
200	303	354	538	250	286	414	317	365	541	259	297	420
300	342	395	590	279	320	462	354	408	603	289	331	475
400	364	421	639	297	341	492	377	434	643	308	353	507
500	380	429	656	310	355	513	393	453	671	321	368	538
600	391	452	675	319	366	528	404	466	690	330	379	543
700	399	461	689	326	373	539	413	476	703	337	387	556
800	405	463	700	331	379	548	419	483	715	342	393	563
900	410	474	708	335	384	554	424	489	723	346	398	570
1000	414	479	715	338	387	559	428	494	731	350	401	576

(续表)

加速 电压 (kV)	Pt(78)			Pb(82)			Au(79)			Th(90)			111 220	111 220	50 金剛石立方(32) 50 金剛石立方(14)
	111	200	220	111	200	220	111	200	220	111	200	220	111	220	
75	130	148	207	214	248	319	141	160	252	216	238	316	778	1348	545 309
100	146	155	232	240	267	357	158	179	240	242	267	354	871	1510	610 906
125	156	180	252	261	290	388	172	194	270	263	290	385	946	1640	662 984
150	169	191	269	278	309	413	183	207	288	280	298	410	1307	1747	706 1048
200	185	210	294	305	339	453	201	227	315	307	338	449	1102	1915	778 1149
300	207	232	329	240	278	505	224	254	352	343	378	501	1233	2138	864 1283
400	220	250	351	263	403	539	239	270	375	366	402	535	1314	2279	921 1368
500	229	260	365	278	420	561	249	282	391	381	419	557	1370	2375	959 1436
600	236	268	376	389	432	578	256	290	402	392	432	573	1409	2444	987 1467
700	241	273	384	397	441	596	262	296	411	400	441	585	1439	2495	1008 1498
800	245	278	390	403	445	599	266	301	417	407	448	594	1462	2534	1024 1521
900	248	281	395	403	454	603	269	304	422	411	452	602	1479	2555	1036 1540
1000	250	284	398	412	458	612	272	307	423	415	457	607	1493	2599	1046 1554

(二) 体心立方材料的消光距离($\bar{A}$)

加速电压 (kV)	110 200 211			110 200 211			110 200 220			110 200 220			110 200 220		
	β Ti(ϵ -22)			α Fe(26)			β -Zr(40)			V(23)			Rb(37)		
75	260	520	653	240	552	446	289	395	493	392	427	549	915	1100	1286
100	403	532	736	268	391	500	324	442	552	327	473	615	1035	1222	1448
125	438	533	800	292	428	543	352	480	599	355	519	668	1113	1308	1564
150	466	574	852	311	456	578	375	512	539	378	553	712	1195	1426	1666
200	511	739	934	340	499	634	410	561	700	415	606	780	1299	1562	1826
300	571	835	1043	380	558	708	458	626	782	463	677	871	1451	1745	2039
400	608	879	1112	405	594	755	489	667	803	492	721	929	1547	1860	2174
500	634	916	1158	422	619	786	509	696	858	515	752	968	1612	1938	2266
600	652	943	1192	435	637	809	524	716	894	529	774	996	1653	1995	2331
700	666	963	1217	444	651	826	535	731	912	541	790	1017	1693	2036	2380
800	676	978	1233	451	661	839	543	742	927	549	802	1033	1720	2068	2418
900	685	990	1251	456	669	849	550	751	938	556	812	1045	1741	2093	2447
1000	691	999	1263	460	675	857	555	758	947	561	820	1055	1757	2113	2470

(续表)

加速电压 (eV)	Nb(41)			Mo(42)			W(74)			Ta(78)		
	110	200	230	110	200	230	110	200	230	110	200	230
75	231	325	400	206	292	368	143	199	244	159	218	267
100	259	364	454	231	327	412	160	220	273	178	244	293
125	281	396	493	251	355	448	174	239	296	193	265	325
150	300	421	526	268	378	477	186	255	316	206	283	346
200	329	462	476	293	415	523	203	280	346	226	310	380
300	367	516	643	327	463	584	227	312	386	252	346	424
400	391	550	686	349	494	623	242	333	412	269	368	452
500	408	573	715	364	514	649	253	347	429	280	384	471
600	420	590	735	374	529	668	260	357	442	288	395	485
700	428	603	751	382	540	682	265	364	451	294	403	495
800	435	611	763	388	549	692	269	370	458	299	410	503
900	440	619	772	393	556	701	272	375	464	303	415	509
1000	445	625	779	397	561	707	275	378	468	305	419	514

(三) 六方结构材料的消光距离(λ)

加速电压 (kV)	1010 0002 1011		1010 0002 1011		1010 0002 1011		1010 0002 1011		1010 0002 1011		1010 0002 1011				
	E ₀ (σ=2)		α Co(37)		α Zr(40)		α Ti(22)		Zn(30)						
75	2504	738	1037	821	219	311	1059	285	392	1304	253	439	391	241	392
100	2805	821	1161	919	245	343	1185	319	429	1461	325	547	1110	270	405
125	3045	892	1261	998	257	378	1287	347	477	1586	429	595	1203	293	440
150	3244	950	1343	1063	284	403	1372	369	508	1690	457	633	1284	312	461
200	3555	1021	1472	1166	311	441	1503	405	557	1852	501	694	1407	342	514
300	3970	1168	1624	1301	348	493	1679	452	622	2068	559	775	1571	382	574
400	4332	1226	1752	1387	371	525	1789	482	663	2205	596	826	1575	407	613
500	4611	1291	1826	1446	386	547	1865	502	691	2298	622	851	1746	421	637
600	4833	1329	1879	1488	397	563	1919	517	711	2365	640	886	1796	437	656
700	4934	1357	1919	1519	406	575	1959	528	726	2414	653	905	1834	446	670
800	4966	1378	1949	1549	412	584	1999	536	737	2452	663	919	1863	453	680
900	4963	1395	1972	1561	417	591	2014	542	746	2484	671	930	1885	458	688
1000	4909	1404	1991	1576	421	597	2033	548	753	2506	678	939	1903	463	695

(续表)

加速电压 (kV)	Cd(48)		Nd(60)		Er(68)		Gd(64)		Re(75)						
	1010	0002	1011	1010	0002	1011	1010	0002	1011	1010	0002	1011			
75	932	218	325	2168	444	755	935	249	329	1035	272	374	502	132	185
100	1043	245	375	2428	497	845	1047	278	380	1159	305	419	562	148	206
125	1133	266	407	2627	540	918	1137	302	413	1253	331	455	610	161	225
150	1207	282	434	2809	575	978	1211	322	440	1341	353	485	650	171	240
200	1323	310	476	3079	631	1072	1323	353	482	1469	383	531	713	188	263
300	1477	346	531	3438	704	1197	1482	392	538	1641	431	593	796	210	294
400	1575	369	565	3665	753	1276	1580	420	574	1749	450	632	848	223	313
500	1641	385	590	3819	782	1329	1647	438	598	1823	479	659	884	233	326
600	1868	395	607	3930	805	1368	1695	451	615	1870	493	678	910	240	336
700	1924	404	620	4012	822	1397	1730	460	628	1915	504	692	929	245	343
800	1751	410	630	4073	835	1419	1757	467	638	1945	511	703	943	248	348
900	1773	415	637	4125	845	1436	1779	473	646	1959	518	712	955	252	352
1000	1790	419	644	4154	853	1449	1796	478	652	1987	523	718	961	254	356

附录九 合金中常见第二相的晶体学数据

化合物的组成	晶体结构	点阵常数 (Å)			空间群	备注
		a	b	c		
碳化物						
MC	面心立方	4.10~4.12			O_h-Fm3m	1. 结构钢和含钒合金钢, $\geq 500^\circ\text{C}$ 回火, 析出 VC; 2. 含铁基中, 常见 TiC 析出; 3. 镍基高温合金中, MC 稳定性按 TaC-NbC-TiC-V C 次序, 依次减小; 4. 高温合金中 MC 稳定温度为 $760\sim 1150^\circ\text{C}$ 。
VC	面心立方	4.14~4.16				
TiC	面心立方	4.3255				
ZrC	面心立方	4.655				
NbC	面心立方	4.458				
TaC	面心立方	4.415				
HfC	面心立方	4.641				
MoC	六方	2.90		2.77		
WC	六方	2.90		2.83		
M ₂₃ C ₆	面心立方	10.95~12.50				
Co ₃ W ₂ C	面心立方	11.01			O_h-Fm3m	1. 高温合金中出现的 M ₂₃ C ₆ , 其化学成分和晶体结构与 M ₆ C 相似, 但 M ₂₃ C ₆ 中碳原子数较 M ₆ C
Fe ₃ W ₃ C	面心立方	11.01				

$\text{Fe}_3\text{Mo}_3\text{C}$	面心立方	11.12	少一半;
$\text{Ni}_3\text{W}_3\text{C}$	面心立方	11.15	2. M_6C 与 μ 相的成分和结构相似,合金中析出 M_6C 有利于析出 μ 相;
$\text{Ni}_3\text{Mo}_3\text{C}$	面心立方	11.13	M_6C 与 M_{23}C_6 共存时,常常同时有 σ 相;
$\text{Fe}_2\text{Mo}_4\text{C}$	面心立方	11.26	3. M_6C 是高速钢的主要碳化物,其中含钨量可达70%; M_6C 在高温下比较稳定。
$\text{Ni}_2(\text{Ti}, \text{Nb})_4\text{C}$	面心立方	11.25	
$\text{Ni}_2(\text{V}, \text{W})_4\text{C}$	面心立方	11.58	
$\text{V}_3\text{Zr}_3\text{C}$	面心立方	11.50	
$\text{Cr}_3\text{Nb}_3\text{C}$	面心立方	12.12	
$\text{Fe}_3\text{Nb}_3\text{C}$	面心立方	11.49	
$\text{Co}_3\text{Nb}_3\text{C}$	面心立方	11.30	
$\text{Co}_3\text{Ta}_3\text{C}$	面心立方	11.633	
$(\text{V}, \text{Ni})_3\text{Nb}_3\text{C}$	面心立方	11.618	
$\text{Ni}_3\text{W}_3\text{C}$	面心立方	11.50	
$\text{Fe}_2\text{W}_4\text{C}$	面心立方	11.25	
$\text{Co}_2\text{Mo}_4\text{C}$	面心立方	11.04	
$\text{Co}_2\text{W}_4\text{C}$	面心立方	11.85	
$\text{Fe}_3\text{W}_4\text{C}$	面心立方	11.21	
$\text{Co}_4\text{W}_2\text{C}$	面心立方	11.08	
	面心立方	11.01	

(续表)

相的名称及组成	晶体结构	点阵常数 (Å)			空间群	备 注
		a	b	c		
$M_{23}C_6$	面心立方	10.50~10.80			$OrFm3m$	1. $M_{23}C_6$ 是具有复杂面心立方结构的碳化物, 单胞中含92个金属原子, 24个碳原子;
$Cr_{23}C_6$	面心立方	10.638~10.64				2. 铁基合金和合金钢中, $Cr_{23}C_6$ 中一部分Cr可为Fe置换, 形成 $(Cr, Fe)_{23}C_6$;
$Mn_{12}C_6$	面心立方	10.57				3. 高温合金中 $Cr_{23}C_6$ 一般在含Cr大于5%的合金中形成, 一部分Cr可为Mo、W置换, 形成 $Cr_{23}(Mo, W)_x C_6$; 高温合金中 $M_{23}C_6$ 析出温度范围为650~1100°C,
$(Cr, Fe)_{23}C_6$	面心立方	10.57~10.54				γ' 相点阵常数与成分有关; $a_{\gamma'} = 3.567 + 0.156C'_{Ni}$ $+ 0.373(C'_{Nb} + C'_{Ta})$ $+ 0.248(C'_{Mo} + C'_{W})$ (C'_M 是M元素在 γ' 相中的原子百分比)
$Cr_{12}Mo_2C_6$	面心立方	10.60~10.70				
$Fe_{21}W_2C_6$	面心立方	10.52				
$Fe_{21}Mo_2C_6$	面心立方	10.51~10.54				
$Cr_{12}W_2C_6$	面心立方	10.73				
$(Cr, Mo, Fe)_{23}C_6$	面心立方	10.53				
金属间化合物:						
$\gamma' Ni_3(Al, Ti)$	有序面心立方	3.56~3.61			$Pm3m$	
$\eta' Ni_3Ti$	六方	5.109		8.299	$P6_3/mmc$	
ϵNi_3Nb	正交	5.11	4.26	4.54	$Pmmm$	
$\gamma'' Ni_3Nb$	四方	3.624		7.406	$I4/mmm$	
$\beta NiAl$	面心立方	2.89			$Pm3m$	
$G Ni_{10}Ti_6Si_2$	面心立方	11.198			$Pm3m$	

X $Cr_6Fe_{12}Mo_8$	体心立方	8.920			I_{43m}	
R $FeCrMo$	六方	10.503			R_3	19.342
μ $(Co, Fe, Ni)_7$ (Cr, W) ₆	六方	4.702			R_{3m}	20.61
ρ $Cr_{13}Ni_{10}Mo_{22}$	正交	9.070	16.98		P_{6mm}	4.752
σ	四方	8.80~9.20			$P_{42/mnm}$	4.50~4.80
$FeCr$	四方	8.80				4.544
$FeMo$	四方	8.183				4.812
Mn_3V	四方	8.92				4.615
FeV	四方	8.930				4.61
CoV	四方	8.877				4.598
NiV	四方	8.966				4.641
Mn_3Cr	四方	8.864				4.588
FeW	四方	4.745				25.78
$CoCr$	四方	8.75				4.54
$MnMo$	四方	9.10				4.74
$FeCrMo$	四方	8.81				4.58

1. σ 相形成温度: 730~980°C,

815~870°C 析出最快;

2. σ 相属拓扑密排相 (TCP);

3. σ 相有较大的固溶度范围, 没有严格的成分组成;

4. 镍基高温合金中, σ 相主要由 Ni、Cr、Mo 组成, Mo 是 σ 相的不可缺少组成部分, 一般 ~20%, Cr 含量也较高 ~40%;

5. 硅有促进 σ 相生成作用。

(续表)

相的名称及组成	晶体结构	点阵常数 (Å)			空间群	备注
		a	b	c		
Laves; ΔB_2	六方	3.45~7.48		4.70~12.27	$D_{6h}^2-F6_3/mmc$	1. Laves 相在高温合金中常见, 且成分复杂, 一般为(Ti, Nb, Mo) (Fe, Co, Ni, Cr, Si) ₂ ;
WFe ₂	六方	4.737		7.701		2. Laue1 718 中 Laves 相 Mo、Ni、Ni 含量较高, 也有一些 Fe、Cr、Ti;
MoFe ₂	六方	4.715		7.724		3. 磁有促进 Laves 相生成的作用;
TiFe ₂	六方	4.760		7.831		4. Laves 相电子衍射谱有时有
NbFe ₂	六方	4.823		7.877		条纹通过衍射斑, 可能与 {0001}、{1011}、{1010} 面上的孪生有关;
TaMn ₂	六方	4.871		7.952		5. Laves 相容易长大成条状;
TiMn ₂	六方	4.825		7.917		6. Laves 相的轴比范围: 1.42~1.71;
NbMn ₂	六方	4.875		7.971		7. Laves 相的析出温度范围: 650~1100°C。
Nb ₃ Co ₃ Si	六方	4.794		7.760		
Ti ₃ Co ₃ Si	六方	4.798		7.566		
Fe ₃ W ₃ Si	六方	4.738		7.567		
WCo ₃	六方	4.76		7.74		
TiCo ₃	面心立方	7.03				
MgCu ₂ 型	面心立方	6.8~7.2				
MgZn ₂ 型	六方	4.8~5.1		7.7~8.1		

MgNi ₂ 型	六方	4.8~4.9		15~15
Y Ti(C, N)S	六方	3.206		11.190
Z Nb ₂ Cr ₂ N ₂	四方	3.034		7.287
硼化物 M ₂ B ₂	四方	5.60~6.20		3.10~3.20
硫化物 CuS	面心立方	5.6948		
γ-MnS	六方	5.584		0.440
α-MnS	面心立方	5.224		
β-MnS	面心立方	5.6		
Ti ₂ S	六方	5.206		11.11
TiS	六方	3.299		6.380
TiS ₂	单斜	4.973	2.432	8.714
Ti ₂ S	正交	11.35	14.00	9.32
TiS ₂	六方	3.4049		5.6912
Ti ₂ S ₃	六方	3.277		9.214
氧化物 α-Al ₂ O ₃	六方	4.759		12.991
Fe ₂ O ₄	面心立方	8.392		
γ-Fe ₂ O ₃	四方	8.338		25.01
η-Al ₂ O ₃	面心立方	7.96		
SiO ₂	六方	5.006		5.459

(续表)

相的名称及组成	晶体结构	点阵常数 (Å)			空间群	备 注
		a	b	c		
氮化物 TiN	面心立方	4.23				
ZrN	面心立方	4.56				
VN	面心立方	4.13				
NbN	面心立方	4.39				
TaN	六 方	3.05		4.95		
CrN	面心立方	4.14				
Cr ₃ N	六 方	4.80		4.47		
Mo ₂ N(γ)	面心立方	4.160				
MoN(β)	六 方	2.860		2.804		
BN	六 方	2.504		0.601		
AlN	六 方	3.114		4.986		
α-Fe	体心立方	2.8661				
γ-Fe	面心立方	3.5698				
石墨 C	六 方	2.461				
渗碳体 Fe ₃ C	正 交	4.5241	5.5088	6.7418		
β-Co	面心立方	3.5449				
α-Co(c Co)	六 方	2.507		4.070		