

“十三五”国家重点图书出版规划项目
物理学名家名作译丛

(美)布伦特·福尔兹 (美)詹姆斯·豪 著
吴自勤 石磊 何维 张庶元 译

材料的透射电子显微学 与衍射学

Transmission Electron Microscopy and
Diffractometry of Materials

中国科学技术大学出版社

“十三五”国家重点图书出版规划项目
物理学名家名作译丛



(美)布伦特·福尔兹 (美)詹姆斯·豪 著
吴自勤 石磊 何维 张庶元 译

材料的透射电子显微学 与衍射学

Transmission Electron Microscopy and
Diffractometry of Materials

中国科学技术大学出版社

安徽省版权局著作权合同登记号:第 12151484 号

Transmission Electron Microscopy and Diffractometry of Materials, First Edition was originally published in English in 2001. This translation is published by arrangement with Springer-Verlag Press.

All rights reserved.

© Springer-Verlag Press & University of Science and Technology of China Press 2017

This book is in copyright. No reproduction of any part may take place without the written permission of Springer-Verlag Press and University of Science and Technology of China Press. This edition is for sale in the People's Republic of China (excluding Hong Kong SAR, Macau SAR and Taiwan Province) only.

此版本仅限在中华人民共和国境内(不包括香港、澳门特别行政区及台湾地区)销售。

图书在版编目(CIP)数据

材料的透射电子显微学与衍射学/(美)布伦特·福尔兹(Brent Fultz),(美)詹姆斯·豪(James Howe)著;吴自勤等译. —合肥:中国科学技术大学出版社,2017. 1
(物理学名家名作译丛)

“十三五”国家重点图书出版规划项目

书名原文:Transmission Electron Microscopy and Diffractometry of Materials
ISBN 978-7-312-03749-8

I. 材… II. ①布… ②詹… ③吴… III. ①工程材料—透射电子显微术 ②工程材料—X 射线衍射 IV. TB302

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 308945 号

出版 中国科学技术大学出版社
安徽省合肥市金寨路 96 号,230026
<http://press.ustc.edu.cn>
印刷 安徽联众印刷有限公司
发行 中国科学技术大学出版社
经销 全国新华书店
开本 710 mm×1000 mm 1/16
印张 42.25
字数 873 千
版次 2017 年 1 月第 1 版
印次 2017 年 1 月第 1 次印刷
定价 99.00 元

编 委 会

主 编 叶铭汉 陆 燏 张焕乔 张肇西 赵政国

编 委 (按姓氏笔画排序)

马余刚(上海应用物理研究所) 叶沿林(北京大学)

叶铭汉(高能物理研究所) 任中洲(南京大学)

庄鹏飞(清华大学) 陆 燏(紫金山天文台)

李卫国(高能物理研究所) 邹冰松(理论物理研究所)

张焕乔(中国原子能科学研究院) 张新民(高能物理研究所)

张肇西(理论物理研究所) 郑志鹏(高能物理研究所)

赵政国(中国科学技术大学) 徐珊珊(近代物理研究所)

黄 涛(高能物理研究所) 谢去病(山东大学)

译者的话

本书是 *Transmission Electron Microscopy and Diffractometry of Materials* (第4版)的中译本,介绍了表征物质材料的透射型电子显微镜(TEM)和X射线衍射仪(XRD)的技术、方法、理论。书中系统阐述了波与固体中的原子相互作用的基本原理,详细论述了TEM中电子衍射以及各种成像模式的物理基础和技术应用,并进行了严格的数学描述,探讨了对X射线、电子、中子衍射进行探测的异同,还对结晶序的衍射效应、缺陷和无序材料等进行了细致的讨论和阐释。原书每一章的章末都配备有习题,以便读者更好地领会和掌握相关知识。与第3版相比,这一版所有章节都进行了更新和修订,增加了与TEM有关的重要的新技术,如纳米束电子衍射、电子层析术和几何相位分析等等。本书是专门为具有美国物理学科背景的高年级大学生和新入学的研究生撰写的教材,是一本广受欢迎和深得好评的透射电子显微学和X射线衍射学的教材和参考书。本书也可供透射电子显微学工作者、X射线衍射技术工作者以及从事凝聚态物理和材料研究的学者参考。

原书第1版于2001年面世,由世界著名的出版社——德国Springer出版社出版,次年8月第2版问世。作者对原书进行修订之后,2005年发行了第2版的修订版。两年之后的2007年出版了第3版,2012年8月原书第4版与读者见面。目前该书已经有了俄文版。本书是根据2013年出版的原书英文第4版翻译而成的。

原书的两位作者Brent Fultz博士和James Howe博士分别是美国加州理工学院应用物理和材料科学系、弗吉尼亚大学材料科学与工程系的教授。Fultz教授早年毕业于麻省理工学院,1982年在加州大学伯克利分校获得博士学位。Fultz教授1988年获得“美国总统杰出青年科学家奖”,2010年获得“美国TMS Electronic, Magnetic & Photonic Materials Division (EMPMD, 矿物、金属、材料学会,电子、磁学及光子材料分会)杰出科学家奖”,他还获得了“IBM学院发展奖”和Jacob Wallenberg基金会奖学金。Fultz教授利用非弹性中子散射,在材料热力学的基本理解方面作出了突出贡献。他是美国散裂中子源(Spallation Neutron Source)广角范围斩波器谱仪(Angular-Range Chopper Spectrometer, ARCS)项目的主要科学家,同时也是美国中子散射实验分散数据分析软件(Distributed Data Analysis for Neutron Scattering Experiments, DANSE)项目的主要科学家。

试读结束: 需要全本请在线购买: www.ertongbook.com

Howe 教授于 1987 年获得“美国总统杰出青年科学家奖”，1999 年获得德国马普金属研究所 (Max-Planck-Institut für Metallforschung) 的“洪堡高级研究员奖” (von Humboldt Senior Researcher)，2000 年获“美国材料信息学会 (ASM International) 材料科学研究银奖”。

本书的翻译由中国科学技术大学和广西大学的四位老师共同完成。吴自勤教授负责筹划和制订出版计划，组织安排书稿的翻译和审阅工作。第 1, 3, 13 章由何维教授和吴自勤教授翻译，第 2 章由吴自勤教授和石磊博士翻译，第 4~7 章由石磊博士翻译，第 8, 9, 11, 12 章由张庶元教授翻译，第 10 章由何维教授翻译。索引部分由石磊博士、何维教授和张庶元教授共同翻译。随着对外交流的增加，英语成为越来越重要的工具。在当前提倡阅读外文原文、使用外文原文教材的环境下，我们对原书的附录未做翻译，给读者保留一点阅读理解原著的空间。本书在翻译过程中力求做到准确、通顺，但限于译者的水平，缺憾和错谬在所难免，真诚地希望广大读者斧正。

本书的出版得到了原书出版社德国 Springer 出版社的支持和帮助，在此对他们表示诚挚的谢意。同时，中译本的筹划和出版得到了德国 Springer 出版社经理陈青先生、中国科学技术大学出版社编辑的大力支持和帮助，在此也一并致谢。

译者

2016 年 6 月

序

本书的目标和范围

本教科书是为以物理科学为背景的高年级大学生和新入学的研究生而写的。其目标是使他们尽可能快地了解透射电子显微学(TEM)和 X 射线衍射学的基础概念和一些细节,它们对材料的表征是重要的。本书话题的发展过程是和大多数近代 TEM 和 XRD 研究材料的现代水平相协调的。本书的内容也提供了进一步研究先进的散射、衍射和显微学课题的基本准备。本书包括许多实际细节和实例,但不包含实验室工作中的一些重要课题,如 TEM 样品的制备方法等。

从 2001 年本书第 1 版发行以来,衍射学和显微学方法又有了快速的进展,它们部分地受纳米科学和材料技术成长的推动。在 TEM 中近期的重大进展是物镜球差的实际校正。它使图像的高分辨率(小于 0.1 nm)可以常规地获得,电子能谱的能量分辨率亦有显著的改进。材料中单个原子定位和鉴定已经从 50 年来的一个梦想变成今天的实验方法。

X 射线谱学和衍射学的整个领域得益于半导体探测技术的发展。另一方面的进展是广大学者(围绕同步辐射的常规用户)的交流团体的形成。强大的新中子源已经提高了中子散射研究的领域。大多数用于 X 射线束、中子束和电子束研究材料的现代仪器,通过国际科学交流愈来愈多地被用户团体按科学的价值被广泛地使用。

第 4 版增加了透射电子显微学的新进展,其中有层析成像(tomography)和应变分析等。中子散射在原有的一章基础上进行了补充,增加了相位、能量和散射因子等基础知识的概念。在第 3 版出版后,许多说明和习题使得本书的核心内容如散射、衍射和显微学的基础知识更加清晰。

在原理和实际知识的细节方面存在着波和波函数如何与物质相互作用形成的广泛概念,利用它们可以统一审视 X 射线、电子和中子。相干性和波的干涉对 X 射线波和电子波函数两者概念上是相似的。在探索材料的结构过程中,周期性波和波函数分享倒格子、晶体学、无序效应等概念。除了教学效益之外,积分处理更大的好处是其广度——它建立了一个以 TEM 和 XRD 两者为共同对象的应用傅里叶变换和卷积的强度。

内容

前三章是散射、衍射和成像的一般介绍以及 XRD, TEM 和中子散射仪器的结构。随后的第 4 章和第 5 章介绍了电子、X 射线和原子的相互作用。在电子的弹性散射中引入原子的形状因子,在电子的非弹性散射中专门引入截面概念,介绍的内容比实际需要深一些,以便理解第 6~8 章。这三章的重点是衍射、晶体学和衍射衬度。在倾向衍射和显微学的课程系统中,可以进一步改变第 4 章和第 5 章中准备进行高级研究的内容。

本书的核心部分是劳厄公式下的运动学衍射理论,可用来处理无序度逐步增加的晶态材料。在第 8 章中,重点利用相位-振幅图分析缺陷的 TEM 图像的衍射衬度。在第 9 章中处理完衍射线宽。随后,在第 10 章中利用帕特森(Patterson)函数处理短程序现象、热漫散射和非晶态材料。在第 11 章中介绍了高分辨 TEM 图像和像模拟。在第 12 章中介绍了多种现代显微学方法。在第 13 章中描述了电子衍射动力学理论的主体内容。

对动力学理论中有效消光长度和有效偏离参量进行讨论后,我们尽可能沿着电子衍射的方向扩展运动学理论。我们认为,对一本教科书来说这是一种正确的方法,因为运动学理论已经建立了衍射和材料结构间清楚、协调的关系。例如,相位-振幅图是解释缺陷衬度的实用图形,并且是实验室工作中顺手的、能启发新设想的工具。不仅如此,熟悉傅里叶变换在衍射学和显微学领域以外的一些应用也是有价值的。傅里叶变换在本书的前面就已提出,但它的认真推演却在第 5, 6, 8 章中。第 9 章讲述了卷积。第 10 章介绍了帕特森函数。建议读者在阅读第 11~13 章高分辨 TEM 和动力学理论之前熟悉本书中所涉及的傅里叶变换。高分辨 TEM 和动力学理论需要较高的数学水平,它们的基础是电子波函数的量子力学。

教学

本书由 1/4 学年课程“衍射理论及其应用”(MS/APh 122)的一组笔记扩展而成,是加州理工学院研究生和高年级大学生的教材,也是弗吉尼亚大学 1/2 学年研究生课程“透射电子显微学”(MSE 703)和“高等 TEM”(MSE 706)笔记的扩展。这些课程的大多数学生的专业是材料科学和应用物理,并且他们有一定的元素晶体学和量子力学基础。

讲课内容、深度、速度是课程教师尝试、判断的结果。为了帮助课程内容的选定,本书作者把比较专门的章节标上“*”号。带有双剑号“‡”的章节需要较高的数学、物理、晶体学知识水平。每一章有几个或多个习题用来阐明原理。一些习题的内容包含某些现象的解释(它们放在正文中显得有些特殊)。习题解是一个在线手册,它包含不少深入的背景知识。此手册只提供给上课教师,欢迎和作者联系(抱歉的是不能广泛提供给热心的同学)。

选择概念的讲解程度时我们也面临严格、透彻和清楚、简明之间的矛盾。我们

的一般处理方案不是直接引用规则,而是提供这些概念包含的物理概念的解释。数学推导的各个步骤的高度是相当的,我们要把注意力集中于核心窍门,即使它们需要复习基本的概念。我们感谢过去的学生对一些解释和计算所做的澄清和修订。

在1/4学年,或者更长些的1/2学年内读完本书是不现实的。我们提出利用本书的建议如下:作为“材料物理”课程(内容为显微学和材料对波的散射理论),本书作者之一讲解的章节次序是:第1章,第2章,3.1~3.4节,第4章,5.1~5.4节,5.6节,第6章,7.1~7.3节,第8章,第9章,10.1~10.3节,11.1节,11.2节,12.1节,12.2节,13.1节,13.5节。用1周完成习题,用1周做TEM实验。这些内容在一共10周的1/4学年内完成。实验室的入门练习见本书附录A.12。

本书另一作者的1/2学年课程讲解的章节次序是:1.1节,1.2节,2.1节,2.8节,4.1节,4.3节,5.1~5.7节,6.1~6.9节,7.1~7.5节,8.1~8.14节。此课程包括附录A.12的实验,但其中的“用 MoO_3 进行电子束转动校正”改为“物镜像散的校正”。

致谢

C. C. Ahn, D. H. Pearson, H. Frase, U. Kriplani, N. R. Good, C. E. Krill 各位博士, L. Anthony, L. Nagel, M. Sarikaya 各位教授提出了建议和意见, P. S. Albertson 帮助准备了书稿, N. R. Good, J. Graetz 完成了许多数学公式的打印。我们感谢他们的细心工作。P. Rez 教授建议过一个统一处理动力学衍射的方法,感谢他和 A. Minor 教授对后来的版本增加的新内容的建议。感谢 R. Gronsky, O. A. Graeve 教授对习题解手册的更新。我们还要感谢 Springer-Verlag 出版社的物理编辑 C. Ascheron 博士的帮助。最后我们要感谢美国国家自然科学基金会对我们进行显微学和衍射研究的支持。

Brent Fultz

Pasadena

James Howe

Charlottesville

目 录

译者的话	(i)
序	(iii)
第 1 章 衍射和 X 射线粉末衍射仪	(1)
1.1 衍射	(1)
1.2 X 射线的产生	(10)
1.3 X 射线粉末衍射仪	(18)
1.4 XRD 和 TEM 的 X 射线探测器	(24)
1.5 粉末 X 射线衍射实验数据	(31)
1.6 拓展阅读	(43)
习题	(44)
参考文献	(48)
第 2 章 TEM 及其电子光学	(49)
2.1 透射电子显微镜概述	(49)
2.2 利用透镜和光路图工作	(53)
2.3 TEM 操作模式	(57)
2.4 实际 TEM 光学	(68)
2.5 玻璃透镜	(73)
2.6 磁透镜	(78)
2.7 透镜像差和其他缺陷	(82)
2.8 分辨率	(89)
2.9 拓展阅读	(90)
习题	(91)
参考文献	(96)
第 3 章 中子散射	(98)
3.1 中子和中子散射	(98)
3.2 中子源	(100)

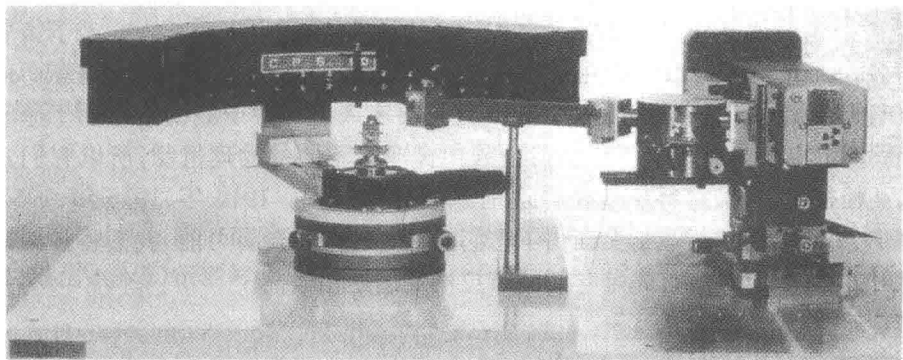
3.3	中子粉末衍射仪	(102)
3.4	相波	(105)
3.5	测量较大结构的仪器	(108)
3.6	非弹性散射*	(111)
3.7	准弹性散射*	(115)
3.8	磁散射*	(116)
3.9	核散射	(117)
3.10	拓展阅读	(118)
	习题	(119)
	参考文献	(120)
第4章	散射	(122)
4.1	波与散射	(122)
4.2	X 射线散射	(129)
4.3	相干弹性散射	(136)
4.4	拓展阅读	(150)
	习题	(150)
	参考文献	(152)
第5章	非弹性电子散射和谱学	(153)
5.1	非弹性电子散射	(153)
5.2	电子能量损失谱(EELS)	(155)
5.3	等离子激发	(161)
5.4	芯激发	(165)
5.5	能量过滤 TEM 成像(EFTEM)	(177)
5.6	X 射线能量色散谱(EDS)	(183)
5.7	定量 EDS	(191)
5.8	拓展阅读	(197)
	习题	(198)
	参考文献	(201)
第6章	晶体衍射	(203)
6.1	原子子波的叠加	(203)
6.2	倒格子和劳厄条件	(208)
6.3	点阵衍射基础	(214)
6.4	化学有序结构	(221)
6.5	晶体形状因子	(227)
6.6	偏离矢量(偏离参量)	(234)

6.7 埃瓦尔德球	(235)
6.8 劳厄区	(239)
6.9 埃瓦尔德球弯曲的影响*	(240)
6.10 拓展阅读	(242)
习题	(242)
参考文献	(247)
第7章 电子衍射和结晶学	(248)
7.1 衍射花样的标定	(248)
7.2 极射赤面投影及操作	(255)
7.3 菊池线与样品取向	(262)
7.4 二次衍射	(270)
7.5 会聚束电子衍射*	(272)
7.6 拓展阅读	(295)
习题	(296)
参考文献	(301)
第8章 TEM 衍射衬度像	(303)
8.1 TEM 像中的衬度	(303)
8.2 含有缺陷晶体的衍射	(305)
8.3 消光距离	(307)
8.4 振幅-相位图	(310)
8.5 试样的厚度条纹	(311)
8.6 TEM 像中的弯曲轮廓线	(316)
8.7 应力场的衍射衬度	(320)
8.8 位错和伯格斯矢量的确定	(322)
8.9 位错的半定量衍射衬度	(333)
8.10 位错的弱束暗场成像	(338)
8.11 界面处的条纹	(344)
8.12 堆垛层错的衍射衬度	(350)
8.13 反相(π)边界和 δ 边界	(359)
8.14 沉淀相和其他缺陷的衬度	(361)
8.15 拓展阅读	(366)
习题	(367)
参考文献	(372)
第9章 衍射线形	(374)
9.1 衍射线宽化和卷积	(374)

9.2	傅里叶变换解卷	(383)
9.3	同时应变和尺寸宽化	(388)
9.4	晶体柱列引起的衍射线形	(393)
9.5	衍射线形的评论	(398)
9.6	拓展阅读	(400)
	习题	(401)
	参考文献	(402)
第 10 章	帕特森函数和漫散射	(404)
10.1	帕特森函数	(404)
10.2	原子位移的漫散射	(414)
10.3	化学无序的漫散射	(424)
10.4	非晶材料*	(432)
10.5	小角散射	(441)
10.6	拓展阅读	(449)
	习题	(450)
	参考文献	(453)
第 11 章	高分辨 TEM 像	(454)
11.1	惠更斯原理	(455)
11.2	高分辨像的物理光学	(466)
11.3	实验高分辨像	(471)
11.4	高分辨 TEM 像的模拟*	(485)
11.5	高分辨 TEM 像的实例	(491)
11.6	拓展阅读	(508)
	习题	(509)
	参考文献	(510)
第 12 章	高分辨 STEM 和相关成像技术	(512)
12.1	高角环形暗场像的特征	(512)
12.2	沿原子列的电子通道	(515)
12.3	通道电子的散射	(519)
12.4	HAADF 和 HRTEM 成像的比较*	(521)
12.5	原子分辨率的 HAADF 成像	(523)
12.6	透镜像差和像差校正*	(525)
12.7	C_s 校正像的实例	(530)
12.8	电子层析术	(533)
12.9	拓展阅读	(536)

习题	(536)
参考文献	(537)
第 13 章 动力学理论	(539)
13.1 本章综述	(539)
13.2 周期势中高能电子的数学特征 ^{**}	(541)
13.3 动力学理论第一方法——束传播	(549)
13.4 动力学理论第二方法——布洛赫波和色散面 [‡]	(552)
13.5 运动学理论和动力学理论的本质差别	(568)
13.6 双束动力学理论中的衍射偏差 s_g	(571)
13.7 晶体缺陷的动力学衍射衬度	(575)
13.8 电子衍射的多束动力学理论 ^{**}	(586)
13.9 拓展阅读	(588)
习题	(589)
参考文献	(591)
附录	(593)
A.1 粉末 X 射线衍射花样的指数标定	(593)
A.2 特征 X 射线 K_α 的质量衰减系数	(594)
A.3 X 射线的原子(散射)形状因子	(596)
A.4 X 射线反常散射的色散校正	(596)
A.5 200 keV 电子的原子(散射)形状因子和其他电压原子(散射) 形状因子的换算方法	(603)
A.6 单晶电子衍射花样的标定: fcc, bcc, dc, hcp	(609)
A.7 极射赤面投影	(619)
A.8 傅里叶变换实例	(623)
A.9 波振幅的 Debye-Waller 因子	(625)
A.10 时变势和非弹性中子散射	(626)
A.11 位错综述	(628)
A.12 TEM 实验室训练	(634)
A.13 基本常数和导出常数	(643)
索引	(647)
后记	(658)

第 1 章 衍射和 X 射线粉末衍射仪



1.1 衍 射

1.1.1 衍射简介

材料由原子组成。原子如何组成晶体结构和微结构的知识是我们理解材料的合成、结构和性质的基础。有许多种测定材料化学成分的方法,其中有依赖内层电子谱的方法,我们将在本书中介绍。本书的重点内容是测定 $10^{-8} \sim 10^{-4}$ cm 范围内的原子分布,即从晶体元胞到材料微结构的原子分布。测定距离如此广泛的结构的方法甚多,但有效的方法都包含衍射。目前,材料中原子空间排列的大量知识来自衍射实验。在每一个衍射实验中,一束入射波导向材料,同时一个按规则运动的探测器记录衍射波的方向和强度。

“相干散射”可以精确保持波的周期性。由不同位置、不同种类原子发射的散射波在各个方向上发生相长干涉或相消干涉。相长干涉的波方向组成的“衍射图样”和材料的晶体结构间存在深刻的几何关系。衍射图样反映的是材料中真实空

间的周期性谱^①。重复周期长的原子周期性使衍射角度小,重复周期短(如小的晶面间距)的引起的衍射角度大。不难理解衍射实验有利于测定材料的晶体结构。然而,衍射图样中包含多得多的材料信息。有长距离精确周期性的晶体有尖锐、清晰的衍射峰,有缺陷(如杂质、位错、堆垛层错、内应力或微沉淀)晶体的原子排列的周期性较差,但它们仍有清晰的衍射峰。它们的衍射峰变得宽化、弱化并有畸变。因此,“衍射线形分析”是研究晶体缺陷的一种重要方法。衍射实验还被用来研究非晶态材料的结构,虽然它们的衍射图样中缺乏尖锐的衍射峰。

衍射实验中的入射波的波长必须能和原子间的距离相比。对这些实验有效的有三种波。首先是劳厄(Laue)和布拉格(Bragg)父子提出的 X 射线衍射(XRD)。入射 X 射线的加速电场驱动原子的电子,它们的加速产生出射波。在电子衍射中根据 Davisson 和 Germer 的观点,入射电子的电荷作用于原子的正电荷芯而产生出射电子波函数。在中子衍射中,Shull 首先提出入射的中子波函数作用于原子核或未配对的电子自旋。这三种衍射过程包含非常不同的物理机制,所以它们常常可以互相补充,提供材料中值得称道的原子分布知识。1914 年、1915 年、1937 年和 1994 年的诺贝尔物理学奖证明了它们的重要性。只要有可能,我们将强调这三种衍射方法的相似性,首先是它们的布拉格定律的相似性。

1.1.2 布拉格定律

图 1.1 可用来推导布拉格定律。两束平行的入射波入射角是 θ ,可以证明:两个小直角三角形 ABC 和 ACD 的小角是相等的,都等于 θ 。(提示:利用补角 $\phi = \pi/2 - \theta$ 。)

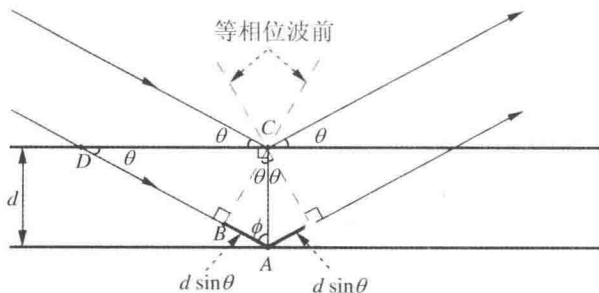


图 1.1 从相距为 d 的两晶面散射出来的波的干涉几何图形,虚线(等相位波前)平行于入射波前和散射波前的峰或谷,两束线之间重要的光程差等于两小段粗线段之和

^① 精确且简明地说,衍射图样是散射因子分布的自相关函数的傅里叶变换。这句话在第 10 章得到了细致的解释。定性地说,晶体可以和音乐联系起来,衍射图样可以和音乐的频谱联系起来。从这样的类比可以得到如下的启发:只给出不同音乐频率的振幅是不可能重建音乐的,因为这里丢失了时序或“相位”信息。类似的结论是:孤立的衍射图样不足以重建材料中原子排列的所有细节。

晶面间距 d 引起从顶层和底层散射的两束光的程差。由图 1.1 得出,从顶层和底层散射的两束光的光程差是 $2d\sin\theta$ 。当光程差等于光的波长 λ 时,得到的是波的相长干涉(强衍射)。此时

$$2d\sin\theta = \lambda \quad (1.1)$$

上述公式的右边可以加上整数 n ,因为加上后仍表示相长干涉。我们习惯上取 $n=1$ 。当相邻晶面引起的光程差为 $n\lambda$ 时,我们可以改变 d (即使新的 d 不符合实际的面间距)。例如,当衍射平面为立方晶体的(100)面,而且

$$2d_{100}\sin\theta = 2\lambda \quad (1.2)$$

时,我们可以说,从相距为 $d_{200} = d_{100}/2$ 的面得到(200)衍射。

从材料得出的衍射图通常含有许多分离的峰,每一个峰对应一个不同的面间距 d 。对于晶格常数为 a_0 的立方晶体,其晶面间距 d_{hkl} ((hkl) 表示米勒(Miller)指数)可以表示为

$$d_{hkl} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (1.3)$$

(此式可以用米勒指数的定义和三维的毕达哥拉斯定理证明)。从布拉格定律式(1.1)得出, (hkl) 衍射峰出现在

$$2\theta_{hkl} = 2\arcsin \frac{\lambda \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2a_0} \quad (1.4)$$

通常样品由许多取向混乱的晶粒组成,因此“粉末图样”中的所有布拉格衍射都可以观察到。按常规方法,用 (hkl) 组合对图 1.2 中“粉末图样”的各个衍射峰进行标定或指标化^①。图 1.2 是指标化的衍射图样的一例。不同衍射峰的强度变化显著,并且对某些 (hkl) 的组合,强度等于零。例如在多晶硅试样中,峰的 h, k, l 必须同时是奇数或偶数,而且 h, k, l (同时是偶数)的和必须被 4 除尽。这一“金刚石立方结构因子规则”将在 6.3.2 小节进一步讨论。

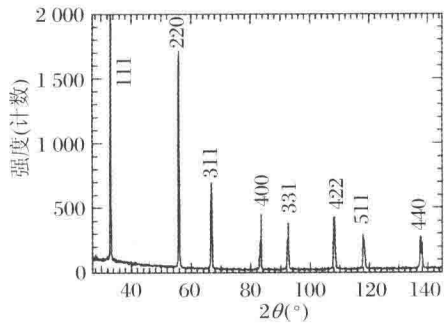


图 1.2 已指标化的多晶硅的粉末衍射图样(用 $\text{Co K}\alpha$ 测得)

X 射线粉末衍射方法的一个重要应用是鉴定样品中的未知晶体。其做法是:把实验测定的衍射峰的位置和强度与标准样品的已知峰或已计算得到的峰一一进行对比。对于图 1.2 中那样简单的衍射图样,通常可以在附录 A.1 中的图表的帮助下猜想出晶体结构。这种试探性指标化需要复核。此时从衍射峰得到 θ 角,再

① 单晶体衍射图样的指标化见第 7 章。