



射线

衍射技术 及设备

X SHEXIAN YANSHE JISHU JI SHEBEI

鞍钢钢铁研究所
丘利胡玉和 编著

冶金工业出版社

X 射线衍射技术及设备

鞍钢技术中心钢铁研究所 丘 利 胡玉和 编著

北 京
冶金工业出版社
1998

内 容 提 要

本书介绍了晶体学和 X 射线衍射基本原理,现代衍射仪设备及实验技术,国内外厂家新近生产的衍射仪产品,以及常用 X 射线衍射方法等。

编写时力求介绍国内外新的技术、方法、设备及其发展,也着眼于 X 射线衍射技术的实际应用与推广、普及。

本书除适合于 X 射线衍射技术应用工作者使用外,还适合于金属物理、金属学、材料、冶金、机械、地质、矿物、陶瓷、建材、化工、汽车、纺织、铁路、硅酸盐、环保、药物、耐火材料、高分子材料、考古、电子陶瓷等专业有关工程、科技人员和大专院校有关专业师生参考。

图书在版编目(CIP)数据

X 射线衍射技术与设备/丘利,胡玉和编. —北京:冶金工业出版社,1998,2

ISBN 7—5024—2003—7

I. X… II. ①丘… ②胡… III. X 射线衍射仪 IV. TH83

中国版本图书馆 CIP 数据核字(96)第 24508 号

出版人 卿启云(北京沙滩嵩祝院北巷 39 号,邮编 100009)

北京市汇宇达公司激光照排

北京梨园彩印厂印刷;冶金工业出版社发行;各地新华书店经销

1998 年 2 月第 1 版,1998 年 2 月第 1 次印刷

787mm×1092mm 1/16;20.5 印张;494 千字;312 页;1-600 册

38.00 元

序 言

X 射线衍射技术是研究材料的晶体结构状态、性能和工艺关系的不可或缺的强有力工具,在冶金、机械、地质、化工、建材、汽车、铁路、考古、矿物、纺织、轻工、金属材料、陶瓷、耐火材料等国民经济和科研的大多数部门中,得到广泛应用,取得显著效果。

在高科技时代,国民经济的发展主要依靠科技进步,而科学技术要面向国民经济,要使科学技术更好地发挥第一生产力的作用。

本书作者多年从事 X 射线衍射技术的应用工作。《X 射线衍射技术及设备》一书,是作者根据 X 射线衍射原理,结合多年实践经验和该技术在国内外的最新发展编写而成的。本书既介绍 X 射线衍射技术和设备,又通过一些实例表明它在科研和生产实践中的应用,以便在 X 射线衍射技术和广阔的生产、科研应用之间作些沟通架桥工作,希望能起到向更多的人推广和普及应用此项技术的作用。

随着科技进步,高新技术和新型材料不断出现,X 射线衍射技术必将得到越来越广泛的应用。这本书的出版,符合现代化建设和发展高新技术的要求,相信它对众多行业和部门的广大工程技术人员、有关科技人员及大专院校有关专业的师生有所裨益,并在推广、普及和应用 X 射线衍射技术方面起一定推动作用。

傅作宝

1997 年 10 月

前 言

W. K. 伦琴(Röntgen)发现 X 射线一百年来, X 射线及其衍射技术得到广泛应用并造福人类, 显示出科学技术是第一生产力的伟大力量。

近十多年来, 随着电子计算机的快速发展, X 射线衍射设备日趋自动化, 功能更强, 软件的使用简便快捷, 可完成更复杂和更大的工作量, 并为更多的非本专业人员使用这种设备和技术创造了条件。

在高科技时代, 在科教兴国和国际竞争的今天, 科学技术应更好地发挥第一生产力的作用。应该让 X 射线衍射技术应用到尽可能多的科研、生产和工艺中去, 以便更迅速地创造出更高级的技术、工艺和更高质量的新产品。

要做到这一点, 除了 X 射线衍射技术工作者不断进取、创新, 开拓视野及工作层面外, 尚需努力做好推广普及工作, 让不同专业和领域的尽可能多的人, 了解和应用 X 射线衍射技术于他们的工作中。本着这个宗旨, 我们做了些初步的尝试, 编写了《X 射线衍射技术及设备》一书。希冀能起到抛砖引玉的作用, 将来出现更多的推广应用、普及的著作。

本书第 1、5、6、8、9 章由胡玉和编写, 第 2、3、4、7、10、11、12 章由丘利编写。

承蒙梁志德、王煜明、李家宝、黄胜涛、林树智、林少凡、李树棠、裴光文、马礼敦、王英华、陆金生、何崇智、金学彩、佟玉濛等许多专家、教授提供并允许引用他们宝贵的著作和论文, 并承梁志德、王煜明、李家宝等教授审校有关章节。在此特向他们致以深切谢意。也感谢张维汉高级工程师协助部分绘图工作。

由于时间仓促和作者水平及条件所限, 书中不足或错误之处, 敬希读者批评指正。

编著者

1997 年 10 月

目 录

1 X 射线衍射基本原理	1
1.1 衍射计算中常用的晶体学表示方法	1
1.1.1 晶体、晶轴及晶面指数	1
1.1.2 倒易矢量及倒易点阵	2
1.1.3 反射球	4
1.1.4 晶系	4
1.1.5 晶体的对称性	5
1.1.6 点群	7
1.1.7 布拉维点阵	10
1.1.8 空间群	11
1.1.9 晶面间距的计算	13
1.1.10 晶带	14
1.2 原子对 X 射线的散射	14
1.2.1 单个自由电子对 X 射线的散射	14
1.2.2 n 个电子的散射及复数算法	15
1.2.3 一个原子的 X 射线的散射	16
1.3 小晶体的散射	18
1.3.1 小晶体的散射强度	18
1.3.2 三个劳厄方程式	19
1.3.3 布拉格衍射的结构因子	20
1.3.4 热振动对小晶体散射强度的影响	22
1.4 衍射线的积分强度	22
1.4.1 小单晶体衍射的积分强度	22
1.4.2 面积稍大的不完整晶体的积分强度	24
1.4.3 粉末样品衍射的积分强度	25
参考文献	26
2 现代 X 射线衍射仪系统及实验技术	28
2.1 概述	28
2.2 X 射线源——种类及性能要求	29
2.2.1 X 射线源的稳定性	30
2.2.2 X 射线源的强度	30
2.2.3 光谱纯净度及单色性	32
2.2.4 X 射线源的适用性	35
2.3 测角仪	35

2.3.1	测角仪结构及布拉格-布伦塔诺聚焦原理	35
2.3.2	狭缝系统及几何光学	37
2.3.3	测角仪的调整	40
2.4	探测器与记录系统	42
2.4.1	正比计数器	43
2.4.2	位置灵敏计数器	44
2.4.3	平面位敏计数器	45
2.4.4	闪烁计数器	46
2.4.5	Si(Li)半导体固态探测器	48
2.4.6	前置放大器和主放大器及脉冲成形器	49
2.4.7	单道脉冲分析器	50
2.4.8	多道脉冲分析器	52
2.4.9	定标器	52
2.4.10	速率计	52
2.4.11	探测器扫描方式及参数	53
2.4.12	X射线衍射能量色散测量	54
2.5	衍射仪的自动化	57
2.5.1	高压和管流的控制	57
2.5.2	测角仪自动调整,试样和狭缝的自动变换	58
2.5.3	自动测量、数据收集和处理	58
2.5.4	各种衍射应用程序和数据库	60
2.5.5	故障诊断的现代化	60
2.6	衍射仪考核检定及验收	61
2.6.1	衍射仪综合稳定度	62
2.6.2	高压及管流稳定度	63
2.6.3	测角仪测角准确度、重复精度及仪器分辨率	63
2.6.4	探测器的相对半高宽	64
2.6.5	计算机硬件	64
2.6.6	计算机软件和应用衍射软件	64
2.6.7	各种衍射仪附件	64
2.6.8	其它有关装置和附件	65
2.7	实验测量技术	65
2.7.1	实验参数的选择及其对粉末衍射花样的影响	65
2.7.2	强度、峰位、线形的测量	66
2.8	国内外一些厂家 X 射线衍射仪产品软、硬件简介	68
2.8.1	北京大学仪器厂产品 BDX 系列 X 射线衍射仪产品简介	68
2.8.2	美国布鲁卡尔(BRUKER)公司 D8 ADVANCEX 射线衍射仪简介	69
2.8.3	荷兰飞利浦(Philips)公司 X 射线衍射仪产品简介	70
2.8.4	德国西门子(Siemens)公司 X 射线衍射仪产品简介	71

2.8.5 日本理学公司 X 射线衍射仪产品简介	73
2.9 衍射仪的选购、实验室注意事项及安全防护	74
2.9.1 衍射仪的选购	74
2.9.2 实验室注意事项	75
2.9.3 X 射线安全防护	75
参考文献	77
3 定性相分析	79
3.1 引言	79
3.2 定性相分析的理论基础	79
3.3 粉末衍射文件 PDF	80
3.3.1 粉末衍射文件(PDF)卡片的新老格式	81
3.4 JCPDS 粉末衍射文件数据的磁盘、磁带及光盘	82
3.5 索引和检索手册	82
3.5.1 哈纳瓦特数值索引	83
3.5.2 芬克数值索引	84
3.5.3 字母索引	85
3.5.4 其他索引	86
3.6 定性相分析的一般步骤	86
3.6.1 制样	86
3.6.2 测量 d 和 I 值	86
3.6.3 手工检索未知相的 PDF 卡片	87
3.6.4 定性相分析的计算机自动检索	88
参考文献	95
4 定量相分析	96
4.1 引言	96
4.2 基本原理	96
4.3 外标法	98
4.3.1 各相为同素异构的多晶型物相组成的待测试样	98
4.3.2 待测试样中各相的质量吸收系数不同	99
4.4 内标法	100
4.5 基体冲洗法(K 值法)	100
4.5.1 原理	101
4.5.2 K 值的转换	102
4.5.3 K 值法国家标准	103
4.6 绝热法	103
4.6.1 原理	104
4.6.2 K_i 值的求法	104
4.6.3 绝热法的优缺点	106
4.7 直接比较法	106

4.7.1	原理	106
4.7.2	应用——残余奥氏体和钢材表层氧化铁体积分数的测定	107
4.7.3	R 值的计算	109
4.8	无标法	110
4.8.1	原理	110
4.8.2	无标法的优缺点	113
4.9	国内定量相分析方法研究成果简介	113
4.9.1	联立方程法	113
4.9.2	普适无标法	114
4.9.3	回归求解法	115
4.9.4	最优化计算法	117
	参考文献	119
5	线形分析方法	121
5.1	线形宽化分析的积分宽度法	121
5.2	K_{α_1} 及 K_{α_2} 双重线的分离	123
5.3	线形近似函数的选择	125
5.4	从 B_0 值求物理宽度 β 值	127
5.5	从 β 值进行亚晶细化宽度 m 及点阵畸变宽度 n 的分离	129
5.5.1	亚晶细化与线形宽化效应的关系——谢乐公式	129
5.5.2	点阵畸变与其宽化效应的关系	130
5.5.3	β 与 m 及 n 的关系式	130
5.5.4	亚晶细化与点阵畸变宽化效应的图解分离法	131
5.5.5	伏格脱函数法	134
5.6	积分宽度法中的测算误差问题	136
5.6.1	谱线宽度测量对于物理宽度 β 的影响	136
5.6.2	M_1 及 N_1 分离中的误差	137
5.6.3	实验条件的讨论	138
5.7	线形宽化分析的傅氏级数法	138
5.7.1	实测线形的傅氏级数展开法	138
5.7.2	粉末样品的衍射本领表达式	140
5.7.3	形变金属衍射谱线宽化傅氏级数分析法	140
5.8	傅氏级数法中亚晶细化与点阵畸变宽化的分离	144
5.8.1	傅氏系数的分离	144
5.8.2	A_n 系数的诠释	146
5.8.3	“弯钩”效应问题	147
5.9	方差分析法	148
5.9.1	谱线方差的测定	148
5.9.2	亚晶细化引起的方差	149
5.9.3	点阵畸变引起的方差	150

5.9.4 方差分析方法举例	151
附录 伏格脱函数法 $2w/\beta, w$ 及 β_g/β 数值表	153
参考文献	153
6 层错率及位错分布的测定	155
6.1 面心立方(FCC)金属中形变层错及孪生层错率的测定	155
6.1.1 FCC 金属中的形变层错及孪生层错	155
6.1.2 晶体衍射强度的计算	156
6.1.3 衍射强度与层错率的关系	157
6.1.4 衍射本领观察值与层错率的关系	158
6.1.5 形变层错率与峰宽位移的关系	160
6.1.6 层错引起的线形宽化问题	163
6.1.7 孪生层错与线形不对称的关系	165
6.2 六方密堆(HCP)金属中形变层错及孪生层错的测定	166
6.3 体心立方(BCC)金属中形变层错及孪生层错的测定	168
6.4 位错分布的测定	172
6.5 维尔根斯理论	173
6.5.1 定义	173
6.5.2 线形强度 $I(S)$ 及其傅氏变换 $A(n)$	174
6.5.3 n 组有限混乱分布螺型位错的 $A(n)$ 求解	175
6.5.4 $A(n)$ 表达式的推广	175
6.5.5 $A(n)$ 及 $I(S)$ 的归一化处理	176
6.6 王煜明分析方法	178
6.6.1 多晶样品线形分析	178
6.6.2 标准曲线绘制	178
6.6.3 从 ρ^* 及 M^* 特征值求 $\bar{\rho}$ 及 $\bar{M}$	179
6.6.4 HCP 及 BCC 金属的分析方法及标准曲线	182
6.6.5 位错偶规则分布模型的分析方法	183
6.6.6 计算机数据处理步骤	183
6.6.7 线形分析数据与材料力学性能的联系	184
6.7 线形精确化方法	185
参考文献	186
7 织构的测定	188
7.1 织构定义	188
7.2 织构类型	188
7.3 织构的表示方法	188
7.3.1 晶体学指数表示法	189
7.3.2 直接极图表示法	189
7.3.3 反极图表示法	193
7.3.4 三维取向分布函数(Orientation distribution fuction)表示法	193

7.4	直接极图测定方法及织构判定	194
7.4.1	(Schulz)反射法	194
7.4.2	透射法	198
7.4.3	完整极图的绘制	200
7.4.4	织构的判定	202
7.4.5	取向比例指数的确定	203
7.5	反极图及其测定	204
7.5.1	反极图定义及反极图表示法	204
7.5.2	反极图的测绘	206
	参考文献	208
8	晶粒取向分布函数分析方法	210
8.1	晶粒取向分布函数	210
8.1.1	晶粒取向表示法	210
8.1.2	晶粒取向分布函数	211
8.1.3	取向分布函数与极图的关系	212
8.2	从完整极图计算 ODF	212
8.2.1	两个级数系数之间的关系	213
8.2.2	用实函数表示的 ODF 级数	214
8.3	对称性在计算中的简化作用	215
8.3.1	弗里德耳定律的影响	215
8.3.2	晶体结构对称性对 W_{lmn} 的影响	216
8.3.3	晶粒取向统计分布的影响	217
8.3.4	旋转—反演对称对 W_{lmn} 的制约	218
8.4	关于 ODF 测算中的误差及提高其准确度的方法	218
8.4.1	测算中的误差问题	218
8.4.2	提高 ODF 准确度的方法	219
8.5	ODF 的测算步骤、表示方法及其与 $(hkl)[uvw]$ 的关系	219
8.5.1	ODF 测算步骤要点	219
8.5.2	ODF 的表示方法	219
8.5.3	取向空间坐标与 $(hkl)[uvw]$ 的对应关系	221
8.6	从不完整极图计算 ODF	223
8.6.1	邦厄方法的原理	223
8.6.2	计算 ODF 的二步法	224
8.7	关于完整 ODF 的探讨	225
8.7.1	单晶衍射法	225
8.7.2	零区法	226
8.7.3	反常散射法	226
8.7.4	织构组分拟合法	226
8.8	从 ODF 计算极图和反极图	226

8.8.1	计算极图	226
8.8.2	计算反极图	227
8.8.3	最大熵方法计算反极图	227
8.9	材料宏观各向异性的计算	229
	附录 立方系各 W_{Lmn} 之间的关系	231
	参考文献	232
9	宏观应力的测定	233
9.1	引言	233
9.2	弹性应力和应变的关系	233
9.3	X 射线测定表面应力的原理	235
9.3.1	X 射线应力测定计算公式的推导	235
9.3.2	试样表面应力状态的确定	236
9.3.3	X 射线波长及衍射晶面的选择	237
9.4	ψ 角的选择及应力的计算	238
9.4.1	双入射法 ($0^\circ \sim 45^\circ$ 法)	238
9.4.2	单入射法	240
9.4.3	$\sin^2\psi$ 法	240
9.4.4	用最小二乘法计算 2θ - $\sin^2\psi$ 关系的最佳斜率	241
9.5	应用衍射仪测定应力的方法	242
9.5.1	半聚焦法	242
9.5.2	平行光束法	243
9.6	侧倾法应力测量	244
9.6.1	有倾角侧倾法	244
9.6.2	无倾角侧倾法	245
9.6.3	侧倾法实验装置	248
9.6.4	侧倾法应力测量的特点	249
9.7	X 射线宏观应力常数	249
9.7.1	关于 X 射线应力常数的若干讨论	249
9.7.2	X 射线应力常数的标定方法	250
9.8	X 射线应力测量举例及若干实际问题	252
9.8.1	X 射线宏观应力测量举例	252
9.8.2	复杂形状部件的应力测量	253
9.8.3	X 射线应力测量实际工作中的若干误差问题	256
9.8.4	2θ - $\sin^2\psi$ 的非线性关系问题	256
	附录 1 常用金属材料 X 射线宏观应力测定中的有关常数	259
	附录 2 常用金属材料应力测定中的 d_i 数值表	259
	参考文献	260
10	晶体点阵常数的精确测定	261
10.1	基本原理	261

10.1.1	精确测定点阵常数的基本原理	261
10.1.2	误差简介	264
10.2	德拜-谢乐照相法的系统误差	265
10.2.1	相机半径误差	265
10.2.2	底片伸缩误差	265
10.2.3	试样偏心误差	265
10.2.4	试样吸收误差	266
10.2.5	光束水平发散误差与吸收误差	266
10.2.6	光束垂直发散误差	267
10.2.7	系统误差的外推函数	267
10.2.8	图解外推法消除系统误差	268
10.2.9	用精密实验技术消除误差	270
10.2.10	用柯亨法(最小二乘法)消除误差	271
10.3	用衍射仪精确测定点阵常数	274
10.3.1	主要误差种类及分析	274
10.3.2	多晶体点阵常数的实际测量	278
10.4	实际应用	284
10.4.1	合金固溶体中溶质元素固溶极限的测定——点阵常数法	284
10.4.2	钢中马氏体和奥氏体的碳含量测定	284
10.4.3	宏观残余应力测定	285
	参考文献	285
11	晶体定向	286
11.1	乌里夫网、极点位置及晶面夹角的确定	286
11.1.1	乌里夫网	286
11.1.2	极点位置及其夹角的确定	286
11.2	格伦宁格尔图尺	291
11.3	用背反射劳厄法进行晶体定向	292
11.3.1	劳厄斑点与其极射赤面投影极点间的几何关系	292
11.3.2	背反射劳厄斑点转为极射赤面投影的极点	293
11.3.3	极点的密勒指数标定	293
11.4	用透射劳厄法进行晶体定向	294
11.5	用衍射仪法进行晶体定向	295
11.6	劳厄定向法的一些应用	296
11.6.1	晶粒取向硅钢片高斯织构的测定	296
11.6.2	晶体定向安装及对称性的测定	296
11.6.3	滑移面(或孪生面)指数的测定	297
11.6.4	滑移方向和孪晶对称类型的确定	298
	参考文献	299
12	织构测定技术的应用举例	300

12.1	引言	300
12.2	深冲汽车板织构	300
12.2.1	塑性应变比 r 值和应变硬化指数 n 值	300
12.2.2	织构与 r 值和深冲性能的关系	301
12.3	含钛深冲汽车薄钢板的织构	304
12.4	含铝低碳深冲汽车薄钢板	306
12.5	低碳含磷高强度深冲钢板的织构	308
12.6	易拉罐用深冲薄钢板与铝板织构	310
12.6.1	易拉罐用镀锡深冲薄钢板的织构	311
12.6.2	易拉罐用深冲铝板的织构	311
	参考文献	312

1 X 射线衍射基本原理

1.1 衍射计算中常用的晶体学表示方法

为了便于掌握本书中有关章节衍射计算中遇到的一些符号及表达式,本节中就常用的晶体学表示方法作一介绍。关于几何晶体学的基本内容,我们假定读者已有了解,这里不作系统叙述,如有需要时,可请参阅其他 X 射线衍射学著作。

1.1.1 晶体、晶轴及晶面指数

晶体是由许多质点在三维空间作有规则的重复排列而成的固体物质,这些质点可以是

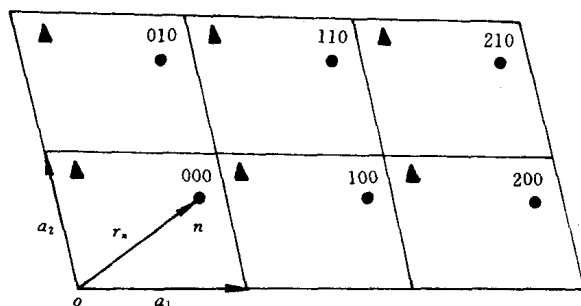


图 1-1 晶体周期性排列的二维图形^[1]

原子、离子或原子群构成。图 1-1 表示一个二维周期排列图形。图中的三角形及圆点代表两种原子、离子或原子群,这些质点在晶体中作有规则的重复。晶体的周期性排列可由三个晶轴 $\vec{a}_1$ 、 $\vec{a}_2$ 和 $\vec{a}_3$ 表示。这些晶轴规定了质点位置重复位移的大小及方向。由 $\vec{a}_1$ 、 $\vec{a}_2$ 和 $\vec{a}_3$ 构成的平行六面体具有最小的体积,称为阵胞或晶胞。阵胞的体积为 $v_a = \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$ 。

假定阵胞中有 n 个不同的原子,编号为 $1, 2, 3, 4 \dots n$,这些原子相对于阵胞中原点的位置为 $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3 \dots \vec{r}_n$ 。对于不同的阵胞用三个整数 m_1, m_2 和 m_3 来标明它在三个轴上的距离,则此阵胞的离晶体中原点的距离为 $m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2 + m_3\vec{a}_3$ 。阵胞中第 n 个原子的位置则为:

$$\vec{R}_n = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2 + m_3\vec{a}_3 + \vec{r}_n \quad (1-1)$$

X 射线光束射到一组 hkl 晶面上时,条件符合布拉格(Bragg)定律则产生衍射现象。

从图 1-2 中可以了解 hkl 所代表的意义。一组 hkl 晶面相当于一组平行的平面,其中有一平面通过原点,与此最接近的平面则与 3 个晶轴相截于 $a_1/h, a_2/k$ 及 a_3/l 三点。整数 hkl 则称为密勒(Miller)指数。

在布拉格定律中对于一组 hkl 晶面来说,需要这些晶面的两个性质:一是晶面的位向;另一是晶面间距。引入矢量 $\vec{H}_{hkl}$ 可以同时表示这两个性质, $\vec{H}_{hkl}$ 的大小为 hkl 面间距的倒数,其方向垂直于 hkl 晶面。与此同时还可引入倒易矢量 $\vec{b}_1, \vec{b}_2$ 和 $\vec{b}_3$,以下将说明这些矢量如何构成了 $\vec{H}_{hkl}$ 。

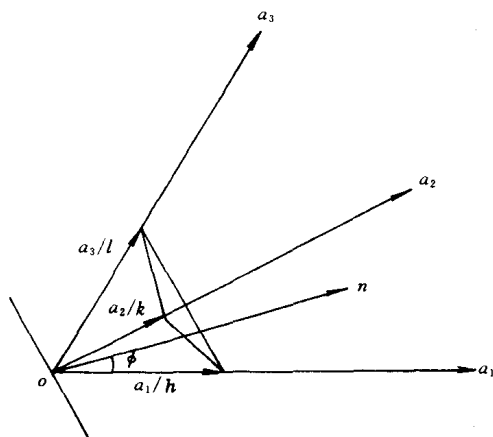


图 1-2 hkl 晶面示意图

1.1.2 倒易矢量及倒易点阵

倒易矢量 $\vec{b}_1$ 、 $\vec{b}_2$ 和 $\vec{b}_3$ 与晶轴 $\vec{a}_1$ 、 $\vec{a}_2$ 和 $\vec{a}_3$ 的关系分别由下列三式来表示,这三个式子也即给出了倒易矢量的定义:

$$\vec{b}_1 = \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} \quad \vec{b}_2 = \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} \quad \vec{b}_3 = \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} \quad (1-2)$$

每一倒易矢量系与两个和它下标不同的晶轴构成的平面相垂直。倒易矢量的下标与等式右面分子内晶轴下标循环地进行变换,按此即很易于记忆。倒易矢量与晶轴矢量(初基矢量)的标积具有相当的重要性。如两种矢量的下标相同,即得

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 = \vec{a}_1 \cdot \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} = 1$$

如两种矢量的下标不同,

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_2 = \vec{a}_1 \cdot \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3} = 0$$

$\vec{a}_3 \times \vec{a}_1$ 为垂直于 $\vec{a}_1$ 的矢量,所以与 $\vec{a}_1$ 的标积等于零。以上两式可以合并为

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = \begin{cases} 1, i = j \\ 0, i \neq j \end{cases} \quad (1-3)$$

式 1-3 所表达的为初基矢量与倒易矢量的正常及正交条件,在衍射问题的计算中常要用到。

应用倒易矢量及密勒指数即可给出 $\vec{H}_{hkl}$ 的定义如下:

$$\vec{H}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \quad (1-4)$$

从图 1-2 中可以看出 $(\vec{a}_1/h - \vec{a}_2/k)$ 及 $(\vec{a}_2/k - \vec{a}_3/l)$ 系与 hkl 晶面相平行的矢量。从式 1-3 有

$$\begin{aligned} \left(\frac{\vec{a}_1}{h} - \frac{\vec{a}_2}{k} \right) \cdot \vec{H}_{hkl} &= \left(\frac{\vec{a}_1}{h} - \frac{\vec{a}_2}{k} \right) \cdot (h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3) = 1 - 1 = 0 \\ \left(\frac{\vec{a}_2}{k} - \frac{\vec{a}_3}{l} \right) \cdot \vec{H}_{hkl} &= \left(\frac{\vec{a}_2}{k} - \frac{\vec{a}_3}{l} \right) \cdot (h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3) = 1 - 1 = 0 \end{aligned}$$

由此表明 $\vec{H}_{hkl}$ 与平行于 hkl 晶面的两个矢量相垂直, 所以也和 hkl 晶面是垂直的。令 d_{hkl} 代表晶面之间的垂直距离, 如 $\vec{n}$ 为垂直于晶面的单位矢量, 从图 1-2 有

$$d_{hkl} = \frac{|\vec{a}_1|}{h} \cos \varphi = \frac{\vec{a}_1}{h} \cdot \vec{n}$$

因 $\vec{H}_{hkl}$ 为垂直于 hkl 晶面的矢量, 所以可用 $\vec{H}_{hkl} / |\vec{H}_{hkl}|$ 来代表 $\vec{n}$, 因此面间距

$$d_{hkl} = \frac{\vec{a}_1}{h} \cdot \frac{(h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3)}{|\vec{H}_{hkl}|} = \frac{1}{|\vec{H}_{hkl}|}$$

此即证明了式 1-4 中的 $\vec{H}_{hkl}$ 矢量垂直于 hkl 晶面, 其大小则等于面间距的倒数。

如对所有的 hkl 值绘出 $\vec{H}_{hkl}$ 矢量, 各矢量的末端将形成一个新的点阵, $\vec{b}_1$ 、 $\vec{b}_2$ 和 $\vec{b}_3$ 各矢量则在此点阵中有规则地重复着, 此点阵称为倒易点阵, 它在晶体衍射问题的处理中非常有用。应用式 1-2 即可从晶轴 $\vec{a}_1$ 、 $\vec{a}_2$ 和 $\vec{a}_3$ 求得倒易矢量 $\vec{b}_1$ 、 $\vec{b}_2$ 和 $\vec{b}_3$ 。将 $\vec{b}_1$ 、 $\vec{b}_2$ 和 $\vec{b}_3$ 加以重复, 即可作出倒易点阵。从原点至任一 hkl 点的矢量即为 $\vec{H}_{hkl}$ 矢量, 用此矢量来表达布拉格定律则颇有便利之处。令 $\vec{s}_0$ 及 $\vec{s}$ 代表入射及衍射光束的单位矢量, 如图 1-3 所示, 绘出 $\vec{s}_0/\lambda$ 及 $\vec{s}/\lambda$ 与衍射晶面 hkl 的夹角均为 θ , 则布拉格定律可写成如下的表达式:

$$\frac{\vec{s} - \vec{s}_0}{\lambda} = \vec{H}_{hkl} \quad (1-5)$$

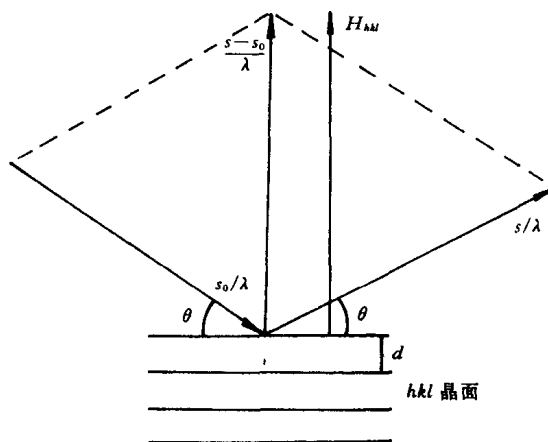


图 1-3 用矢量表示布拉格定律的示意图^[1]

此式是否相当于布拉格定律可考查如下。由于式 1-5 为矢量方程式, 含有两点意义, 方程两边矢量属于同一方向, 即相互平行; 同时两边的数值相等。第一点表明入射光束与衍射光束和衍射面之间的夹角相等, 均为 θ 角; 第二点则要求:

$$\left| \frac{\vec{s} - \vec{s}_0}{\lambda} \right| = \frac{2\sin\theta}{\lambda} = |\vec{H}_{hkl}| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

此式即为布拉格定律常用形式 $\lambda = 2d\sin\theta$ 。

倒易点阵提供了满足布拉格定律的一种图解方法, 图 1-4 表明了这一情况。对于一组 hkl 晶面在倒易点阵中作出 $\vec{H}_{hkl}$ 矢量至 hkl 点, 对于一定的波长 λ , 可以按照式 1-5 的规定, 求出入射及衍射光束一些可能的方向。 $\vec{s}_0/\lambda$ 及 $\vec{s}/\lambda$ 两矢量所在平面的位置可以围绕着 $\vec{H}_{hkl}$ 矢