

The background of the cover is a repeating green geometric pattern. It consists of a grid of squares, each containing a smaller square with a diagonal cross. The lines are black on a green background, creating a complex, crystalline-like texture.

# 材料结构 电子显微分析

刘文西 黄孝瑛 陈玉如 著

天津大学出版社

# 材料结构电子显微分析

刘文西 黄孝瑛 陈玉如 著

天津大学出版社



## 内 容 提 要

本书主要论述了透射电镜在材料科学方面的应用，同时扼要地介绍了晶体学和表面结构分析原理和方法。书中原理阐述特别注意物理图象的说明。计算方法简捷并附以例题，易于理解，比较实用。

本书为材料专业的研究生教材，也可作为固体物理、晶体化学、地学矿物、金属物理和材料工程等方面科技人员和高校师生的参考书。

### 材料结构电子显微分析

刘文西 黄孝瑛 陈玉如 著

\*

天津大学出版社出版

(天津大学内)

河北省邮电印刷厂印刷

新华书店天津发行所发行

\*

开本：850×1168 毫米1/32 印张：15 7/8。字数：437千字 插页：15

1989年12月第一版 1989年12月第一次印刷

印数：1—2800

ISBN 7-5618-0179-3

0·22

定价：4.40元

数字图书馆  
PDG

## 序 言

目前透射电子显微镜技术在材料研究的各个领域得到广泛的应用，它已成为揭露材料微观结构与其性能相互联系的重要研究手段。翻开任何一本有关近代材料学的书刊，几乎总会看到透射电镜照片或有关显微结构的内容。电子显微分析不再只是电镜工作者的事，它已成为广大材料工作者迫切希望了解的知识 and 应当具备的技能。

当前材料工作者很需要有关透射电镜方面比较实用的书，以帮助解决诸如怎么计算电子衍射谱，怎么分析电镜照片等这类经常遇到的问题。针对这些问题我们曾先后给材料专业的研究生讲过课。1986年夏，中国电镜学会在天津大学举办了电子衍射谱和衍衬图像分析研讨会。这些内容曾编成讲义，在会上作了介绍，引起了与会者的浓厚兴趣，并希望正式出版，方便读者。为此我们在原讲义基础上，补充了晶体学和表面结构分析等内容，写成了这本书。这里需要指出的是，我们根据自己的体会和理解，对若干传统内容作了重新处理。应当说，这只是一次尝试，未必妥当，疏漏之处在所难免，诚恳地欢迎批评指正，以便再版时予以改正。

在成书和出版过程中得到郭可信、柯俊、李金镗、陈复民、王仁卉诸位教授的鼓励与指正，在此表示衷心的感谢。

作者

一九八八年十月

# 目 录

<b>第一章 晶体的布喇菲胞和点群</b> .....	( 1 )
§ 1-1 引言 .....	( 1 )
§ 1-2 点阵 .....	( 1 )
§ 1-3 布喇菲胞 .....	( 6 )
§ 1-4 晶面和晶向 .....	( 10 )
§ 1-5 晶体外形的对称性 .....	( 14 )
§ 1-6 点群 .....	( 21 )
§ 1-7 对称操作的数学表示 .....	( 30 )
§ 1-8 群的定义及性质 .....	( 33 )
参考文献.....	( 35 )
<b>第二章 空间群</b> .....	( 37 )
§ 2-1 引言 .....	( 37 )
§ 2-2 晶体内部结构的对称素 .....	( 38 )
§ 2-3 空间群 .....	( 44 )
§ 2-4 对称素的组合与变换 .....	( 50 )
§ 2-5 典型结构的空間群 .....	( 55 )
§ 2-6 空间群在结构测定中的应用 .....	( 60 )
参考文献.....	( 63 )
<b>第三章 透射电子显微镜的构造及原理</b> .....	( 65 )
§ 3-1 引言 .....	( 65 )
§ 3-2 电子的波长与加速电压 .....	( 67 )
§ 3-3 电磁透镜及像差 .....	( 68 )
§ 3-4 透射电镜的构造 .....	( 72 )
§ 3-5 透射电镜的工作方式与合轴 .....	( 77 )

§ 3-6	电子束与试样的交互作用 .....	( 83 )
§ 3-7	弹性散射波的合成 .....	( 85 )
	参考文献 .....	( 88 )
<b>第四章</b>	<b>试样制备及质厚衬度</b> .....	( 89 )
§ 4-1	引言 .....	( 89 )
§ 4-2	非晶试样的质厚衬度像 .....	( 89 )
§ 4-3	复型试样 .....	( 92 )
§ 4-4	粉末试样 .....	( 99 )
§ 4-5	切片试样 .....	( 102 )
§ 4-6	薄膜试样 .....	( 105 )
	参考文献 .....	( 109 )
<b>第五章</b>	<b>倒易点阵</b> .....	( 110 )
§ 5-1	引言 .....	( 110 )
§ 5-2	倒易点阵的基矢 .....	( 112 )
§ 5-3	倒易关系与线面互应 .....	( 116 )
§ 5-4	正倒点阵的指数转换 .....	( 119 )
§ 5-5	晶面间距、晶面夹角、晶向夹角 .....	( 121 )
§ 5-6	倒易点阵的类型 .....	( 125 )
§ 5-7	倒易阵点的形状 .....	( 130 )
	参考文献 .....	( 134 )
<b>第六章</b>	<b>标定电子衍射谱的程序</b> .....	( 136 )
§ 6-1	引言 .....	( 136 )
§ 6-2	电子衍射花样的意义 .....	( 137 )
§ 6-3	像机常数 .....	( 140 )
§ 6-4	立方和密堆六方结构衍射谱的标定 .....	( 142 )
§ 6-5	其它类型晶体结构衍射谱的标定 .....	( 152 )
§ 6-6	六角及菱形点阵的晶体学指数 .....	( 158 )
§ 6-7	同面间距的指数变换 .....	( 161 )
§ 6-8	标定电子衍射谱的微机程序 .....	( 164 )

§ 6-9	多晶电子衍射谱的标定	( 167 )
§ 6-10	测定新结构的点阵单胞	( 171 )
§ 6-11	点阵的对称约化	( 176 )
	参考文献	( 181 )
<b>第七章</b>	<b>高阶劳厄斑的标定</b>	( 183 )
§ 7-1	引言	( 183 )
§ 7-2	高阶劳厄斑衍射谱的花样及广义晶带定律	( 184 )
§ 7-3	设定指数验算平行截矩	( 187 )
§ 7-4	按平行截矩计算指数	( 194 )
§ 7-5	设定指数验算垂直截距	( 196 )
§ 7-6	确定差矢变换指数	( 199 )
	参考文献	( 203 )
<b>第八章</b>	<b>孪晶电子衍射谱标定</b>	( 204 )
§ 8-1	引言	( 204 )
§ 8-2	180°旋转孪晶的简易方程	( 207 )
§ 8-3	立方孪晶的等效类	( 211 )
§ 8-4	立方孪晶的复合倒易点阵	( 215 )
§ 8-5	孪晶电子衍射谱的标定步骤	( 217 )
§ 8-6	二次衍射的附加斑点	( 221 )
§ 8-7	解算孪晶衍射谱的电子计算机程序	( 224 )
	参考文献	( 226 )
<b>第九章</b>	<b>位向关系的测定和迹线分析</b>	( 227 )
§ 9-1	引言	( 227 )
§ 9-2	极射赤面投影	( 228 )
§ 9-3	极图的基本操作	( 238 )
§ 9-4	位向关系矩阵表达的两类基本命题	( 242 )
§ 9-5	位向关系测定中的问题及解决方法	( 251 )
§ 9-6	特征平面指数的测定	( 258 )
	参考文献	( 264 )

<b>第十章 菊池衍射谱的标定</b> .....	( 265 )
§ 10-1 引言.....	( 265 )
§ 10-2 菊池衍射几何.....	( 265 )
§ 10-3 菊池衍射谱的特征.....	( 268 )
§ 10-4 菊池衍射谱的标定.....	( 272 )
§ 10-5 晶体取向的精确测定.....	( 278 )
§ 10-6 标定菊池线微机程序的设计思路.....	( 281 )
参考文献.....	( 284 )
<b>第十一章 会聚束衍射分析</b> .....	( 285 )
§ 11-1 引言.....	( 285 )
§ 11-2 会聚束衍射的光路.....	( 285 )
§ 11-3 衍射盘的第一种衬度来源.....	( 290 )
§ 11-4 衍射盘的第二种衬度来源.....	( 294 )
§ 11-5 倒易定理与底孔规则.....	( 299 )
§ 11-6 会聚束花样对称性的来源.....	( 303 )
§ 11-7 31种会聚束衍射群.....	( 306 )
§ 11-8 衍射群的确定.....	( 310 )
§ 11-9 利用会聚束衍射谱确定晶体的点群.....	( 313 )
§ 11-10 用会聚束衍射测定晶体的空间群.....	( 315 )
参考文献.....	( 317 )
<b>第十二章 调制结构</b> .....	( 318 )
§ 12-1 引言.....	( 318 )
§ 12-2 多层结构的分类及表示方法.....	( 320 )
§ 12-3 多层结构的电子衍射谱.....	( 324 )
§ 12-4 多层结构的一维畴模式.....	( 328 )
§ 12-5 代位型长程有序结构.....	( 333 )
§ 12-6 间隙型长程有序结构.....	( 336 )
§ 12-7 非保守位移超点阵.....	( 339 )
参考文献.....	( 340 )

<b>第十三章 衍衬导论</b> .....	( 346 )
§ 13-1 引言.....	( 346 )
§ 13-2 明场像和暗场像操作.....	( 346 )
§ 13-3 消光距离.....	( 348 )
§ 13-4 衍衬运动学的简化假设.....	( 351 )
§ 13-5 等厚条纹与等倾条纹.....	( 355 )
§ 13-6 衍衬的动力学解释.....	( 361 )
参考文献.....	( 367 )
<b>第十四章 位错的观测</b> .....	( 368 )
§ 14-1 引言.....	( 368 )
§ 14-2 位错像的形成.....	( 368 )
§ 14-3 位错线的真实位置.....	( 372 )
§ 14-4 位错衬度的定量表达.....	( 375 )
§ 14-5 位错布氏矢量的确定.....	( 377 )
§ 14-6 位错环分析.....	( 384 )
§ 14-7 弱束像.....	( 387 )
§ 14-8 位错密度的测定.....	( 395 )
§ 14-9 常见位错图像的特征.....	( 398 )
参考文献.....	( 398 )
<b>第十五章 界面与表面</b> .....	( 416 )
§ 15-1 引言.....	( 416 )
§ 15-2 界面结构的描述方式.....	( 417 )
§ 15-3 叠层衬度.....	( 431 )
§ 15-4 层错衬度.....	( 434 )
§ 15-5 层错能的测定.....	( 440 )
§ 15-6 $\pi$ 边界和 $\delta$ 边界条纹.....	( 443 )
§ 15-7 固体表面的晶体结构.....	( 445 )
§ 15-8 测定表面结构的方法.....	( 450 )
§ 15-9 表面结构的符号.....	( 452 )

参考文献	( 455 )
<b>第十六章 第二相衬度和微衍射技术</b>	( 456 )
§ 16-1 引言	( 456 )
§ 16-2 第二相导致的应变场衬度	( 456 )
§ 16-3 沉淀衬度	( 460 )
§ 16-4 交互作用衬度	( 461 )
§ 16-5 $\mu$ -衍射技术	( 467 )
参考文献	( 472 )
<b>第十七章 薄晶体的高分辨像</b>	( 478 )
§ 17-1 引言	( 478 )
§ 17-2 薄晶体的透射函数	( 479 )
§ 17-3 透镜的变换及修正	( 481 )
§ 17-4 物镜散焦和球差对相位的影响	( 485 )
§ 17-5 传递函数和Scherzer欠焦	( 486 )
§ 17-6 影响传递函数曲线的因素	( 488 )
§ 17-7 高分辨像举例	( 493 )
参考文献	( 492 )
<b>附录一 原子散射因子</b>	( 499 )
<b>附录二 立方和密堆六方晶体衍射谱的几何特征</b>	( 503 )
(一)简单立方(pc)	( 503 )
(二)体心立方(bcc)	( 507 )
(三)面心立方(fcc)	( 512 )
(四)密堆六方(hcp)	( 516 )

# 第一章 晶体的布喇菲胞和点群

## § 1-1 引 言

人类对于晶体的认识首先是从外形规则的矿物开始的。古代采矿时发现了像冰一样透明的石英，称作水晶，古希腊称为 κρυσταλλος (冰)，而晶体 crystal 是由演变的拉丁文 crystallum 转化来的。在较长的时间里，人们根据具有一定外形的矿物，如黄铁矿、方解石、重晶石等，把晶体理解为自然形成的规则几何形状的多面体。但是更多的事实证明，规则外形并不是晶体本质的特征。例如，图 1-1(a)、(b)、(c) 是银的三种单晶。由于结晶时扩散和散热两个因素的制约，使它们形成立方晶、角状晶和树枝晶。如图 1-1(d)，由于孪晶和连生使天然晶体的外形更趋于复杂化。近十年，人工晶体有很大的发展，图 1-1(e) 是人工制造的单晶，它的表面并不是很规则的。它的外形轮廓和表面的波度决定于拉制模的形状和具体的制造工艺。图 1-1(f) 是机械连杆，其材料本质也是晶体，它的外形则是根据工业使用的要求人为地设计的。

1784 年 Haüy 提出晶体应该是质点 (原子、离子、分子) 三维周期的阵列。1912 年劳埃 (Laue) 首先用 X 射线衍射证实了这一设想。晶体学是材料电子显微分析的一个重要理论基础。本章将扼要地对布喇菲胞和点群作一介绍。

## § 1-2 点 阵

晶体内的原子、离子、分子在三维空间作规律排列，这个规律本身指的是相同的部分具有直线周期平移的特点。图 1-2 是具有这

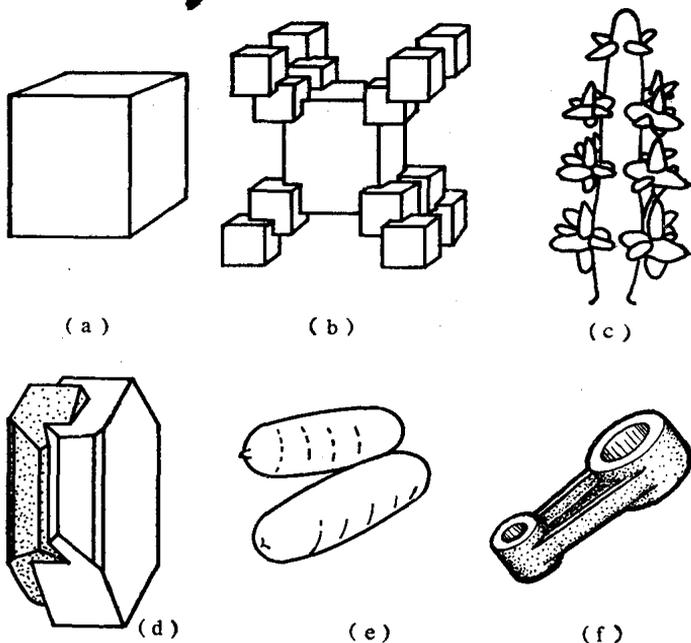


图 1-1 各种形态的晶体

(a)立方晶；(b)角晶；(c)枝晶；(d)孪晶；(e)拉制的单晶；(f)模锻多晶体的连杆

种特点的图案，米老鼠的头以一定的步距排列。为了描述这种平移图案的几何特点，首先要找到平移的对应点或通常称作等同点。等同点的周围环境应当相同，例如取图中米老鼠鼻尖A点，则图中所有鼻尖都是等同点A，它的下部都是鼻子，右方都是面颊。显然，等同点的选择是带有任意性的，如也可以选各个B点或C点等等。但是无论怎么选，各组等同点的位置和分布都体现了相同的平移规律。一般把描写晶体三维周期平移规律的几何点列称为空间点阵，组成它的几何点称为阵点。阵点的根据和来源是等同点。在分析晶体结构时，等同点的选择是非原则性的，但一般应尽量选取对称性较高的位置，这样使用起来方便，所以对阵点的位置附加了若

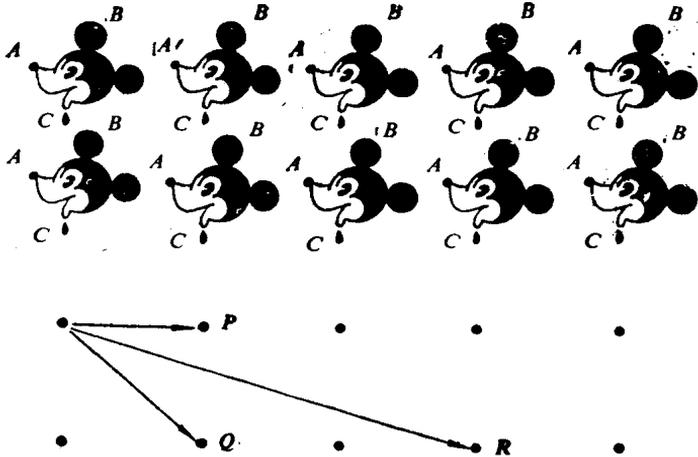
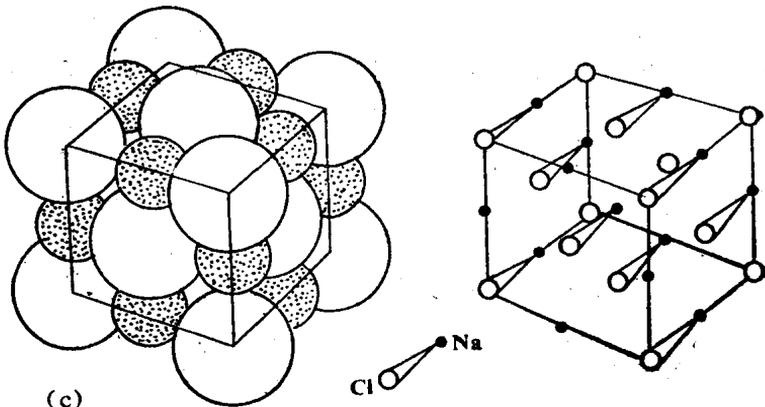
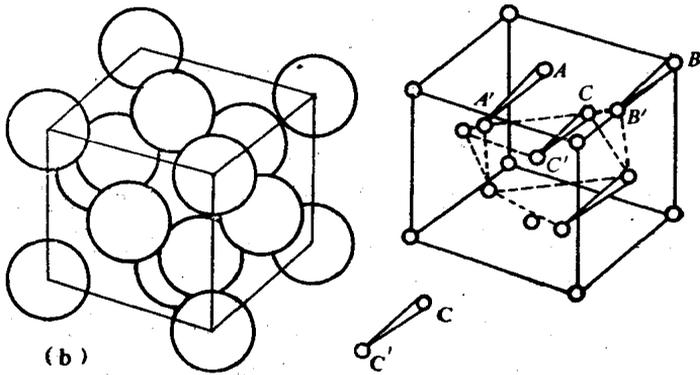
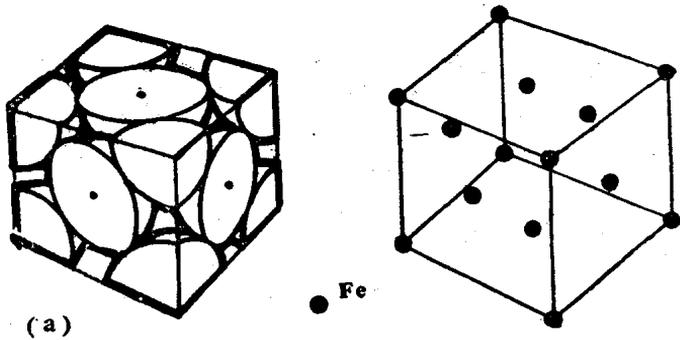


图 1-2 表征平移规律的点阵

千人为的规定。抽象的几何点阵能方便地说明平移的特点，如图 1-2 周期距离为  $P$  的平移可写为  $P$ ，若平移  $m$  个周期则写为  $mP$ ，其它  $Q$ 、 $R$  方向等等依此类推。

为了加强三维点阵的形象性，用空间的三组直线联结阵点得到空间格子。下面以  $\gamma$ -Fe、金刚石、NaCl 和  $\text{CaF}_2$  晶体为例，说明晶体点阵的分析过程。因为晶体结构平移是周期重复的，如图 1-3 各取一个有代表性的部分，并用圆球表示各类原子。图(a)是  $\gamma$ -Fe 晶体，为了观察方便，将表征原子的球剖开。分析这种结构点阵比较简单，若取各球心为等同点，则空间点阵和原子的分布恰巧是一致的，表示如图(a)中间的点阵及格子，称为面心立方(fcc)格子。这是一种简单又特殊的例子。这个例子往往给人们带来三种误解：(1)以为一个阵点就必定代表一个原子；(2)以为点阵就必定与原子堆积的形式相同；(3)以为阵点必定在原子的重心上。实际点阵阵点代表的相同内容称为结构基元。上述特殊情况它代表一个原子，复杂情况时也可以代表两个以上原子或离子，甚至可以代表一



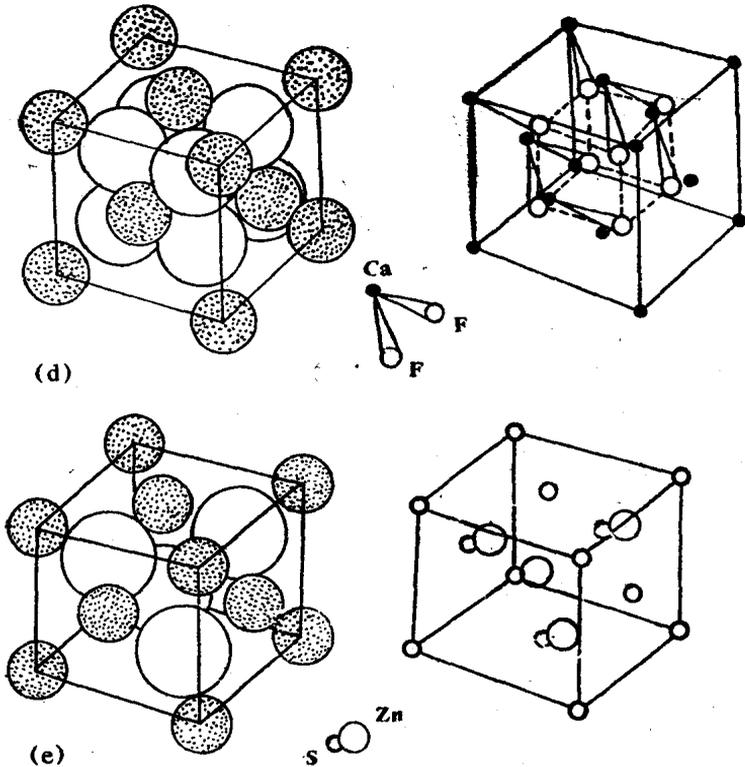


图 1-3 晶体结构的点阵分析  
 (a) $\gamma$ -Fe (b)金刚石 (c)NaCl (d)CaF<sub>2</sub> (e)ZnS(或GaAs)

堆数以千计的原子。

许多晶体的点阵阵点与原子的排列不同，点阵只说明这种排列的平移规律和它的几何特征。图1-3(b)右侧，小圆圈表示金刚石原子的位置。可以看出，除了原来面心立方位置的原子以外，又在 $\frac{1}{4}$ 对角线上对应地增加了碳原子。每个基元相当于是由两个碳原子组成的，如图(b)右下方所示。为清楚起见，用线联结基元原子有AA'、BB'、CC'、DD'。其余剩下的原子还可以与立方体以外原子联成结构基元，这里未画出。可以看出这种结构的点阵类型与 $\gamma$ -

Fe是相同的。同样，可以认为图(c)的NaCl基元是由一个 $\text{Na}^+$ 与一个 $\text{Cl}^-$ 离子组成的。图(d)的 $\text{CaF}_2$ 基元，则是由图示的一个 $\text{Ca}^{++}$ 离子与两个 $\text{F}^-$ 离子组成的。图(e)的 $\text{ZnS}$ 的基元由图示的一个Zn和S原子组成，每个原子有四个价电子。这五种晶体结构完全不同，但它们的点阵类型相同，都是面心立方fcc。

### § 1-3 布喇菲胞

无论是单晶或是多晶，它的外形尺寸是有限的。对于表征结构平移特征的点阵来说，要求依据它能推算任意个平移矢量，因此晶体点阵是无穷大的。在无穷大的点阵中，如果用一个单位的晶格来说明整个点阵的特征，那将是非常方便的。一般将单位晶格所组成的平行六面体称为晶胞。晶胞的选取可能是多种多样的，晶体学中应用最广泛的，尽量照顾对称性选取的晶胞称为布喇菲胞 (Bravais cell)。它实际是一种对称胞。选取此种晶胞的规定如下：

- (1) 选择的平行六面体应能代表整个空间点阵的对称性；
- (2) 平行六面体内相等的棱和角的数目应最多；
- (3) 平行六面体棱间的直角最多；
- (4) 在满足上述条件下，选取最小体积的平行六面体。

数学证明，按上述规定选择的布喇菲胞有14种类型。它代表了空间点阵类型，同时又是以格子方式作成的晶胞，故也称为14种空间点阵或14种布喇菲格子，具体类型如图1-4所示。六面体晶胞的三个棱可以作为坐标的参考轴或称为基矢  $a$ 、 $b$ 、 $c$ ，相对的轴间夹角为  $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 。各个类型胞  $a$ 、 $b$ 、 $c$  之间的长度关系和轴间夹角数值列入表1-1中。根据这些特征又可将14种胞归属为七种晶系。也可以按每一晶胞平均的阵点数目和阵点的位置进行分类，平均阵点数为1的称为初基(P)胞或简单胞；平均阵点数大于或等于2的称为非初基胞。后者除了平行六面体胞的棱角处有阵点以外，还有多余的阵点。如果平行六面体中心有一个阵点，称为体心(I)胞；

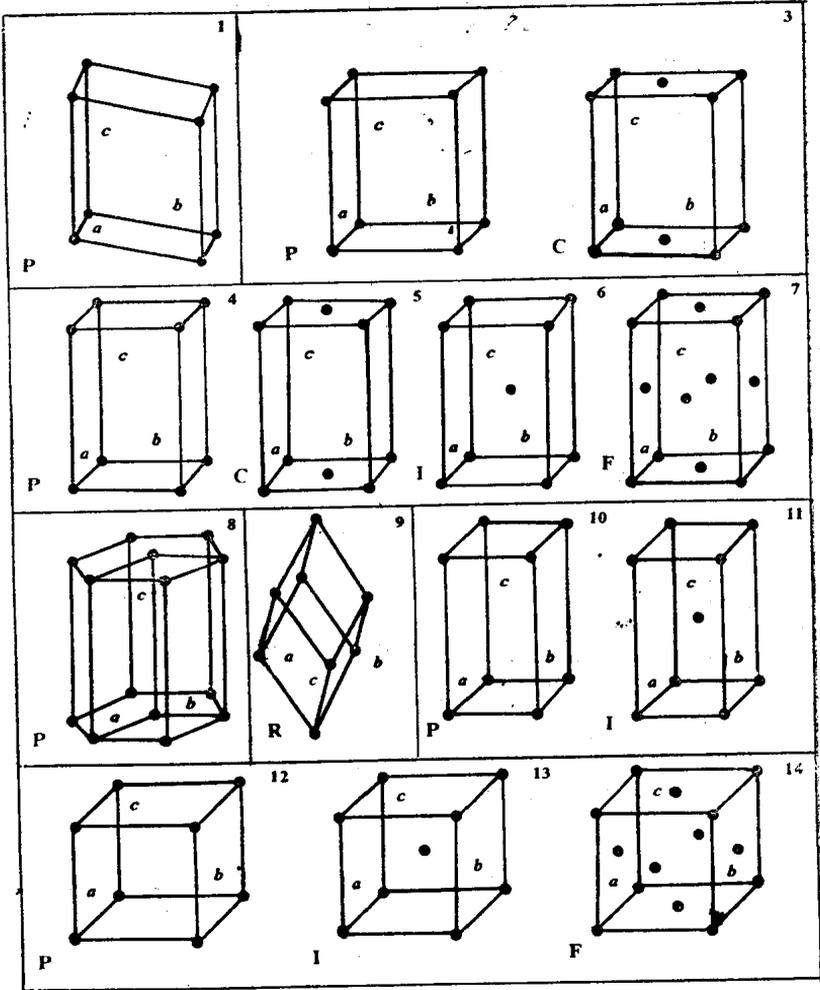


图 1-4 布喇菲胞