

单晶高压电子衍射分析法

特征基本平行四边形分析法

杨国力 艾宝瑞 著

科学出版社

1979

内 容 简 介

本书介绍作者于1966年提出的一种分析单晶高压电子衍射图形的新方法,即特征基本平行四边形法。全书共分四部分,分别讲述这种方法产生的背景、原理、应用和计算。同时,为了推广这种方法,除介绍计算原理外,还给出了具体计算的框图和程序清单。

本书可供从事结构分析的有关科研和生产人员参考,也可供大学有关专业师生作为参考读物。

单晶高压电子衍射分析法

特征基本平行四边形分析法

杨国力 艾宝瑞 著

*

科学出版社出版

·北京朝阳门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1979年3月第一版 开本:787×1092 1/32

1979年3月第一次印刷 印张:4

印数:0001—8,840 字数:87,000

统一书号:13031·939

本社书号:1329·13-3

定价: 0.43 元

目 录

一、选区电子衍射	1
1. 实验情况	1
2. 倒易空间	3
3. 衍射原理	11
4. 高压选区电子衍射的特点	17
二、特征基本平行四边形分析法的原理	19
1. 电镜常数和垂直公式	19
2. 卡片法	22
3. 特征基本平行四边形	24
4. 特征基本平行四边形的转换	30
三、特征基本平行四边形分析法的应用	33
1. 特征基本平行四边形表	33
2. 衍射底板的分类及特征基本平行四边形分析法的适用范围	37
四、特征基本平行四边形表的计算	43
1. 膜面范围的确定	43
2. 独立膜面系的基本平行四边形指标的确定	55
3. 特征基本平行四边形转换表的计算	62
4. 特征基本平行四边形表的计算框图及程序	77
附录 I. 立方晶系特征基本平行四边形表(000—999) ...	92
附录 II. 四方晶系特征基本平行四边形转换表(000—555)	107

一、选区电子衍射

为了叙述的连贯性和以后讲述特征基本平行四边形分析法的方便，本节先对选区电子衍射的概念和电子衍射的原理等作一简略介绍。

1. 实验情况

当我们把某种合金材料的金属薄膜（厚度一般为 1000 \AA 左右，对超高压电子显微镜来说，膜的厚度还可增加）作成试样放入电子显微镜中进行观察时，在荧光屏上一般会出现如图 1 所示的合金组织图象。图中画有不同斜度的斜线的大块

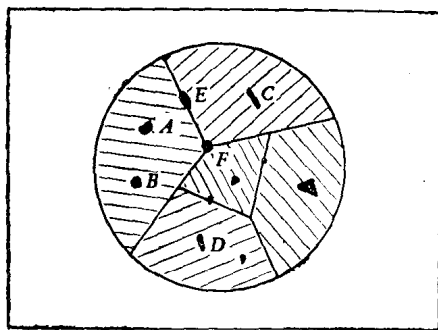


图 1

为合金的基体组织。此外，还有一些较小的形状不一的小块，称之为第二相。由图可以看到，它们有的分布在基体的晶内（如 A, B, C, D ），有的分布在基体的晶界上（如 E, F ）。但这

仅是问题的一个方面。因为，这样一个图象并没有告诉我们 A, B, \dots, F 等是些什么相（例如是 NbC 还是 TiN? 等等），只有在弄清第二相的分布图（见图 1）并确定了这些小块（ A, B, \dots, F 等）到底是什么相时，才能比较确切地说明第二相在基体中的存在状态，才能为研究合金材料提供重要的依据。在某些合金材料（如磁性材料等）的研究中往往还要涉及晶体的取向关系，这时还需确定 A, B, \dots, F 等与基体之间的晶体学取向关系。而所有这些都必须依靠对选定的区域进行电子衍射。例如当我们想确定 A 是什么相时，我们先对 A 进行电子衍射，再从得到的衍射底板进行分析¹⁾。可以想见，如对 A, B 同时进行电子衍射，则不仅给分析工作带来麻烦，而且也很难得到确定的结果。例如，根据衍射底板的分析，确定有 NbC 和 TiN，那么 A 到底是 NbC 还是 TiN 呢？这是很难确定的。

上述这种对选定区域进行电子衍射的技术就是所谓选区电子衍射。在试验上它是通过电子显微镜中物镜后焦面的一个限制光阑来实现的。当我们想确定 A 是什么相时，首先移动试样把 A 移到荧光屏的中心，用限制光阑把 A 围起来（如图

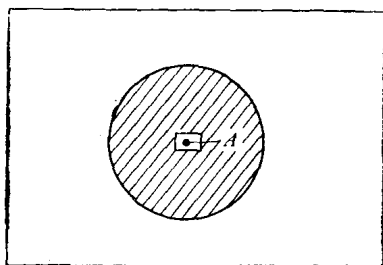


图 2

1) 此时所得到的电子衍射底板上，除由 A 产生的一套衍射斑点外，还有由基体产生的一套衍射斑点。但通过分析即可把这两套斑点分开。

2 所示)。此时在视野里只剩下小块 A ，再进行电子衍射即可得到 A 的电子衍射图形。

2. 倒易空间

倒易空间与晶体空间(或称正空间)不一样,它是一种数学上虚构的空间,在处理晶体学特别是晶体的衍射问题中是一种很有用的工具。

1. 定 义

晶体空间以三个基矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ (它们的模及其相互之间的夹角构成了晶体的六个参数: $a, b, c; \alpha, \beta, \gamma$) 为空间坐标轴的单位矢量,其正结点(一般为原子、离子等)则按一定的规律周期性地填布于这个空间之中。倒易空间则以三个基矢 $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ 为空间坐标轴的单位矢量,其倒易结点也是按一定的规律周期性地填布于这个空间之中。我们说倒易空间是虚构的空间,是指它没有客观的尺度(因为倒易基矢的量纲为 L^{-1}), 而仅是一种三维的数学空间,其尺度的大小完全由人们任意给出。另外,分布于这个空间之中的倒易结点也并非物质的点,而是与晶面有关的量。

我们知道正空间的基矢是按一定的对称原则由晶体本身所确定,而倒易空间的基矢则是与正空间相联系而定义出来的。其定义式为:

$$\mathbf{a}_k \cdot \mathbf{a}_i^* = \begin{cases} 1 & \text{当 } k = i \text{ 时,} \\ 0 & \text{当 } k \neq i \text{ 时;} \end{cases} \quad (1)$$

式中 $i = 1, 2, 3; k = 1, 2, 3$ 。

将式(1)展开得:

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_1^* = \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_2^* = \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_3^* = 1, \\ \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2^* = \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_3^* = \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_1^* = \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3^* = \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_1^* = \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_2^* = 0. \end{cases} \quad (2)$$

由式(2)可知, \mathbf{a}_1^* 垂直于 \mathbf{a}_2 和 \mathbf{a}_3 , \mathbf{a}_2^* 垂直于 \mathbf{a}_3 和 \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_3^* 垂直于 \mathbf{a}_1 和 \mathbf{a}_2 . 因此有

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1^* = \alpha_1(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3), \\ \mathbf{a}_2^* = \alpha_2(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1), \\ \mathbf{a}_3^* = \alpha_3(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2), \end{cases} \quad (3)$$

式中 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 为待定系数.

将式(3)代入式(2)的前半部, 则有 $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_1^* = 1 = \alpha_1 \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$. 应注意的是, $\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ 正好为晶胞的体积 V . 因此, $\alpha_1 = \frac{1}{V}$; 同理, $\alpha_2 = \alpha_3 = \frac{1}{V}$. 故有

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1^* = \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{V}, \\ \mathbf{a}_2^* = \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{V}, \\ \mathbf{a}_3^* = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{V}. \end{cases} \quad (4)$$

式(1)为倒易基矢的定义式, 而公式(4)则指出由正基矢产生倒易基矢的方法.

需要注意一个重要的事实是, 在倒易基矢的定义式(1)中, 正基矢与倒易基矢处于完全对称的地位, 因此正空间与倒易空间之间是互为倒易关系 (即正空间和倒易空间是互为倒易的空间). 所以我们可以不加证明地把式(4)反过来写成

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = \frac{\mathbf{a}_2^* \times \mathbf{a}_3^*}{V^*}, \\ \mathbf{a}_2 = \frac{\mathbf{a}_3^* \times \mathbf{a}_1^*}{V^*}, \\ \mathbf{a}_3 = \frac{\mathbf{a}_1^* \times \mathbf{a}_2^*}{V^*}; \end{cases} \quad (5)$$

式中 V^* 为倒易空间中的单胞体积。由公式(4)和(5)还可得

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_1^* = 1 = \frac{1}{VV^*} (\mathbf{a}_2^* \times \mathbf{a}_3^*) \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = \frac{1}{VV^*},$$

在推导此式时利用了

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{d}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{d}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{d})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})$$

以及式(1)。由上式得

$$V = \frac{1}{V^*} \quad (6)$$

即正空间与倒易空间的单胞体积互为倒数关系。

2. 性 质

这里主要介绍有关倒易矢量的两条重要定理。我们用 \mathbf{G} 表示倒易矢量,所以 \mathbf{G}_{HKL} 即为

$$\mathbf{G}_{HKL} = H\mathbf{a}_1^* + K\mathbf{a}_2^* + L\mathbf{a}_3^* \quad (7)$$

式中 H, K, L 为整数。若这些整数有公因子 n (正整数),则

$$\mathbf{G}_{HKL} = n\mathbf{G}_{hkl}, \quad (8)$$

其中 $H = nh, K = nk, L = nl$; 对普遍的情况, n 也可以等于1,此时 $H = h, K = k, L = l$ 也为不含公因子的三个整数。

定理 1 倒易矢量 \mathbf{G}_{HKL} 垂直于指数为 (HKL) 的晶面(当 H, K, L 没有公因子时)或垂直于指数为 (hkl) 的晶面(当 H, K, L 含有公因子 n 时)。

定理 2 矢量 \mathbf{G}_{HKL} 的模等于 $\frac{1}{d_{HKL}}$ (当 H, K, L 无公因子时)或等于 $\frac{n}{d_{hkl}}$ (当 H, K, L 含有公因子 n 时)。

证明: 如图 3 所示, 在正空间中作一最靠近原点 O 而其密勒指数为 (hkl) 的平面, 显然, 按密勒指数的定义, 这个平面

在 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 轴上的截距矢量将分别为

$$\frac{\mathbf{a}_1}{h}, \quad \frac{\mathbf{a}_2}{k}, \quad \frac{\mathbf{a}_3}{l}.$$

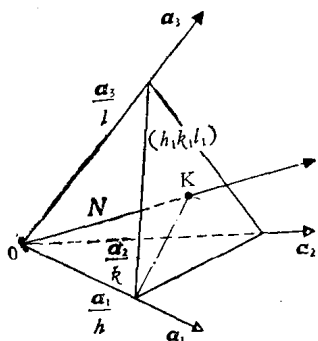


图 3

再由原点 O 向该平面引垂线交此平面于 K 点, 显然 $|OK| = d_{hkl}$ [即 (hkl) 晶面的面间距].

令 \mathbf{N} 为 \overrightarrow{OK} 方向上的单位矢量, 则

$$\frac{\mathbf{a}_1}{h} \cdot \mathbf{N} = \frac{\mathbf{a}_2}{k} \cdot \mathbf{N} = \frac{\mathbf{a}_3}{l} \cdot \mathbf{N} = d_{hkl},$$

或写成

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{N} = h d_{hkl}, \\ \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{N} = k d_{hkl}, \\ \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{N} = l d_{hkl}. \end{cases} \quad (9)$$

现用 $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*, \mathbf{a}_3^*$ 分别乘以式(9)的各式, 而后相加得

$$\begin{aligned} & (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{N})\mathbf{a}_1^* + (\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{N})\mathbf{a}_2^* + (\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{N})\mathbf{a}_3^* \\ & = d_{hkl}(h\mathbf{a}_1^* + k\mathbf{a}_2^* + l\mathbf{a}_3^*) = d_{hkl}\mathbf{G}_{hkl}. \end{aligned} \quad (10)$$

令式(10)左端等于矢量 \mathbf{L} , 那么根据式(1)的倒易基矢的定义, \mathbf{L} 与 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 的点乘将分别为 $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{N}, \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{N}, \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{N}$.

因 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 为不共面的三个矢量, 所以

$$\mathbf{L} = \mathbf{N},$$

代入式(10)得

$$\mathbf{N} = d_{hkl} \frac{\mathbf{G}_{HKL}}{n}. \quad (11)$$

到此定理 1 得证. 因为 \mathbf{N} 是单位矢量, 所以由式(11)可得

$$|\mathbf{G}_{HKL}| = \frac{n}{d_{hkl}}. \quad (12)$$

到此定理 2 也得证.

3. 应 用

根据定理 1 和定理 2 可得到晶体学方面的一些重要量.

(1) 晶面的面间距 d 按定理 2, (hkl) 晶面的面间距 d_{hkl} 为

$$d_{hkl} = \frac{1}{|\mathbf{G}_{hkl}|},$$

$$\frac{1}{d_{hkl}} = |\mathbf{G}_{hkl}|. \quad (13)$$

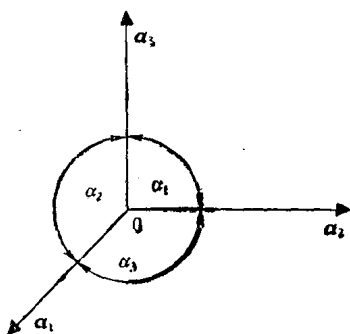


图 4

如令晶格参数为 $a_1, a_2, a_3; \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ (见图 4), 那么, 利用矢量的基本演算规则可得到由晶格参数所表示的 $\frac{1}{d_{hkl}}$ (或

$|G_{hkl}|$) 的表达式, 结果为

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = G_{hkl}^2 = (h^2 a_1^2 a_3^2 \sin^2 \alpha_1 + k^2 a_1^2 a_2^2 \sin^2 \alpha_2 + l^2 a_1^2 a_2^2 \sin^2 \alpha_3 + 2hkT_3 + 2hlT_2 + 2klT_1) / [a_1^2 a_2^2 a_3^2 (1 - \cos^2 \alpha_1 - \cos^2 \alpha_2 - \cos^2 \alpha_3 + 2 \cos \alpha_1 \cos \alpha_2 \cos \alpha_3)], \quad (14)$$

式中

$$T_1 = a_1^2 a_2 a_3 (\cos \alpha_2 \cdot \cos \alpha_3 - \cos \alpha_1),$$

$$T_2 = a_2^2 a_1 a_3 (\cos \alpha_1 \cdot \cos \alpha_3 - \cos \alpha_2),$$

表 1

晶系名称	晶 格 参 数	$1/d_{hkl}^2$
三斜晶系	$a_1, a_2, a_3; \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 均为任意的	见式(14)
单斜晶系	a_1, a_2, a_3, α_2 为任意的; $\alpha_1 = \alpha_3 = 90^\circ$	$(h/a_1 \sin \alpha_2)^2 + (k/a_2)^2 + (l/a_3 \sin \alpha_2)^2 - 2hl \cos \alpha_2 / a_1 a_3 \sin^2 \alpha_2$
正交晶系	a_1, a_2, a_3 为任意的; $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$	$(\frac{h}{a_1})^2 + (\frac{k}{a_2})^2 + (\frac{l}{a_3})^2$
四方晶系	a_3 为任意的; $a_1 = a_2; \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$	$\frac{h^2 + k^2}{a_1^2} + \frac{l^2}{a_3^2}$
菱形晶系	$a_1 = a_2 = a_3 = a; \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha \neq 90^\circ$	$[(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + hl) \times (\cos^2 \alpha - \cos \alpha)] / a^2(1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)$
六角晶系	a_3 为任意的; $a_1 = a_2; \alpha_1 = \alpha_2 = 90^\circ; \alpha_3 = 120^\circ$	$\frac{4}{3} \cdot \frac{h^2 + hk + k^2}{a_1^2} + \frac{l^2}{a_3^2}$
立方晶系	$a_1 = a_2 = a_3 = a; \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$	$\frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$

表中的 $a_1, a_2, a_3, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 与一般习惯写法的 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ 相对应。

$$T_3 = a_3^2 a_2 a_1 (\cos \alpha_1 \cdot \cos \alpha_2 - \cos \alpha_3).$$

这是 $\frac{1}{d^2}$ 或 G^2 的普遍表达式。如果考虑到各晶系的特点(如正交晶系中 $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$)，即可得到相应于各晶系的 $\frac{1}{d^2}$ 或 G^2 的表达式。现把这些公式汇总于表 1

(2) 晶面之间的夹角 φ 按定理 1, $(h_1 k_1 l_1)$ 晶面与 $(h_2 k_2 l_2)$ 晶面之间的夹角 φ (也即这两个晶面的法线之间的夹角 φ) 即为 $\mathbf{G}_{h_1 k_1 l_1}$ 与 $\mathbf{G}_{h_2 k_2 l_2}$ 之间的夹角。所以

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= \cos(\mathbf{G}_{h_1 k_1 l_1} \wedge \mathbf{G}_{h_2 k_2 l_2}) \\ &= \frac{\mathbf{G}_{h_1 k_1 l_1} \cdot \mathbf{G}_{h_2 k_2 l_2}}{|\mathbf{G}_{h_1 k_1 l_1}| |\mathbf{G}_{h_2 k_2 l_2}|}. \end{aligned} \quad (15)$$

各晶系的夹角公式见表 2。

三斜晶系的夹角公式比较繁杂,按式(15),

表 2

晶系名称	$\cos \varphi$
单斜晶系	$d_{h_1 k_1 l_1} d_{h_2 k_2 l_2} \left(\frac{h_1 h_2}{a_1^2 \sin^2 \alpha_2} + \frac{k_1 k_2}{a_2^2} + \frac{l_1 l_2}{a_3^2 \sin^2 \alpha_2} - \frac{(h_1 l_2 + l_1 h_2) \cos \alpha_2}{a_1 a_3 \sin^2 \alpha_2} \right)$
正交晶系	$d_{h_1 k_1 l_1} d_{h_2 k_2 l_2} \left(\frac{h_1 h_2}{a_1^2} + \frac{k_1 k_2}{a_2^2} + \frac{l_1 l_2}{a_3^2} \right)$
菱形晶系	$\frac{d_{h_1 k_1 l_1} d_{h_2 k_2 l_2}}{a^2 (1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^4 \alpha)} [(h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2) \sin^2 \alpha + (h_1 k_2 + h_1 l_2 + k_1 h_2 + k_1 l_2 + l_1 k_2 + l_1 h_2) (\cos^2 \alpha - \cos \alpha)]$
六角晶系	$d_{h_1 k_1 l_1} d_{h_2 k_2 l_2} \left(\frac{4h_1 h_2 + 2(h_1 k_2 + k_1 h_2) + 4k_1 k_2}{3a_1^2} + \frac{l_1 l_2}{a_3^2} \right)$
四方晶系	$d_{h_1 k_1 l_1} d_{h_2 k_2 l_2} \left(\frac{h_1 h_2 + k_1 k_2}{a_1^2} + \frac{l_1 l_2}{a_3^2} \right)$
立方晶系	$\frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}$

$$\cos \varphi = \frac{\mathbf{G}_{h_1 k_1 l_1} \cdot \mathbf{G}_{h_2 k_2 l_2}}{|\mathbf{G}_{h_1 k_1 l_1}| |\mathbf{G}_{h_2 k_2 l_2}|}$$

对三斜晶系来说,

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{h_1 k_1 l_1} \cdot \mathbf{G}_{h_2 k_2 l_2} &= h_1 h_2 a_1^{*2} + k_2 k_1 a_2^{*2} + l_1 l_2 a_3^{*2} \\ &+ (h_1 k_2 + k_1 h_2) \cdot (\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_2^*) + (h_1 l_2 + l_1 h_2) \\ &\cdot (\mathbf{a}_1^* \cdot \mathbf{a}_3^*) + (k_1 l_2 + l_1 k_2) \cdot (\mathbf{a}_2^* \cdot \mathbf{a}_3^*) \end{aligned}$$

其中

$$a_1^{*2} = \frac{a_2^2 a_3^2 \sin \alpha_1}{V^2}$$

$$a_2^{*2} = \frac{a_1^2 a_3^2 \sin^2 \alpha_2}{V^2}$$

$$a_3^{*2} = \frac{a_1^2 a_2^2 \sin^2 \alpha_3}{V^2}$$

而

$$\begin{aligned} V^2 &= a_1^2 a_2^2 a_3^2 \cdot (1 - \cos^2 \alpha_1 - \cos^2 \alpha_2 - \cos^2 \alpha_3 \\ &+ 2 \cos \alpha_1 \cos \alpha_2 \cos \alpha_3). \end{aligned}$$

(3) 晶带轴 按定义, 其指数为 $(h_1 k_1 l_1)$ 和 $(h_2 k_2 l_2)$ 两晶面的晶带轴即为这两个晶面的交线方向. 若令此交线平行于某一正矢量 \mathbf{P}_{uvw} , 此时

$$\mathbf{P} = u\mathbf{a}_1 + v\mathbf{a}_2 + w\mathbf{a}_3,$$

所以求晶带轴即求出 $\{uvw\}$ 三数.

按定理 1, $(h_1 k_1 l_1)$ 和 $(h_2 k_2 l_2)$ 晶面的法线是平行于 $\mathbf{G}_{h_1 k_1 l_1}$ 和 $\mathbf{G}_{h_2 k_2 l_2}$, 所以

$$\mathbf{G}_{h_1 k_1 l_1} \perp \mathbf{P}_{uvw},$$

$$\mathbf{G}_{h_2 k_2 l_2} \perp \mathbf{P}_{uvw}.$$

于是它们的点乘 $\mathbf{G}_{h_1 k_1 l_1} \cdot \mathbf{P}_{uvw}$ 和 $\mathbf{G}_{h_2 k_2 l_2} \cdot \mathbf{P}_{uvw}$ 都为 0.

这样根据倒易基矢的定义显然有

$$\begin{cases} uh_1 + vk_1 + wl_1 = 0, \\ uh_2 + vk_2 + wl_2 = 0. \end{cases} \quad (16)$$

解方程得

$$u:v:w = (k_1l_2 - l_1k_2):(l_1h_2 - h_1l_2):(h_1k_2 - k_1h_2) \quad (17)$$

公式(14), (15), (17)回答了我们在前面所提出的三个问题,至于倒易空间在晶体衍射中的应用将在下面叙述。

3. 衍射原理

下面对衍射原理的运动学部分作一简略的介绍。所谓运动学部分一般是指: 1) 散射波极弱, 故不考虑入射波的损失; 2) 不考虑散射波再受到的各种散射。根据量子力学, 微观粒子除具有粒子的性能外还具有波动的性质。以电子为例, 电子波的波长与加速电压之间存在如下的关系:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0eV}} \left(1 + \frac{eV}{2m_0c^2} \right); \quad (18)$$

其中 λ 为电子波波长, h 为普朗克常数, m_0 为电子的静止质量, e 为一个电子所带的电量, V 为加速电压, c 为光速。根据上式, 由已知的加速电压可算出电子波波长, 如:

电压(千伏)	50	100	200	500	1000
波长(Å)	0.0536	0.0370	0.0247	0.0142	8.72×10^{-3}

由此可以看出电子波波长随加速电压的增加而减小。

基于这一事实, 电子衍射的基本原理与X光的衍射原理完全一致。在电子显微镜中热电子受到一个恒定加速电压的作用后, 再经会聚镜会聚成一股很细的电子束。当这股电子束射入晶体时, 从量子力学的观点来看即可视为具有一定波长[由式(18)确定]的平行入射线(与X射线相当)射入晶体。此时, 由于电子束受到晶体中原子核与核外电子所形成的静电场的作用而发生散射。这些散射线必然相互作用——互相减

弱或加强，结果就使得晶体周围的空间散射电子射线的强度分布不均。因此我们要找出一种适合于晶体的干涉方程来描述这种散射强度的分布情况。

这种干涉方程的推导，在很多书上已有专门的论证¹⁾，这里直接引出其结果：

$$\begin{aligned} \frac{J}{J_0} &= \frac{\phi^2}{R^2} f(\varphi_i) \\ &= \frac{\phi^2}{R^2} \cdot \frac{\sin^2 M_1 \varphi_1 \cdot \sin^2 M_2 \varphi_2 \cdot \sin^2 M_3 \varphi_3}{\sin^2 \varphi_1 \cdot \sin^2 \varphi_2 \cdot \sin^2 \varphi_3} \end{aligned} \quad (19)$$

结合图5，我们先看等式的右端， φ 为原子的散射本领， R 为观测点 C 至晶体的距离，而

$$\varphi_i = \frac{\pi}{\lambda} [\mathbf{a}_i(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_0)] \quad i = 1, 2, 3.$$

其中 \mathbf{a}_i 为晶体单胞的晶格矢量， λ 为入射束的波长， $\boldsymbol{\sigma}_0$ 为入射束方向的单位矢量， $\boldsymbol{\sigma}$ 为观测方向的单位矢量。而

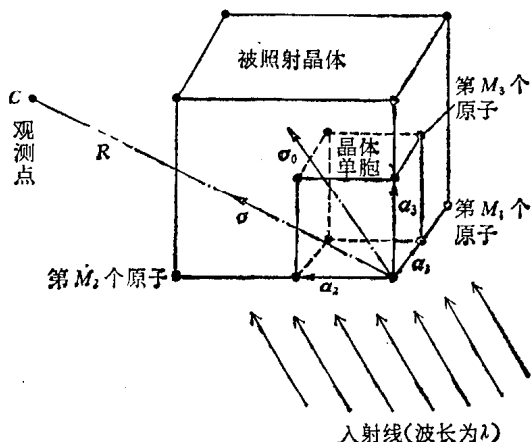


图 5

1) «倒易晶格空间构造», И. В. Яворский, 田玉译, 地质出版社.

$$f(\varphi_i) = \frac{\sin^2 M_1 \varphi_1 \sin^2 M_2 \varphi_2 \sin^2 M_3 \varphi_3}{\sin^2 \varphi_1 \sin^2 \varphi_2 \sin^2 \varphi_3}$$

一般称为干涉函数, M_1, M_2, M_3 分别为 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 方向上晶体的原子数. 在等式的左端, J_0 为入射束的强度, J 为散射束的强度(在 σ 方向上的),

J/J_0 为在 σ 方向上的散射相对强度.

这里需要说明的是,干涉方程(19)是对晶体、入射束、实验条件等作了一系列的假设后,通过近似处理得到的. 比如对实验条件来说它要求:

- 1) 在 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 方向上分别分布有 M_1, M_2, M_3 个原子的完整晶体完全浸润在入射束之中.
- 2) 晶体的大小比起观测点 C 至晶体的距离要充分小,以至可以把晶体视为一个点.

干涉方程式(19)的物理意义是,在同一实验中沿不同的方向(即不同的 σ)可观测到不同的散射相对强度. 那么,在哪些方向上散射相对强度具有极大值呢? 这不仅是干涉方程(19)的自然引伸,同时也是具有实际意义的问题. 因为在衍射底板上所得到的衍射斑点正好就是那些极大散射强度的记录. 为此我们以干涉方程中的 $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ 为自变量也即以 σ 为自变量求其极值. 其结果是

$$\varphi_i = g_i \pi, \quad (20)$$

式中

$$g_i = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots \pm n,$$

$$i = 1, 2, 3.$$

这就是所谓劳埃方程. 因为 $\varphi_i = \frac{\pi}{\lambda} [\mathbf{a}_i(\sigma - \sigma_0)]$, 所以其物理意义是,当我们在符合 $\varphi_i = \frac{\pi}{\lambda} [\mathbf{a}_i(\sigma - \sigma_0)] = g_i \pi$ 的 σ 方向上进行观测时,即可观测到散射相对强度的极大值.

劳埃方程虽然回答了极大散射相对强度的分布问题，但具体使用起来不太方便。为此我们把

$$\varphi_i = \frac{\pi}{\lambda} [\mathbf{a}_i(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_0)]$$

代入式(20)得

$$\mathbf{a}_i \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_0}{\lambda} = g_i. \quad (21)$$

注意：此时 $\boldsymbol{\sigma}$ 已代表散射强度取极大值的方向，即衍射方向。

设倒易矢量 $\mathbf{G}_{g_1, g_2, g_3}$ 表示

$$\mathbf{G}_{g_1, g_2, g_3} = g_1 \mathbf{a}_1^* + g_2 \mathbf{a}_2^* + g_3 \mathbf{a}_3^*, \quad (22)$$

那么，根据倒易矢量的定义我们有

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{G}_{g_1, g_2, g_3} = g_i. \quad (23)$$

比较式(21)与(23)可得

$$\mathbf{G}_{g_1, g_2, g_3} = \frac{\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_0}{\lambda}. \quad (24)$$

式(24)即为矢量形式的布拉格方程。它为晶体衍射问题提供了一种新的解释，如图6所示。

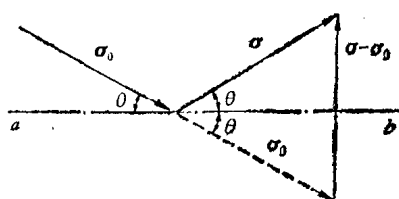


图 6

画一个以入射束(沿 $\boldsymbol{\sigma}_0$ 方向)为入射线，衍射束(沿 $\boldsymbol{\sigma}$ 方向)为反射线的假想平面 ab ，由于 $\frac{\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_0}{\lambda}$ 平行于 $\mathbf{G}_{g_1, g_2, g_3}$ ，

$\frac{\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}_0}{\lambda}$ 垂直于 ab 平面，所以这个假想平面正好是以 $(g_1 g_2 g_3)$