

科学技术简报和经验交流

倒易空间点阵用于多晶 X 射线衍射图象的解释*

曾 訓 一

(科学院冶金研究所)

如所周知,解释单晶 X 射线衍射图象时,倒易点阵是强有力的工具。由于多晶体的多晶性,有多少取向不同的晶体数,便有多少取向不同的倒易点阵数,这一复杂情况使人们不能获得象单晶情况那样良好的结果。因此,解释多晶 X 射线衍射图象时,倒易点阵方法未能获得广泛的应用。本文是这方面一个尝试,结果获得适用于立方晶系的新共线图。

多晶体 X 射线衍射图象即 Debye 环。它的全面解释应包括环的位置、线强和外观。外观指环弥散与否,系连续抑系点状。本文提出的图示方法,和其它解释 Debye 环的图示方法一样,仅涉及环的位置。本文的图示方法,和其它解释 Debye 环的图示方法一样,仅对立方系晶体给出简洁的共线图。对大多数金属和合金立方晶系,因此,所提出的共线图的应用范围,还有它的广泛性。

一、共线图原理与共线图

假定多晶体属立方晶系,点阵常数为 a , 本文所提出的共线图原理表于图 1 (类似表示见^[1])。以 A 为中心, a/λ 为半径作 Ewald 球 C , 这里 λ 为原 X 射线波长。多晶体位于 A , 相应的倒易点阵族的中心为 B , B 在球 C 被原 X 射线穿透处。以 B 为中心、 N 为半径作

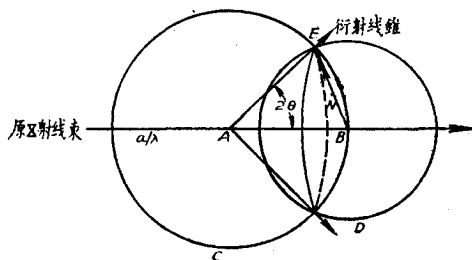


图 1

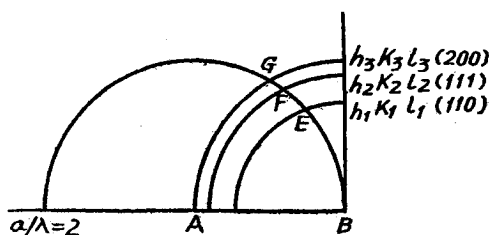


图 2

球 D 。这里 $N = \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$, 而 hkl 是衍射指数。倒易点阵点与球 C 球面接触即产生衍射, 而所有衍射指数为 hkl 的倒易点阵点均密集在球 D 球面上。因此, C 与 D 二球交线上的点均产生衍射, 其方向例如 AE , 在空间呈以 A 为顶点、 2θ 为半顶角的锥体, 这里 θ 为 Bragg 角。若置圆柱形记录底片, 使其轴线垂直于原 X 射线且经球心 A , 则柱体与锥体相交得 Debye 环。

* 1961 年 8 月 31 日收到。

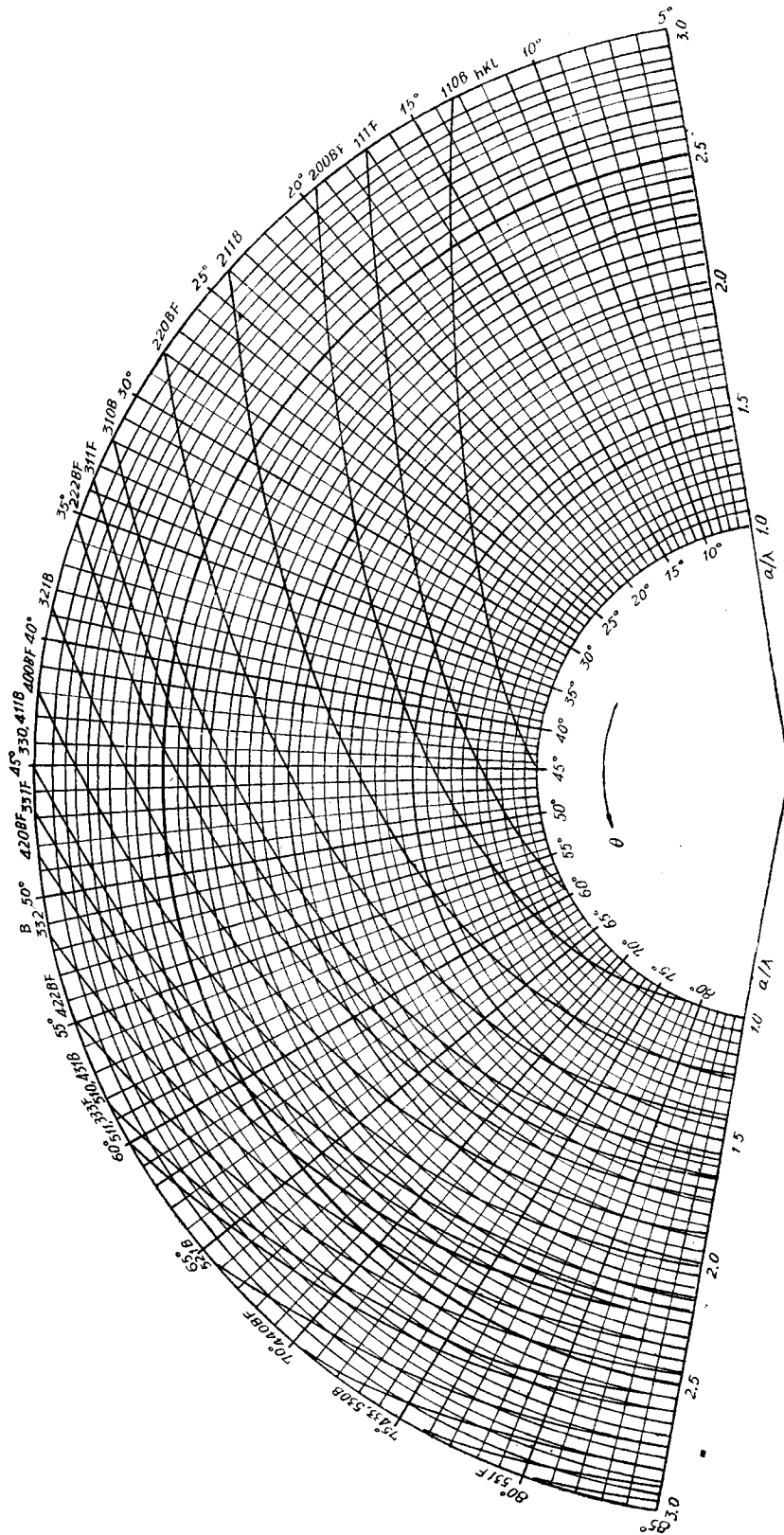


图3 解釋 Debye 環的共綫圖(立方系晶体)

a ——点陣常数; λ ——X射綫波長; θ ——Bragg 角; hkl ——衍射指數; B——体心立方; F——面心立方.

基此,我們得到本文所提出的共綫图的作图法:

1. 用简单的几何作图法,作出不同 N 值的同心圓(可以只作一个象限,例如第二象限);
2. 用描图紙,取相应单位,作出不同 a/λ 值的同心圓(可以只作相邻二象限,例如第一、二象限),并标明 a/λ 值. 分度圓心角,且把实际上的 2° 作为 $\theta = 1^\circ$ 看待;
3. 对某一定 a/λ 值的圓,上述二图重迭如图 2,得交点 $E, F, G \dots$;
4. 对不同 a/λ 值,类似上述得 $E', F', G' \dots, E'', F'', G'' \dots$ 等.
5. 連 $EE'E'' \dots, FF'F'' \dots, GG'G'' \dots$ 等得綫族,其中每一綫对应于某一給定的 hkl . 这样,我們便得到了共綫图(图 3).

二、Bragg 方程的极坐标表示

图 3 亦可从 Bragg 方程的极坐标表式出发得到.

众所周知的 Bragg 方程如下:

$$\lambda = 2d \sin \theta.$$

对立方晶系,变换后得

$$\sin \theta = \frac{\lambda \sqrt{N}}{2a} = \left(\frac{\sqrt{N}}{2} \frac{1}{\frac{a}{\lambda}} \right),$$

或

$$\theta = \sin^{-1} \left(\frac{K}{r} \right), \quad (1)$$

其中

$$K = \sqrt{N}/2, \\ r = a/\lambda.$$

式(1)便是 Bragg 方程的极坐标解析形式. 作共綫图时,为了赋予式(1)以倒易点陣方法的实质,同样应把圓心角实际上的 2° 作为 $\theta = 1^\circ$ 看待. 这样便可从式(1)作得图 3.

三、共綫图的应用

已知晶体属立方晶系及其点陣常数 a , 靶固定即已知 λ , 算出 a/λ , 可根据图 3 預計各 Debye 环的位置. 这时只須沿該 a/λ 值的 Ewald 球(圓)寻找与等 hkl 綫的交点, 这些点所在位置的 θ 值即 θ_{hkl} . 改变靶即改变 λ , 則得另一些 θ_{hkl} , 这样的过程便是精确测定点陣常数时的选靶过程.

已得一立方晶系多晶体的 Debye 图象, 測定其 θ_{hkl} , 在图 3 标出相应 θ_{hkl} 的輻向綫, 考察这些輻向綫与等 hkl 綫的交点, 注意这些交点在那一 a/λ 值的 Ewald 球(圓)上, 这样便求得 a/λ , 从而可粗略求得点陣常数 a .

在有两种或两种以上立方晶系多晶共存, 或只一种立方晶系多晶体但原 X 射綫为多波长(例如 K_α, K_β)时, 可以用图 3 区分其衍射綫.

参 考 文 献

- [1] James, R. W., The Optical principles of Diffractions of X-Rays, London, G. Bell & Sons Ltd., 1954, P.18.