

电子衍射谱自动标定中的消光处理*

郭 可 信

(中国科学院金属研究所)

电子衍射的一个显著特点是衍射束很强,一些原来属于消光的衍射(有心点阵的消光除外)往往通过二次或多次衍射而获得一定的强度,出现在衍射谱中.换句话说,消光效应可能为多次衍射效应所掩盖,因此在电子衍射分析中必须统一考虑这两种效应.王仁卉等^[1]分析了金刚石等三种常见结构类型的消光问题,只有在电子衍射谱中存在有普遍消光的情况下,也就是有半数以上并且是相间分布的衍射消光时,多次衍射才不会掩盖消光.因此,只要距透射束最近的三个衍射束中有两个属于消光的情况(相当于倒易点阵中相间的点列都不出现),在电子衍射谱的标定中就需要考虑消光处理.

王仁卉等^[1]考虑的几种消光情况都属于空间群中等效点的特殊位置引起的消光,关于更普遍存在的滑动面引起的消光, Bucksch^[2] 虽有过一些考虑,但一则未作全面细致的分析,二则仍需对此进行人工的逐个考虑.我们在上述工作的基础上,编写了一个能处理系统消光的子程序 EXTINCT,只要输入空间群中滑移面符号,就能处理 230 个空间群中由于滑移面引起的消光现象,对于等效点的特殊位置产生的消光,则还要输入程序中规定的特殊位置的序号.这个消光子程序可以配在原来编写的物相分析程序 EDPHASE II 和劳厄带计算程序 EDZONE II 上使用^[3].

由于选了非初基的有心点阵引起的点阵消光,已经在从约化胞到布喇菲胞的指数变换中考虑过了^[3].螺旋轴不引起普遍消光,无需考虑.滑移面也只是在为数有限的几个 $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ 晶带电子衍射谱中产生普遍消光,并且对其中每个电子衍射谱也只需要考虑一种取向的滑移面的消光作用(见表 1 右边四栏),因为其它取向的滑移面对这个电子衍射谱并不产生普遍消光.例如, (100) 取向的 b 滑移面只能使 $[100]$ 晶带电子衍射谱中 okl 衍射中 k 为奇数的一些衍射消光.因此,需要考虑的消光情况就显著简化了.

230 个空间群符号已把点阵及滑移对称的消光作用包罗无遗.但对不同晶系,空间群中点群符号的位序代表不同的取向(表 1 左边三栏),因此有必要进行调换,按 X, Y, Z, W (在 XY 坐标平面内的方向)取向的顺序排列,如表 1 中右边四栏所示.在这种调换中,一方面应注意在空间群符号中没有明显表示出的一些由对称操作联系起来的一些滑移面,另一方面也应注意滑移面符号的变换,如四方、立方晶系中的情况.

在六角晶系中,除了 X, Y 轴外,还有一个等效的 U 轴,与这三个轴正交的 $\{11\bar{2}0\}$ 取向的 c 滑移面会使 l 为奇数的 $h\bar{l}0l$ 衍射消光,需要考虑消光的是 $U^2 - UV + V^2 = 1$ 的 $[100]$, $[110]$ 等晶带的电子衍射谱.同理, $U^2 - UV + V^2 = 3$ 的 $[1\bar{1}0]$, $[210]$ 等晶带电子衍射谱中的系统消光条件是,如在 $\{1\bar{1}00\}$ 取向有 c 滑移面, l 为奇数的 $hh2\bar{h}l$ 不

* 1978 年 2 月 17 日收到.

表 1 滑移面取向与衍射出现的条件

晶 系	点群符号中的位序及滑动面取向 (与 X, Y, Z 或 W ¹⁾ 正交)			滑 移 面 取 向				
	第 一 位	第 二 位	第 三 位	(100) ⁴⁾ ⊥ X	(010) ⁴⁾ ⊥ Y	(001) ⊥ Z	{110} ⁵⁾ ⊥ W	
单 斜 ²⁾		Y(c)		● ³⁾	c	●	●	
正 交	X $\begin{pmatrix} b, c \\ n, d \end{pmatrix}$	Y $\begin{pmatrix} a, c \\ n, d \end{pmatrix}$	Z $\begin{pmatrix} a, n \\ d \end{pmatrix}$	b, c, n, d	c, a, n, d	a, n, d	●	
六角(三角)	Z	X, Y (c)	W(c)	c	c	●	c	
四 方	Z (a, n)	X, Y $\begin{pmatrix} a, c \\ n \end{pmatrix}$	W(c, d)	b, c, n	a, c, n	a, n	c, d	
立 方	X, Y, Z $\begin{pmatrix} a, n \\ d \end{pmatrix}$	●	W $\begin{pmatrix} c, n \\ d \end{pmatrix}$	b, n, d	c, n, d	a, n, d	c, n, d	
1) W 是 XY 坐标平面上的方向。 2) 在单斜晶系中, 可能有一个滑移面, 无位序。在第二种表示中, Y 是特殊轴。 3) “●”表示无滑移面对称关系。 4) 在六角晶系中应是{1120}取向, h \bar{h} 0l 衍射。 5) 在六角晶系中应是{1100}取向, hh $\bar{2}$ l 衍射。在立方晶系中还应包括 h \bar{h} kk, lkl 衍射。 6) 这里的 n 是任意整数。				衍 射	0kl ⁴⁾	h0l ⁴⁾	hk0	hhl ⁵⁾
				出	b k = 2n ⁶⁾	c l = 2n	a h = 2n	c l = 2n
				现	c l = 2n	a h = 2n	—	—
				条	n k + l = 2n	n l + h = 2n	n h + k = 2n	n l = 2n
				件	d k + l = 4n	d l + h = 4n	d h + k = 4n	d 2h + l = 4n

出现。

230 个空间群中, 等效点的特殊位置及相应的消光条件为数还是不少的。但是, 有的消光条件与对称性高的点阵的消光条件或滑动面的消光条件相同。此外, 还有不少特殊位置的消光条件不构成普遍消光。除上述情况外, 我们选择了一些常见结构类型的特殊位置消光条件, 规定特殊位置的序号 (NSPEC), 进行消光处理。

如前所述, 只有当距透射束最近的三个衍射束中至少有两个消光时才需要进行消光处理。如三个衍射 (衍射矢量 g_1, g_2, g_3) 全消光, 可令 $g'_i = 2g_i$ ($i = 1, 2, 3$) 为新的衍射矢量, 再进行消光检验。若仍属消光的衍射, 令 $g'_i = 3g_i$, 如此循环下去, 直到最后得出至少有两个不消光的衍射为止。

如与透射束最接近的三个衍射束中有两个消光时, 可选不消光的衍射与 $2g_1$ 或 $2g_2$ (当 g_1 是不消光的衍射) 为倒易点阵平面一个基胞的矢量, 进行约化处理, 然后再进行消光检验。

参 考 文 献

- [1] 王仁卉, 康立山, 孙天锡, 万宪, 金属学报, 待发表。
 [2] R. Bucksch, *J. Appl. Cryst.*, **6** (1973), 304.
 [3] 郭可信, 物理学报, **27** (1978), 160.

**ON THE EXTINCTION PROBLEM IN THE AUTOMATIC
INDEXING OF ELECTRON DIFFRACTION PATTERNS**

GUO KE-XIN

(Institute of Metal Research, Academia Sinica)