

面心立方晶体中生成孪晶或六角密堆相的电子衍射分析*

郭 可 信

(中国科学院金属研究所)

提 要

用指数变换矩阵将面心立方晶体的晶带轴 $[uvw]$ 变换成孪晶的 $[u'v'w']$ 及六角密堆结构的 $[u''v''w'']$, 在略去这些指数的公共系数后, 如 $u'^2 + v'^2 + w'^2 > u^2 + v^2 + w^2$ 或 $u', v' \neq 3n$ 而 $u' + v' = 3n$, 则孪晶或六角密堆结构与面心立方晶体有完全相重的电子衍射谱。这种标定的不唯一性是广泛存在的。

面心立方金属 Co, Fe-Mn 及 Fe-Cr-Ni 合金, 以及 TiCr_2 型金属化合物等, 在晶体生长或范性形变过程中常有孪晶生成, 有时还会转变为六角密堆结构。面心立方晶体、孪晶以及六角密堆结构都可以看作是由同一六角密排层堆垛而成的, 只不过是堆垛顺序不同而已。如基体的堆垛顺序是 ABCABC..., 通过密排层的滑移或切变很容易产生孪晶顺序 CBACBA... 或六角密堆顺序 ABAB...。因此, 这三种结构常是伴随而生的。

面心立方晶体与其孪晶的电子衍射谱有许多衍射斑点相重, 有时甚至完全相重, 这一点很早就受到人们的注意, 并进行了孪晶指数变换的矩阵分析^[1-7]。最近有人指出, 在 33 个低指数晶带的衍射谱中, 孪晶衍射谱与基体完全相重的竟多达 26 个。Kestenbach^[8] 发现六角密堆相的衍射谱与基体以及孪晶完全相重的为数也相当多。换句话说, 电子衍射谱标定的这种不唯一性是广泛存在的, 因此常常不能确定面心立方晶体中是否有孪晶或六角密堆相存在。即使从透射电子显微像中观察到基体的 $\{111\}$ 面上有薄片状的结构, 有时也难以用电子衍射确定它是孪晶还是六角密堆相。

Kestenbach 等都是把面心立方晶体的低指数晶带电子衍射谱以及孪晶或六角密堆相的衍射谱一一绘出, 逐个进行比较, 从中找出标定不唯一的情况。这种方法似嫌繁琐, 低指数晶带的情况尚可制表列出 (如表 1), 高指数晶带就很难一一列举了。鉴于这种标定的不唯一性对金属和半导体晶体的电子衍射分析有重要意义, 我们从面心立方晶体、孪晶和六角密堆相的正点阵与倒易点阵间的几何关系, 找出这种不唯一性的规律。只要将面心立方晶体的晶带轴指数变换成孪晶或六角密堆相的晶带轴指数, 在绝大多数情况下, 就可以直接确定这种不唯一性是否存在。如不存在, 还可以进一步确定基体中有孪晶还是六角密堆相。

* 1977 年 11 月 12 日收到。

一、李 晶

在旋转李晶关系中,如李生面是 (HKL) ,以其法线为轴旋转 180° 即可得出李晶点阵.在立方晶系中,旋转李晶与反映李晶是等价的,因此只要考虑以 $[HKL]$ 为轴的旋转李晶.基体的点阵平面指数 hkl 变换成李晶的 $h'k'l'$,

$$\begin{aligned} h' &= \bar{h} + \frac{2H}{H^2 + K^2 + L^2} (Hh + Kk + Ll), \\ k' &= \bar{k} + \frac{2K}{H^2 + K^2 + L^2} (Hh + Kk + Ll), \\ l' &= \bar{l} + \frac{2L}{H^2 + K^2 + L^2} (Hh + Kk + Ll). \end{aligned} \quad (1)$$

对于面心立方点阵, $\{HKL\} = \{111\}$, $H^2 + K^2 + L^2 = 3$. 由(1)式不难看出:

当 $Hh + Kk + Ll = 3n$ 时,李晶的倒易阵点与基体的一个倒易阵点相重;

当 $Hh + Kk + Ll = 3n \pm 1$ 时,李晶的倒易阵点与基体的倒易阵点不相重,偏离是 $\pm \frac{1}{3}\langle 111 \rangle$ (这与 $\pm \frac{1}{3}\langle 111 \rangle$ 相当).

显然,基体与李晶有三分之一倒易阵点相重,其它三分之二倒易阵点在李生面法线方向有 $\pm \frac{1}{3}\langle 111 \rangle$ 位移,如图 1 所示. 这种关系对于分析李晶电子衍射谱的几何特征 (包括标定的不唯一性)是非常重要的.

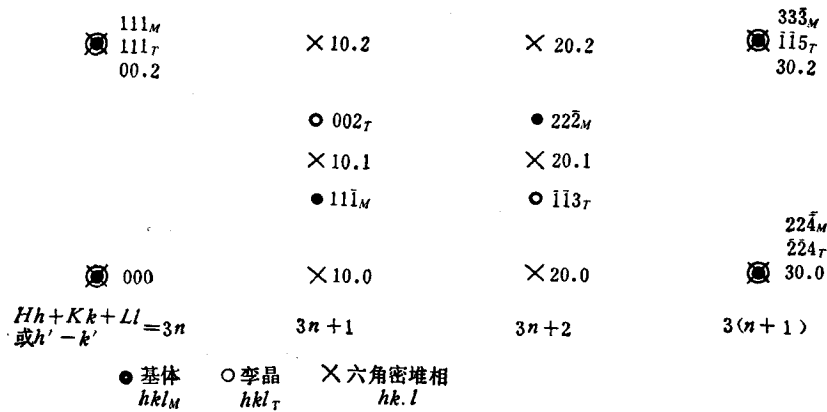


图 1 倒易点阵平面: 基体 $(1\bar{1}0)^*$, 李晶 $(110)^*$, 六角密堆相 $(0\bar{1}0)^*$; $(HKL) = (111)$

面心立方晶体的李晶指数变换关系(1)还可以具体地用下列矩阵表示之:

$$\begin{aligned} T_{111} &= \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \bar{1} & 2 & 2 \\ 2 & \bar{1} & 2 \\ 2 & 2 & \bar{1} \end{pmatrix}, & T_{1\bar{1}\bar{1}} &= \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{2} & 2 \\ \bar{2} & \bar{1} & \bar{2} \\ 2 & \bar{2} & \bar{1} \end{pmatrix}, \\ T_{\bar{1}11} &= \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{2} & \bar{2} \\ \bar{2} & \bar{1} & 2 \\ \bar{2} & 2 & \bar{1} \end{pmatrix}, & T_{\bar{1}\bar{1}1} &= \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \bar{1} & 2 & \bar{2} \\ 2 & \bar{1} & \bar{2} \\ \bar{2} & \bar{2} & \bar{1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2)$$

在立方晶系这种特殊情况下, 孪晶指数变换矩阵不但是对称正交矩阵 ($T = \tilde{T} = T^{-1}$), 而且对点阵平面指数和点阵方向指数都适用. 表 1 列举了面心立方晶体的一些低指数点阵方向 $[uvw]$ 与孪晶的点阵方向 $[u'v'w']$ 间的平行关系. 由于点阵方向的指数一般取整数值, 略去由(2)式变换得出的 $[u'v'w']$ 的公共系数, 就得出与基体 $(uvw)^*$ 倒易点阵平面平行的孪晶倒易点阵平面 $(u'v'w')^*$. 显然, 这也就是电子束入射方向平行于 $[uvw]$ 时拍摄的基体的 $[uvw]$ 晶带及孪晶 $[u'v'w']$ 晶带电子衍射谱. 一般说来, $[u'v'w']$ 有四种可能, 但当 $[uvw]$ 有特殊取向时, $[u'v'w']$ 的数目小于此值. 对于 $[100]$ 取向, 四个 $\{111\}$ 孪晶呈对称分布, 因此只有一个独立的 $[u'v'w']$. 对于 $[111]$ 取向, $(1\bar{1}1)$, $(\bar{1}11)$, $(\bar{1}\bar{1}1)$ 三个孪晶是等价的, 因此只需要考虑 (111) 及 $(1\bar{1}1)$ 两种孪晶的 $[u'v'w']$. 对于 $[uv\bar{v}]$ 取向, 只考虑 (111) 及 $(1\bar{1}1)$ 两种孪晶就够了, 而当 $[uvw]$ 中有两个指数相同时, 则需要考虑三种孪晶关系.

从表 1 中列举的孪晶倒易面的指数 $(u'v'w')^*$ 可以看出, $u'^2 + v'^2 + w'^2$ 与 $u^2 + v^2 + w^2$ 相比有三种情况. 第一种情况是 $u'^2 + v'^2 + w'^2 = 9(u^2 + v^2 + w^2)$. 孪晶在 $[u'v'w']$ 方向的长度比基体在 $[uvw]$ 方向的长度大三倍, 因此孪晶的 $(u'v'w')^*$ 倒易面间距只有基体 $(uvw)^*$ 倒易面间距的三分之一. 换句话说, 基体的两个相邻的 $(uvw)^*$ 倒易点阵平面之间, 还夹有孪晶的两个 $(u'v'w')^*$ 倒易点阵平面. 显然, 这就会有三分之二的孪晶倒

表 1 面心立方晶体 $[uvw]$ 及与其平行的孪晶的 $[u'v'w']$ 及六角密堆相的 $[u'v'w']$,
黑体字表示与 $(uvw)^*$ 上倒易阵点不完全相重的情况

面心立方晶体 uvw	孪晶 $u'v'w'$ (略去公共系数)				六角密堆相 $u'v'w'$ (略去公共系数)			
	(111)	(1 $\bar{1}$ 1)	($\bar{1}$ 11)	($\bar{1}\bar{1}$ 1)	(111)	(1 $\bar{1}$ 1)	($\bar{1}$ 11)	($\bar{1}\bar{1}$ 1)
1 0 0	$\bar{1}$ 2 2	—	—	—	4 $\bar{4}$ 3	—	—	—
1 1 0	1 1 4	$\bar{1}$ $\bar{1}$ 0	—	—	4 2 3	0 1 0	—	—
1 1 1	1 1 1	1 5 $\bar{1}$	—	—	0 0 1	$\bar{8}$ 8 3	—	—
2 1 0	0 1 2	$\bar{4}$ 5 2	—	—	4 0 3	4 20 3	—	—
2 1 1	2 5 5	2 $\bar{7}$ 1	2 1 $\bar{1}$	—	1 $\bar{1}$ 3	2 8 3	$\bar{1}$ 2 0	—
2 2 1	4 4 7	$\bar{4}$ 8 1	—	0 0 $\bar{1}$	8 4 15	$\bar{8}$ 20 3	—	4 8 3
3 1 0	1 5 8	5 $\bar{7}$ 4	—	—	4 $\bar{1}$ 3	4 14 3	—	—
3 1 1	1 7 7	$\bar{1}$ 3 1	7 5 5	—	8 $\bar{8}$ 15	0 8 3	$\bar{16}$ 32 3	—
3 2 0	1 4 10	7 8 2	—	—	20 4 15	4 32 3	—	—
3 2 1	1 2 3	5 $\bar{10}$ 1	3 2 $\bar{1}$	1 2 $\bar{1}$ 1	2 0 3	2 14 3	$\bar{1}$ 3 0	5 7 3
3 2 2	5 8 8	$\bar{1}$ 4 0	$\bar{1}$ 1 4 4	—	4 $\bar{4}$ 21	$\bar{4}$ 8 3	20 40 3	—
3 3 1	5 5 11	7 $\bar{1}$ 1 1	—	1 1 $\bar{1}$ 3	16 8 21	$\bar{8}$ 32 3	—	16 32 $\bar{1}$ 5
3 3 2	7 7 10	5 $\bar{1}$ 3 2	—	$\bar{1}$ $\bar{1}$ $\bar{1}$ 4	2 1 6	$\bar{8}$ 14 3	—	5 10 3
4 1 0	2 7 10	2 3 2	—	—	20 $\bar{8}$ 15	4 12 3	—	—
4 1 1	0 1 1	4 $\bar{1}$ 1 5	8 $\bar{7}$ 7	—	2 $\bar{2}$ 3	1 8 3	$\bar{10}$ 20 3	—
4 2 1	2 8 11	2 $\bar{4}$ 1	$\bar{10}$ 8 5	2 4 $\bar{1}$ 3	16 $\bar{4}$ 21	0 4 1	$\bar{16}$ 44 3	28 32 $\bar{1}$ 5
4 3 0	2 5 14	$\bar{10}$ $\bar{1}$ 1 2	—	—	28 8 21	4 44 3	—	—
4 3 1	4 7 13	8 $\bar{1}$ 3 1	4 3 $\bar{1}$	0 1 5	5 1 6	2 20 3	$\bar{1}$ 4 0	4 6 3
4 3 2	2 3 4	2 5 0	$\bar{14}$ 7 4	2 1 $\bar{16}$	4 0 9	4 12 3	20 52 3	28 44 $\bar{1}$ 5
4 3 3	8 11 11	4 $\bar{1}$ 7 $\bar{1}$	$\bar{16}$ 5 5	—	2 $\bar{2}$ 15	5 8 3	$\bar{14}$ 28 3	—
4 4 1	2 2 5	$\bar{10}$ $\bar{14}$ $\bar{1}$	—	2 2 $\bar{1}$ 7	8 4 9	8 44 3	—	20 40 $\bar{2}$ 1
4 4 3	10 10 13	2 6 $\bar{1}$	—	2 $\bar{2}$ $\bar{1}$ 9	8 4 33	8 12 3	—	28 56 $\bar{1}$ 5

易阵点不可能与基体的倒易阵点相重,而其余的三分之一的孪晶倒易阵点(属于 $Hh + Kk + Ll = 3n$ 型)一定要全部与基体的倒易阵点相重. 图 2 是以(111)为孪晶面的两个晶体的倒易点阵平面示意图. 如晶体 I 是基体,晶体 II 是孪晶,则孪晶的(114)*倒易点阵平面上约化胞的面积比基体的(110)*平面约化胞加大了三倍,倒易点阵数目相应减少,但全部与基体的倒易阵点相重. 反之,如晶体 II 是基体,晶体 I 是孪晶,则孪晶的(110)*平面约化胞的面积比基体的(114)*平面约化胞减小了三倍,倒易阵点数目相应增多,只有三分之一与基体的倒易阵点相重,其它三分之二则否. 这就是 $u'^2 + v'^2 + w'^2 = \frac{1}{9}(u^2 + v^2 + w^2)$ 的情况. 应当指出,两个晶体互为孪晶构成一个统一体,实无基体与孪晶之分. 倒易点阵平面约化胞面积的增大或减小也是相对而言的,朝一个方向变化是增大,朝反方向变化就是减小. 在后一种情况下,孪晶 $(u'v'w')^*$ 倒易面上的阵点数目增多,其中只有一部分与基体的倒易阵点相重. 换句话说,基体与孪晶的电子衍射谱不同,孪晶的 $u'v'w'$, 在表 1 中用黑体字表示.

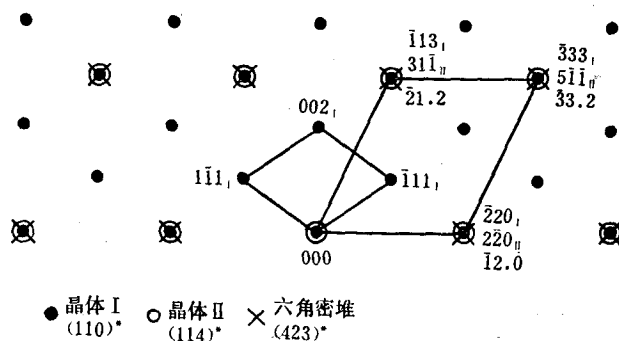


图 2 两个互为孪晶的晶体以及六角密堆相的倒易点阵平面

在 $u'^2 + v'^2 + w'^2 = u^2 + v^2 + w^2$ 的情况下,孪晶的 $(u'v'w')^*$ 与基体的 $(uvw)^*$ 不但倒易面间距相同,倒易平面约化胞的面积也相等. 一般说来,基体与孪晶的衍射谱是不相重的,在表 1 中也用黑体字表示. 但是,由于立方晶系的对称性很高,偶然重合的现象还是存在的. 除众所熟知的基体与孪晶有相重的 $[111]$ 或 $[211]$ 晶带衍射谱外,基体的 $[441]$ 晶带与孪晶的 $[225]$ 晶带衍射谱也完全相重. 这就要进一步检验 $(uvw)^*$ 及 $(u'v'w')^*$ 两个倒易面上距中心最近的两个倒易阵点的指数. 如 $(441)^*$ 上的 $2\bar{2}0$ 及 $20\bar{8}$ 倒易阵点经 T_{111} 操作变换成 $\bar{2}20$ 及 $\bar{6}44$ 阵点,这正是孪晶 $(225)^*$ 上两个最近的倒易阵点应有的指数. 这种偶合除了要求两个倒易面上的平面约化胞有相同的大小和形状外,还应满足上述孪晶关系.

二、六角密堆结构

在面心立方的 ABCABC... 堆垛顺序中,每两层引入一个 $\frac{1}{6}\langle 112 \rangle$ 的滑移,就会产生六角密堆结构的 ABAB... 顺序. 六角点阵的初基矢 a', b' 在面心立方点阵 $\{111\}$ 面的 $\langle 110 \rangle$ 方向 ($a' = b' = a/\sqrt{2}$),而初基矢 c' 则与 $\langle 111 \rangle$ 平行 ($c' = 2a/\sqrt{3}$). 在 (111)

面上生成六角密堆结构 (晶轴比 $c'/a' = \sqrt{8/3}$) 的点阵对应关系是

$$\begin{aligned} [100]_{HCP} &= \frac{1}{2} [10\bar{1}]_{FCC}, & [010]_{HCP} &= \frac{1}{2} [\bar{1}10]_{FCC}, \\ [001]_{HCP} &= \frac{2}{3} [111]_{FCC}; \end{aligned}$$

对应矩阵是

$$C_{III} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 3 & 0 & \bar{3} \\ \bar{3} & 3 & 0 \\ 4 & 4 & 4 \end{pmatrix}, \quad C_{III}^{-1} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 4 & \bar{4} & 3 \\ 4 & 8 & 3 \\ \bar{8} & \bar{4} & 3 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

指数变换关系是

$$u' = \tilde{C}^{-1}u, \quad (4)$$

$$h = C^{-1}h', \quad (5)$$

其中 u' , h' 分别是六角点阵的点阵方向指数及点阵平面指数列矩阵. 对于四个 $\{111\}$ 面上生成六角密堆结构的具体指数变换矩阵是

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{III}^{-1} &= \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 4 & 4 & \bar{8} \\ \bar{4} & 8 & \bar{4} \\ 3 & 3 & 3 \end{pmatrix}, & \tilde{C}_{III}^{-1} &= \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 4 & \bar{4} & \bar{8} \\ 8 & 4 & \bar{4} \\ 3 & \bar{3} & 3 \end{pmatrix}, \\ \tilde{C}_{III}^{-1} &= \frac{1}{6} \begin{pmatrix} \bar{4} & 4 & \bar{8} \\ \bar{8} & \bar{4} & \bar{4} \\ \bar{3} & 3 & 3 \end{pmatrix}, & \tilde{C}_{III}^{-1} &= \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 8 & \bar{4} & 4 \\ 4 & 4 & 8 \\ \bar{3} & \bar{3} & 3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6)$$

从(3)式中的 C_{III}^{-1} 及(5)式得

$$\begin{aligned} h &= \frac{2}{3} (h' - k') + \frac{1}{2} l', \\ k &= 2k' + \frac{2}{3} (h' - k') + \frac{1}{2} l', \\ l &= -2h' + \frac{2}{3} (h' - k') + \frac{1}{2} l'. \end{aligned}$$

把六角密堆结构的消光条件 (当 $h' - k' = 3n$ 时, $l' = 2m$, $h'k'l'$ 衍射的强度才不为零) 代入上式得

$$\begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2n + m \\ 2k' + 2n + m \\ -2h' + 2n + m \end{pmatrix};$$

当 m 为奇数时, h, k, l 全为奇数, 而当 m 为偶数时全为偶数. 由此可见, 当 $h' - k' = 3n$ 时, 六角点阵的 $h'k'l'$ 倒易阵点与面心立方的 hkl 倒易阵点相重. 而当 $h' - k' \neq 3n$ 时, 六角点阵的倒易阵点与面心立方点阵的一个倒易阵点的偏离是 $\pm \frac{1}{6}[111]$ 或 $\pm \frac{1}{3}[111]$, 具体分布如图 1 所示. 对于其它三个 $\{111\}$ 面上生成六角密堆相的情况, 也可进行类似分析, 得出 $h' - k' = 3n$ 是六角密堆相倒易阵点与面心立方点阵的倒易阵点相重条件.

如果

$$\begin{cases} u' = 3n_1 + 1 \\ v' = 3n_2 - 1 \end{cases} \text{ 或 } \begin{cases} u' = 3n_1 - 1 \\ v' = 3n_2 + 1 \end{cases} \quad (7)$$

(也就是 $u', v' \neq 3n$, 而 $u' + v' = 3n$), 从晶带定律可得

$$h'u' + k'v' + l'w' = 3(n_1h' + n_2k') \pm (h' - k') + l'w' = 0. \quad (8)$$

从(4)式及(6)式可以看出, w' 恒为 3 的倍数(除非 u', v', w' 同时为 3 的整数倍而约掉), 因此只有当 $h' - k' = 3n$ 时, (8)式才成立. 换句话说, 当 u', v' 满足(7)式时, 符合晶带定律的 $h'k'l'$ 倒易阵点都与面心立方点阵的一个倒易阵点相重, 否则就不相重. 因此, 只要将面心立方晶体的 $[uvw]$ 变换成六角点阵的 $[u'v'w']$ 并略去公共系数后, 从 u', v' 的具体指数就可以直接判断 $(uvw)^*$ 及 $(u'v'w')^*$ 两个倒易面上的倒易阵点是否相重, 不相重的 $(u'v'w')^*$ 在表 1 中也用黑体字表示.

从表 1 可以明显地看出, 六角密堆结构的许多倒易点阵平面与基体的一个倒易点阵平面相重, 并且它们出现的规律又几乎与李晶中的情况完全一致. 不仅如此, 六角密堆结构的这些倒易点阵平面还与李晶的相应倒易点阵平面完全相重, 如图 2 中六角密堆结构的 $(423)^*$ 就与互为李晶关系的两个面心立方晶体的 $(110)^*$ 和 $(114)^*$ 完全相重. 这是因为当 $Hh + Kk + Ll$ 及 $h' - k'$ 都等于 $3n$ 时, 面心立方晶体、李晶以及六角密堆结构的倒易阵点完全相重(见图 1). 这种规律还适用于长周期密排结构, 例如堆垛顺序为 ABACABAC... 的 4H 型或 ABCBCACAB... 的 9R 型结构, 因为只有 $h' - k' \neq 3n$ 的倒易点列上出现新的倒易阵点, 而 $h' - k' = 3n$ 的倒易点列仍与面心立方晶体的倒易点列相同^[9].

六角密堆结构的 $(001)^*$ 及 $(041)^*$ 与基体的相应倒易点阵平面不同, 而相应的李晶 $(111)^*$ 及 $(\bar{2}41)^*$ 则与基体相同(见表 1), 这是由于后者属于立方晶系中的偶合情况. 在六角密堆结构中, 这两个倒易点阵平面上都包含 $[100]^*$ 或 $[010]^*$ 方向, 它与基体的 $\langle 22\bar{4} \rangle^*$ 平行, 但阵点排列较后者密三倍(图 1). $[100]^*$ 及 $[010]^*$ 都是六角密堆结构的特征倒易点列, 应尽可能选包含这种点列的倒易点阵平面用以鉴定六角密堆相的存在与否.

三、结 论

1. 用指数变换矩阵(2)及(6)式将面心立方晶体的晶带轴 $[uvw]$ 变换成李晶的 $[u'v'w']$ 及六角密堆结构的 $[u'v'w']$ 并略去公共系数后, 就可从这些指数直接判断它们的电子衍射谱是否完全相重.

2. 李晶与面心立方晶体有相重电子衍射谱的条件是: $u'^2 + v'^2 + w'^2 = 9(u^2 + v^2 + w^2)$, 以及 $u'^2 + v'^2 + w'^2 = u^2 + v^2 + w^2$ 时的一些偶合情况.

3. 六角密堆结构与面心立方晶体有相重电子衍射谱的条件是: $u', v' \neq 3n$, 而 $u' + v' = 3n$.

4. 在面心立方晶体的低指数晶带 ($u, v, w \leq 4$) 电子衍射谱中, 约有 80% 的李晶或六角密堆结构的电子衍射谱与其相重. 这么高的重合情况可能与李晶及六角密堆结构的晶带轴指数较高有关. 在电子衍射分析中应充分注意这种不唯一性.

参 考 文 献

- [1] R. D. Burbank, R. D. Heidenreich, *Phil. Mag.*, **5** (1960), 373.
- [2] D. W. Pashley, M. J. Stowell, *Phil. Mag.*, **8** (1963), 1605.
- [3] A. G. Crocker, *Trans. Amer. Inst. Min. Met. Engrs.*, **230** (1964), 597.
- [4] R. Bullough, C. M. Wayman, *Trans. Amer. Inst. Min. Met. Engrs.*, **236** (1966), 1704.
- [5] C. J. Calbick, R. B. Marcus, *Acta Cryst.*, **23** (1967), 12.
- [6] I. Saxl, *Czech. J. Phys.*, **B17** (1967), 586.
- [7] F. Wihelm, *J. Appl. Cryst.*, **4** (1971), 521.
- [8] H. J. Kestenbach, *Metallography*, **10** (1977), 189.
- [9] H. Sato, R. S. Toth, G. Honjo, *J. Phys. Chem. Solids*, **28** (1967), 137.

ELECTRON DIFFRACTION ANALYSIS OF THE TWIN AND HCP PHASE FORMED IN A FCC CRYSTAL

GUO KE-XIN

(Institute of Metal Research, Academia Sinica)

ABSTRACT

1. After transforming the zone axis $[uvw]$ of a FCC crystal into $[u'v'w']$ of its twin or $[u'v'w']$ of the HCP phase formed in it, it is possible to recognize immediately from these indices whether the electron diffraction pattern of the latter is distinct from that of the former.

2. The condition for the twin to have a non-distinct pattern is:

$$u'^2 + v'^2 + w'^2 > u^2 + v^2 + w^2.$$

3. The condition for the HCP phase to have a non-distinct pattern is:

$$u', v' \neq 3n, u' + v' = 3n.$$

4. As far as the low zone indices ($u, v, w \leq 4$) electron diffraction patterns of a FCC crystal are concerned, approximately 80% of the twin or HCP phase are not discernible by electron diffraction analysis.