

有简单取向关系的两晶体间电子衍射图相重的规律*

叶 恒 强

(中国科学院金属研究所)

提 要

有简单取向关系的两个晶体在倒易空间中有部分倒易点相重。仅由相重倒易点构成的倒易面所对应的电子衍射图必定被基体的衍射斑点所覆盖。给出判定第二相相重电子衍射图晶带轴指数的方法,用此方法考察了立方晶体与孪晶、六角密堆相和 ω 相等衍射图相重的情况。

在有简单取向关系的两晶体复合电子衍射图中,两晶体的衍射斑点有时完全相重,这样就不容易鉴别是否有两相共存。如在面心立方晶体、孪晶及六角密堆相^[1-3],体心立方和六角 ω 相^[4],硬磁材料六角 SmCo_5 和六角 Sm_2Co_7 , $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ 及菱形 Sm_2Co_7 , $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ 之间^[5]等,都经常观察到这种情况。郭可信^[6]从倒易空间中两晶体倒易点相重的指数分析,找出它们的电子衍射图相重的规律。Santoro 和 Mighell^[7]从晶体学诱导点阵的角度,分析讨论了两个穿插点阵相重的阵点构成超点阵的几何关系。两晶体间电子衍射图相重,实际上就是其中一个晶体的倒易面上倒易点配置成为另一晶体平行倒易面上的一个超点阵。本文试图确立满足上述条件的倒易面指数规律,并按所得规律分析了几个重要的例子。

一、原 理

设基体坐标基矢 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$, 第二相坐标基矢 $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \mathbf{A}_3$, 它们之间的转换关系为

$$\mathbf{A}_i = \sum_j \mathcal{S}_{ij} \mathbf{a}_j \quad (i, j = 1, 2, 3), \quad (1)$$

$\mathcal{S}$ 矩阵表示确定的取向关系。第二相点阵平面指数(HKL)与基体的点阵平面指数(hkl)变换关系为

$$\mathbf{h} = \mathcal{T} \mathbf{H}, \quad (2)$$

其中 $\mathcal{T} = \mathcal{S}^{-1}$; $\mathbf{h}, \mathbf{H}$ 均为列矩阵。一般来说矩阵元素 T_{ij} 不一定是整数,为使 T_{ij} 为整数,就需要在矩阵 $\mathcal{T}$ 前置一系数 $1/D$, D 是整数。

在取向关系比较简单的情况下, $\mathcal{S}_{ij}$ 和 T_{ij} 多为整数。在空间点阵中,两相阵点有较大的几率相重。在倒易空间也是如此。我们如果知道相重倒易点在第二相坐标中的指数 HKL , 由它们,而且仅仅由它们所构成的倒易面 (UVW)* 自然不会有跟基体不相重的第

* 1978年4月10日收到。

二相倒易点,所以相应的 $[UVW]$ 晶带电子衍射图的衍射斑点必定全部与基体相重. 我们的任务是: (i)找出哪些 HKL 与基体倒易点相重; (ii)确定仅由相重倒易点 HKL 构成的倒易面 $(UVW)^*$ 的指数.

将(2)式写开:

$$T_{11}H + T_{12}K + T_{13}L = Dh, \quad (2-1)$$

$$T_{21}H + T_{22}K + T_{23}L = Dk, \quad (2-2)$$

$$T_{31}H + T_{32}K + T_{33}L = Dl. \quad (2-3)$$

由此可见,将第二相的某一个 HKL 倒易点用基体倒易空间的坐标描述,由于矩阵 $\mathcal{T}$ 前面的系数所限制, hkl 一般不是整数,这意味着第二相的这个 HKL 倒易点不与基体的倒易点相重. 仅当 hkl 为整数时,它们才相重. 因此任务(i)就归结为在(2-1), (2-2), (2-3)式中令 h, k, l 均为整数. 上述三个式子可归纳为广义晶带定律的表述:

$$\mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_i = Dn \quad (i = 1, 2, 3). \quad (3)$$

上式中 $\mathbf{g}$ 为 HKL 点阵平面的倒易矢量, $\mathbf{r} = T_{11}\mathbf{A}_1 + T_{12}\mathbf{A}_2 + T_{13}\mathbf{A}_3$. 还可调整 n 来约化(3)式,使

$$\begin{aligned} \frac{2-D}{2} \leq T_{ij} \leq \frac{D}{2} \quad D \text{ 为偶数,} \\ \frac{1-D}{2} \leq T_{ij} \leq \frac{D-1}{2} \quad D \text{ 为奇数.} \end{aligned} \quad (4)$$

得

$$T_{i1}H + T_{i2}K + T_{i3}L = Dn \quad (i = 1, 2, 3). \quad (5)$$

我们考虑仅由相重倒易点 HKL 构成的倒易面 $(UVW)^*$ 上一个最小平行四边形, 它的两边为 $\mathbf{g}_1(H_1K_1L_1)$, $\mathbf{g}_2(H_2K_2L_2)$. $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2$ 应满足

$$\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{r}_i = Dh_{i1}, \quad \mathbf{g}_2 \cdot \mathbf{r}_i = Dh_{i2}. \quad (6)$$

与 $(UVW)^*$ 倒易面正交的晶带轴 $\mathbf{U}$ 是

$$\mathbf{U} = V(\mathbf{g}_1 \times \mathbf{g}_2),$$

式中 $V = \mathbf{A}_1 \cdot (\mathbf{A}_2 \times \mathbf{A}_3)$ 是正空间中第二相基胞的体积. 这样

$$\begin{aligned} \frac{1}{V}(\mathbf{r}_i \times \mathbf{U}) &= \mathbf{r}_i \times (\mathbf{g}_1 \times \mathbf{g}_2) = \mathbf{g}_1(\mathbf{g}_2 \cdot \mathbf{r}_i) - \mathbf{g}_2(\mathbf{g}_1 \cdot \mathbf{r}_i) \\ &= Dh_{i2}(H_1\mathbf{A}_1^* + K_1\mathbf{A}_2^* + L_1\mathbf{A}_3^*) - Dh_{i1}(H_2\mathbf{A}_1^* + K_2\mathbf{A}_2^* + L_2\mathbf{A}_3^*) \\ &= D(n_1\mathbf{A}_1^* + n_2\mathbf{A}_2^* + n_3\mathbf{A}_3^*), \end{aligned} \quad (7)$$

式中

$$n_1 = h_{i2}H_1 - h_{i1}H_2, \quad n_2 = h_{i2}K_1 - h_{i1}K_2, \quad n_3 = h_{i2}L_1 - h_{i1}L_2. \quad (8)$$

n_1, n_2, n_3 都是整数,展开得

$$\begin{aligned} T_{i2}W - T_{i3}V &= Dn_1, \quad T_{i3}U - T_{i1}W = Dn_2, \\ T_{i1}V - T_{i2}U &= Dn_3, \quad \text{而 } U, V, W \text{ 不同时等于 } Dn \quad (i = 1, 2, 3). \end{aligned} \quad (9)$$

这就是与基体衍射点相重的第二相衍射图的晶带轴指数判据.

在一般情况下,判据式包括三组九个式子. 关于(9)式的讨论参看附录,主要结果是:

(i) 从(2)式单式使用到(8), (9)式,当 h_i 为整数, n_1, n_2, n_3 必然是整数,而且反过来, n_1, n_2, n_3 都是整数,则 h_i 也必然是整数. 所以(9)式的判据是必要的,也是充分的.

(ii) 当 i 已经取定后, (9) 式的三个式子不是无关的. 例如, 用 T_{ii} 乘 (9-1), T_{ii} 乘 (9-2) 式后两式相加可得 (9-3) 式. 所以 (9) 式一组三式只需选用一组两式便可. 当 T_{ii} 均不等于 D_n 时, (9) 式三个中任取两个即可. 当 $T_{ii} = D_n$ 时, 那么不包含 T_{ii} 的 (9-1) 式必须选用, 再在 (9-2), (9-3) 中任选一个式子. T_{ii} 或 T_{jj} 为 D_n 时类推. 这样, (9) 式判据包括三组六个式子便可.

(iii) 如果 (2-1), (2-2), (2-3) 式经约化后有两个或三个一样, 那么只取两个式子或一个式子便可, 最后使 (9) 式判据只需二组四个或一组两个式子. 二、三、四、五节都是后者的情况.

(iv) 上面讨论只是限于简单点阵. 对于有心点阵, 一般需要先将其变换到简单点阵进行考虑. 这是比较繁琐的. 在第二相为简单点阵, 仅基体为有心点阵时, 可按下述处理. 点阵消光可表示为: ①体心 $h+k+l=2n$; ②面心 $h+k=2n, k+l=2n$; ③底心 $h+k=2n$; ④菱形 (用六角坐标表示) $-h+k+l=3n$ (正放) 或 $h-k+l=3n$ (倒放). 我们将未经约化的 (2) 式按上述点阵消光的要求组合为一个新的式子, 命名为 (2-4) 式, 由此得到 (9) 式的第 4 组判别式, 作为新的制约条件. 下面第三、四节中, 这样的 (2-4) 式全等于约化后的归并式子, 所以无新的限制. 对于立方晶体有心点阵的旋转问题, 点阵消光也不会提出新的限制, 第二、五节就是这种情况.

二、立方晶体的孪晶

面心立方晶体 (111) 孪晶的基矢转换矩阵^[8]

$$\mathcal{S} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \bar{1} & 2 & 2 \\ 2 & \bar{1} & 2 \\ 2 & 2 & \bar{1} \end{pmatrix},$$

$\mathcal{S} = \mathcal{S}^{-1} = \mathcal{S}$, 这时 $D = 3$. 从 (2-1), (2-2), (2-3) 式按 (4) 式约化都得到

$$H + K + L = 3n.$$

面心立方晶体其他三个 {111} 孪晶及体心立方晶体的 12 个 {112} 孪晶的基矢转换矩阵已由文献 [8] 给出, 按 (4), (5) 式可得

$$pH + qK + rL = 3n. \quad (10)$$

式中 pqr 是孪生面指数. 所以

$$qW - rV = 3n_1, \quad rU - pW = 3n_2, \quad \text{而 } U, V \text{ 及 } W \approx 3n. \quad (11)$$

这就是孪晶衍射图的斑点全部与基体的相重的判定条件.

为了阐述 (10) 式的晶体学含义, 有必要展示面心立方、体心立方晶体与其孪晶的复合倒易点阵, 作形象的说明. 关于立方晶体与其孪晶的复合倒易点阵的模型, 已有一些作者进行过讨论^[1,9,10]. 为了分析两相间的诱导超点阵, 我们将立方晶体用三角坐标轴和六角坐标轴来描述.

面心立方晶体的倒易点阵既可以用一个体心立方点阵描述 (基矢 a_1^*, a_2^*, a_3^*), 也可用一个菱形点阵描述:

$$a_{R_1}^* = a_1^* + a_2^* - a_3^*, \quad a_{R_2}^* = -a_1^* + a_2^* + a_3^*, \quad a_{R_3}^* = a_1^* - a_2^* + a_3^*.$$

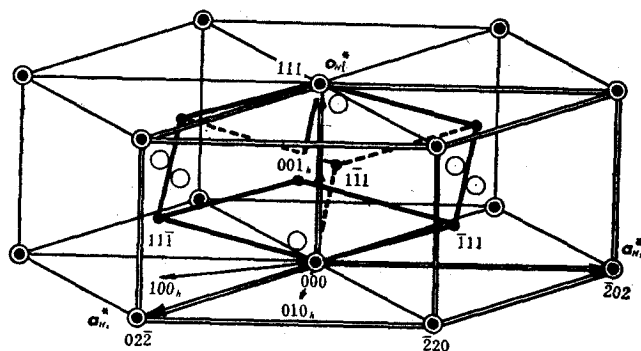


图1 面心立方晶体及其孪晶在倒易空间中的诱导超点阵

●为基体倒易点; ○为孪晶倒易点

点阵常数 $a_R^* = \sqrt{3} a^*$, $\alpha^* = 109.47^\circ$, 单胞如图1中粗线所示。这个菱形点阵也可以看作是三重六角点阵, 坐标基矢是

$$a_{H_1}^* = 2a_2^* - 2a_3^*, \quad a_{H_2}^* = -2a_1^* + 2a_3^*, \quad c_H^* = a_1^* + a_2^* + a_3^*.$$

它的单胞如图1中双线所示。当面心立方晶体在(111)面产生孪晶时, 基体倒易点阵绕[111]轴转180度。这时三重六角点阵中的一个简单六角点阵, 即图1中用双线勾划出一个单胞所代表的六角点阵, 将与自己相重, 成为面心立方晶体与(111)孪晶在倒易空间中的诱导超点阵。而三重六角点阵中其他两个简单六角点阵, 由于与旋转轴相重的是三次轴而不是六次轴, 因此各不相重。孪晶有三分之一的倒易点与基体倒易点相重, 它们都坐落在 $3n$ 层的(111)*倒易面上, 满足(10)式关系。对图1来说(pqr)为(111), 其余 $\{111\}$ 孪晶类推。

体心立方晶体的孪生面是 $\{112\}$, 有12种可能。但由于立方系的对称性最高, 一个 $\{111\}$ 面与三个 $\{112\}$ 面垂直, 而且其截线 $\langle 110 \rangle$ 又是二次旋转对称轴, 所以体心立方 $\{112\}$ 孪晶与 $\{111\}$ 孪晶从空间模型来说是等效的, 也只有四种。在倒易空间中, 也是如此。体心立方晶体的倒易点阵是面心立方点阵(基矢 a_1^*, a_2^*, a_3^*), 用菱形点阵描述, 基矢为 $a_{R_1}^* = a_1^* + a_2^*, a_{R_2}^* = a_2^* + a_3^*, a_{R_3}^* = a_1^* + a_3^*$; 点阵常数为 $a_R^* = \sqrt{2} a^*, \alpha^* = 60^\circ$, 单胞如图2中粗线所示。这个菱形点阵也可用三重六角点阵来描述, 基矢为 $a_{H_1}^* = a_2^* - a_3^*, a_{H_2}^* = -a_1^* + a_3^*, c_H^* = 2a_1^* + 2a_2^* + 2a_3^*$ 。在图2中用双线勾划出六角点阵的一个单胞。图2和图1的配置是完全类似的, 只不过图2是图1在[111]方向均匀地拉长而成, 这正是它们互为倒易的关系所要求的。体心

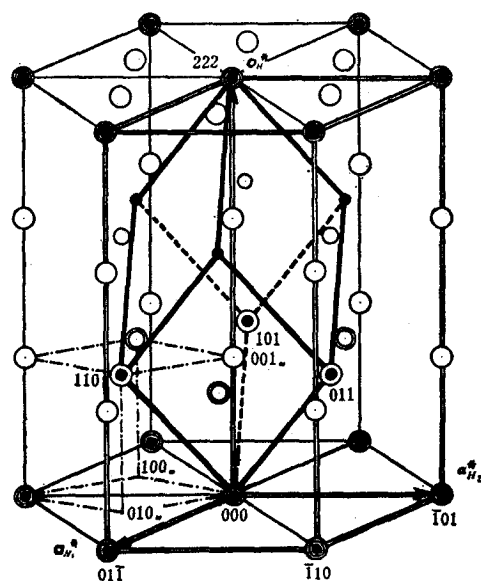


图2 体心立方晶体及其孪晶在倒易空间中的诱导超点阵

●为基体倒易点; ○为孪晶倒易点;
○为六角 ω 相倒易点

立方的 $\{112\}$ 孪晶也相当于在 $\langle 111 \rangle$ 的三次轴上再加上一个二次轴,使基体与孪晶的复合点阵有一个六次轴。孪晶倒易点有三分之一与基体相重,相重倒易点构成如图2双线所勾划出的六角诱导超点阵。超点阵的棱柱面,即孪晶坐标轴的 $\{112\}^*$ 倒易面,所以孪晶相重倒易点 HKL 可看成是按 $\{112\}^*$ 倒易面的 $3n$ 层堆垛,即满足(10)式关系。对于图2来说,(10)式的 (pqr) 是 $(\bar{2}11)$, $(1\bar{2}1)$, $(11\bar{2})$,对于其他 $\{112\}$ 孪晶,也可作类似分析。

将基体 $u, v, w \leq 4$ 的晶带轴变换到四种 $\{111\}$ 孪晶中去的平行孪晶晶带轴的指数已列于文献[6]的表中,那里孪晶电子衍射图相重的晶带轴指数都符合(11)式的关系。

三、面心立方晶体与六角密堆相

面心立方晶体 $\{111\}$ 面上生成的六角密堆晶体的取向关系参阅文献[1,2,6],以(111)面为例,

$$\mathcal{S} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 3 & 0 & \bar{3} \\ \bar{3} & 3 & 0 \\ 4 & 4 & 4 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{T} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 4 & \bar{4} & 3 \\ 4 & 8 & 3 \\ \bar{8} & \bar{4} & 3 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

按(4),(5)式,相重倒易点符合

$$-2H + 2K + 3L = 6n \quad (13)$$

的关系。相重衍射图的晶带轴指数判据为

$$2W - 3V = 6n_1, \quad 3U + 2W = 6n_2, \quad \text{且 } U, V \text{ 及 } W \approx 6n. \quad (14)$$

将六角密堆相的倒易基矢画在图1,扣除消光点 $H - K = 3n, L = 2n + 1$ 之后,可以看到六角密堆相与面心立方晶体在倒易空间的诱导超点阵也就是双线勾划出的六角点阵,与孪晶的诱导超点阵相重。超点阵的阵点指数为 $H - K = 3n, L = 2n$,所以考虑消光条件后(13)式对 L 的奇偶属性不加限制,变为

$$H - K = 3n. \quad (15)$$

相重衍射图的晶带轴指数判据为

$$U + V = 3n_1, \quad W = 3n_2, \quad \text{且 } U, V \approx 3n. \quad (16)$$

(16)式已为郭可信^[6]得到。有关基体 $u, v, w \leq 4$ 晶带轴变换到四种 $\{111\}$ 面生成的六角密堆相平行的晶带轴指数,也请参阅文献[6]中的表。由于面心立方晶体、孪晶和六角密堆相有同一诱导超点阵,所以相重或不相重衍射图晶带轴指数在文献[6]的表中出现的位置基本对应。

四、体心立方晶体与六角 ω 相

钛、锆、钽合金的高温体心立方 β 相在冷却时发生六角 ω 相的转变。 ω 相的点阵常数为 $a_\omega = \sqrt{2} a_\beta, c_\omega = \frac{\sqrt{3}}{2} a_\beta$; β 相与 ω 相的取向关系为 $(111)_\beta // (001)_\omega, (2\bar{1}\bar{1})_\beta // (100)_\omega$ 。有人作X射线衍射分析曾认为 ω 相具有点阵常数比 β 相大三倍的体心立方点阵^[11,12], ω 相的 $(1\bar{1}2)^*$ 倒易面又显示出四次对称的二维点列^[13],在 β 相四个 $\{111\}$ 面生成的四种取

向不同的六角 ω 相的衍射图叠加经常会组成 β 相衍射图的三分之一小网格^[14]. 这些现象说明由于六角 ω 相的点阵常数与 β 相有密切关系, 而且取向关系又很简单, 必然使六角 ω 相的倒易点有较大的几率与 β 相的倒易点相重.

在 (111) 面转变的 ω 相基矢转换矩阵为^[15]

$$\mathcal{S} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & \bar{2} & 0 \\ 0 & 2 & \bar{2} \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{T} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 \\ \bar{1} & 1 & 2 \\ \bar{1} & \bar{2} & 2 \end{pmatrix}. \quad (17)$$

在其余三个 {111} 面上, 相应的转换矩阵为

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{(1\bar{1}1)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 2 \\ \bar{2} & \bar{2} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{T}_{(1\bar{1}1)} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{2} & 2 \\ 1 & \bar{1} & \bar{2} \\ 2 & 1 & 2 \end{pmatrix}; \\ \mathcal{S}_{(11\bar{1})} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ \bar{2} & 0 & \bar{2} \\ \bar{1} & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{T}_{(11\bar{1})} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & \bar{1} & \bar{2} \\ 2 & 1 & 2 \\ \bar{1} & \bar{2} & 2 \end{pmatrix}; \\ \mathcal{S}_{(\bar{1}11)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \bar{2} & 2 & 0 \\ 0 & \bar{2} & \bar{2} \\ \bar{1} & \bar{1} & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{T}_{(\bar{1}11)} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} \bar{2} & \bar{1} & \bar{2} \\ 1 & \bar{1} & \bar{2} \\ \bar{1} & \bar{2} & 2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (18)$$

按 (4), (5) 式得出相重倒易点满足

$$H - K + L = 3n \quad (19)$$

关系. 相重衍射图晶带轴指数判据为

$$U + V = 3n_1, \quad V + W = 3n_2, \quad U, V \text{ 及 } W \approx 3n. \quad (20)$$

按 (17), (18) 式将基体 $[uvw]$ 晶带轴指数变换为 ω 相晶带轴指数, 根据 (20) 式判定, 与基体衍射图不相重的用黑斜体字表示, 列于表 1. 一个例外的情况是 $[001]$, 那里由于 ω 相的禁止衍射 $h - k \approx 3n, l = 0$ 的倒易点不能通过二次衍射显现出来, 所以该取向的 ω 相衍射图也被完全覆盖. ω 相的倒易点阵也在图 2 画出, 其单胞用点划线勾出. 很明显, 由于倒易空间中体心立方的倒易点阵与六角 ω 相倒易点阵的诱导超点阵也就是体心立方的倒易点阵本身, 换言之, 基体倒易点全部与 ω 相倒易点相重. 从这里也可以得出 (19) 式的关系. 并且由于体心立方与孪晶的诱导超点阵是体心立方与六角 ω 相的诱导超点阵的一部分, 所以相重或不相重衍射图晶带轴指数在文献 [6] 的表中及本文表 1 中出现的位置, 也有着较好的对应.

从统计得出, 体心立方晶体与六角 ω 相单晶电子衍射图相重几率, 对单取向为 70% 以上, 对四种取向的迭加仍在三分之一以上. 当然, 因为 ω 相通常比从面心立方转变的六角密堆相要细小弥散, 所以选区电子衍射图经常是四种取向的衍射图叠加, ω 相衍射图被基体覆盖的几率不太大. 另外对于合金化程度较高的钛、锆合金, ω 相的电子衍射图常伴随着衍射条纹^[16,17], 较易辨认. 所以从电子衍射图中漏掉 ω 相存在的现象不如孪晶、六角密堆相那样严重.

表 1

基体晶带轴	ω 相				面心立方二次 孪晶 $T_{111}/111$
	(111)	(1 $\bar{1}$ 1)	($\bar{1}$ 11)	($\bar{1}\bar{1}$ 1)	
1 0 0	2 1 2	$\bar{1}$ $\bar{2}$ 2	1 $\bar{1}$ 2	2 $\bar{1}$ 2	1 $\bar{4}$ $\bar{8}$
1 1 0	1 2 4	0 $\bar{1}$ 0	1 0 0	$\bar{1}$ 2 4	5 $\bar{1}\bar{1}$ 4
1 1 1	0 0 1	1 $\bar{1}$ 1	1 $\bar{1}$ 1	$\bar{1}$ 2 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 5 $\bar{1}$
2 1 0	1 $\bar{1}$ 2	$\bar{1}$ 5 2	4 $\bar{1}$ 2	1 1 2	8 $\bar{15}$ $\bar{60}$
2 1 1	2 1 8	1 $\bar{4}$ 4	1 $\bar{1}$ 0	4 5 4	0 $\bar{19}$ $\bar{9}$
2 2 1	1 2 10	2 5 2	5 $\bar{2}$ 2	$\bar{1}$ $\bar{2}$ $\bar{2}$	2 $\bar{26}$ 7
3 1 0	5 4 8	2 7 4	5 $\bar{2}$ 4	5 4 8	7 $\bar{19}$ $\bar{20}$
3 1 1	2 1 5	0 $\bar{1}$ 1	2 $\bar{2}$ $\bar{1}$	$\bar{1}$ $\bar{1}$ $\bar{1}$	1 $\bar{23}$ $\bar{19}$
3 2 0	4 5 10	$\bar{1}$ 8 2	7 $\bar{1}$ 2	4 5 $\bar{10}$	11 $\bar{26}$ $\bar{16}$
3 2 1	1 $\bar{1}$ 4	1 7 4	2 $\bar{1}$ 0	5 7 8	1 $\bar{10}$ $\bar{5}$
3 2 2	2 1 14	1 $\bar{2}$ 2	5 5 2	2 3 2	5 $\bar{34}$ $\bar{14}$
3 3 1	1 2 7	1 4 1	4 $\bar{1}$ 1	2 4 5	7 $\bar{37}$ $\bar{11}$
3 3 2	1 2 16	4 7 4	7 4 4	5 $\bar{10}$ 8	$\bar{1}$ $\bar{41}$ $\bar{10}$
4 1 0	7 5 10	$\bar{1}$ $\bar{3}$ 2	2 $\bar{1}$ $\bar{2}$	7 5 $\bar{10}$	8 $\bar{23}$ $\bar{28}$
4 1 1	2 $\bar{1}$ 4	$\bar{1}$ 8 8	5 5 4	8 7 8	0 $\bar{1}$ $\bar{1}$
4 2 1	5 4 14	0 $\bar{3}$ 2	7 4 2	7 8 $\bar{10}$	4 $\bar{34}$ $\bar{23}$
4 3 0	5 7 14	$\bar{1}$ $\bar{1}\bar{1}$ 2	10 $\bar{1}$ 2	5 7 $\bar{14}$	16 $\bar{37}$ $\bar{20}$
4 3 1	4 5 16	1 $\bar{10}$ 4	3 $\bar{1}$ 0	2 $\bar{3}$ $\bar{4}$	8 $\bar{41}$ $\bar{19}$
4 3 2	1 $\bar{1}$ 6	1 $\bar{3}$ 2	8 5 2	7 $\bar{11}$ $\bar{10}$	0 $\bar{5}$ $\bar{2}$
4 3 3	2 1 20	5 8 8	7 7 4	8 $\bar{13}$ 8	8 $\bar{49}$ $\bar{17}$
4 4 1	1 $\bar{2}$ 6	2 $\bar{1}\bar{1}$ 2	11 $\bar{2}$ 2	5 $\bar{10}$ $\bar{14}$	4 $\bar{16}$ 5
4 4 3	1 2 22	2 $\bar{3}$ 2	3 $\bar{2}$ 2	7 $\bar{14}$ $\bar{10}$	4 $\bar{56}$ $\bar{13}$

五、面心立方晶体的二次孪晶

用电子衍射试验研究立方晶体的高次孪晶已有许多工作^[18-20]。我们以面心立方晶体的二次孪晶为例,考察一下高次孪晶衍射图与基体相重的情况。

假设先在基体(111)面上产生一次孪晶,接着在孪晶的(1 $\bar{1}$ 1)面上又产生孪晶,这样的二次孪晶基矢转换矩阵为

$$\mathcal{S} = \mathcal{T}_{1\bar{1}1/111} = \mathcal{T}_{1\bar{1}1} \cdot \mathcal{T}_{111} = \frac{1}{9} \begin{pmatrix} 1 & 4 & \bar{8} \\ \bar{4} & \bar{7} & 4 \\ \bar{8} & 4 & 1 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

在面心立方的高次孪晶的转换矩阵中,由于每一个一次转换矩阵都有 $\mathcal{T} = \bar{\mathcal{T}} = \mathcal{T}^{-1}$ 的特殊性质,所以它们的连乘矩阵也就有 $\mathcal{S} = \bar{\mathcal{S}}^{-1}$, 即 $\mathcal{S}^{-1} = \bar{\mathcal{S}}$ 。所以

$$\mathcal{S}^{-1} = \frac{1}{9} \begin{pmatrix} 1 & \bar{4} & \bar{8} \\ 4 & \bar{7} & 4 \\ \bar{8} & 4 & 1 \end{pmatrix}. \quad (22)$$

按(4),(5)式得相重倒易点满足

$$H - 4K + L = 9n \quad (23)$$

关系,相重衍射图晶带轴指数判据为

$$4W + V = 9n_1, \quad U - W = 9n_2, \quad U, V \text{ 及 } W \approx 9n. \quad (24)$$

按(21)式将基体 $u, v, w \leq 4$ 的晶带轴指数变换为二次孪晶的平行晶带轴指数,略去前面公共系数后按(24)式进行考察,结果列于表1最后一栏,不相重的晶带轴用黑斜体字表示。由表1可见,二次孪晶衍射图与基体相重几率仍然很高。但这时二次孪晶的相应晶带轴指数已经很大,衍射图很容易出现高阶劳厄带,它将成为鉴别有无二次孪晶的重要依据。

六、结 语

在两晶体的空间点阵穿插共存的情况下,它们互为诱导点阵,其取向关系用二者的基矢转换矩阵 $\mathcal{S}$ 来描述。取 $\mathcal{S} = \mathcal{S}^{-1}$, 并令矩阵元素 T_{ij} 为整数,相应矩阵 $\mathcal{S}$ 前面有系数 $1/D$ 。在倒易空间中,两相的相重倒易点构成诱导超点阵。在所需考察的第二相坐标中,诱导超点阵阵点指数 HKL 应满足

$$T_{i1}H + T_{i2}K + T_{i3}L = Dn \quad (i = 1, 2, 3)$$

的关系。由此得出:

1. 第二相衍射图的晶带轴指数如满足

$$\begin{aligned} T_{i2}W - T_{i3}V &= Dn_1, \quad T_{i3}U - T_{i1}W = Dn_2, \\ T_{i1}V - T_{i2}U &= Dn_3, \quad (i = 1, 2, 3) \text{ 且 } U, V, W \text{ 不同时等于 } Dn. \end{aligned} \quad (9)$$

则它们的衍射斑点必定与基体的完全相重。

2. 如立方晶体的 (pqr) 孪晶电子衍射图与基体相重,则孪晶晶带轴指数符合如下关系:

$$qW - rV = 3n_1, \quad rU - pW = 3n_2 \quad \text{且 } U, V, W \text{ 不同时等于 } 3n. \quad (11)$$

3. 六角 ω 相衍射图与体心立方基体相重的几率,在单取向为 70% 以上,对几种取向的迭加为三分之一。

4. 面心立方晶体二次孪晶的衍射图与基体相重的几率也很大,但由于相应二次孪晶的晶带轴指数很高,衍射图将出现高阶劳厄带的衍射斑点,有助于鉴别二次孪晶的存在。

本工作是在郭可信同志指导下完成的。杨奇斌、吴玉琨同志提出了有益的建议。作者在此表示深切的感谢。

附 录

关于(9)式的适用范围,可分四方面进行讨论:

(i) (9)式的判据是否充分的问题。当从(5)式出发推导出(7)式时,如 h_{i1}, h_{i2} 是整数,当然使 n_1, n_2, n_3 为整数。这说明(9)式是判据的必要条件;反过来,可以分两步说明当 n_1, n_2, n_3 是整数, h_{i1}, h_{i2} 也必然是整数。若 h_{i1}, h_{i2} 中只有一个是分数,那么为使(8)式中 n_i 为整数,必然使 $H_1K_1L_1$ 或 $H_2K_2L_2$ 有一公约数,而这违反了前提,所以是不可能的。若 h_{i1}, h_{i2} 都是不可约分数,设 $h_{i2} = \frac{L}{m}$; $h_{i1} = \frac{c}{d}$, 则(8)式可写为

$$LdH_1 - cmH_2 = mdn_1, \quad LdK_1 - cmK_2 = mdn_2, \quad LdL_1 - cmL_2 = mdn_3.$$

上式在点阵平面几何上表示由 Ld 个 g_1 与 cm 个 g_2 的矢量代数和得出的矢量指数,而且这个矢量不是一个简单的矢

量,而是 $[n_1 n_2 n_3]^*$ 的 md 倍。 n_1, n_2, n_3 三个是整数,相当于 $[n_1 n_2 n_3]^*$ 是若干个 g_1 与若干个 g_2 的矢量代数和,因而 md 必然是 Ld, cm 的约数。而这违反了原来的假定。所以 h_{11}, h_{12} 必然是整数。这说明(9)式是判据的充分条件。

(ii) (9)式判据中每组中的式子个数。将 T_{11} 乘(9-1)式, T_{12} 乘(9-2)式后相加,并将(8)式中 n_i 值代入,得相加式的左边为: $T_{13}(T_{11}V - T_{12}U)$,右边为 $DT_{13}n_3$ 。这说明(9)式三个式子不是独立的,可取两个式子即可。至于选哪两个式子,就要注意 T_{ij} 是否为 Dn ,如正文所述。

(iii) (9)式判据中所需的式子的组数。一般情况要三组,当(5)式可约化为两式相同或三个式子相同,判据所需式子的组数便减少为二个或一个。

(iv) 点阵消光问题。这时需要对(1)式作一个变换, $A'_i = \sum_j Q_{ij}A_j, a'_i = \sum_j p_{ij}a_j (i, j = 1, 2, 3), A'_i$ 和 a'_i 已经分别是第二相与基体的简单点阵的基矢,它们之间的变换矩阵是 $\mathcal{S}' = \mathcal{Q}\mathcal{S}\mathcal{Q}^{-1}$ 。用 $\mathcal{S}' = \mathcal{S}'^{-1}$ 进行讨论,得出判别式后,简单点阵的 $[UVW]$ 又要变换到有心点阵中去。这个过程比较繁琐。当只有基体为有心点阵时,正文已有讨论,可以稍为简化。当讨论面心立方或体心立方晶体旋转前后的取向关系时,从 $s = h^2 + k^2 + l^2$ 的表可以看出,属于同一 s 值的不同 h, k, l 的奇偶属性是同样的。这就是说立方晶体经旋转后,有心点阵点子要不就是与有心点阵的点子相重,要不就不相重,而不会跟属于简单点阵的点子而不属于有心点阵的点子相重。这时不必对(5)式施加额外的限制。

参 考 文 献

- [1] Л. М. Утевский, Дифракционная электронная микроскопия в металловедении (1973).
- [2] H. J. Kestenbach, *Metallography*, 10 (1977), 189.
- [3] 陈乾惕, 金属学报, 待发表.
- [4] S. L. Sass, *J. Less-Common Metals*, 28 (1972), 157.
- [5] P. Rao and R. P. Goehner, *J. Appl. Cryst.*, 7 (1974), 482.
- [6] 郭可信, 物理学报, 27(1978), 547.
- [7] A. Santoro and A. D. Mighell, *Acta Cryst.*, A28 (1972), 284.
- [8] K. W. Andrews and W. Johnson, *British J. Appl. Phys.*, 6 (1955), 92.
- [9] D. W. Pashley and M. J. Stowell, *Phil. Mag.*, 8 (1963), 1605.
- [10] C. J. Calbick and R. B. Marcus, *Acta Cryst.*, 23 (1967), 12.
- [11] P. D. Frost, W. M. Parris, L. L. Hirsch, J. R. Doig, C. M. Schwarz, *Trans. ASM.*, 46 (1954), 231; 1056.
- [12] E. U. Lee, *J. Appl. Cryst.*, 3 (1970), 413.
- [13] S. L. Sass, *Acta Met.*, 17 (1969), 813.
- [14] M. J. Blackburn and J. C. Williams, *Trans. AIME.*, 242 (1968), 2461.
- [15] B. A. Hatt and J. A. Roberts, *Acta Met.*, 8 (1960), 575.
- [16] D. de Fontaine, N. E. Paton and J. C. Williams, *Acta Met.*, 19 (1971), 1153.
- [17] J. C. Williams, D. de Fontaine and N. E. Paton, *Trans. Met.*, 4 (1973), 2701.
- [18] H. Holloway, K. Wollmann and A. S. Joseph, *Phil. Mag.*, 11 (1965), 263.
- [19] S. Mahajan and G. Y. Chin, *Acta Met.*, 22 (1974), 1113.
- [20] J. G. Allpress and J. V. Sanders, *Surface Science*, 7 (1967), 1.

ON OVERLAPPING OF ELECTRON DIFFRACTION PATTERNS FROM TWO CRYSTALS WITH A SIMPLE ORIENTATION RELATIONSHIP

YE HENG-QIANG

(Institute of Metal Research, Academia Sinica)

ABSTRACT

For two phases having a simple orientation relationship, some of the reciprocal points coincide in the reciprocal space. The electron diffraction pattern corresponding to the reciprocal planes consisting of common reciprocal points only will superpose on the matrix spots. In this paper, a simple method is established to identify the indices of zone axis which give the second phase electron diffraction pattern superimposed on the matrix spots. The method is applied to examine the cases of the overlapping of cubic matrix pattern with that of the twin crystal, the hexagonal close packed structure, the hexagonal ω -phase, etc.