

# 电子衍射谱分析中的一种有效方法\*

李 春 志

## 提 要

本文用矩阵运算简明地推导了晶体正空间和倒易空间中的坐标变换关系式;对于两相、李晶及高级劳厄带等复杂电子衍射谱的分析,提出了一套矩阵方法。

## 引 言

简单电子衍射谱上衍射斑点的二维点列仅构成一套网格,复杂电子衍射谱则有两套以上。两相、李晶与高级劳厄带衍射谱是常见的复杂电子衍射谱。正确地分析与标定这些衍射谱对材料的研制与发展具有理论与实际的意义。

金属的相变、时效或半导体外延生长等情况中,新相与母相间常有一定的取向关系。这是借助薄晶体电子显微术研究合金的组织与结构时应该弄清楚的一个重要课题。对此,通常用极图分析<sup>[1]</sup>,也有极图与矩阵运算相结合的方法<sup>[2]</sup>。本文在处理这个问题上提出了一种矩阵方法,以便使用电子计算机。

李晶取向关系的分析在矿物与金属中是十分重要的。通常也用极图方法。文献[3, 4]用矩阵方法仅分析了反映李晶和180°旋转李晶。我们在文献[5]中提出了包括非180°旋转李晶的普遍矩阵分析式。

对高级劳厄带的分析通常采用一般的向量解析式<sup>[6]</sup>。

在电子衍射谱的分析上,矩阵分析有许多优点。它能够简化计算公式的推导过程,使公式简明,并能处理那些一般向量解析难于解决的问题。极图分析颇为繁琐,特别对非立方晶系的情况。矩阵分析很适于电子计算机技术,从而显示出其特有的优越性。

## 一、晶体正空间与倒易空间中坐标变换的基本关系式

### 1. 晶体正空间点阵与倒易空间点阵基矢间的线性变换

晶体正空间点阵基矢  $a, b, c$  与对应的倒易空间点阵基矢  $a^*, b^*, c^*$  有如下关系:

$$\begin{bmatrix} a^* \\ b^* \\ c^* \end{bmatrix} [abc] = \begin{bmatrix} a^*a & a^*b & a^*c \\ b^*a & b^*b & b^*c \\ c^*a & c^*b & c^*c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = E, \quad (1)$$

\* 1978年5月8日收到。

$E$  表示单位矩阵.

若晶体基矢用倒易基矢描述, 则其关系式为

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{bmatrix} = F \begin{bmatrix} \mathbf{a}^* \\ \mathbf{b}^* \\ \mathbf{c}^* \end{bmatrix}, \quad (2)$$

其逆变换关系为

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}^* \\ \mathbf{b}^* \\ \mathbf{c}^* \end{bmatrix} = F^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{bmatrix}, \quad (3)$$

$F$  为变换矩阵,  $F^{-1}$  是它的逆阵. 等式(2)两边右乘以  $[\mathbf{abc}]$ , 则

$$F = \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{bmatrix} [\mathbf{abc}] = \begin{bmatrix} \mathbf{aa} & \mathbf{ab} & \mathbf{ac} \\ \mathbf{ba} & \mathbf{bb} & \mathbf{bc} \\ \mathbf{ca} & \mathbf{cb} & \mathbf{cc} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a^2 & ab \cos \gamma & ac \cos \beta \\ ab \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ac \cos \beta & bc \cos \alpha & c^2 \end{bmatrix}. \quad (4)$$

(3)式两边右乘以  $[\mathbf{a}^* \mathbf{b}^* \mathbf{c}^*]$ , 则

$$\begin{aligned} F^{-1} &= \begin{bmatrix} \mathbf{a}^* \\ \mathbf{b}^* \\ \mathbf{c}^* \end{bmatrix} [\mathbf{a}^* \mathbf{b}^* \mathbf{c}^*] = \begin{bmatrix} \mathbf{a}^* \mathbf{a}^* & \mathbf{a}^* \mathbf{b}^* & \mathbf{a}^* \mathbf{c}^* \\ \mathbf{b}^* \mathbf{a}^* & \mathbf{b}^* \mathbf{b}^* & \mathbf{b}^* \mathbf{c}^* \\ \mathbf{c}^* \mathbf{a}^* & \mathbf{c}^* \mathbf{b}^* & \mathbf{c}^* \mathbf{c}^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{aa} & \mathbf{ab} & \mathbf{ac} \\ \mathbf{ba} & \mathbf{bb} & \mathbf{bc} \\ \mathbf{ca} & \mathbf{cb} & \mathbf{cc} \end{bmatrix}^{-1} \\ &= \frac{1}{\nabla^2} \begin{bmatrix} b^2 c^2 \sin^2 \alpha & abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) & ab^2 c (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta) \\ abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) & a^2 c^2 \sin^2 \beta & a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) \\ ab^2 c (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta) & a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) & a^2 b^2 \sin^2 \gamma \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\text{其中 } \nabla^2 = a^2 b^2 c^2 (1 + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma). \quad (6)$$

将各晶系的晶体点阵参数  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$  代入(4)和(5)式, 则得出各晶系的  $F$  和  $F^{-1}$ .

## 2. 晶体正空间点阵矢量间及倒易空间点阵矢量间的坐标变换

设新晶体坐标基矢为  $\mathbf{a}', \mathbf{b}', \mathbf{c}'$ , 其倒易坐标基矢为  $\mathbf{a}^{*'}, \mathbf{b}^{*'}, \mathbf{c}^{*'}$ ; 原晶体坐标基矢为  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ , 其倒易坐标基矢为  $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ , 则可以写出

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}' \\ \mathbf{b}' \\ \mathbf{c}' \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{bmatrix}, \quad (7)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{bmatrix} = A^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{a}' \\ \mathbf{b}' \\ \mathbf{c}' \end{bmatrix}, \quad (8)$$

$A$  为晶体正空间点阵中新旧坐标基矢的变换矩阵.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}^{*' } \\ \mathbf{b}^{*' } \\ \mathbf{c}^{*' } \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} \mathbf{a}^* \\ \mathbf{b}^* \\ \mathbf{c}^* \end{bmatrix}, \quad (9)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}^* \\ \mathbf{b}^* \\ \mathbf{c}^* \end{bmatrix} = B^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{a}^{*'} \\ \mathbf{b}^{*'} \\ \mathbf{c}^{*'} \end{bmatrix}, \quad (10)$$

$B$  为倒易点阵中新旧坐标基矢的变换矩阵。

将(9)式转置

$$[\mathbf{a}^{*'} \mathbf{b}^{*'} \mathbf{c}^{*'}] = [\mathbf{a}^* \mathbf{b}^* \mathbf{c}^*] B^T,$$

用上式在(7)式两边对应右乘,则

$$A B^T = E. \quad (11)$$

可见,变换矩阵  $A$  跟变换矩阵  $B$  互为转置逆阵。

$$B^{-1} = A^T, \quad A^{-1} = B^T. \quad (12)$$

1) 晶体正空间矢量的坐标变换 设晶体正空间矢量  $I_{uvw}$  按原坐标基矢  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$  分解为

$$I_{uvw} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c},$$

按新坐标基矢  $\mathbf{a}', \mathbf{b}', \mathbf{c}'$  分解为

$$I_{uvw} = u'\mathbf{a}' + v'\mathbf{b}' + w'\mathbf{c}',$$

则

$$[\mathbf{a}' \mathbf{b}' \mathbf{c}'] \begin{bmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{bmatrix} = [\mathbf{a} \mathbf{b} \mathbf{c}] \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}. \quad (13)$$

在(13)式两边对应左乘(9)式,则

$$\begin{bmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}, \quad (14)$$

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = B^{-1} \begin{bmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{bmatrix} = A^T \begin{bmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{bmatrix}. \quad (15)$$

比较(9)式和(14)式可见,晶体正空间矢量的坐标变换,与其倒易空间点阵基矢的变换具有相同的变换矩阵。

2) 倒易空间矢量坐标变换 设倒易空间矢量  $\mathbf{g}_{hkl}$  按原坐标基矢  $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$  分解为

$$\mathbf{g}_{hkl} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*,$$

按新坐标基矢  $\mathbf{a}^{*'}, \mathbf{b}^{*'}, \mathbf{c}^{*'}$  分解为

$$\mathbf{g}_{hkl} = h'\mathbf{a}^{*' } + k'\mathbf{b}^{*' } + l'\mathbf{c}^{*' },$$

则

$$[\mathbf{a}^{*' } \mathbf{b}^{*' } \mathbf{c}^{*' }] \begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix} = [\mathbf{a}^* \mathbf{b}^* \mathbf{c}^*] \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}. \quad (16)$$

在(16)式两边对应左乘(7)式,则

$$\begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}, \quad (17)$$

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = A^{-1} \begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix} = B^T \begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix}. \quad (18)$$

比较(7)式和(17)式可见,倒易空间矢量的坐标变换与晶体正空间点阵基矢的变换具有相同的变换矩阵。

### 3. 晶体正空间矢量与倒易空间矢量间的坐标变换

设正空间矢量  $I_{uvw} = ua + vb + wc$ , 在倒易空间描述它为  $I_{hkl}^* = ha^* + kb^* + lc^*$ .  $I_{uvw}$  与  $I_{hkl}^*$  这两个矢量等长,同方向,在数学上是相等的,但量纲是不同的. 因此  $I_{uvw} = mI_{hkl}^*$ ,  $m$  的数值为 1, 而其量纲为长度的平方,通常点阵常数的量纲为  $\text{\AA}$ , 这时  $m$  的量纲为  $\text{\AA}^2$ , 即  $m = 1 \text{\AA}^2$ . 于是

$$[abc] \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = m [a^* b^* c^*] \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}. \quad (19)$$

在(19)式两边左乘  $\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}$ , 则

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = 1/m \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} [abc] \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = F/m \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}. \quad (20)$$

由此

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = mF^{-1} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}. \quad (21)$$

考虑到  $m$  是个量纲的修正系数,数值为 1,为运算方便,可以将其略去。

## 二、两相的电子衍射谱

遵循一定取向关系的新相与母相之间的晶向指数与晶面指数的坐标变换是由一定的变换矩阵决定的. 如(14),(18)式所示。

$$\begin{bmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}, \quad (22)$$

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = B^T \begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix}. \quad (23)$$

$B$  是晶体方向指数变换矩阵。(22) 式表示新相的倒易面  $(u'v'w')^*$  平行于母相的倒易面  $(uvw)^*$ 。 $B^T$  是晶面指数的变换矩阵, 它是  $B$  的转置矩阵。(23) 式表示新相的倒易点  $h'k'l'$  在母相倒易点阵中位于  $hkl$  处。

由已知两相的取向关系去分析电子衍射谱, 或由对电子衍射谱的分析寻找两相的取向关系, 使用矩阵分析的核心问题是首先计算出变换矩阵  $B$  与  $B^T$ 。

### 1. 在已知取向关系的条件下求变换矩阵

1) 已知

$$(h'_1 k'_1 l'_1) // (h_1 k_1 l_1), (h'_2 k'_2 l'_2) // (h_2 k_2 l_2), (h'_3 k'_3 l'_3) // (h_3 k_3 l_3),$$

$(h_i k_i l_i)$  代表母相的晶面,  $(h'_i k'_i l'_i)$  代表新相的晶面。

根据上述关系可写成下列等式:

$$\begin{bmatrix} h'_1 & k'_1 & l'_1 \\ h'_2 & k'_2 & l'_2 \\ h'_3 & k'_3 & l'_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a}^{*'} \\ \mathbf{b}^{*'} \\ \mathbf{c}^{*'} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a}^* \\ \mathbf{b}^* \\ \mathbf{c}^* \end{bmatrix}, \quad (24)$$

其中  $\alpha_i = |\mathbf{g}'_i|/|\mathbf{g}_i| = d_i/d'_i$ ,  $\mathbf{g}_i$  表示母相的倒易矢量,  $\mathbf{g}'_i$  表示新相的倒易矢量,  $d_i$  表示母相的面间距,  $d'_i$  表示新相的面间距。

$$\text{令} \quad D = \begin{bmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3 \end{bmatrix},$$

将(24)式简写为

$$H' \begin{bmatrix} \mathbf{a}^{*'} \\ \mathbf{b}^{*'} \\ \mathbf{c}^{*'} \end{bmatrix} = DH \begin{bmatrix} \mathbf{a}^* \\ \mathbf{b}^* \\ \mathbf{c}^* \end{bmatrix}, \quad (25)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}^{*'} \\ \mathbf{b}^{*'} \\ \mathbf{c}^{*'} \end{bmatrix} = H'^{-1}DH \begin{bmatrix} \mathbf{a}^* \\ \mathbf{b}^* \\ \mathbf{c}^* \end{bmatrix}. \quad (26)$$

所以,

$$B = H'^{-1}DH, \quad (27)$$

即

$$B = \begin{bmatrix} h'_1 & k'_1 & l'_1 \\ h'_2 & k'_2 & l'_2 \\ h'_3 & k'_3 & l'_3 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{bmatrix}. \quad (28)$$

对于一个确定的取向关系,  $H'^{-1}D$  是固定的, 而  $H$  中的元素是有变化的, 即各个等效面。不同的  $H$  对应着不同的  $B$ 。

2) 若已知

$$(h'_3 k'_3 l'_3) // (h_3 k_3 l_3), [u'_1 v'_1 w'_1] // [u_1 v_1 w_1],$$

那么

$$\begin{bmatrix} h_1 \\ k_1 \\ l_1 \end{bmatrix} = F_m \begin{bmatrix} u_1 \\ v_1 \\ w_1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} h'_1 \\ k'_1 \\ l'_1 \end{bmatrix} = F_n \begin{bmatrix} u'_1 \\ v'_1 \\ w'_1 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} u_3 \\ v_3 \\ w_3 \end{bmatrix} = F_m^{-1} \begin{bmatrix} h_3 \\ k_3 \\ l_3 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} u'_3 \\ v'_3 \\ w'_3 \end{bmatrix} = F_n^{-1} \begin{bmatrix} h'_3 \\ k'_3 \\ l'_3 \end{bmatrix}.$$

$F_m$  和  $F_m^{-1}$  为母相的  $F$  和  $F^{-1}$ ,  $F_n$  和  $F_n^{-1}$  为新相的  $F$  和  $F^{-1}$ .

由  $[u_3 v_3 w_3]$  和  $[u_1 v_1 w_1]$  的矢性积得到  $(h_2 k_2 l_2)$ , 由  $[u'_3 v'_3 w'_3]$  和  $[u'_1 v'_1 w'_1]$  的矢性积得到  $(h'_2 k'_2 l'_2)$ . 于是

$$(h'_1 k'_1 l'_1) // (h_1 k_1 l_1), (h'_2 k'_2 l'_2) // (h_2 k_2 l_2), (h'_3 k'_3 l'_3) // (h_3 k_3 l_3).$$

之后, 就可按这节1) 进行计算.

例如: 钢中奥氏体与马氏体的  $K-S$  取向关系为  $\{011\}_a // \{111\}_r, \langle 11\bar{1} \rangle_a // \langle 10\bar{1} \rangle_r$ . 它包含着 12 个具体的取向关系, 那么它们对应着 12 个变换矩阵. 按所推的公式(28), 由电子计算机计算结果如下:

$$\begin{array}{l} (011)_a // (111)_r, \\ [11\bar{1}]_a // [10\bar{1}]_r, \\ \begin{bmatrix} 0.593 & 0.520 & 0.133 \\ -0.533 & 0.593 & 0.060 \\ -0.060 & -0.133 & 0.786 \end{bmatrix}; \end{array} \quad \begin{array}{l} (1\bar{1}0)_a // (111)_r, \\ [11\bar{1}]_a // [10\bar{1}]_r, \\ \begin{bmatrix} 0.520 & -0.133 & -0.593 \\ 0.593 & -0.060 & 0.533 \\ -0.133 & -0.786 & 0.060 \end{bmatrix}; \end{array}$$

$$\begin{array}{l} (0\bar{1}\bar{1})_a // (111)_r, \\ [1\bar{1}\bar{1}]_a // [10\bar{1}]_r, \\ \begin{bmatrix} 0.593 & -0.520 & -0.133 \\ -0.533 & -0.593 & -0.060 \\ -0.060 & 0.133 & -0.786 \end{bmatrix}; \end{array} \quad \begin{array}{l} (\bar{1}10)_a // (111)_r, \\ [1\bar{1}\bar{1}]_a // [10\bar{1}]_r, \\ \begin{bmatrix} -0.520 & 0.133 & -0.593 \\ -0.593 & 0.060 & 0.533 \\ 0.133 & 0.786 & 0.060 \end{bmatrix}; \end{array}$$

$$\begin{array}{l} (0\bar{1}\bar{1})_a // (111)_r, \\ [\bar{1}11]_a // [10\bar{1}]_r, \\ \begin{bmatrix} -0.593 & 0.520 & -0.133 \\ 0.533 & 0.593 & -0.060 \\ 0.060 & -0.133 & -0.786 \end{bmatrix}; \end{array} \quad \begin{array}{l} (101)_a // (111)_r, \\ [1\bar{1}1]_a // [10\bar{1}]_r, \\ \begin{bmatrix} 0.133 & 0.593 & 0.520 \\ 0.060 & -0.533 & 0.593 \\ 0.786 & -0.060 & -0.133 \end{bmatrix}; \end{array}$$

$$\begin{array}{l} (0\bar{1}\bar{1})_a // (111)_r, \\ [1\bar{1}\bar{1}]_a // [10\bar{1}]_r, \\ \begin{bmatrix} -0.593 & -0.520 & 0.133 \\ 0.533 & -0.593 & 0.060 \\ 0.060 & 0.133 & 0.786 \end{bmatrix}; \end{array} \quad \begin{array}{l} (\bar{1}0\bar{1})_a // (111)_r, \\ [11\bar{1}]_a // [10\bar{1}]_r, \\ \begin{bmatrix} -0.133 & 0.593 & -0.520 \\ -0.060 & -0.533 & -0.593 \\ -0.786 & -0.060 & 0.133 \end{bmatrix}; \end{array}$$

$$\begin{array}{l}
 (110)_a // (111)_\gamma, \\
 [\bar{1}\bar{1}1]_a // [10\bar{1}]_\gamma, \\
 \begin{bmatrix} 0.520 & 0.133 & 0.593 \\ 0.593 & 0.060 & -0.533 \\ -0.133 & 0.786 & -0.060 \end{bmatrix}; \\
 (\bar{1}\bar{1}0)_a // (111)_\gamma, \\
 [\bar{1}\bar{1}1]_a // [10\bar{1}]_\gamma, \\
 \begin{bmatrix} -0.520 & -0.133 & 0.593 \\ -0.593 & -0.060 & -0.533 \\ 0.133 & -0.786 & -0.060 \end{bmatrix};
 \end{array}
 \qquad
 \begin{array}{l}
 (\bar{1}01)_a // (111)_\gamma, \\
 [\bar{1}\bar{1}1]_a // [10\bar{1}]_\gamma, \\
 \begin{bmatrix} -0.133 & -0.593 & 0.520 \\ -0.060 & 0.533 & 0.593 \\ -0.786 & 0.060 & -0.133 \end{bmatrix}; \\
 (10\bar{1})_a // (111)_\gamma, \\
 [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]_a // [10\bar{1}]_\gamma, \\
 \begin{bmatrix} 0.133 & -0.593 & -0.520 \\ 0.060 & 0.533 & -0.593 \\ 0.786 & 0.060 & 0.133 \end{bmatrix}.
 \end{array}$$

## 2. 两相间取向关系的确定

现在讨论事先不知道两相间的取向关系, 如何通过对电子衍射谱的分析找出其取向关系. 这需要许多张不同电子束入射方向的两相的叠加电子衍射谱. 在这些底片上, 两相的电子衍射斑点的强弱分布应几乎中心对称, 这样误差较小.

首先对一张电子衍射谱进行标定, 得出某种取向关系  $(h'k'l') // (hkl)$ ,  $[u'v'w'] // [uvw]$ . 如上节 1) 所述, 由此计算出对应的变换矩阵  $B$ . 考虑到  $180^\circ$  不唯一性, 令  $h'k'l'$  反号, 对  $(\bar{h}'\bar{k}'\bar{l}') // (hkl)$ ,  $[u'v'w'] // [uvw]$  计算, 也得到对应的变换矩阵. 之后, 对每张底片都经过这样的计算. 结果将表明有某一类变换矩阵会多次反复出现. 它们反映了各个具体的取向关系的等价性. 由这类变换矩阵决定的典型的取向关系即是两相的晶体取向关系.

## 三、孪晶电子衍射谱

在旋转孪晶的情形下, 把孪晶中两部分的取向关系处理为相当于一部分固定, 另一部分绕孪生轴旋转一定的角度. 我们通过使选取的坐标系转动并寻求变换矩阵的方法推导出适于各个晶系的二次轴, 三次轴, 四次轴及六次轴旋转孪晶的普遍矩阵分析式<sup>[5]</sup>. 这里仅列出其结果.

设孪生轴用倒易空间坐标描述为  $[pqr]^*$ , 用正空间坐标描述为  $[uvw]$ , 则孪晶两部分间方向指数的变换矩阵为

$$B = \begin{bmatrix} p & q & r \\ v & \bar{u} & 0 \\ 0 & w & \bar{v} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sin(\varphi + \theta)}{\sin \varphi} & -f \frac{\sin \theta}{\sin \varphi} \\ 0 & \frac{\sin \theta}{f \cdot \sin \varphi} & \frac{\sin(\varphi - \theta)}{\sin \varphi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p & q & r \\ v & \bar{u} & 0 \\ 0 & w & \bar{v} \end{bmatrix}, \quad (29)$$

其中  $\varphi$  为  $[v\bar{u}0]^*$  与  $[0w\bar{v}]^*$  二倒易矢量间的夹角;  $f$  为倒易矢  $[v\bar{u}0]^*$  的长度对倒易矢  $[0w\bar{v}]^*$  的长度的比值;  $\theta$  为孪晶的一部分对另一部分逆时针转动的角度, 对二次轴, 三次轴, 四次轴及六次轴旋转孪晶分别为  $180^\circ$ ,  $120^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $60^\circ$ .

晶面指数变换矩阵为

$$A = [B^T]^{-1}.$$

设基体的晶向指数为  $u_m v_m w_m$ , 孪晶的晶向指数为  $u_t v_t w_t$ ; 基体的晶面指数为  $h_m k_m l_m$ ; 孪晶的晶面指数为  $h_t k_t l_t$ , 则

$$\begin{bmatrix} u_t \\ v_t \\ w_t \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} u_m \\ v_m \\ w_m \end{bmatrix}, \quad (30)$$

$$\begin{bmatrix} h_t \\ k_t \\ l_t \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} h_m \\ k_m \\ l_m \end{bmatrix}. \quad (31)$$

(30)式表示孪晶的倒易面  $(u_t v_t w_t)^*$  平行于基体的倒易面  $(u_m v_m w_m)^*$ . (31)式表示基体中倒易点  $h_m k_m l_m$  在孪晶中的指数是  $h_t k_t l_t$ .

#### 四、高级劳厄带电子衍射谱

晶带定律的广义表达式为  $uH + vK + wL = N$ , 其中  $N$  为劳厄带级次. 当电子束沿晶体的  $[uvw]$  方向入射时, 若反射球面同时也截过平行于零层面的邻层 ( $N = \pm 1$ ) 或更高层 ( $N = \pm 2; \pm 3 \dots$ ) 倒易面上的阵点时, 同时产生高级劳厄带衍射谱. 求出高级劳厄带斑点在零级劳厄带上的位置是高级劳厄带衍射谱标定的主要之点. 为此, 下面讨论倒易点阵中任一矢量  $\mathbf{G}_{HKL}$  在任一倒易面  $(uvw)^*$  上的垂直投影点的坐标是如何确定的.

首先建立一个新的参考坐标系, 为此在倒易面  $(uvw)^*$  上任意选两个倒易矢量, 并选取一个任意长的垂直于倒易面  $(uvw)^*$  即平行于晶带轴  $\mathbf{L}_{uvw}$  的倒易矢量.

为实际计算方便, 令这个矢量  $\mathbf{P}_{eis} = m/a^2 \mathbf{l}_{hkl}^* = 1/a^2 \mathbf{l}_{uvw}$ , 即

$$\begin{bmatrix} e \\ j \\ s \end{bmatrix} = F/a^2 \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}, \quad (32)$$

$F$  为变换矩阵, 不同晶系的  $F$  是不同的. 如图 1, 新的参考坐标系的基矢与原倒易点阵基矢的关系为

$$\begin{bmatrix} \mathbf{g}_1 \\ \mathbf{g}_2 \\ \mathbf{P}_{eis} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ e & j & s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a}^* \\ \mathbf{b}^* \\ \mathbf{c}^* \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} \mathbf{a}^* \\ \mathbf{b}^* \\ \mathbf{c}^* \end{bmatrix}. \quad (33)$$

倒易矢量  $\mathbf{G}_{HKL}$  用  $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$  描述为

$$\mathbf{G}_{HKL} = H\mathbf{a}^* + K\mathbf{b}^* + L\mathbf{c}^*,$$

用  $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{P}_{eis}$  描述为

$$\mathbf{G}_{HKL} = H'\mathbf{g}_1 + K'\mathbf{g}_2 + L'\mathbf{P}_{eis}.$$

如(17)式表明那样,



$$\begin{bmatrix} H' \\ K' \\ L' \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} H \\ K \\ L \end{bmatrix}, \quad (34)$$

而  $A = [B^T]^{-1}$  (见(12)式)

所以

$$\begin{bmatrix} H' \\ K' \\ L' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_1 & h_2 & e \\ k_1 & k_2 & j \\ l_1 & l_2 & s \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} H \\ K \\ L \end{bmatrix}, \quad (35)$$

$H', K', L'$  即为任意倒易矢量  $\mathbf{G}_{HKL}$  在新的参考坐标系的空间坐标;  $H', K'$  为它在倒易面  $(uvw)^*$  上垂直投影点的平面坐标, 用

$$\mathbf{J}_{HKL} = H'[h_1 k_1 l_1] + K'[h_2 k_2 l_2] \quad (36)$$

表示倒易矢量  $\mathbf{G}_{HKL}$  在  $(uvw)^*$  倒易面上的垂直投影点的位置。

为了求出  $H', K', L'$ , 在手算时可通过解联立方程的方法。

因为(35)式写成联立方程为

$$\begin{aligned} h_1 H' + h_2 K' + e L' &= H, \\ k_1 H' + k_2 K' + j L' &= K, \\ l_1 H' + l_2 K' + s L' &= L. \end{aligned} \quad (37)$$

当电子束沿  $(uvw)$  入射,  $HKL$  为高层倒易点时, (35)和(36)式就是计算高层倒易点在零层面上垂直投影点的位置的公式。当入射电子束与

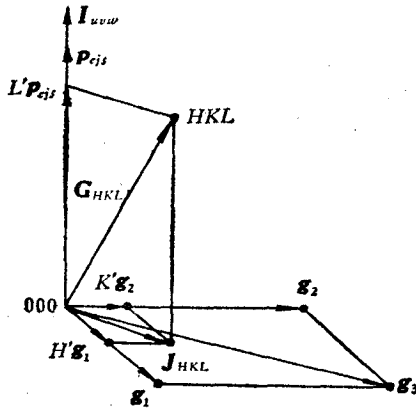


图1 高层倒易点  $HKL$  在零层倒易面上垂直投影点的位置示意图

倒易面不垂直时, 这个算法有微小误差, 但是可以忽略。

在电子衍射谱上, 有时同时出现几个高级劳厄带衍射谱, 标定工作是比较繁琐的。为了简化计算, 现提出一些简明的矩阵表达式。

由于倒易阵点的周期性排列及对称性, 各高层倒易点在零层面上的垂直投影点的位置间有着一定的几何关系。借助几何作图, 运用矢量的平行四边形法则不难得出这些关系式。

设  $n$  为倒易面层次,  $H_n K_n L_n$  为上  $n$  层倒易面上的一个倒易点,  $H_{-n} K_{-n} L_{-n}$  为下  $n$  层倒易面上的一个倒易点。这些倒易点在零层面上的垂直投影点落在由  $000, h_1 k_1 l_1, h_2 k_2 l_2, h_3 k_3 l_3$  构成的平行四边形内。

以  $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \mathbf{P}_{cis}$  为新的参考坐标系,  $H'_n, K'_n$  表示  $H_n K_n L_n$  在零层倒易面上垂直投影点的坐标;  $H'_{-n}, K'_{-n}$  表示  $H_{-n} K_{-n} L_{-n}$  在零层倒易面上垂直投影点的坐标。

1)  $+N$  级与  $-N$  级间的关系式

$$\begin{bmatrix} H'_{-n} \\ K'_{-n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - H'_n \\ 1 - K'_n \end{bmatrix}, \quad (38)$$

$$\begin{bmatrix} H_{-n} \\ K_{-n} \\ L_{-n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_3 \\ k_3 \\ l_3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} H_n \\ K_n \\ L_n \end{bmatrix}. \quad (39)$$

2) +1 级与 +N 级间的关系式

$$n \begin{bmatrix} H_1' \\ K_1' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_1 + D_1 \\ I_2 + D_2 \end{bmatrix}, \quad (40)$$

其中  $I_1, I_2$  分别是  $nH'$  和  $nK'$  数值的整数部分;  $D_1, D_2$  分别是  $nH'$  和  $nK'$  数值的小数部分.

$$\begin{bmatrix} H_n' \\ K_n' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \end{bmatrix}, \quad (41)$$

$$\begin{bmatrix} H_n \\ K_n \\ L_n \end{bmatrix} = n \begin{bmatrix} H_1 \\ K_1 \\ L_1 \end{bmatrix} - I_1 \begin{bmatrix} h_1 \\ k_1 \\ l_1 \end{bmatrix} - I_2 \begin{bmatrix} h_2 \\ k_2 \\ l_2 \end{bmatrix}. \quad (42)$$

一般  $n = N$ , 但对于面心立方和体心立方晶系, 对于某类倒易面(由于结构因素, 体心立方  $(uvw)^*$  的指数为全奇时, 面心立方为两奇一偶时)  $N$  只能取  $0, \pm 2, \pm 4, \dots$ , 这种情况下  $N = \pm 2$  是指上一层倒易面,  $n = \pm 1$ ;  $N = \pm 4$  是指上下第二层倒易面, 这时  $n = \pm 2; \dots$  等等.

上述关系式(38)—(42)对各个晶系都是适用的.

在上述矩阵分析的基础上已编出一系列标定复杂电子衍射谱的电子计算机程序. 用于进行分析.

颜鸣皋总工程师曾对本文提出宝贵意见, 在此表示深切感谢!

### 参 考 文 献

- [1] J. W. Edington, *Practical Electron Microscopy in Materials Science* (1976), 4, 18—60, Macmillan Philips Technical Library.
- [2] Л. М. Утевский, *Дифракционная электронная микроскопия в металловедении*, Москва (1973), 497.
- [3] K. W. Andrews, W. Johnson, *Brit. J. Appl. Phys.*, 6 (1955), 92.
- [4] C. J. Calbick, R. B. Marcus, *Acta Cryst.*, 23 (1967), 12.
- [5] 李春志, *金属学报*, 14 (1978), 298.
- [6] P. B. Hirsch et al., *Electron Microscopy of Thin Crystals*, London (1965), 141

## A USEFUL METHOD FOR INDEXING ELECTRON DIFFRACTION PATTERNS

LI CHUN-ZHI

### ABSTRACT

In this paper, general expressions for coordinate transformation in crystal direct space or reciprocal space are derived by using of matrix calculus. A matrix method for indexing complex electron diffraction patterns of two phase structures, twins and high order Laue zones is described.