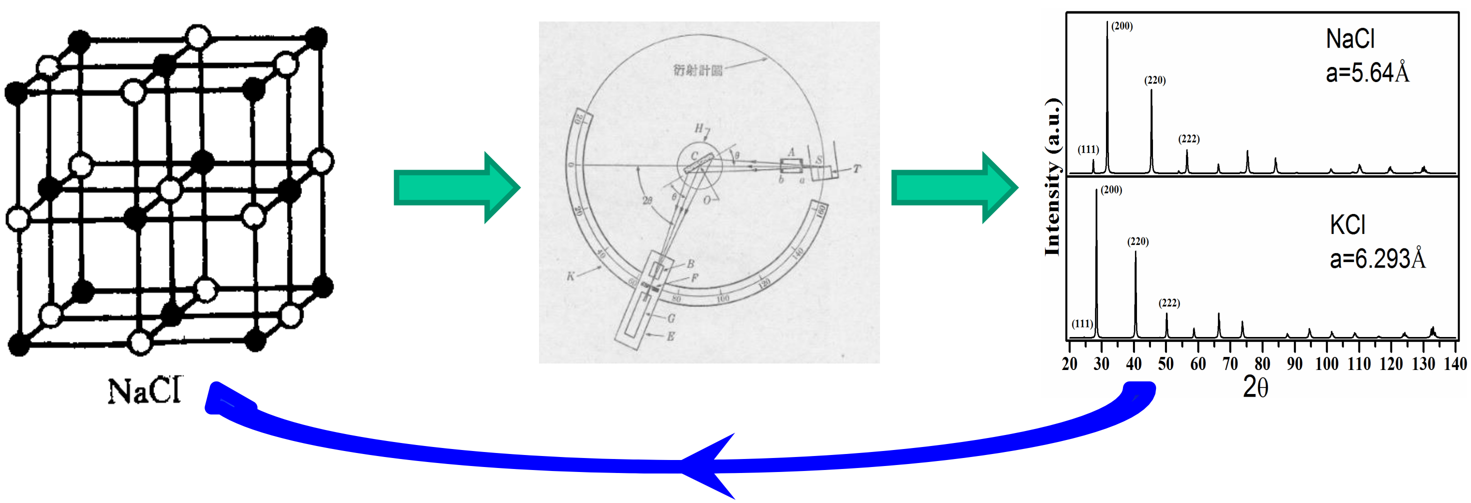
晶体衍射与结构分析

Lec-05

Crystal Diffraction and Structure Analysis

刘　泉　林

北京科技大学材料科学与工程学院



晶体衍射与结构分析

Crystal Diffraction and Structure Analysis

二、X射线晶体衍射理论及实验技术和方法

2.1　X射线物理学：X射线本质，　X射线与物质的相互作用，　X射线的探测与防护，　X射线散射。

独立电子散射，原子散射

2.2　X射线衍射的运动学：

结构因数：一个晶体内所有晶胞对X射线的散射，

干涉函数，　劳厄方程式与布拉格方程式及应用举例

2.3　倒易点阵，衍射实验技术和方法

倒易点阵和衍射方向

衍射数据的实验收集方法和数据处理

晶体衍射与结构分析

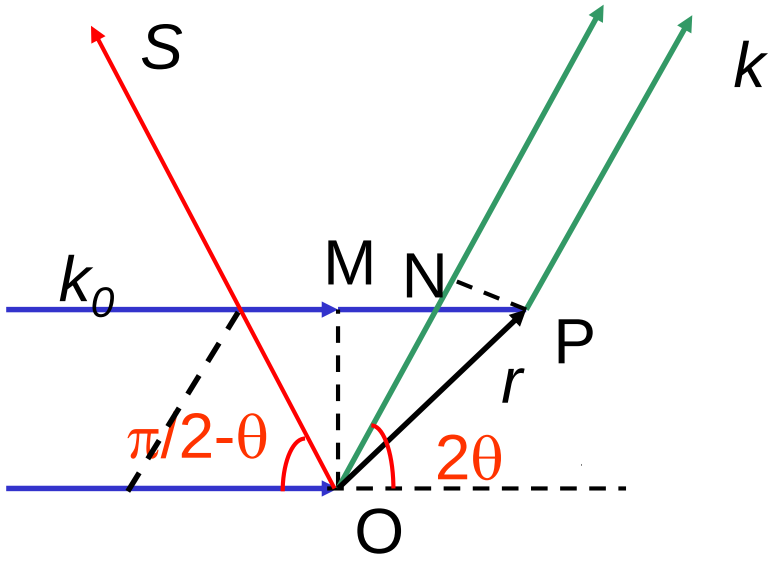
Crystal Diffraction and Structure Analysis

材料 ⟷ 物相 ⟷ 多晶 ⟷

单晶 ⟷ 晶胞 ⟷ 原子 ⟷ 电子

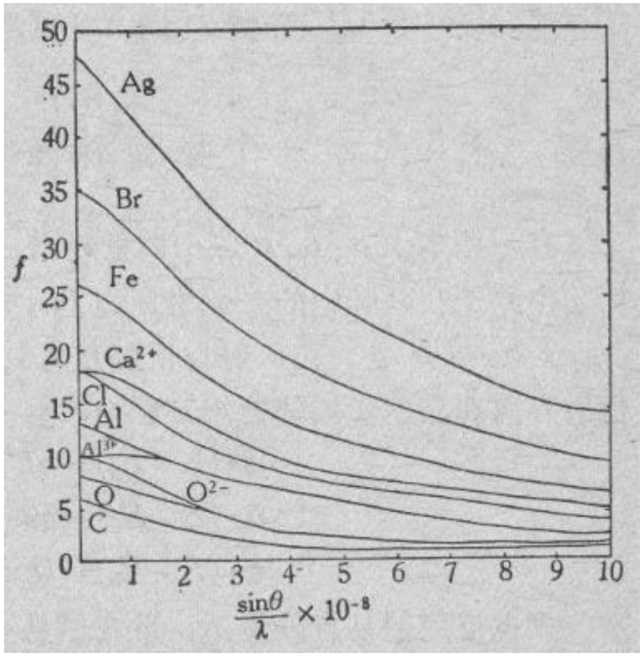
一个晶胞或小块单晶对X射线的散射/衍射及其数学表达式

原子散射因数



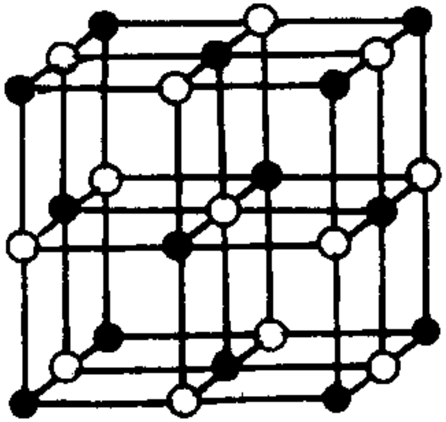
$$|k_0| = |k| = \frac{2\pi}{\lambda}.$$

$$|s| = |k - k_0| = 2|k_0|\sin\theta = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta$$

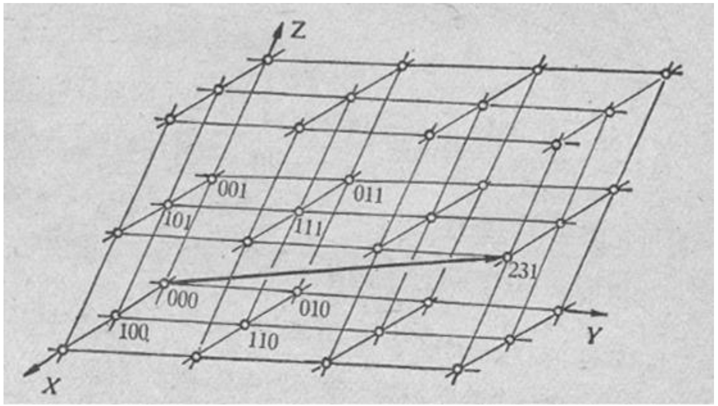


一个原子散射的振幅相当于位于原子的原点处的f（s）个独立电子向同一个s方向所散射振幅（按汤姆逊公式计算）的和。

2.2.1 一个晶胞内所有原子对X射线的散射：结构因数



NaCl

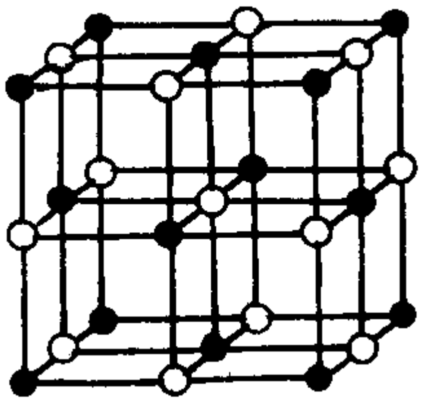


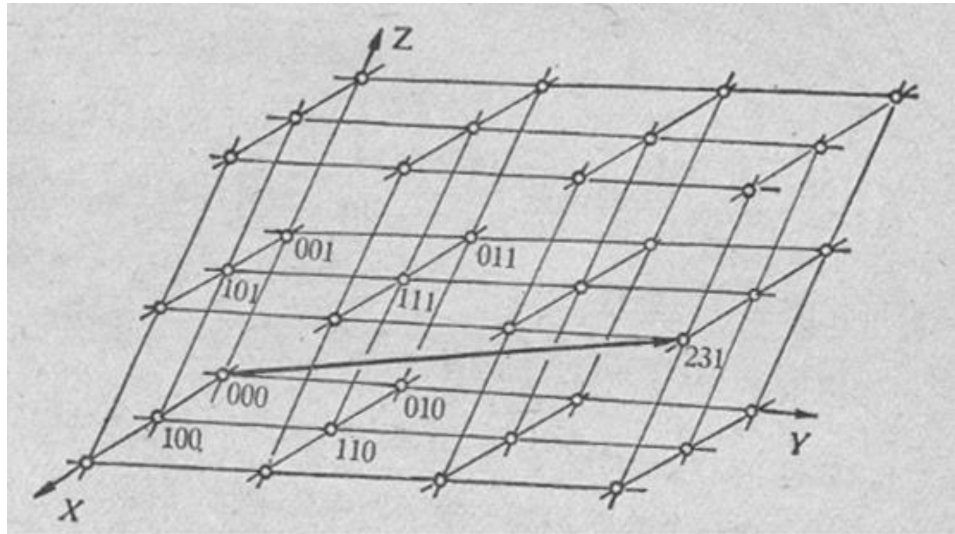
晶体＝晶胞＋三维平移周期

一个晶胞内所有原子对X射线的散射——结构因数

一个晶体内所有晶胞对X射线的散射——干涉函数

一个晶胞或单晶中原子位置的数学表达式


NaCl



Fm3m， a=5.640 Å

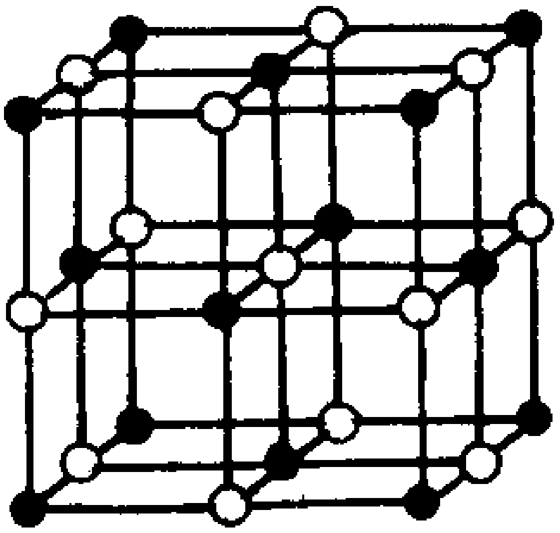
Na 4a (0,0,0)

Cl 4b (0.5,0.5,0.5)

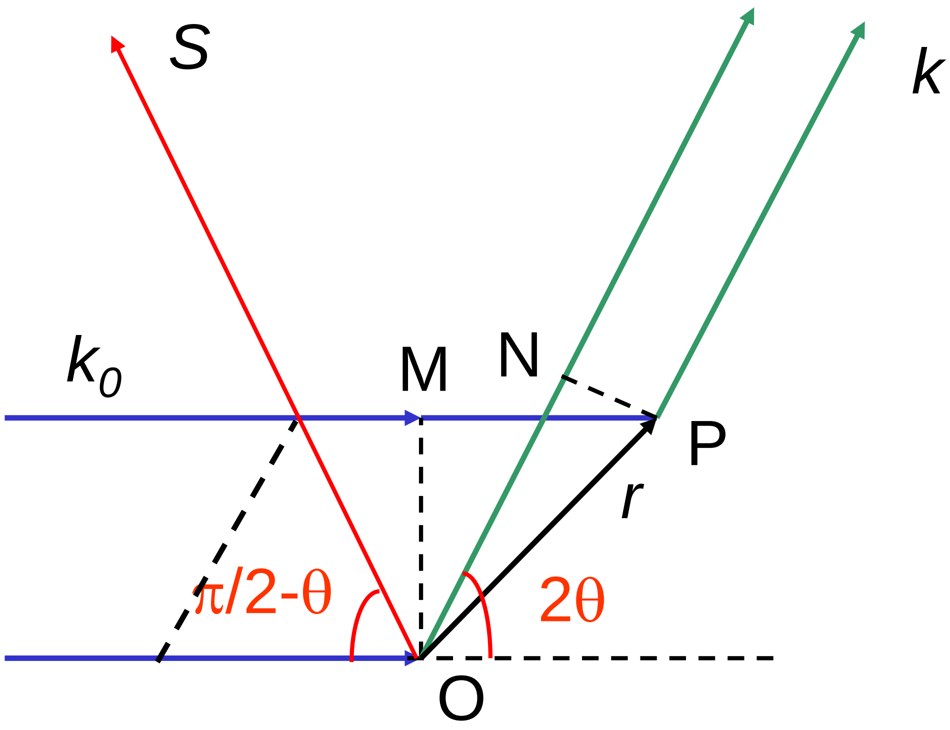
$$\boldsymbol{r}_N = m\boldsymbol{a} + n\boldsymbol{b} + p\boldsymbol{c}$$

$$\boldsymbol{r}_{\mathrm{C}} = 0.5\boldsymbol{a} + 0.5\boldsymbol{b} + 0.5\boldsymbol{c}$$

一个晶胞对X射线的散射

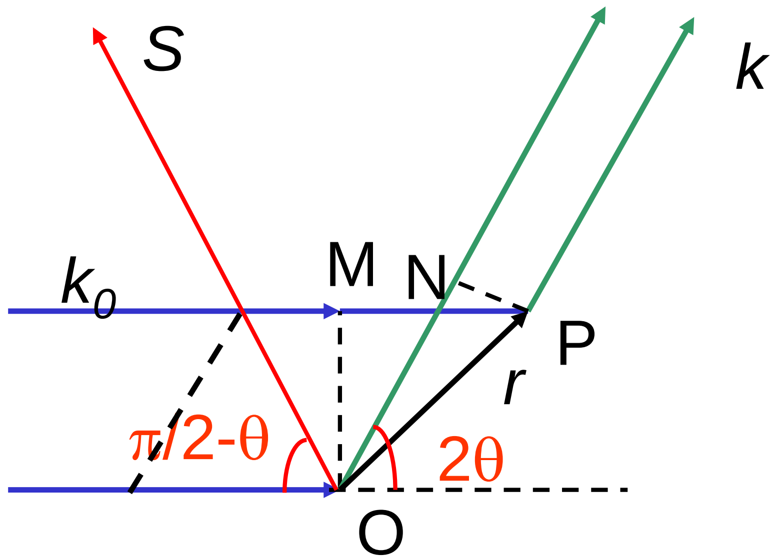


NaCl



$$\boldsymbol{r}_j = x_j\boldsymbol{a} + y_j\boldsymbol{b} + z_j\boldsymbol{c}$$

一个晶胞对X射线的散射



$$\phi_j = \boldsymbol{r}_j \cdot \boldsymbol{s}$$

$$\boldsymbol{r}_j = x_j\boldsymbol{a} + y_j\boldsymbol{b} + z_j\boldsymbol{c}$$

$$\boldsymbol{s} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0, \left|\boldsymbol{s}\right| = \frac{4\pi\sin\theta}{\lambda}$$

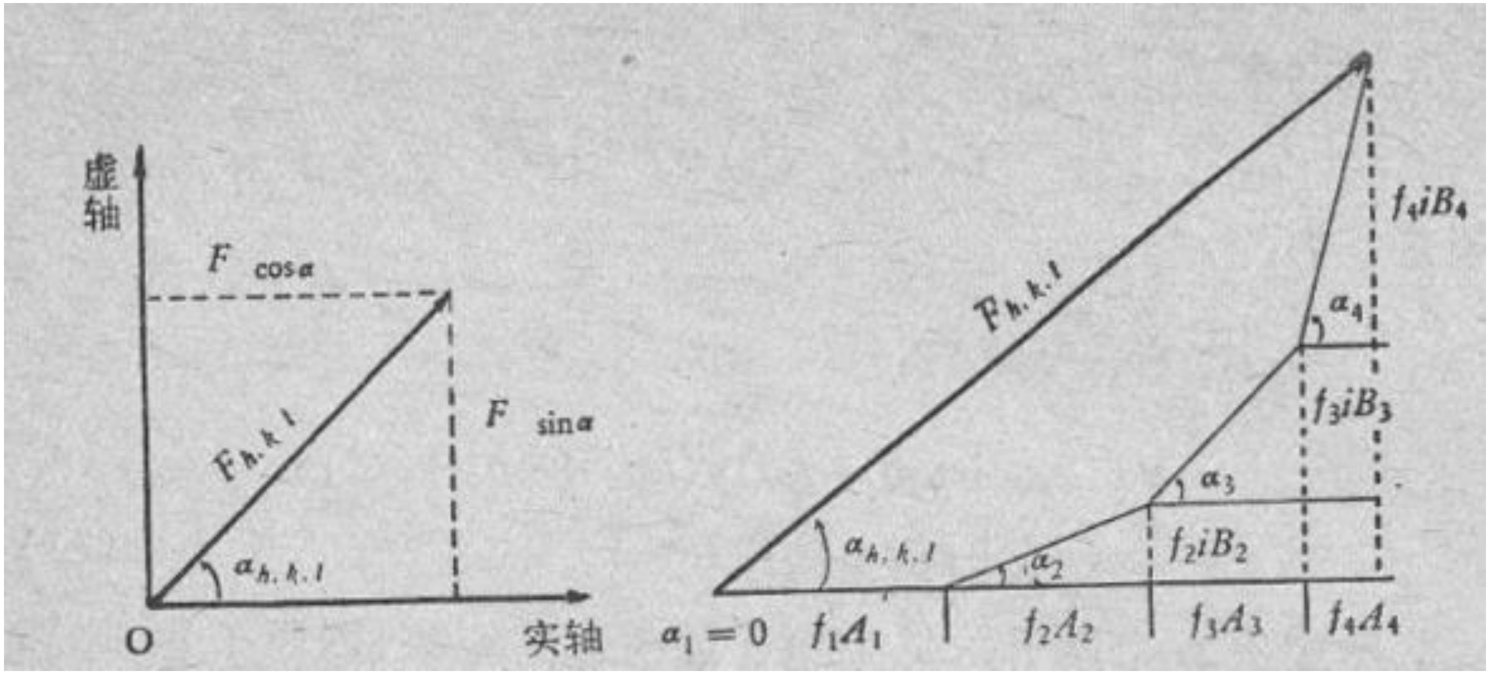
$$E_{uc} = E_e\sum_{i=1}^{n} f_j e^{i\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{r}_j} = E_e\sum_{i=1}^{n} f_j e^{i\boldsymbol{s}\cdot(x_j\boldsymbol{a}+y_j\boldsymbol{b}+z_j\boldsymbol{c})}$$

结构因数/因子

$$F(\boldsymbol{s})=\frac{E_{uc}}{E_e}=\sum_{i=1}^{n} f_j e^{i\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{r}_j}=\sum_{i=1}^{n} f_j e^{i\boldsymbol{s}\cdot(x_j\boldsymbol{a}+y_j\boldsymbol{b}+z_j\boldsymbol{c})}$$

结构因数F(**s**)——也有人称为结构振幅——表征了晶胞内原子种类，各种原子的个数和晶胞内原子的排列对衍射的影响。它的物理意义是一个晶胞向有**s**规定的方向散射的振幅等于F(**s**)个电子处在晶胞原点向这一方向散射的总振幅。

结构因数/因子



$$F(\boldsymbol{s})=\frac{E_{uc}}{E_e}=\sum_{i=1}^{n} f_j e^{i\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{r}_j}=\sum_{i=1}^{n} f_j e^{i\boldsymbol{s}\cdot(x_j\boldsymbol{a}+y_j\boldsymbol{b}+z_j\boldsymbol{c})}$$

$$F(\boldsymbol{s}) = \frac{E_{uc}}{E_e} = \sum_{i=1}^{n} f_j e^{i\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{r}_j} = \sum_{i=1}^{n} f_j e^{i\boldsymbol{s}\cdot(x_j\boldsymbol{a}+y_j\boldsymbol{b}+z_j\boldsymbol{c})}$$

$$\exp\{i\alpha\} = \cos\alpha + i\sin\alpha = A + iB$$

$$F_{\boldsymbol{s}} = \left|F_{\boldsymbol{s}}\right| \exp\{i\alpha_{\boldsymbol{s}}\} = \left|F_{\boldsymbol{s}}\right| \cos\alpha_S + i\left|F_{\boldsymbol{s}}\right| \sin\alpha_S = A'_S + iB_S$$

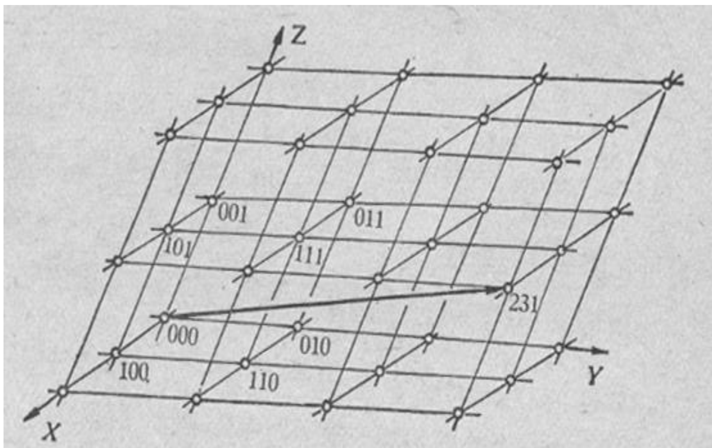
$$\left|F_{\boldsymbol{s}}\right| = (A'^2_S + iB'^2_S)^{1/2}$$

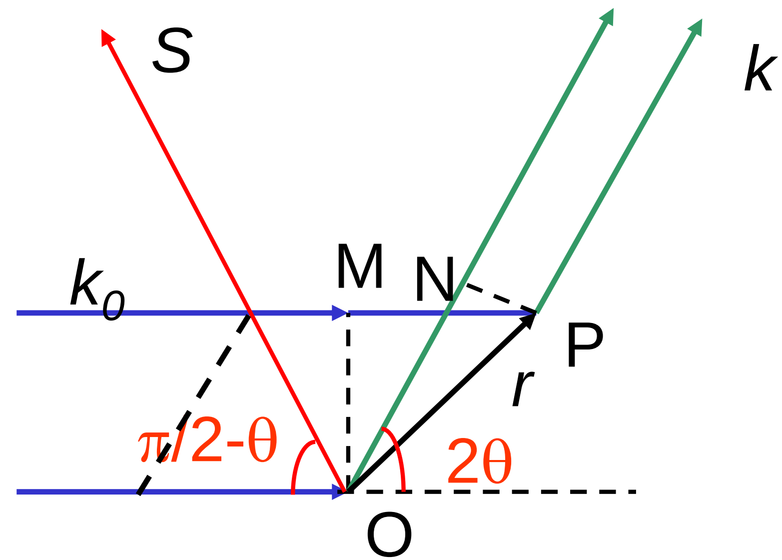
$$A'_S = \left|F_{\boldsymbol{s}}\right| \cos\alpha_S = \sum_{j=1}^{n} f_j \cos\{\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{a}x_j + \boldsymbol{b}y_j + \boldsymbol{c}z_j)\}$$

$$B'_S = \left|F_{\boldsymbol{s}}\right| \sin\alpha_S = \sum_{j=1}^{n} f_j \sin\{\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{a}x_j + \boldsymbol{b}y_j + \boldsymbol{c}z_j)\}$$

$$\alpha_S = \tan^{-1}\frac{B'}{A'}$$

2.2.2 一个晶体内所有晶胞对X射线的散射





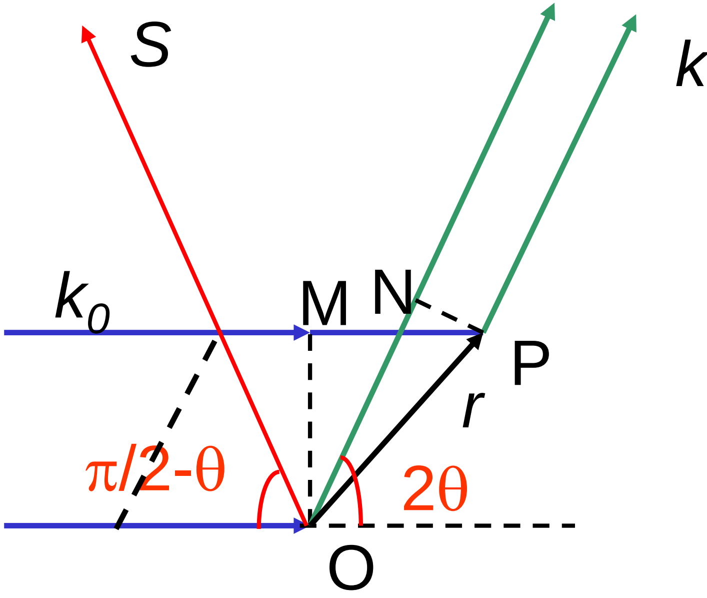
$$\mathbf{r}_N = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$$

2.2.2 一个晶体内所有晶胞对X射线的散射

$$\phi = \frac{2\pi}{\lambda}(ON - MP) = \boldsymbol{r}_P \cdot (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0) \equiv \boldsymbol{r}_P \cdot \boldsymbol{s}$$

$$\boldsymbol{r}_P = m\boldsymbol{a} + n\boldsymbol{b} + p\boldsymbol{c}$$

$$\boldsymbol{s} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0, |\boldsymbol{s}| = \frac{4\pi \sin\theta}{\lambda}$$



$$E_c = F(s)E_e \sum_{P=0}^{N-1} e^{is\cdot \boldsymbol{r}_Q} = F(s)E_e \sum_{m=0}^{N_1-1} e^{is\cdot m\boldsymbol{a}} \sum_{n=0}^{N_2-1} e^{is\cdot n\boldsymbol{b}} \sum_{p=0}^{N_3-1} e^{is\cdot p\boldsymbol{c}}$$

$$= F(s)E_e \sum_{m=0}^{N_1-1} e^{im\boldsymbol{a}\cdot \boldsymbol{s}} \sum_{n=0}^{N_2-1} e^{in\boldsymbol{b}\cdot \boldsymbol{s}} \sum_{p=0}^{N_3-1} e^{ip\boldsymbol{c}\cdot \boldsymbol{s}}$$

2.2.2 一个晶体内所有晶胞对X射线的散射

$$I_S' = I_e \left|F(s)\right|^2 \left|\sum_{m=0}^{N_1-1} e^{i\mathbf{s}\cdot m\mathbf{a}} \sum_{n=0}^{N_2-1} e^{i\mathbf{s}\cdot n\mathbf{b}} \sum_{p=0}^{N_3-1} e^{i\mathbf{s}\cdot p\mathbf{c}}\right|^2$$

$$G_1 = \left|\sum_{m=0}^{N_1-1} e^{i\mathbf{s}\cdot m\mathbf{a}}\right|$$

$$G_1 = \left| \sum_{m=0}^{N_1-1} e^{i\boldsymbol{s}\cdot m\boldsymbol{a}} \right|$$

$$a + ar + ar^2 + \cdots + ar^l = \frac{r^l - a}{r - 1}$$

$$G_1 = \left| \sum_{m=0}^{N_1-1} e^{i\boldsymbol{s}\cdot m\boldsymbol{a}} \right| = \left| \frac{e^{iN_1\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{S}} - 1}{e^{i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{S}} - 1} \right| = \frac{\sin \frac{1}{2} N_1 \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{s}}{\sin \frac{1}{2} \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{s}}$$

$$I_c = E_c \cdot E_c^*$$

$$= F^2(s) E_e^2 \cdot \frac{\sin^2 \frac{1}{2} N_1 \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{s}}{\sin^2 \frac{1}{2} \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{s}} \cdot \frac{\sin^2 \frac{1}{2} N_2 \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{s}}{\sin^2 \frac{1}{2} \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{s}} \cdot \frac{\sin^2 \frac{1}{2} N_3 \boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{s}}{\sin^2 \frac{1}{2} \boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{s}}$$

干涉函数

$$I(s)=\frac{\sin^2\frac{1}{2}N_1\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{s}}{\sin^2\frac{1}{2}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{s}}\cdot\frac{\sin^2\frac{1}{2}N_2\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{s}}{\sin^2\frac{1}{2}\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{s}}\cdot\frac{\sin^2\frac{1}{2}N_3\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{s}}{\sin^2\frac{1}{2}\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{s}}$$

$$I_c=F^2(s)E_e^2I(s)$$

干涉函数

$$I(s)=\frac{\sin^2\frac{1}{2}N_1\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{s}}{\sin^2\frac{1}{2}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{s}}\cdot\frac{\sin^2\frac{1}{2}N_2\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{s}}{\sin^2\frac{1}{2}\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{s}}\cdot\frac{\sin^2\frac{1}{2}N_3\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{s}}{\sin^2\frac{1}{2}\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{s}}$$

$$\varphi_a=\frac{1}{2}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{a},$$

（1）主极大的位置，大小，宽度和数目

位置：

$$\varphi_a=h\pi=\frac{1}{2}s\cdot a$$

大小：

$$\left[\frac{\sin^2 N_1\varphi_a}{\sin^2\varphi_a}\right]_{\varphi_a=h\pi}=N_1^2$$

宽度：

$$\frac{\sin^2 N_1\varphi_a}{\sin^2\varphi_a}=0$$

$$\varphi_a^0=\frac{p\pi}{N_1}+h\pi$$

$$\varphi_a^0=\pm\frac{\pi}{N_1}+h\pi$$

$$\frac{2\pi}{N_1}$$

主极大的宽度和数目

数目: $$|\theta| \le \frac{\pi}{2}, |2\theta| \le \pi, |\sin\theta| \le 1$$

$$\varphi_a = \frac{1}{2}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{a} = \boldsymbol{h}\pi$$

$$\frac{1}{2}\cdot\frac{4\pi\sin\theta}{\lambda}\cdot a = h\pi$$

$$\frac{h\lambda}{a} = 2\sin\theta$$

$$|h| \le \frac{2a}{\lambda}$$

零点位置数目

$$\frac{\sin^2 N_1\varphi_a}{\sin^2\varphi_a} = 0$$

$$\varphi_a^0 = \frac{p\pi}{N_1} + h\pi$$

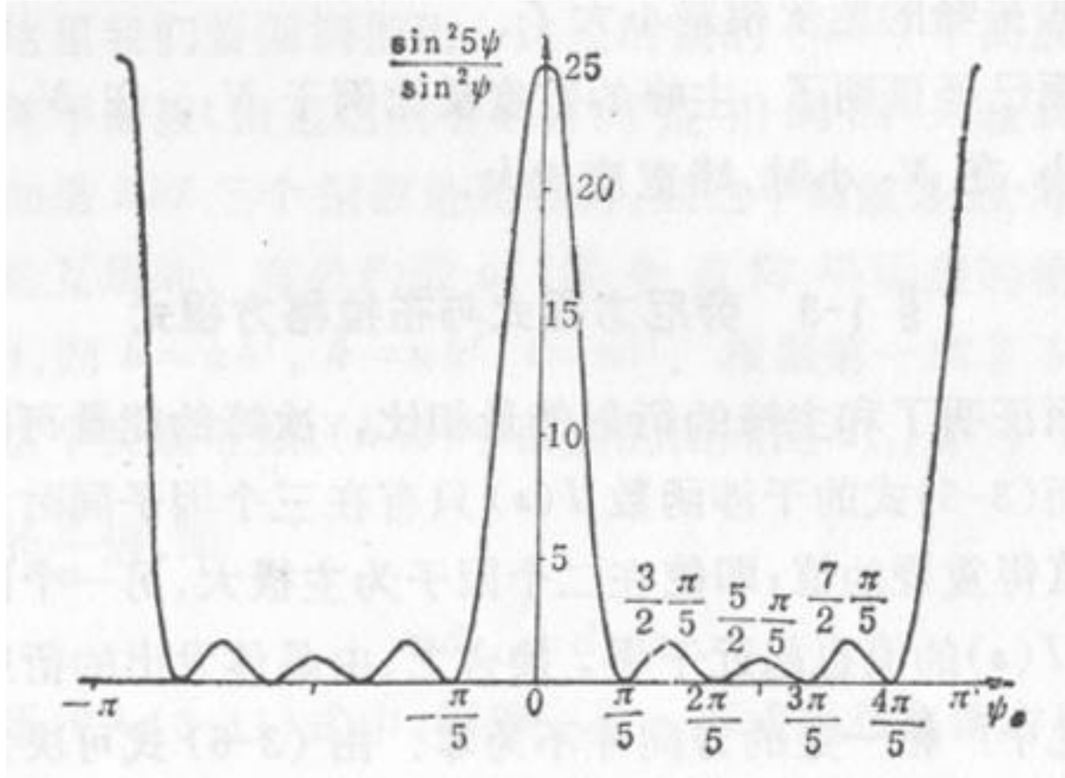
p＝1，2…N－1

次极大的位置，数目和强度

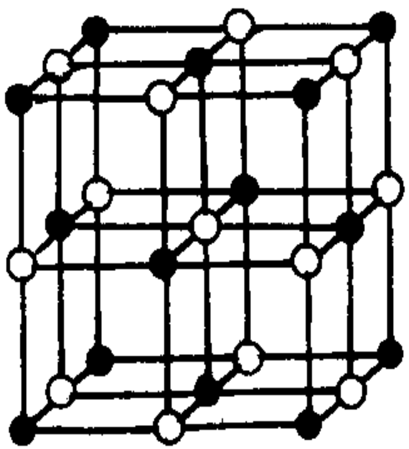
零点位置之间为次极大

$$\varphi_a^s = \frac{\dfrac{p\pi}{N_1} + \dfrac{(p+1)\pi}{N_1}}{2}$$

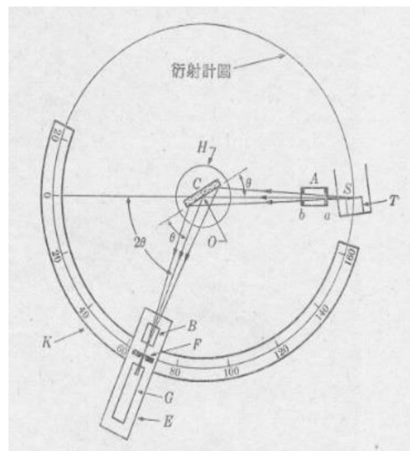
$$= \frac{2p+1}{2}\frac{\pi}{N_1}$$

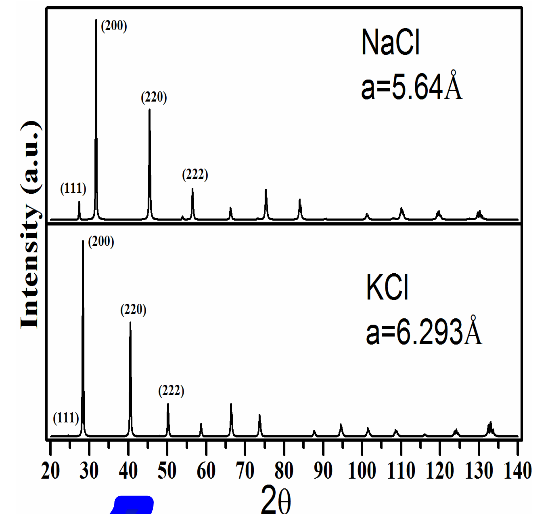


衍射峰敏锐/背底强度低 取决于?



NaCl





$$\varphi_a^s = \frac{\dfrac{p\pi}{N_1} + \dfrac{(p+1)\pi}{N_1}}{2} = \frac{2p+1}{2}\frac{\pi}{N_1}$$

2.2.3 劳厄方程式与布拉格方程式

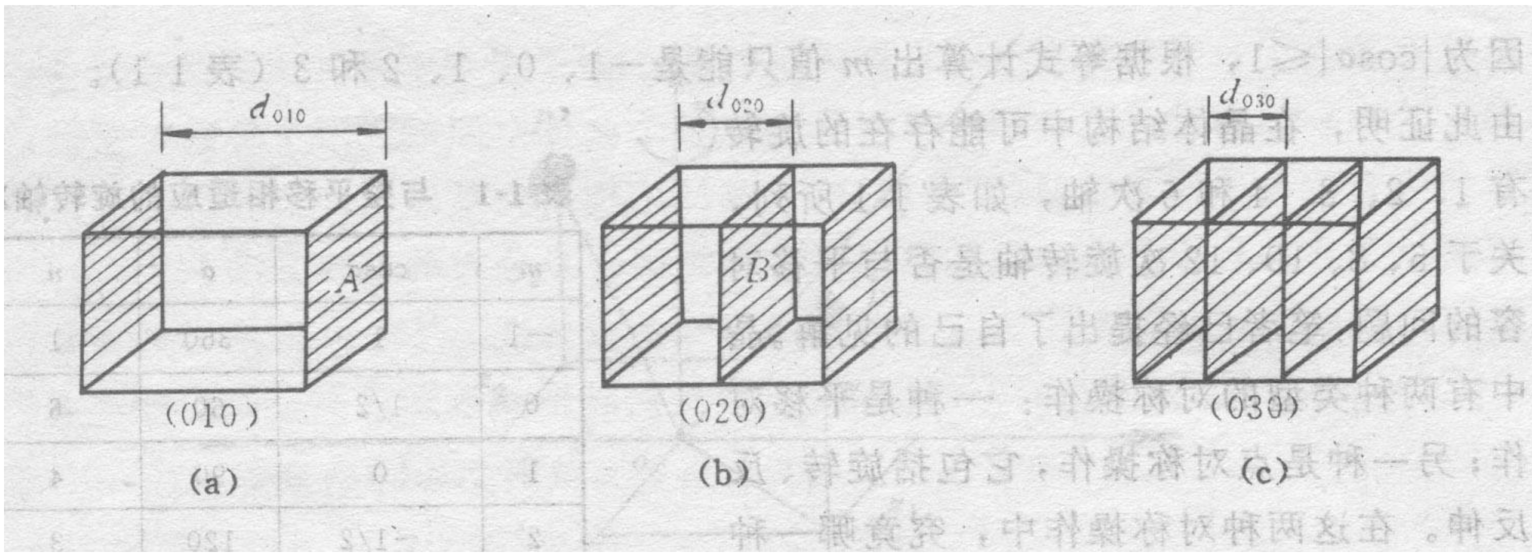
$$\varphi_a = \frac{1}{2}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{a} = \boldsymbol{h}\pi$$

$$\varphi_b = \frac{1}{2}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{b} = \boldsymbol{k}\pi$$

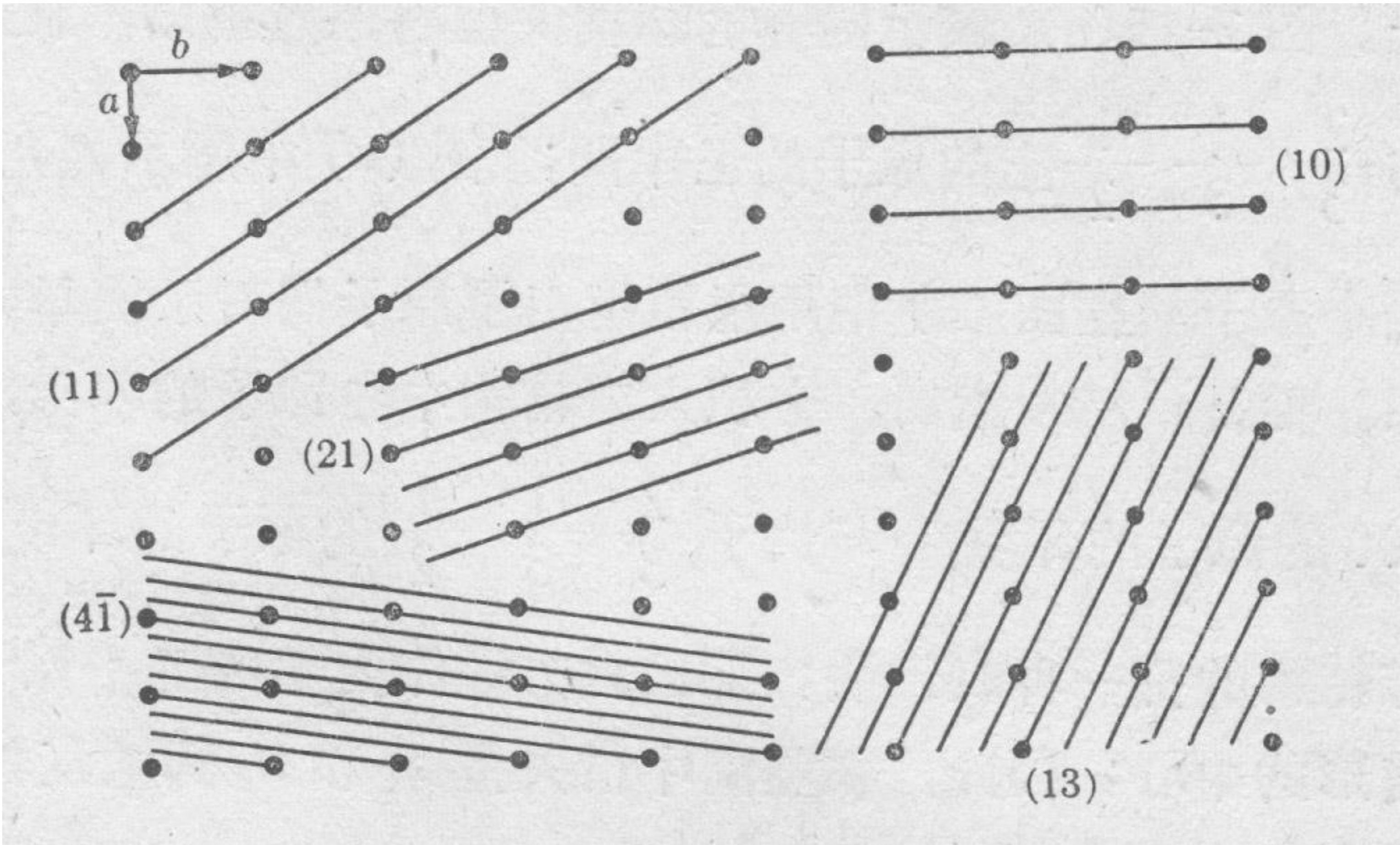
$$\varphi_c = \frac{1}{2}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{c} = \boldsymbol{l}\pi$$

$$\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{a} = 2\boldsymbol{h}\pi,\ \boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{b} = 2\boldsymbol{k}\pi, \boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{c} = 2\boldsymbol{l}\pi$$

劳厄方程式与布拉格方程式

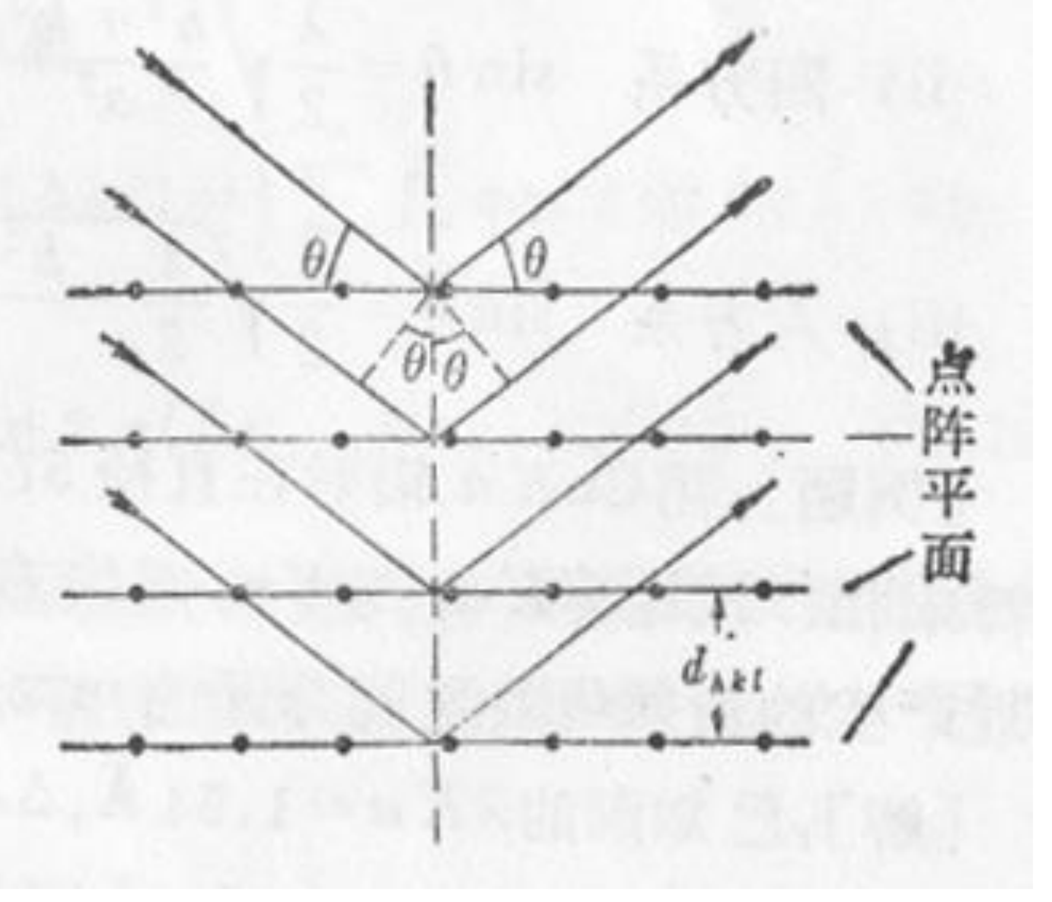


劳厄方程式与布拉格方程式



布拉格方程式

$$2d_{hkl}\sin\theta = \lambda$$



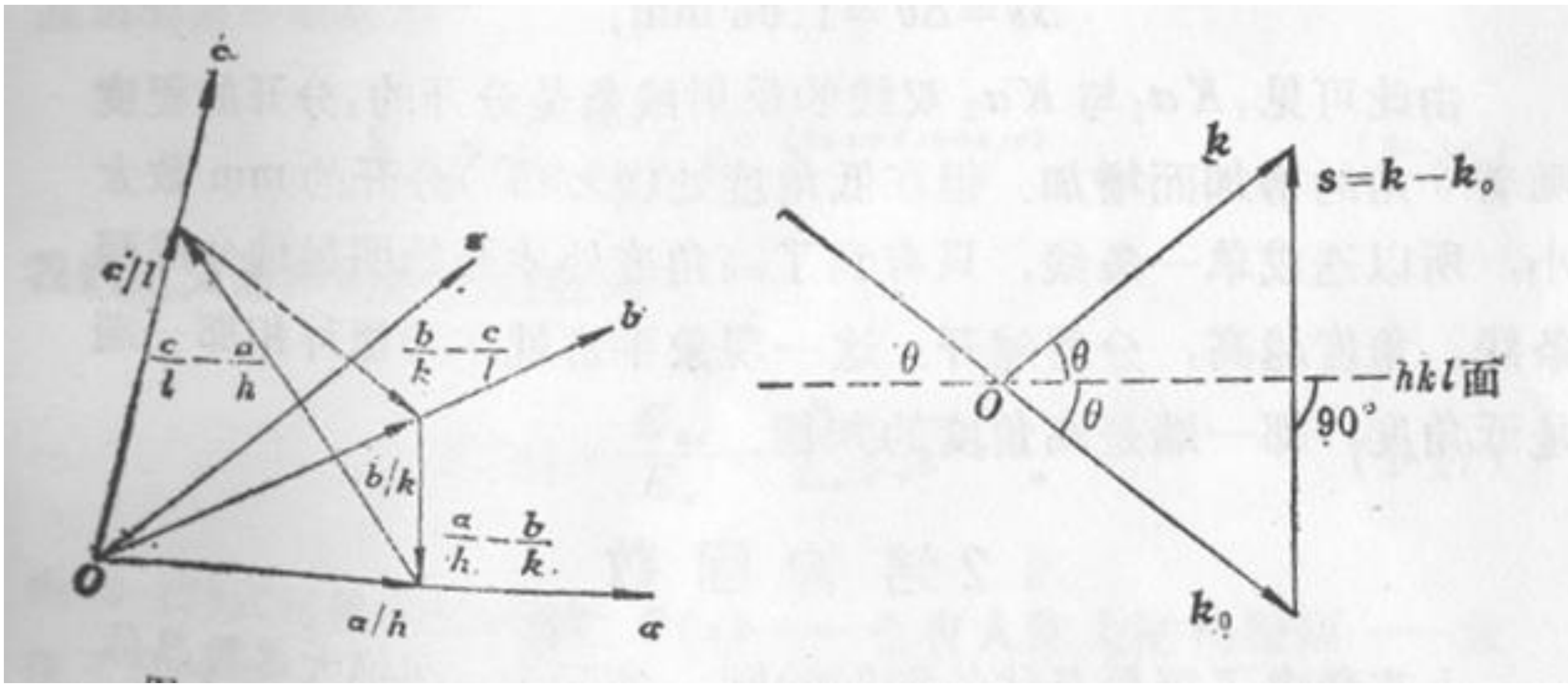
劳厄方程式

$$\mathbf{s}\cdot\frac{\boldsymbol{a}}{h}=2\pi,\qquad \mathbf{s}\cdot\left(\frac{\boldsymbol{a}}{h}-\frac{\boldsymbol{b}}{k}\right)=0$$

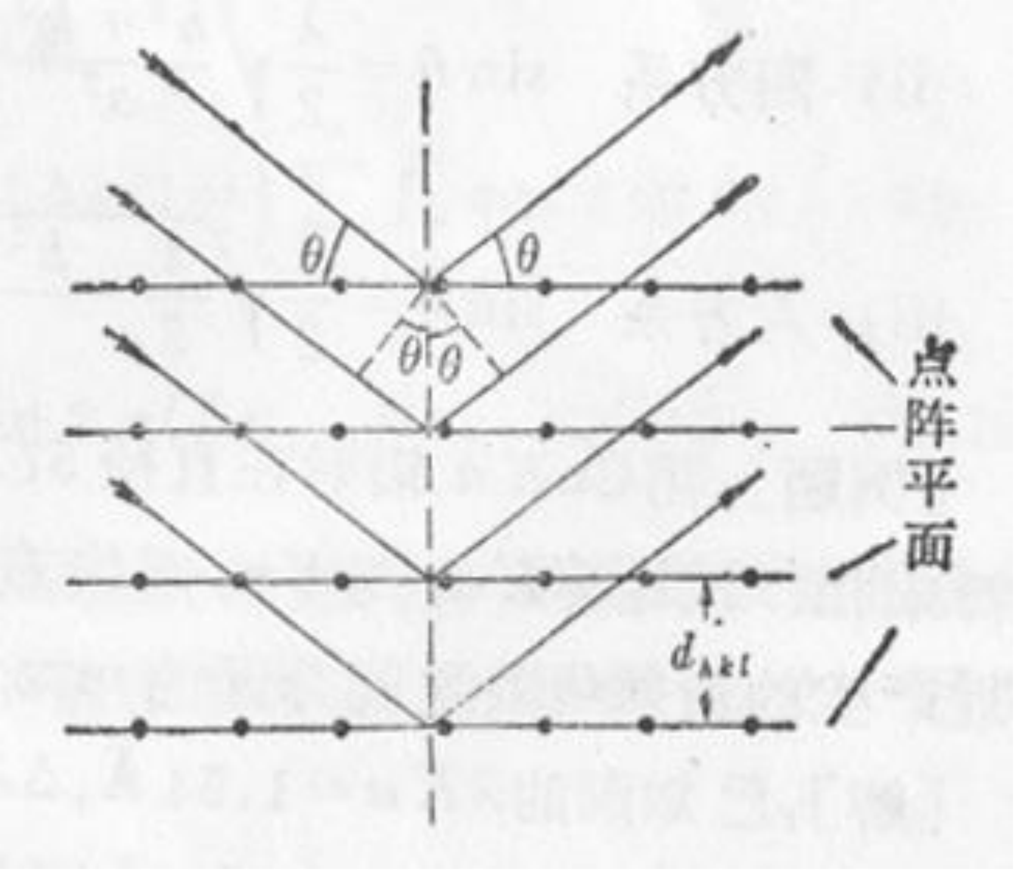
$$\mathbf{s}\cdot\frac{\boldsymbol{b}}{k}=2\pi\qquad \mathbf{s}\cdot\left(\frac{\boldsymbol{b}}{k}-\frac{\boldsymbol{c}}{l}\right)=0$$

$$\mathbf{s}\cdot\frac{\boldsymbol{c}}{l}=2\pi\qquad \mathbf{s}\cdot\left(\frac{\boldsymbol{c}}{l}-\frac{\boldsymbol{a}}{h}\right)=0$$

劳厄方程式与布拉格方程式



劳厄方程式与布拉格方程式



劳厄方程式与布拉格方程式

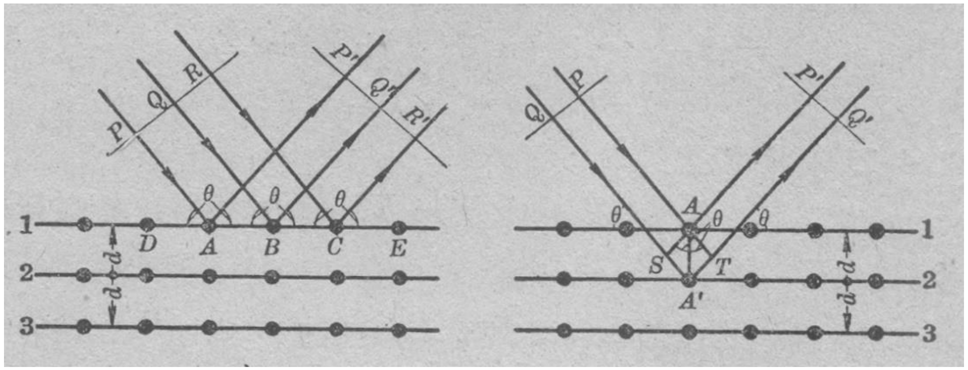
$$d_{hkl} = \frac{\boldsymbol{s} \cdot \dfrac{\boldsymbol{a}}{h}}{|\boldsymbol{s}|} = \frac{\boldsymbol{s} \cdot \dfrac{\boldsymbol{b}}{k}}{|\boldsymbol{s}|} = \frac{\boldsymbol{s} \cdot \dfrac{\boldsymbol{c}}{l}}{|\boldsymbol{s}|}$$

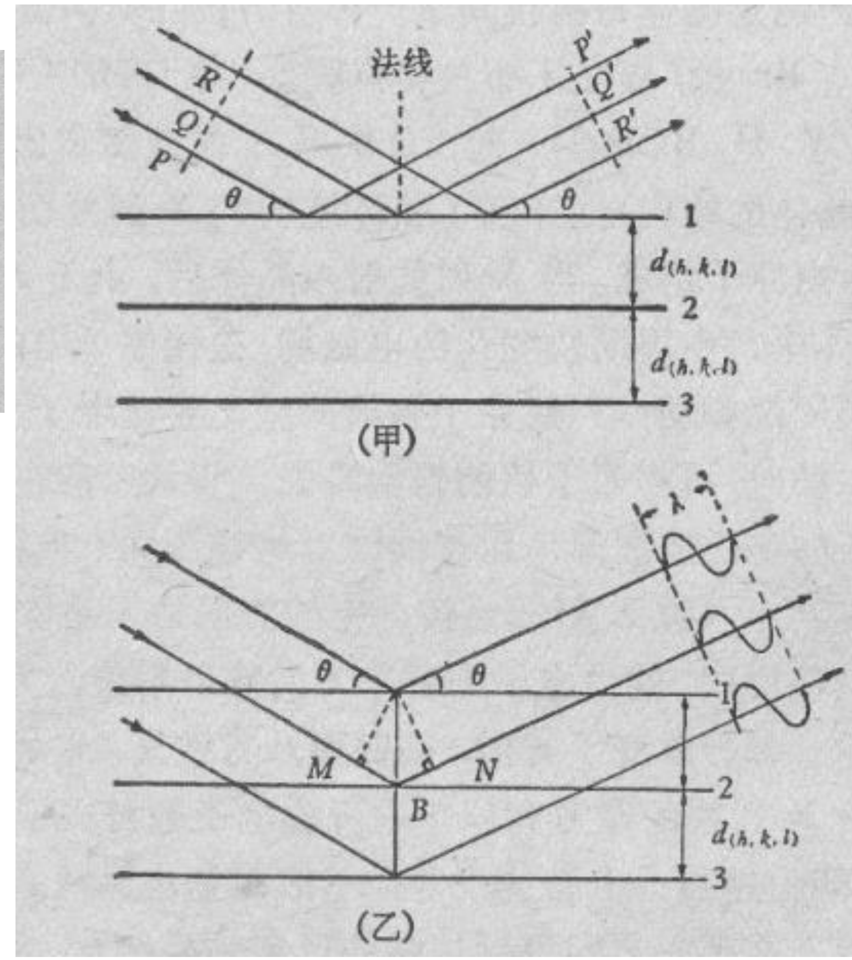
$$\boldsymbol{s} \cdot \frac{\boldsymbol{a}}{h} = \boldsymbol{s} \cdot \frac{\boldsymbol{b}}{k} = \boldsymbol{s} \cdot \frac{\boldsymbol{c}}{l} = 2\pi$$

$$|\boldsymbol{s}| = \frac{4\pi \sin\theta}{\lambda}$$

$$2d_{hkl} \sin\theta = \lambda$$

如何理解布拉格方程?



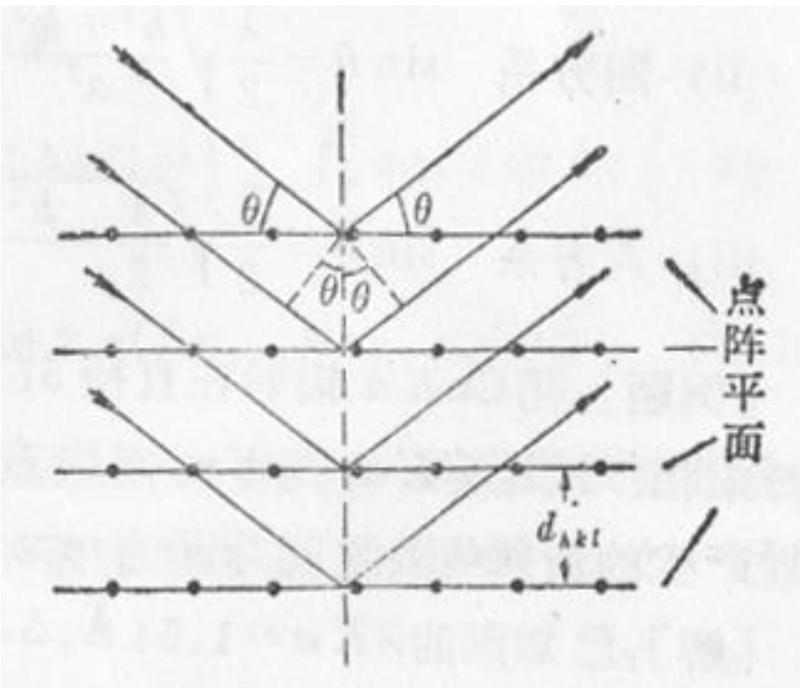


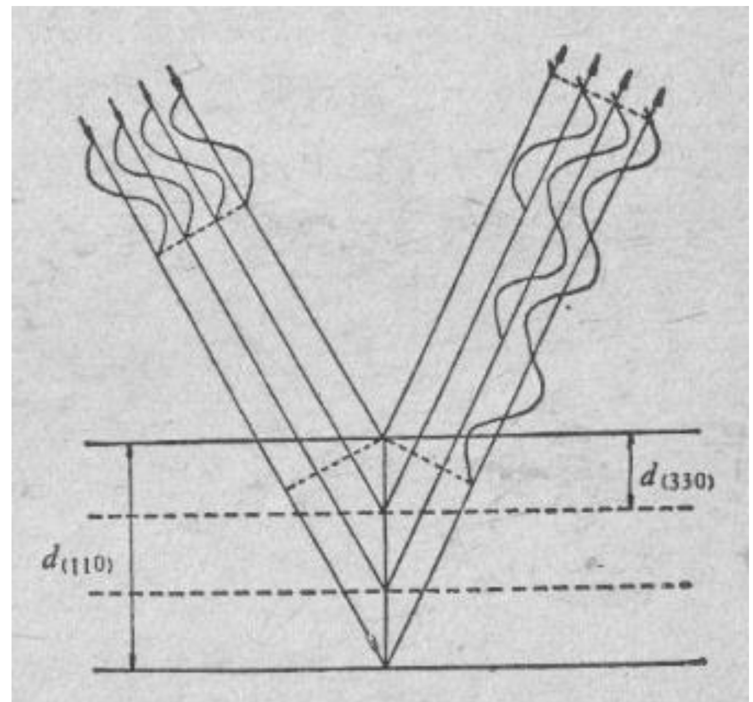
$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda$$

一维，二维，三维

如何理解 n？

$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda \qquad 2d_{hkl}\sin\theta = \lambda$$





不同晶系晶面间距的计算

$$\frac{1}{d^2}=\frac{h^2+k^2+l^2}{a^2}$$

$$\frac{1}{d^2}=\frac{h^2+k^2}{a^2}+\frac{l^2}{c^2}$$

$$V=abc,\frac{1}{d^2}=\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{c^2}$$

$$V=\frac{\sqrt{3}}{2}a^2c,\frac{1}{d^2}=\frac{4}{3a^2}(h^2+hk+k^2)+\frac{l^2}{c^2}$$

不同晶系晶面间距的计算

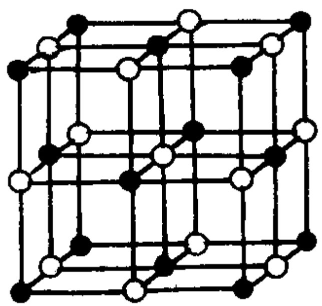
$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{V^2}\{h^2b^2c^2\sin^2\alpha + k^2c^2a^2\sin^2\beta + l^2a^2b^2\sin^2\gamma$$

$$+2abc[kla(\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha)$$

$$+lhb(\cos\gamma\cos\alpha - \cos\beta) +$$

$$hkc(\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma)]\}$$

X射线晶体衍射结构分析基本原理



NaCl

晶体结构 ↔ 空间点阵 ＋ 结构基元

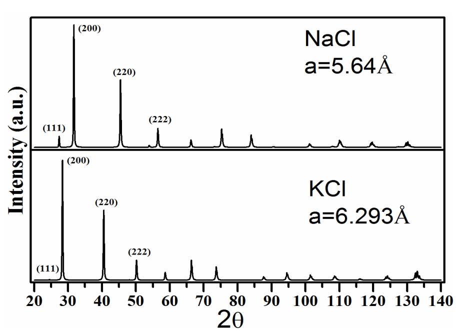
晶胞参数　　原子位置

$$2d_{hkl}\sin\theta=\lambda$$

$$F(hkl)=\sum_{i=1}^{n}f_je^{i2\pi(hx_j+ky_j+lz_j)}$$

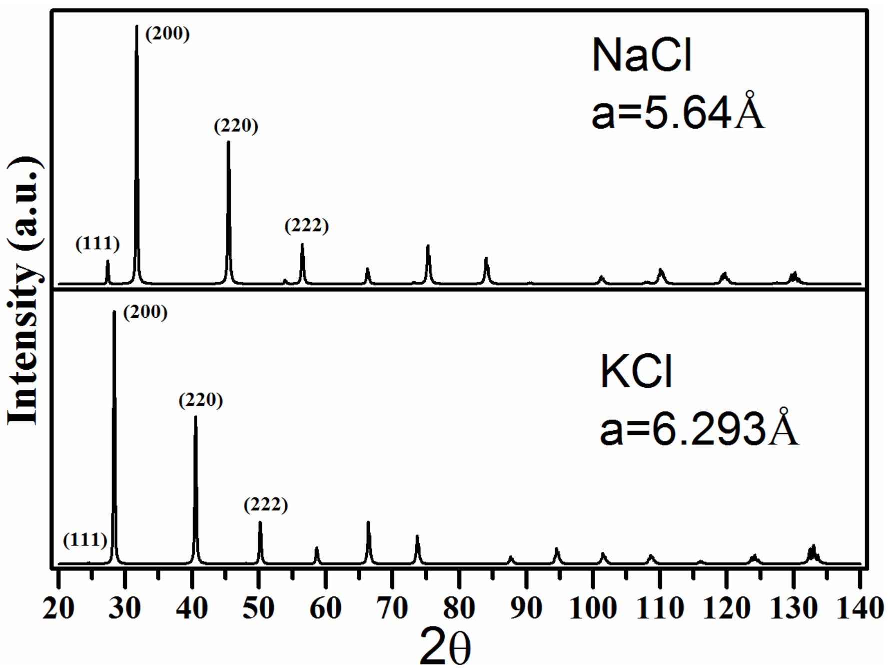
衍射峰位置　　衍射峰强度

实验数据



2.2.4 衍射方程的简单应用举例

3.1 简单实例分析



问题？

1.KCl衍射峰偏向低角度

2.(100) 衍射峰消失

3.全奇指标衍射峰弱于全偶

4.KCl (111) 弱于 NaCl (111)

32	f	$.3m$	x,x,x	$\bar{x},\bar{x},x$	$\bar{x},x,\bar{x}$	$x,\bar{x},\bar{x}$		
			$x,x,\bar{x}$	$\bar{x},\bar{x},\bar{x}$	$x,\bar{x},x$	$\bar{x},x,x$		
24	e	$4m.m$	$x,0,0$	$\bar{x},0,0$	$0,x,0$	$0,\bar{x},0$	$0,0,x$	$0,0,\bar{x}$
24	d	$m.mm$	$0,\frac{1}{4},\frac{1}{4}$	$0,\frac{3}{4},\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4},0,\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4},0,\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4},\frac{1}{4},0$	$\frac{3}{4},\frac{1}{4},0$
8	c	$\bar{4}3m$	$\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}$				
4	b	$m\bar{3}m$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$					
4	a	$m\bar{3}m$	$0,0,0$					

NaCl/KCl 晶体结构

Fm3m

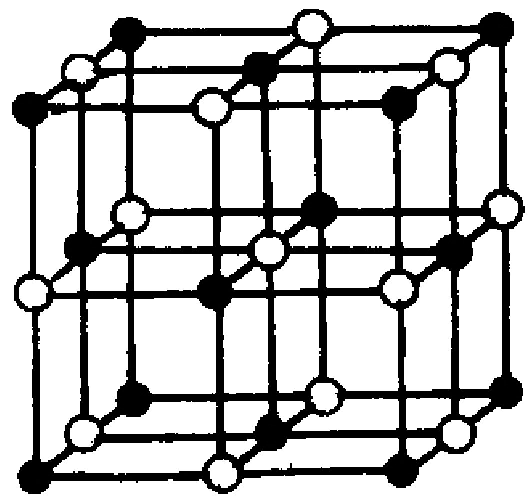
a=5.640 Å

Na 4a (0,0,0)

Cl 4b (0.5,0.5,0.5)

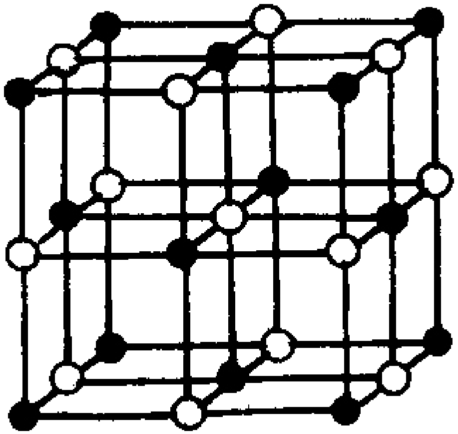
Z=4

KCl: a=6.2901Å



NaCl

1.5 简单实例分析



NaCl

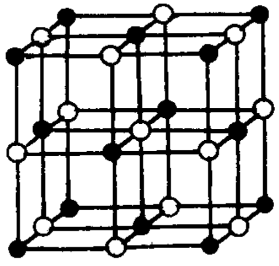
$$000, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$$

$$F(hkl) = \sum_{i=1}^{n} f_j e^{i2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)}$$

$$F(hkl) = fe^{2\pi i(0)} + fe^{2\pi i(k+l)/2} + fe^{2\pi i(h+l)/2} + fe^{2\pi i(h+k)/2}$$

(100),(110),(210), (211): $F(hkl) = f + f - f - f = 0$

(111),(200),(220)(311): $F(hkl) = f + f + f + f = 4f$



Na 4a (0,0,0),
Cl 4b (0.5,0.5,0.5)

$$F(hkl) = \sum_{i=1}^{n} f_j e^{i2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)}$$

(111),(200),(220)(311) $f_1 = f(\mathrm{Na}^+)\,;\, f_2 = f(\mathrm{Cl}^-)$

$$F(hkl) = f_1 e^{2\pi i(0)} + f_1 e^{2\pi i(k+l)/2} + f_1 e^{2\pi i(h+l)/2} + f_1 e^{2\pi i(h+k)/2}$$

$$+ f_2 e^{2\pi ih/2} + f_2 e^{2\pi ik/2} + f_2 e^{2\pi il/2} + f_2 e^{2\pi i(h+k+l)/2}$$

(111), (311) $F(hkl) = 4f_1 - 4f_2 = 4f(\mathrm{Na}^+) - 4f(\mathrm{Cl}^-)$ Weak

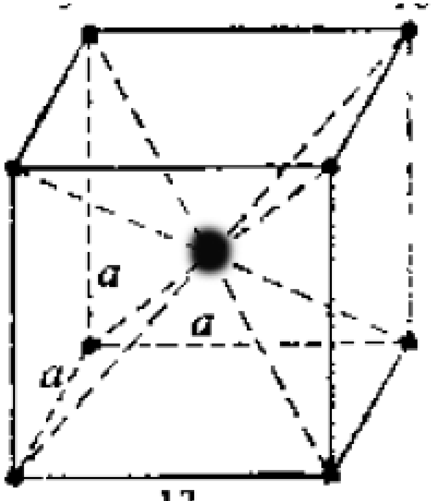
(200), (220) $F(hkl) = 4f_1 + 4f_2 = 4f(\mathrm{Na}^+) + 4f(\mathrm{Cl}^-)$ Strong

KCl, (111) $F(hkl) = 4f_1 - 4f_2 = 4f(\mathrm{K}^+) - 4f(\mathrm{Cl}^-)$ Very weak

d值的精确度 ~ 0.00001 nm

(hkl)	NaCl Fm3m a=5.64		KCl Fm3m a=6.293	
	d (Å)	I	d(Å)	I
111	3.2600	13	3.6330	1
200	2.8210	100	3.1460	100
220	1.9940	55	2.2251	37
311	1.7010	2	1.8972	<1
222	1.6280	15	1.8169	10

衍射强度分析



Fe单质： Im3m a=2.866

$$F(hkl) = fe^{2\pi i(0)} + fe^{2\pi i(h+k+l)/2}$$

hkl	I
110	100
200	20
211	30
220	10
310	12
222	6

确定晶体点阵类型的系统消光条件 消光规律

布拉格点阵	出现的衍射	不出现的衍射
简单点阵P	全部出现	无
体心点阵I	h+k+l为偶数	h+k+l为奇数
面心点阵F	h,k,l为全奇或全偶	h,k,l有奇有偶
C面底心点阵	h和k全奇或全偶	h和k一奇一偶
A面底心点阵	k和l全奇或全偶	k和l一奇一偶

确定晶体所具有的微观对称元素

设晶格中有平行于（001）且通过原点的2_1螺旋轴。这样，这个对称元素就要求对应于晶胞内任意一点

$x_j y_j z_j$ 有等效点 $-x_j - y_j, z_j + \frac{1}{2}$

确定晶体所具有的微观对称元素

$$f\sum^{\frac{n}{2}} e^{2\pi i(hx_j+ky_j+lz_j)} + f\sum^{\frac{n}{2}} e^{2\pi i(-hx_j-ky_j+lz_j+\frac{1}{2}l)}$$

(00l) $$f\sum e^{2\pi i(lz_j)} + f\sum e^{2\pi i(lz_j+\frac{l}{2})}$$

$l=2n$ **有强度**

$l=2n+1$ **0**

消光规律

螺旋轴的系统消光特征　消光规律

反射晶面	反射条件	螺旋轴类型	符号
001	l = 2n l = 3n l = 4n l = 6n	平行[001]，c/2 平行[001]，c/3 平行[001]，c/4 平行[001]，c/6	$2_1, 4_2, 6_3$ $3_1, 3_2, 6_2, 6_4$ $4_2, 4_3$ $6_1, 6_5$
h00	l = 2n l = 4n	平行[100]，a/2 平行[100]，a/4	$2_1, 4_2$ $4_1, 4_3$
0k0	l = 2n l = 4n	平行[010]，b/2 平行[010]，b/4	$2_1, 4_2$ $4_1, 4_3$
hh0	l = 2n	平行[110]，a/2+b/2	2_1

确定晶体所具有的微观对称元素

设晶体中有平行于（010）面，滑移方向沿着a轴的滑移面存在。这样，这个对称元素就要求对应于晶胞内任意一点

$x_j y_j z_j$ 有等效点 $x_j+\frac{1}{2}, \beta-y_j, z_j$

β 与坐标原点的选择有关。

确定晶体所具有的微观对称元素

$$f\sum^{\frac{n}{2}} e^{2\pi i(hx_j+ky_j+lz_j)} + f\sum^{\frac{n}{2}} e^{2\pi i(hx_j-ky_j+lz_j+\frac{h}{2}+\beta k)}$$

(h0l) $$f\sum e^{2\pi i(hx_j+lz_j)} + f\sum e^{2\pi i(hx_j+lz_j+\frac{h}{2})}$$

l=2n **有强度**

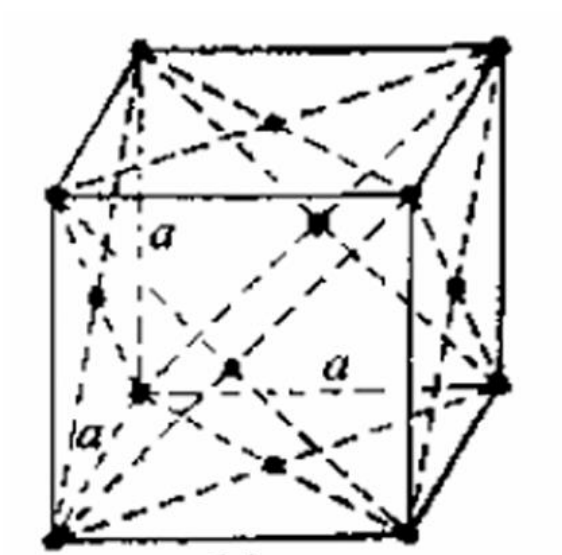
l=2n+1 ***0***

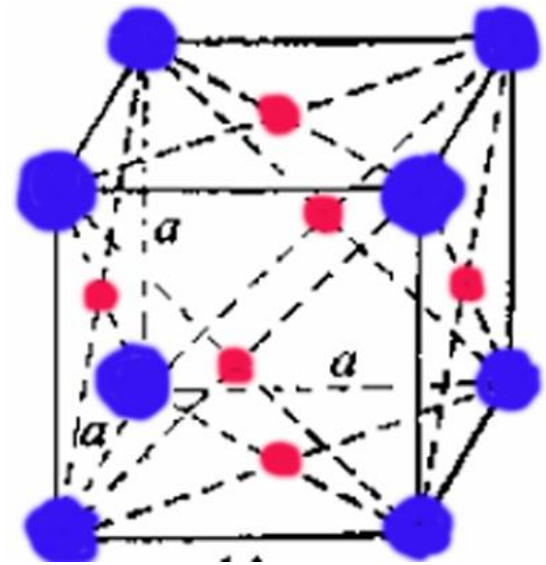
消光规律

滑移面的系统消光特征 消光规律

反射晶面	反射条件	滑移面类型	符号
hk0	h = 2n	垂直[010]， a/2	*a*
	k = 2n	垂直[010]， b/2	*b*
	h+k=2n	垂直[010]， a/2+b/2	*n*
	h+k=4n	垂直[010]， a/4+b/4	*d*
h0l	h = 2n	垂直[001]， a/2	*a*
	l = 2n	垂直[001]， c/2	*c*
	h+l=2n	垂直[001]， a/2+b/2	*n*
	h+l=4n	垂直[001]， a/4+b/4	*d*
hhl	l = 2n	垂直[110]， c/2	*c*
	h = 2n	垂直[001]， a/2+b/2	*b*
	h+l=2n	垂直[001]， a/2+b/2+ c/2	*n*
	2h+l=4n	垂直[001]， a/4+b/4+ c/4	*d*

检查固溶体中原子占位的有序化





$$F(hkl) = f_{Au} + f_{Cu}[e^{\pi i(h+k)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(k+l)}]$$

$$= \begin{cases} fAu+3fCu, (\text{当}h,k,l\text{全为奇数或全为偶数时}) \\ fAu-fCu, (\text{当}h,k,l\text{为有奇数有偶数时}) \end{cases}$$

陆学善，梁敬魁，*铜金二元系中超结构的形成与点阵间隔的变迁*，

物理学报 22， 669-697（1966）

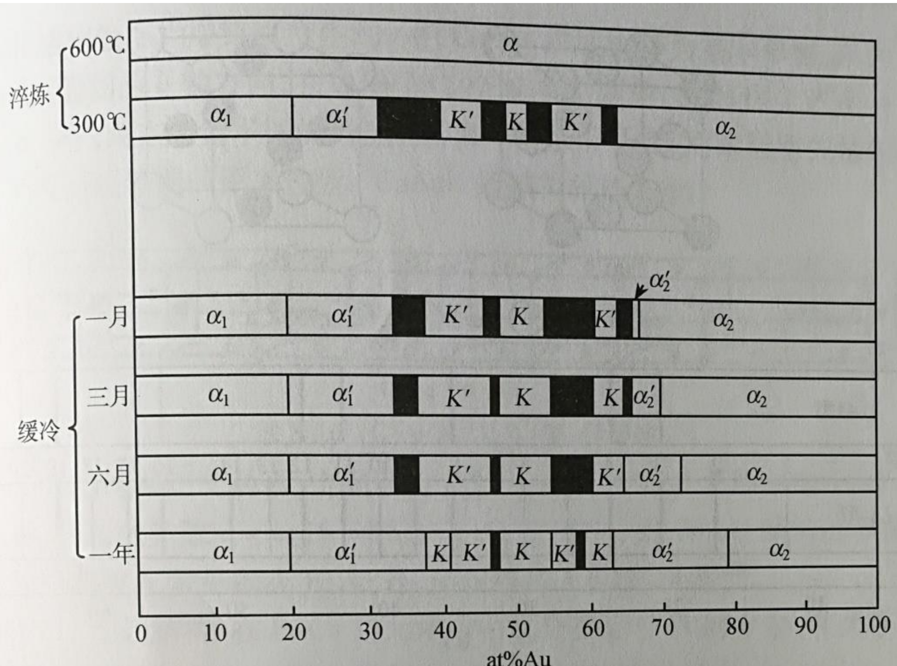


图 8.13　Cu-Au 二元系的相区分布

α_1 为以 Cu 为基的固溶体，属 $A1$ 型结构；α'_1 为相当于 Cu_3Au 的 $L1_2$ 型超结构；
α_2 为以 Au 为基的固溶体，属 $A1$ 型结构；α'_2 为相当于 $CuAu_3$ 的 $L1_2$ 型超结构；
K 为相当于 CuAuI 的 $L1_0$ 型超结构；K'为相当于 CuAuII 的 $L1_0V_W$ 型超结构；
为两相区

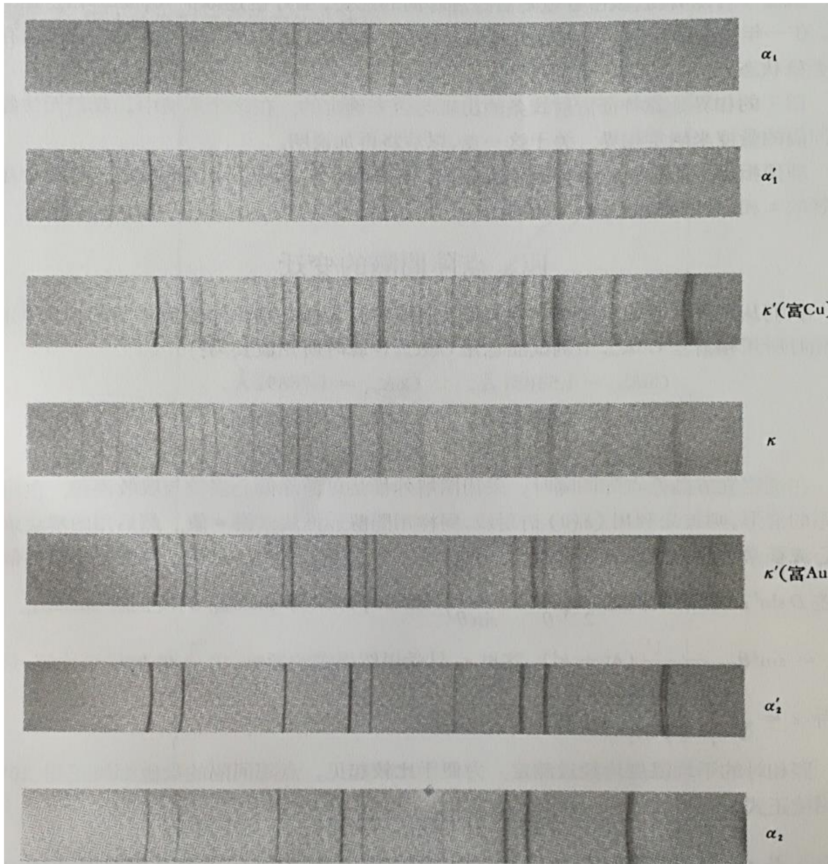
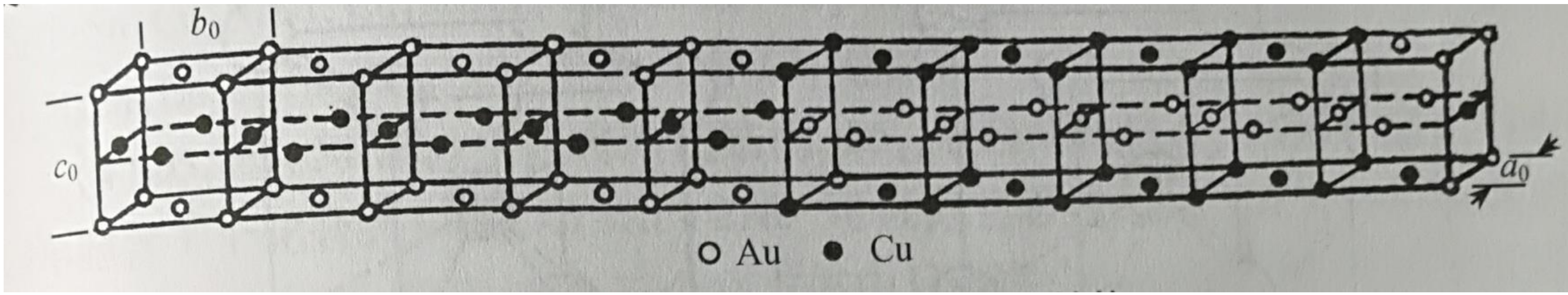


图 2　单相合金的典型衍射图样

陆学善，梁敬魁，*铜金二元系中超结构的形成与点阵间隔的变迁*，

物理学报 22， 669-697（1966）



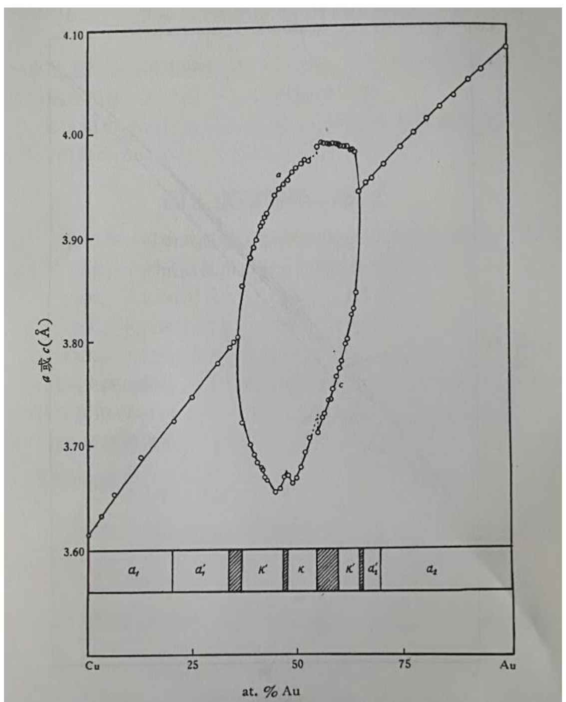


图 4 缓冷合金点阵间隔随成分的变迁

陆学善（1905-1981）