Material Sciences 材料科学, **2012, 2, 106-109**
doi:10.4236/ms.2012.23019 Published Online July 2012 (http://www.hanspub.org/journal/ms)

Calculation of Interplanar Spacing and Structure-Factor of Diamond-Type Structure

Qunchen Fan

State Key Laboratory for Mechanical Behavior of Materials, Xi'an Jiaotong University, Xi'an
Email: qcfan@mail.xjtu.edu.cn

Received: Mar. 4th, 2012; revised: Mar. 28th, 2012; accepted: Apr. 7th, 2012

Abstract: With the "site-factor *S*" of an addition atom, the possible four kinds of interplanar spacing of diamond-type structure was calculated. In addition, the structure-factor of this structure was calculated, and a correlativity between the interplanar spacing and the structure-factor was analysed. Finally, a difference in missing reflection conditions between diamond-type structure and face-centered cubic structure was discussed.

Keywords: Interplanar Spacing; Structure-Factor; Site-Factor; Diamond-Type Structure

金刚石型结构晶面间距及结构因子的计算

范群成

西安交通大学材料强度国家重点实验室，西安
Email: qcfan@mail.xjtu.edu.cn

收稿日期：2012 年 3 月 4 日；修回日期：2012 年 3 月 28 日；录用日期：2012 年 4 月 7 日

摘　要：用添加原子的“位置因子 *S*”，得到了金刚石型结构可能的四种面间距。计算了这种结构的结构因子，并分析了晶面间距与结构因子的相关性。讨论了金刚石型结构与面心立方结构间消光条件的差异。

关键词：晶面间距；结构因子；位置因子；金刚石型结构

1. 引言

金刚石、硅、锗等具有金刚石型结构的晶体是一类重要的材料。然而，关于这种结构的晶面间距及X-光衍射结构因子的计算，在国内外相关专著和教科书[1-10]中却很少提及。金刚石型结构与面心立方结构都属面心立方点阵，二者的晶面间距修正条件及消光条件是否相同呢？B. D. Cullity[5]指出，金刚石所有出现反射的面都具有不混合指数，但诸如 200、222、420等等那样的反射却消失。此处出现的消光面，究竟有什么规律呢？本文作者已经用添加原子的位置因子 *S* 成功计算了密排六方晶体的面间距[11]。在本文中，将运用这种方法计算金刚石型结构的面间距，并计算它的结构因子。

2. 晶面间距的计算

2.1. 计算方法

金刚石型结构的初级晶胞是简单立方。简单立方的面间距 d'_{hkl} 可用下式计算：

$$d'_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \tag{1}$$

式中，*h*、*k*、*l* 为互质的整数，*a* 为点阵常数。

金刚石型晶体的一个晶胞含有 8 个同种原子，他们在晶胞中的位置如下：

$$000\quad \frac{1}{2}\frac{1}{2}0\quad \frac{1}{2}0\frac{1}{2}\quad 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}\quad \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}\quad \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}\quad \frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}\quad \frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}$$

7 个添加原子的加入会使某些方位的(*hkl*)晶面中

出现附加面，其面间距必须修正。晶面间距的计算，就是要确定出现附加面的条件，并确定相应的修正系数。这可以用下式给出的添加原子的位置因子 S 进行确定：

$$S = hx + ky + lz = p + \frac{m}{q} \tag{2}$$

式中，x、y、z 为添加原子在晶胞中的位置，h、k、l 为晶面指数，p 为整数，m、q 为互质整数，且 $m < q$。

分别将 7 个添加原子的 x、y、z 值代入(2)式，得到 7 个 S 值：

$$S_i = x_i h + y_i k + z_i l = \left(p + \frac{m}{q}\right)_i \quad i = 1, 2, \cdots, 7, \tag{3}$$

若 7 个 S 皆为整数，则该(hkl)面中无附加面，其面间距无须修正，$d_{hkl} = d'_{hkl}$。若 7 个 S 中有分数值，则其真分数为该添加原子所在附加面面间距的修正系数，而所有不同修正系数的数目(相同的计为 1 个)就是该晶面所有附加面的总数。

2.2. 计算结果

1) h、k、l 全奇时

$$S_1 = \frac{h}{2} + \frac{k}{2} + 0 = p$$

$$S_2 = \frac{h}{2} + 0 + \frac{l}{2} = p$$

$$S_3 = 0 + \frac{k}{2} + \frac{l}{2} = p$$

$$S_4 = \frac{h}{4} + \frac{k}{4} + \frac{l}{4} = \frac{h+k+l}{4} = p + \frac{2 \pm 1}{4}$$

$$S_5 = \frac{3h}{4} + \frac{3k}{4} + \frac{l}{4} = \frac{h+k+l}{4} + \frac{h+k}{2} = p + \frac{h+k+l}{4} = p + \frac{2 \pm 1}{4}$$

$$S_6 = \frac{3h}{4} + \frac{k}{4} + \frac{3l}{4} = \frac{h+k+l}{4} + \frac{h+l}{2} = p + \frac{h+k+l}{4} = p + \frac{2 \pm 1}{4}$$

$$S_7 = \frac{h}{4} + \frac{3k}{4} + \frac{3l}{4} = \frac{h+k+l}{4} + \frac{k+l}{2} = p + \frac{h+k+l}{4} = p + \frac{2 \pm 1}{4}$$

1 个附加面，$d_{hkl} = d'_{hkl}/4$ 或 $3d'_{hkl}/4$

2) h、k、l 全偶时

$$S_1 = \frac{h}{2} + \frac{k}{2} + 0 = p$$

$$S_2 = \frac{h}{2} + 0 + \frac{l}{2} = p$$

$$S_3 = 0 + \frac{k}{2} + \frac{l}{2} = p$$

$$S_4 = \frac{h}{4} + \frac{k}{4} + \frac{l}{4} = \frac{h+k+l}{4}$$

$$S_5 = \frac{3h}{4} + \frac{3k}{4} + \frac{l}{4} = \frac{h+k+l}{4} + \frac{h+k}{2} = p + \frac{h+k+l}{4}$$

$$S_6 = \frac{3h}{4} + \frac{k}{4} + \frac{3l}{4} = \frac{h+k+l}{4} + \frac{h+l}{2} = p + \frac{h+k+l}{4}$$

$$S_7 = \frac{h}{4} + \frac{3k}{4} + \frac{3l}{4} = \frac{h+k+l}{4} + \frac{k+l}{2} = p + \frac{h+k+l}{4}$$

当 $h+k+l = 4n$ 时，

$$S_1 = S_2 = S_3 = S_4 = S_5 = S_6 = S_7 = p$$

无附加面，$d_{hkl} = d'_{hkl}$。

当 $h+k+l = 4n-2$ 时，

$$\frac{h+k+l}{4} = p + \frac{1}{2}$$

$$S_4 = S_5 = S_6 = S_7 = p + \frac{1}{2}$$

1 个附加面，$d_{hkl} = d'_{hkl}/2$。

3) h、k、l 奇偶混合时

当 h、k、l 二奇一偶时，

$$S_1 = \frac{h}{2} + \frac{k}{2} + 0 = \frac{h+k}{2}$$

$$S_2 = \frac{h}{2} + 0 + \frac{l}{2} = \frac{h+l}{2}$$

$$S_3 = 0 + \frac{k}{2} + \frac{l}{2} = \frac{k+l}{2}$$

$$S_4 = \frac{h}{4} + \frac{k}{4} + \frac{l}{4} = p + \frac{3 \pm 1}{4}$$

$$S_5 = \frac{3h}{4} + \frac{3k}{4} + \frac{l}{4} = p + \frac{3 \pm 1}{4}$$

$$S_6 = \frac{3h}{4} + \frac{k}{4} + \frac{3l}{4} = p + \frac{3 \pm 1}{4}$$

$$S_7 = \frac{h}{4} + \frac{3k}{4} + \frac{3l}{4} = p + \frac{3 \pm 1}{4}$$

S_1、S_2、S_3 中有 2 个为 $p+\frac{1}{2}$，1 个为整数

$$S_4=S_5=S_6=S_7=p+\frac{3\pm1}{4}=p \text{ 或 } p+\frac{1}{2}$$

1 个附加面，$d_{hkl}=d'_{hkl}/2$。

当 h、k、l 二偶一奇时，

$$S_1=\frac{h}{2}+\frac{k}{2}+0=\frac{h+k}{2}$$

$$S_2=\frac{h}{2}+0+\frac{l}{2}=\frac{h+l}{2}$$

$$S_3=0+\frac{k}{2}+\frac{l}{2}=\frac{k+l}{2}$$

$$S_4=\frac{h}{4}+\frac{k}{4}+\frac{l}{4}=p+\frac{2\pm1}{4}$$

$$S_5=\frac{3h}{4}+\frac{3k}{4}+\frac{l}{4}=p+\frac{2\pm1}{4}$$

$$S_6=\frac{3h}{4}+\frac{k}{4}+\frac{3l}{4}=p+\frac{2\pm1}{4}$$

$$S_7=\frac{h}{4}+\frac{3k}{4}+\frac{3l}{4}=p+\frac{2\pm1}{4}$$

S_1、S_2、S_3 中有 2 个为 $p+\frac{1}{2}$，1 个为整数

$$S_4=S_5=S_6=S_7=p+\frac{2\pm1}{4}=p+\frac{1}{4} \text{ 及 } p+\frac{3}{4}$$

3 个附加面等间距分布，$d_{hkl}=d'_{hkl}/4$。

综合上述结果示于表 1。

3. 结构因子的计算

3.1. 计算方法

将 8 个原子的位置因子 S 代入下式：

$$F_{hkl}=\sum_{j=1}^{n} f_j e^{2\pi i S_j} \tag{4}$$

Table 1. The number of additional planes and interplanar spacing d_{hkl} of diamond-type crystals
表 1. 金刚石型晶体的附加面数目及晶面间距 d_{hkl}

	h、k、l	附加面数目	d_{hkl}
混合	2 奇 1 偶	1(位于中央)	$d'_{hkl}/2$
	2 偶 1 奇	3(等间距分布)	$d'_{hkl}/4$
全偶	$h+k+l=4n-2$	1(位于中央)	$d'_{hkl}/2$
	$h+k+l=4n$	0	d'_{hkl}
全奇		1(不位于中央)	$d'_{hkl}/4$ or $3d'_{hkl}/4$

式中，f 为一个原子的散射因子。

则，(hkl)晶面的结构因子 F 为

$$\begin{aligned}
F &= fe^{2\pi i(0)}+fe^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}\right)}+fe^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{l}{2}\right)}+fe^{2\pi i\left(\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)} \\
&+fe^{2\pi i\left(\frac{h}{4}+\frac{k}{4}+\frac{l}{4}\right)}+fe^{2\pi i\left(\frac{3h}{4}+\frac{3k}{4}+\frac{l}{4}\right)}+fe^{2\pi i\left(\frac{3h}{4}+\frac{k}{4}+\frac{3l}{4}\right)} \\
&+fe^{2\pi i\left(\frac{h}{4}+\frac{3k}{4}+\frac{3l}{4}\right)}=f\left[1+e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}\right)}+e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{l}{2}\right)}+e^{2\pi i\left(\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)}\right] \\
&+fe^{2\pi i\left(\frac{h}{4}+\frac{k}{4}+\frac{l}{4}\right)}\left[1+e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}\right)}+e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{l}{2}\right)}+e^{2\pi i\left(\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)}\right] \\
&=f\left[1+e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}\right)}+e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{l}{2}\right)}+e^{2\pi i\left(\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)}\right]\left[1+e^{2\pi i\left(\frac{h}{4}+\frac{k}{4}+\frac{l}{4}\right)}\right]
\end{aligned} \tag{5}$$

及，$F^2=|F|^2$。

3.2. 计算结果

1) h、k、l 全奇时

式(5)中，

$$\frac{h}{2}+\frac{k}{2}=\frac{h}{2}+\frac{l}{2}=\frac{k}{2}+\frac{l}{2}=p$$

$$\frac{h}{4}+\frac{k}{4}+\frac{l}{4}=\frac{2\pm1}{4}$$

$$1+e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}\right)}+e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{l}{2}\right)}+e^{2\pi i\left(\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)}=4$$

$$1+e^{2\pi i\left(\frac{h}{4}+\frac{k}{4}+\frac{l}{4}\right)}=1\pm i$$

$$F=4(1\pm i)f$$

$$F^2=32f^2$$

2) h、k、l 全偶时

当 $h+k+l=4n$ 时，式(5)中，

$$\frac{h}{2}+\frac{k}{2}=\frac{h}{2}+\frac{l}{2}=\frac{k}{2}+\frac{l}{2}=p$$

$$\frac{h}{4}+\frac{k}{4}+\frac{l}{4}=p$$

$$1+e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}\right)}+e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{l}{2}\right)}+e^{2\pi i\left(\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)}=4$$

$$1+e^{2\pi i\left(\frac{h}{4}+\frac{k}{4}+\frac{l}{4}\right)}=1+1=2$$

$$F=8f$$

$$F^2=64f^2$$

当 $h+k+l=4n-2$ 时，式(5)中，

$$\frac{h}{4}+\frac{k}{4}+\frac{l}{4}=p+\frac{1}{2}$$

$$1+e^{2\pi i\left(\frac{h}{4}+\frac{k}{4}+\frac{l}{4}\right)}=1-1=0$$

$$F=0$$

$$F^2=0$$

3) h、k、l 奇偶混合时

式(5)中，

$\frac{h}{2}+\frac{k}{2}$、$\frac{h}{2}+\frac{l}{2}$、$\frac{k}{2}+\frac{l}{2}$ 中，两个为 $p+\frac{1}{2}$，1 个为 p

$$1+e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}\right)}+e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}+\frac{l}{2}\right)}+e^{2\pi i\left(\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)}=0$$

$$F=0$$

$$F^2=0$$

综合上述结果及表 1 所列晶面间距的结果示于表 2。

4. 讨论

表 2 所列结果表明，面间距与结构因子二者之间有密切的相关性，即他们具有相同的面指数条件。这源自于二者都与添加原子的位置因子紧密相关。

B. D. Cullity[5]指出，金刚石所有出现反射的面都具有不混合指数，但诸如 200、222、420 等等那样的反射消失。事实上，此处反射消失的面，就是表 2 中所列的指数全偶中 $h+k+l=4n-2$ 的那一类面。

Table 2. Structure-factor F_{hkl}^2, the number of additional planes and interplanar spacing d_{hkl} of diamond-type crystals
表 2. 金刚石型晶体的结构因子 F_{hkl}^2、附加面数目及晶面间距 d_{hkl}

h、k、l		F_{hkl}^2	附加面数目	d_{hkl}
混合	2 奇 1 偶	0	1(位于中央)	$d'_{hkl}/2$
	2 偶 1 奇		3(等间距分布)	$d'_{hkl}/4$
全偶	$h+k+l=4n-2$	0	1(位于中央)	$d'_{hkl}/2$
	$h+k+l=4n$	$64f^2$	0	d'_{hkl}
全奇		$32f^2$	1(不位于中央)	$d'_{hkl}/4$ or $3d'_{hkl}/4$

金刚石型结构与面心立方结构都属于面心立方点阵，但二者的晶面间距修正条件及消光条件却不尽相同。面心立方结构的面间距修正条件就是其消光条件，即混合指数面消光，且消光面的面间距 $d_{hkl}=d'_{hkl}/2$。而金刚石型结构多了一类消光面，且消光面的面间距不全是 $d_{hkl}=d'_{hkl}/2$。造成这种差别的原因在于，金刚石型结构与面心立方结构的基元中原子数目不同。前者为 1 个原子，而后者为 2 个原子。

5. 结论

1) 用位置因子 S 计算得到，金刚石型晶体共有 4 种可能的面间距：h、k、l 全偶，且 $h+k+l=4n$ 时，$d_{hkl}=d'_{hkl}$；h、k、l 二奇一偶，或全偶且 $h+k+l=4n-2$ 时，$d_{hkl}=d'_{hkl}/2$；h、k、l 二偶一奇时，$d_{hkl}=d'_{hkl}/4$；h、k、l 全奇时，$d_{hkl}=d'_{hkl}/4$，或 $d_{hkl}=3d'_{hkl}/4$。

2) 结构因子计算表明，金刚石型晶体的消光条件为：h、k、l 奇偶混合，或全偶且 $h+k+l=4n-2$。这与同为面心立方点阵的面心立方晶体有所不同，源于二者不同的基元。

3) 由于面间距与结构因子都与添加原子的位置因子 S 紧密相关，故二者之间有密切的关联性。

参考文献 (References)

[1] J. D. Verhoeven. Fundamentals of physical metallurgy. New York: John Wiley and Sons, Inc., 1995.
[2] J.-J. Rousseau. Basic crystallography. New York: John Wiley and Sons, Inc., 1975.
[3] G. D. Arora. Crystallography and crystal structure. New Delhi: Sarup and Sons, 2000.
[4] L. H. Schwartz, J. B. Cohen. Diffraction from materials. New York: Academic Press, 1977.
[5] B. D. Cullity. Elements of X-ray diffraction. Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1956: 120-121.
[6] 胡赓祥, 蔡珣, 戎咏华. 材料科学基础(第三版)[M]. 上海: 上海交通大学出版社, 2010.
[7] 潘金生, 仝健民. 田民波.材料科学基础[M]. 北京: 清华大学出版社, 1998.
[8] 余永宁. 材料科学基础[M]. 北京: 高等教育出版社, 2006.
[9] 肖旭刚. 晶体结构几何理论(第二版)[M]. 北京: 高等教育出版社, 1993.
[10] 范雄. X 射线金属学[M]. 北京: 机械工业出版社, 1981.
[11] 范群成. 密排六方晶体晶面间距的计算[J]. 材料科学, 2012, in press.

