第三节 电子衍射理论

1、电子衍射条件
2、倒易点阵
3、选区衍射
4、花样标定
5、取向关系

概述

电镜中的电子衍射,其衍射几何与X射线完全相同,都遵循布拉格方程所规定的衍射条件和几何关系. 衍射方向可以由厄瓦尔德球(反射球)作图求出.因此,许多问题可用与X射线衍射相类似的方法处理.

- 电子衍射与X射线衍射相比的优点

•电子衍射能在同一试样上将形貌观察与结构分析结合起来。
•电子波长短，单晶的电子衍射花样婉如晶体的倒易点阵的一个二维截面在底片上放大投影，从底片上的电子衍射花样可以直观地辨认出一些晶体的结构和有关取向关系，使晶体结构的研究比X射线简单。
•物质对电子散射主要是核散射，因此散射强，约为X射线一万倍，曝光时间短。

- 不足之处

电子衍射强度有时几乎与透射束相当，以致两者产生交互作用，使电子衍射花样，特别是强度分析变得复杂，不能象X射线那样从测量衍射强度来广泛的测定结构。此外，散射强度高导致电子透射能力有限，要求试样薄，这就使试样制备工作较X射线复杂；在精度方面也远比X射线低。

1. 衍射几何

1.1. 晶体结构与空间点阵

空间点阵 + 结构基元 = 晶体结构

晶面：（hkl）,{hkl} 用面间距和晶面法向来表示

晶向：[uvw], <uvw>

晶带：平行晶体空间同一晶向的所有晶面的总称 ，[uvw]

1.2. Bragg定律

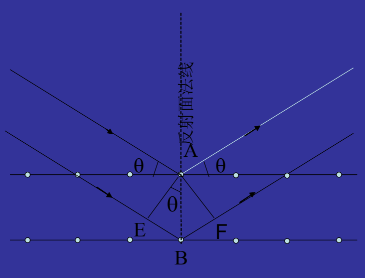
$2d\sin\theta = n\lambda$, $2d_{HKL}\sin\theta = \lambda$, 选择反射，**是产生衍射的必要条件，但不充分。**

100kV, λ=0.037Å

$\sin\theta = \lambda/2d_{HKL} = 10^{-2}$,

$\theta \approx 10^{-2} < 1^{\circ}$

$\mathbf{K_g - K_0 = g}$ $|\mathbf{g}| = 1/d$，用**g**代表一个面。

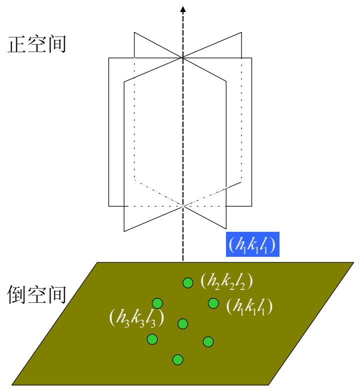


布拉格反射图解

2、倒易点阵

(hkl)晶面可用一个矢量来表示，使晶体几何关系简单化

一个晶带的所有面的矢量（点）位于同一平面，具有上述特性的点、矢量、面分别称为倒易点，倒易矢量、倒易面。因为它们与晶体空间相应的量有倒易关系。



晶带正空间与倒空间对应关系图

将所有{hkl}晶面相对应的倒易点都画出来，就构成了倒易点阵，过0*点的面称为0层倒易面，上、下和面依次称为±1，±2层倒易面。

正点阵基矢与倒易点阵基矢之间的关系:

$a \cdot a^* = b \cdot b^* = c \cdot c^* = 1$

$a \cdot b^* = a \cdot c^* = b \cdot a^* = b \cdot c^* = c \cdot a^* = c \cdot b^* = 0$

$g = ha^* + kb^* + lb^*$

晶体点阵和倒易点阵实际是互为倒易的

$\mathbf{r} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$

$\mathbf{r} \cdot \mathbf{g} = hu + kv + lw = N$

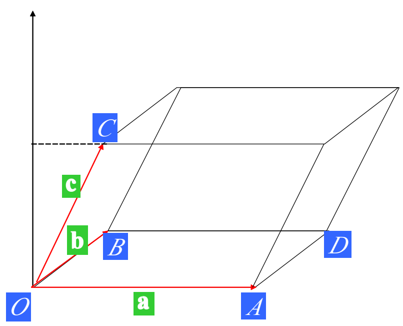
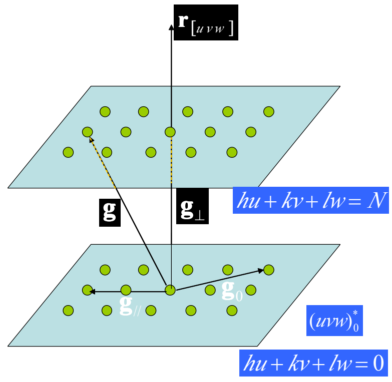


图2–5　与正点阵的关系

晶带定律

- $\mathbf{r} \cdot \mathbf{g} = 0$，狭义晶带定律，倒易矢量与r垂直，它们构成过倒易点阵原点的倒易平面
- $\mathbf{r} \cdot \mathbf{g} = N$，广义晶带定律,倒易矢量与r不垂直。这时g的端点落在第非零层倒易结点平面。



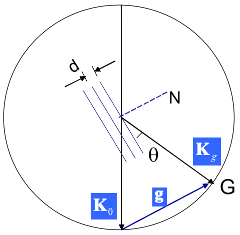
g与 **r** 的关系示意图

专题讨论：倒易点阵与衍射点阵

1、关于埃瓦尔德球 *（X射线与电子的有何区别）*

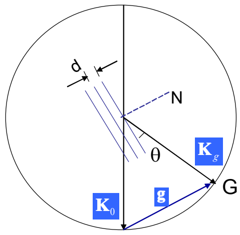
2、衍射斑点的性质（强度、形状）

1.1、埃瓦尔德球的含义



反射球

1.2、埃瓦尔德球的画法

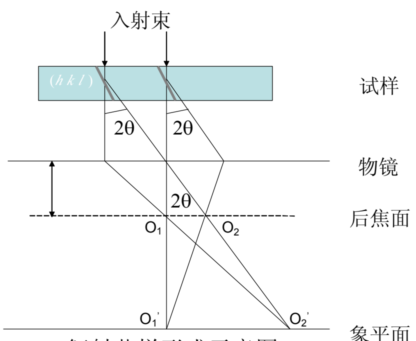


反射球作图法

$|\mathbf{K}_0| = |\mathbf{K}_g| = 1/\lambda$

2.1 衍射花样与倒易面

平行入射束与试样作用产生衍射束，同方向衍射束经物镜作用于物镜后焦面会聚成衍射斑．透射束会聚成中心斑或称透射斑。



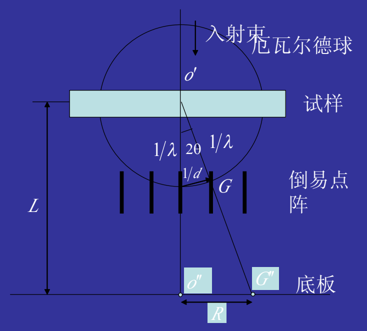
衍射花样形成示意图

Ewald图解法:

A: 以入射束与反射面的交点为原点，作半径为1/λ的球，与衍射束交于O^*.

B: 在反射球上过O^*点画晶体的倒易点阵；

C: 只要倒易点落在反射球上，即可能产生衍射．



电子衍射花样形成示意图

$\mathbf{K}-\mathbf{K}_0=\mathbf{g}$

$r/f=\mathrm{tg}2\theta \approx \sin 2\theta \approx 2\sin\theta = \lambda/d$

$r=f\lambda/d$, $\mathbf{r}=f\lambda\mathbf{g}$

$R=Mr$, $R=Mf\lambda/d=L\lambda/d$

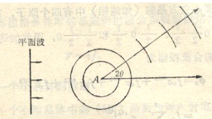
$L=Mf$, 称为**相机常数**

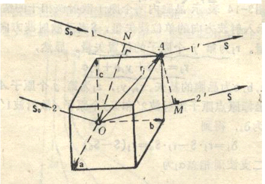
衍射花样相当于倒易点阵被反射球所截的二维倒易面的放大投影.

从几何观点看，倒易点阵是晶体点阵的另一种表达式，但从衍射观点看，有些倒易点阵也是衍射点阵。

2.2 衍射花样的强度

1、原子对电子的散射





两个原子对电子散射波的叠加

波程差δ: $\delta_j = \mathbf{r}_j\cdot\mathbf{S} - \mathbf{r}_j\cdot\mathbf{S}_0 = \mathbf{r}_j(\mathbf{S}-\mathbf{S}_0)$

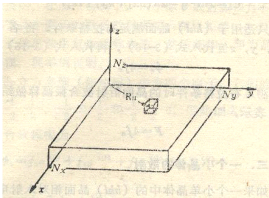
二支波周相差α_j为

$$\alpha_j = \frac{2\pi}{\lambda}\delta_j = 2\pi\mathbf{r}_j\cdot\frac{\mathbf{S}-\mathbf{S}_0}{\lambda} = 2\pi\mathbf{r}_j\cdot(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)$$

2、晶胞对电子的散射

知道了各个原子的原子散射振幅f_j和周相差α_j之后，再把每个原子散射波用复数函数表达，然后相加，即为晶胞的散射波振幅。

3、小晶体对电子的散射



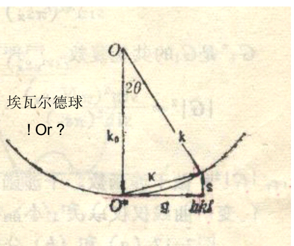
由$N_x\cdot N_y\cdot N_z$个晶胞组成的薄晶体中，第n个晶胞的位置

晶胞的位置矢量为

$$\mathbf{R}_n = n_x\mathbf{a}+n_y\mathbf{b}+n_z\mathbf{c}$$

散射波的周相差

$$\alpha = 2\pi(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\cdot\mathbf{R}_n$$



Case ! : Bragg rule

$K=k-k_0=g$,

$S=0$

Case ?: non Bragg rule

$K=k-k_0=g+S\neq g$

$S\neq 0$

小晶体的衍射振幅为

$$\phi = F\sum e^{2\pi i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_n} \quad ①$$

$$= F\left(\sum_{n_x=0}^{N_x-1} e^{2\pi i n_x s_x}\cdot\sum_{n_y=0}^{N_y-1} e^{2\pi i n_y s_y}\cdot\sum_{n_z=0}^{N_z-1} e^{2\pi i n_z s_z}\right)$$

括弧内的项用G表示，则

$$\phi = FG$$

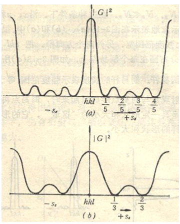
$$\phi^2 = I = F^2|G|^2$$

I是散射波的强度，F是结构振幅

$|G|^2$称做干涉函数利用欧拉公式和三角函数变换将$|G|^2$化简，得到

$$|G|^2=\frac{\sin^2(\pi N_x s_x)}{\sin^2(\pi s_x)}\cdot\frac{\sin^2(\pi N_y s_y)}{\sin(\pi s_y)}\cdot\frac{\sin^2(\pi N_z s_z)}{\sin(\pi s_z)}$$

若：Sx=0，Sy=0，Nz=3 or 5时：



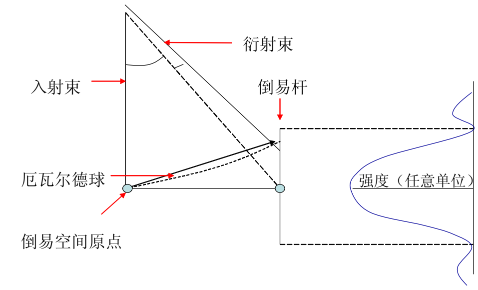
干涉函数$|G|^2$与s值的依赖关系

（1）小晶体的衍射线强度围绕倒易点存在一个分布范围，这就相当于在正空间中，电子束偏离布拉格角 ±Δθ，仍有一定强度的衍射线出现。

（2）随着晶体尺寸减小，允许偏离值 s_z 增大但最大强度值$|G|^2_{max}$（等于 N^2）减小。

值得再次强调指出的是，在每个倒易点上，$|G|^2_{max}$ 值都相同，围绕倒易点$|G|^2$的曲线形状也相同，它们只与小晶体的尺寸和几何形状（当考虑曲线的三维形状时）有关。但每个倒易点的最大强度值 I_{max} 可能不相同，因为它们的F^2值可能不同。

2.3 衍射斑点的形状



薄晶的倒易点拉长为倒易杆产生衍射的厄瓦尔德球构图

因此可以得出结论：对小晶体或薄晶体来说，在偏离布拉格条件下，仍有衍射线，强度弱些。晶体越薄或越小，允许偏离越大。

各种晶形相应的倒易点宽化的情况

小立方体	六角形星芒
小球体	大球加球壳，
盘状体	杆
针状体	盘

（参见下图）

想想为什么会是这样的？？？