

## X 射线漫散射研究中的 Ewald 作图法

李永基

(吉林大学物理系)

X 射线漫散射已经成为研究不完整晶体的有力工具<sup>[1,2]</sup>。在晶体结构分析中也起着重要作用,我们曾把 Ewald 作图法用于 X 射线漫散射研究<sup>[3]</sup>。在图解法中,各层倒易格点与反射球的关系清晰地表现在图上,不但使实验调整工作简便,而且对分析实验结果也有参考价值。

### 一、原 理

以简单单斜格子为例进行讨论。

考虑倒易基矢  $\mathbf{a}^*$ ,  $\mathbf{b}^*$  所定义的倒易层面。同层倒易格点的指数  $l$  相同,与反射球相交于同一纬度的圆环上,简称此圆为反射圆。反射球的极轴与晶格空间的基矢  $\mathbf{c}$  平行 ( $\mathbf{c}$  为特殊轴)。各层反射圆的间距为  $1/c$  ( $c$  为基矢  $\mathbf{c}$  的长度),其圆心均位于反射球这一选定的极轴上。

注意到背射平板相机受到几何条件的限制,只有处于反射圆的部份圆弧上的倒易格点对相片有贡献。

因此,不但需要在各层倒易格面上确定相应于该层的反射圆的圆心位置及半径,还需要确定各层反射圆弧的位置及其半张角。

#### 1. 各层反射圆的圆心位置及半径

设已知晶体的倒易基矢为  $\mathbf{a}^*$ ,  $\mathbf{b}^*$ ,  $\mathbf{c}^*$ , 其夹角分别为  $\alpha^*$ ,  $\beta^*$ ,  $\gamma^*$ , 入射 X 射线与  $\mathbf{a}^*$ ,  $\mathbf{b}^*$ ,  $\mathbf{c}^*$  间的夹角分别为  $\xi$ ,  $\eta$ ,  $\zeta$ 。

令人射 X 射线  $MO$  与晶体的  $\mathbf{c}$  轴所定义的平面和图纸平行,见图 1。其中  $O$  为原点,  $PO$  为入射线  $MO$  在  $\mathbf{a}^*\mathbf{b}^*$  面上的投影,  $MO$

与  $PO$  的夹角  $\delta = \frac{\pi}{2} - \zeta$ 。

反射球与图纸相交而成一圆,简称基圆。第  $l$  层倒易格面与基圆相交于  $N_l N'_l$  (在此例中  $l = \bar{1}, 0, 1, 2$ )<sup>1)</sup>, 并与反射球的极轴  $L_1 L_2$  相交于  $D_l$  ( $l = \bar{1}, 0, 1, 2$ ), 各层倒易格面的间距为  $1/c$  ( $c$  为基矢  $\mathbf{c}$  的长度)。显然,第  $l$  层反射圆心为  $D_l$ , 半径为  $D_l N_l$ 。

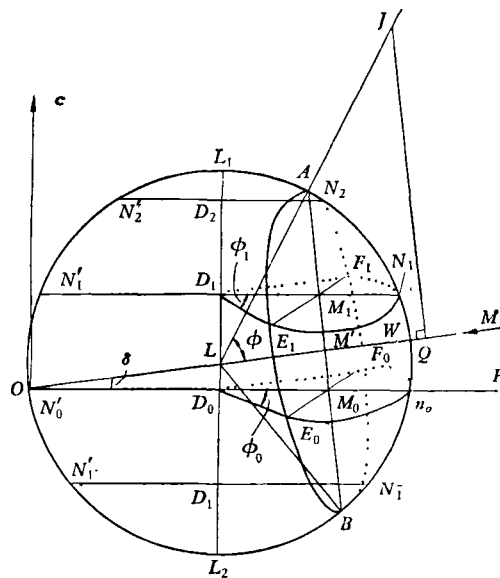


图 1 各层反射圆圆心、半径及反射圆弧的半张角

各层反射圆在  $\mathbf{a}^*\mathbf{b}^*$  面上的投影为一组同心圆,见图 2。其圆心重合为一点  $L'$ , 位于  $PO$  线上。  $PO$  与  $\mathbf{a}^*$  间夹角为  $\phi$ , 按球面三角关系有

$$\cos \phi = \cos \xi / \sin \zeta,$$

1) 当  $l < \bar{1}$  及  $l > 2$  时,倒易格点处于反射球外面。

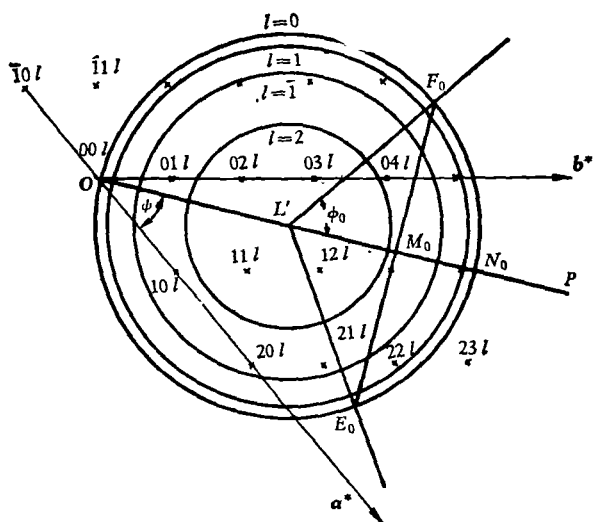


图2 各层反射圆与倒易格点关系 ( $l = \bar{1}, 0, 1, 2$ ). 图中只标出  $l = 0$  时, 即第0层的反射圆弧及其半张角

见图3, 故  $\phi$  可计算出来.

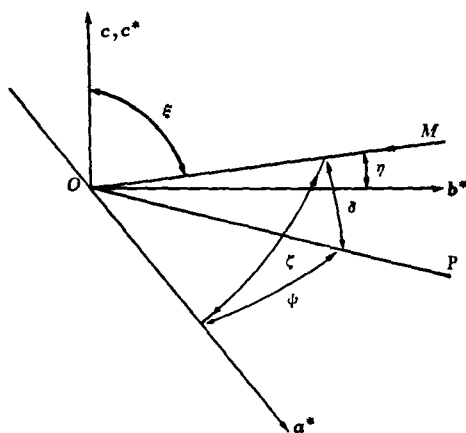


图3 球面三角关系

## 2. 各层反射圆弧的位置及其半张角 $\phi_l$

设全部能为相片所收集到的衍射线处于以反射球中心  $L$  为顶点, 入射线  $MO$  为轴, 半张角为  $\phi$  的圆锥内. 只有处于此锥面与反射球相交而成的球冠  $W-AB$  上的倒易格点才对相片有贡献. 实际上, 倒易格点处于球冠  $W-AB$  与倒易层面的交线即圆弧  $E_l N_l F_l$  上 ( $l = \bar{1}, 0, 1, 2$ ). 这就是我们感兴趣的反射圆弧 (见图1).

球冠  $W-AB$  的底面  $AE_1 E_0 B F_0 F_1$  与图

纸平面的交线为  $AB$ , 它与入射线  $MO$  相交于  $M'$  点, 并且  $AB$  与  $MO$  垂直. 又由图1可以看出:  $LA$  为反射球的半径  $r$ ,  $\angle ALM'$  即相片所能收集到的衍射线形成的圆锥的半张角  $\phi$ . 故线  $AB$  的位置可以确定. 从而, 线  $AB$  与第  $l$  层倒易格面的交点  $M_l$  可以确定.

由于底面  $AE_1 E_0 B F_0 F_1$  与第  $l$  层倒易格面的交线  $E_l F_l$  必与图面垂直, 且  $D_l M_l$  处于图面上, 故

$$D_l M_l \perp E_l F_l.$$

又  $M_l$  点位于  $E_l F_l$  线上,  $E_l F_l$  为第  $l$  层反射圆的弦, 故  $D_l M_l$  恰为由第  $l$  层反射圆心  $D_l$  至弦  $E_l F_l$  的垂直距离. 还有  $D_l E_l$  为第  $l$  层反射圆的半径, 故  $\angle E_l D_l M_l$  即我们所需要的第  $l$  层反射圆弧的半张角  $\phi_l$ , 所以半张角  $\phi_l$  可以确定.

## 二、图解法步骤

按上述原理, 我们把图解法步骤总结如下.

令入射线  $MO$  在  $a^* b^*$  面上的投影为  $PO$ , 则  $PO$  与  $MO$  间夹角  $\delta = \frac{\pi}{2} - \zeta$  和  $PO$  与  $a^*$  间夹角  $\phi = \cos^{-1}(\cos \xi / \sin \zeta)$  均可求得.

1. 以水平线  $PO$  为基线, 作直线  $MO$  与  $PO$  成  $\delta$  角. 在线  $MO$  上截  $OL$  令其长度等于反射球半径  $r$ , 则点  $L$  为反射球中心. 以点  $L$  为圆心,  $r$  为半径作基圆.

过点  $L$  引  $PO$  的垂线与基圆相交于  $L_1, L_2$  点, 线  $L_1 L_2$  即为反射球的一个特定的极轴.  $L_1 L_2$  与  $PO$  相交于  $D_0$  点,  $D_0$  即为0层反射圆圆心,  $OD_0$  即0层反射圆的半径.

在  $L_1 L_2$  线上截线段  $D_0 D_1 = D_0 D_2 = D_1 D_2 = 1/c$  ( $c$  为晶胞基矢  $c$  的长度), 则  $D_l$  ( $l = \bar{1}, 0, 1, 2$ ) 即为  $l$  层反射圆圆心.

过  $D_l$  作直线平行  $PO$  与基圆相交于  $N_l, N'_l$  点 ( $N'_0$  点即原点  $O$ ), 线  $N_l N'_l$  即反射球内第  $l$  层倒易格面在图面上的投影,  $D_l N_l$  即第  $l$  层反射圆半径, 见图1.

2. 在  $MO$  上截  $LQ$  线段使它的长度等于

样品至相片距离(单位任意),过  $Q$  点作  $MO$  的垂线并截线段  $QJ$ . 令它的长度等于相片的半径(单位与前一致). 过  $J, L$  两点引直线与基圆相交于点  $A$ , 过  $A$  点引  $MO$  的垂线, 分别与  $MO$  及基圆相交于  $M'$  点及  $B$  点. 则  $\angle ALM'$  即衍射圆锥的半张角  $\phi$ .

直线  $AB$  与线  $D_l N_l$  相交于  $M_l$  点, 则线  $D_l M_l$  的长度可由图中确定 ( $l = \bar{1}, 0, 1, 2$ ), 见图 1.

3. 在  $a^*b^*$  面上作线  $PO$  与  $a^*$  成  $\phi$  角, 在  $PO$  线上截线段  $OL'$ , 令它的长度等于 0 层反射圆的半径  $D_0 N_0$ , 则  $L'$  即各层反射圆的圆心.

以  $L'$  为圆心,  $D_l N_l$  为半径作圆, 此圆即为第  $l$  层反射圆.

在  $PO$  线上截线段  $L'M_l$ , 令它的长度等于线  $D_l M_l$  的长度, 过  $M_l$  点作  $PO$  的垂线并与第  $l$  层反射圆相交于  $E_l, F_l$  两点. 过  $L'$  点及  $E_l$  点连直线  $L'E_l$ , 过  $L'$  点及  $F_l$  点连直线  $L'F_l$ . 则  $\angle E_l L' M_l = \angle F_l L' M_l = \phi_l$  即为第  $l$  层反射圆弧的半张角.

第  $l$  层反射圆与线  $PO$  相交于  $N_l$  点,  $\widehat{E_l N_l F_l}$  即我们所需要的第  $l$  层反射圆弧, 见图 2<sup>1)</sup>.

在此例中, 由于单斜晶系的  $c^*$  与  $a^*b^*$  面垂直, 不同层的倒易格点, 只要其指数  $h, k$  相同, 在此投影图中均重合为一点. 各层反射圆圆心  $D_l$  在投影图中也与  $L'$  点重合.

### 三、讨 论

上述作图法很容易推广到普遍情况, 即  $c^*$

并不与  $a^*b^*$  面垂直的情况.

此时, 各层倒易格面的基矢在投影面上(即  $a^*b^*$  面)并不重合. 相邻层面的基矢平移一矢量  $R$ , 但各层反射圆圆心在投影面上仍重合为一点. 我们可以把这种情况处理为: 各层倒易基矢仍重合, 但相邻层的反射圆圆心平移一矢量  $-R$ .

各层倒易格面间距  $d^*$  沿  $c$  轴方向, 且有

$$|d^*| = 1/c,$$

可以看出

$$R = c^* - c/c^2,$$

故

$$\begin{aligned} R \cdot \frac{a^*}{a^*} &= \left( c^* - \frac{c}{c^2} \right) \cdot \frac{a^*}{a^*} \\ &= c^* \cos \beta^*, \end{aligned}$$

其中  $\beta^*$  为  $c^*$  与  $a^*$  间夹角, 即  $R$  在  $a^*$  上的投影等于  $c^*$  在  $a^*$  上的投影. 同理,

$$R \cdot \frac{b^*}{b^*} = c^* \cos \alpha^*,$$

其中  $\alpha^*$  为  $c^*$  与  $b^*$  间夹角. 上述方程中右边均为已知量, 故  $R$  在  $a^*$  及  $b^*$  上的投影均可求得. 因此,  $R$  很易用作图法求出.

综上所述, 可见这种倒易空间图解法普遍适用于任意晶系.

### 参 考 文 献

- [1] H. Lohstoter, H. Spalt & H. Peisl, *Phys. Rev. Lett.*, **29**(1972), 224.
- [2] P. Ehrhart, W. Schilling, *Phys. Rev. B*, **8** (1973), 2604.
- [3] 李永基, 吉林大学自然科学学报, **1** (1980), 55.

1) 图中只标出了  $l = 0$  时, 即第 0 层的反射圆弧及其半张角.