

内界面衍射效应

沙 维

(北京科技大学材料物理系)

摘 要

本文简要介绍了沿晶界、相界等内界面发生的衍射效应。在一定的界面模型基础上,给出了理论上沿垂直界面入射的衍射强度分布,并加以讨论。本文还介绍了国外有关内界面衍射的部分实验结果。

最近,沿垂直界面平面入射的衍射效应得到人们的重视。人们通过这种内界面衍射效应对界面的结构进行了细致的研究。

一、理论 研究

图 1(a) 是理论计算中所采用的晶界构型^[1]。该模型实际对应的是一个扭转或对称倾斜晶界。Vitek 等人在此模型中假设晶面间距在界面中心发生最大膨胀,而且这种膨胀以指数函数规律向两边衰减。

图 1(b) 是理论计算中所采用的相界构型^[2](实际上还有其它一些假设模型)。这种相界实际出现在 Mo/Mo₂C 界面上。这种几何构型相当于在两相间有一层极薄的过渡区,其面间距可近似为:

$$d_{II} \approx \frac{d_I + d_{III}}{2}$$

对晶界和相界都仅考虑一维情况,采用运动学理论计算衍射强度,计算公式为

$$\text{衍射振幅 } X_L = \sum_n \exp(2\pi i L z')$$

$$\text{衍射强度 } I = X_L \cdot X_L^*$$

晶界衍射计算结果如图 2 所示。由理论计算还可以得到以下结论:

(1) 整个晶界区(完整晶体部分 N_I 与 N_{III} 和晶间过渡部分 N_{II}) 必须作为整体来考虑进行衍射计算,方可得到正确结果。

(2) 由于实际晶体都是有限大的,衍射振幅会发生随衍射角变化而快速振荡的现象。这

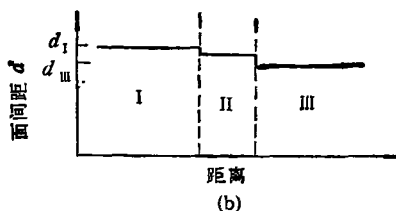
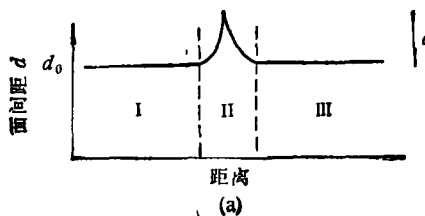


图 1

- (a) 晶界模型中晶面间距与距离的关系
(δ 为面间距相对变化最大值);
(b) 相界模型中晶面间距与距离的关系
(Δ 为面间距相对变化)

种振荡效应只有在计算出衍射强度之后才可给出平滑曲线,在计算衍射振幅之后马上求出平滑过渡曲线再求强度是不正确的。

(3) 由于在晶界模型中采用了指数衰减型晶格膨胀的假设,在计算所得到的衍射花样中,在主布喇格衍射点左边小区出现了非对称宽化。在晶间畸变很大以至于不现实的情况下,或在高级衍射中,可以有单峰分离出来。

(4) 界面宽度与衍射峰宽之间没有定量联系。

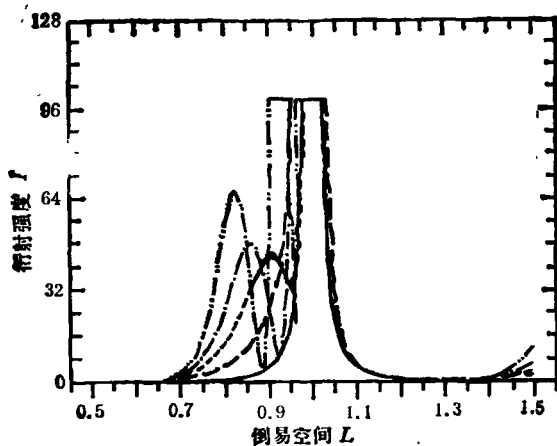


图2 理论计算晶界衍射花样 ($\delta = 0.4$)
(图中数字表示 $N_I/N_{II}/N_{III}$ 值)

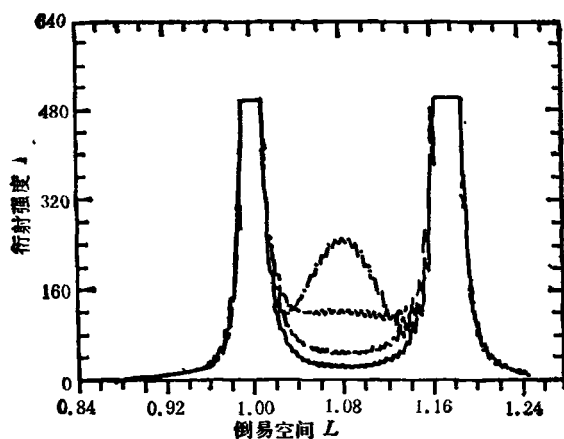


图3 理论计算相界衍射花样 ($\Delta = 0.15$)
(图中数字表示 $N_I/N_{II}/N_{III}$ 值)

(5) 对较小的界面晶格膨胀, 衍射花样基本上与畸变区相对宽度无关。

相界衍射计算结果如图3所示。由图(3)可见:

(1) 在衍射花样中出现了新的衍射峰, 在高级衍射中新衍射峰可以完全和主峰分离。

(2) 由相界过渡区导致的新衍射峰的半高宽与相界区宽度有反比关系:

$$\omega \propto \frac{1}{N_{II}} \quad (\omega \text{ 为衍射峰半高宽}).$$

此外, Vitek 还计算了界面元素偏析对内界面衍射效应的进一步影响^[3], 这里不再赘述。

二、实验研究

实验研究涉及的技术包括高分辨电子显微象、电子衍射与X射线衍射。目前这方面的实验结果还不很多, 但已能给出一些很有价值的结果。

1. Mo-Mo₂C 相界透射电镜电子衍射研究

Florjancic 与 Rühle 用透射电镜观察了经过饱和渗碳后再时效以析出 Mo₂C 的 Mo 单晶体^[4]。在 Mo 基体与第二相析出物 Mo₂C (惯习面 (110)_M//(0001)_P) 之间有一极薄的过渡结构。它既不同于 Mo 的 bcc 结构, 也不同于 Mo₂C 的 hcp 结构。在电子衍射花样中, 除了 Mo 与 Mo₂C 的衍射斑点以外, 还出现了一些所谓的“拖影”。这些拖影便是相界过渡区衍射的结果。从拖影的长短可以推断出界面尺寸约为 2 nm, 即相当于九层 (110)_{Mo} 面的距离。经推算, 垂直于界面的应变约为 2.15%。

2. NiO, Au, Ge 晶界结构分析

Budai 等人用 X 射线衍射等方法研究了晶界结构^[5,6]。Vaudin 等人在西门子 102 型电子显微镜上研究了上述几种不同材料的晶界结构^[7]。操作电压为 125kV, 采用相当大的第二聚光镜欠焦距, 曝光 30—900s 后, 得到了晶界区的电子衍射花样。实验中通过改变入射电子束方向来改变爱瓦尔德球取向 (步进 0.25—0.1°, 不是通常的倾转试样方式)。在他们得到的衍射花样中也出现了拖影。

此外, Vaudin 等人还观察了 NiO 倾转晶界的界面形貌^[8]。Vardanyan 等人用 X 射线衍射研究了小角扭转晶界中的位错超点阵^[9,10], 都给出了有益的结果。

- [1] J. M. Vitek and M. Rühle, *Acta Metall.*, 34(1986), 2085.
- [2] J. M. Vitek and M. Rühle, *Acta Metall.*, 34(1986), 2095.
- [3] J. M. Vitek, *Ultramicroscopy*, 22(1987), 197.
- [4] M. Florjancic and M. Rühle, *The Structure and Properties of Crystal Defects*, Materials Science Monograph (edited by V. Taidar and L. Lejcek), Elsevier,

(下转第 744 页)