

# 任意晶系标准极射赤面投影图的一种绘制方法

黄 荣 陈 京 一

(中国科学院上海冶金研究所)

## 摘 要

本文利用矢量分析,提出了一种分析极射赤面投影的新的解析方法。它首先建立一个直角坐标系,当知道投影方向矢量  $G_{H_1K_1L_1}^*$  时,利用倒易空间和实空间矢量之间的相互关系,在垂直于投影方向的平面上找出两个相互垂直的倒易矢量  $G_{H_2K_2L_2}^*$  和实空间的矢量  $R_{H_3K_3L_3}$ ,作为投影面上两个坐标轴的方向;再在平面坐标系中求出每一个倒易矢量的投影矢量,以及求出每一个倒易格矢的极射赤面投影点在平面坐标系中的坐标,这样就可以绘制出一张完整的以  $G_{H_1K_1L_1}^*$  为投影矢量的极射赤面投影图。

标准极射赤面投影图在研究晶体结构、定向等过程中都是必需的<sup>[1]</sup>,在X射线貌相研究工作中更是一种必不可少的工具<sup>[2]</sup>。绘制标准极射赤面投影图已有许多方法,它们各有千秋<sup>[3,4]</sup>。本文建立一种绘制任意晶系标准极射赤面投影图的解析方法,利用计算机实现绘图自动化具有实际意义。它基于矢量运算,简单明了。

极射赤面投影图,就是晶面法线与参考球的交点在某一特定的投影面上的极射赤面投影。因为晶体的  $(hkl)$  晶面法线方向与倒易空间的矢量  $G_{hkl}^*$  方向一致,所以在倒易空间中分析标准极射赤面投影具有独特的优越性。

假定投影面的指数为  $(H_1K_1L_1)$ ,那么它的法线方向为倒易空间矢量  $G_{H_1K_1L_1}^*$ ,在投影面上另外选取两个互相垂直的方向矢量  $G_{H_2K_2L_2}^*$ ,  $R_{H_3K_3L_3}$ ,  $G_{H_2K_2L_2}^*$ ,  $R_{H_3K_3L_3}$  分别是倒易矢量和实空间的矢量(这样选取是为了方便计算和  $R_{H_3K_3L_3}$  的选取)。  $G_{H_1K_1L_1}^*$ ,  $G_{H_2K_2L_2}^*$  和  $R_{H_3K_3L_3}$  构成一个直角坐标系。

### 一、 $(hkl)$ 晶面在 $(H_1K_1L_1)$ 投影面上的极射赤面投影

$(hkl)$  晶面法线  $G_{hkl}^*$  在  $(H_1K_1L_1)$  投影面上的极射赤面投影如图 1 所示。

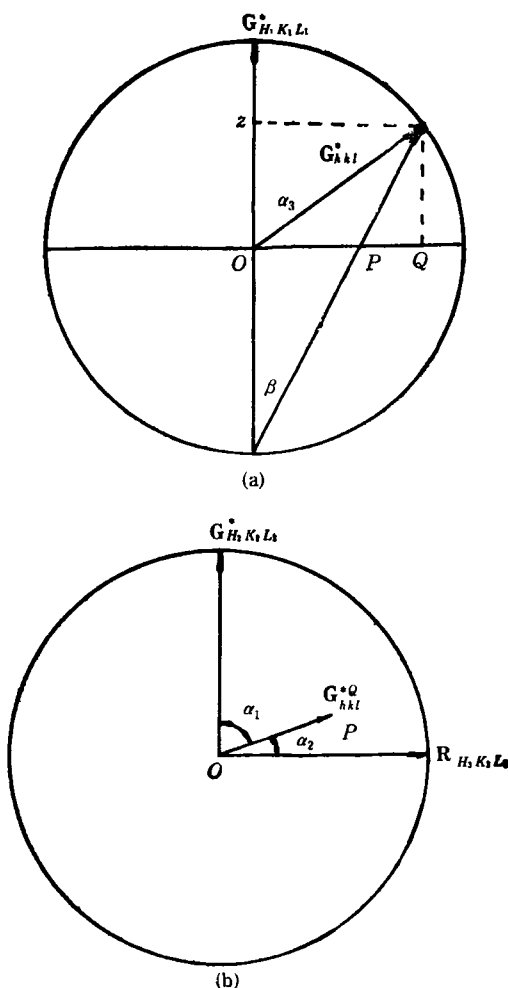


图 1

(a)  $G_{hkl}^*$  在  $(H_1K_1L_1)$  极射赤面投影面上的投影;  
(b) 投影点 P 在平面坐标系中的位置

图1(a)中  $\alpha_3$  是  $\mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^*$  和  $\mathbf{G}_{hkl}^*$  之间的夹角,其值为

$$\alpha_3 = \cos^{-1} \frac{\mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^* \cdot \mathbf{G}_{hkl}^*}{|\mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^*| |\mathbf{G}_{hkl}^*|} \quad (1)$$

因而,

$$\beta = \frac{1}{2} \alpha_3 = \frac{1}{2} \cos^{-1} \frac{\mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^* \cdot \mathbf{G}_{hkl}^*}{|\mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^*| |\mathbf{G}_{hkl}^*|} \quad (2)$$

设  $R$  为投影图的半径,则

$$OP = R \cdot \tan \beta, \quad (3)$$

它决定了投影点  $P$  到投影中心  $O$  之间的距离. 设  $\mathbf{G}_{hkl}^{*Z}$  表示矢量  $OZ$ ,  $\mathbf{G}_{hkl}^{*O}$  表示矢量  $OQ$ , 则

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{hkl}^{*O} &= \mathbf{G}_{hkl}^{*Z} + \mathbf{G}_{hkl}^{*O} \\ &= \frac{\mathbf{G}_{hkl}^* \cdot \mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^*}{|\mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^*|^2} \mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^* + \mathbf{G}_{hkl}^{*O} \end{aligned} \quad (4)$$

所以

$$\mathbf{G}_{hkl}^{*O} = \mathbf{G}_{hkl}^* - \frac{\mathbf{G}_{hkl}^* \cdot \mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^*}{|\mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^*|^2} \mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^*$$

设  $\mathbf{G}_{hkl}^{*O}$  与  $\mathbf{G}_{H_2K_2L_2}^*$  和  $\mathbf{R}_{H_3K_3L_3}$  之间的夹角分别为  $\alpha_1, \alpha_2$ , 则

$$\alpha_1 = \cos^{-1} \frac{\mathbf{G}_{hkl}^{*O} \cdot \mathbf{G}_{H_2K_2L_2}^*}{|\mathbf{G}_{hkl}^{*O}| |\mathbf{G}_{H_2K_2L_2}^*|}, \quad (5)$$

$$\alpha_2 = \cos^{-1} \frac{\mathbf{G}_{hkl}^{*O} \cdot \mathbf{R}_{H_3K_3L_3}}{|\mathbf{G}_{hkl}^{*O}| |\mathbf{R}_{H_3K_3L_3}|} \quad (6)$$

因此,  $P$  点在  $(H_1K_1L_1)$  投影面上的坐标为

$$\begin{cases} x = OP \cdot \cos \alpha_1, \\ y = OP \cdot \cos \alpha_2. \end{cases} \quad (7)$$

知道了  $x, y$  就可以在投影面上绘出  $(hkl)$  晶面的极射赤面投影.

## 二、 $\mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^*$ , $\mathbf{R}_{H_3K_3L_3}$ 的确定

$\mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^*$ ,  $\mathbf{R}_{H_3K_3L_3}$  是为了方便而引入的两个矢量,对于立方晶系等的一些简单指数的投影面是很容易确定的,但就一般情形而言,这两个矢量需要经过计算才能得到. 因为  $\mathbf{G}_{H_2K_2L_2}^*$  垂直于  $\mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^*$ , 所以有

$$\mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^* \cdot \mathbf{G}_{H_2K_2L_2}^* = 0,$$

或  $H_1H_2b^2c^2\sin^2\alpha + H_1K_2abc^2(\cos\alpha\cos\beta$

$$\begin{aligned} & - \cos\gamma) + H_1L_2abc^2(\cos\alpha\cos\gamma \\ & - \cos\beta) + K_1H_2abc^2(\cos\alpha\cos\beta \\ & - \cos\gamma) + K_1K_2c^2a^2\sin^2\beta \\ & + K_1L_2a^2bc(\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha) \\ & + L_1H_2acb^2(\cos\gamma\cos\alpha - \cos\beta) \\ & + L_1K_2a^2bc(\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha) \\ & + L_1L_2a^2b^2\sin^2\gamma = 0, \end{aligned} \quad (8)$$

其中  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$  为晶胞参数. 将各晶胞参数和投影面指数  $H_1, K_1, L_1$  代入(8)式,(8)式便是  $H_2, K_2, L_2$  的一个不定方程. 若方程中只含一个变量,则方程决定了该变量为零. 当方程中出现两个变量时,只要给其中一个变量为非零值,就可确定这两个变量,第三个变量可任选;若方程中的两个变量取为零,则第三个变量取非零值. 当方程中三个变量都出现时,任意给其中两个变量非同时为零的值,则第三个变量随之而定. 因此,无论什么情况下总可以求得所需的  $\mathbf{G}_{H_2K_2L_2}^*$ .

对于  $\mathbf{R}_{H_3K_3L_3}$ , 因为它同时垂直于  $\mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^*$  和  $\mathbf{G}_{H_2K_2L_2}^*$ , 所以有

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{H_3K_3L_3} &= \mathbf{G}_{H_1K_1L_1}^* \times \mathbf{G}_{H_2K_2L_2}^* \\ &= \frac{4\pi^2}{V} [(K_1L_2 - L_1K_2)\mathbf{a} + (L_1H_2 \\ & - H_1L_2)\mathbf{b} + (H_1K_2 - K_1H_2)\mathbf{c}], \end{aligned} \quad (9)$$

其中  $V$  为原胞体积,  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$  为原胞基矢. 去掉系数  $\frac{4\pi^2}{V}$  将不会影响对  $\mathbf{R}_{H_3K_3L_3}$  矢量方向的选择,故取

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{H_3K_3L_3} &= (K_1L_2 - L_1K_2)\mathbf{a} + (L_1H_2 - H_1L_2)\mathbf{b} \\ &+ (H_1K_2 - K_1H_2)\mathbf{c}. \end{aligned}$$

因为  $\mathbf{R}_{H_3K_3L_3}$  只在(6)式中出现,而  $\mathbf{G}_{hkl}^{*O}$  为倒易矢量,故  $\mathbf{R}_{H_3K_3L_3}$  选用正空间矢量将更方便.

李润身同志对本工作提出了宝贵的意见,特此致谢.

- [1] 许顺生,金属X射线学,上海科学技术出版社,(1962).
- [2] 许顺生、冯端,X射线衍射貌相学,科学出版社,(1987)
- [3] J. S. Smail, Metallurgical Stereographic Projections, Adam Idigener Ltd., London, (1972), 74-162.
- [4] 潘金生,金属学报,21(1985), B284.