

Calculation of Interplanar Spacing in Hexagonal Close-Packed Crystal

Quncheng Fan

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

Received: Feb. 19th, 2012; revised: Feb. 24th, 2012; accepted: Mar. 2nd, 2012

Abstract: Based on a principle of analytic geometry, a “site-factor S ” of an addition atom was suggested to take as a tool for calculating interplanar spacing. With the “site factor S ”, the interplanar spacing of hexagonal close-packed crystal was calculated and confirmed by some examples, and the result showed that it has 6 kinds of possible interplanar spacing. The correlativity between the interplanar spacing and the structure-factor were analysed, and relation between the additional plane and the missing reflection plane was discussed.

Keywords: Interplanar Spacing; Calculation Principle; Calculation Method; Site-Factor S ; Hexagonal Close-Packed Crystal

密排六方晶体面间距的计算

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2月19日; 修回日期: 2012年2月24日; 录用日期: 2012年3月2日

摘要: 基于解析几何基本原理, 提议用添加原子的“位置因子 S ”作为计算晶面间距的工具。使用“位置因子 S ”, 算得密排六方晶体六种可能的面间距, 并得到实例验证。分析了晶面间距与结构因子的相关性, 并讨论了附加面与消光面的关系。

关键词: 晶面间距; 计算原理; 计算方法; 位置因子 S ; 密排六方晶体

1. 引言

面间距是晶体的重要参数, 是晶体衍射测量的结果数据。计算7种初级晶胞晶面间距的公式已很完备。而对多原子晶胞晶面间距的计算, 就是要根据具体情况, 对相应的初级晶胞晶面间距的公式进行修正, 即乘以修正系数。

钛、镁、锌等密排六方晶体是一类重要的材料, 但其面间距的计算, 国内外诸多专著及教科书^[1-7]中却很少介绍。即使介绍, 也是将衍射的消光条件错误地当做晶面间距的修正条件。本文依据解析几何的基本原理, 阐明了晶面间距的计算原理, 并提议用添

加原子的“位置因子 S ”作为计算面间距的工具。使用“位置因子 S ”得出了密排六方晶体面间距的计算方法, 并应用实例进行了验证。分析了晶面间距与结构因子的相关性, 并讨论了附加面与消光面的关系。

2. 晶面间距的计算原理

密排六方晶体的布拉菲点阵是简单六方, 简单六方点阵的面间距 d'_{hkl} 可用下式计算:

$$d'_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3} \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \left(\frac{l}{c}\right)^2}} \quad (1)$$

式中, h, k, l 为互质的整数, a 和 c 为点阵常数。

密排六方晶体的一个晶胞含有两个同种原子。相对于简单晶胞, 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。其晶面间距的计算, 就是要确定出现附加面的条件, 并确定相应的修正系数。

晶面指数是由原子面的截距确定的。如图 1 所示, 简单晶胞的 (hkl) 晶面组包含无数个相互平行间距相等的原子面(图中实线面), 它们虽具有同一面指数, 但截距不同。距坐标原点最近的原子面在坐标轴上的截距分别为 $1/h$ 、 $1/k$ 和 $1/l$ 。由于点阵的周期性重复, 其他原子面的截距整数倍于 $1/h$ 、 $1/k$ 和 $1/l$, 可表示为 p/h 、 p/k 和 p/l , 其中 p 为整数。添加原子产生附加面(图中虚线面)后, 附加面的截距不再整数倍于 $1/h$ 、 $1/k$ 和 $1/l$, 可表示为 $(p+m/q)/h$ 、 $(p+m/q)/k$ 、 $(p+m/q)/l$, 其中 m 和 q 为互质的整数, 且 $m < q$ 。综合这两类原子面(附加面、非附加面), 可将原子面的截距统一表示为 $(p+m/q)/h$ 、 $(p+m/q)/k$ 、 $(p+m/q)/l$ 。显然, $m=0$ 的面不是附加面, 其面间距不须修正, $d_{hkl} = d'_{hkl}$, 而 $m \neq 0$ 的面是附加面, 其面间距应当修正为 $d_{hkl} = (m/q)d'_{hkl}$ 。

解析几何中, 一个平面在三个坐标轴上的截距 a 、 b 、 c 与该平面内任意一点 (x, y, z) 满足如下关系:

$$\frac{x}{a} + \frac{y}{b} + \frac{z}{c} = 1 \quad (2)$$

将原子面的截距代入(2)式, 可得

$$\frac{x}{(p+m/q)/h} + \frac{y}{(p+m/q)/k} + \frac{z}{(p+m/q)/l} = 1$$

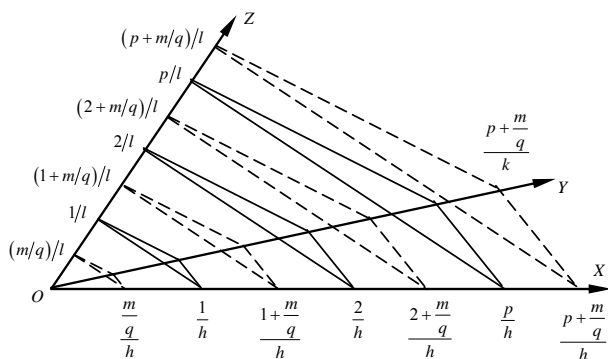


Figure 1. Schematic diagram showing the intercepts of atom planes (——) for a primary crystal cell and the intercepts of its additional atom planes (---)

图 1. 简单晶胞原子面(——)的截距及其附加原子面(---)的截距示意图

即

$$hx + ky + lz = p + \frac{m}{q} \quad (3)$$

为方便起见, 引入“位置因子 S ”——晶胞中添加原子的位置 (x, y, z) 与晶面指数 (hkl) 的点积, 将(3)式表达为

$$S = hx + ky + lz = p + \frac{m}{q} \quad (4)$$

位置因子表征了添加原子 (x, y, z) 所在的 (hkl) 原子面的特征: 是 $(m \neq 0)$ 不是 $(m = 0)$ 附加面、附加面间距的修正系数 (m/q) 、以及该原子面到坐标原点的距离 $((p+m/q)d'_{hkl})$, 可以作为计算面间距的工具。

当 $S =$ 整数, 即 $m = 0$ 、 $S = p$ 时, 添加原子所在的 (hkl) 原子面不是附加面; (hkl) 晶面间距不须修正, 即 $d_{hkl} = d'_{hkl}$; 该原子面到坐标原点的距离为 pd'_{hkl} 。

当 $S \neq$ 整数, 即 $m \neq 0$ 、 $S = p + m/q$ 时, 添加原子所在的 (hkl) 原子面是附加面; (hkl) 晶面间距的修正系数为 m/q , 即 $d_{hkl} = (m/q)d'_{hkl}$; 该附加面到坐标原点的距离为 $(p+m/q)d'_{hkl}$ 。

简言之, 当 $S =$ 整数时, 面间距不须修正; 当 $S =$ 分数时, 修正系数为其分数 m/q 。

3. 密排六方晶体面间距的计算方法

将添加原子的位置坐标 $(2/3, 1/3, 1/2)$ 代入(4)式,

$$\text{得} \quad S = \frac{2h}{3} + \frac{k}{3} + \frac{l}{2} = p + \frac{m}{q} = p + \frac{m}{6} \quad (5)$$

当 $m = 0$ 时, (hkl) 面中无附加面, 面间距不须修正, $d_{hkl} = d'_{hkl}$, 添加原子所在的原子面到坐标原点的距离为 pd'_{hkl} 。

当 $m \neq 0$ 时, (hkl) 面中有附加面, 面间距的修正系数为 $m/6$, $d_{hkl} = (m/6)d'_{hkl}$, 该附加面到坐标原点的距离为 $(p+m/6)d'_{hkl}$ 。

由上可见, 密排六方晶体中只可能有 6 种面间距: d'_{hkl} , $d'_{hkl}/6$, $d'_{hkl}/3$, $d'_{hkl}/2$, $2d'_{hkl}/3$, $5d'_{hkl}/6$ 。不位于其相应简单晶胞两个最近邻原子平面中央位置的附加面, 会同时形成两个不等但互补的面间距: $d'_{hkl}/3$ 和 $2d'_{hkl}/3$, 或 $d'_{hkl}/6$ 和 $5d'_{hkl}/6$ 。计算所得密排六方晶体的面间距列于表 1。

Table 1. Interplanar spacing of HCP crystal
表 1. 密排六方晶体的面间距

| $2h+k$ | l | d_{hkl} |
|---------------------|-----|---------------------------|
| $3n(n \text{ 为整数})$ | 奇数 | $d'_{hkl}/2$ |
| $3n$ | 偶数 | d'_{hkl} |
| $3n \pm 1$ | 奇数 | $d'_{hkl}/6, 5d'_{hkl}/6$ |
| $3n \pm 1$ | 偶数 | $d'_{hkl}/3, 2d'_{hkl}/3$ |

4. 计算方法应用举例及验证

例 1. 密排六方晶体(100)晶面间距的计算及验证。

$$S = \frac{2}{3} \times 1 + \frac{1}{3} \times 0 + \frac{1}{2} \times 0 = \frac{2}{3}, \quad d_{100} = 2d'_{100}/3 \text{ 和}$$

$$d_{100} = d'_{100}/3.$$

图 2 显示了添加原子所在的(100)附加面(虚线)及其晶面间距。

例 2. 密排六方晶体(110)晶面间距的计算及验证。

$$S = \frac{2}{3} \times 1 + \frac{1}{3} \times 1 + \frac{1}{2} \times 0 = 1, \quad d_{110} = d'_{110}.$$

图 3 显示了添加原子所在的(110)原子面及其晶面间距。

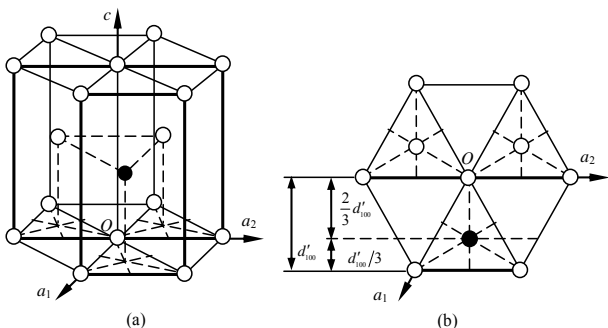


Figure 2. Schematic diagrams showing the (100) interplanar spacing in a HCP cell: (a) Perspective view; (b) Vertical view
图 2. 密排六方晶胞(100)面间距: (a) 立体图; (b) 俯视图

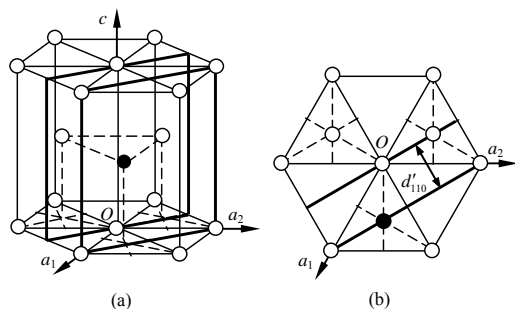


Figure 3. Schematic diagrams showing the (110) interplanar spacing in a HCP cell: (a) Perspective view; (b) Vertical view
图 3. 密排六方晶胞(110)面间距: (a) 立体图; (b) 俯视图

例 3. 密排六方晶体(111)晶面间距的计算及验证。

$$S = \frac{2}{3} \times 1 + \frac{1}{3} \times 1 + \frac{1}{2} \times 1 = 1 + \frac{1}{2}, \quad d_{111} = d'_{111}/2.$$

图 4 显示了添加原子所在的(111)附加面(虚线)及其晶面间距。

例 4. 密排六方晶体(101)晶面间距的计算及验证。

$$S = \frac{2}{3} \times 1 + \frac{1}{3} \times 0 + \frac{1}{2} \times 1 = 1 + \frac{1}{6}, \quad d_{101} = d'_{101}/6,$$

$$d_{101} = 5d'_{101}/6.$$

图 5 显示了添加原子所在的(101)附加面(虚线)及其晶面间距。

5. 讨论

5.1. 晶面间距与结构因子的相关性

根据晶体衍射理论^[5], 决定 (hkl) 晶面衍射强度的重要因素结构因子 F_{hkl} 为

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^n f_j e^{i\varphi_j} \quad (6)$$

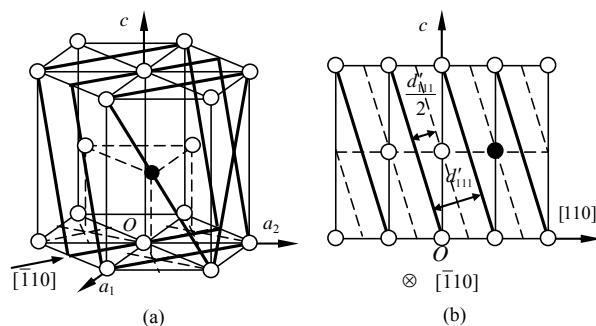


Figure 4. Schematic diagrams showing the (111) interplanar spacing in a HCP cell: (a) Perspective view; (b) $[\bar{1}10]$ projective view

图 4. 密排六方晶体(111)面间距: (a) 立体图; (b) $[\bar{1}10]$ 方向投影图

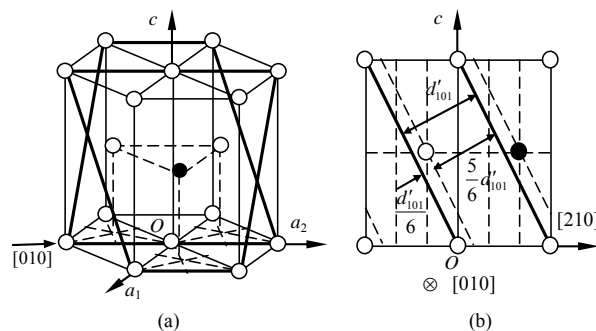


Figure 5. Schematic diagrams showing the (101) interplanar spacing in a HCP cell: (a) Perspective view; (b) $[010]$ projective view

图 5. 密排六方晶体(101)面间距: (a) 立体图; (b) $[010]$ 方向投影图

式中, f 为一个原子的散射因子, ϕ 为晶面上的原子(坐标为 (x, y, z) 与原点处原子经 (hkl) 晶面反射后的位向差,

$$\phi = 2\pi(hx + ky + lz) \quad (7)$$

表 2 综合了密排六方晶体的结构因子^[5]以及表 1 所列的晶面间距计算结果。

表 2 所列结果表明, 晶面间距与结构因子有很好的相关性: 面间距较小的晶面, 其结构因子也较小。两者之间的这种关联, 源自与二者都密切相关的参量——添加原子的位置因子 S 。

S 是决定晶面间距修正系数的唯一参量: 当 $S =$ 整数时, 面间距不须修正; 当 $S =$ 分数时, 修正系数为其真分数 m/q 。

ϕ 是决定结构因子的重要参量, 而且也与 S 密切相关:

$$\phi = 2\pi(hx + ky + lz) = 2\pi S \quad (8)$$

由此不难理解, 位置因子 S 是联系晶面间距与结构因子的纽带。

5.2. 附加面与消光面的关系

晶面间距 $d_{hkl} < d'_{hkl}$ 的面为附加面, 结构因子 $F_{hkl}^2 = 0$ 的面为消光面。

众所周知, 7 种非初级点阵(底心单斜、底心正交、体心正交、体心四方、体心立方、面心正交、面心立方)的附加面就是其消光面, 且 $d_{hkl} = d'_{hkl}/2$ 。

然而, 密排六方晶体的情况并非如此。表 2 所列结果表明: 附加面并非一定都消光, 只有其中 $d_{hkl} = d'_{hkl}/2$ 的面才消光; 其他情况下, 只会使衍射强度发生变化。

出现上述差别的根本原因在于, 密排六方不是点阵。

Table 2. Structure-factor F_{hkl}^2 and interplanar spacing d_{hkl} of HCP crystal

表 2. 密排六方晶体的结构因子 F_{hkl}^2 及晶面间距 d_{hkl}

| $2h+k$ | l | F_{hkl}^2 | d_{hkl} |
|-------------|-----|-------------|---------------------------|
| $3n(n$ 为整数) | 奇数 | 0 | $d'_{hkl}/2$ |
| $3n$ | 偶数 | $4f^2$ | d'_{hkl} |
| $3n \pm 1$ | 奇数 | $3f^2$ | $d'_{hkl}/6, 5d'_{hkl}/6$ |
| $3n \pm 1$ | 偶数 | f^2 | $d'_{hkl}/3, 2d'_{hkl}/3$ |

对 7 种非初级点阵来说, 其添加原子都位于点阵的结点。由于点阵的周期性重复特性, 晶胞中所有原子“周围环境完全相同”。添加原子所在的面一定位于其相应简单点阵中两个最近邻点阵平面的中央, $d_{hkl} = d'_{hkl}/2$, 使光程差减半, 产生消光。

而对密排六方晶体, 其添加原子的位置 $(2/3, 1/3, 1/2)$ 并不是点阵的结点, 因为他与晶胞顶角处原子并不处于“完全等同”的位置。如果添加原子产生了附加面, 这个附加面不一定都位于简单六方点阵中两个最近邻点阵平面的中央。只有那些 $d_{hkl} = d'_{hkl}/2$ 的附加面才会消光, 其他附加面只是改变了衍射强度而已。

6. 结论

1) 提议用添加原子的位置因子 S , 作为计算晶面间距的工具。

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

它表征了添加原子 (x, y, z) 所在的 (hkl) 原子面的特征: 是 $(m \neq 0)$ 不是 $(m = 0)$ 附加面、附加面间距的修正系数 (m/q) 、以及该原子面到坐标原点的距离 $((p + m/q)d'_{hkl})$ 。

2) 用位置因子 S 计算得到, 密排六方晶体共有 6 种可能的面间距: d'_{hkl} 、 $d'_{hkl}/6$ 、 $d'_{hkl}/3$ 、 $d'_{hkl}/2$ 、 $2d'_{hkl}/3$ 、 $5d'_{hkl}/6$, 并被实例所验证。

3) 密排六方晶体的结构因子与其面间距密切相关, 位置因子是二者间的纽带。

4) 由于密排六方晶体的添加原子不位于阵点位置, 其消光面只是 5 种附加面中的一种。

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, reading. Massachusetts, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1956: 113-123.
- [6] 胡庚祥, 蔡珣, 戎咏华. 材料科学基础(第二版)[M]. 上海: 上海交通大学出版社, 2006: 27.
- [7] 陈立佳. 材料科学基础[M]. 北京: 冶金工业出版社, 2007: 12.