

Посвящается памяти профессора

Льва Марковича Утевского

Грузинский технический университет
Республиканский центр структурных исследований

Э.Р. Кутелия, Т.А. Дзиграшвили

Рецензент: Проф. П. Кервалишвили

**АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОНОГРАММ ОТ
ДВУХФАЗНЫХ
И ДВОЙНИКОВЫХ КРИСТАЛЛОВ**

ISBN 99940-39-27-X

© Издательство «Интеллекти»

© Э.Р. Кутелия, Т.А. Дзиграшвили

**Издательство “Интеллекти”
Тбилиси 2005**

Книга предназначена для студентов и аспирантов (бакалавров и магистров), специализирующихся в физике твердого тела и в материаловедении. Она скомпилирована как введение и учебный материал, содержащий также значительные справочные данные для анализа составных электронно-дифракционных картин от двойниковых и двухфазных кристаллов. В книге изложены математические аспекты всей процедуры компьютерного построения схем дифракционных картин от двухфазных и двойниковых кристаллов. Понимание предложенного материала требует минимального знания кристаллографии и векторной и матричной алгебры. С учебной целью в книгу включены различные подходы к вычислению элементов матриц двойникового и ориентационного соответствий сосуществующих кристаллических фаз, для общего триклинного случая. Студенты имеющие хорошую подготовку в матричной алгебре и кристаллографии, по материалам книги смогли бы создать свои алгоритмы для компьютерного моделирования электронно-дифракционных картин и стереографических проекций. Ввиду того, что значительная доля исследований структуры поликристаллического материала связана с определением ориентационных соотношений граничащих между собой кристаллов, данная книга может быть полезна и для исследователей соответствующего профиля.

В начале книги суммируются основные аспекты приложения матриц к описанию ориентационных соотношений между произвольными элементарными ячейками кристаллов. Во втором параграфе первой главы изложена процедура экспериментального установления ориентационного соотношения между кристаллическими фазами, исходя из соответствующих составных электронно-дифракционных картин. Во второй главе рассмотрены альтернативные методы вычисления матриц двойникового соотношения. В третьей главе изложены процедуры вычислений для компьютерного моделирования дифракционных картин и стереографических проекций от двойниковых и двухфазных кристаллов.

Книга имеет приложение и содержит атлас схем электронно-дифракционных картин и стереографических проекций, построенных

на основе разработанных авторами алгоритмов. Различные примеры матриц ориентационного соотношения и совпадающих кристаллографических направлений для различных материалов приведены в виде списка. Рассмотрены случаи двойникового соотношения для различных кристаллических систем и плоскостей двойникового соотношения. Приведены также примеры ориентационных соотношений Бейна, Багаряцкого, Курдюмова-Закса, Нишиямы-Вассермана, Слизвика, Питча, Джека и Бюргерса между фазами, являющимися объектами интересов авторов в различное время.

Заинтересованные программы лица могут обратиться по адресу: dzigra@gtu.edu.ge или посетить сайт профессора Т. Дзиграшвили: <http://www.gtu.ge/gtu/departments/rcsr/temur.htm>

(см. Также руководство по программе **ELDIST**).

Благодарности

Авторы благодарны Американскому фонду гражданских исследований и развития (CRDF, RESC program) за финансовую поддержку (грант GER2-1035-TB-03) при подготовке и печатании данной книги.

INTERPRETATION OF ELECTRON DIFFRACTION PATTERNS OF TWO-PHASE AND TWINNED CRYSTALS

Summary

The book is designed for both undergraduate and graduate students of solid state physics and materials science as an introduction and training material in the analysis of complex electron diffraction patterns taken from twinned and two-phase crystals. It also contains a considerable reference material. Comprehension of the presented material by the reader assumes an elementary knowledge of crystallography and vector and matrix algebra. For teaching purposes different treatments are suggested to calculate matrix components for twin and orientation relationship between twin components and coexisting phases in crystals of any system. If students have a significant preparation in matrix algebra and crystallography, they will like to develop their own algorithms for computer simulation of electron diffraction patterns and stereographic projections, based on the material suggested in the book.

As considerable part of research on polycrystalline materials deals with the determination of orientation relationships between adjacent crystals available in materials and governing their properties, this book may be useful for the researchers as well.

The book begins with summarizing of application of matrices to orientation relationship of arbitrary unit cells in crystals. The second paragraph of the chapter deals with the experimental determination of orientation relationship between crystalline phases from the respective electron diffraction patterns.

Chapter 2 describes an alternative methods of calculation of twin relation matrices.

In chapter 3 we pass on to procedure of calculations for computer simulation of diffraction patterns and stereographic projections from twinned and two-phase crystals.

The book includes an appendix and an atlas of schemes of electron diffraction patterns and stereographic projections of different crystal structures. Several examples of calculated matrices and coinciding

crystallographic directions of adjacent crystals in different materials are also listed. Examples of twinning are considered for all crystal systems for different planes of twinning. The matrices of Bain, Kurdjumov-Sachs, Nishiyama-Wassermann, Bagarjatski, Sleswyk, Pitsch, Jack and Burgers orientation relationships between the phases in solid materials of the authors interest, are presented in a separate list.

The schemes of electron diffraction patterns and stereographic projections included in the book are calculated and plotted using the software developed by the authors. Those interested in the software may apply to:

dzigra@gtu.edu.ge or visit the web site of Prof. T. Dzigrashvili :

<http://www.gtu.ge/gtu/departments/rcsr/temur.htm>

Acknowledgements

Support from the U.S. Civilian Research and Development Foundation (CRDF Grant GER2-1035-TB-03) to the Republic Center for Structure Research at the Georgian Technical University (RCSR) in preparation of this book, is gratefully acknowledged.

ОГЛАВЛЕНИЕ

<i>Предисловие</i>	5
Глава 1	
Использование матриц линейных преобразований для анализа дифракционных картин от двухфазных кристаллов с определенным ориентационным соотношением	6
1.1. Связь между кристаллографическими плоскостями и направлениями реальных и обратных решеток двух сопрягающихся кристаллов	7
1.2. Определение ориентационных соотношений по микродифракционным картинам	8
Глава 2	
Анализ дифракционных картин от двойниковых кристаллов	10
Приложение к главе 2	25
Пример к главе 2	26
Глава 3	
Компьютерное построение электронно-дифракционных картин и стереографических проекций для анализа двухфазных и двойниковых кристаллов	28
3.1. Составные дифракционные картины	29
3.2. Гномостереографические проекции	32
Приложение к главе 3	33
Атлас (схемы электронно-дифракционных картин и стереографических проекций)	36
<i>Литература</i>	58

ПРЕДИСЛОВИЕ

Анализ электронограмм от двухфазных и двойниковых кристаллов и установление ориентационного соотношения, как известно, трудоемкая задача [1, 2, 3].

Важность задачи в свое время определила разработку и успешное применение, наряду с геометрическими методами, аналитических методов, основанных на использовании матриц преобразования координат [4-9].

Располагая набором схем электронограмм и гномостереографических проекций двухфазных и двойниковых кристаллов с определенным ориентационным соотношением, анализ дифракционных картин предельно облегчается.

С целью быстрого и однозначного анализа электронограмм авторами разработаны и реализованы алгоритмы и программы для расчета индцированных схем электронограмм и стереографических проекций, соответствующих двойникам и двухфазным кристаллам, с заданным ориентационным соотношением между фазами.

В книге изложены математические аспекты всей процедуры компьютерного построения схем дифракционных картин от двухфазных и двойниковых кристаллов.

Программы, созданные на базе разработок, приведенных в настоящей книге, позволяют в диалоговом режиме моделировать различные условия дифракции: ориентацию кристалла, масштаб электронограммы, расположение атомов в элементарной ячейке, альтернативные варианты ориентационного соотношения и плоскости двойникования. Это позволяет быстро перебирать все возможные случаи.

Описанная ниже методика успешно применяется в Республиканском центре структурных исследований

Грузинского технического университета. Результат проделанной работы - комплекс программ для генерирования схем дифракционных картин и стереографических проекций для двухфазных и двойниковых кристаллов.

Для тех, кто попытается создать подобный комплекс программ, авторы решили изложить сущность метода и основные этапы алгоритмов. Авторы также сочли полезным, с педагогической точки зрения, привести разные варианты расчетов матриц соответствия для общего триклинного случая.

Материал книги основан на работах авторов, посвященных двойникованию, ориентационному соотношению между фазами в кристаллах и интерпретации составных электронограмм.

Основная часть материала была опубликована в разное время в работах [4-10].

Текст книги написан довольно сжато, но, на наш взгляд, понятно для тех, кто использует аппарат кристаллографии, дифракционные методы и компьютер.

Книга предназначена для студентов (бакалавров и магистров) специализирующихся в дифракционных методах исследования материалов. Книга также будет полезна для исследователей, изучающих тонкую структуру твердых тел.

Авторы выражают благодарность А.Видмаку и Г.Микучадзе за ценные консультации при написании программ, госпоже Л. Амаглобели, профессорам Э. Миминошвили и О. Харашвили за просмотр рукописи, и аспирантам О. Цурцумия и Е. Санаия за помощь в подготовке электронного варианта текста.

ГЛАВА 1

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТРИЦ ЛИНЕЙНЫХ ПРЕОБРАЗОВНИЙ ДЛЯ АНАЛИЗА ДИФРАКЦИОННЫХ КАРТИН ОТ ДВУХФАЗНЫХ КРИСТАЛЛОВ С ОПРЕДЕЛЕННЫМ ОРИЕНТАЦИОННЫМ СООТНОШЕНИЕМ

Взаимную ориентацию двух (или нескольких) кристаллических решеток можно определить однозначно, если задать операцию преобразования. Однако, прямой поиск совпадающих векторов (направлений) двух решеток или вариантов вращения, приводящих к той же относительной ориентации решеток, оказывается весьма трудоемким. Эти задачи решаются гораздо легче с помощью матричных методов [4, 13-16]. Матрицы впервые были введены в математику Кэли в 1857 году [17].

В частности, взаимную ориентацию двух кристаллических фаз можно охарактеризовать взаимным поворотом их координатных систем, т.е. осевых векторов соответствующих кристаллических решеток. Аналитически это линейное преобразование, которое может быть представлено некоторой матрицей преобразования координат [13-16]. Мы будем в дальнейшем пользоваться формулами и правилами преобразования, придерживаясь формальной записи, применяемой в русской научной литературе.

Прежде чем изложить методы решения конкретных задач определения ориентационных соотношений между фазами из электронно-микродифракционных картин, обобщим некоторые положения линейных преобразований применительно к кристаллографии и их запись в матричном виде, следуя стилю замечательных монографий [13,14]. Основной задачей, рассмотренной в данной книге, является определение и

описание ориентационного соотношения двух фаз с разными кристаллическими решетками, возникающего при фазовых превращениях в твердом теле.

1.1. Связь между кристаллографическими плоскостями и направлениями реальных и обратных решеток двух сопрягающихся кристаллов

Обозначим базисные векторы – осевые единицы кристаллографических решеток фазы матрицы (условно первой фазы) через a_1, a_2, a_3 и выделенной (условно второй фазы), – A_1, A_2, A_3 . Будем считать, что при сопряжении обе координатные системы имеют общее начало.

Пусть осевые векторы решетки выделения, A_1, A_2, A_3 , при данном сопряжении развернуты относительно решетки матрицы таким образом, что индексы (координаты конца) вектора A_1 в координатной системе матрицы суть T_{11}, T_{12}, T_{13} , а вектора A_2 – T_{21}, T_{22}, T_{23} ,и т.д. Тогда, как известно из аналитической геометрии, связь между двумя базисами можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} A_1 &= T_{11}a_1 + T_{12}a_2 + T_{13}a_3 \\ A_2 &= T_{21}a_1 + T_{22}a_2 + T_{23}a_3 \\ A_3 &= T_{31}a_1 + T_{32}a_2 + T_{33}a_3 \end{aligned} \quad (1.1)$$

Совокупность коэффициентов при осевых векторах в (1.1) образует матрицу преобразования базиса,

$$T \equiv \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix}; \quad \text{так что} \quad T \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix}, \quad (1.2)$$

вполне определяет переход от координатной системы a_1, a_2, a_3 к A_1, A_2, A_3 . Обратный переход от A_1, A_2, A_3 к a_1, a_2, a_3 , как известно, будет осуществляться с помощью обратной матрицы, T^{-1} :

$$T^{-1} \equiv \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & t_{13} \\ t_{21} & t_{22} & t_{23} \\ t_{31} & t_{32} & t_{33} \end{bmatrix}; \quad \text{так что} \quad T^{-1} \cdot \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}, \quad (1.3).$$

Рассмотрим теперь, как преобразуются индексы узлов и узловых рядов (кристаллографических направлений). Пусть некоторый узел матричной фазы, имеющий индексы pqr , совпадает при сопряжении с узлом решетки выделения, имеющим в своей координатной системе индексы PQR . Радиус-вектор r данного узла будет иметь единственное представление в каждом базисе:

$$r = pa_1 + qa_2 + ra_3 = PA_1 + QA_2 + RA_3 \quad (1.4)$$

Используя (1.1), запишем (1.4) в следующем виде:

$$\begin{aligned} r &= P(T_{11}a_1 + T_{12}a_2 + T_{13}a_3) + \\ &+ Q(T_{21}a_1 + T_{22}a_2 + T_{23}a_3) + R(T_{31}a_1 + T_{32}a_2 + T_{33}a_3) \end{aligned} \quad (1.5)$$

Сравнивая коэффициенты при a_1, a_2, a_3 в (1.4) и (1.5) получим:

$$\begin{aligned}
p &= T_{11}P + T_{21}Q + T_{31}R \\
q &= T_{12}P + T_{22}Q + T_{32}R \\
r &= T_{13}P + T_{23}Q + T_{33}R
\end{aligned} \tag{1.6}$$

или в виде матричного равенства:

$$\tilde{T} \cdot \begin{bmatrix} P \\ Q \\ R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix}. \tag{1.7}$$

В место разложения (1.1) мы можем использовать (1.3), тогда получим:

$$\begin{bmatrix} P \\ Q \\ R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{21} & t_{31} \\ t_{12} & t_{22} & t_{32} \\ t_{13} & t_{23} & t_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} \text{ или } \tilde{T}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P \\ Q \\ R \end{bmatrix} \tag{1.8}$$

Матрицы в (1.7) и (1.8) получены транспортированием матрицы (1.2) и обратной матрицы (1.3) соответственно. Будем обозначать их через \tilde{T} и \tilde{T}^{-1} . Очевидно, что аналогичным правилам будет подчиняться связь кристаллографических направлений (векторов), т.к. каждому узлу решетки с координатами, скажем, pqr , соответствует вектор $[pqr]$, проведенный в этот узел от начала координат, и координаты узла одновременно являются индексами этого вектора.

Проиллюстрируем вышеизложенное на конкретном примере. На рис.1 изображены две совмещенные произвольные решетки:

одна из них имеет ячейку с осевыми векторами a_1, a_2, a_3 , другая - A_1, A_2, A_3 . При этом конец вектора A_1 имеет индексы 111 относительно первой координатной системы; вектора A_2 - индексы 031 и вектора A_3 - индексы 013. Тогда уравнение (1.1) в данном случае, можно записать следующим образом:

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} \tag{1.9}$$

Для того, чтобы рассчитать совпадающие кристаллографические направления этих решеток при таком сопряжении, нужно воспользоваться уравнением (1.7) (см. Таблицу 1), которое в рассматриваемом случае будет иметь следующий вид:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix} \tag{1.10}$$

Рассмотрим, например, узел R (рис.1), имеющий в координатной системе A_1, A_2, A_3 индексы 111; этому узлу соответствует и направление $[111]$ в этой же системе. Мы можем, не прибегая к сложному построению, с помощью матричного равенства (1.10) рассчитать, какой узел uvw решетки a_1, a_2, a_3 совпадает с узлом R (или какие индексы будет иметь вектор \vec{OR} в системе a_1, a_2, a_3). Простой расчет

показывает, что, согласно (1.10), имеем, $[111]_A || [155]_a$, в чем легко убедиться также и из рис.1.

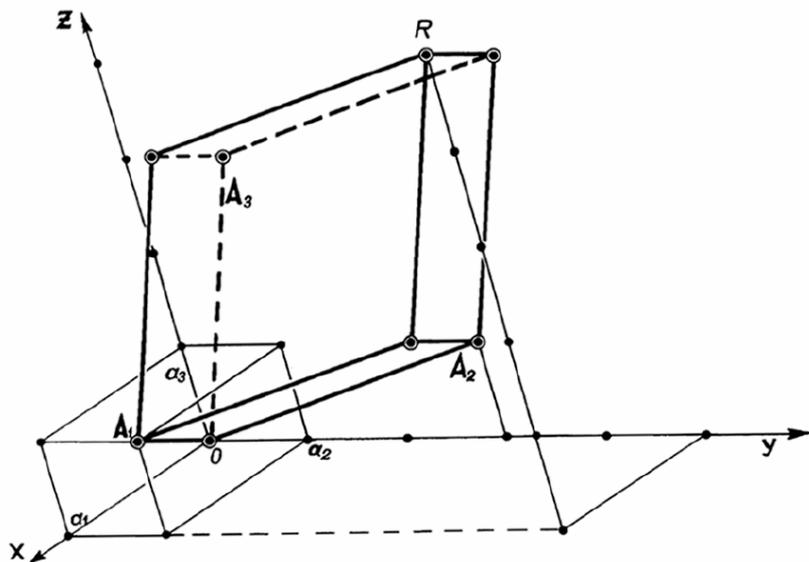


Рис.1. Модель двух совмещенных решеток. Ячейка ABC выделена жирной линией.

В уравнении (1.10) столбцами матрицы являются осевые компоненты векторов A_1, A_2 и A_3 в координатной системе a_1, a_2, a_3 . Обозначим далее индексы некоторой серии узловых сеток в координатных осях a_1, a_2, a_3 символами hkl , а в системе A_1, A_2, A_3 - символами HKL . По определению H есть число частей, на которые делится соответствующее ребро элементарной ячейки. Однако, из (1.1) имеем, что $A_1 = T_{11}a_1 + T_{12}a_2 + T_{13}a_3$ и вектор A_1 должен делиться на

столько же частей, на сколько делится ломаная линия $T_{11}a_1 + T_{12}a_2 + T_{13}a_3$, соединяющая концы вектора A_1 . По определению вектор a_1 должен делиться на h частей. Следовательно, вектор $T_{11}a_1$ делится на $T_{11}h$ частей; аналогично, вектор $T_{12}a_2$ делится на $T_{12}k$ частей а $T_{13}a_3$ - на $T_{13}l$ частей. В результате, вся ломаная делится на $T_{11}h + T_{12}k + T_{13}l$ частей. Таким образом, $H = T_{11}h + T_{12}k + T_{13}l$. Аналогичные рассуждения для других индексов убеждают в справедливости следующих уравнений (1.11):

$$\begin{aligned} H &= T_{11}h + T_{12}k + T_{13}l \\ K &= T_{21}h + T_{22}k + T_{23}l \\ L &= T_{31}h + T_{32}k + T_{33}l \end{aligned} \quad ; \quad T \cdot \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H \\ K \\ L \end{bmatrix} \quad (1.11)$$

Сравнивая эти уравнения (1.11) с уравнениями (1.1), видим, что индексы любых узловых сеток преобразуются с помощью тех же уравнений и коэффициентов, которые позволяют перейти от базисных векторов решетки матрицы к базисным векторам решетки выделения.

С другой стороны, параллельность (совпадение) узловых сеток матричной решетки с определенными сетками в решетке выделения соответствует совпадению узловых рядов (направлений) в обратных решетках матрицы и выделения, ориентированных согласно данной взаимной ориентировке осевых векторов этих фаз. Поэтому очевидно, что уравнениями (1.11) преобразуются и координаты точек обратной решетки, т.е. находятся индексы совпадающих узлов обратной решетки. Симметричность выражений, связывающих осевые векторы «прямой» и обратной решеток (см. таблицу 1) [14] показывает,

что с геометрической точки зрения эти решетки взаимно-обратны, и законы линейных преобразований будут одинаково правомерными для установления связи между кристаллографическими направлениями двух сопрягающихся фаз как в «прямых» (атомных), так и в обратных решетках.

В таблице 1 приведены правила использования всех 4-х матриц преобразования при описании ориентационных соотношений между кристаллическими фазами. В таблице 1 условно, под одной буквой, подразумевается совокупность соответствующих параметров. Например, $a - (a_1 a_2 a_3)$, $H - (HKL)$, $u - [uvw]$ - в атомной решетке; $A^* - (A_1^* A_2^* A_3^*)$; $h^* - (hkl)^*$; $U^* - [UVW]^*$ - в обратной решетке. Малые буквы относятся к параметрам одного (первого) кристалла, а большие – к параметрам другого (второго).

Таблица 1

Используемая матрица	Преобразуемые параметры		
	Оси	Индексы сеток (плоскостей)	Индексы узлов (точек) и рядов (направлений)
T	$a \rightarrow A$	$h \rightarrow H$	$u^* \rightarrow U$
T^{-1}	$A \rightarrow a$	$H \rightarrow h$	$U^* \rightarrow u^*$
\tilde{T}	$A^* \rightarrow a$	$H^* \rightarrow h$	$U \rightarrow u$
\tilde{T}^{-1}	$a^* \rightarrow A^*$	$h^* \rightarrow H$	$u \rightarrow U$

1.2 Определение ориентационных соотношений по микродифракционным картинам

Поскольку точечная электронограмма, полученная при высоком ускоряющем напряжении, является практически плоским сечением обратной решетки, которому перпендикулярен пучок электронов, параллельный некоторой оси зоны $[uvw]$, индексы рефлексов - индексы отражающих плоскостей (hkl) , должны удовлетворять следующему условию зональности: $uh + vk + wl = 0$. Поэтому анализ электронограммы от монокристаллических участков, в случае кристаллической фазы с известной структурой, удобно проводить с помощью индцированной модели обратной решетки исследуемого вещества, построенного с учетом структурного фактора. Сопоставляя различные плоские сечения модели с экспериментально полученной электронограммой, можно найти нужное сечение и идентифицировать отражения. Можно также заранее построить разные сечения обратной решетки (практически достаточным оказывается набор из 15-25 сечений) в масштабе электронограммы (λL) и сопоставлять с экспериментальными электронограммами [18,20].

Таким же образом, в случае двухфазных кристаллов, имея в своем распоряжении схемы составных электронограмм, соответствующих заданным ориентировкам кристаллов матрицы и фазы выделения, можно отдельно проиндцировать экспериментально наблюдаемые дифракционные картины каждой фазы. Следовательно, первая задача – определение принадлежности, идентификация рефлексов [3,18,20] и их разделение на сетки, принадлежащих к разным фазам, и вторая – индцирование рефлексов, будут решены.

Следующей задачей является установление ориентационного соотношения между кристаллическими решетками двух фаз.

В случаях фаз с известными кристаллическими решетками возможны два основных варианта задачи:

1. Ориентационное соотношение между решетками фаз известно, и нужно лишь установить, отвечают ли ему экспериментально наблюдаемые взаимные ориентации. Это легко сделать, если: а) заранее построить сечения общего обратного пространства двух совмещенных кристаллов отвечающие данному ориентационному соотношению между фазами; б) выяснить, описывается ли экспериментально наблюдаемая взаимная ориентация фаз вычисленной матрицей соответствия.

2. Ориентационное соотношение неизвестно, и его надо определить с помощью экспериментально полученных электронограмм. Для решения этой задачи законы преобразований, изложенные выше, применяются к сопрягающимся кристаллическим решеткам с одинаковыми (например, двойники [7,20]) или разными (разные фазы [4,6,19]) элементарными ячейками.

Рассмотрим применение матриц из Таблицы 1 для решения этих задач – индцирование дифракционных картин от двухфазного комплекса и установление ориентационного соотношения с помощью дифракционных картин.

Допустим, известное ориентационное соотношение между матрицей и фазой выделения для кубических решеток задано таким образом, что направление $[100]_A$ кристаллической решетки выделения параллельно некоторому направлению $[u_1 v_1 w_1]_a$ решетки матричной фазы, направление $[010]_A$ $\parallel [u_2 v_2 w_2]_a$ и $[001]_A$ $\parallel [u_3 v_3 w_3]_a$. Тогда связь между индексами любых совпадающих (параллельных)

кристаллографических направлений в обеих решетках, в силу (1.7), можно представить в виде следующего матричного равенства:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_A = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & u_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \\ w_1 & w_2 & w_3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_a \quad (1.12)$$

Если элементарные ячейки сопрягающихся фаз различны, или несоразмерны, то элементы матрицы в таком равенстве, естественно, будут дробными числами. В некоторых случаях (для удобства расчетов), их можно сократить до целых чисел без общего делителя.

Таким образом, в случае электронограммы, равенство (1.12), описывающее конкретный вариант ориентационного соотношения матрица-выделение (первая фаза - вторая фаза), связывает в частности, те оси зон в решетках матрицы и выделения, которые одновременно становятся параллельными падающему пучку электронов, т.е. те плоскости обратных решеток двух фаз, которые одновременно изображаются на электронограмме. При этом индексы совпадающих направлений в обратных решетках (в частности, индексы совпадающих направлений в плоскости электронограммы) будут описываться с помощью матрицы, транспонированной от матрицы, входящей в (1.12) (см. Таблицу 1), т.е. с помощью следующего матричного равенства:

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_A = \begin{bmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_a \quad (1.13)$$

После выбора (в определенной мере произвольно) конкретного варианта ориентационного соотношения, матричные равенства (1.12) и (1.13) позволяют построить и однозначно проиндцировать любые точечные электронограммы - сечения общего обратного пространства двух сопряженных решеток.

Рассмотрим это на конкретном примере ориентационного соотношения Багаряцкого между ферритом (ОЦК) и цементитом (Ромбическая) в стали [21].

Согласно соотношению Багаряцкого, в самом общем случае осевые векторы цементитной решетки должны совпадать по направлению со следующими кристаллографическими осями в решетке ОЦК железа: $[100]_{\alpha} \parallel \langle 110 \rangle_{\gamma}$, $[010]_{\alpha} \parallel \langle 111 \rangle_{\gamma}$ и

$[001]_{\alpha} \parallel \langle 112 \rangle_{\gamma}$. Можно далее выбрать разные, но эквивалентные конкретные варианты соотношения, подбирая соответственно конкретные кристаллографические направления в решетке $\alpha - Fe$. Исходя из удобства оперирования с минимальным количеством отрицательных знаков у индексов, при расчетах можно выбрать следующий частный вариант соотношения: $[100]_{\gamma} \parallel [1\bar{1}0]_{\alpha}$, $[010]_{\gamma} \parallel [11\bar{1}]_{\alpha}$ и $[001]_{\gamma} \parallel [112]_{\alpha}$. Тогда, в силу формул (1.1) и (1.9), учитывая и размерные соотношения между векторами участвующими в ориентационном соотношении, получим [20]:

$$T \equiv \begin{bmatrix} 1.116 & -1.116 & 0 \\ 1.025 & 1.025 & -1.025 \\ 0.9605 & 0.9605 & 1.921 \end{bmatrix}, \quad \text{где } T \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix}_{\alpha} \quad (1.13a)$$

Следовательно, этот вариант ориентационного соотношения (см. Таблицу 1) можно описать следующими матрицами:

$$\tilde{T} \equiv \begin{bmatrix} 1.116 & 1.025 & 0.9605 \\ -1.116 & 1.025 & 0.9605 \\ 0 & -1.025 & 1.921 \end{bmatrix}$$

и

$$\tilde{T}^{-1} \equiv \begin{bmatrix} 0.4481 & -0.4481 & 0 \\ 0.3251 & 0.3251 & -0.3251 \\ 0.1735 & 0.1735 & 0.3470 \end{bmatrix} \quad (1.14)$$

так что $\tilde{T} \cdot \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_{\gamma} = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_{\alpha}$ и $\tilde{T}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_{\alpha} = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_{\gamma}$ (1.14a)

В случае, если ориентационное соотношение задано в такой форме, которая не включает в себя осевых векторов, то предварительно следует найти те направления одной кристаллической решетки, которые совпадают с осевыми направлениями второй. Это удобно делать по стереографической проекции или с помощью пространственной модели.

С помощью матричного равенства (1.14a) можно заранее рассчитать, какие оси зон, в данном случае решеток феррита и цементита, становятся параллельными и могут быть одновременно получены на одной электронограмме. В таблице 2 приведены результаты таких расчетов для некоторых направлений решетки $\alpha - Fe$ и цементита. При этом

совпадающие направления в обратных решетках $\alpha - Fe$ и цементита, лежащие в плоскостях соответствующих электронограмм, будут описываться с помощью матричного равенства (1.13), которое для рассматриваемого конкретного варианта имеет следующий вид (1.13а):

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_\alpha = T \cdot \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_\alpha \quad (1.15)$$

Матричные равенства (1.14а) и (1.15) позволяют при выбранном конкретном варианте ориентационного соотношения однозначно проиндексировать любые электронограммы от кристаллов α -фазы с цементитными выделениями, если соблюдается соотношение Багаряцкого [21].

В таблице 3 приведены рассчитанные по формуле (1.15) совпадающие направления обратных решеток ОЦК железа и цементита, наиболее характерные для основных сечений общего обратного пространства этих двух фаз. Следует учесть, что кроме приведенных в таблице 2 значений параллельных (или почти параллельных) зон, существуют и другие, так же близко лежащие зоны.

Для установления конкретного ориентационного соотношения, которому отвечает каждый конкретный случай – каждая полученная электронограмма, полезно воспользоваться этими таблицами 2 и 3 и построить совмещенные сечения обратных решеток ОЦК железа и орторомбического цементита.

Таблица 2

Взаимно-параллельные кристаллографические направления в решетках ОЦК-железа и цементита, сопряженных по одному из вариантов соотношения Багаряцкого. Индексы получены из матричного равенства (1.12), округлены.

α	ζ	α	ζ	α	ζ
100	321	$11\bar{2}$	$04\bar{1}$	$2\bar{1}0$	921
010	$\bar{3}21$	121	$\bar{3}45$	102	$3\bar{2}5$
001	$0\bar{1}1$	$\bar{1}21$	$\bar{3}01$	$10\bar{2}$	$12\bar{1}$
110	021	$1\bar{2}1$	$9\bar{4}1$	201	312
$1\bar{1}0$	100	$12\bar{1}$	$\bar{3}81$	$20\bar{1}$	110
101	101	211	345	113	$0\bar{1}4$
$10\bar{1}$	$34\bar{1}$	$\bar{2}11$	$\bar{9}41$	$\bar{1}13$	$\bar{1}\bar{1}1$
011	$\bar{1}01$	$2\bar{1}1$	301	$1\bar{1}3$	$1\bar{1}1$
$0\bar{1}1$	$3\bar{4}1$	$21\bar{1}$	381	$11\bar{3}$	$05\bar{2}$
111	012	021	$\bar{3}12$	131	$\bar{1}11$
$\bar{1}11$	$\bar{3}\bar{1}1$	$0\bar{2}1$	$1\bar{1}0$	$\bar{1}31$	$\bar{6}12$
$1\bar{1}1$	$3\bar{1}1$	012	$\bar{3}\bar{2}5$	$1\bar{3}1$	$2\bar{1}0$
$11\bar{1}$	010	$0\bar{1}2$	$11\bar{2}$	$13\bar{1}$	$\bar{3}51$
112	001	120	$\bar{1}21$	311	111
$\bar{1}12$	$\bar{3}\bar{2}2$	$1\bar{2}0$	$9\bar{2}1$	$\bar{3}11$	$2\bar{1}0$
$1\bar{1}2$	$3\bar{2}2$	210	121	$3\bar{1}1$	612

Экспериментально совмещение сферы отражения с какой-либо плоскостью обратной решетки достигается соответствующим ориентированием образца в пространстве с помощью гониометрического столика электронного микроскопа.

Выведения осей зон параллельно пучку электронов с точностью до $1-2^\circ$ можно достичь, добиваясь (при визуальном наблюдении) однородного (центросимметричного) распределения интенсивности рефлексов обеих фаз на электронограмме.

Имея в своем распоряжении схемы нескольких основных дифракционных картин, при определенном опыте, можно за короткое время обследовать большое количество кристаллов.

На рис.2 приведена электронограмма отпущенного мартенситного кристалла в стали. Из этой электронограммы, как показывает ее расшифровка (см. схему № 74 в атласе), прямо вытекает соотношение Багаряцкого:

$$\begin{aligned} [112]_{\alpha} &\parallel [001]_{\gamma} \\ [11\bar{1}]_{\alpha} &\parallel [010]_{\gamma} \\ [1\bar{1}0]_{\alpha} &\parallel [100]_{\gamma} \end{aligned}$$

Параллельность $[112]_{\alpha}$ и $[001]_{\gamma}$ следует из того факта, что при соответственном ориентировании образца оси зон $[112]_{\alpha}$ и $[001]_{\gamma}$ одновременно становятся строго параллельными электронному пучку (центросимметричное распределение интенсивностей рефлексов от феррита и цементита). Параллельность двух других осей решетки цементита

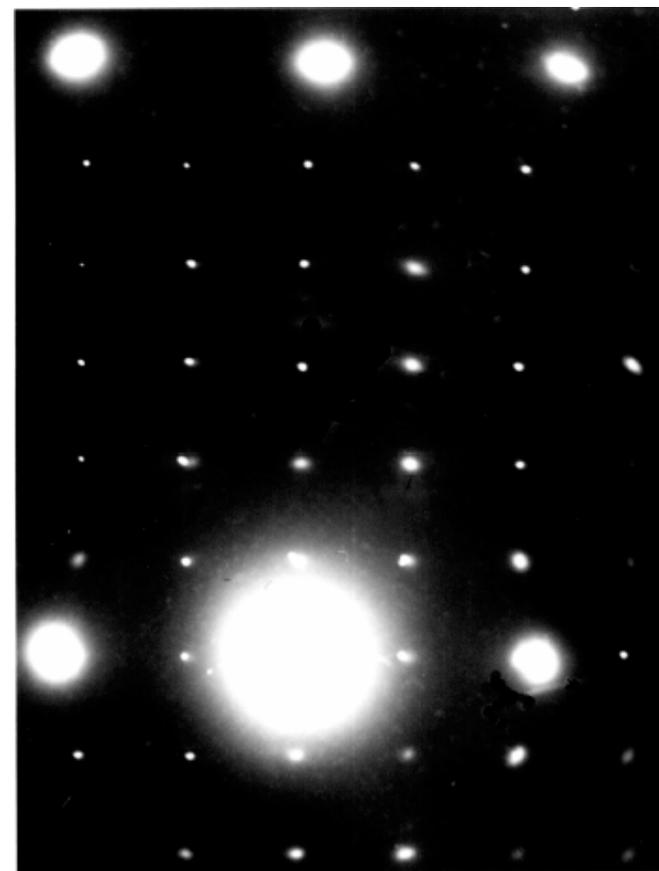


Рис.2. Дифракционная картина электронов от отпущенного мартенсита стали 48ХН3М. Крупные рефлексы соответствуют решетке феррита; малые – решетке цементита. Ось зоны $[112]_{\alpha} \parallel [001]_{\gamma}$ (См. схему № 74 в атласе).

В случае последовательного сопряжения трех кристаллических решеток при известных ориентационных соотношениях между первой и второй и между второй и третьей, ориентационное соотношение между первой и третьей фазами можно найти применением правил умножения матриц.

ГЛАВА 2

АНАЛИЗ ДИФРАКЦИОННЫХ КАРТИН ОТ ДВОЙНИКОВЫХ КРИСТАЛЛОВ

В настоящей главе изложен метод анализа дифракционных картин, получаемых от двойников. Два кристалла могут быть приведены в одну, конгруэнтную, ориентацию путем отражения в некоторой плоскости или вращением относительно некоторой оси. Представляется вероятным, что части двойника могут быть связаны любыми кристаллографическими элементами симметрии – поворотными осями $2,3,4,6$ порядков, инверсионными осями $\bar{3},\bar{4},\bar{6}$, плоскостью зеркального отражения m и центром симметрии $\bar{1}$. Однако, в подавляющем большинстве случаев, элементами симметрии являются зеркальная плоскость и ось второго порядка.

Для формирования в кристаллической решетке двойникового соотношения между частями кристалла единственное фундаментальное ограничение состоит в том, что эту взаимосвязь может осуществить только тот элемент симметрии, которого, в нужной для этой взаимосвязи ориентации, не существует в исходном кристалле. В противном случае, т.е. при наличии указанного элемента симметрии в обычной для данной решетки ориентировке, кристалл переходил бы в самого себя, а не в двойник [23,27,31].

Анализ электронограмм от двойников, тем самым, затрудняется:

1. присутствием отражений от нескольких кристаллов,
2. высокой интенсивностью отраженных пучков, сравнимой с основными отражениями из-за двойной (и многократной) дифракции, и возможным появлением в обратном пространстве

почти сплошных стержней и сателлитных пятен [3,18,20,22,29,30], с которыми многократно сталкиваемся в ходе исследований. Геометрические методы анализа дифракционных картин от двойников сводятся к отысканию (экспериментально) совпадающих направлений матрицы и двойника как в прямом, так и в обратном пространстве, с помощью которых строятся стереографические проекции двойникового кристалла, и после установления ориентационного соотношения оно записывается в матричном виде. Далее, с помощью этих матриц находятся другие совпадающие направления как в прямом, так и в обратном пространстве, и таким образом создается полная картина [20].

Изложенный в настоящей главе подход предполагает теоретическое построение ожидаемых дифракционных картин от двойников в кристаллах любой сингонии, исходя только из индексов плоскости двойникового и параметров решетки.

Метод основан на использовании матрицы ориентационного и размерного соответствия, который дает возможность найти координаты совпадающих направлений и узлов в прямом и обратном пространстве. Совокупность полученных данных позволяет создать картину, получаемую на дифракционной картине от двойника [4-9,18,20].

В кристаллах под влиянием различных факторов возникает двойниковая структура (например, деформационные двойники, двойники превращения и роста), которая в большинстве случаев представляет собой результат зеркального отображения решетки относительно некоторой плоскости (в зависимости от сингонии и ретикулярной плотности плоскости) или поворота относительно некоторого направления [23]. Например, в ОЦК кристаллах это плоскости типа $\{112\}$, в ГЦК - $\{111\}$, в ГПУ - $\{101\}, \{102\}, \{103\}, \{111\}, \{112\}$, в ГЦТ - $\{101\}$ и т.д.

Как отмечено выше, дифракционная картина, полученная от такой структуры, осложняется наложением двух (в общем случае разных) дифракционных сеток.

Если рассмотрим зеркальное отображение произвольной линейной координатной системы относительно некоторой плоскости, то нетрудно заметить, что, учитывая априорную centrosymmetrichность дифракционной картины, эту операцию можно без ущерба заменить поворотом координатной системы на 180° относительно нормали к плоскости зеркального отражения (двойникового) [7,20]. Заметим, что такая замена операции симметрии, в общем случае, действительна только в случае кристалла, построенного из одинаковых атомов. В противном случае, когда решетка построена из разноименных атомов, хотя положения узлов решетки в случаях поворота на 180° и отражения будут совпадать, все же мотивы кристалла в этих двух случаях будут различными, так как в общем случае узлы одного типа в кристалле могут быть заняты разноименными атомами.

Это обстоятельство меняется в обратном пространстве, т.е. в случае дифракционной картины, где присутствует центр симметрии и все дозволённые структурным фактором отражения для поставленной цели (построение схемы электронограммы) можно рассмотреть как одинаковые узлы решетки, на этот раз – обратной.

Таким образом, для узлов обратной решетки и следовательно для дифракционной картины, возможна замена операции зеркального отражения поворотом на 180° относительно нормали к плоскости отражения, без ущерба для релевантности. Преимуществом такой замены является и то обстоятельство, что, если в случае зеркального отражения меняется четность координатной системы, т.е. левая система переходит в правую и наоборот, то в случае вращения на 180° , четность координатной

системы не меняется и, следовательно, легче ориентироваться в пространстве, проводя кристаллографический анализ. Очевидно, что при установлении ориентационного соотношения и выводе матрицы соответствия целесообразно пользоваться системами одинаковой четности.

Следовательно, математически двойникование будет рассматриваться как поворот координатной системы на 180° вокруг нормали к плоскости двойникования.

Как известно, преобразование прямолинейных координат, связь между реперами старой и новой координатных систем (в нашем случае между реперами двойника и матрицы) можно записать в виде следующих линейных комбинации (см. гл. 1):

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix} = T \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}_M$$

или
$$A_j = \sum_{j=1}^3 T_{ij} a_j \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (2.1)$$

где A_i - реперы координатной системы двойниковой части кристалла, a_i - матричной, а T_{ij} - коэффициенты линейной комбинации, и составляют матрицу ориентационного и размерного соответствия. Без ущерба для общности, будем считать, что обе координатные системы имеют общее начало.

Коэффициенты T_{ij} определяются косинусами между реперами матрицы и двойника A_i и a_i . Исходя из строгого геометрического соотношения, можно получить выражение, которое устанавливает связь между реперами координатных

систем матрицы и двойника в общем триклинном случае [7,10]. Выражение имеет следующий вид:

$$A_i \cdot a_j = 2(n \cdot a_i)(n \cdot a_j) - (a_i \cdot a_j) \quad (2.2)$$

где A_i , a_i , a_j - единичные векторы координатных систем решеток двойника и матрицы; n - направляющий вектор нормали к плоскости двойникования.

Если скалярные произведения в выражении (2.2) запишем через косинусы, получим:

$$\cos \varpi_{ij} = 2 \cos \alpha_i \cdot \cos \alpha_j - \cos \alpha_{ij} \quad (2.2a)$$

где ϖ_{ij} - угол между i -тым и j -тым реперами двойника и матрицы, соответственно, α_i - угол между a_i и нормалью к плоскости двойникования - n , α_j - угол между a_j и n , α_{ij} - угол между a_i и a_j , зависящий от сингонии кристалла. Соотношение (2.2a) позволяет вычислить элементы матриц соответствия двойниковых решеток, т.е. для координатных систем, находящихся в двойниковом соотношении. Эти элементы, соответственно, являются коэффициентами линейных комбинаций (2.1). Ниже будет показана последовательность вычисления элементов матрицы T , и метод их применения для анализа дифракционных картин от двойников.

Рассмотрим предварительно частный случай ортогонального базиса. Выражение для элемента матрицы преобразования ортогонального базиса имеет вид:

$$T_{ij} = \frac{A_i}{a_j} \cos \varpi_{ij} \quad (2.3)$$

или учитывая выражение (2.2a), т.е. в случае двойникового соотношения базисов, получим:

$$T_{ij} = \frac{A_i}{a_j} [2 \cos \alpha_i \cos \alpha_j - \cos \alpha_{ij}]$$

или

$$T_{ij} = \frac{A_i}{a_j} [2 \cos \{[uvw], a_i\} \cdot \cos \{[uvw], a_j\} - \cos \{a_i, a_j\}],$$

где индексы нормали к плоскости двойникового $(hkl)_D$ обозначены через $[uvw]$. Подставляя выражения для $\cos \alpha_i$, $\cos \alpha_j$ и $\cos \alpha_{ij}$, записанные в принятой в кристаллографии форме, через uvw и $a_1 a_2 a_3$ (реперы решетки), получим выражения для $\cos \alpha$. Такие подстановки, в случае орторомбической сингонии (общей для систем с ортогональным базисом), дают следующие выражения для элементов матрицы:

$$T_{11} = \frac{u^2 a_1^2 - v^2 a_2^2 - w^2 a_3^2}{u^2 a_1^2 + v^2 a_2^2 + w^2 a_3^2}$$

$$T_{12} = \frac{2uv a_1^2}{u^2 a_1^2 + v^2 a_2^2 + w^2 a_3^2}$$

.....

Составленная из T_{ij} матрица будет иметь вид:

$$T = \frac{1}{u^2 a_1^2 + v^2 a_2^2 + w^2 a_3^2} \times \begin{bmatrix} u^2 a_1^2 - v^2 a_2^2 - w^2 a_3^2 & 2uv a_1^2 & 2uw a_1^2 \\ 2uv a_1^2 & v^2 a_2^2 - u^2 a_1^2 - w^2 a_3^2 & 2vw a_2^2 \\ 2uw a_1^2 & 2vw a_2^2 & w^2 a_3^2 - u^2 a_1^2 - v^2 a_2^2 \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

Индексы нормали $[uvw]$ к плоскости двойникового (hkl) определяются из известного условия ортогональности плоскости (hkl) и направления $[uvw]$ [22,24]:

$$u = (a_1^*)^2 h + (a_1^* \cdot a_2^*) \cdot k + (a_1^* \cdot a_3^*) l$$

$$v = (a_2^* \cdot a_1^*) h + (a_2^*)^2 \cdot k + (a_2^* \cdot a_3^*) l \quad \text{или} \quad G^{-1} \cdot \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

$$w = (a_3^* \cdot a_1^*) h + (a_3^* \cdot a_2^*) \cdot k + (a_3^*)^2 l$$

где G -метрический тензор примитивной решетки Бравэ рассматриваемого кристалла (см. приложение к главе 3).

Очевидно, что из выражения (2.4) при $a_1 = a_2 \neq a_3$ получается матрица соответствия двойниковых решеток для тетрагональной сингонии:

$$T = \frac{1}{(u^2 + v^2)a_1^2 + w^2a_3^2} \times \begin{bmatrix} (u^2 - v^2)a_1^2 - w^2a_3^2 & 2uva_1^2 & 2vwa_1^2 \\ 2uva_1^2 & (v^2 - u^2)a_1^2 - w^2a_3^2 & 2vwa_1^2 \\ 2uwa_3^2 & 2vwa_3^2 & w^2a_3^2 - (u^2 + v^2)a_1^2 \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

а при $a_1 = a_2 = a_3$, для кубической:

$$T = \frac{1}{u^2 + v^2 + w^2} \times \begin{bmatrix} u^2 - v^2 - w^2 & 2uv & 2vw \\ 2uv & v^2 - w^2 - u^2 & 2vw \\ 2uw & 2vw & w^2 - u^2 - v^2 \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

Как и следовало ожидать, для кристаллов высшей симметрии, кубическо-голоэдрического класса, элементы матрицы преобразования выражаются только через индексы нормали к плоскости двойникования.

В случае неортогональных сингоний, аналогично (2.4), (2.6), (2.7), можно составить матрицу, учитывая способ проектирования (выражение (2.3) справедливо только в случае ортогонального проектирования). Однако, из-за громоздких выражений для каждого элемента T_{ij} в этом случае целесообразно воспользоваться эквивалентной матрицей, проводя операцию двойникового преобразования в некотором ортогональном (или в ортонормированном) базисе [7,8,24-27],

или используя для этой цели матрицу вращения вокруг произвольной оси на произвольный угол в ортонормированной системе координат [13]. С целью упражнения рассмотрим оба варианта.

А. После того, как определенным способом (см. приложение и пример к главе 2) [8,24], предварительно будет выбран ортогональный (или ортонормированный) базис в неортогональной системе, устанавливается связь между неортогональным базисом исходного кристалла и новым ортогональным (или ортонормированным) базисом с помощью матричного равенства (см. пример в конце главы):

$$U \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}_M = \begin{bmatrix} a_1^0 \\ a_2^0 \\ a_3^0 \end{bmatrix}_M \quad (2.8)$$

где индекс (M) означает, что базисы (a_i) и (a_i^0) принадлежат к матричной части кристалла, а a_i^0 и a_i - ортогональный и неортогональный базисы, соответственно. Индекс i - принимает значения 1, 2, 3; U - матрица, связывающая эти базисы (см. приложение и пример к главе 2) Операция двойникования проводится уже в ортогональной системе, т.е. устанавливается следующая связь [7]:

$$T \cdot \begin{bmatrix} a_1^0 \\ a_2^0 \\ a_3^0 \end{bmatrix}_M = \begin{bmatrix} A_1^0 \\ A_2^0 \\ A_3^0 \end{bmatrix}_D \quad (2.9)$$

где T -матрица двойникового соотношения для нового ортогонального базиса и вычислена по формулам (2.4) и (2.5) в случае выбора ортогонального базиса, или по формуле (2.7) в случае ортонормированного базиса, и в которых a_1, a_2, a_3 - это базис a_i^0 . Индекс (D) указывает, что вектор-столбец является базисом двойниковой части кристалла.

Далее полученный результат переводится обратно в неортогональную систему с помощью следующего матричного равенства:

$$U^{-1} \cdot \begin{bmatrix} A_1^0 \\ A_2^0 \\ A_3^0 \end{bmatrix}_D = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

где U^{-1} - есть обратная U матрица; т.е. полученный после операции двойникового соотношения в ортогональной системе базис, и следовательно, индексы направлений и плоскостей выражаются опять в старой неортогональной системе. Матрицу U (или U^{-1} , \tilde{U} , \tilde{U}^{-1}) легко можно получить, исходя из конкретного геометрического соотношения выбранного ортогонального базиса к базису сингонии, или воспользоваться стандартной матрицей перевода в ортонормированную систему (см. Пример к главе 2) [24,28].

Подытоживая последовательность операции (2.8), (2.9), (2.10), очевидно, что их можно записать в одном обобщенном выражении:

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix}_D = U^{-1} \cdot T \cdot U \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}_M \quad (2.11)$$

или

$$\begin{bmatrix} A_i \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix}_D = S \cdot \begin{bmatrix} a_i \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{bmatrix}_M, \quad (2.11a)$$

$$\text{где} \quad S \equiv U^{-1} \cdot T \cdot U \quad (2.12)$$

есть матрица преобразования неортогонального базиса при двойниковании.

Как предполагалось, матрицы T и S действительно являются эквивалентными, так как они связаны преобразованием подобия (2.12), являющимся условием эквивалентности двух матриц в случае, если $\det U \neq 0$ [24-27], а в нашем случае преобразования координат всегда можно найти некоторую матрицу U^{-1} , чтобы удовлетворять условию $U^{-1} \cdot U = I$, где I - единичная матрица. Последнее же условие выполняется только тогда, когда $\det U \neq 0$ т.е. S и T - эквивалентные матрицы (см. Приложение к главе 2).

Используя матрицы $S \equiv U^{-1} \cdot T \cdot U$ и \tilde{S} (или соответствующие обратные и обратно-транспонированные), можно провести однозначную расшифровку электроно-дифракционной картины от двойниковых структур) [7,10,20]. А именно: предварительно рассчитать индексы совпадающих кристаллографических направлений двойника и исходного кристалла в прямой решетке, которые одновременно становятся параллельными электронному пучку (т.е. индексы осей зон каждой сетки рефлексов на электронограмме). Для этого нужно использовать следующее матричное равенство:

$$\tilde{S} \cdot \begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix}_D = \begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix}_M \quad (2.13)$$

где $[U \ V \ W]_D$ и $[U \ V \ W]_M$ - индексы совпадающих направлений двойника и матрицы.

При этом индексы совпадающих направлений в обратном пространстве (в частности индексы совпадающих направлений в плоскости электрограммы) будут связаны следующим равенством:

$$S \cdot \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_M = \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_D \quad \text{и} \quad S^{-1} \cdot \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_D = \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_M \quad (2.14)$$

Следует отметить, что выражения (2.13) и (2.14) общие для всех сингоний, как ортогональных, так и неортогональных. Для ортогональных сингоний очевидно, что $U = I$, т.е. матрица S тождественна матрице T (2.4).

Рассчитанное с помощью (2.13) и (2.14) ориентационное соотношение позволяет построить схему ожидаемой дифракционной картины от двойников (см. пример к главе 2).

Формулы, готовые для вычисления матричных элементов в кубической, тетрагональной, ромбической, гексагональной и моноклинной сингониях, полученные вышеизложенной процедурой и выраженные уже через индексы Миллера плоскости двойникования - h, k, l , приведены ниже:

Кубическая сингония:

$$s_{11} = \frac{1}{q}(h^2 - k^2 - l^2), \quad s_{12} = \frac{2hk}{q}, \quad s_{13} = \frac{2hl}{q},$$

$$s_{21} = \frac{2hk}{q}, \quad s_{22} = \frac{1}{q}(k^2 - h^2 - l^2), \quad s_{23} = \frac{2kl}{q},$$

$$s_{31} = \frac{2hl}{q}, \quad s_{32} = \frac{2kl}{q}, \quad s_{33} = \frac{1}{q}(l^2 - h^2 - k^2)$$

где $q = h^2 + k^2 + l^2$

Тетрагональная сингония:

$$s_{11} = \frac{1}{q} \left(\frac{h^2 - k^2}{a^2} - \frac{l^2}{c^2} \right), \quad s_{12} = \frac{2hk}{qa^2}, \quad s_{13} = \frac{2hl}{qc^2},$$

$$s_{21} = \frac{2hk}{qa^2}, \quad s_{22} = \frac{1}{q} \left(\frac{k^2 - h^2}{a^2} - \frac{l^2}{c^2} \right), \quad s_{23} = \frac{2kl}{qc^2},$$

$$s_{31} = \frac{2hl}{qa^2}, \quad s_{32} = \frac{2kl}{qa^2}, \quad s_{33} = \frac{1}{q} \left(\frac{l^2}{c^2} - \frac{h^2 + k^2}{a^2} \right),$$

где $q = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$;

Ромбическая сингония:

$$s_{11} = \frac{1}{q} \left(\frac{h^2}{a^2} - \frac{k^2}{b^2} - \frac{l^2}{c^2} \right), \quad s_{12} = \frac{2hk}{qb^2}, \quad s_{13} = \frac{2hl}{qc^2},$$

$$s_{21} = \frac{2hk}{qa^2}, \quad s_{22} = \frac{1}{q} \left(\frac{k^2}{b^2} - \frac{h^2}{a^2} - \frac{l^2}{c^2} \right), \quad s_{23} = \frac{2kl}{qc^2},$$

$$s_{31} = \frac{2hl}{qa^2}, \quad s_{32} = \frac{2kl}{qb^2}, \quad s_{33} = \frac{1}{q} \left(\frac{l^2}{c^2} - \frac{h^2}{a^2} - \frac{k^2}{b^2} \right)$$

где $q = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$

Гексагональная сингония:

$$s_{11} = \frac{1}{q} \left(\frac{4}{3} \frac{h^2 - k^2}{a^2} - \frac{l^2}{c^2} \right), \quad s_{12} = \frac{4(h^2 + 2hk)}{3a^2 q}, \quad s_{13} = \frac{2lh}{c^2 q},$$

$$s_{21} = \frac{4(k^2 + 2hk)}{3a^2 q}, \quad s_{22} = \frac{1}{q} \left(\frac{4}{3} \frac{k^2 - h^2}{a^2} - \frac{l^2}{c^2} \right), \quad s_{23} = \frac{2kl}{c^2 q},$$

$$s_{31} = \frac{4l(k + 2h)}{3a^2 q}, \quad s_{32} = \frac{4l(h + 2k)}{3a^2 q}, \quad s_{33} = \frac{1}{q} \left(\frac{l^2}{c^2} - 4 \frac{h^2 + k^2 + hk}{3a^2} \right),$$

где $q = \frac{h^2}{a^2} + \frac{(h + 2k)^2}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2}$.

Моноклиная сингония:

$$s_{11} = \frac{1}{q} \left[\frac{h^2}{a^2 \sin^2 \beta} - \frac{k^2}{b^2} - \frac{l^2}{c^2} (1 + \operatorname{ctg}^2 \beta) \right], \quad s_{12} = \frac{2hk}{qb^2},$$

$$s_{13} = \frac{2h}{qc^2} \left(\frac{al \cos^2 \beta - hc \cos^2 \beta}{a \sin^2 \beta} + l \right), \quad s_{21} = \frac{2k(hc - al \cos \beta)}{qa^2 c \sin^2 \beta},$$

$$s_{22} = \frac{1}{q} \left[\frac{k^2}{b^2} - \frac{l^2}{c^2} - \frac{(hc - al \cos \beta)^2}{a^2 c^2 \sin^2 \beta} \right], \quad s_{23} = \frac{2k(la - hc \cos \beta)}{qc^2 a \sin^2 \beta},$$

$$s_{31} = \frac{2l(hc - al \cos \beta)}{qa^2 c \sin^2 \beta}, \quad s_{32} = \frac{2kl}{sb^2},$$

$$s_{33} = \frac{1}{q} \left[\frac{l^2}{c^2} (1 + \operatorname{ctg}^2 \beta) - \frac{h^2}{a^2 \sin^2 \alpha} - \frac{k^2}{b^2} \right]$$

где $q = \left(\frac{h}{a \sin \beta} - \frac{l}{c \cdot \operatorname{tg} \beta} \right)^2 + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$.

Б. Матрица вращения вектора на угол ϑ вокруг произвольной оси с единичной направляющей $p_1 p_2 p_3$ в ортонормированной системе, как известно, имеет вид:

$$\begin{bmatrix} [p_1^2(1 - \cos \vartheta) + \cos \vartheta] & [p_1 p_2(1 - \cos \vartheta) - p_3 \sin \vartheta] & [p_1 p_3(1 - \cos \vartheta) + p_2 \sin \vartheta] \\ [p_2 p_1(1 - \cos \vartheta) + p_3 \sin \vartheta] & [p_2^2(1 - \cos \vartheta) + \cos \vartheta] & [p_2 p_3(1 - \cos \vartheta) - p_1 \sin \vartheta] \\ [p_3 p_1(1 - \cos \vartheta) - p_2 \sin \vartheta] & [p_3 p_2(1 - \cos \vartheta) + p_1 \sin \vartheta] & [p_3^2(1 - \cos \vartheta) + \cos \vartheta] \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

Для рассматриваемого в данной главе случая поворота на 180° матрица (2.15) сводится к следующему виду:

$$R = \begin{bmatrix} 2p_1^2 - 1 & 2p_1p_2 & 2p_1p_3 \\ 2p_2p_1 & 2p_2^2 - 1 & 2p_2p_3 \\ 2p_3p_1 & 2p_3p_2 & 2p_3^2 - 1 \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

или в тензорных обозначениях [13,24],

$$r_{ij} = 2p_i p_j - \delta_{ij} \quad (2.17)$$

В кристаллографическом применении она преобразует координаты точки (или индексы направления) в кубической системе.

Чтобы обобщить (2.17) для произвольной неортонормированной сингонии, скалярные умножения следует записать через взаимные (обратные), т.е. ковариантные и контравариантные компоненты вектора нормали к плоскости двойникования, в данном случае вектора с компонентами $p_1 p_2 p_3$. Учитывая правила скалярного умножения в неортонормированной координатной системе [23,24], в случае описания двойникования поворотом на 180° вокруг нормали к плоскости двойникования, с единичным вектором нормали - \mathbf{m} , где $m_i m^j = 1$ и $m^i = g^{ik} m_k$ из (2.17) имеем:

$$r_j^i = 2m^i m_j - \delta_j^i \quad (2.18)$$

Здесь g^{ij} - контравариантная компонента метрического тензора рассматриваемой кристаллической решетки; m_i - ковариантные а m^j контравариантные компоненты вектора \mathbf{m} . В данной книге везде суммирование подразумевается по повторяющему индексу.

Сразу же заметим, что матрица зеркального отражения из (2.18) получается дополнением операции инверсии, что в рассматриваемой тензорной записи соответствует умножению правой части (2.18) на -1.

$$D_j^i = \delta_j^i - 2m^i m_j \quad (2.19)$$

При использовании матриц (2.18) и (2.19) следует учесть, что они выведены для преобразования направлений, а не базисных векторов, как это было в предыдущих случаях матриц (2.4) – (2.7). Это означает, что они уже транспонированы по отношению к таковым для преобразования базиса, и это надо учесть при пользовании правилами применения матриц, приведенными в таблице 1. Следует также учитывать, что в случаях вращения и отражения обратная и оригинальная матрицы идентичны.

В развернутом виде матрицу отражения в плоскости с единичной нормалью \mathbf{m} , (2.19), можно представить в следующем виде:

$$D = \begin{bmatrix} 1 - 2m^1 m_1 & -2m^1 m_2 & -2m^1 m_3 \\ -2m^2 m_1 & 1 - 2m^2 m_2 & -2m^2 m_3 \\ -2m^3 m_1 & -2m^3 m_2 & 1 - 2m^3 m_3 \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

Напомним, что m_i и m^j -нормированные компоненты вектора нормали к плоскости двойникования. В математической кристаллографии они представляют собой контравариантные и ковариантные компоненты одного и того же вектора, в данном случае нормали к плоскости двойникования, \mathbf{m} .

Следовательно, если заданы индексы Миллера плоскости двойникования (hkl) , т.е. ковариантные компоненты нормали к (hkl) , находим его контравариантные компоненты, т.е. в терминах геометрической кристаллографии, индексы направления нормали в прямой решетке,

$$u = G^{-1} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}$$

или в тензорной записи, $u^i = g^{ij}h_j$. Затем вычисляется длина вектора \mathbf{m} и проводится нормирование, $m = \sqrt{g^{ij}m_i m_j}$ или $m = \sqrt{m^i m_i}$.

Учитывая, что в рассматриваемом случае m_i это h_i , а $m^i = u^i$, то длина вектора нормали в нашем случае равняется $m = \sqrt{u^i h_i}$.

Нормируя hkl , получим $m_i = h_i / m$. Далее вычисляем и контравариантные компоненты вектора \mathbf{m} , $m^i = g^{ij}m_j$, или $m^i = u^i / m$. Подставляя m^i и m_i в (2.20) получаем матрицу отражения (или поворота на 180° , см выше) для общего триклинного случая, с помощью которого можно вычислять численные значения матричных элементов, не прибегая к длинным формулам приведенным выше в секции А.

Приложения к главе 2

Как известно из теории матриц, матрица вращения имеет детерминант, равный единице, так как при вращении не меняется объем базисной ячейки координатной системы. Используем этот критерий для полученной выше матрицы S :

$$\det S = \det(U^{-1} \cdot T \cdot U)$$

По теореме об определителе произведений матриц имеем:

$$\det(U^{-1} \cdot T \cdot U) = \det U^{-1} \cdot \det T \cdot \det U$$

но $U^{-1} \cdot U = I$ (I - единичная матрица), следовательно $\det U^{-1} \cdot \det U = 1$ и поэтому,

$$\det S = \det T$$

где

$$\det T = \frac{1}{(u^2 a_1^2 + v^2 a_2^2 + w^2 a_3^2)^2} \times \det \begin{bmatrix} u^2 a_1^2 - v^2 a_2^2 - w^2 a_3^2 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 2uva_2^2 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 2uwa_3^2 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}.$$

Здесь матрица T является матрицей двойникования для общего ортогонального случая, т.е. для ромбической системы. Легко показать, что

$$\det \begin{bmatrix} u^2 a_1^2 - v^2 a_2^2 - w^2 a_3^2 & \dots & \dots & \dots \\ 2uva_2^2 & \dots & \dots & \dots \\ 2uwa_3^2 & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} = (u^2 a_1^2 + v^2 a_2^2 + w^2 a_3^2)^2$$

т.е. $\det T = \det S = 1$, что и хотели доказать.

В общем триклинном случае в качестве матрицы U предпочтительнее выбирать матрицу, связывающую исходную кристаллографическую координатную систему с некоторой ортонормированной системой:

$$U = \left\{ \begin{array}{ccc} \frac{a^* \varpi}{\sin \alpha \sin \beta} & 0 & -\frac{c^* \varpi}{\operatorname{tg} \beta \sin \gamma} \\ a^* \sin \gamma^* & b^* & c^* \cos \alpha^* \\ 0 & 0 & \frac{c^* \varpi}{\sin \gamma} \end{array} \right\},$$

$$U^{-1} = \left\{ \begin{array}{ccc} a \sin \beta & 0 & a \cos \beta \\ -b \sin \alpha \cos \gamma^* & \frac{b \varpi}{\sin \beta} & b \cos \alpha \\ 0 & 0 & c \end{array} \right\},$$

где $\varpi = \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$,

и кристаллографические параметры принадлежат к исходной неортонормированной системе [24]. В таком случае в качестве матрицы T следует подставить матрицу двойникования для ортонормированной системы, т.е. для кубической (2.7).

Пример к главе 2

В качестве примера использования матрицы S для расчета ожидаемых дифракционных картин от кристаллов неортогональной сингонии рассмотрим конкретный вариант двойникования гексагональной кристаллической решетки Ti с соотношением осей $c/a=1,58$. Возможная плоскость двойникования в гексагональной решетке (10.1). Задача: построить схемы ожидаемых дифракционных картин.

Чтобы решить эту задачу, нужно вычислить матрицу S . Для этого необходимо выбрать новый ортогональный базис и составить матрицу для перехода с гексагонального базиса на ортогональный [27,28]. Обычно для гексагональных кристаллов с любым $\frac{c}{a}$ выбирают так называемый ортогексагональный базис (рис.3) со следующим соотношением с гексагональным базисом: $a_1^0 = a_1^G - a_2^G + 0$, $a_2^0 = a_1^G + a_2^G + 0$ и $a_3^0 = 0 + 0 + a_3^G$ или в матричной записи:

$$\begin{bmatrix} a_1^0 \\ a_2^0 \\ a_3^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1^G \\ a_2^G \\ a_3^G \end{bmatrix} \quad \text{где} \quad \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \equiv U$$

Для обратного перехода, U^{-1} равняется

$$\begin{bmatrix} 0,5 & 0,5 & 0 \\ -0,5 & 0,5 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Далее вычислим матрицу T в этой новой ортогональной системе. Предварительно вычислим индексы плоскости двойникования в выбранной ортогональной системе с помощью матрицы \tilde{U}^{-1} (см. Таблицу 1):

$$\tilde{U}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}_\Gamma = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}_0.$$

В ортогональных координатах плоскость двойникования $(10.1)_\Gamma$ имеет индексы $(111)_0$.

Индексы нормали к этой плоскости в новой ортогональной системе - u, v, w , вычисляем по формулам (2.5), где $a_1^0 = a_1 \sqrt{3}$; $a_2^0 = a_2^F$; $a_3^0 = a_3^F$. Получим $[uvw] \rightarrow [1 \ 3 \ 1,2]$ или $[5 \ 15 \ 6]$. Подставляя эти значения uvw в (2.4) вычисляем элементы T_{ij} ,

$$T = \begin{bmatrix} -0,6152 & 1,1543 & 0,4617 \\ 0,3848 & 0,1543 & 0,4617 \\ 0,3842 & 0,1526 & -0,5390 \end{bmatrix},$$

а для матрицы S получим следующее значение:

$$S \equiv U^{-1} \cdot T \cdot U = \begin{bmatrix} 0,54 & 0,77 & 0,46 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1,54 & 0,77 & -0,54 \end{bmatrix}$$

Для расчета совпадающих кристаллографических направлений исходного кристалла и двойника используем равенство (2.13), в правую часть которого вместо $\langle uvw \rangle_D$ подставляем индексы желаемых для построения осей зон, и получаем индексы параллельных зон в исходной части кристалла - $\langle uvw \rangle_M$. Затем для отыскания совпадающих направлений в обратной решетке пользуемся равенством (2.14). Следовательно, получим, что вдоль электронного пучка можно вывести одновременно, например, оси зон $[0 \ \bar{1} \ 0]_M$ и $[0 \ 1 \ 0]_D$, таким образом, что $[1 \ 0 \ 1]_M \parallel [1 \ 0 \ 1]_D$, как это получается из равенства (2.14). Построив плоские сечения обратной решетки $(0\bar{1}0)^*$ и $(010)^*$, и наложив друг на друга с общим нулевым узлом так, что $[1 \ 0 \ 1]_M \parallel [1 \ 0 \ 1]_D$, получим схему ожидаемой дифракционной картины от двойника в рассматриваемом кристалле. Результат такого построения для α -Ti при $\frac{c}{a} = 1,58$ приведен на схеме № 39 (см. атлас).

ГЛАВА 3

ПОСТРОЕНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ДИФРАКЦИОННЫХ КАРТИН И СТЕРЕОГРАФИЧЕСКИХ ПРОЕКЦИЙ ДЛЯ АНАЛИЗА ДВУХФАЗНЫХ И ДВОЙНИКОВЫХ КРИСТАЛЛОВ

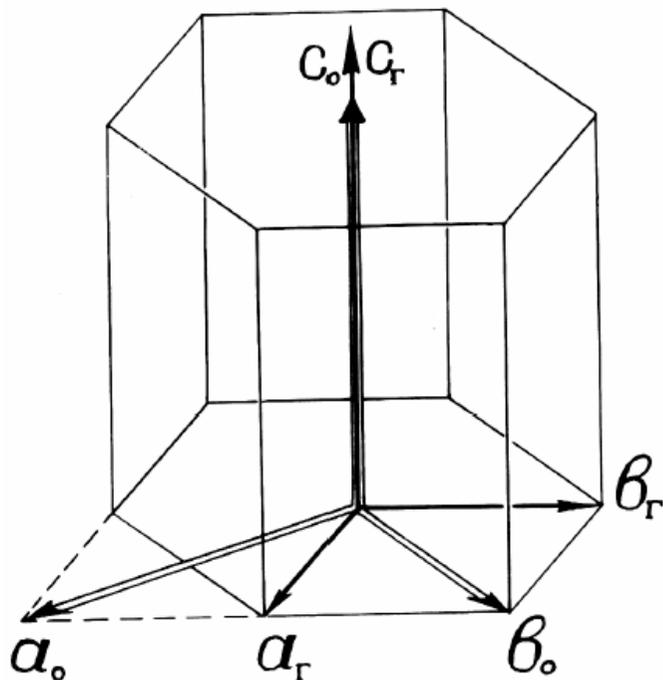


Рис.3. Модель, демонстрирующая связь гексагонального базиса с ортогональным. Ортогональный базис выделен двойными линиями.

На схеме №39 (см. атлас), приведена рассчитанная на компьютере по вышеизложенному алгоритму дифракционная картина от двойника в гексагональной решетке. Плоскость двойникового (101). Ось зоны $[0 \bar{1} 0]_M \parallel [0 1 0]_D$.

Материал данной главы, в отличие от предыдущих, изложен в виде последовательности операций – алгоритма для расчета и графического построения схем электронограмм от двухфазных и двойниковых кристаллов.

Схемы дифракционных картин, генерированные на компьютере и представленные в атласе, авторы старались создать такими алгоритмами, которые содержали бы по возможности минимум операций, но были бы достаточными для построения схем, годных для анализа составных электронограмм.

С этой целью были сделаны два допущения, которые не уменьшают объем информации на схемах. Первое – сфера Эвальда заменена плоскостью, и второе – интенсивность всех дозволенных рефлексов одинакова.

Ниже изложены основные этапы процедуры, в которых, естественно, все интуитивные и «ручные» операции выражены логически и аналитически, и будут полезны для тех, кто собирается самостоятельно создать подобный комплекс программ.

3.1. Составные дифракционные картины

Входными данными для программы построения схем электронограмм от двухфазных кристаллов являются параметры кристаллической решетки, координаты атомов в элементарной ячейке, атомные факторы рассеяния, ориентационное соотношение (в виде совпадающих направлений и плоскостей), максимальное значение индексов h, k, l , постоянная прибора λL и индексы оси зоны матричной фазы (M).

Решение задачи – вычисление индексов оси зоны второй фазы (B), совпадающей с первой (матричной), и генерирование совместной электронограммы.

Для решения этой задачи, как и в предыдущих параграфах в которых рассматривались двойниковые кристаллы, удобно получить связь между векторами прямой и обратной решеток обеих фаз в матричном виде, т.е. связать базисы первой и второй фазы a_1, a_2, a_3 и A_1, A_2, A_3 . Это требует обобщения преобразований для самого общего – триклинного случая, т.е. для косоугольной декартовой координатной системы с разными единицами масштаба на осях. Указанное обобщение в данной задаче, в частности касается векторного произведения и использования метрического тензора [16,22,24]. (см. приложение к главе 3). Рассмотрим последовательность преобразований, приводящих к искомому матричному равенству.

Исходя из заданного ориентационного соотношения в виде совпадающих направлений и плоскостей, $[uvw]_M \parallel [uvw]_B$ и $(hkl)_M \parallel (hkl)_B$, находятся векторы, перпендикулярные плоскостям $(hkl)_M$ и $(hkl)_B$,

$$U_2 = G_M^1 \cdot \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_M, \quad U_2' = G_B^{-1} \cdot \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_B, \quad (3.1)$$

где G_M и G_B - метрические тензоры кристаллических решеток первой и второй фазы.

Если обозначим $[uvw]_M \equiv U_1$ и $[uvw]_B \equiv U_1'$ и вычислим продукты следующих векторных произведений,

$$U_3 = G_M^{-1} \cdot (U_1 \times U_2) \quad \text{и} \quad U_3' = G_B^{-1} \cdot (U_1' \times U_2')$$

где знак умножения “ \times ” означает векторное умножение по принятой схеме в ортонормированной системе (см. приложение к гл.3),

$$\text{то } U_3 \parallel U_3', \quad \text{так как } U_1 \parallel U_1' \quad \text{и} \quad U_2 \parallel U_2'. \quad (3.2)$$

Полученные векторы U_1, U_2, U_3 и U_1', U_2', U_3' являются некоторыми векторами (направлениями) прямой решетки матричной (первой) и выделенной (второй) фазы соответственно.

Т.к. векторы U_1, U_2, U_3 и U_1', U_2', U_3' попарно параллельны, это значит, что,

$$\begin{aligned} U_1 &= M \cdot U_1' & u_1 a_1 + v_1 a_2 + w_1 a_3 &= M \cdot (u_1' A_1 + v_1' A_2 + w_1' A_3) \\ U_2 &= N \cdot U_2' & \text{или } u_2 a_1 + v_2 a_2 + w_2 a_3 &= N \cdot (u_2' A_1 + v_2' A_2 + w_2' A_3) \\ U_3 &= P \cdot U_3' & u_3 a_1 + v_3 a_2 + w_3 a_3 &= P \cdot (u_3' A_1 + v_3' A_2 + w_3' A_3) \end{aligned} \quad (3.3)$$

где M, N, P - нормирующие множители, равные отношениям длин параллельных векторов, а u_i, v_i, w_i и u'_i, v'_i, w'_i - компоненты векторов U_i и U'_i соответственно.

$$\text{Так} \quad M = \frac{|U_1|}{|U'_1|}; \quad N = \frac{|U_2|}{|U'_2|}; \quad P = \frac{|U_3|}{|U'_3|}.$$

В матричном виде выражение (3.3) примет следующий вид:

$$U \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = U' \cdot \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

где U - матрица из компонентов векторов U_1, U_2, U_3 , а U' - из компонент векторов U'_1, U'_2, U'_3 с множителями M, N, P , соответственно.

Из (3.4) получаем искомое равенство,

$$a = U^{-1} \cdot U' \cdot A \quad \text{или} \quad (U')^{-1} \cdot U \cdot a = A$$

Где a - базис a_1, a_2, a_3 , а A - базис A_1, A_2, A_3 . В сокращенном виде $T \cdot a = A$, где $T \equiv (U')^{-1} \cdot U$ - матрица ориентационного соотношения, которая составлена из компонентов векторов (3.2). U_1 и U'_1 - это совпадающие направления первой и второй фазы $[uvw]_M$ и $[uvw]_B$; U_2 и U'_2 нормали к совпадающим плоскостям этих фаз $(hkl)_M$ и $(hkl)_B$, а U_3 и U'_3 - это векторы,

перпендикулярные двум предыдущим, и составляют правую систему.

Матрица T - связывающая базисы матричной и второй фазы, дает возможность найти направление второй фазы $[uvw]_B$, совпадающее с некоторым заданным направлением матричной фазы $[uvw]_M$ (см. Таблицу 1, гл.1).

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_B = \tilde{T}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_M \quad (3.5)$$

Следует отметить, что в равенстве (3.5) направление $[uvw]_B$ может получиться в общем случае нерациональным, что потребует нахождения ближайшего рационального направления второй фазы, расходящегося с $[uvw]_B$ не более чем на $3-4^\circ$. Это значение установлено эмпирически и обусловлено конечными размерами узлов обратной решетки [20]. При размытии узлов этот угол может быть и больше. Такое отклонение от $[uvw]_B$ на опыте соответствует наклону гониометра – сечению обратной решетки не одной плоскостью, а серией плоскостей, находящихся в данном интервале разориентации.

Программа генерирует все возможные комбинации h, k, l , где $\max h, k, l \leq N$ - значение которого задается. Далее сформированный массив «фильтруется», проходя через следующие ограничения: $h^2 + k^2 + l^2 \leq D$ - значение D задается или рассчитывается в зависимости от размеров схемы. Условие зональности $uh + vk + wl = 0$ и условие погасания $|F_{hkl}|^2 = \varepsilon$ (где ε - некоторое малое число, подобранное эмпирически,

исходя из точности расчетов тригонометрических функций в $|F_{hkl}|^2$, задаются отдельно для первой и второй фаз.

Полученный набор (hkl) представляет собой координаты узлов обратной решетки. $(hkl)_M$ и $(hkl)_B$, находятся в одной плоскости, перпендикулярной к заданной оси зоны матричной фазы $[UVW]_M \parallel [UVW]_B$.

Набор (h, k, l) , соответствующий рефлексам второй фазы, далее выражаем (переводим) в матричную координатную систему (первой фазы).

$$T^{-1} \cdot \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_B = \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}_{BM}$$

где $(hkl)_{BM}$ - координаты узлов обратной решетки второй фазы относительно обратной решетки матричной (первой) фазы. Таким образом, координаты как первой, так и второй фазы выражены в одной – матричной обратной координатной системе. Это позволяет найти координаты всех узлов О.Р. первой и второй фаз относительно одной двумерной ортогональной координатной системы, находящейся в плоскости электронограммы. В этой плоскости в качестве оси X , определенным алгоритмом, выбирается одна из триад в наборе $(hkl)_M$, а направление Y - находится векторным умножением заданного направления оси зоны матричной фазы - $[UVW]_M$ на X . Так как координаты направления $[UVW]_M$ выражены в прямой решетке, ее предварительно надо выразить в обратной координатной системе,

$$G_M \cdot \begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix}_M = U_M^*,$$

где U_M^* - это координаты направления $[uvw]_M$ в обратной решетке (см. 4 в приложении к гл.3).

$$Y = G_M \cdot \{U_M^* \times X\}$$

где знак \times - векторное умножение по принятой схеме для ортонормированной координатной системы (см. (1) в приложении к главе 3).

Следовательно, X, Y и U_M^* создают правую систему координат. Далее вычисляются ортогональные проекции всех $(hkl)_M$ и $(hkl)_{BM}$ на осях X и Y . По полученным данным на мониторе выдается схема дифракционной картины, которая по команде пользователя печатается в желаемом масштабе.

Программа содержит 10 подпрограмм, которые, соответственно, осуществляют генерирование массива h, k, l , вычисление элементов матрицы ориентационного соотношения, нахождение рационального направления; расчет углов между направлениями, определение оптимального масштаба на схеме электронограммы, создание графического объекта, вывод графического объекта на печатающее устройство.

В случае двойниковых кристаллов алгоритм построения дифракционных картин отличается от такового для двухфазных только подпрограммой расчета матрицы двойникового соотношения.

3.2. Гномостереографические проекции

Расчет и вычисление гномостереографических проекций двухфазных кристаллов проводится программой, которая содержит часть подпрограмм из предыдущих и специальную для выбора h, k, l , не содержащих общего делителя.

Задаются параметры решеток первой и второй фаз, ориентационное соотношение, максимальное значение h, k, l и направление, выводимое в центре проекции $[UVW]_M$ (или индексы Миллера плоскости проектирования). Задан стандартный радиус сферы, 10см. Координаты гномостереографических проекций, x, y вычисляются по формулам:

$$x = \frac{R \cdot \cos \alpha}{1 + \cos \gamma}; \quad y = \frac{R \cdot \cos \beta}{1 + \cos \gamma} \quad (3.8)$$

где R - радиус сферы, α, β, γ - углы между полюсом $[UVW]_M$ и осями X, Y, Z где $Z \perp X \perp Y$. Оси X и Y находятся в плоскости проекции, а Z совпадает с заданным направлением в центре проекции $[UVW]_M$.

Для созданного множества всевозможных (h, k, l) , не содержащих общего делителя, вычисляются координаты нормалей к этим плоскостям - $[uvw]$ (см. приложение к гл.3). Для выбора оси X , лежащей в плоскости стереографической проекции (в плоскости чертежа), из множества $[uvw]$ выбираются те, которые составляют 90° с заданным направлением полюса - $[UVW]_M$. Затем из них, в качестве оси X , определенным алгоритмом выбирается некоторое

направление с малыми индексами. Направление Y вычисляется векторным умножением $[UVW]_M$ на X .

Из множества $[uvw]$ выбираются те $[uvw]_M$, которые составляют с $[UVW]_M$ угол $\leq 90^\circ$, т.е. направления, выходящие в верхнюю часть сферы проекции. Формулы (3.8) дают координаты гномостереографических проекций на плоскости проекции в ортогональной системе координат XOY , где O совпадает с полюсом проекции.

Такие же операции проводятся и с направлениями второй фазы $[uvw]_B$, для которых направление, выводимое в центре проекции $[UVW]_B$ и совпадающее с $[UVW]_M$ первой фазы, находится с помощью матрицы ориентационного соотношения:

$$\tilde{T}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix}_M = \begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix}_B$$

(см. формулу 3.5 и таблицу 1 в гл. 1).

Из множества $[uvw]$ выбираются такие направления $[uvw]_B$, которые так же составляют угол $\leq 90^\circ$ к $[UVW]_B$.

Полученный набор $[uvw]_B$ далее выражается в координатах первой фазы (матричной фазы),

$$\tilde{T} \cdot \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_B = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_{B-M}$$

Следовательно, все направления первой фазы – множество $[uvw]_M$ и второй – множество $[uvw]_{B-M}$, выражены в координатах осей первой (M) фазы, и их координаты (x, y) на плоскости проекции вычисляются для обоих множеств по формулам (3.8) одновременно. Полученные данные выводятся на печатающее устройство в позициях (x, y) .

Располагая 20-25 индцированными схемами дифракционных картин и несколькими стереографическими проекциями, построенными для исследуемого объекта, задача расшифровки и анализа электронограмм от двухфазных и двойниковых кристаллов сводится к сравнению – сопоставлению схем с экспериментальными электронограммами, с учетом соответствующих стереографических проекций.

Конкретные примеры рассчитанных на компьютере схем дифракционных картин и стереографических проекций приведены в атласе в конце книги.

Приложение к главе 3

В задачах кристаллографии часто применяется формула векторного произведения. В ортонормированной координатной системе, например, в координатной системе кубической кристаллической решетки, где модули реперов $|a_1| = |a_2| = |a_3|$ и углы между ними $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, т.е. для системы с метрическим тензором, равным единичной матрице [20, 24], векторное умножение осуществляется по следующей схеме:

$$H_1(u_1v_1w_1) \times H_2(u_2v_2w_2) \Rightarrow \begin{array}{c|ccc|ccc} u_1 & v_1 & w_1 & u_1 & v_1 & w_1 \\ \hline u_2 & v_2 & w_2 & u_2 & v_2 & w_2 \end{array} \Rightarrow \\ \Rightarrow (v_1w_2 - w_1v_2), (w_1u_2 - u_1w_2), (u_1v_2 - v_1u_2) \quad (1)$$

Полученные в скобках значения являются координатами продукта векторного произведения в той же системе координат.

Однако, в косоугольных координатных системах и с разными масштабами на осях, т.е. для неортонормированных систем, следует обобщить схему (1).

Здесь речь идет об одном существенном свойстве векторного произведения, которое следует учитывать в неортонормированных координатных системах, т.е. в кристаллографической терминологии, в тетрагональной, ромбической, гексагональной ромбоэдрической, в моноклинной и триклинной системах.

А именно, если даны контравариантные координаты двух векторов H_1 и H_2 в аффинных координатах, то координаты

продукта векторного умножения последних, в общем виде, определяются следующей известной формулой:

$$H_3 = H_1 \times H_2 = (v_1 w_2 - w_1 v_2) \cdot (a_2 \times a_3) + (w_1 u_2 - u_1 w_2) \cdot (a_3 \times a_1) + (u_1 v_2 - v_1 u_2) \cdot (a_3 \times a_1) \quad (2)$$

где u_1, v_1, w_1 и u_2, v_2, w_2 - контравариантные координаты векторов H_1 и H_2 соответственно, а a_1, a_2, a_3 - базисные векторы неортонормированной системы координат.

Нетрудно увидеть, что продукт умножения (вектор H_3) выражен не в том же базисе - a_1, a_2, a_3 , а в базисе взаимных (обратных), по отношению к последним, векторов a_1^*, a_2^*, a_3^* . Действительно, так как $(a_1 \times a_2) = a_3^* \cdot \omega$; $(a_3 \times a_1) = a_2^* \cdot \omega$; $(a_2 \times a_3) = a_1^* \cdot \omega$ где $\omega \equiv a_1 \cdot (a_2 \times a_3)$ следовательно, продукт векторного умножения в координатах можно выразить следующим образом:

$$H_3 = \omega \cdot \left\{ (v_1 w_2 - w_1 v_2) \cdot a_1^* + (w_1 u_2 - u_1 w_2) \cdot a_2^* + (u_1 v_2 - v_1 u_2) \cdot a_3^* \right\} \quad (3)$$

Т.е. продукт векторного умножения H_3 получается выраженным в обратном базисе, где

$$\begin{aligned} \omega(v_1 w_2 - w_1 v_2) &\equiv u_3^* \\ \omega(w_1 u_2 - u_1 w_2) &\equiv v_3^* \\ \omega(u_1 v_2 - v_1 u_2) &\equiv w_3^* \end{aligned}$$

являются контравариантными координатами продукта H_3 в обратной координатной системе.

Это, естественно, затрудняет кристаллографические расчеты (в некубических системах), требующие знания координат продукта векторного умножения в том же базисе, в котором были выражены H_1 и H_2 .

Следовательно, возникает необходимость перевода координат из обратной координатной системы в прямую. Эту задачу можно решить следующим образом.

Известно, что, если имеется вектор $H(u, v, w)$, то его можно выразить как в прямом базисе, так и в обратном

$$H = u a_1 + v a_2 + w a_3 \quad \text{и} \quad H = u^* a_1^* + v^* a_2^* + w^* a_3^*,$$

где u^*, v^*, w^* - контравариантные координаты вектора в обратной координатной системе. Учитывая определение и свойства векторов a_1^*, a_2^*, a_3^* , получаем следующие линейные комбинации:

$$\begin{aligned} u &= (a_1^*)^2 \cdot u^* + (a_1^* \cdot a_2^*) v^* + (a_1^* \cdot a_3^*) \cdot w^* \\ v &= (a_2^* \cdot a_1^*) \cdot u^* + (a_2^*)^2 v^* + (a_2^* \cdot a_3^*) \cdot w^* \\ w &= (a_3^* \cdot a_1^*) \cdot u^* + (a_3^* \cdot a_2^*) v^* + (a_3^*)^2 \cdot w^* \end{aligned}$$

Или в матричном виде:

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = G^{-1} \cdot \begin{bmatrix} u^* \\ v^* \\ w^* \end{bmatrix} \quad (4)$$

В рассматриваемом случае координатами вектора H_3 в обратной координатной системе являются u_3^*, v_3^*, w_3^* . Переводя их в прямую координатную систему, получим,

$$\begin{bmatrix} u_3 \\ v_3 \\ w_3 \end{bmatrix} = G^{-1} \cdot \begin{bmatrix} u_3^* \\ v_3^* \\ w_3^* \end{bmatrix}, \quad (5)$$

где G - метрический тензор. Следовательно, координаты вектора $H_3 = H_1 \times H_2$ уже выражены в исходной - прямой координатной системе - u_3, v_3, w_3 . Обобщая выражения (2) и (4), получим:

$$\begin{aligned} u_3 &= \omega \cdot \left\{ (a_1^*)^2 (v_1 w_2 - w_1 v_2) + (a_1^* \cdot a_2^*) (w_1 u_2 - u_1 w_2) + \right. \\ &\quad \left. + (a_1^* \cdot a_3^*) (u_1 v_2 - v_1 u_2) \right\} \\ v_3 &= \omega \cdot \left\{ (a_2^* \cdot a_1^*) (v_1 w_2 - w_1 v_2) + (a_2^*)^2 (w_1 u_2 - u_1 w_2) + \right. \\ &\quad \left. + (a_2^* \cdot a_3^*) (u_1 v_2 - v_1 u_2) \right\} \\ w_3 &= \omega \cdot \left\{ (a_3^* \cdot a_1^*)^2 (v_1 w_2 - w_1 v_2) + (a_3^* \cdot a_2^*) (w_1 u_2 - u_1 w_2) + \right. \\ &\quad \left. + (a_3^*)^2 (u_1 v_2 - v_1 u_2) \right\} \end{aligned} \quad (6)$$

Полученные формулы дают контравариантные координаты продукта векторного произведения в исходной обобщенной, косоугольной, декартовой (неортонормированной) системе координат. В частном случае ортонормированной системы члены, содержащие произведения разноименных базисных векторов, обращаются в нули, а члены $(a_1^*)^2 = (a_2^*)^2 = (a_3^*)^2 = 1$.

Следовательно, получим известные формулы координат продукта векторного произведения для кубической системы:

$$u_3 = (v_1 w_2 - w_1 v_2); \quad v_3 = (w_1 u_2 - u_1 w_2); \quad w_3 = (u_1 v_2 - v_1 u_2) \quad (7)$$

Учитывая известную симметрию в зависимостях между базисными векторами прямой и обратной координатных систем, легко получить формулы векторного произведения для обратной координатной системы, заменяя в (5) и (6) uvw на h,k,l ; a_1^*, a_2^*, a_3^* на a_1, a_2, a_3 и ω на ω^* .

В формулах (6) и (7) следует учесть, что, исходя из определения индексов направлений как в прямой, так и в обратной решетке, формулами (6) в кристаллографии можно пользоваться без постоянного множителя ω .

Отметим еще одно применение матричного тензора - используемое в изложенных выше процедурах вычисления - нахождение нормали к плоскости.

В терминах кристаллографии, если задана плоскость в прямой решетке, т.е. ее миллеровские индексы h,k,l , то контравариантные координаты нормали к этой плоскости в обратной решетке имеют те же численные значения. Как показано выше, координаты вектора можно выразить метрическим тензором во взаимном, т.е. в обратном базисе (см. формулу 4). Следовательно, если выразим контравариантные координаты нормали к плоскости h,k,l , в обратной решетке, в обратном ему базисе, т.е. в прямой решетке,

$$G^{-1} \cdot \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix},$$

то результат - uvw , есть контравариантные координаты нормали к плоскости h,k,l в прямой же решетке. Значения элементов метрического тензора для общего триклинного случая дана ниже,

$$G = \begin{bmatrix} a_1^2 & a_1 \cdot a_2 \cos \gamma & a_1 \cdot a_3 \cos \beta \\ a_2 \cdot a_1 \cos \gamma & a_2^2 & a_2 \cdot a_3 \cos \alpha \\ a_3 \cdot a_1 \cos \beta & a_3 \cdot a_2 \cos \alpha & a_3^2 \end{bmatrix}.$$

$$G^{-1} = \begin{bmatrix} a_1^{*2} & a_1^* a_2^* \cos \gamma^* & a_1^* a_3^* \cos \beta^* \\ a_2^* a_1^* \cos \gamma^* & a_2^{*2} & a_2^* a_3^* \cos \alpha^* \\ a_3^* a_1^* \cos \beta^* & a_3^* a_2^* \cos \alpha^* & a_3^{*2} \end{bmatrix}.$$

АТЛАС

Схемы электронно-дифракционных картин и стереографических проекций для двойниковых и двухфазных кристаллов

Назначением атласа является не только демонстрация возможностей методов и алгоритмов, развитых авторами в разделах 1-3 с приложениями, но и оказание помощи пользующимся электронно-дифракционными методами исследования тонкой структуры кристаллических материалов. В атласе приведены примеры относительно часто встречающихся в материаловедении случаев двойникования и ориентационных соотношений между фазами. Так, например, в кубических кристаллах с ОЦК решеткой это двойникование по плоскости $(1\ 1\ 2)$, для ГЦК - $(1\ 1\ 1)$. Тетрагональные кристаллы представлены двумя случаями с $c/a > 1$ и $c/a < 1$. В гексагональной системе рассмотрены случаи с $c/a=1,63; 1,58; 2,56; 2,722$ и $0,96$. Случаи со сходными дифракционными картинками, обусловленные одинаковой симметрией и плоскостью двойникования, опущены. Например, при $c/a=1,632$ для Со и плоскости двойникования $(1\ 0\ 2)$ получаются такие же картины, что и для Mg с $c/a=1,623$, при той же плоскости двойникования. Некоторые случаи для Zr, с $c/a=1,59$, сходны с таковыми для Mg и т.д. Приведены случаи ромбоэдрической решетки на примере $\beta-B$, и моноклинной на примере ZrO_2 . Значения индексов плоскостей двойникования взяты из оригинальных работ [23,32,33], монографии [31] и минералогической базы данных [41]. Схемы для двухфазных кристаллов с ориентационным соотношением между фазами, приведены для конкретных вариантов соотношения: по одному

для каждого случая. Ориентационные соотношения предполагаются точными, т.е. соответствующие дифракционные картины построены для абсолютно точной параллельности указанных плоскостей и направлений в ориентационном соотношении. Однако можно задавать любые, уточненные, значения. (см. например схемы 128 и 129, соответствующие о.с. Питча между ферритом и цементитом [3], стр. 229). Погасания на схемах дифракционных картин соответствуют структуре материала, использованного нами в качестве примера. Однако, в некоторых случаях, из-за двойной дифракции на экспериментальных электронограммах появляются запрещенные рефлексы и заполняются недопозволенные кинематическим приближением позиции обратной решетки, вплоть до появления целого ряда рефлексов. Следовательно, авторы сочли предпочтительным показать на схемах все возможные отражения, т.е. вводились координаты атомов, соответствующие примитивной решетке чтобы «зажечь» все рефлексы. Например, для цементита Fe_3C (Pbnm) закон погасания, следующий из структуры определенной Липсоном [34], экспериментально не наблюдается, за исключением случая отражения типа $0kl$, которые гаснут при $k=2n+1$, и только при условии, когда первичный пучок параллелен направлению $[\bar{1} \ 0 \ 0]$. Это, как известно [29,35-37], обусловлено динамическими эффектами, и подобные случаи появления запрещенных отражений могут иметь место и по другим причинам, например, из-за дефектов кристалла и определенной ориентации винтовой оси второго порядка и плоскости симметрий скользящего отражения [38]. Основные кристаллографические данные, наряду с оригинальными работами, взяты из монографий [23,30,31,39,40] и из минералогической базы данных [41]. Атлас схем, как всякая схема и подобие действительности, имеет, конечно, свои

недостатки. Первый и самый главный из них состоит в том, что в нем даны теоретические дифракционные картины, а не реальные.

- Ориентационные соотношения считаются точными, хотя в действительности разброс составляет $1-2,5^\circ$.
- Интенсивность всех допозволенных рефлексов на схемах одинакова.
- Сфера Эвальда заменена плоскостью.

Ниже приведен список схем рассмотренных примеров, в котором указаны: параметры кристаллической решетки $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$, матрица двойникового соотношения или матрица ориентационного соотношения - T , метрический тензор для примитивных решеток Бравэ - G (для двухфазных материалов, G_1 и G_2), Список совпадающих направлений (осей зон основной-матричной и двойниковой частей кристалла) одновременно выводимых вдоль первичного пучка электронов, $[UVW]_M$ и $[UVW]_D$ (а в случае двухфазных кристаллов - $[UVW]_M$ и $[UVW]_B$), направление следа плоскости двойникового. В списке приведены только некоторые направления осей зон второй (или двойниковой) фазы, находящиеся в пределах 4° от матричной зоны. Программа, естественно, предлагает все рациональные направления, находящиеся в указанном угловом интервале, и пользователь может выбрать различные варианты близлежащих зон, моделируя тем самым наклон образца относительно первичного электронного пучка. Приведены также номера соответствующих гномостереографических проекций в атласе. Программа также генерирует: а) стереографические проекции направлений, где в качестве полюса служит некоторое заданное кристаллографическое направление, и указывается в центре стереопроекции, б) гномостереографические проекции

плоскостей (стереографические проекции нормалей к плоскостям), в которых можно задать как полюс, так и плоскость проекций, вычисленная нормаль к которой далее служит полюсом (в центре стереопроекции, в этом случае, указаны индексы плоскости проекции). Нормали к плоскостям двойникования выделены скобками, в которых указаны индексы Миллера плоскости двойникования. На стереопроекции также указаны индексы направления следа плоскости двойникования в прямой и обратной решетке.

На схемах дифракционных картин приведены параметры кристаллической решетки обеих фаз (в ангстремах и градусах); химическая формула или символ вещества, ось зоны матричной фазы - $[UVW]_1$, ось зоны второй фазы - $[UVW]_2$, ориентационное соотношение, заданное в следующем формате: $[UVW]_1 \parallel [UVW]_2$, $(hkl)_1 \parallel (hkl)_2$, для двойников - плоскость двойникования - $(hkl)_D$, точные и округленные значения индексов направления следа плоскости двойникования в обратной координатной системе матричной фазы, масштаб электронограммы - λL , угол между осью зоны второй фазы (в общем случае нерациональной, но точно совпадающей с осью зоны первой) и реально вычерченной на схеме ближайшей рациональной зоны - φ .

Для двойниковых кристаллов на схемах дифракционных картин нанесены также направления следа плоскости двойникования в виде тонкой черточки, с целью совмещения изображения с дифракционной картиной. Численные значения индексов направлений следов, как в прямой, так и в обратной решетке, в общем случае нерациональных, приведены в округленном виде, с разной степенью точности округления на схемах и в списке. В случаях когда ось зоны матрицы перпендикулярна к плоскости двойникования, индексы следа даны на схеме в виде $[000]^*$.

СПИСОК СОВПАДАЮЩИХ НАПРАВЛЕНИЙ И ОСНОВНЫХ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ СООТВЕТСТВУЮЩИХ СХЕМАМ ДИФРАКЦИОННЫХ КАРТИН ОТ ДВОЙНИКОВЫХ КРИСТАЛЛОВ

$$\tilde{T} \cdot \begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix}_M = \begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix}_D$$

ОБЪЕМНО-ЦЕНТРИРОВАННАЯ КУБИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА

$\alpha Fe; a = 2,866$

Плоскость двойникования - (112)

$$T = \begin{pmatrix} -0,6666 & 0,3333 & 0,6666 \\ 0,3333 & -0,6666 & 0,6666 \\ 0,6666 & 0,6666 & 0,3333 \end{pmatrix}$$

Направление оси зоны матричной части кристалла $[UVW]_M$	Направление оси зоны двойника $[UVW]_D$	Направление следа плоскости двойникования $[UVW]_{cl}^*$	Номер схемы	Номер стереопроекции
1	2	3	4	5
001	221	$\bar{1}10$		
110	$\bar{1}\bar{1}4$	$\bar{1}10$		
111	115	$1\bar{1}0$		
120	$0\bar{1}2$	$4\bar{2}\bar{1}$		
130	$1\bar{5}8$	$3\bar{1}\bar{1}$	1	
150	$1\bar{3}4$	$5\bar{1}\bar{2}$	2	

112	112	000		98
113	223	$\bar{1}10$		
113	557	$\bar{1}10$		
123	213	$11\bar{1}$		
134	314	$11\bar{1}$		
135	425	$13\bar{2}$		
137	212	$\bar{1}5\bar{2}$	3	
137	535	$\bar{1}5\bar{2}$		
137	747	$\bar{1}5\bar{2}$		
137	323	$\bar{1}5\bar{2}$		
139	645	$\bar{3}7\bar{2}$		
139	434	$\bar{3}7\bar{2}$		
157	728	$35\bar{4}$		
157	10 3 11	$35\bar{4}$		

Плоскость двойникования – (121)

$$T = \begin{pmatrix} -0,6666 & 0,6666 & 0,3333 \\ 0,6666 & 0,3333 & 0,6666 \\ 0,3333 & 0,6666 & -0,6666 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
110	011	$1\bar{1}1$		
120	245	$2\bar{1}0$		
113	$13\bar{1}$	$\bar{5}21$	4	
111	151	$\bar{1}01$		
123	$510\bar{1}$	$\bar{2}10$		
115	$25\bar{3}$	$\bar{9}41$		
115	$38\bar{4}$	$\bar{9}41$	5	

Плоскость двойникования – (211)

$$T = \begin{pmatrix} 0,3333 & 0,6666 & 0,6666 \\ 0,6666 & -0,6666 & 0,3333 \\ 0,6666 & 0,3333 & -0,6666 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
113	$31\bar{1}$	$\bar{2}5\bar{1}$	6	
123	$111\bar{2}$	$\bar{1}5\bar{3}$		
130	$7\bar{4}5$	$3\bar{1}\bar{5}$		

Плоскость двойникования – (11 $\bar{2}$)

$$T = \begin{pmatrix} -0,6666 & 0,3333 & -0,6666 \\ 0,3333 & -0,6666 & -0,6666 \\ -0,6666 & -0,6666 & 0,3333 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
113	$\bar{7}\bar{7}\bar{1}$	$\bar{1}10$	7	
111	$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$	$\bar{1}10$		

Плоскость двойникования – ($\bar{1}12$)

$$T = \begin{pmatrix} -0,6666 & -0,3333 & -0,6666 \\ -0,3333 & -0,6666 & 0,6666 \\ -0,6666 & 0,6666 & 0,3333 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
311	$\bar{3}\bar{1}\bar{1}$	$1\bar{7}4$	8	

ГРАНЕЦЕНТРИРОВАННАЯ КУБИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА

γFe ; $a = 3,585$

Плоскость двойникования – (111)

$$T = \begin{pmatrix} -0,3333 & 0,6666 & 0,6666 \\ 0,6666 & -0,3333 & 0,6666 \\ 0,6666 & 0,6666 & -0,3333 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
001	$2\bar{2}\bar{1}$	$\bar{1}10$		
110	114	$1\bar{1}0$		
$11\bar{1}$	$\bar{1}\bar{1}5$	$1\bar{1}0$		
120	102	$2\bar{1}\bar{1}$		
130	$5\bar{1}8$	$3\bar{1}\bar{2}$		
150	$3\bar{1}4$	$5\bar{1}\bar{4}$	9	
112	552	$\bar{1}10$		99
221	335	$1\bar{1}0$		
223	332	$\bar{1}10$		
125	430	$\bar{3}4\bar{1}$		
127	650	$\bar{1}1\bar{2}$		
123	321	$\bar{1}2\bar{1}$	10	
111	111	000		100

Плоскость двойникования – ($\bar{1}11$)

$$T = \begin{bmatrix} -0,3333 & -0,6666 & -0,6666 \\ -0,6666 & -0,3333 & 0,6666 \\ -0,6666 & 0,6666 & -0,3333 \end{bmatrix}$$

1	2	3	4	5
112	$\bar{7}1\bar{2}$	$\bar{1}\bar{3}2$		
120	$\bar{5}\bar{4}2$	$2\bar{1}3$		
130	$\bar{5}\bar{4}3$	$3\bar{1}4$		
130	$\bar{7}\bar{5}4$	$3\bar{1}4$		
332	$\bar{5}\bar{2}\bar{1}$	$1\bar{5}6$	11	
110	$\bar{1}\bar{1}0$	$1\bar{1}2$		

Плоскость двойникования – ($\bar{1}\bar{1}1$)

$$T = \begin{pmatrix} -0,3333 & 0,6666 & -0,6666 \\ 0,6666 & -0,3333 & -0,6666 \\ -0,6666 & -0,6666 & -0,3333 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
112	$\bar{1}\bar{1}\bar{2}$	$1\bar{1}0$		
120	$10\bar{2}$	$2\bar{1}1$		
123	$\bar{1}\bar{2}\bar{3}$	$5\bar{4}1$	12	
223	$\bar{1}\bar{1}\bar{3}$	$1\bar{1}0$		
223	$\bar{3}\bar{3}\bar{8}$	$1\bar{1}0$	13	

ТЕТРАГОНАЛЬНАЯ РЕШЕТКА

$Fe-Pd$; $\frac{c}{a}=0,966$; $a=3,86$; $c=3,73$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.0671 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0671 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0718 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойникования – (101)

$$T = \begin{pmatrix} -0.0342 & 0 & 1.0342 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0.966 & 0 & 0.0342 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
001	100	010		
$10\bar{2}$	$\bar{2}01$	$0\bar{1}0$	14	
111	$1\bar{1}1$	$15\bar{1}\bar{1}4$		
010	$0\bar{1}0$	$150\bar{1}4$		101
$\bar{1}10$	$0\bar{1}\bar{1}$	$1515\bar{1}4$		
$11\bar{2}$	$\bar{2}\bar{1}1$	$7.5\bar{2}2\bar{7}.2$		
110	$0\bar{1}1$	$1515\bar{1}4$		
120	$0\bar{2}1$	$2\bar{1}\bar{1}.9$	15	
$\bar{1}01$	$10\bar{1}$	010		
102	201	010		
102	503	010		
114	$4\bar{1}1$	$1541\bar{1}4$		
031	$1\bar{3}0$	$216.7\bar{2}0$		
121	$1\bar{2}1$	$140.4\bar{1}3.2$		
221	$1\bar{2}2$	$9\bar{5}\bar{8}$		
115	$5\bar{1}1$	$1555\bar{1}4$		

ТЕТРАГОНАЛЬНАЯ РЕШЕТКА

In ; $\frac{c}{a}=1.07$; $a=4,592$; $c=4,94$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.0474 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0474 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0409 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойникования – (101)

$$T = \begin{pmatrix} 0.073 & 0 & 0.927 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1.073 & 0 & -0.073 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
$10\bar{2}$	$\bar{2}01$	$0\bar{1}0$	16	
$\bar{1}10$	$0\bar{1}\bar{1}$	$44\bar{4}.7$		
$11\bar{2}$	$\bar{2}\bar{1}1$	$4\bar{1}3\bar{4}.5$		
102	301	010		
101	403	010		
010	$0\bar{1}0$	$40\bar{4}.7$		102
120	$0\bar{2}1$	$2\bar{1}2.4$		
031	$1\bar{3}0$	$124.7\bar{1}4$		
121	$3\bar{5}2$	$403\bar{4}6$		
221	$2\bar{3}3$	$41\bar{1}7\bar{4}8$		
122	$3\bar{3}1$	$4027\bar{4}7$		
122	$6\bar{5}2$	$4027\bar{4}7$		
201	203	$0\bar{1}0$	17	
123	$5\bar{3}1$	$41\bar{5}0\bar{4}7$		
321	$2\bar{3}4$	$41\bar{3}8\bar{4}7$		

РОМБИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА

Ti-Ta 50 вес%; $a=3,116$; $b=4,893$; $c=4,662$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.1029 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0417 & 0 \\ 0 & 0 & 0.046 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойникования – (130)

$$T = \begin{pmatrix} -0.5698 & 0.5232 & 0 \\ 1.2903 & 0.5698 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
001	$00\bar{1}$	$\bar{6}50$		
010	210	001		
100	$\bar{1}10$	001		
$\bar{2}10$	$5\bar{1}0$	001	18	
101	$\bar{1}1\bar{2}$	$\bar{6}56$		
$\bar{1}01$	$1\bar{1}\bar{2}$	$\bar{6}5\bar{6}$		
$1\bar{1}0$	$\bar{1}00$	001		
111	$23\bar{3}$	$\bar{6}51$		
$\bar{1}11$	$20\bar{1}$	$\bar{6}5\bar{1}\bar{1}$		
$1\bar{1}1$	$\bar{2}0\bar{1}$	$\bar{6}511$		
$11\bar{1}$	233	$6\bar{5}1$		
112	$23\bar{6}$	1081		
201	$\bar{1}1\bar{1}$	5410		
130	320	001	19	103
210	010	001		
013	$21\bar{5}$	$\bar{4}3\bar{1}$		
114	$11\bar{4}$	540		

РОМБИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА

$YBa_2Cu_3O_{7-x}$ $a=3,81$; $b=3,883$; $c=11,674$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.0689 & 0 & 0 \\ 0 & 0.663 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0073 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойникования – (110)

$$T = \begin{pmatrix} 0.019 & 0.981 & 0 \\ 1.019 & -0.019 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
001	$00\bar{1}$	$37\bar{3}90$	20	104
010	100	001	21	
101	$01\bar{1}$	$37\bar{3}937$	22	105
110	110	001		

ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ ПЛОТНОУПОКОВАННАЯ РЕШЕТКА

Mg; $\frac{c}{a}=1.623$; $a=3.2092$; $c=5.2102$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.1295 & 0.0647 & 0 \\ 0.0647 & 0.1295 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0368 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойникования – (111)

$$T = \begin{pmatrix} -0.0866 & 0.9130 & 0.1730 \\ 0.9130 & -0.0866 & 0.1730 \\ 0.9130 & 0.9130 & -0.8267 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
001	11 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 10		
$\bar{1}$ 10	1 $\bar{1}$ 0	11 $\bar{10.5}$	23	
120	732	2 $\bar{1}$ 5.4		
011	63 $\bar{2}$	$\bar{15}$ 19 $\bar{19}$		
122	32 $\bar{1}$	$\bar{8}$ 9 $\bar{5}$		
411	130	$\bar{3.3}$ 112.2	24	
114	33 $\bar{2}$	$\bar{1}$ 10	25	
111	44 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 10		106
321	340	$\bar{1.4}$ 12.2		
124	43 $\bar{2}$	$\bar{7}$ 7.4 $\bar{2}$		
124	65 $\bar{3}$	$\bar{7}$ 7.4 $\bar{2}$		
112	22 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 10	26	

Плоскость двойникования – (101)

$$T = \begin{pmatrix} 0.557 & 0.778 & 0.443 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1.56 & 0.778 & -0.557 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
001	63 $\bar{2}$	$\bar{1}$ 20	27	107,108
$\bar{1}$ 10	$\bar{1}$ 4 $\bar{1}$	115.4		
$\bar{1}$ 11	1 $\bar{1}$ $\bar{1}$	$\bar{1}$ 6 $\bar{7}$	28	
112	52 $\bar{1}$	$\bar{7}$ 17 $\bar{5}$		
102	53 $\bar{1}$	$\bar{10}$ 175		
031	34 $\bar{1}$	4.513 $\bar{3.9}$		
021	32 $\bar{1}$	01 $\bar{2}$		
120	36 $\bar{2}$	2 $\bar{1}$ 5.3		
211	841	$\bar{1}$ 20		

ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ ПЛОТНОУПОКОВАННАЯ РЕШЕТКА

$$Co; \frac{c}{a} = 1.632; a = 2.519; c = 4.133$$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.2101 & 0.1051 & 0 \\ 0.1051 & 0.2101 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0585 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойникования – (102)

$$T = \begin{pmatrix} -0.054 & 0.473 & 0.527 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1.892 & 0.946 & 0.054 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
001	210	$\bar{1}$ 20		
$\bar{1}$ 10	0 $\bar{3}$ 1	1010 $\bar{27}$		
110	0 $\bar{1}$ 1	11 $\bar{11}$ 10		
112	621	$\bar{1}$ 31.1		

120	$0\bar{3}1$	$2\bar{1}2\bar{7}$	29	109
102	641	$\bar{2}2.81$		
031	$1\bar{1}0$	$1.21\bar{3}$	30	
221	503	$13\bar{2}.4\bar{2}1$	31	
411	334	$1\bar{2}218$		
011	100	$118\bar{1}8$		
211	634	$1\bar{2}0$		

ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ ПЛОТНОУПОКОВАННАЯ РЕШЕТКА

Zr; $\frac{c}{a}=1.59$; $a=3.237$; $c=5.15$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.127 & 0.063 & 0 \\ 0.063 & 0.127 & 0 \\ 0 & 0 & 0.037 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойникования – (111)

$$T = \begin{pmatrix} -0.0898 & 0.91 & 0.1798 \\ 0.91 & -0.0898 & 0.1798 \\ 0.91 & 0.91 & -0.82 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
$\bar{1}11$	$50\bar{2}$	$\bar{1}1.5\bar{2}.5$		
102	$46\bar{3}$	$\bar{2}1.81$		
103	$23\bar{2}$	$\bar{3}2.81$		
112	$22\bar{1}$	$\bar{1}10$	32	110

ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ ПЛОТНОУПОКОВАННАЯ РЕШЕТКА

α Ti; $\frac{c}{a}=1.5846$; $a=2.959$; $c=4.689$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.1523 & 0.0761 & 0 \\ 0.0761 & 0.1523 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0454 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойникования – (102)

$$T = \begin{pmatrix} -0.088 & 0.455 & 0.544 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1.823 & 0.911 & 0.088 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
101	542	$\bar{2}.52.5$		111
111	512	$14.1\bar{5}.1$		
121	$3\bar{1}1$	$1.71\bar{3}.7$	33	
411	345	$1\bar{1}4.310.3$		
211	423	$1\bar{2}0$		
$1\bar{1}1$	341	$\bar{2}71037$	34	
031	$1\bar{1}0$	$43\bar{9}$		
311	434	$1\bar{8}5$		

Плоскость двойникования – (112)

$$T = \begin{pmatrix} -0.2848 & 0.7152 & 0.2848 \\ 0.7152 & -0.2848 & 0.2848 \\ 1.43 & 1.43 & -0.4304 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
001	33 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 10		
$\bar{1}$ 10	1 $\bar{1}$ 0	11 $\bar{5}$	35	
114	55 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 10	36	112
121	641	$\bar{1}$ 3 $\bar{5}$		
122	430	$\bar{6}$ 8 $\bar{5}$		
411	141	$\bar{1}$ $\bar{1}$ 5	37	
311	251	$\bar{3}$ $\bar{1}$ 10		
1 $\bar{1}$ 1	16 $\bar{1}$	$\bar{7}$ 310		
221	331	$\bar{1}$ 10		
321	231	11 $\bar{5}$		
1 $\bar{2}$ 0	$\bar{6}$ 5 $\bar{1}$	$\bar{4}$ $\bar{2}$ 17		
211	461	$\bar{3}$ 15		

Плоскость двойникования – (101)

$$T = \begin{pmatrix} 0.54 & 0.77 & 0.46 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1.54 & 0.77 & -0.54 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
$\bar{1}$ 01	10 $\bar{1}$	$\bar{5}$ 13 $\bar{5}$	38	
0 $\bar{1}$ 0	010	$\bar{3}$ 010	39	
001	63 $\bar{2}$	$\bar{1}$ 20	40	
100	232	0 $\bar{3}$ $\bar{5}$		
110	2 $\bar{1}$ 2	3 $\bar{3}$ $\bar{5}$		113
112	62 $\bar{1}$	$\bar{3}$ 7 $\bar{2}$		
632	421	$\bar{1}$ 20		

$\bar{1}$ 10	$\bar{1}$ 4 $\bar{1}$	11 $\bar{5}$		
114	73 $\bar{2}$	$\bar{7}$ 15 $\bar{2}$		
120	1 $\bar{3}$ 1	2 $\bar{1}$ $\bar{5}$		
120	2 $\bar{5}$ 2	2 $\bar{1}$ $\bar{5}$		
021	3 $\bar{2}$ $\bar{1}$	110 $\bar{2}$ 0		
021	6 $\bar{5}$ $\bar{2}$	110 $\bar{2}$ 0		
012	61 $\bar{2}$	$\bar{2}$ 6 $\bar{3}$		
123	51 $\bar{1}$	$\bar{3}$ 9 $\bar{5}$		

Плоскость двойникования – (1 $\bar{1}$ 1)

$$T = \begin{pmatrix} -0.23 & -0.77 & 0.46 \\ -0.77 & -0.23 & -0.46 \\ 0.77 & -0.77 & -0.54 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
001	3 $\bar{3}$ $\bar{2}$	110		
100	1 $\bar{3}$ 2	0 $\bar{3}$ $\bar{5}$		
011	0 $\bar{1}$ $\bar{1}$	85 $\bar{5}$	41	
120	4 $\bar{3}$ $\bar{1}$	2 $\bar{1}$ $\bar{5}$		
1 $\bar{1}$ 1	3 $\bar{3}$ 1	110		114
112	1 $\bar{5}$ $\bar{2}$	95 $\bar{7}$	42	
221	$\bar{2}$ $\bar{5}$ $\bar{1}$	6.50 $\bar{13}$		
123	1 $\bar{7}$ 4	74 $\bar{5}$		

ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ РЕШЕТКА

C - Графит; $\frac{c}{a}=2,722$; $a=2,4614$; $c=6,7014$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.2201 & 0.11 & 0 \\ 0.11 & 0.2201 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0222 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойникования – (111) [31]

$$T = \begin{pmatrix} -0.0326 & 0.967 & 0.065 \\ 0.967 & -0.0326 & 0.065 \\ 0.967 & 0.967 & -0.9347 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
001	11 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 10	43	115
1 $\bar{1}$ 0	$\bar{1}$ 10	11 $\bar{3}$ 0	44	
114	44 $\bar{3}$	$\bar{1}$ 10		
113	33 $\bar{2}$	$\bar{1}$ 10		
1 $\bar{1}$ 1	02 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 10 21		
031	51 $\bar{1}$	$\bar{4}$ 5 $\bar{1}$ 5		
012	32 $\bar{2}$	$\bar{1}$ 9 20 $\bar{1}$ 0		
311	36 $\bar{1}$	$\bar{6}$ 5 13		
221	44 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 10		
123	43 $\bar{2}$	$\bar{2}$ 8 29 $\bar{1}$ 0		
011	21 $\bar{1}$	10 11 11		

ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ ПЛОТНОУПОКОВАННАЯ РЕШЕТКА

Zn; $\frac{c}{a}=1.856$; $a=2.6648$; $c=4.9456$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.1877 & 0.0938 & 0 \\ 0.0938 & 0.1877 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0408 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойникования – (102)

$$T = \begin{pmatrix} 0.0689 & 0.5345 & 0.4655 \\ 0 & -1 & 0 \\ 2.138 & 1.069 & -0.0689 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
001	210	$\bar{1}$ 20		116
010	0 $\bar{1}$ 0	10 $\bar{2}$	45	
$\bar{1}$ 10	0 $\bar{3}$ $\bar{1}$	22 $\bar{7}$		
101	641	$\bar{9}$ 10 9		
$\bar{1}$ 01	41 $\bar{1}$	$\bar{1}$ 3 $\bar{1}$	46	
111	621	$\bar{1}$ 9 $\bar{8}$		
$\bar{1}$ 11	4 $\bar{1}$ $\bar{1}$	$\bar{1}$ 22 $\bar{2}$ 3		
$\bar{1}$ 21	4 $\bar{3}$ $\bar{1}$	14 $\bar{7}$		
131	6 $\bar{4}$ 1	32 $\bar{9}$		

ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ РЕШЕТКА

$$\alpha \text{ В; } \frac{c}{a}=2.56; a=4.908; c=12.567$$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.0553 & 0.0276 & 0 \\ 0.0276 & 0.0553 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0063 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойникования – (0 $\bar{1}$ 4)

$$T = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0.353 & -0.293 & -0.323 \\ -1.413 & -2.827 & 0.293 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
100	$\bar{1}00$	$0\bar{5}\bar{1}\bar{1}$	47	117
111	$\bar{2}\bar{3}0$	$3\bar{2}\bar{1}$		
110	$\bar{2}\bar{1}\bar{1}$	$10\bar{1}0\bar{1}\bar{1}$		
120	$\bar{1}\bar{2}\bar{2}$	$2\bar{1}0$		
011	$\bar{1}\bar{3}0$	$3\bar{1}\bar{1}$		
311	$\bar{4}\bar{3}0$	$10\bar{1}3\bar{1}\bar{7}$	48	
122	$\bar{1}\bar{2}0$	$2\bar{1}0$		
$\bar{1}20$	$3\bar{1}\bar{1}$	$10\bar{5}2\bar{2}$		
211	$\bar{1}\bar{1}0$	$26\bar{2}5\bar{2}7$	49	

ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ РЕШЕТКА

$$\text{WC; } \frac{c}{a}=0.976; a=2.906; c=2.837$$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.1579 & 0.0789 & 0 \\ 0.0789 & 0.1579 & 0 \\ 0 & 0 & 0.1242 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойникования – (111)

$$T = \begin{pmatrix} -0.2078 & 0.7922 & 0.4156 \\ 0.7922 & -0.2078 & 0.4156 \\ 0.7922 & 0.7922 & -0.5844 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
100	$\bar{1}42$	$0\bar{5}9$	50	118
$\bar{1}10$	$1\bar{1}0$	$11\bar{4}$	51	
$11\bar{2}$	$\bar{1}\bar{1}2$	$1\bar{1}0$		
110	223	$1\bar{1}0$		
115	$2\bar{2}\bar{1}$	$\bar{1}10$		
114	$5\bar{5}\bar{2}$	$\bar{1}10$		
113	$3\bar{3}\bar{1}$	$\bar{1}10$		
311	131	$\bar{5}\bar{6}21$		
221	221	$1\bar{1}0$		
122	320	$\bar{2}3\bar{2}$		
411	152	$\bar{3}\bar{7}19$		
$\bar{1}20$	$4\bar{3}1$	$2\bar{1}5\bar{7}$		

Плоскость двойниковаия – (101)

$$T = \begin{pmatrix} 0.1192 & 0.5596 & 0.8808 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1.1192 & 0.5596 & -0.1192 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
10 $\bar{2}$	$\bar{4}$ $\bar{1}$ 2	2 $\bar{6}$ 1	52	
11 $\bar{2}$	$\bar{4}$ $\bar{3}$ 2	18 $\bar{28}$ $\bar{5}$		
112	411	$\bar{5}$ 27 $\bar{11}$		
102	431	$\bar{4}$ 5 2		
031	1 $\bar{2}$ 0	9 5 $\bar{15}$		
121	3 $\bar{2}$ 2	5 1 $\bar{7}$		
221	4 $\bar{1}$ 5	15 $\bar{8}$ $\bar{14}$	53	
411	112	2 $\bar{15}$ 7		
201	455	$\bar{5}$ $\bar{6}$ 10		
$\bar{1}$ 2 0	0 $\bar{3}$ 1	2 1 $\bar{3}$		
2 1 1	425	1 $\bar{2}$ 0		

РОМБООДРИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА

β В (R); $a=10.17$; $\alpha=65.2^\circ$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.0128 & -0.0038 & -0.0038 \\ -0.0038 & 0.0128 & -0.0038 \\ -0.0038 & -0.0038 & 0.0128 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойниковаия – (100)

$$T = \begin{pmatrix} 1 & -0.591 & -0.591 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
001	00 $\bar{1}$	3 10 0	54	
100	5 $\bar{3}$ $\bar{3}$	0 1 $\bar{1}$		
10 $\bar{2}$	5 $\bar{3}$ 7	$\bar{2}$ $\bar{6}$ $\bar{1}$		
111	2 $\bar{3}$ $\bar{3}$	01 $\bar{1}$		119
$\bar{1}$ 10	$\bar{5}$ 23	$\bar{3}$ $\bar{3}$ $\bar{7}$		
115	1 $\bar{2}$ $\bar{6}$	14 $\bar{1}$		
112	2 $\bar{3}$ $\bar{5}$	3 23 $\bar{13}$		
114	1 $\bar{2}$ $\bar{5}$	2 10 $\bar{3}$		
113	2 $\bar{3}$ $\bar{7}$	6 33 $\bar{13}$		
031	0 $\bar{3}$ $\bar{1}$	$\bar{2}$ 3 $\bar{9}$	55	
121	2 $\bar{5}$ $\bar{3}$	$\bar{3}$ 13 $\bar{23}$		
221	2 $\bar{3}$ $\bar{2}$	$\bar{3}$ 16 $\bar{26}$		
112	1 $\bar{3}$ $\bar{3}$	01 $\bar{1}$		
411	5 $\bar{4}$ $\bar{4}$	01 $\bar{1}$		
123	2 $\bar{5}$ $\bar{7}$	3 33 $\bar{23}$	56	
321	4 $\bar{5}$ $\bar{4}$	$\bar{3}$ 19 $\bar{29}$		

Плоскость двойниковаия – (5 $\bar{1}$ $\bar{1}$)

$$T = \begin{pmatrix} 0.7299 & -0.6751 & -0.6751 \\ -0.346 & -0.865 & 0.135 \\ -0.346 & 0.135 & -0.865 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
001	$\bar{3}$ 1 $\bar{6}$	2 5 0		
100	1 $\bar{1}$ $\bar{1}$	01 $\bar{1}$		
10 $\bar{2}$	3 $\bar{2}$ 2	$\bar{2}$ $\bar{4}$ $\bar{1}$		
111	0 $\bar{1}$ $\bar{1}$	01 $\bar{1}$		

11 $\bar{2}$	3 $\bar{5}$ 3	5 $\bar{7}$ 6		120
115	1 $\bar{1}$ 5	11 39 10		
115	2 $\bar{1}$ 6	11 39 10		
112	1 $\bar{4}$ 7	3 17 10		
114	1 $\bar{1}$ 4	5 19 6	57	
113	1 $\bar{2}$ 5	5 22 9	58	
311	1 $\bar{2}$ 2	01 $\bar{1}$		
031	3 $\bar{5}$ 1	4515		
121	1 $\bar{7}$ 4	3 10 17		
221	1 $\bar{7}$ 5	3 13 20		
122	1 $\bar{3}$ 3	01 $\bar{1}$		
411	2 $\bar{3}$ 3	01 $\bar{1}$		
201	1 $\bar{1}$ 2	3 15 6		
123	1 $\bar{2}$ 3	3 24 17		
321	1 $\bar{3}$ 2	3 16 23	59	
1 $\bar{3}$ 1	344	11 10 19		

МОНОКЛИННАЯ РЕШЕТКА

ZrO₂; $a = 5.17$, $b = 5.26$, $c = 5.30$
 $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta = 80.16^\circ$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.03853 & 0 & -0.00642 \\ 0 & 0.03614 & 0 \\ -0.00642 & 0 & 0.03667 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойникования – (100)

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -0.3334 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
100	30 $\bar{1}$	010		121
010	0 $\bar{1}$ 0	1 $\bar{0}$ 6	60	
011	0 $\bar{1}$ 1	1 $\bar{1}$ 6	61	
102	10 $\bar{2}$	010		
201	40 $\bar{3}$	010		
210	63 $\bar{2}$	1 $\bar{1}$ 3 6		
211	42 $\bar{3}$	1 $\bar{8}$ 6		
112	22 $\bar{5}$	1 $\bar{1}$ 3 6		
221	44 $\bar{3}$	1 $\bar{4}$ 6		
113	11 $\bar{3}$	1 $\bar{1}$ 9 6		
131	26 $\bar{3}$	37 18		
311	31 $\bar{2}$	19 6	62	

ТРИКЛИННАЯ РЕШЕТКА

Albite NaAlSi₃O₈ [41]
 $a = 8.144$; $b = 12.787$; $c = 7.16$;
 $\alpha = 94.266^\circ$ $\beta = 116.583^\circ$ $\gamma = 87.667^\circ$

$$G^{-1} = \begin{pmatrix} 0.0189 & -0.0001 & 0.0096 \\ -0.0001 & 0.0062 & 0.0008 \\ 0.0096 & 0.0008 & 0.0245 \end{pmatrix}$$

Плоскость двойникования – (010)

$$T = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -0.0291 & 1 & 0.2509 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4	5
100	$\bar{1}00$	0 8 $\bar{6}2$	63	122
010	041	8 0 1		
001	00 $\bar{1}$	62 1 0	64	
110	441	$\bar{8}$ 8 $\bar{6}3$		
101	$\bar{1}0\bar{1}$	62 9 $\bar{6}2$		

**СПИСОК СОВПАДАЮЩИХ НАПРАВЛЕНИЙ И
ОСНОВНЫХ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ,
СООТВЕТСТВУЮЩИХ СХЕМАМ ДИФРАКЦИОННЫХ
КАРТИН ОТ ДВУХ ФАЗНЫХ КРИСТАЛЛОВ**

$$\tilde{T} \cdot \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_1 = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}_2$$

**ГЦК – ОЦК; Аустенит – Мартенсит;
 $\gamma Fe(1) - \alpha Fe(2)$; Ориентационное соотношение Бейна.**

$$(010)_\gamma \parallel (01\bar{1})_\alpha \quad [100]_\gamma \parallel [100]_\alpha$$

$$T = \begin{pmatrix} 0.7994 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5653 & 0.5653 \\ 0 & -0.5653 & 0.5653 \end{pmatrix}$$

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} 1.251 & 0 & 0 \\ 0 & 0.8845 & -0.8845 \\ 0 & 0.8845 & 0.8845 \end{pmatrix}$$

Направление оси зоны матричной части кристалла [UVW] ₁	Направление оси зоны второй фазы [UVW] ₂	Номер схемы	Номер стерео- проекции
1	2	3	4
001	011	65	
110	32 $\bar{2}$		
011	010	66	123
111	230		
1 $\bar{1}$ 1	203		
112	362		
411	310		
211	320		
123	141		
310	41 $\bar{1}$		
311	210		
120	23 $\bar{3}$		
122	130		

Ориентационное соотношение Курдюмова-Закса.

$$(011)_\gamma \parallel (111)_\alpha \quad [1\bar{1}1]_\gamma \parallel [0\bar{1}1]_\alpha \quad [3,20].$$

$$T = \begin{pmatrix} 0.5330 & 0.5929 & 0.0598 \\ -0.5929 & 0.5195 & 0.1332 \\ 0.0598 & -0.1332 & 0.7860 \end{pmatrix}$$

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} 0.8339 & -0.9276 & 0.0937 \\ 0.9276 & 0.8129 & -0.2085 \\ 0.0937 & 0.2085 & 1.23 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4
100	1 $\bar{1}$ 0		
011	111	67	124
111	302		
111	503		
1 $\bar{1}$ 1	0 $\bar{1}$ 1	68	
411	3 $\bar{2}$ 1		
211	3 $\bar{1}$ 1		
211	6 $\bar{2}$ 3		
123	425		
310	2 $\bar{1}$ 0		
310	5 $\bar{3}$ 0		
311	4 $\bar{2}$ 1		
122	312		
122	524		
351	510		

Ориентационное соотношение Нишиямы-Вассермана.

$$(1\bar{1}1)_\gamma \parallel (0\bar{1}1)_\alpha \quad [\bar{1}12]_\gamma \parallel [011]_\alpha \quad [3,20].$$

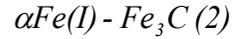
$$T = \begin{pmatrix} 0.5653 & 0.5653 & 0 \\ -0.5571 & 0.5572 & 0.1352 \\ 0.0955 & -0.0955 & 0.7879 \end{pmatrix}$$

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} 0.5653 & 0.5653 & 0 \\ -0.5571 & 0.5572 & 0.1352 \\ 0.0955 & -0.0955 & 0.7879 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4
100	1 $\bar{1}$ 0		
010	110		

110	100	69	
101	4 $\bar{3}$ 6		
1 $\bar{1}$ 1	0 $\bar{1}$ 1	70	125
120	310		
211	4 $\bar{1}$ 2		
$\bar{1}$ 12	011	71	
310	2 $\bar{1}$ 0		
122	212		
123	425		
411	2 $\bar{1}$ 1		
411	5 $\bar{3}$ 2		

ОЦК - РОМБИЧЕСКАЯ; Феррит – Цементит;



$a_2 = 4,523, b_2 = 5,089, c_2 = 6,743; \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$$G_2^{-1} = \begin{pmatrix} 0.0488 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0386 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0219 \end{pmatrix}$$

Ориентационное соотношение Багаряцкого

$(112)_\alpha \parallel (001)_\alpha \parallel [1\bar{1}0]_\alpha \parallel [100]_\alpha \parallel [20]_\alpha$

$$T = \begin{pmatrix} 1,116 & -1,116 & 0 \\ 1,025 & 1,025 & -1,025 \\ 0,9605 & 0,9605 & 1,921 \end{pmatrix}$$

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} 0.4481 & 0.3251 & 0.1735 \\ -0.4481 & 0.3251 & 0.1735 \\ 0 & -0.3251 & 0.347 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4
100	321		
010	$\bar{3}$ 21		
001	0 $\bar{1}$ 1		
110	021	72	
1 $\bar{1}$ 0	100	73	
101	101		
10 $\bar{1}$	34 $\bar{1}$		
011	$\bar{1}$ 01		
111	012		
1 $\bar{1}$ 1	3 $\bar{1}$ 1		
11 $\bar{1}$	010		
112	001	74	126
$\bar{1}$ 12	$\bar{3}$ 22		
121	$\bar{2}$ 34		
121	$\bar{3}$ 46		
$\bar{1}$ 21	$\bar{3}$ 01		
211	234		
021	$\bar{3}$ 12		
120	$\bar{1}$ 21		
311	111		
31 $\bar{1}$	351		
31 $\bar{1}$	120		

Ориентационное соотношение между $\alpha Fe(I)$ и $Fe_3 C(2)$ в верхнем бейните [4,19,20].

$$(1\bar{1}0)_\alpha \parallel (2\bar{1}\bar{1})_{\text{ц}} \quad [111]_\alpha \parallel [111]_{\text{ц}}$$

$$T = \begin{pmatrix} 1.4810 & -0.4692 & 0.2785 \\ 0.6029 & 1.578 & -0.5475 \\ -0.1534 & 0.8216 & 2.1990 \end{pmatrix}$$

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} 0.5946 & 0.1912 & -0.0277 \\ -0.1884 & 0.5005 & 0.1484 \\ 0.1118 & -0.1736 & 0.3973 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4
001	$2\bar{3}7$		
010	$\bar{1}31$		
100	310		
101	201		
110	361		
$10\bar{1}$	$43\bar{3}$		
111	111	75	127
$\bar{1}11$	$\bar{5}14$		
112	213		
$1\bar{1}2$	$3\bar{2}2$		
$1\bar{2}1$	$1\bar{1}0$	76	
311	421		

Ориентационное соотношение Питча [3,20].

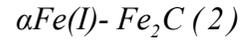
$$(3\bar{1}1)_\alpha \parallel (100)_{\text{ц}} \quad [\bar{2}\bar{1}5]_\alpha \parallel [001]_{\text{ц}}$$

$$T = \begin{pmatrix} 1.4275 & -0.4758 & 0.4758 \\ 0.3909 & 1.6616 & 0.4887 \\ -0.8591 & -0.4295 & 2.1477 \end{pmatrix}$$

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} 0.5731 & 0.1240 & -0.1552 \\ -0.1910 & 0.5270 & -0.0776 \\ 0.1910 & 0.1550 & 0.3880 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4
001	438		
010	$\bar{2}7\bar{1}$		
100	$51\bar{1}$		
110	$23\bar{1}$		
110	$58\bar{3}$		
101	311		
011	021		
$11\bar{1}$	$25\bar{6}$		
111	451		
$\bar{1}11$	$\bar{1}11$		
$\bar{1}11$	$\bar{5}54$		
$1\bar{1}1$	$4\bar{1}1$		
112	342		
$\bar{1}12$	$\bar{3}67$		
$11\bar{2}$	$01\bar{3}$	77	
113	454		
$\bar{2}\bar{1}5$	001	78	128,129
141	010		

ОЦК- ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ; Феррит – ε -карбид;



$a_2 = 2,73, c_2 = 4,33, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

$$G_2^{-1} = \begin{pmatrix} 0.1789 & 0.0894 & 0 \\ 0.0894 & 0.1789 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0533 \end{pmatrix}; \frac{c_2}{a_2} = 1,58$$

Ориентационное соотношение Джека [20].

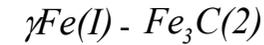
$(110)_\alpha \parallel (001)_\varepsilon \quad [\bar{1}11]_\alpha \parallel [100]_\varepsilon$

$$T = \begin{pmatrix} -0.5500 & 0.5500 & 0.5500 \\ 0.6118 & -0.6118 & 0.3986 \\ 1.068 & 1.068 & 0 \end{pmatrix}$$

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} -0.3587 & 0.4949 & 0.4680 \\ 0.3587 & -0.4949 & 0.4680 \\ 1.101 & 0.9898 & 0 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4
100	$\bar{1}11$		
110	001	79	130
101	362		
10 $\bar{1}$	$\bar{3}\bar{1}1$	80	
011	311		
01 $\bar{1}$	$\bar{3}\bar{6}2$		
121	313		
031	4 $\bar{1}3$		
212	342		
$\bar{1}21$	5 $\bar{1}1$		

ГЦК-РОМБИЧЕСКАЯ; Аустенит – Цементит



Ориентационное соотношение Слизвика [20].

$(31\bar{1})_\gamma \parallel (10\bar{1})_\alpha \quad [011]_\gamma \parallel [111]_\alpha$

$$T = \begin{pmatrix} 1,1070 & 0,4983 & 0,3439 \\ -0,5199 & 1,302 & -0,2362 \\ -0,5940 & 0,0893 & 1,7820 \end{pmatrix}$$

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} 0,6954 & -0,2545 & -0,1679 \\ 0,3130 & 0,6463 & 0,0252 \\ 0,2161 & -0,1172 & 0,5038 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4
11 $\bar{1}$	53 $\bar{4}$		
113	403		
121	852		
$\bar{1}12$	047		
001	4 $\bar{2}9$	81	
010	120		
101	5 $\bar{2}2$		
011	111	82	131
110	73 $\bar{1}$		
$\bar{1}10$	$\bar{2}51$		
01 $\bar{1}$	185		
111	411		
1 $\bar{1}1$	2 $\bar{3}1$		
112	915		
021	342		
31 $\bar{1}$	20 $\bar{1}$		

ГЦК-ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ; Аустенит- ε - мартенсит;
 $\gamma\text{Fe}(1) - \varepsilon(2)$

$$a_2 = 2,535, \quad c_2 = 4,132, \quad \alpha = \beta = 90^\circ, \quad \gamma = 120^\circ$$

$$G_2^{-1} = \begin{pmatrix} 0.2075 & 0.1037 & 0 \\ 0.1037 & 0.2075 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0585 \end{pmatrix}; \quad \frac{c_2}{a_2} = 1,63$$

Ориентационное соотношение

$$(111)_\gamma \parallel (001)_\varepsilon \quad [10\bar{1}]_\gamma \parallel [100]_\varepsilon \quad [20].$$

$$T = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & -0.5 \\ -0.5 & 0.5 & 0 \\ 0.6654 & 0.6654 & 0.6654 \end{pmatrix}$$

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} 0.6667 & -0.6667 & 0.5009 \\ 0.6667 & 1.3333 & 0.5009 \\ -1.3333 & -0.6667 & 0.5009 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4
100	$3\bar{3}2$		
010	483		
110	423		
$\bar{1}10$	010	83	
101	$\bar{2}43$		
011	$\bar{2}23$		
011	001		
112	$\bar{2}\bar{1}3$		
$11\bar{2}$	210		
121	123		

$\bar{2}11$	$\bar{1}10$		
120	332		
120	443	84	
021	043		
130	453		
310	$4\bar{1}3$		
$4\bar{3}1$	171		
$4\bar{3}1$	623		
113	$2\bar{1}2$		
123	$\bar{2}03$	85	
111	001		132

ОЦК – ГЕКСАГОНАЛЬНАЯ; Титан, $\beta\text{Ti}(1) - \omega\text{Ti}(2)$

$$a_1 = 3.25; \quad a_2 = 4.596, \quad c_2 = 2.815, \quad \frac{c_2}{a_2} = 0.612$$

$$G_2^{-1} = \begin{pmatrix} 0.0631 & 0.0315 & 0 \\ 0.0315 & 0.0631 & 0 \\ 0 & 0 & 0.1262 \end{pmatrix};$$

Ориентационное соотношение Багаряцкого.

$$(111)_\beta \parallel (001)_\omega \quad [1\bar{1}0]_\beta \parallel [110]_\omega$$

$$T = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0.5 & 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}, \quad T^{-1} = \begin{pmatrix} 0.3333 & 0.6666 & 0.6666 \\ -0.6666 & -0.3333 & 0.6666 \\ 0.3333 & -0.3333 & 0.6666 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4
001	$1\bar{1}2$		
010	$2\bar{1}2$		
100	122		
$1\bar{1}0$	110	86	133
110	$\bar{1}14$		
$11\bar{1}$	$\bar{1}11$		
$\bar{1}11$	$\bar{1}21$		
210	012		
201	112		
120	$\bar{1}02$	87	
211	128		
311	125		
131	$2\bar{1}5$		
113	$1\bar{1}5$		
114	$1\bar{1}4$		
411	124		
321	014	88	

ГЦК – ГПУ; Сплав Cu –Si 11.7 ат%(1) - χ -фаза(2);

$$a_1 = 3,622; \quad a_2 = 2,559, \quad c_2 = 4,185, \quad \frac{c}{a} = 1,63$$

$$G_2^{-1} = \begin{pmatrix} 0.2036 & 0.1018 & 0 \\ 0.1018 & 0.2036 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0571 \end{pmatrix};$$

Ориентационное соотношение Бюргерса

$$(111)_1 \parallel (001)_2 \quad [1\bar{1}0]_1 \parallel [110]_2 \quad [42]$$

$$T = \begin{pmatrix} 0 & 0.4996 & -0.4996 \\ -0.4996 & 0 & -0.4996 \\ 0.6671 & 0.6671 & 0.6671 \end{pmatrix}$$

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} -0.6672 & -1.334 & 0.4997 \\ 1.334 & 0.6672 & 0.4997 \\ -0.6672 & 0.6672 & 0.4997 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4
001	$\bar{3}32$		
100	$\bar{4}83$		
101	$\bar{4}23$		
110	$2\bar{2}3$		
$\bar{1}10$	110	89	
$10\bar{1}$	$0\bar{1}0$	90	
011	243		
$01\bar{1}$	100		
111	001		134
112	$\bar{1}13$		
211	$\bar{1}23$		
120	403	91	
021	443	92	
130	513		
031	543		
311	$\bar{1}22$		
123	023		
114	$\bar{2}23$		

ОЦК – ГПУ; Титан, $\beta Ti(1) - \alpha Ti(2)$

$$a_1 = 3,307; \quad a_2 = 2,95, \quad c_2 = 4,679, \quad \frac{c}{a} = 1,586$$

$$G_2^{-1} = \begin{pmatrix} 0.1532 & 0.0766 & 0 \\ 0.0766 & 0.1532 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0456 \end{pmatrix}$$

Ориентационное соотношение Бюргера

$$(10\bar{1})_\beta \parallel (001)_\alpha \quad [111]_\beta \parallel [110]_\alpha \quad [42,43].$$

$$T = \begin{pmatrix} -0.0579 & 0.8901 & -0.0579 \\ 0.5741 & -0.3740 & 0.5741 \\ 1.0028 & 0 & -1.0028 \end{pmatrix}$$

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} 0.3821 & 0.9095 & 0.4986 \\ 1.1731 & 0.1185 & 0 \\ 0.3821 & 0.9095 & -0.4986 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4
001	25 $\bar{3}$		
110	321		
10 $\bar{1}$	001	93	
1 $\bar{1}$ 0	2 $\bar{2}$ 1		
1 $\bar{1}$ 0	3 $\bar{3}$ 2		
120	521		
102	25 $\bar{1}$		
1 $\bar{1}$ 1	1 $\bar{4}$ 0		
111	110		135

112	56 $\bar{1}$		
121	320	94	
211	561		
1 $\bar{1}$ 2	32 $\bar{3}$		
113	34 $\bar{1}$		
114	23 $\bar{1}$	95	

Ориентационное соотношение между моноклинной и тетрагональной фазами

$ZrO_2(m) (1) - ZrO_2(t) (2)$

$$a_2 = 5.07, \quad c_2 = 5.16$$

$$(100)_m \parallel (100)_t \quad [001]_m \parallel [001]_t \quad [33].$$

$$T = \begin{pmatrix} 0.9953 & 0 & -0.1659 \\ 0 & 0.9639 & 0 \\ 0 & 0 & 0.9736 \end{pmatrix}$$

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} 1.0047 & 0 & 0.1712 \\ 0 & 1.0375 & 0 \\ 0 & 0 & 1.0271 \end{pmatrix}$$

1	2	3	4
010	010	96	
100	601	97	
001	001		136,137
110	551		

ЛИТЕРАТУРА

1. З.Г.Пинскер. Дифракция электронов. М., -Л., АН СССР, 1949.с. 475
2. Б.К.Вайнштейн. Структурная электронография. М., Изд., академии наук СССР, 1971. с.250.
3. К.Эндрюс, Д.Дайсон, С.Киоун. Электронограммы и их интерпретация. М., «Мир», 1971. с. 256
4. Э.Р.Кутелия, Л.М.Утевский. ФММ, т.28, Вып.1, 129-137 (1969)
5. Э.Р.Кутелия, В.В.Санадзе. Труды Грузинского Политехнического Института, «Физика» №6 (154), с. 29-36 (1972)
6. Э.Кутелия, Т.Дзиграшвили. Кристаллография, том 29, 6, с.1190-1192, (1984)
7. Т.А.Дзиграшвили, Э.Р.Кутелия, В.В.Санадзе. Кристаллография, т.20,5,965 (1975)
8. Т.А.Дзиграшвили, Э.Р.Кутелия, В.В.Санадзе. Труды Грузинского Политехнического Института, «Физика» №5 (178), 18-22 (1975)
9. Т.А.Дзиграшвили, В.В.Санадзе, Т.О.Бахтадзе, Ч.М.Бурджалиани. Кристаллография, т.25, 5, 1060-1061, (1980)
10. Т.А.Дзиграшвили. Кристаллография. Т.32, 6, стр. 1523- 1525, (1987)
11. I.Bataronov, T.Dzigrashvili, A.Roschupkin. The Crystallographic Calculation of the Elements of Mechanical Twinning in Crystals. Zeitschrift fur Kristallographie (1995), 210, pp. 167-172. R.Oldenburger Verlag, Munchen, Germany.
12. I.Bataronov, T.Dzigrashvili, A.Roschupkin. The Analytical Theory of The Crystallography of Mechanical Twinning. Ferroelectrics, Vol.175 pp.1-11, (1996) U.S.A.
13. C.M. Wayman. Introduction to the Crystallography of Martensitic Transformations. Macmillan, N.Y., 1964, p.193.
14. Г.Б. Бокий, М.А. Порай-Кошиц. Рентгеноструктурный анализ. Т.1, Изд. МГУ, 1964г. с.489
15. Н.К.Д.Н. Bhadeshia. Worked Examples in the Geometry of Crystals. Institute of Metals, London. 2001.
16. D.E.Sands, Vectors and Tensors in Crystallography, Dover Publications, N.Y., 1995, p.228.
17. А.А. Caylay, Memoir on the Theory of Matrices. Philos.Trans.Roy.Soc.London, Ser.A, 148, p.p.17-37, 1857.
18. П.Хирш, А.Хови, Р.Никольсон, Д.Пэшли, М.Уэлан. Электронная микроскопия тонких кристаллов. Изд., Мир, Москва, 1968, с.574.
19. Э.Кутелия. Физика металлов и металловедение, т.28, вып.5, с.853-857, (1969)
20. Л.М.Утевский. Дифракционная электронная микроскопия в металловедении. М., «Металлургия», 1973. с.583.
21. Ю.А. Багаряцкий. Доклады АН СССР, т,73, №6, с.1161 (1950)
22. Г.С.Грицаенко, Б.Б.Звягин, Р.В.Боярская, А.И.Горшков, Н.Д.Самотин, К.Е.Флорова. Методы электронной микроскопии минералов. М., «Наука», 1969. с. 289.
23. J.W.Christian, S.Mahajan. Deformation Twinning. Progress in Materials Science, Vol.39, p.p.1-157,(1995)
24. Ю.И.Сиротин, М.П.Шаскольская. Основы кристаллофизики. М., «Наука», 1979

25. П.Ланкастер. Теория матриц. М., «Наука»,1978, с.280
26. Г.Штрайтвольф. Теория групп в физике твердого тела. М., Мир, 1971, с.198
27. Д.М.Васильев. Физическая кристаллография, М., «Металлургия», 1981. с. 279.
28. М.А. Порай-Кошиц. Основы структурного анализа химических соединений. М., 1989, с.191
29. Г.Томас, М.Ж.Гориндж. Просвечивающая электронная микроскопия металлов. М., «Наука». 1983. с.
30. Современная кристаллография. Т.4 изд. «Наука», М., 1981
31. М.В.Классен-Нехлюдова. Механическое двойникование кристаллов. 1960, с.261
32. M.J.McKelvy, A.R.Rae Smith, L.Eyring. Journal of Solid State Chemistry, 44, p.p.374-381, (1982)
33. I.Wei Chen, Y.-H. Chiao. Acta Metallurgica, 33, p.p.1827-1845, (1985)
34. H.Lipson, N.J.Petch. J.Iron and Steel Inst. 142, 92, (1940)
35. S.Nagakura, Y.Nakamura, T.Suzuki. Japanese Journals of Applied Physics. Vol.21, #7, pp.1449-1451, (1982)
36. S.Nagakura, Y.Nakamura. Transaction of the Japan Institute of Metals. Vol.24, #6, pp.329-336, (1983)
37. E.Kutelia, T.Dzigrashvili. Proceedings of XIth Conference on Applied Crystallography, Kozubnik, Poland. p.p. 244-248, (1984)
38. J.M.Cowley, A.F.Moodie. Acta Cryst., 12, 360, (1950)
39. А.Келли, Г.Гровс. Кристаллография и дефекты в кристаллах. М., «Мир», 1974, с.496
40. Reed-Hill, R.E.; Hirth, J.P.; Rogers, H.C. Deformation Twinning. Gordon and Breach, 1965. 464pp.
41. <http://webmineral.com/data/>
42. W.G.Burgers. Physica 1, p.561, (1934)
43. R.B.Nicholson, J.Nutting. Acta met., v.9, p.332, (1961).

ე.რ. ქუთელია, თ.ა. ძიგრაშვილი

ორფაზა და ორეულოვანი კრისტალების
ელექტრონოგრაფიის ანალიზი

გამომცემლობა „ინტელექტი“
თბილისი 2005