第四章 晶向、 晶面等概念

4.1 原子坐标(三维)

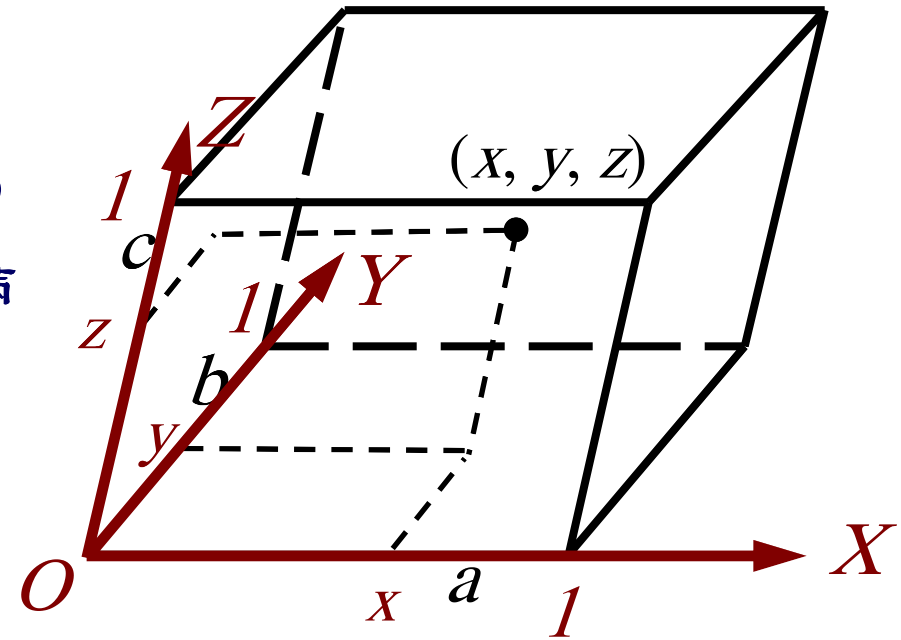
晶体的结构具有周期性和对称性，描述晶体中微粒的相对位置时，若使用普遍采用的三维直角坐标系直接描述每一个粒子的坐标位置的话，十分不便。

这样需要结合晶体的点阵周期性，重新建立一套很方便就可以描述晶体内部各粒子的位置的方法。

晶胞是基于“三原则”选出的能够较好的反映晶体周期性和对称性的最小单元，若描述了晶胞内的每一个粒子的坐标位置，就知道了整个晶体内的粒子相对位置。

借助晶胞的三条棱向量建立一套坐标系，并借此描述晶胞内部的每一个粒子的坐标位置(原子坐标)。

4.1 原子坐标(三维)



(1) 取晶胞参数a、b、c的方向为三维坐标系坐标轴的方向，满足右手系；

(2) 以晶胞参数a、b、c 的长度为三个方向的长度单位1；

(3)一般将原点选在晶胞顶点上(偶有不然)；

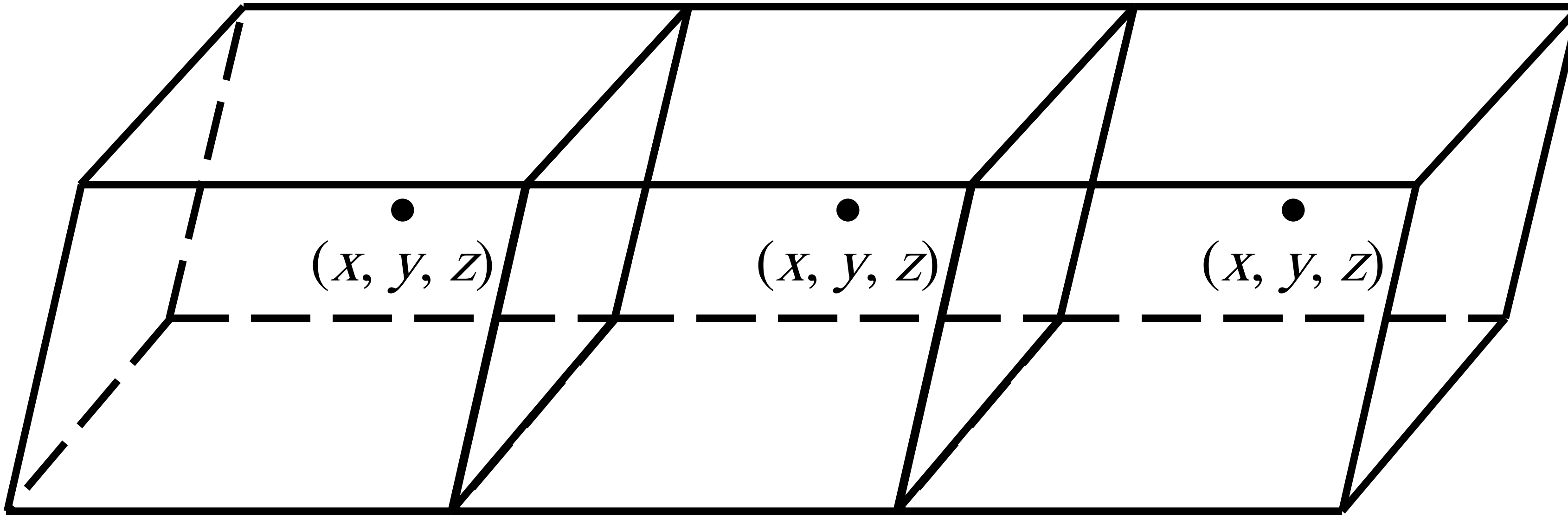
(4)如此建立了O-XYZ的晶体坐标系；a b c 称作晶体坐标晶轴。

(5) 当 $\begin{cases} 0 \leqslant x < 1 \\ 0 \leqslant y < 1 \\ 0 \leqslant z < 1 \end{cases}$ 时，取其原子坐标为：(x, y, z)。

(6)具有a或b或c向量平移关系的质点具有相同的原子坐标。

以上讨论均是在晶胞中讨论，晶体中的原子坐标如何？

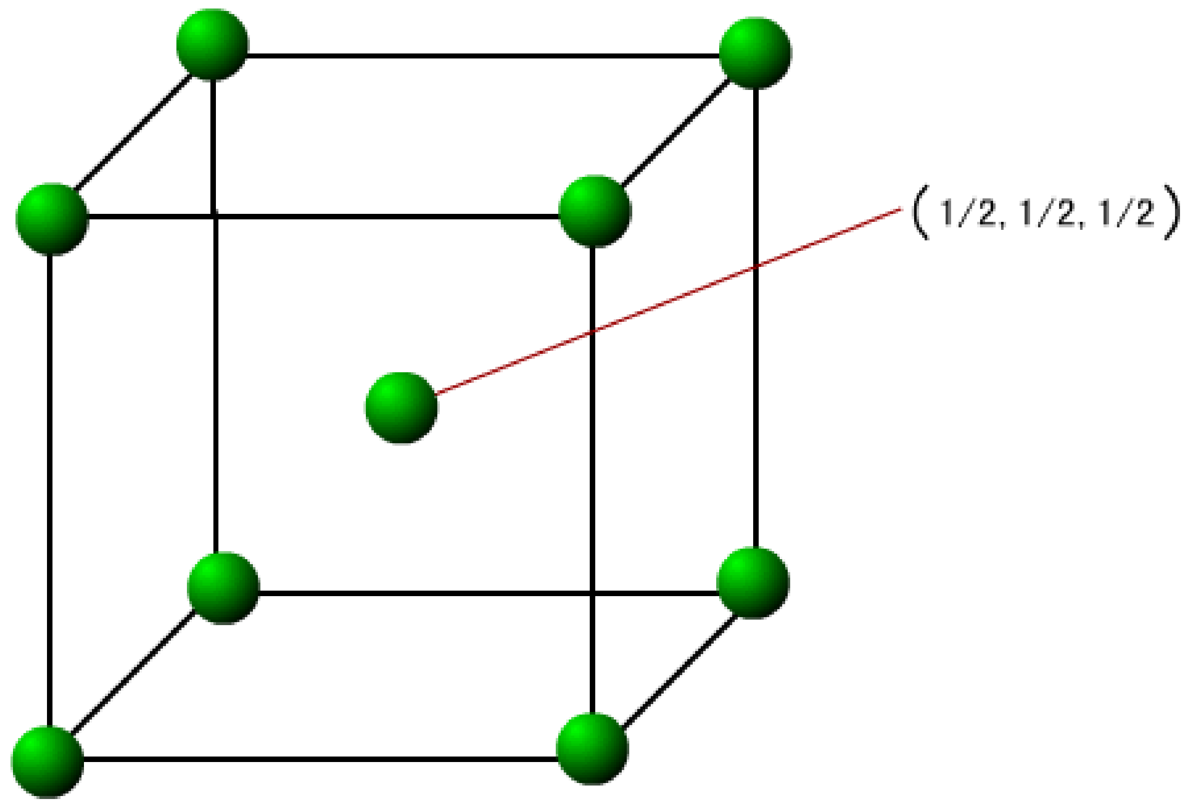
4.1 整个晶体中的原子坐标



一个晶胞中所含有的原子坐标，与整个晶体所含有的原子坐标相同。

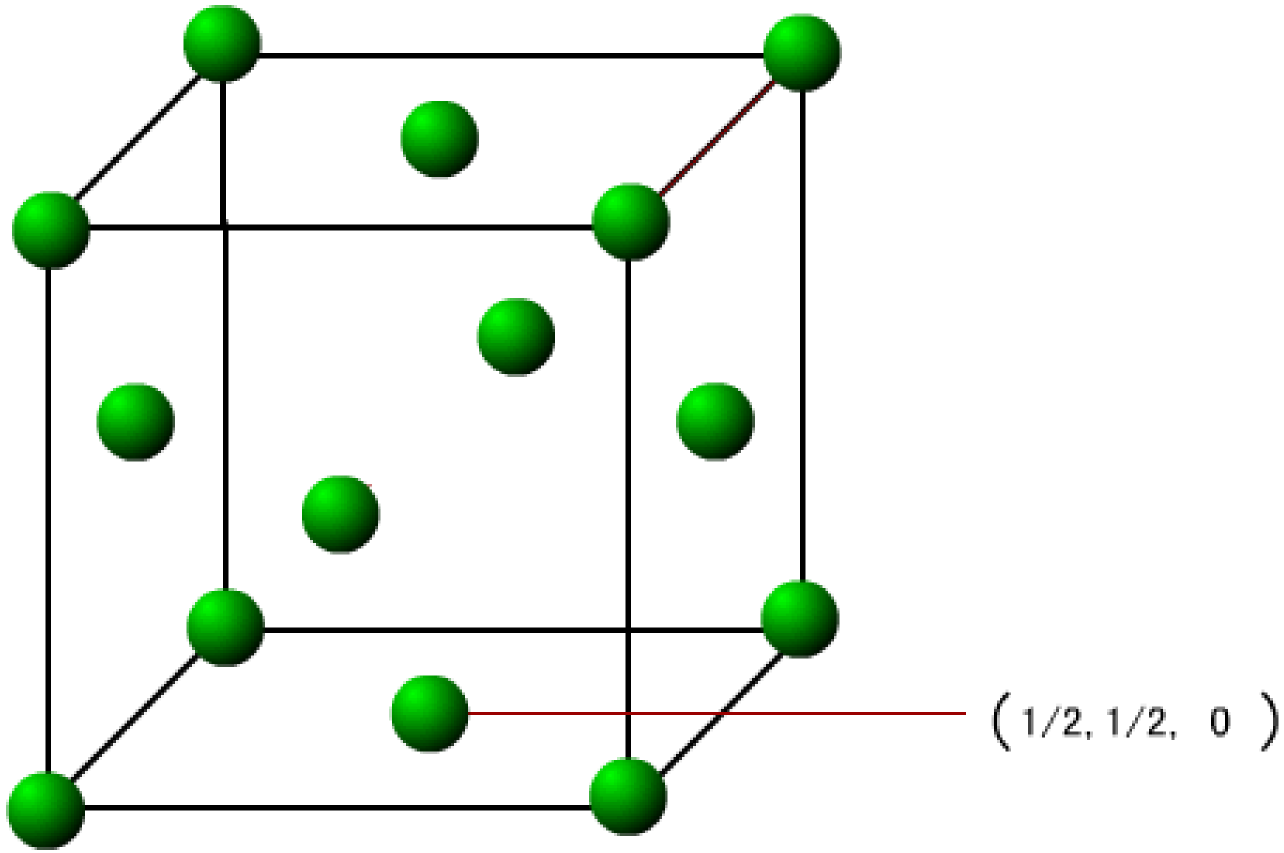
整个晶体中属于相同原子坐标的质点，满足晶胞棱向量*a*或*b*或*c*向量平移关系。

具有体心立方格子的晶胞，原子坐标：$(0,0,0)$ $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$

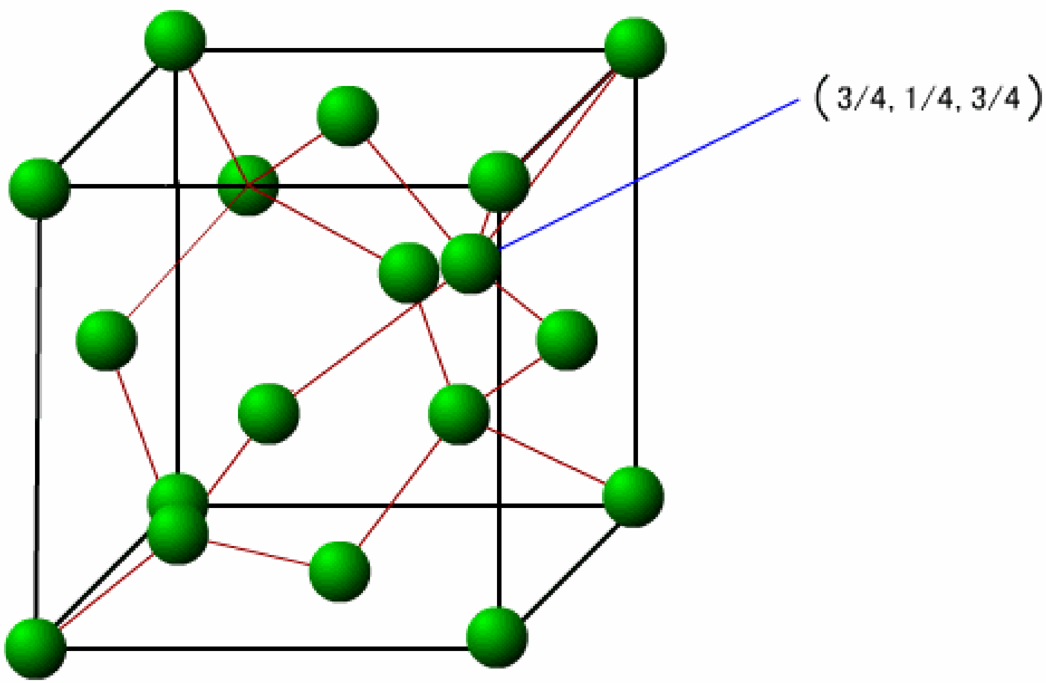


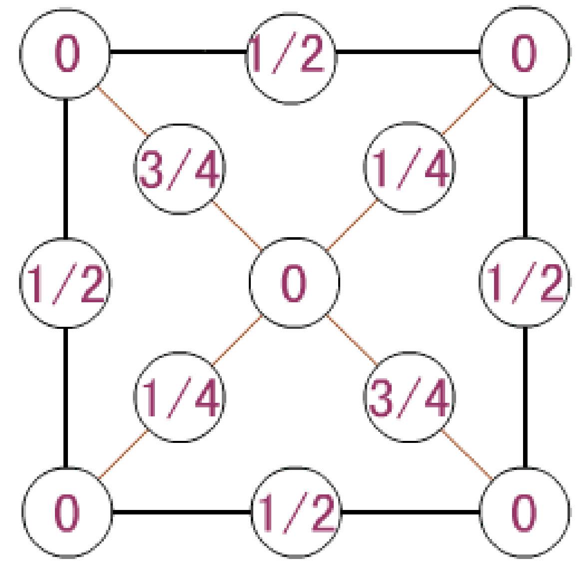
具有面心立方格子的晶胞，原子坐标：

$$(0,0,0)\quad (\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$$



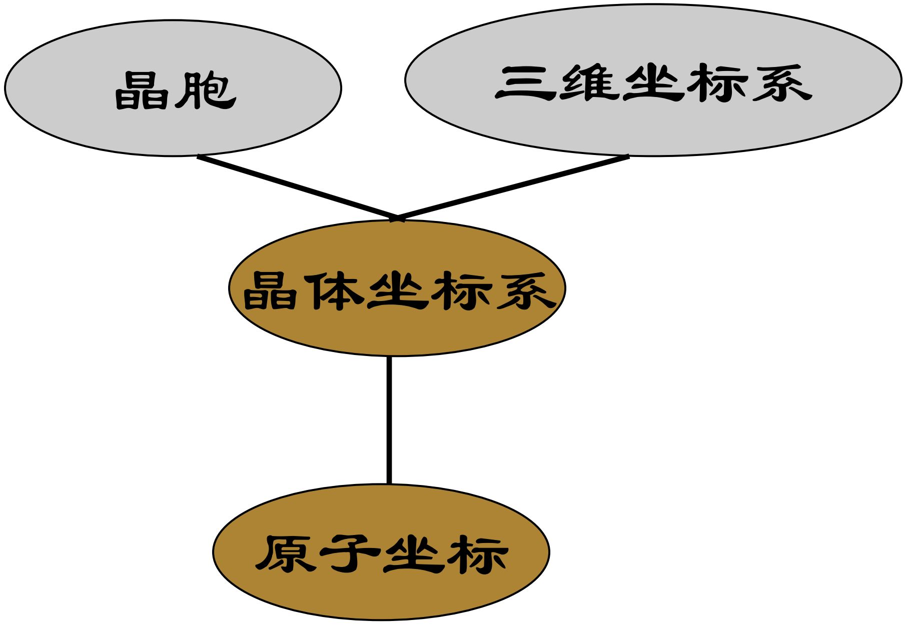
金刚石的晶胞，原子坐标：(0, 0, 0) (1/4, 1/4, 1/4) (3/4, 3/4, 1/4) (1/4, 3/4, 3/4) (3/4, 1/4, 3/4) $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$





有时，也可以将原子的位置投影到晶胞结构的底面上，以数字标明它所在位置的高度。

4.1 小结



这为描述晶体中各粒子的相对位置关系提供了一个很简便又较严谨的方法，广泛被大家接受。

4.2 晶面及晶面指数

晶体中**晶面**：　含有多于三个质点的平面。

相邻两层平行晶面之间的距离，称**晶面间距**。

晶面上单位面积上的质点个数称作**晶面的面密度**。

不平行的晶面之间的夹角称作**晶面夹角**。

在同一晶体的格子结构中，沿不同方向可以构成许多组这样相互平行的晶面，不同晶面间彼此相差一定角度，并且他们的晶面间距、面密度及质点种类、价键密度也不同，这将导致这些晶面的物理、化学性质有所不同。

为区分晶体这些晶面，结晶学上人们用晶面指数来描述。显然晶胞中包含了晶体中各种晶面。

确定晶面指数的三个步骤(采用前述晶体坐标系):

(1)该晶面与X, Y, Z轴相交的长度

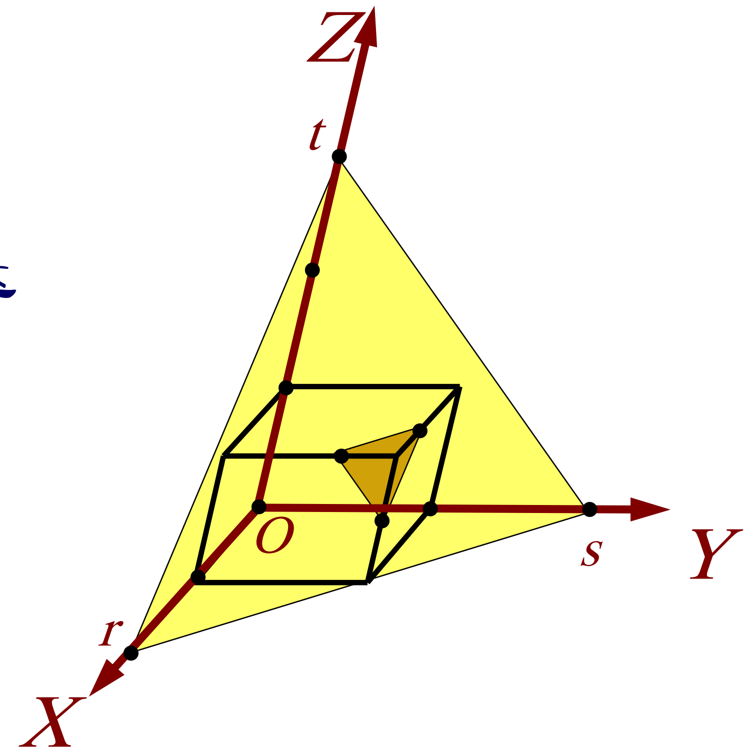
r, *s*, *t*;

(2)分别取其倒数 *1/r*, *1/s*, *1/t*, 并对这

三个分数进行通分;

(3)通分后三个分数的分子就是这个

晶面的晶面指数 *h k l*。



这种晶面指数又称密勒指数。

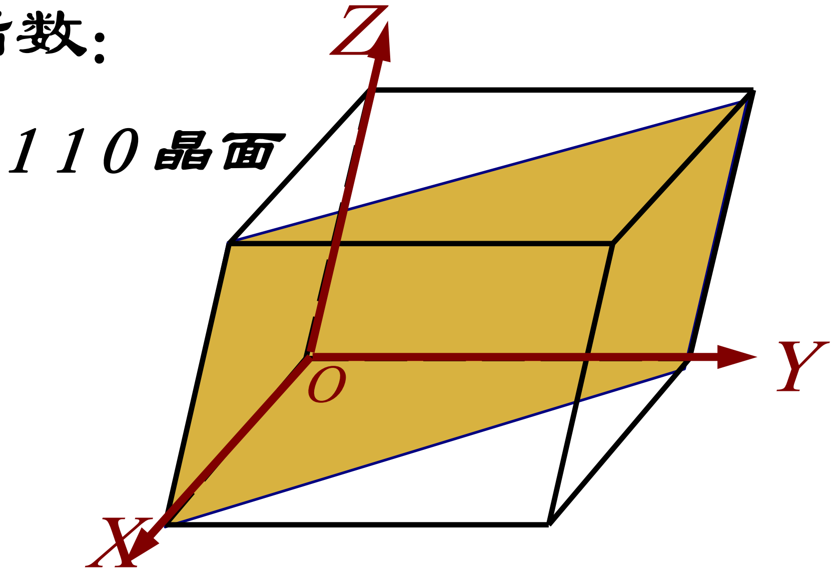
例如图中晶面的晶面指数为:

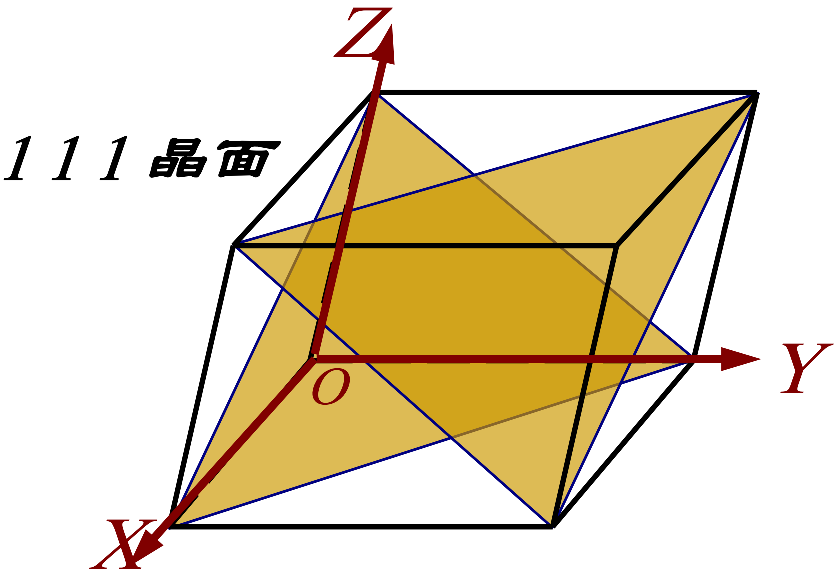
$$2,2,3 \rightarrow \frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{3} \rightarrow \frac{3}{6},\frac{3}{6},\frac{2}{6} \rightarrow (332)$$

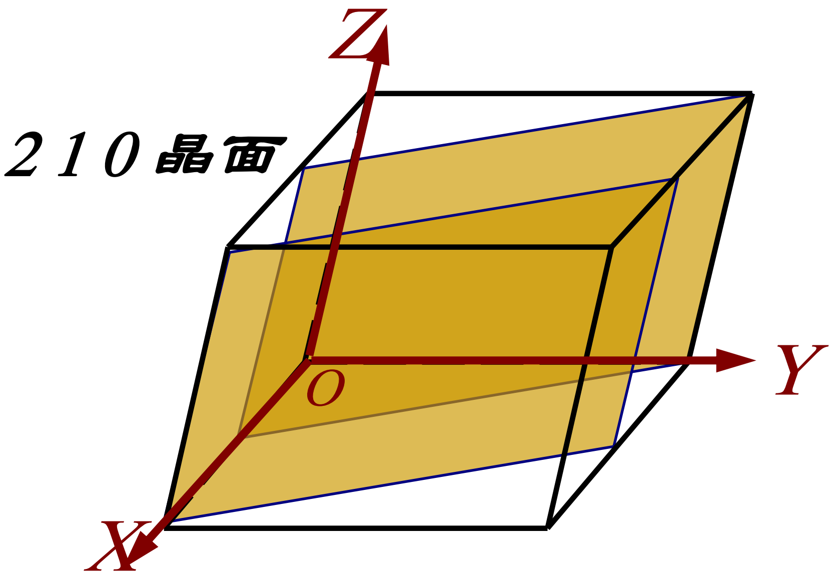
简单说晶面指数:“晶体坐标系下,截距倒数通分取分子”

请写出下列晶面的晶面指数:

当晶面和晶轴平行时，认为该晶面与晶轴在无穷远处相交，截距∞。

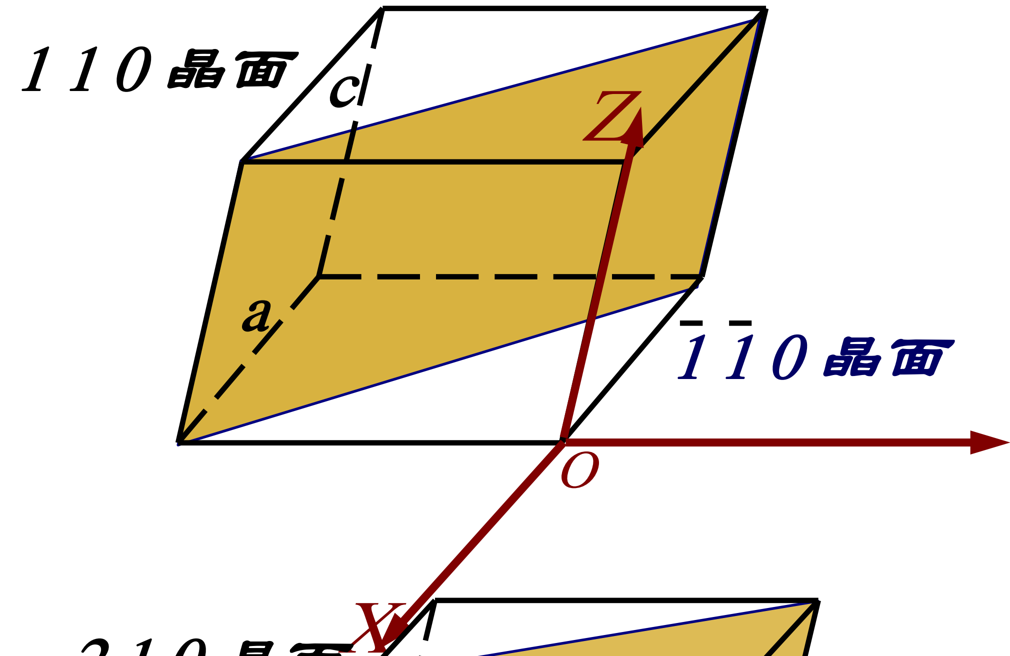


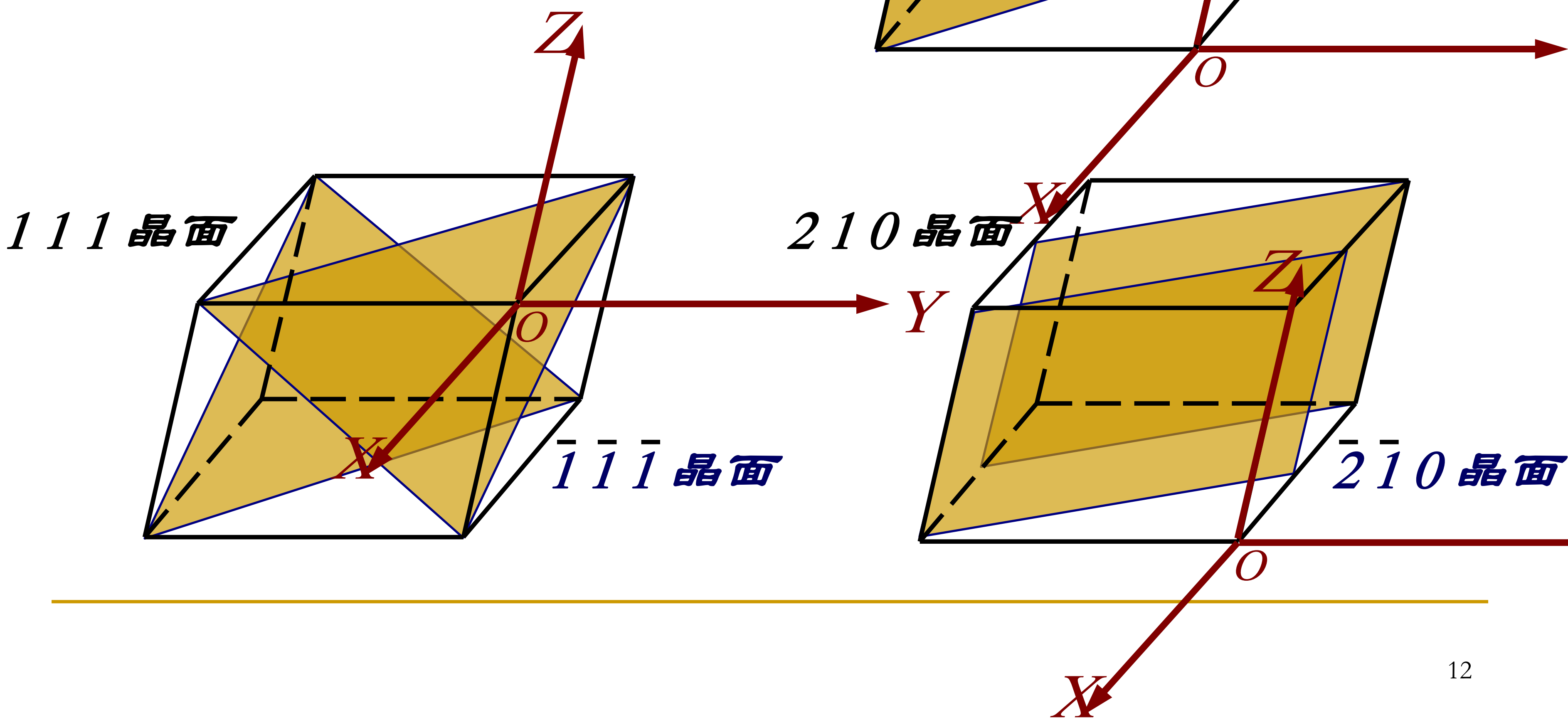




请写出下列晶面的晶面指数:

晶面与某一晶轴的负方向相交，则相应的指数上加一个负号。

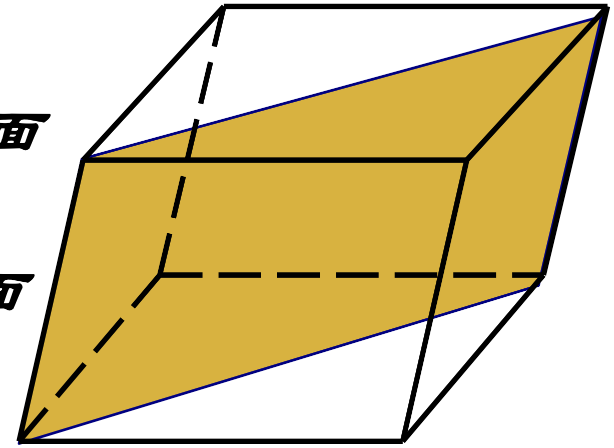




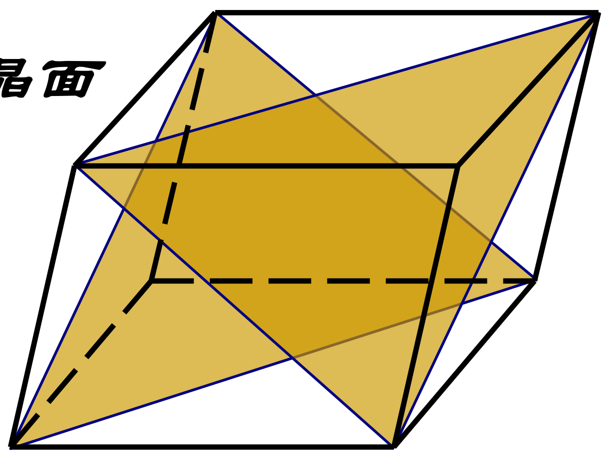
坐标原点的选择对晶面指数有明显的影响：

原点选在不同顶点时，只影响晶面指数的整体正负符号。

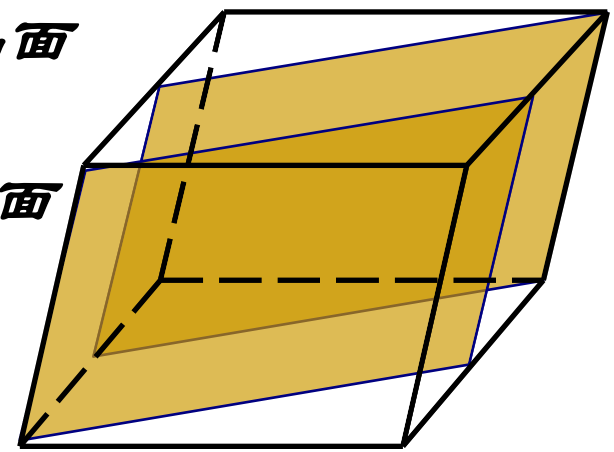
110 晶面
或
$\bar{1}\bar{1}0$ 晶面



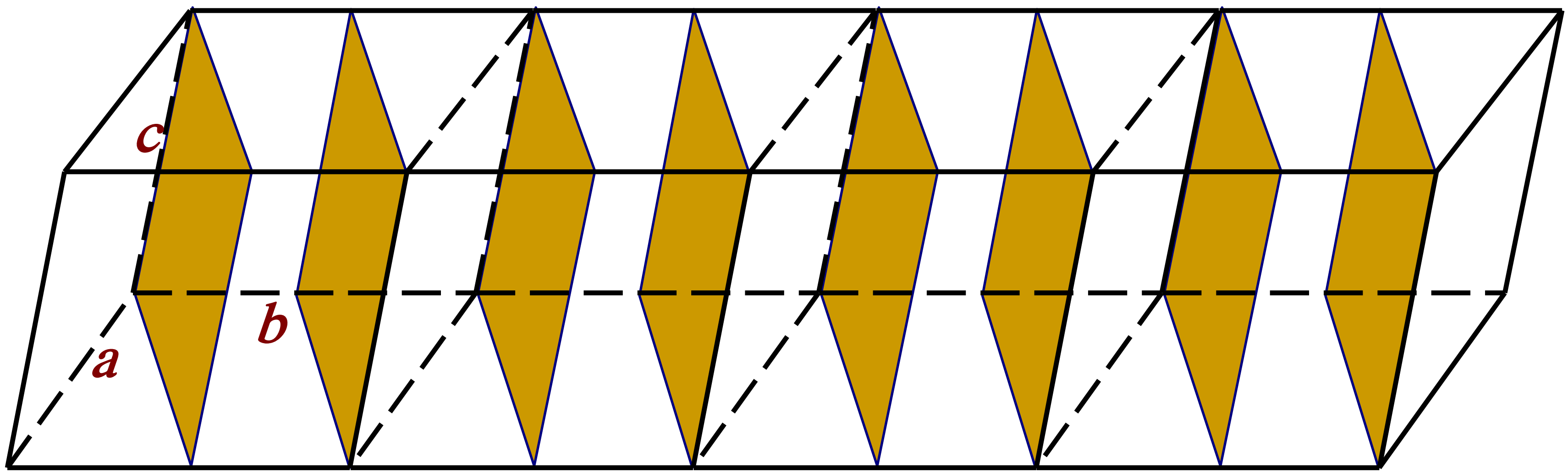
111 晶面
或
$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ 晶面



210 晶面
或
$\bar{2}\bar{1}0$ 晶面



晶体中的晶面:



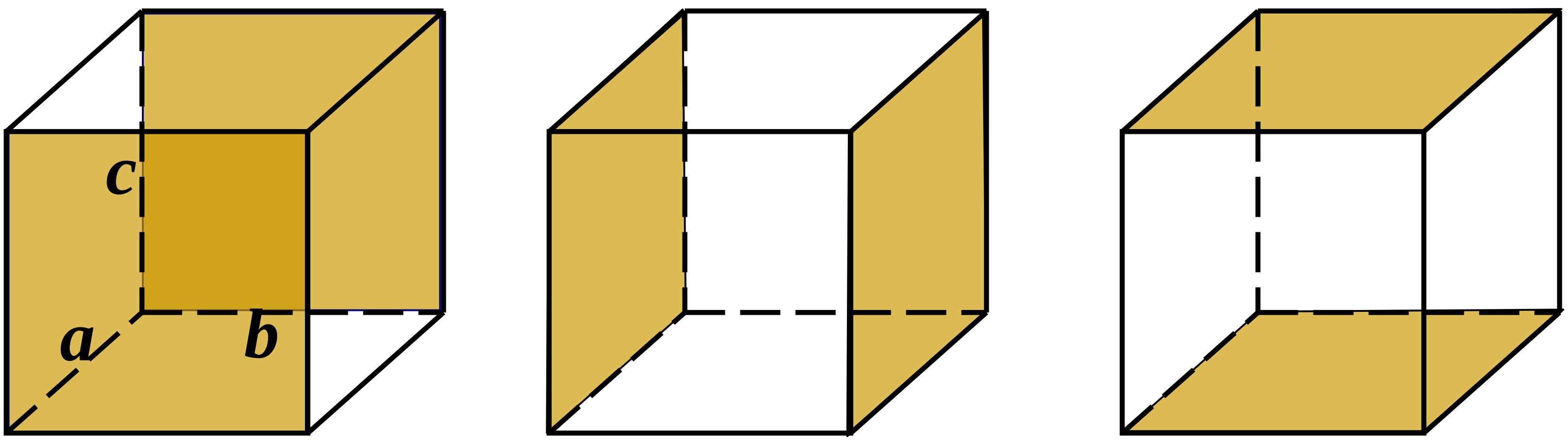
$(1\,\bar{2}\,0)$晶面 或 $(\bar{1}\,2\,0)$晶面

按照晶体的周期性，无穷多个晶胞并构便可以构成整个晶体。因此一个晶胞中若具有某晶面*h, k, l*，整个晶体中就有许许多多这样的晶面。他们是相互平行等间距的。写作 $(h\,k\,l)$，表示的是一组平行晶面。

若考虑到晶体所具有的对称性，有许多不平行的晶面上也具有相同的质点分布。这些晶面是彼此等同的，我们把它们称作一个**晶面族**，记做{h k l}。

例如：立方晶系的晶体具有特征对称要素 $4\ \underline{3}$,

{1 0 0}包含(100) (010) (001) $(\bar{1}00)$ $(0\bar{1}0)$ $(00\bar{1})$ 共六种晶面。



(100)或$(\bar{1}00)$　　(010)或$(0\bar{1}0)$　　(001)或$(00\bar{1})$

立方晶系中有:

{100}包含以下6个晶面:

$(100)\ (010)\ (001)\ (\bar{1}00)\ (0\bar{1}0)\ (00\bar{1})$

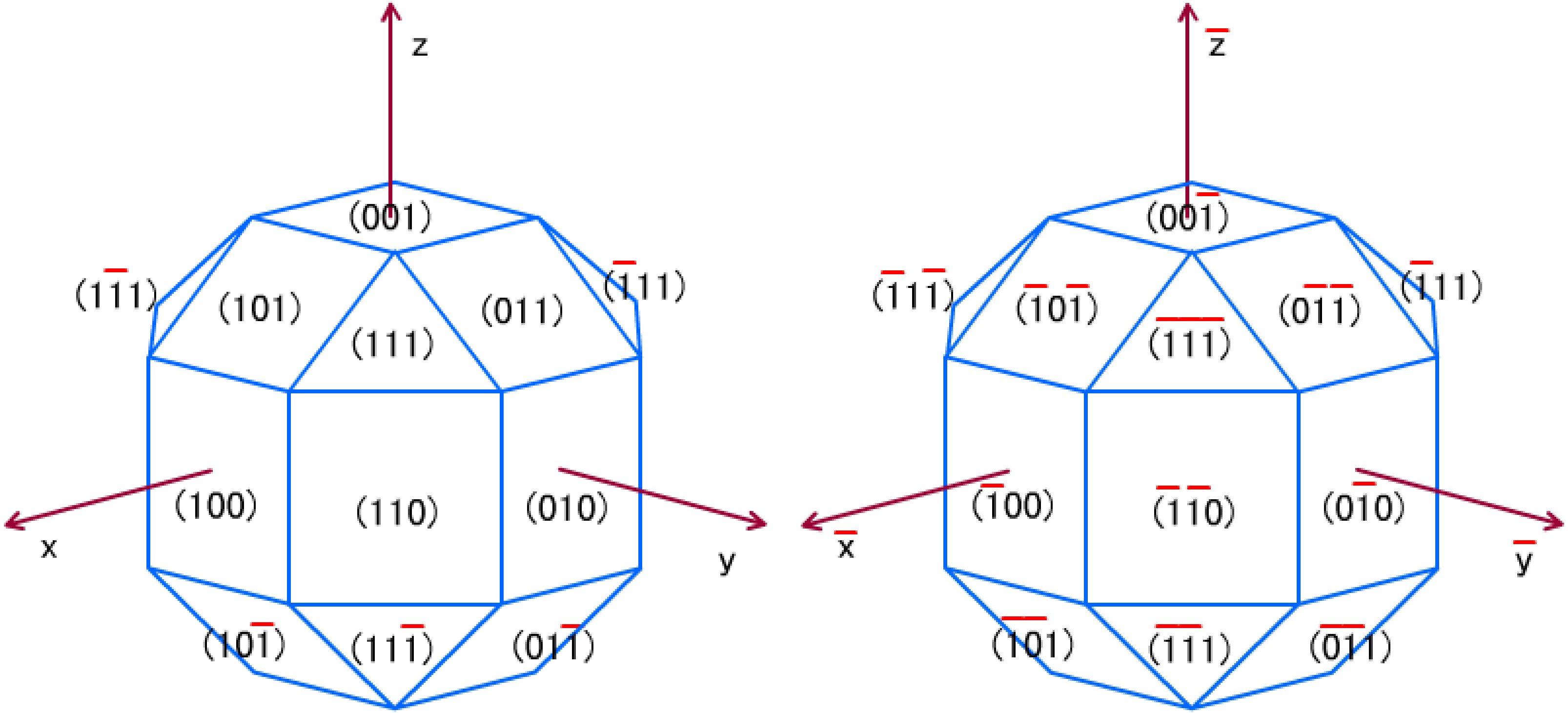
{110}包含以下12个晶面:

$(110),(101),(011),(\bar{1}10),(\bar{1}01),(0\bar{1}1),(1\bar{1}0),(10\bar{1}),(01\bar{1}),(\bar{1}\bar{1}0),(\bar{1}0\bar{1}),(0\bar{1}\bar{1})$

{111}包含以下8个晶面:

$(111),(\bar{1}11),(1\bar{1}1),(11\bar{1}),(\bar{1}\bar{1}1),(\bar{1}1\bar{1}),(1\bar{1}\bar{1}),(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$

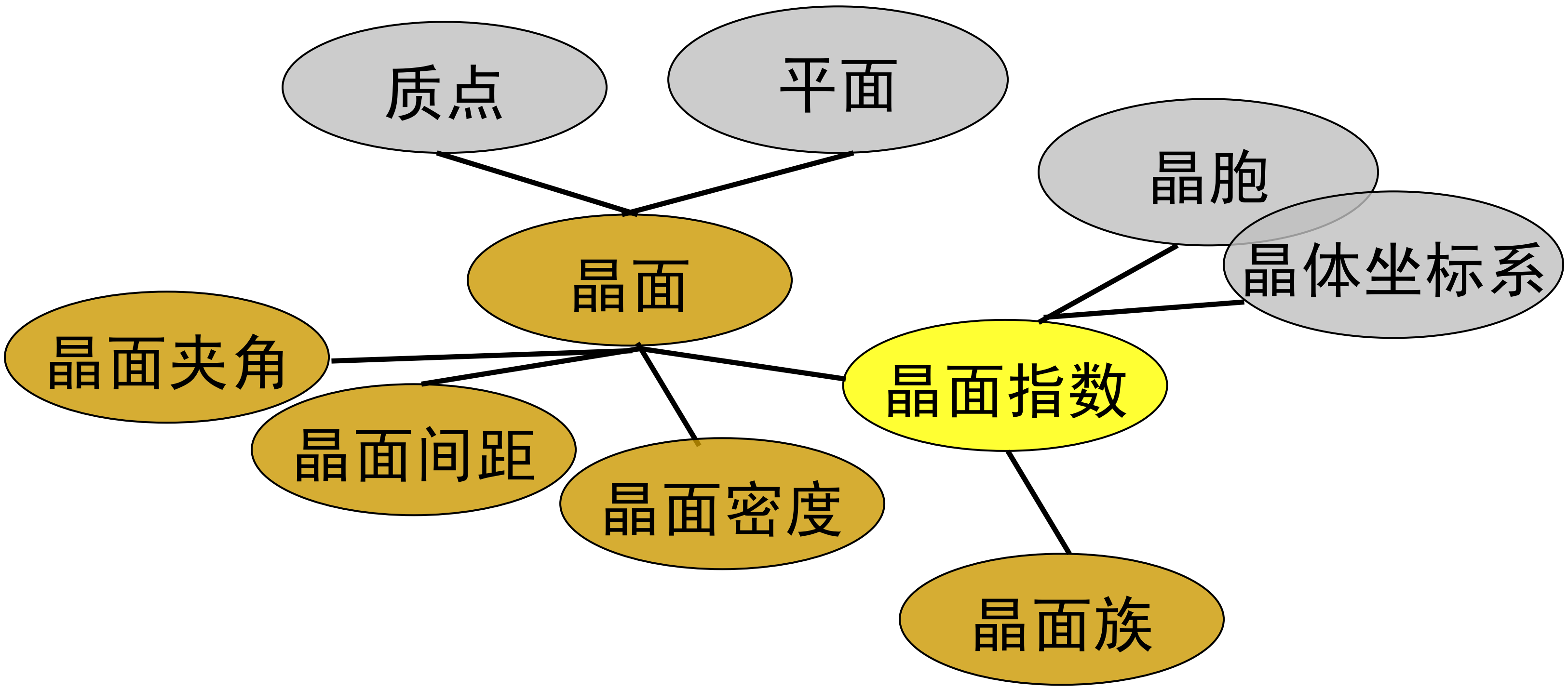
以上三个晶面族的26个晶面是立方晶系晶体中**最常用的晶面**。



立方晶系中六个等同的{100}晶面，十二个等同的{110}晶面，八个等同的{111}晶面的方向，可以用一个26面体表示出来。

(第三次实习内容)

4.2 小结



4.3 晶向及晶向指数

晶向是指在晶体中任何一条穿过许多质点的直线方向。

晶体中不同的晶向，常常具有不同的**线密度**等不同属性。

为区分晶体这些晶向，结晶学上人们引入晶向指数。

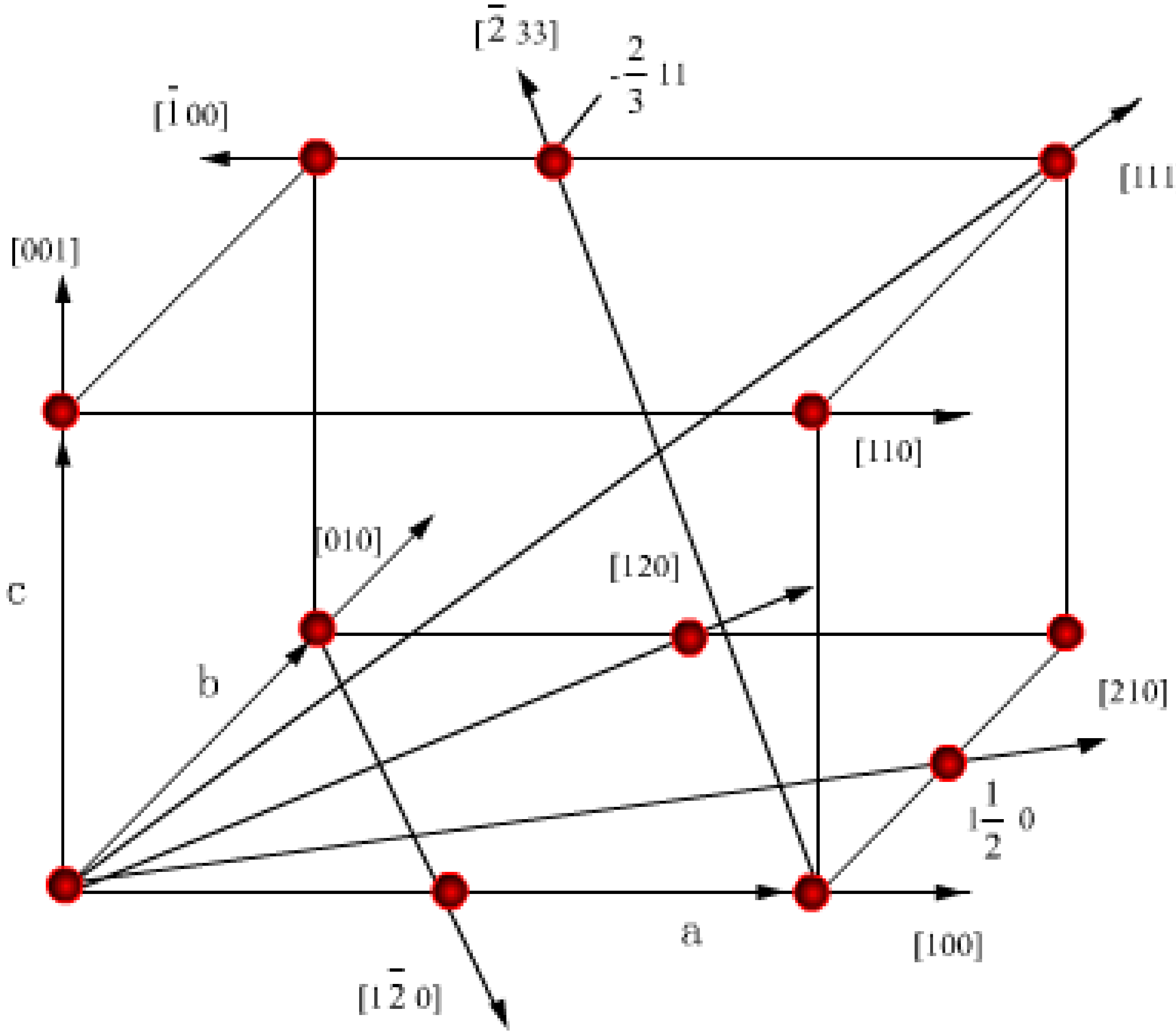
确定晶向指数的三个步骤(采用上述晶体坐标系):

1)先做一条平行于该晶向的直线，并使其通过坐标原点;

2)在这条直线上任取一点，求其原子坐标;

3)化为最简整数比，即为晶向指数；用$[m\ n\ w]$表示

简单的说：**晶向上某质点原子坐标的最简整数比**



[$\bar{2}$ 33]
$-\frac{2}{3}$ 1 1
[$\bar{1}$00]
[111]
[001]
[110]
[010]
[120]
c
b
[210]
1 $\frac{1}{2}$ 0
a
[100]
[1 $\bar{2}$ 0]

图4.3.1 晶向举例

考虑晶体对称性，也有若干个晶向常常是等同的。它们构成一个**晶向族**，用<$m\ n\ w$>来表示这一系列的晶向。

例如：对于立方晶系

<100> 包含**六个**晶向；

$$[100],[010],[\bar{1}00],[0\bar{1}0],[001],[00\bar{1}]$$

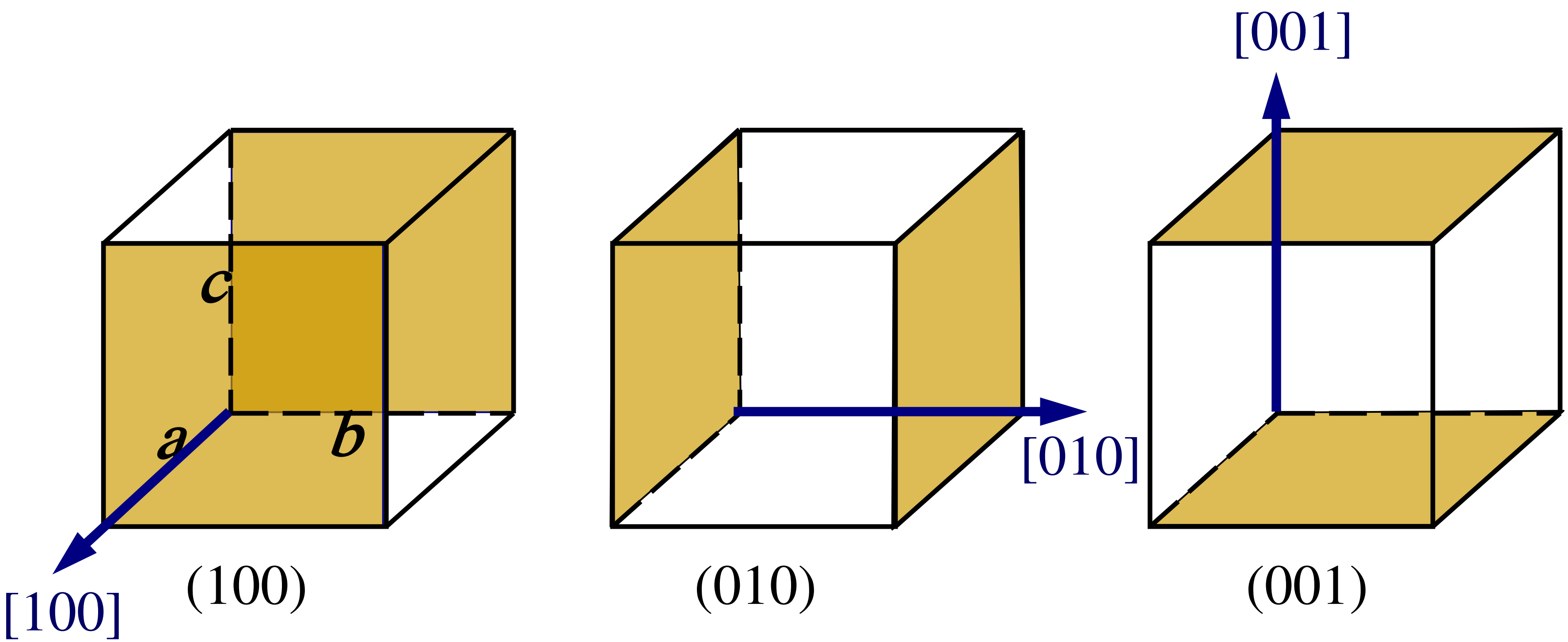
<110>包含**八个**晶向

$$[110],[101],[011],[\bar{1}10],[\bar{1}01],[0\bar{1}1],[1\bar{1}0],[10\bar{1}],[01\bar{1}],[\bar{1}\bar{1}0],[\bar{1}0\bar{1}],[0\bar{1}\bar{1}]$$

<111>包含**十二个**晶向；

$$[111],[\bar{1}11],[1\bar{1}1],[11\bar{1}],[\bar{1}\bar{1}1],[\bar{1}1\bar{1}],[1\bar{1}\bar{1}],[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$$

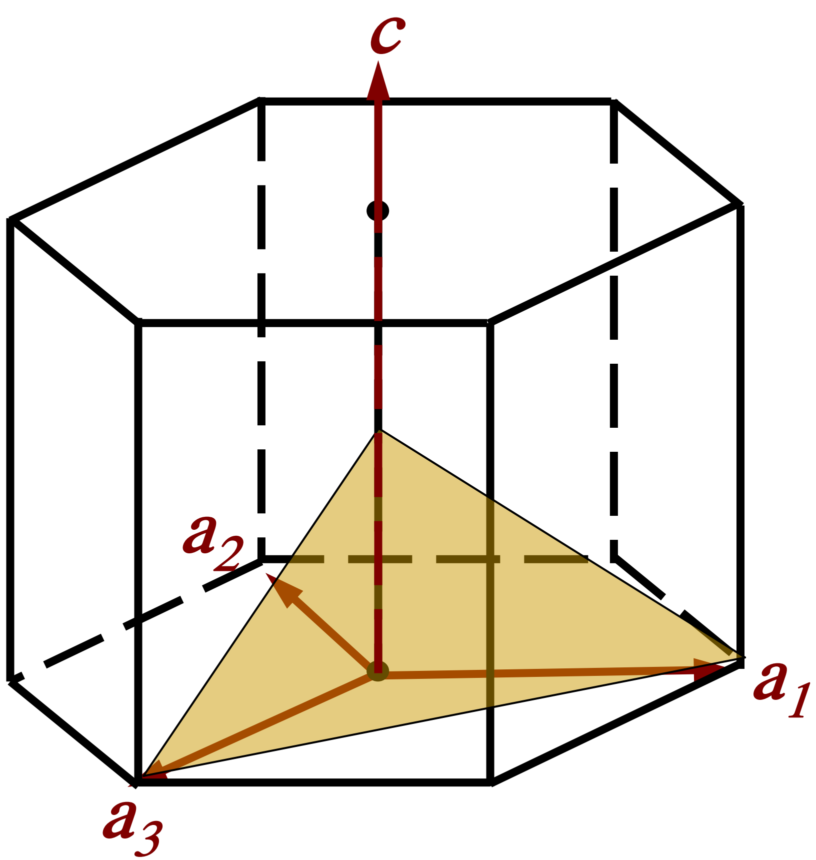
在立方晶系中，由于晶胞参数(a, b, c, a, b, g)的特殊关系，某一晶面($h\ k\ l$)与指数相同的晶向[$h\ k\ l$]恰好垂直。



但在其他晶系中，这一关系不一定存在。

六方惯用晶胞中的晶面指数——特殊情况

常常使用四个晶轴a_1 a_2 a_3 c所组成的坐标系统。由此确定**四个**坐标指数表示晶面，被称为**密勒布喇菲指数**$(h\,k\,i\,l)$。



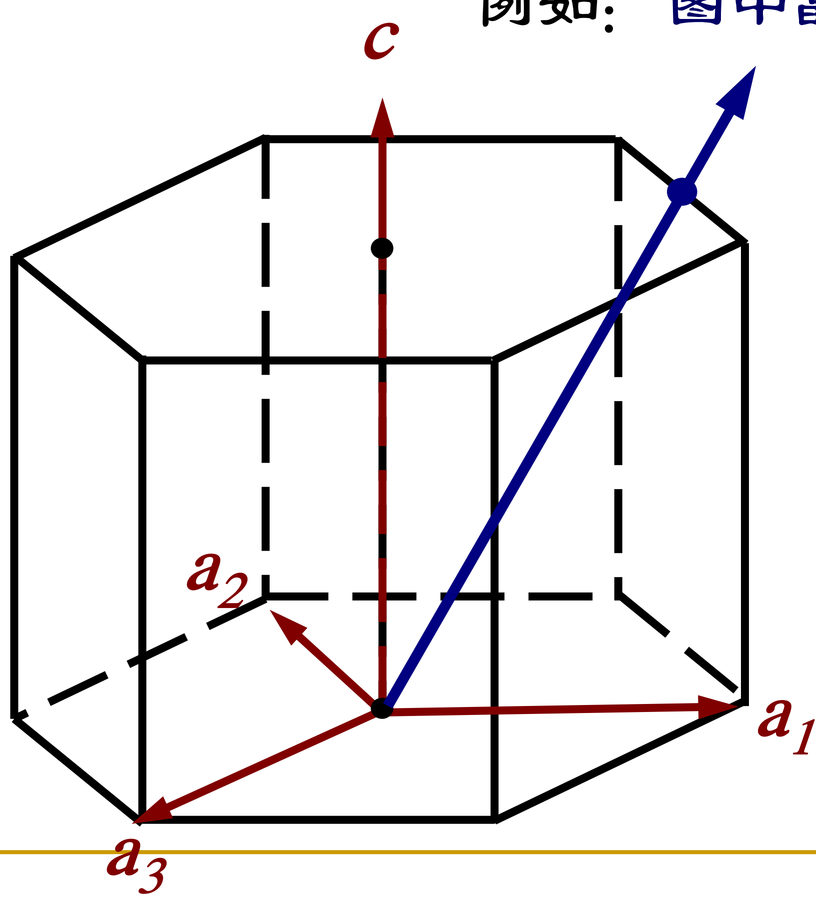
例如图中黄色晶面的密勒布拉菲指数为：$(1\bar{2}12)$

$h\ k\ i\ l$四个指数中，只有三个是独立的，其中$h+k+i=0$。

六方惯用晶胞中的晶向指数——特殊情况

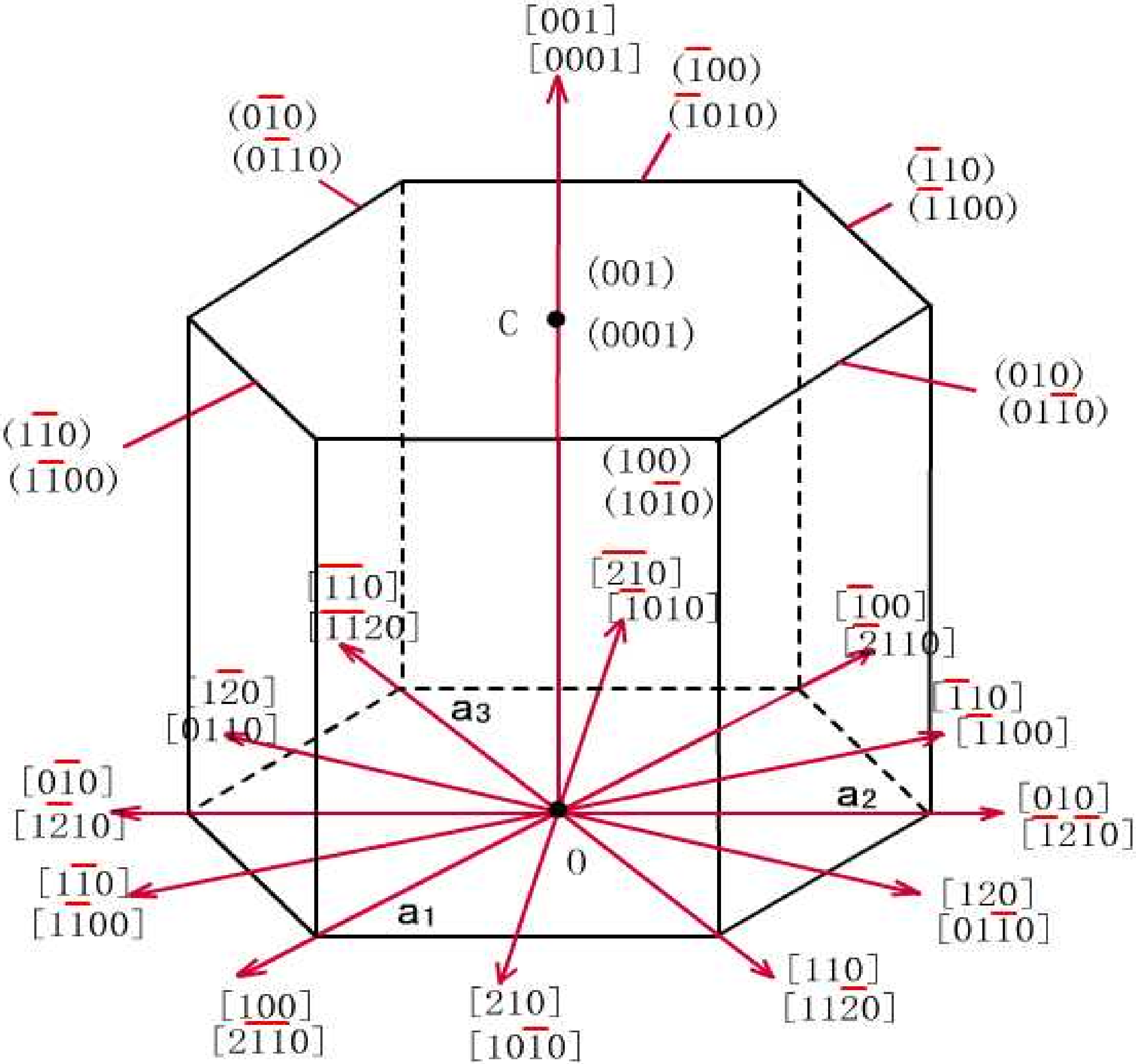
在六方晶系中，**晶向**最好用a_1、a_2、c三个晶轴坐标系表示，即$[u\ v\ w]$。

例如：**图中晶向的晶向指数为：[2 1 2]**



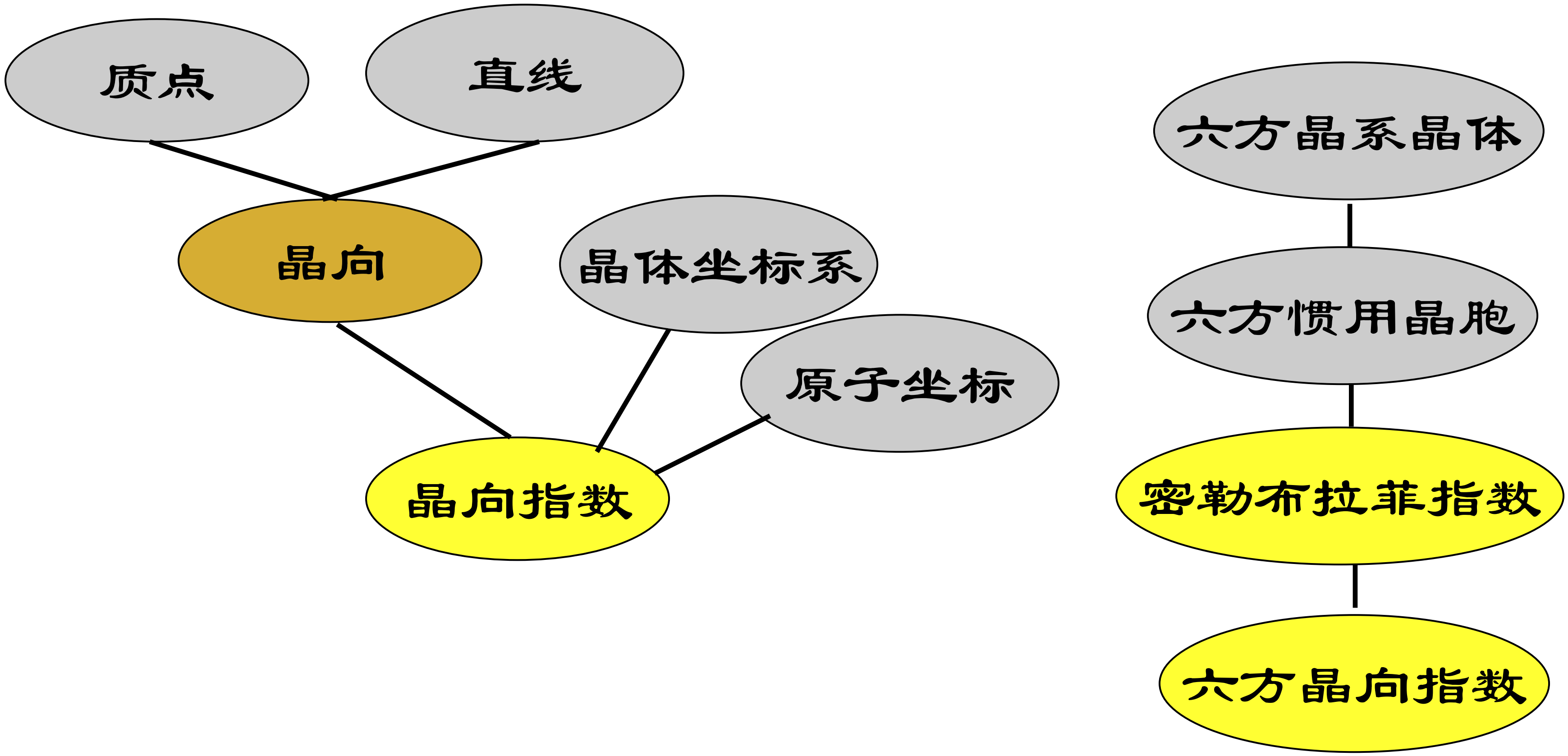
但也有用a_1、a_2、a_3，c四个晶轴坐标系统表示的即$[u\ v\ t\ w]$。四个坐标指数满足：$u + v + t = 0$

例如：**图中晶向的晶向指数为：** $[2\ 1\ \bar{3}\ 2]$;



六方晶系中的晶面与晶向

4.3 小结



4.4 倒易点阵

研究倒易点阵的目的：

(1)更清楚地了解X射线在晶体衍射中的几何概念；

(2)更容易理解晶面的存在及其坡度、晶面间距等问题；

(3)倒易点阵也是固体物理学中讨论能带理论的重要方法；

倒易点阵本身是一种几何构图，是一种数学变换。

如果两个点阵(即晶体点阵和倒易点阵)有一个共同的原点O。

(1) 晶体点阵中$(h\ k\ l)$晶面在倒易点阵中用一点P_{hkl}来表示，原点O与点P_{hkl}连线垂直于$(h\ k\ l)$晶面；

(2) 原点O与点P_{hkl}之间距离为 $OP_{hkl} = H_{hkl} = 1/d_{hkl}$，式中$d_{hkl}$是$(h\ k\ l)$晶面的晶面间距。有时放大K倍取$OP_{hkl}=K/d_{hkl}$。

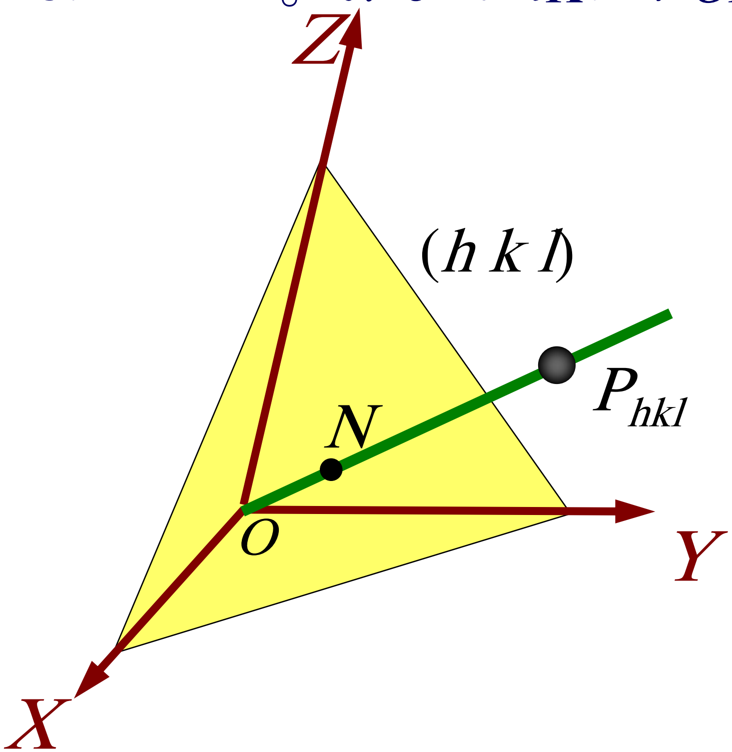


图4.4.1 正点阵与倒易点阵的转化图示

注意:

(1)此坐标系，选点阵的一组素向量(素单位的棱向量)作为坐标轴方向和单位。并借此定义晶面指数。

(2)并假设此晶体中含有任意晶面指数的晶面（质点密实）。

晶体质点密实:

晶面间距d_{hkl}是$(h\ k\ l)$晶面中最相邻晶面的距离。

例：(100)、(200)、(300) 的晶面间距d_{100}、d_{200}、d_{300}

$d_{100} = D$

$d_{200} = D/2$

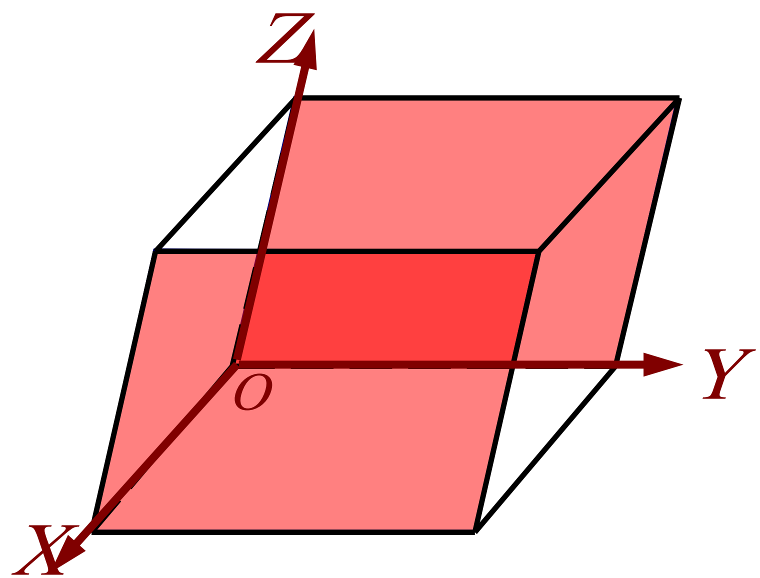
$d_{300} = D/3$

•

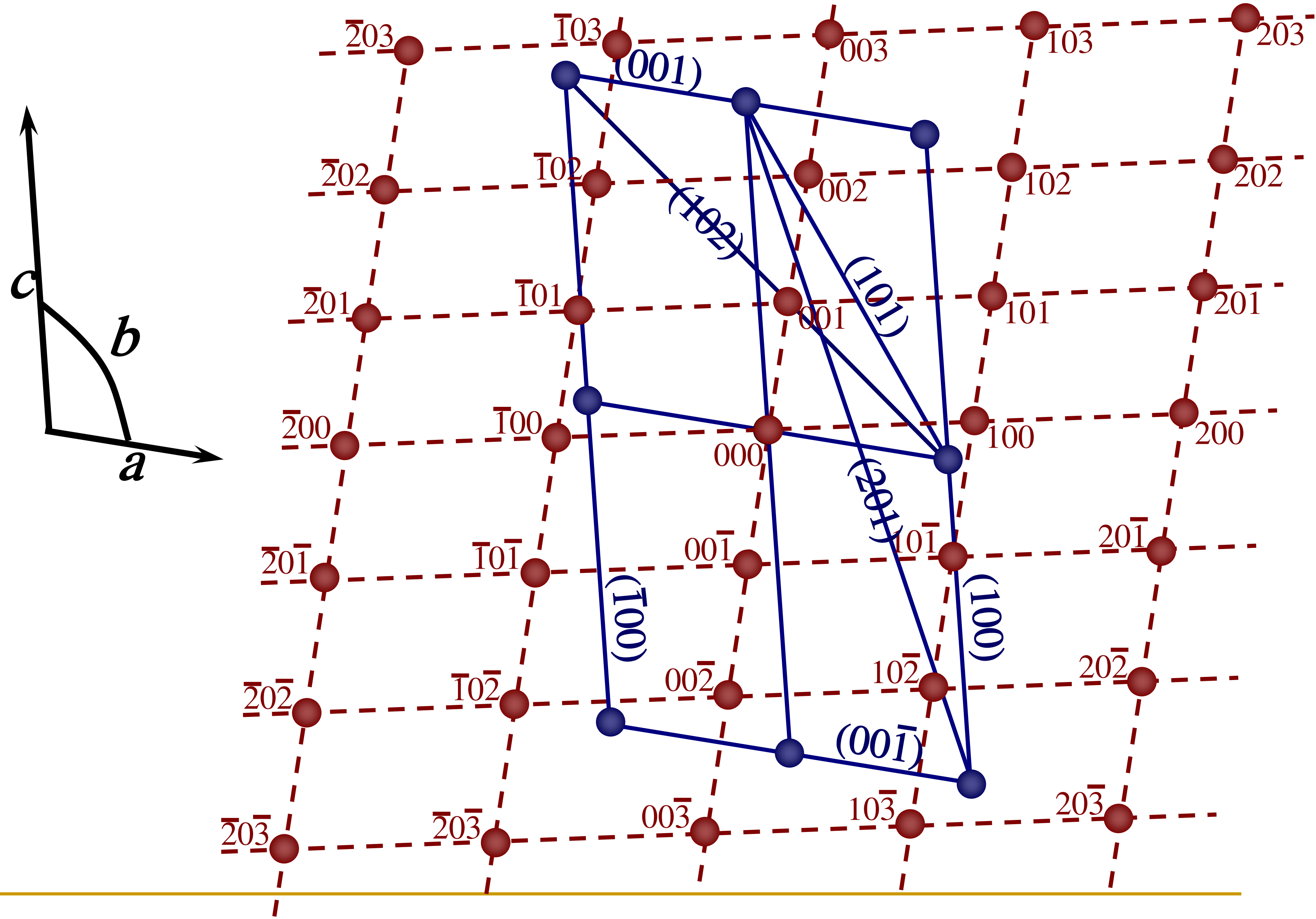
•

•

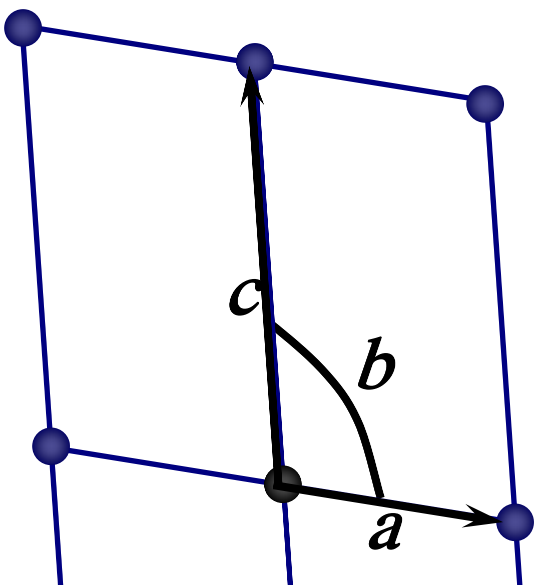
$d_{n00} = D/n$

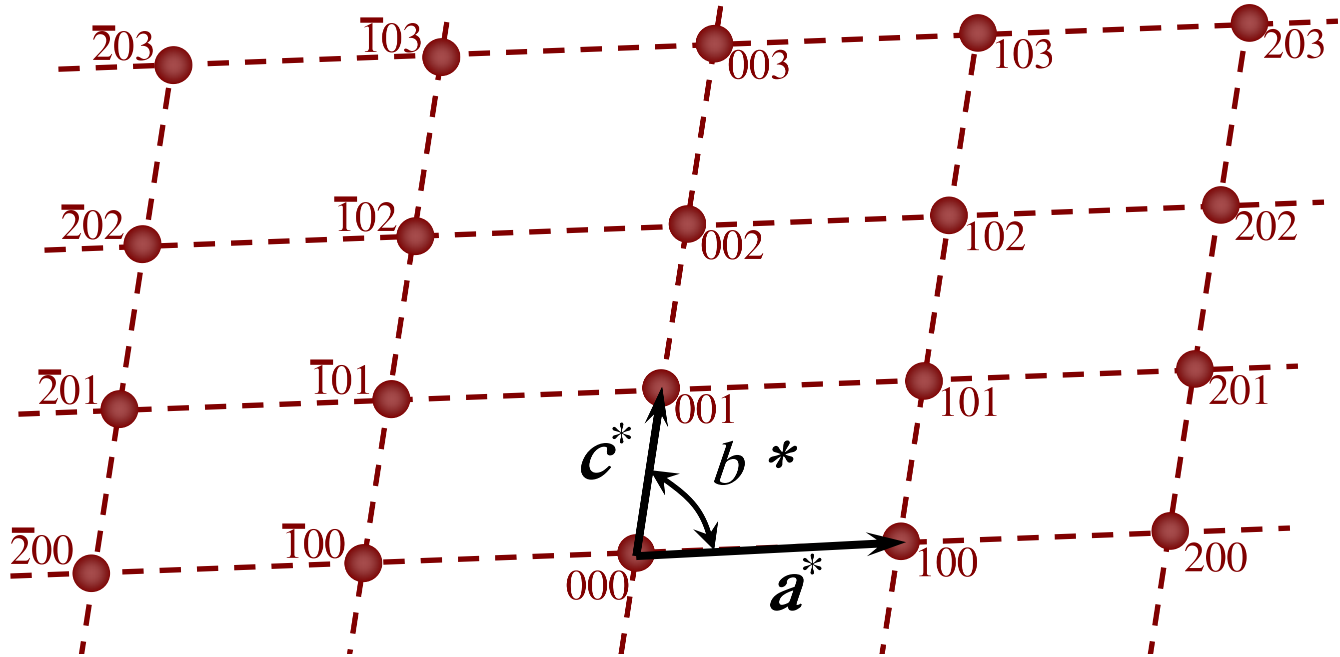


简单单斜格子的正格子和倒格子。



简单单斜格子的正格子和倒格子。





正格子：简单单斜格子，a、b、c，$a = g = 90^{\circ} \neq b$

倒格子：简单单斜格子，$a^* = K/d_{100}$、$b^* = K/d_{010}$、$c^* = K/d_{001}$

$$a\,^* = g\,^* = 90^{\circ}\,,\quad b\,^* = 180^{\circ} - b$$

对任意点阵，其正格子与倒格子的晶轴夹角都是互为补角关系。

以上为倒格子的几何学定义，这种方法十分直观。

4.4.1 倒易点阵的矢量分析

标积(点乘)： $a \cdot b = ab\cos q$　　　$a \cdot b = b \cdot a$

矢积(叉乘)： $a \times b = ab\sin q$　　　$a \times b = -(b \times a)$

混合积： $[abc] = (a \times b) \cdot c = a \cdot (b \times c)$

$$(a \times b) \cdot c = (b \times c) \cdot a = (c \times a) \cdot b = -(b \times a) \cdot c = -(c \times b) \cdot a = -(a \times c) \cdot b$$

$$[abc] = [bca] = [cab] = -[bac] = -[cba] = -[acb]$$

$$[aba] = [aab] = [baa] = (a \times b) \cdot a = (a \times a) \cdot b = (b \times a) \cdot a = 0$$

混合积的几何意义：

矢量的混合积 $[abc] = (a \times b) \cdot c$ 是这样的一个数，它的绝对值表示以矢量 a、b、c 为棱的平行六面体的体积。如果矢量 a、b、c 组成一个右手系，那么积的符号是正的，如果组成一个左手系，符号是负的。

4.4.1 倒易点阵的矢量分析

如果晶体点阵中的三个晶轴矢量是 a、b、c(一组素向量)，相应的倒易点阵晶轴矢量是 a^*、b^*、c^*(一组素向量)。

可以如下式定义倒易点阵的三个晶轴矢量:

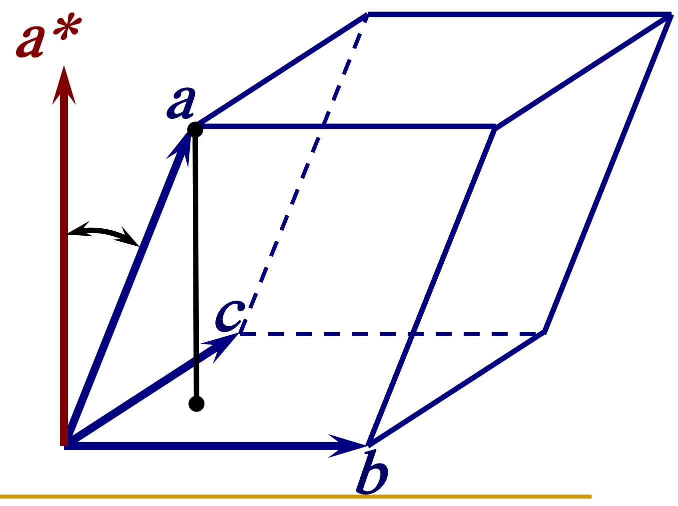
$$a^*\cdot b = a^*\cdot c = b^*\cdot a = b^*\cdot c = c^*\cdot a = c^*\cdot b = 0 \quad (\text{决定方向}) \qquad (4.4.2)$$

$$a^*\cdot a = b^*\cdot b = c^*\cdot c = 1 \quad (\text{决定长度}) \qquad (4.4.3)$$

式4.4.3也可写为:

$$a^* = \frac{1}{a\cos \widehat{aa^*}} \qquad b^* = \frac{1}{b\cos \widehat{bb^*}}$$

$$c^* = \frac{1}{c\cos \widehat{cc^*}}$$

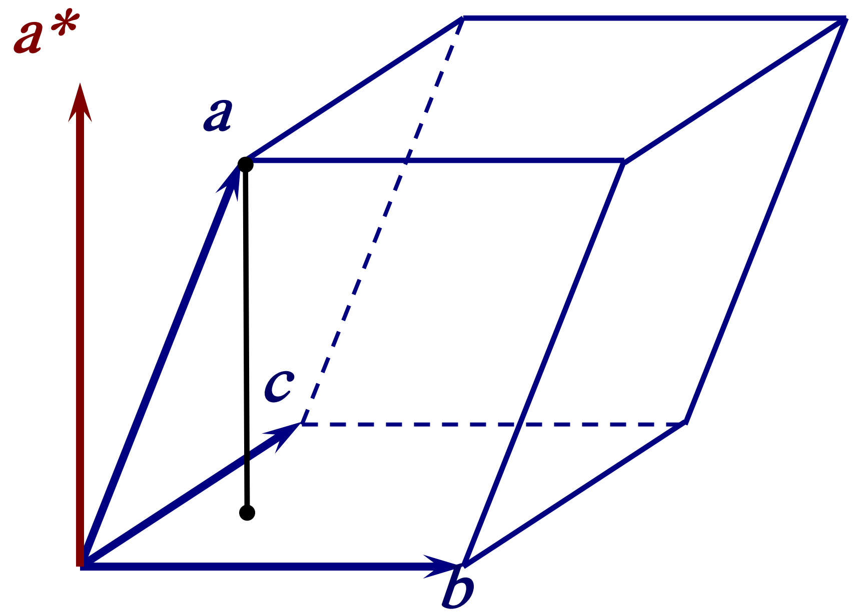


倒易矢量的另外一种定义

$$a^* = \frac{b\times c}{(a\times b)\cdot c} = \frac{b\times c}{[abc]}$$

$$b^* = \frac{c\times a}{(a\times b)\cdot c} = \frac{c\times a}{[abc]}$$

$$c^* = \frac{a\times b}{(a\times b)\cdot c} = \frac{a\times b}{[abc]}$$



我们把倒格子的这组素向量：

$$\boxed{a^* = \frac{b\times c}{[abc]} \qquad b^* = \frac{c\times a}{[abc]} \qquad c^* = \frac{a\times b}{[abc]}}$$

称作倒格基矢

以倒格基矢a^*、b^*、c^*为一组素向量可写出平移群：

$$H_{hkl} = ha^* + kb^* + lc^*$$ 其中h、k、$l = 0$，±1，$\pm2\cdots$

平移群是此倒易点阵的符号表示。可证明原点O到此点阵的任意结点H_{hkl}的向量H刚好满足前面对倒易点阵定义：$OH_{hkl} = 1/d_{hkl}$

证明： (1)若平面为晶面(hkl)中的一个平面，可写出它在晶轴上的截距：

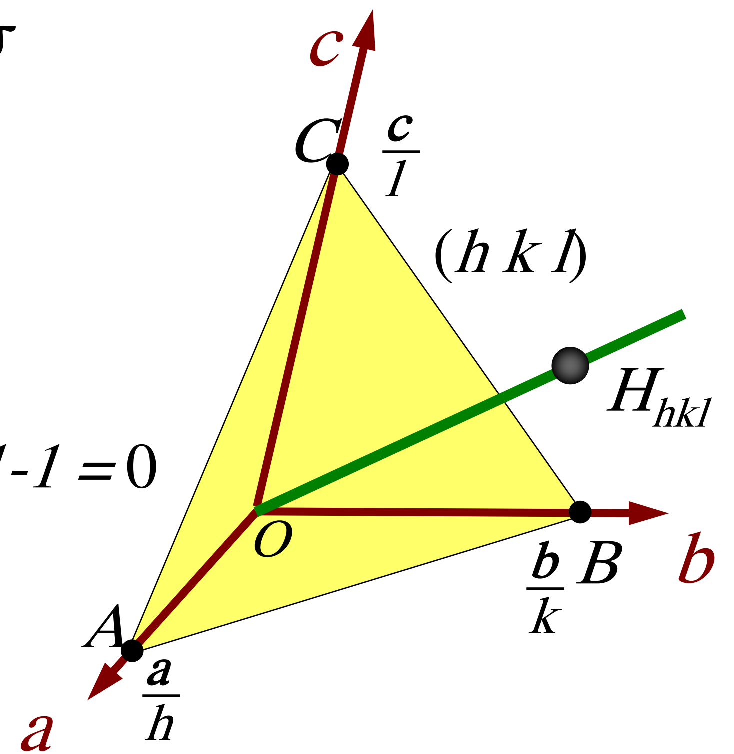
$$\overrightarrow{OA} = \frac{a}{h},\quad \overrightarrow{OB} = \frac{b}{k},\quad \overrightarrow{OC} = \frac{c}{l},$$

则：$$\overrightarrow{AB} = \overrightarrow{OB} - \overrightarrow{OA} = \frac{b}{k} - \frac{a}{h}$$

$$\because \overrightarrow{OH_{hkl}} \cdot \overrightarrow{AB} = (ha^* + kb^* + lc^*) \cdot \left(\frac{b}{k} - \frac{a}{h}\right) = 1 - 1 = 0$$

$\therefore \overrightarrow{OH_{hkl}} \perp \overrightarrow{AB}$，同理$\overrightarrow{OH_{hkl}} \perp \overrightarrow{BC}$

$\therefore \overrightarrow{OH_{hkl}} \perp$ 面ABC



(2)设$\boldsymbol{n}=\boldsymbol{H}/H$是沿$OH$方向的单位矢量，

$$\because\ \overrightarrow{OH}_{hkl}\perp \text{面}ABC$$

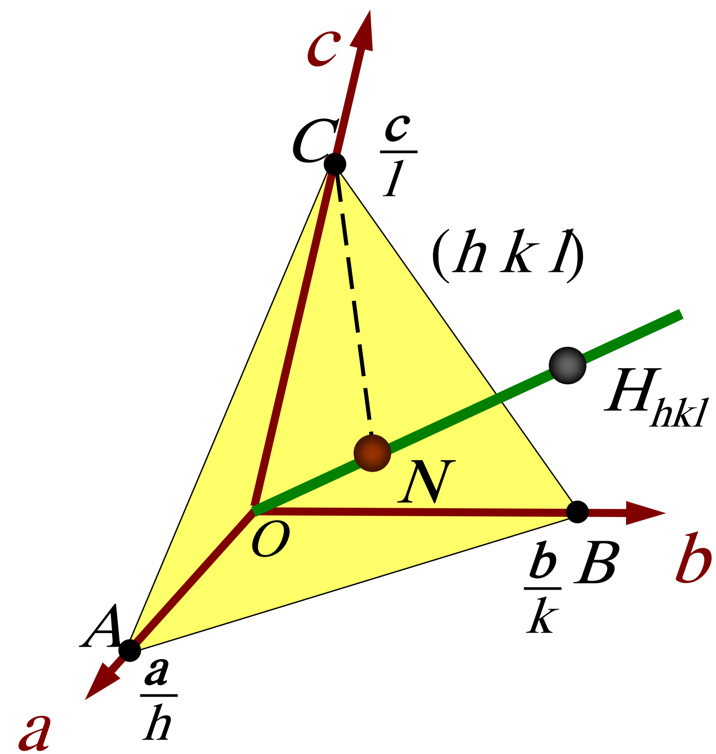
$$\therefore \angle \mathrm{ONC}=90^{\circ}$$

$$\therefore\ ON=d_{hkl}=\frac{\boldsymbol{c}}{l}\cdot\boldsymbol{n}$$

$$\therefore\ d_{hkl}=\frac{\boldsymbol{c}}{l}\cdot\frac{\boldsymbol{H}}{H}$$

$$=\frac{\boldsymbol{c}}{l}\cdot\frac{(h\boldsymbol{a}^{*}+k\boldsymbol{b}^{*}+l\boldsymbol{c}^{*})}{H}$$

$$=\frac{1}{H}$$



以上证得的关系式与上小节中对倒易点阵的几何定义所规定是一致的。

倒易点阵小结

(1) 几何构图法

把每一种晶面$(h\,k\,l)$转化为一个点 H 坐标 (h, k, l)

(2) 素向量标积法

互为排斥的标积为零，对应的标积为一。

(3)素向量矢积比混合积法。

正格子基矢排斥的矢积除以混合积为倒格基矢。

正格子所在的三维空间，称作正空间；

倒格子所在的三维空间，称作倒空间。

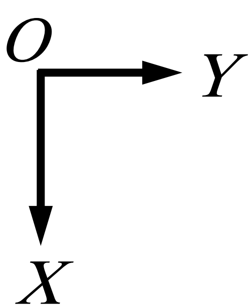
正、倒空间中，距离的量纲具有倒数关系。

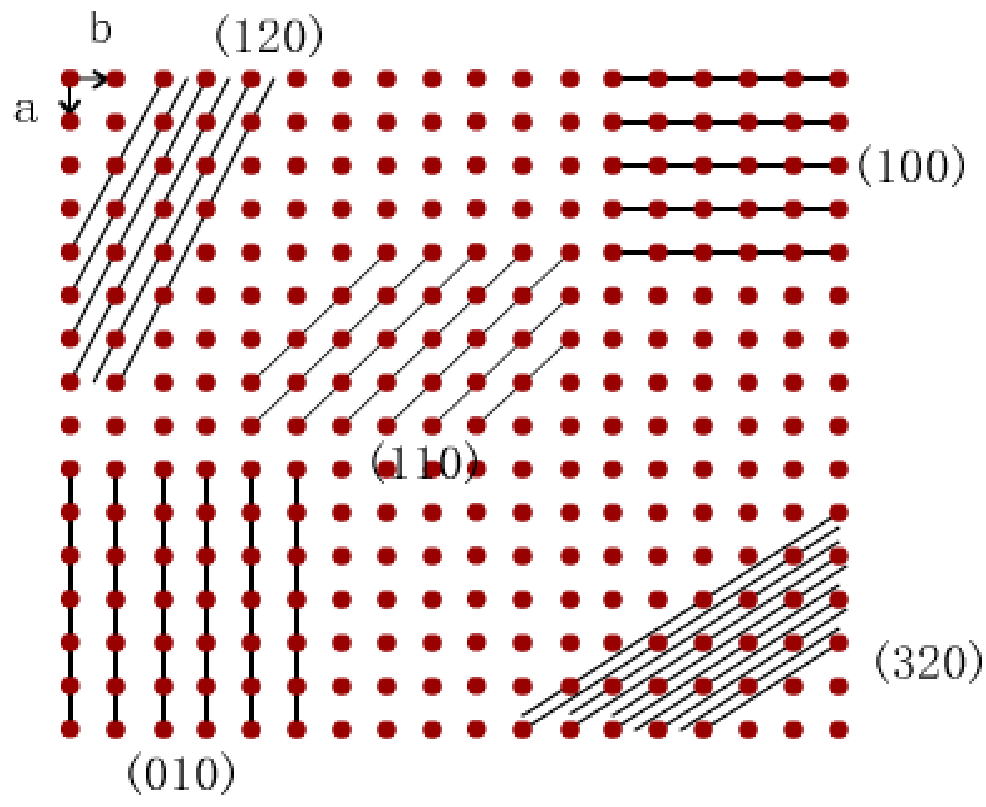
有一些具体问题，在倒空间中解决将更方便。

4.5 晶面间距、晶面夹角及晶带

4.5.1 晶面间距

凡是一组平行晶面中最相邻的两个晶面间的距离。$(h\,k\,l)$晶面，d_{hkl}最相邻的晶面间距。在晶体中**晶面指数最低的晶面总是具有最大的晶面间距。**





利用倒格子推导晶面距离：

$$H=\frac{1}{d_{hkl}} \qquad H^2=\frac{1}{\left(d_{hkl}\right)^2}$$

$$\boldsymbol{H}\bullet\boldsymbol{H}=H^2\cdot\cos 0^0=H^2$$

$$\therefore \frac{1}{\left(d_{hkl}\right)^2}=H^2=\boldsymbol{H}\bullet\boldsymbol{H}=\left(h\boldsymbol{a}^*+k\boldsymbol{b}^*+l\boldsymbol{c}^*\right)\cdot\left(h\boldsymbol{a}^*+k\boldsymbol{b}^*+l\boldsymbol{c}^*\right)$$

$$=h^2a^{*2}+k^2b^{*2}+l^2c^{*2}+2hk\left(\boldsymbol{a}^*\cdot\boldsymbol{b}^*\right)+2hl\left(\boldsymbol{a}^*\cdot\boldsymbol{c}^*\right)+2kl\left(\boldsymbol{b}^*\cdot\boldsymbol{c}^*\right)$$

将各个晶系晶体点阵常数与倒易点阵常数的关系带入上式，即可求晶面间距。在简单立方格子的晶体中：

$$a=b=c\ ,\quad a=b=g=90^\circ$$

$$a^*=b^*=c^*=1/a\ ,\quad a^*=b^*=g^*=90^\circ$$

$$\frac{1}{\left(d_{hkl}\right)^2}=\frac{h^2+k^2+l^2}{a^2}$$

$$\boxed{d_{hkl}=\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}}$$

(只适用于立方晶系)

4.5.2 晶面及晶向间夹角

晶面夹角： 不平行晶面间的夹角。

约简的晶面指数： 把前面所定义的晶面指数，除以最大公约数而获得的晶面指数最简整数比。平行的晶面具有相同的约简的晶面指数。

晶向夹角： 不平行的两个晶向的夹角。(晶向指数不同)

这是研究晶体取向及研究或与晶体取向有关性质时，经常涉及的问题。

例如立方晶系：请计算指数为$[h_1\ k_1\ l_1]$和$[h_2\ k_2\ l_2]$两个晶向间夹角[redacted]与晶向指数的关系?

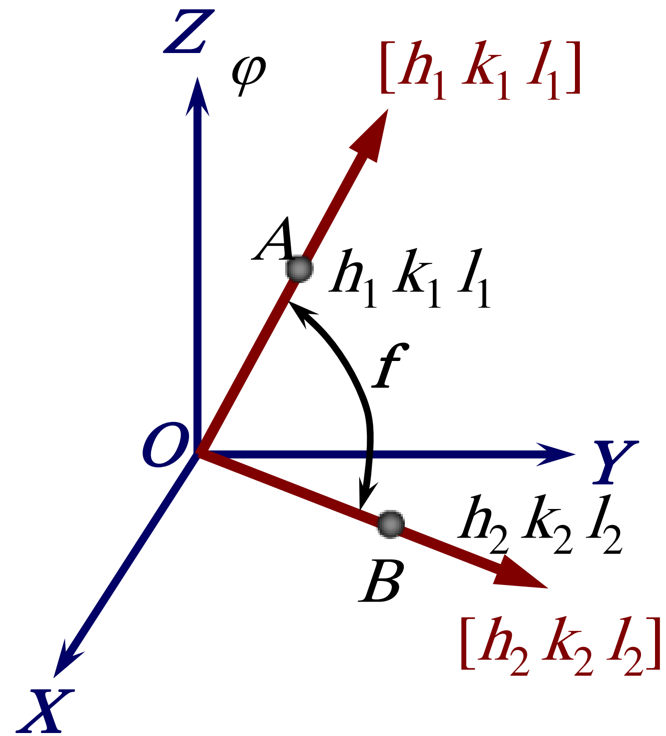
根据晶向定义，可以在两个晶向上分别找到原子坐标为$h_1\ k_1\ l_1$和$h_2\ k_2\ l_2$的点A和B。

$$\therefore \begin{cases} \overrightarrow{OA} = h_1 \boldsymbol{i} + k_1 \boldsymbol{j} + l_1 \boldsymbol{k} \\ \overrightarrow{OB} = h_2 \boldsymbol{i} + k_2 \boldsymbol{j} + l_2 \boldsymbol{k} \end{cases}$$

$$\because \quad \overrightarrow{OA} \cdot \overrightarrow{OB} = |OA|\,|OB| \cos f$$

$$\therefore \quad \cos f = \frac{OA \cdot OB}{|OA|\,|OB|}$$

$$= \boxed{\frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}\sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}}$$



此式是否适用一切晶系？ 适用于立方、四方、正交。

4.5.2 晶面及晶向间夹角

晶面夹角： 不平行晶面间的夹角。

约简的晶面指数： 把前面所定义的晶面指数，除以最大公约数而获得的晶面指数最简整数比。平行的晶面具有相同的约简的晶面指数。

晶向夹角： 不平行的两个晶向的夹角。(晶向指数不同)

这是研究晶体取向及研究或与晶体取向有关性质时，经常涉及的问题。

例如立方晶系：请计算指数为$[h_1\ k_1\ l_1]$和$[h_2\ k_2\ l_2]$两个晶向间夹角 ϕ 与晶向指数的关系?

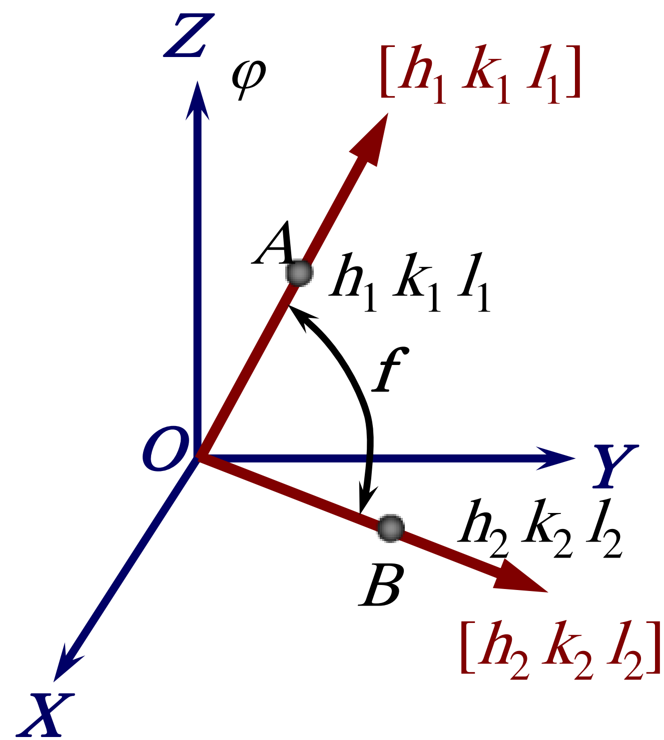
根据晶向定义，可以在两个晶向上分别找到原子坐标为$h_1\ k_1\ l_1$和$h_2\ k_2\ l_2$的点A和B。

$$\therefore \begin{cases} \overrightarrow{OA} = h_1\boldsymbol{i} + k_1\boldsymbol{j} + l_1\boldsymbol{k} \\ \overrightarrow{OB} = h_2\boldsymbol{i} + k_2\boldsymbol{j} + l_2\boldsymbol{k} \end{cases}$$

$$\because \quad \overrightarrow{OA} \cdot \overrightarrow{OB} = |OA|\,|OB| \cos\phi$$

$$\cos\phi = \frac{OA \bullet OB}{|OA| \cdot |OB|}$$

$$= \boxed{\frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}\sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}}$$



此式是否适用一切晶系？ 适用于立方、四方、正交。

由于立方晶系中，具有相同指数的晶向与晶面相垂直，晶面$(h_1\ k_1\ l_1)$与$(h_2\ k_2\ l_2)$夹角与晶向$[h_1\ k_1\ l_1]$与$[h_2\ k_2\ l_2]$夹角相同。

例如立方晶系中：

(110)与(111)晶面夹角： $\cos\varphi=\sqrt{2/3}$ $\varphi=35.27°$

$[1\bar{1}0]$与$[112]$晶向夹角： $\cos\varphi=0$ $\varphi=90°$

(100)与(010)晶面夹角： $\cos\varphi=0$ $\varphi=90°$

其它晶系，晶向及晶面夹角算法较复杂。

4.5.3 晶带

在晶体中如果许多晶面同时平行于一个晶向时，则这些晶面称为晶带，这个晶向称为晶带轴。

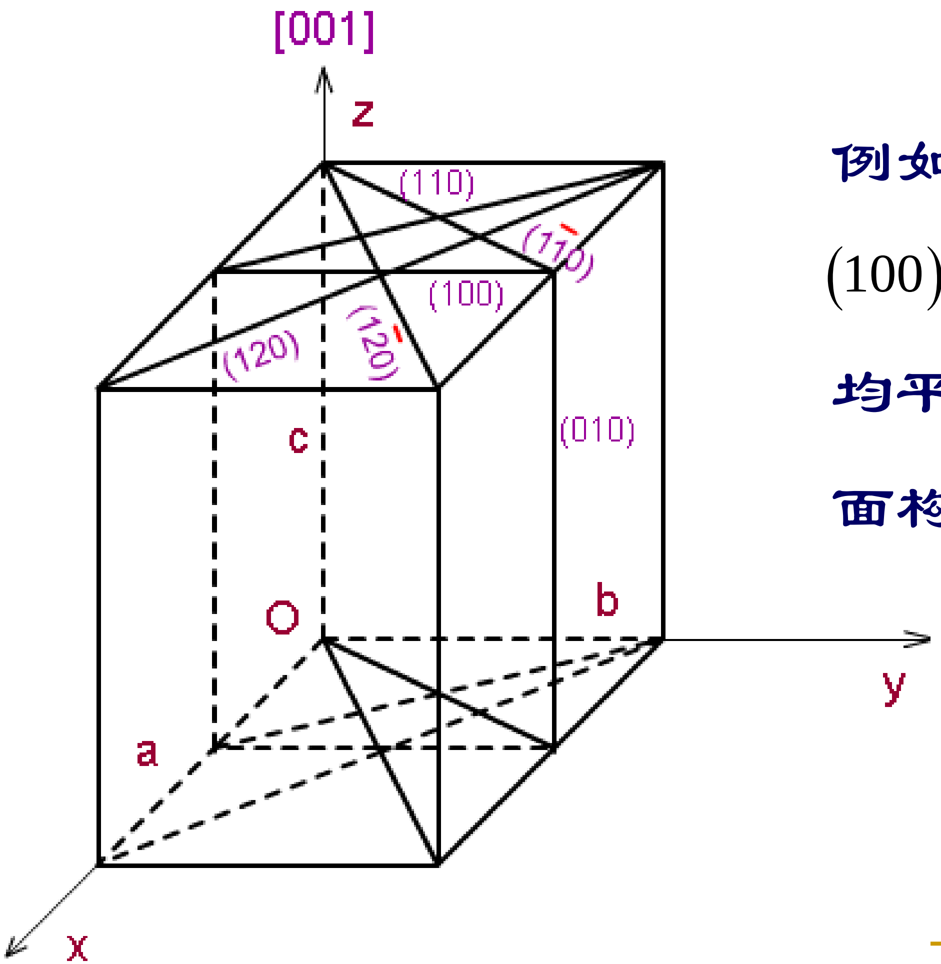


图4.5.4 晶带面和晶带轴

例如：左图正交晶系中，晶面 (100)、(010)、(110)、$(1\bar{1}0)$、(120)、$(1\bar{2}0)$ 均平行于[001]晶向，这些晶面构成以[001]为晶带轴的晶带。

定理：如果晶带轴为$[u\ v\ w]$，任何晶面具有$(h\ k\ l)$符合：

$$hu + kv + lw = 0$$

则这个$(h\ k\ l)$晶面属于以$[u\ v\ w]$为晶带轴的一个晶带。

证明：

因为同一晶带的各个晶面和其晶带轴都是互相平行的，所以这些晶面的法线必定与晶带轴垂直。即任何晶带面的$(h\ k\ l)$的倒易矢量$\vec{H}$必与晶带轴$[u\ v\ w]$垂直。即以下两个向量垂直

$$\vec{H} = h\,\boldsymbol{a}^* + k\,\boldsymbol{b}^* + l\,\boldsymbol{c}^*$$

$$\vec{L} = u\,\boldsymbol{a} + v\,\boldsymbol{b} + w\,\boldsymbol{c}$$

即：$$\vec{L}\cdot\vec{H} = (u\,\boldsymbol{a} + v\,\boldsymbol{b} + w\,\boldsymbol{c}) \cdot (h\,\boldsymbol{a}^* + k\,\boldsymbol{b}^* + l\,\boldsymbol{c}^*) = 0$$

$$\boxed{\therefore\ hu + kv + lw = 0}$$

利用晶带轴和晶带面指数之间的关系，可解答以下两个问题：

1、如果两个晶面$(h_1\ k_1\ l_1)$和$(h_2\ k_2\ l_2)$属于以$[u\ v\ w]$为晶带轴的晶带，则有如下关系：

$$u = k_1 l_2 - k_2 l_1$$

$$v = l_1 h_2 - l_2 h_1$$

$$w = h_1 k_2 - h_2 k_1$$

2、如果一个晶面$(h\ k\ l)$同时属于两个晶带，其晶带轴分别为$[u_1\ v_1\ w_1]$ 和 $[u_2\ v_2\ w_2]$，则晶面指数为：

$$h = v_1 w_2 - v_2 w_1$$

$$k = w_1 u_2 - w_2 u_1$$

$$l = u_1 v_2 - u_2 v_1$$

例1： (100)和(110)两个晶面同时属于晶带轴$(u\ v\ w)$

则： $u=0,\ v=0,\ w=1$，这个晶带轴是(001)。

例2： $(h\ k\ l)$晶面同时属于两个晶带轴[001]和[010]

则： $h=1,\ k=0,\ l=0$，这个晶面是(100)。

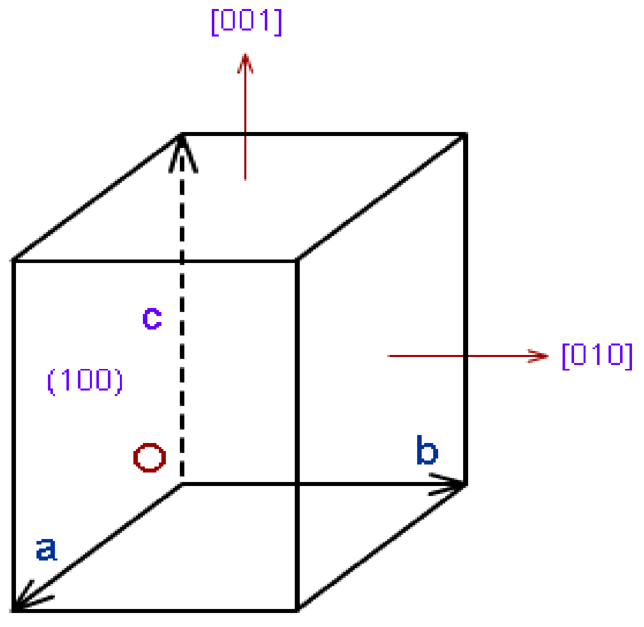


图4.5.5 表示属于两个晶带的晶带轴

4.6 晶体的极射赤面投影表示

在晶体学及X射线衍射工作中，非常需要用一种方法将一个立体的晶体(或晶体点阵中的一个晶胞)投影到一个平面上，以便很简单而明确地表示晶体点阵中各个晶面的取向及其夹角间、晶带间的关系以及对称性等特性。

经常用到两种方法：**球面投影** 和 **极射赤面投影**

4.6.1 球面投影

将一个很小的晶体放在一个大圆球(称参考球或极球)的球心处，由晶体的各个不同晶面作它们的法线和参考球的球面相交为许多点(称极点)，这种投影称为晶体的球面投影。

在球面投影中，每一个极点对应于晶体中的一种约简的晶面指数。

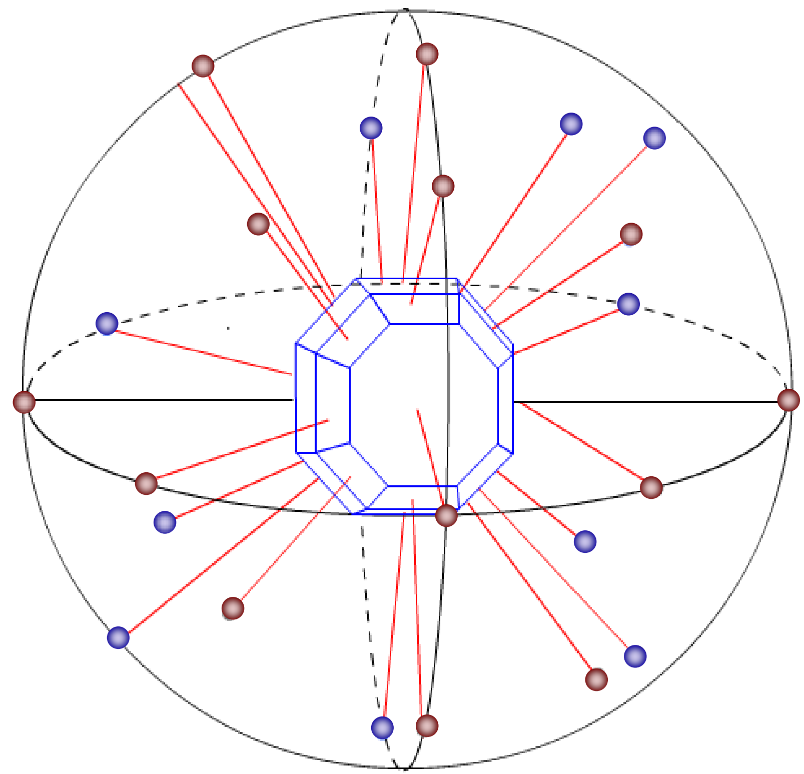


图4.6.1　晶体的球面投影

一般规律：

1、如果几个相交的平面(通过球心)具有一定的夹角，那么它们的法线在球面上的极点P_1、P_2、P_3等也有一定的角距离。

2、如果某些晶面属于晶体中的同一晶带，那么它们的法线在同一平面上，因而它们的极点P_1、P_2、P_3在同一大圆上，而其晶带轴的极点在90°以外，即垂直于大圆的直径和参考球面所形成的极点。

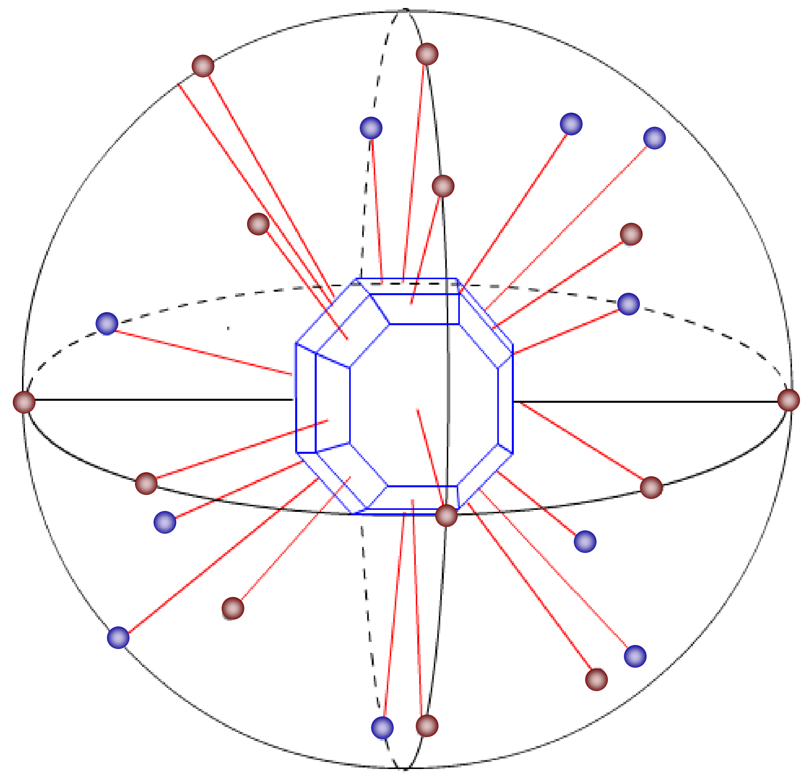
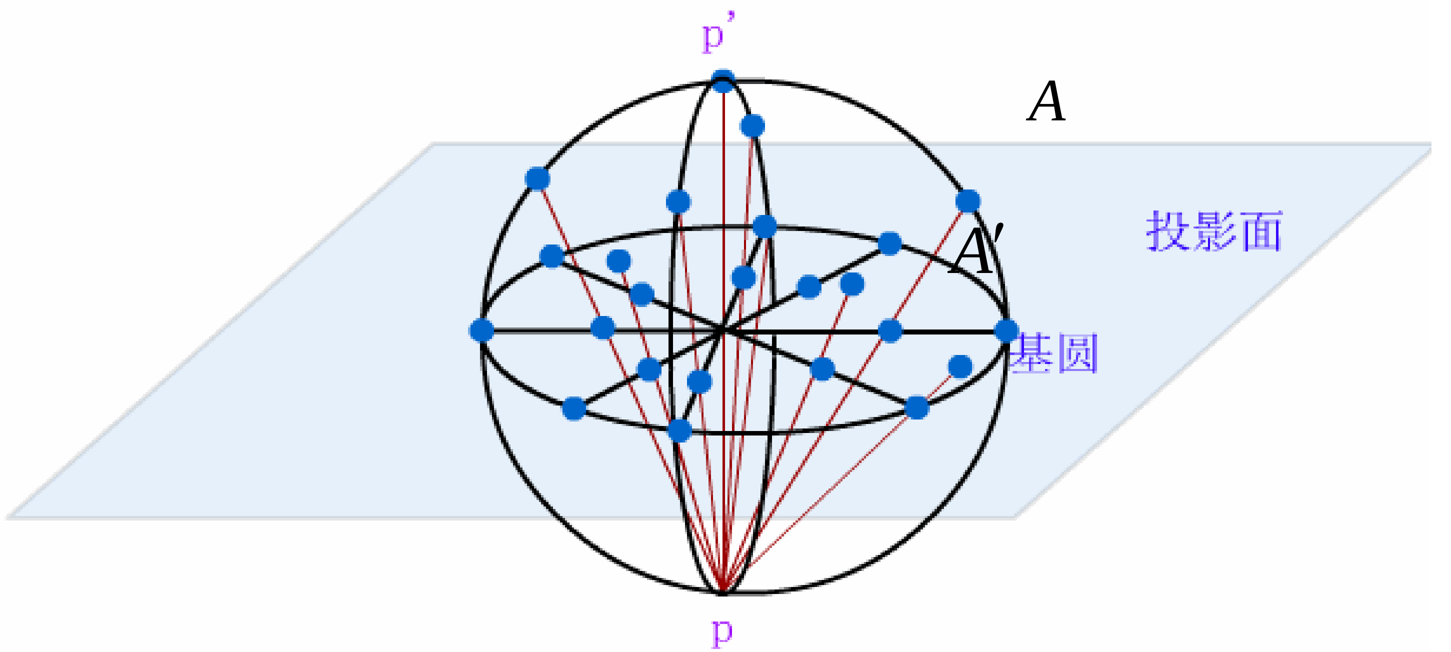


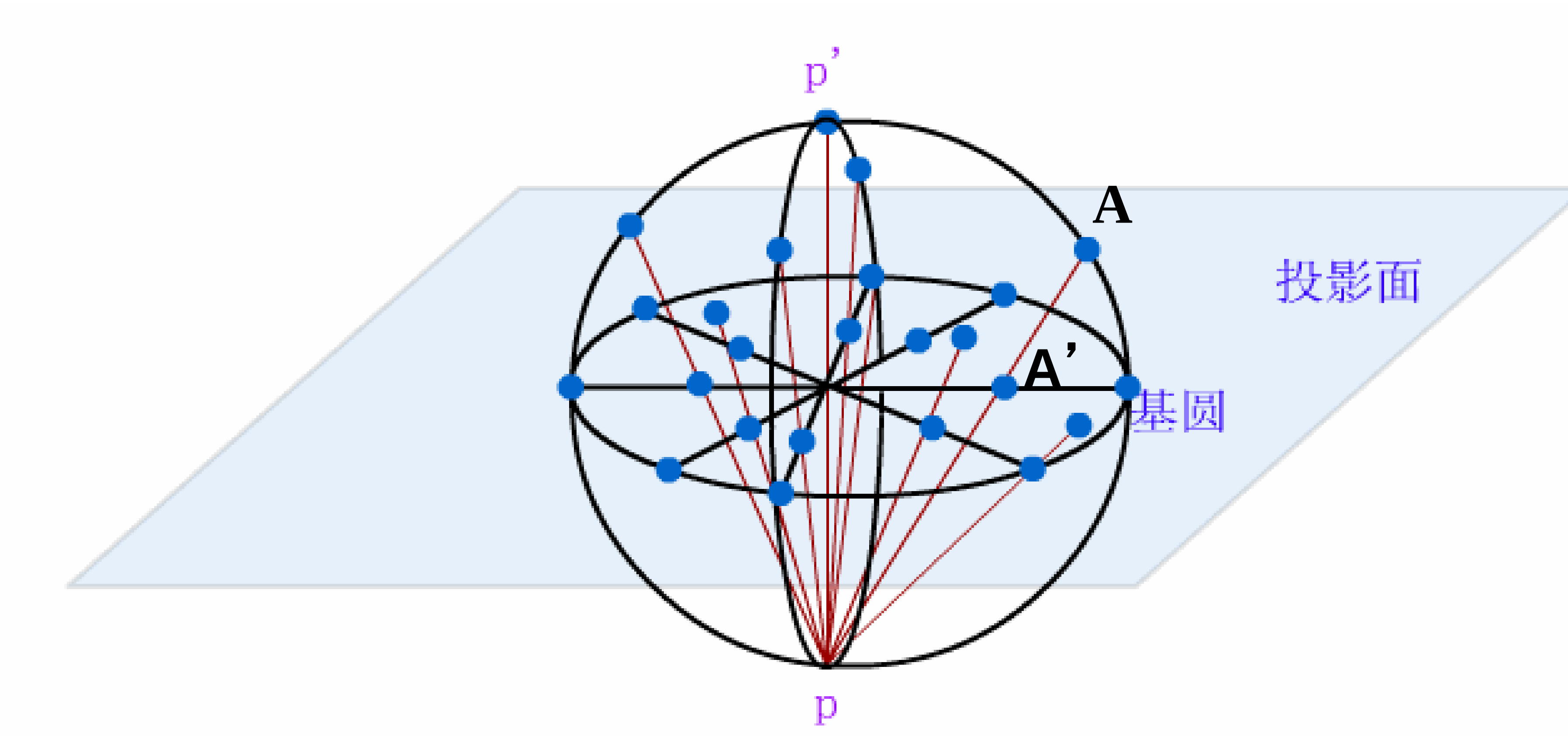
图4.6.1　晶体的球面投影

4.6.2 极射赤面投影

将观察者的眼睛放在参考球的一个极点上(或在P处放一个光源)，连P点及球心的连线，在对方球面上交于p'点，则通过赤道并且垂直于pp'的平面将成为投影面。与参考球相交于赤道成为一个大圆，这个大圆称为基圆。

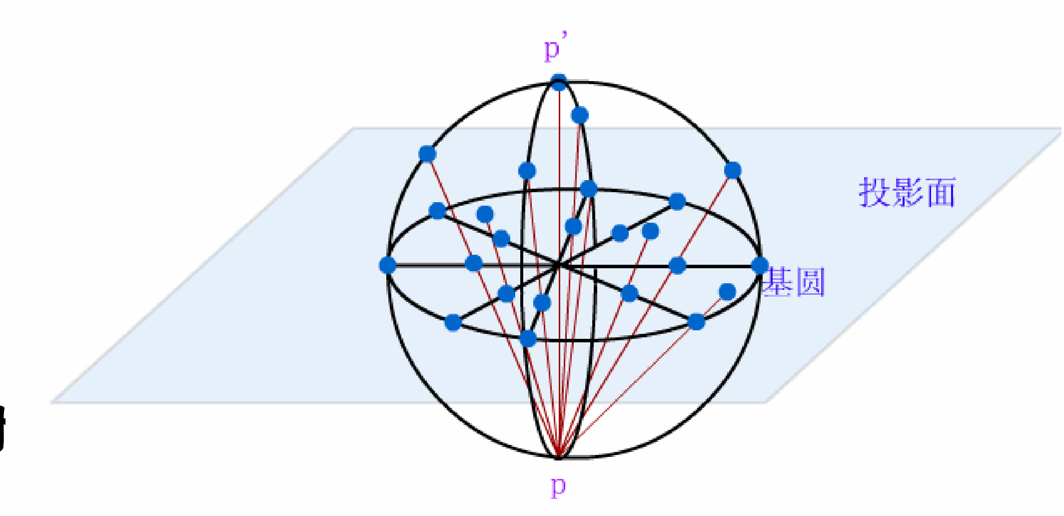


晶体上某一个晶面的法线与参考球面相交而成的A点，将投影到基园上成为A'点。



晶体点阵平面的球面投影极点在上半球以内者均可以投影到基圆以内，而在下半球面上的极点，则投影到基圆以外。愈近P点的极点，投影点距基圆圆心愈远。若需要下半球极点的投影，可将光源移至P'点，投影面不变，所得投影点一律加以负号或用空心圆圈表示。

投影面是过赤道面的平面，观察点在极点上，顾名思义，这种投影方式称之为“极射赤面投影”。

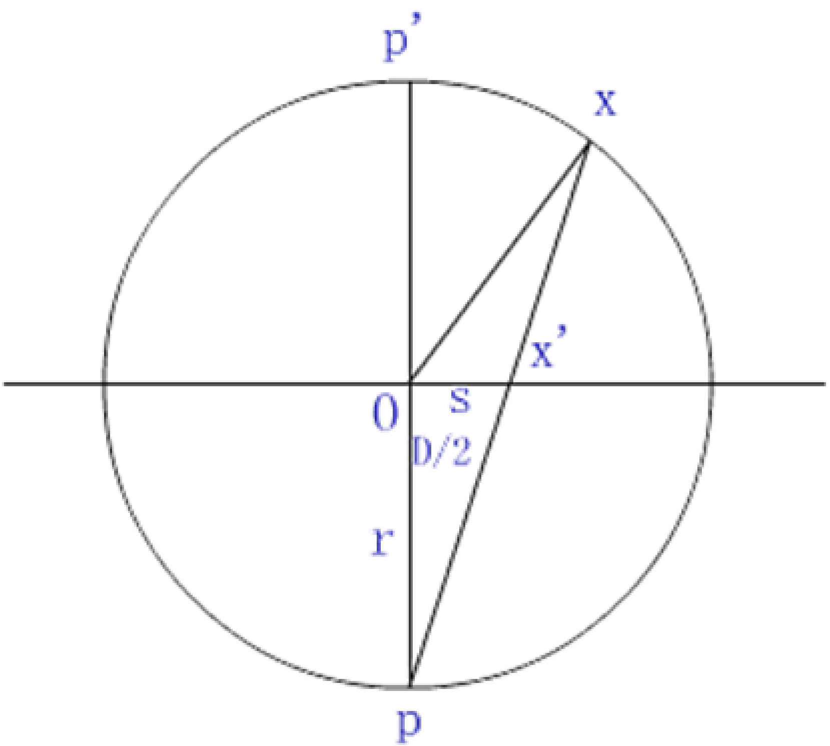


参考球上的大圆投影到基圆上成为圆弧，其两端在基圆直径的两对点上。通过 PP′ 的大圆其投影在基圆上成为直径。

(1) 求取极射赤面投影S值的方法

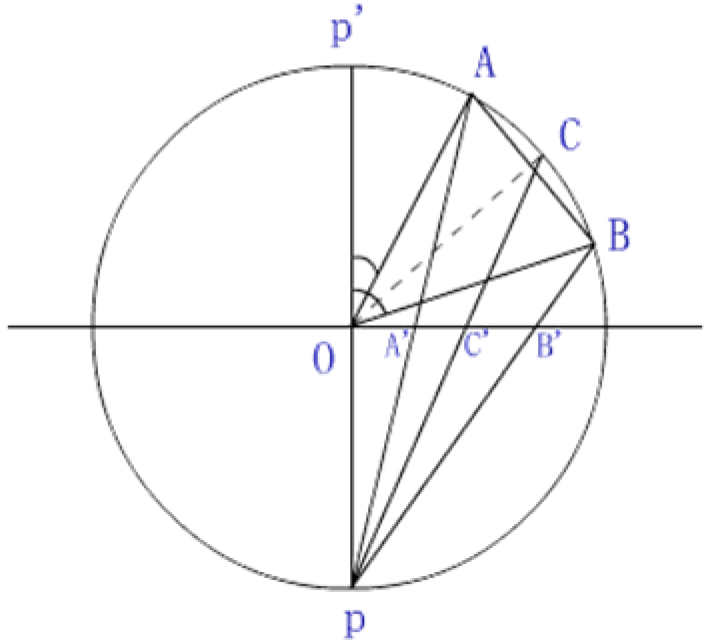
球面上某一极点x与P'之间的角距离为γ，则x点在极射赤面上的投影极点x′与基圆圆心0之间距离为S，

$$S= 0P \times tg(\gamma/2)= r \times tg(\gamma/2)$$



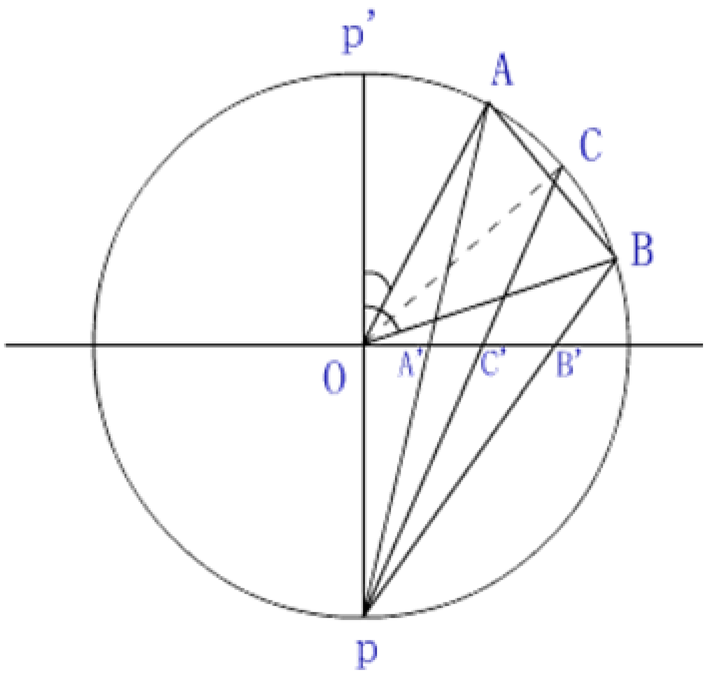
(2) 参考球上的小圆的极射赤面投影

参考球上的小圆在极射赤面上的投影图也将成为圆，但球上小圆的中心投影到极射赤面上并不在投影图的几何中心，但在角距离中心。



推导证明！！！

将这个问题，化成一个纯粹的数学问题，如下：



已知：$\overset{\frown}{AC} = \overset{\frown}{CB} \quad \overset{\frown}{AP'} = \alpha \quad \overset{\frown}{BP'} = \beta$

求证：$A'C' \neq C'B' \quad \angle APC = \angle CPB$

证明：

$$\overset{\frown}{AC} = \overset{\frown}{CB} = \frac{\beta\text{-}\alpha}{2}$$

$$\angle APC = \angle CPB = \frac{\beta\text{-}\alpha}{4}$$

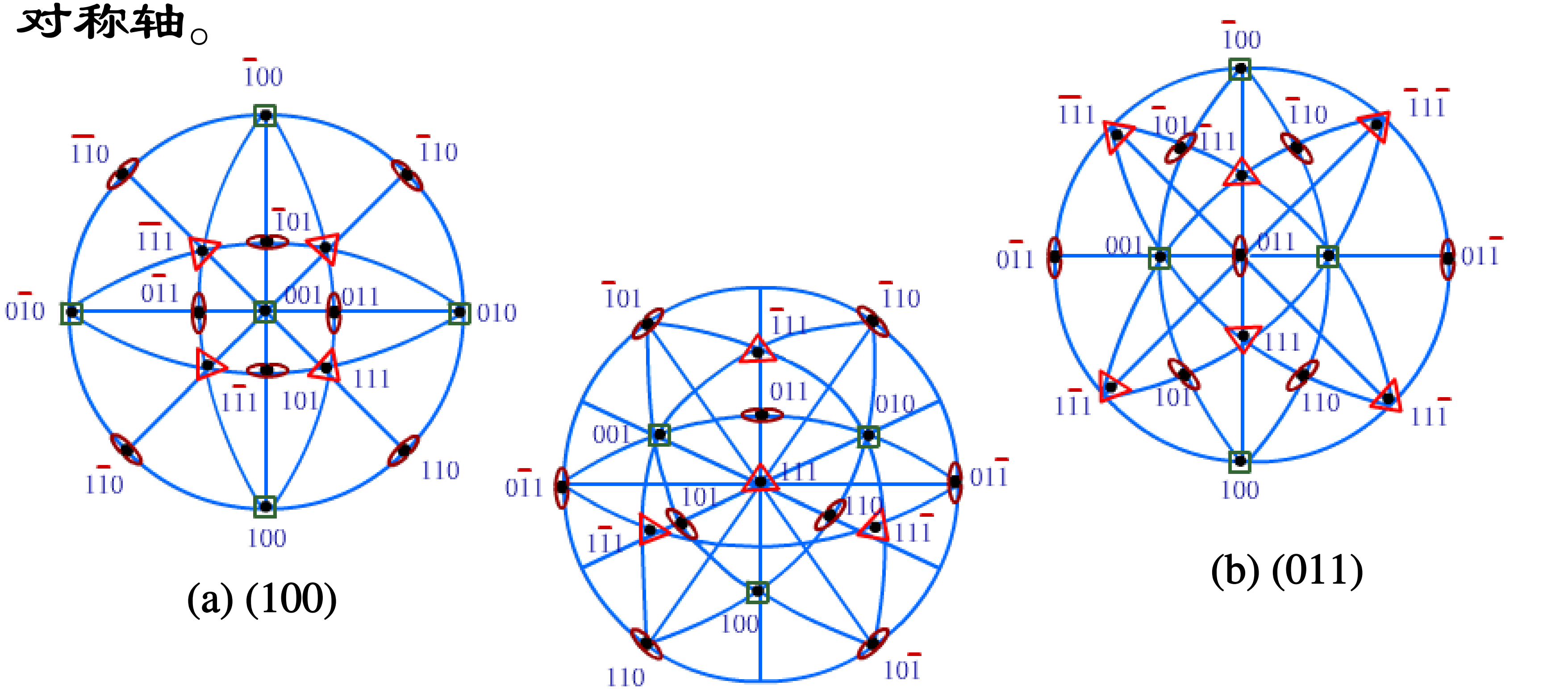
$$\angle P'PC = \frac{\alpha}{2} + \frac{\beta\text{-}\alpha}{4} = \frac{\alpha+\beta}{4}$$

$$OA' = \gamma \cdot \tan\frac{\alpha}{2} \qquad OC' = r \cdot \tan\frac{\alpha+\beta}{4} \qquad OB' = r \cdot \tan\frac{\beta}{2}$$

$$A'C' = OC' - OA' = r \cdot (\tan\frac{\alpha+\beta}{4} - \tan\frac{\alpha}{2}) = r \cdot \frac{\sin({}^{\beta\text{-}\alpha}/_{4})}{\cos\frac{\alpha+\beta}{4} \cdot \cos\frac{\alpha}{2}}$$

$$C'B' = OB' - OC' = r \cdot (\tan\frac{\beta}{2} - \tan\frac{\alpha+\beta}{4}) = r \cdot \frac{\sin({}^{\beta\text{-}\alpha}/_{4})}{\cos\frac{\alpha+\beta}{4} \cdot \cos\frac{\beta}{2}}$$

利用极射赤面投影的方法可以方便地把某一晶体的各个晶面的法线方向标记到赤平面上。对于立方晶系晶体晶向和晶面的法线方向是一致的，因此也就是把晶向标记到赤平面上，见图4.6.8。图中○，□，△分别表示2重对称轴，4重对称轴，3重对称轴。



(a) (100)　(b) (011)　(c) (111)

4.7 晶体的定向方法

晶体各项异性，晶面不同，性质不同，晶面的确定很重要。

- 光点定向
- 晶体外貌（棱线、解理面）
- X射线衍射定向（劳厄定向法、X射线衍射仪）

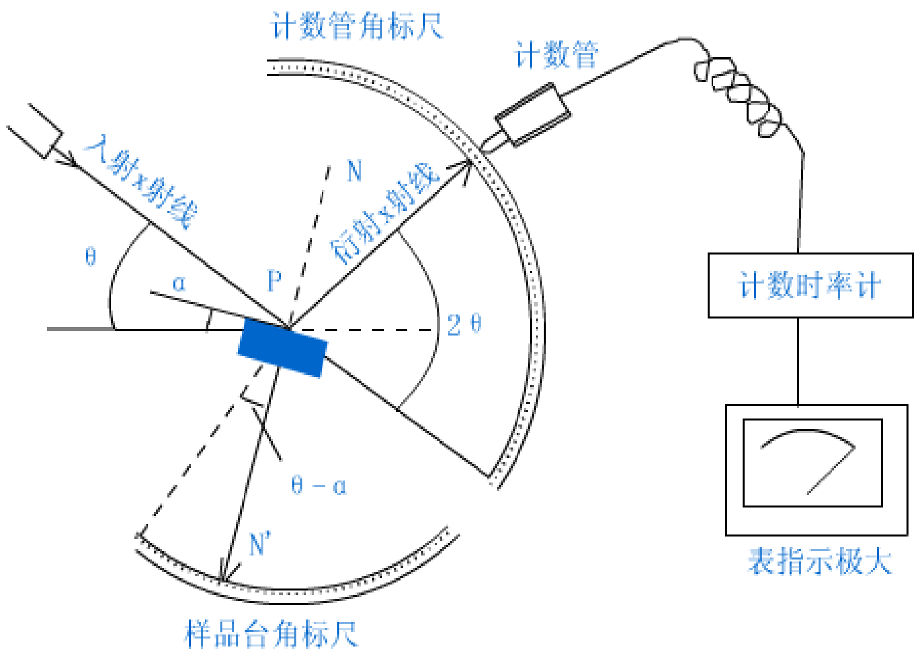


图4.7.1 单色x射线衍射法定向原理图

根据布拉格方程

$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda$$

采用波长为λ的x射线以θ角入射到晶体上，若满足该方程时，x射线就会在晶面间距为d_{hkl}的一族平行晶面(hkl)上产生衍射，n为整数。

本章小结

1、晶格中原子的表示方法：原子坐标

2、晶面的表示方法：晶面指数，如何确定？

3、晶向的表示方法：晶向指数，如何确定？

4、倒易点阵的意义？倒格子与正格子的关系？

5、倒易点阵的矢量分析。

6、晶面间距，晶向间夹角，晶带与晶带轴。

7、极射赤面投影与球面投影，以及相关问题。