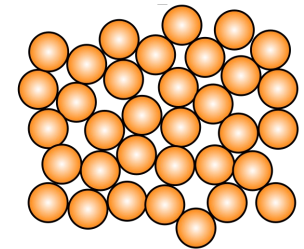
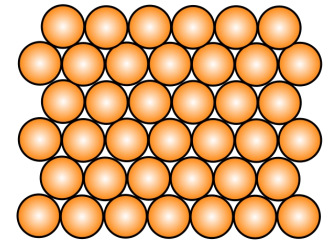
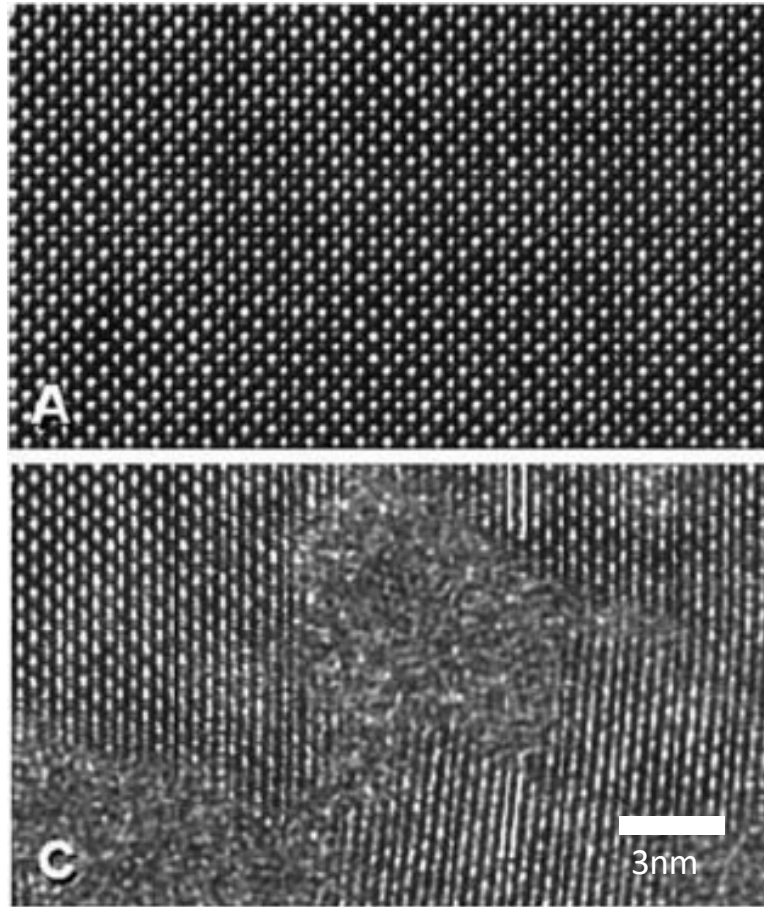


2.点阵，晶向和晶面

Dongsheng Wen

晶体与非晶体

- ZrSiO_4

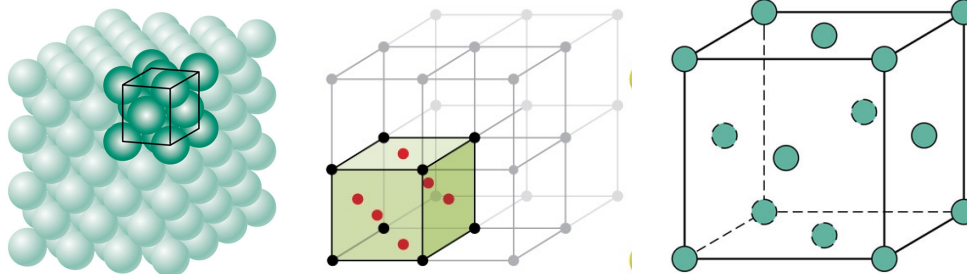


晶体与非晶体

- 金属
- 陶瓷
- 高分子

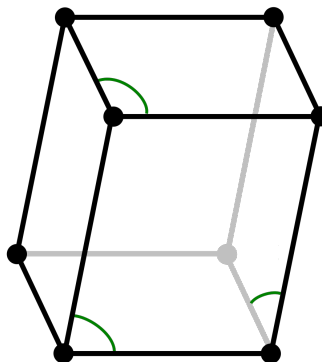
点阵与晶胞

- 点阵 (lattice)：将晶体中的原子排列的结构看成是三维空间中的几何点阵

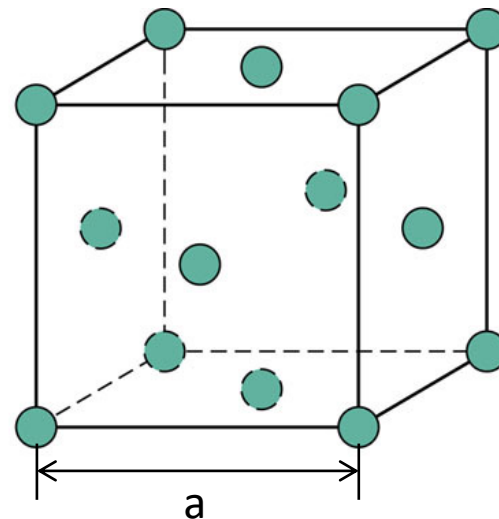
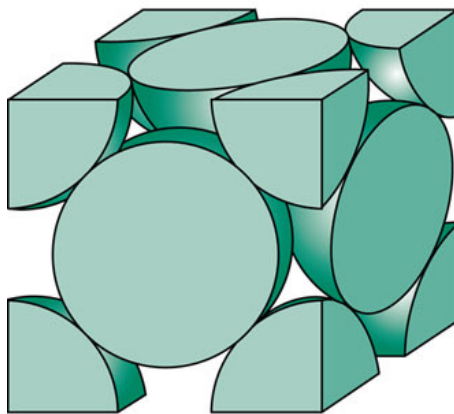
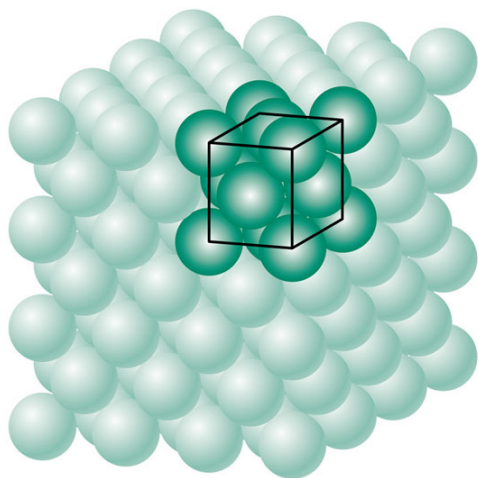


- 晶胞 (unit cell)

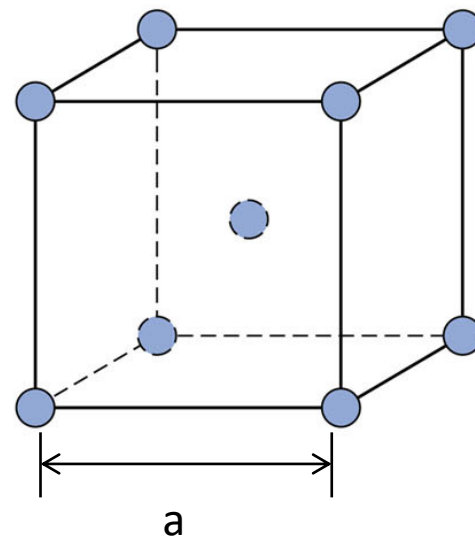
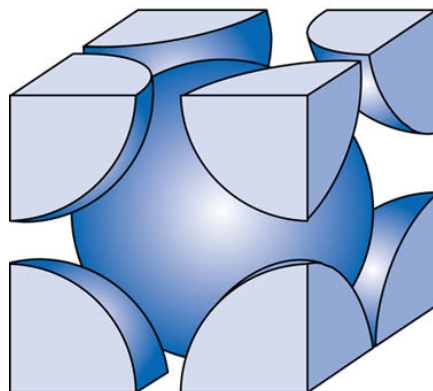
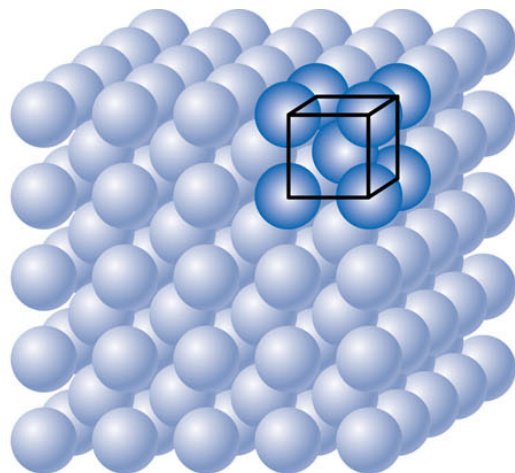
- 晶胞参数 ($a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$)



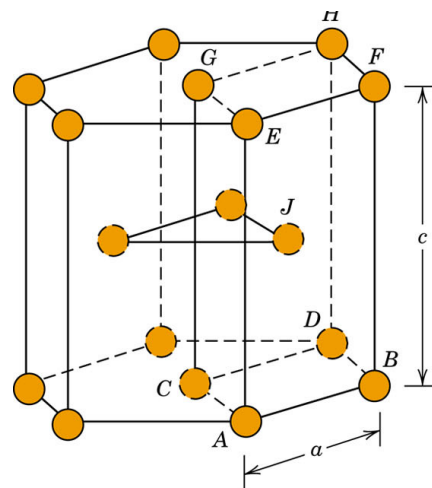
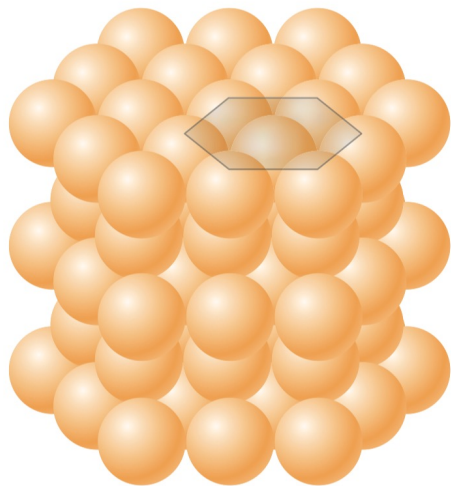
面心立方 (Face-centered cubic)



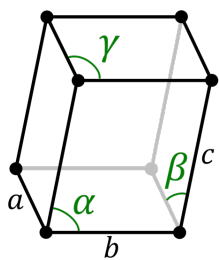
体心立方 (Body-centered cubic)



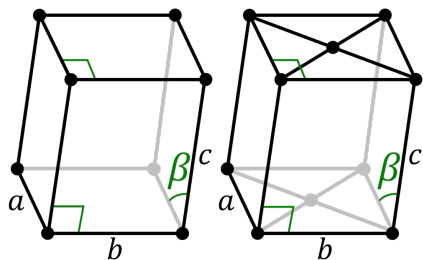
密排六方 (Hexagonal close-packed)



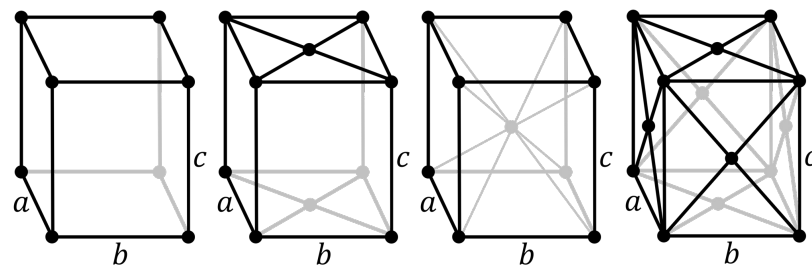
布拉维点阵 (Bravais lattice)



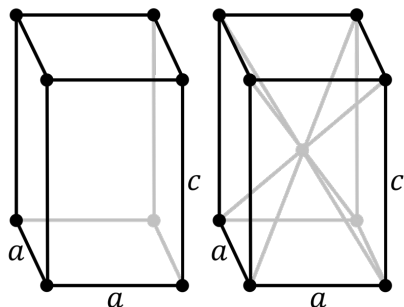
三斜 ($a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma$)



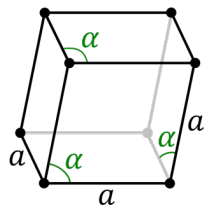
单斜 ($a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$)



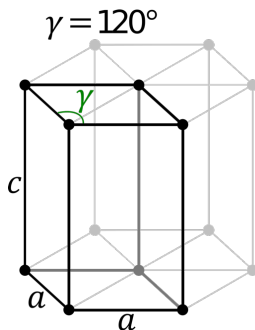
正交 ($a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = \beta = 90^\circ$)



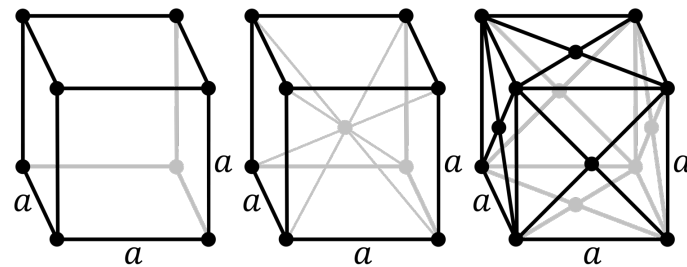
四方 ($a = b \neq c, \alpha = \gamma = \beta = 90^\circ$)



菱方
($a = b = c,$
 $\alpha = \gamma = \beta \neq 90^\circ$)



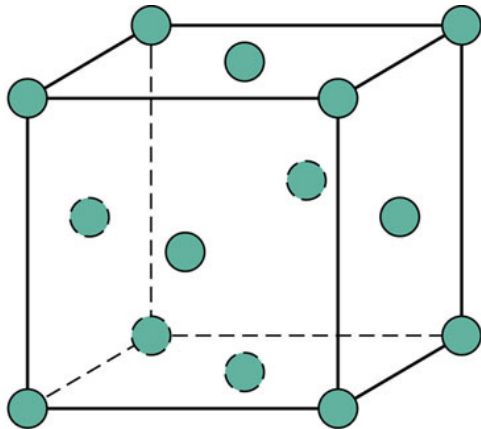
六方
($a = b \neq c,$
 $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$)



立方 ($a = b = c, \alpha = \gamma = \beta = 90^\circ$)

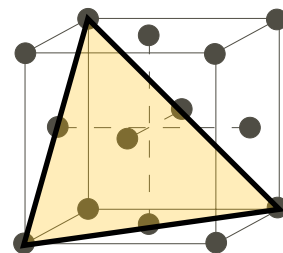
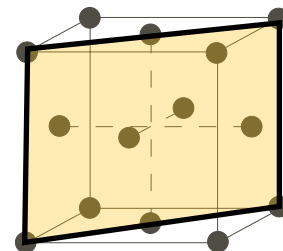
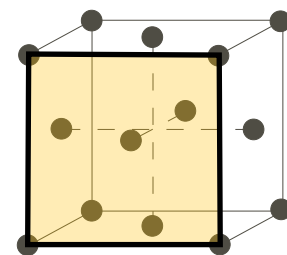
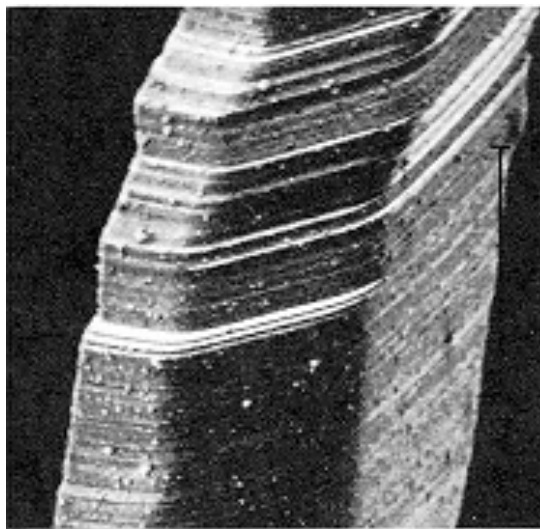
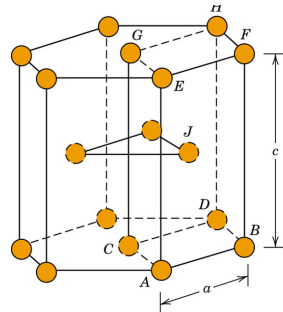
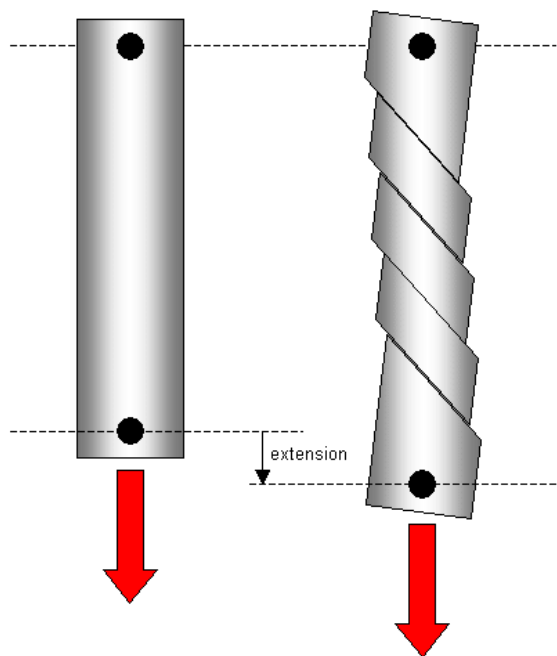
晶胞参数+坐标

- 例子：FCC Ni



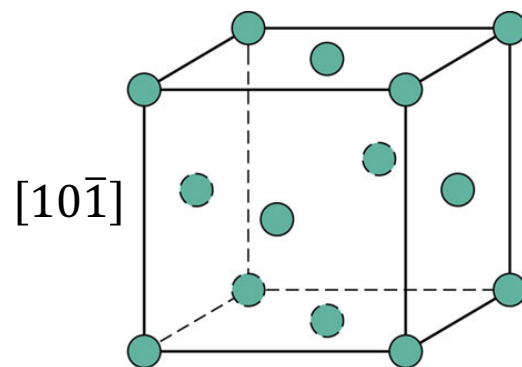
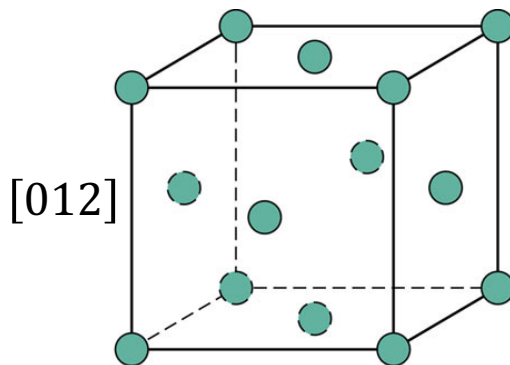
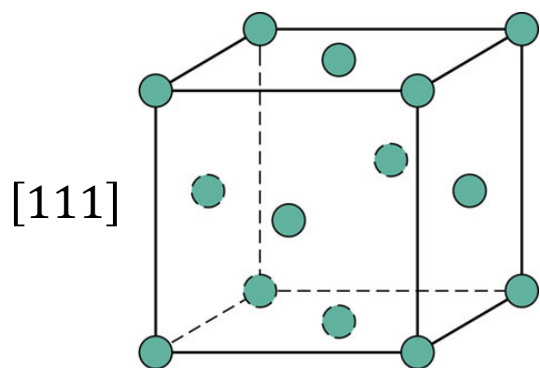
晶向指数和晶面指数 (Miller indices)

- 晶向指数 $[uvw]$ ：晶胞点阵中用于指示某个方向。
- 晶面指数 (hkl) ：晶胞点阵中用于指示某个面。
- 我们为啥要关心这些 ???



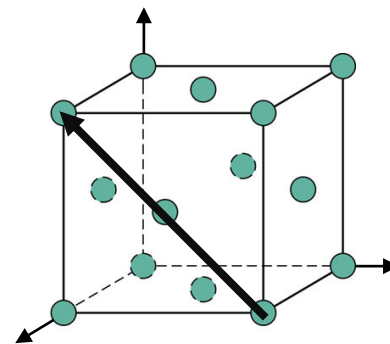
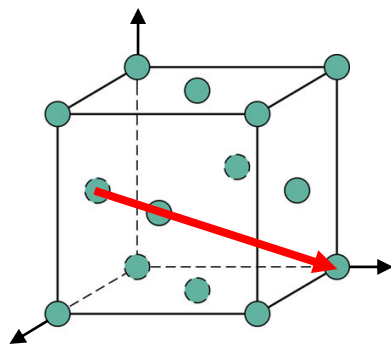
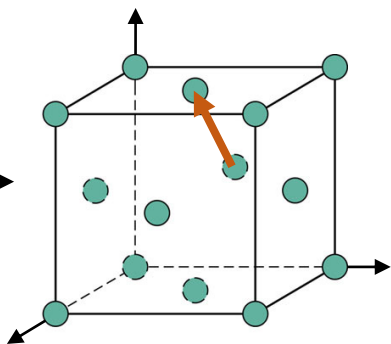
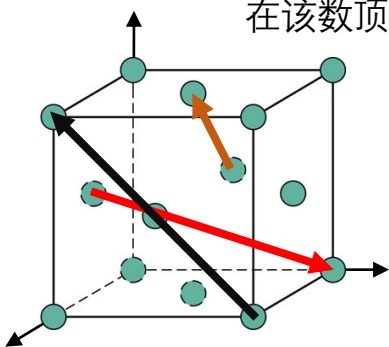
晶向指数 $[uvw]$

- 对于某晶胞参数 $(a, b, c, \alpha, \beta, \gamma)$, 画出某一指定的晶向 $[uvw]$
 - 根据晶胞角度 α, β, γ , 建立坐标轴 (x, y, z) , 定义原点 O
 - 根据晶胞轴长度 a, b, c , 画出晶胞
 - 根据晶向 $[uvw]$, 定出晶向的终点坐标 $P(u a, v b, w c)$
 - 从 O 点到 P 点画出向量



晶向指数 $[uvw]$

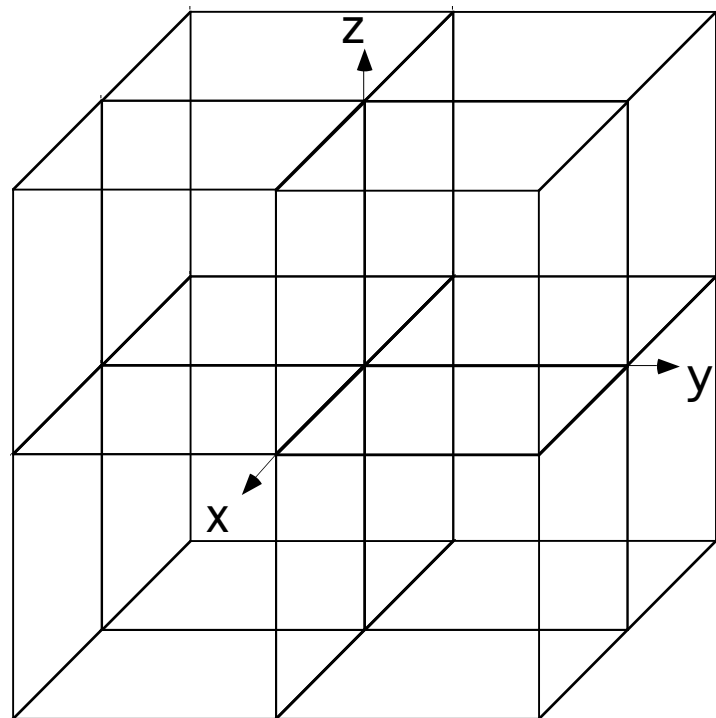
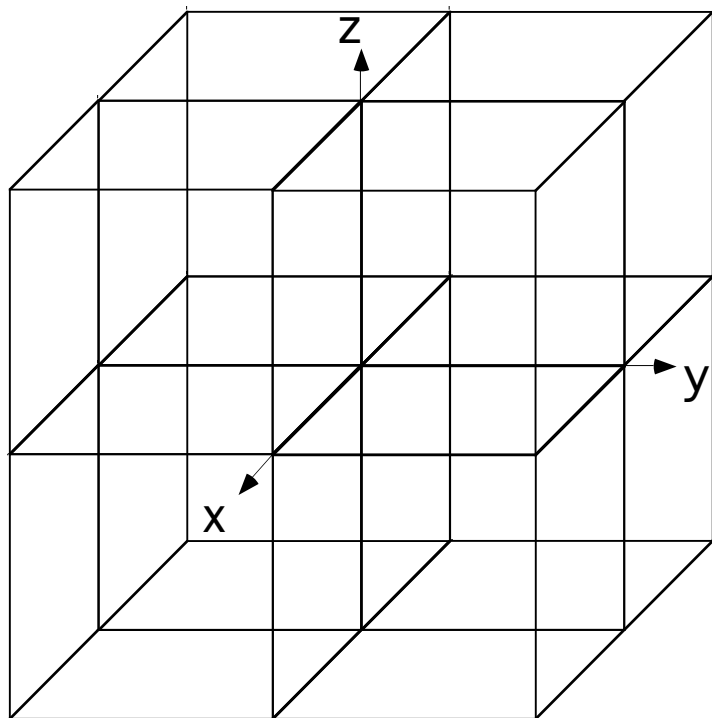
- 标定已经画出来的未知的晶向 OP
 - 根据给出的坐标轴 (x, y, z) , 定义原点 O
 - 找出起点坐标 (X_1, Y_1, Z_1)
 - 找出终点的坐标 $P(X_2, Y_2, Z_2)$
 - 取出 $X_2 - X_1, Y_2 - Y_1, Z_2 - Z_1$, 化成最小整数 u, v, w , 并且加上方括号成为 $[uvw]$, 如果有负数, 在该数顶部加 $-$



晶向指数-练习

画出

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

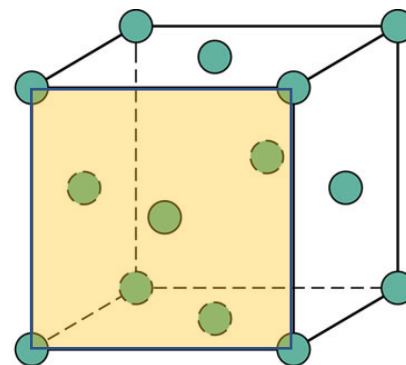
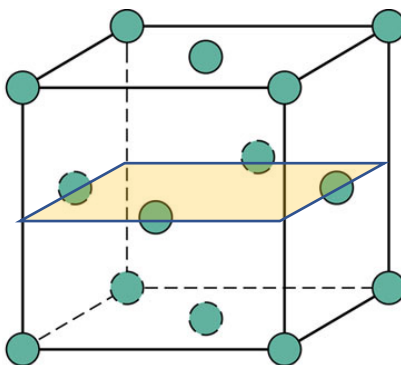
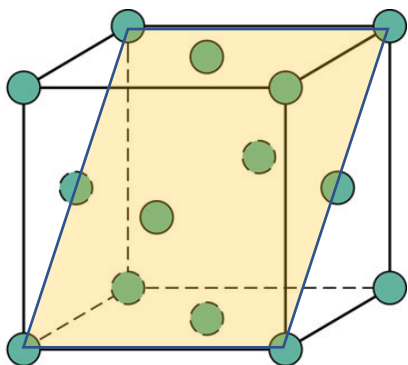
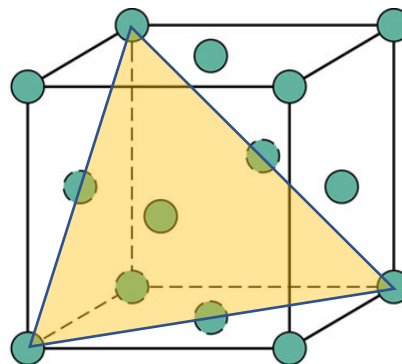


晶向族 $\langle uvw \rangle$ (family of directions)

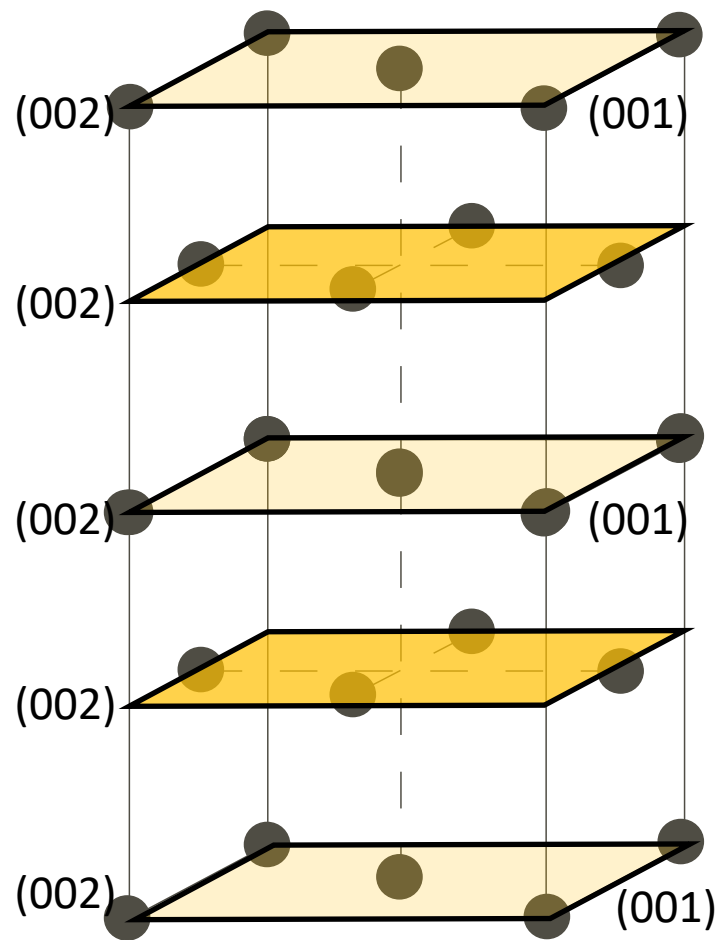
- $[110], [\bar{1}\bar{1}0]$
- $[101], [\bar{1}0\bar{1}]$
- $[011], [0\bar{1}\bar{1}]$
- $[1\bar{1}0], [\bar{1}10]$
- $[10\bar{1}], [\bar{1}01]$
- $[01\bar{1}], [0\bar{1}1]$

晶面指数 (hkl)

- 标注指定的晶面
 - 定义原点O
 - 找出这个晶面与x轴相交的坐标 $(X, 0, 0)$
 - 找出这个晶面与y轴相交的坐标 $(0, Y, 0)$
 - 找出这个晶面与z轴相交的坐标 $(0, 0, Z)$
 - 取出 X, Y, Z , 取倒数, $1/X, 1/Y, 1/Z$
 - 对 $1/X, 1/Y, 1/Z$, 化成整数 hkl , 加上()



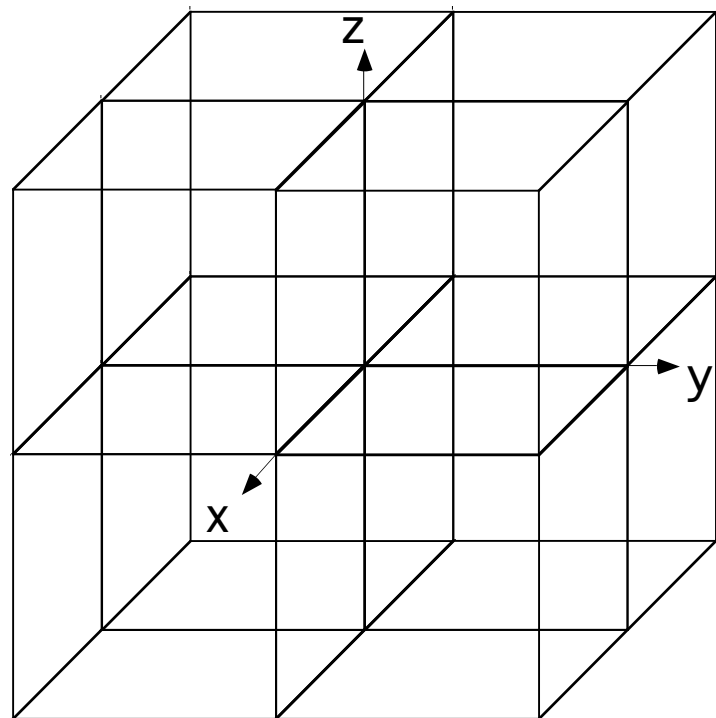
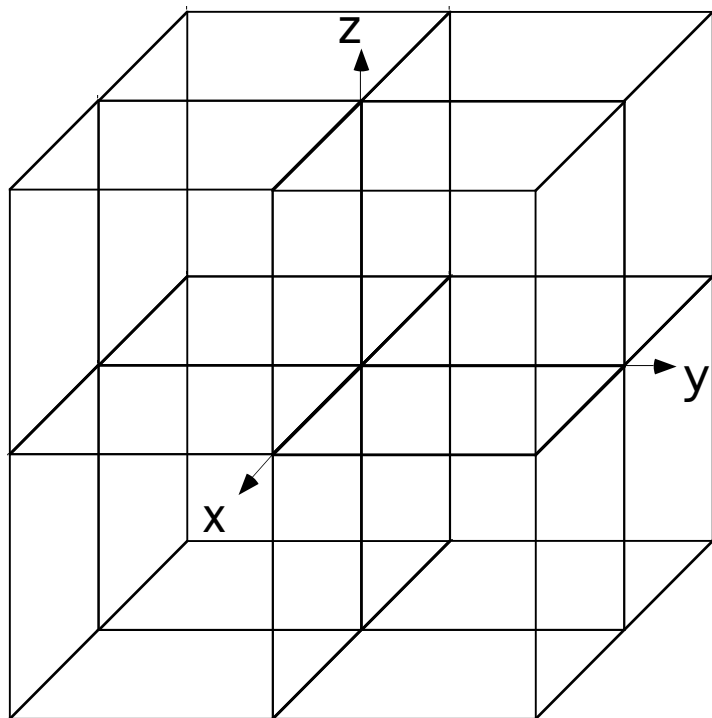
晶面指数 (hkl)



晶面指数-练习

画出

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

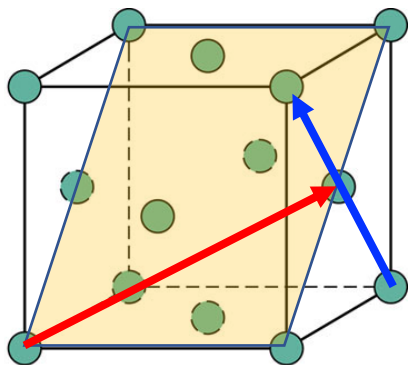


晶面族 $\{hkl\}$

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

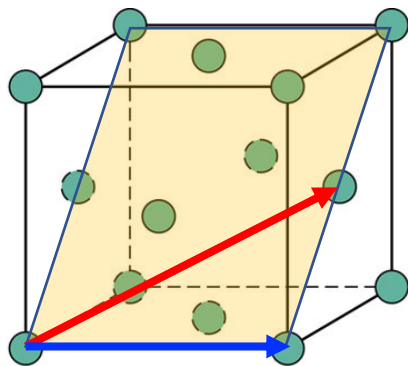
立方系统中的晶向与晶面

- 判断一个晶向 $[uvw]$ 是否在一个晶面 (hkl) 的平面上，那可以用点乘：
 - 如果 $uh + vk + wl = 0$ ，则晶向 $[uvw]$ 在晶面 (hkl) 的平面上
- 晶向 $[uvw]$ 与晶面 (hkl) 垂直时： $u = h, v = k, w = l$



立方系统中的晶向与晶面

- 如果要求两个晶向 $[u_1v_1w_1]$ 和 $[u_2v_2w_2]$ 在哪一个晶面 (hkl) 的平面上，那可以用叉乘来求这个平面的 (hkl) ：



下一节课：FCC，BCC和
HCP的原子堆垛