



第六节 晶面指数

□ 前面介绍了晶体结构的基本特征及晶体结构的基本几何描述

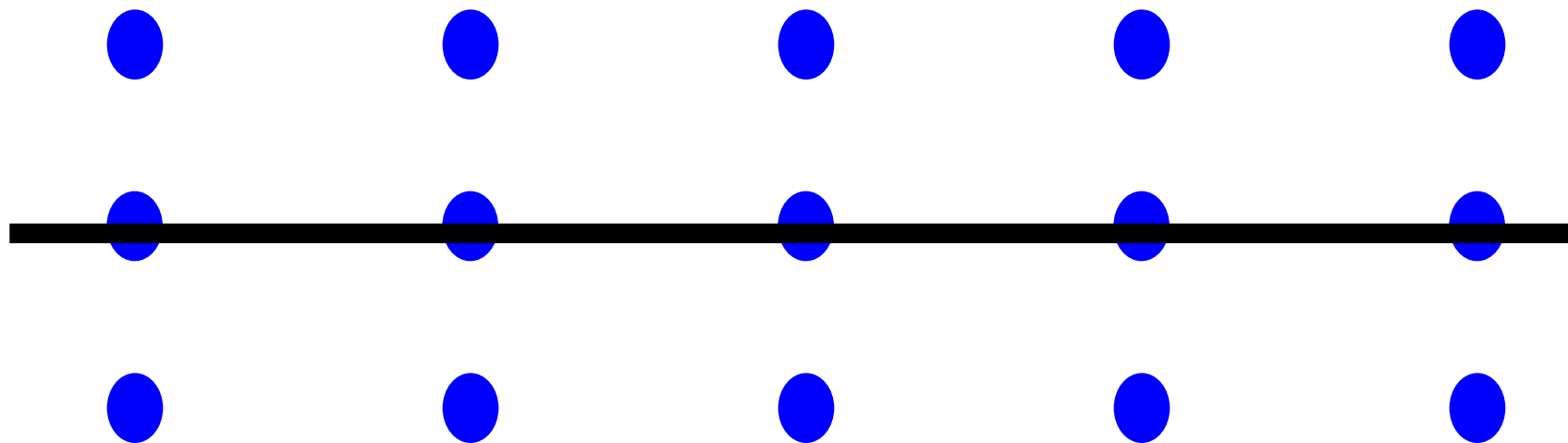
□ 希望对晶体结构进行定量描述——

晶面指数和晶向指数



一、晶列

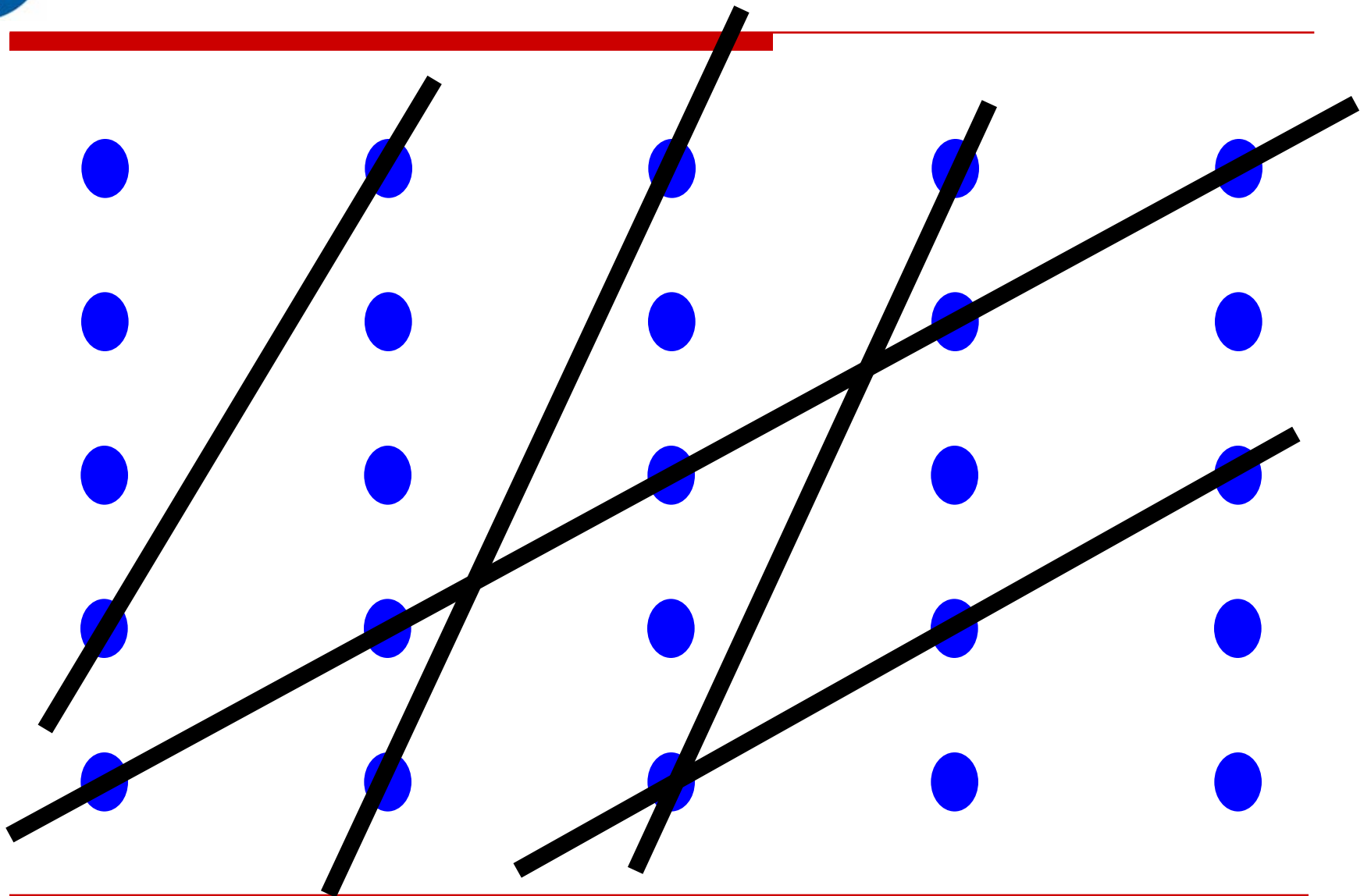
1、晶列：通过晶体点阵中任意两个格点所连成的直线。





(1)、一个晶列中包含着无限多个相同的格点。

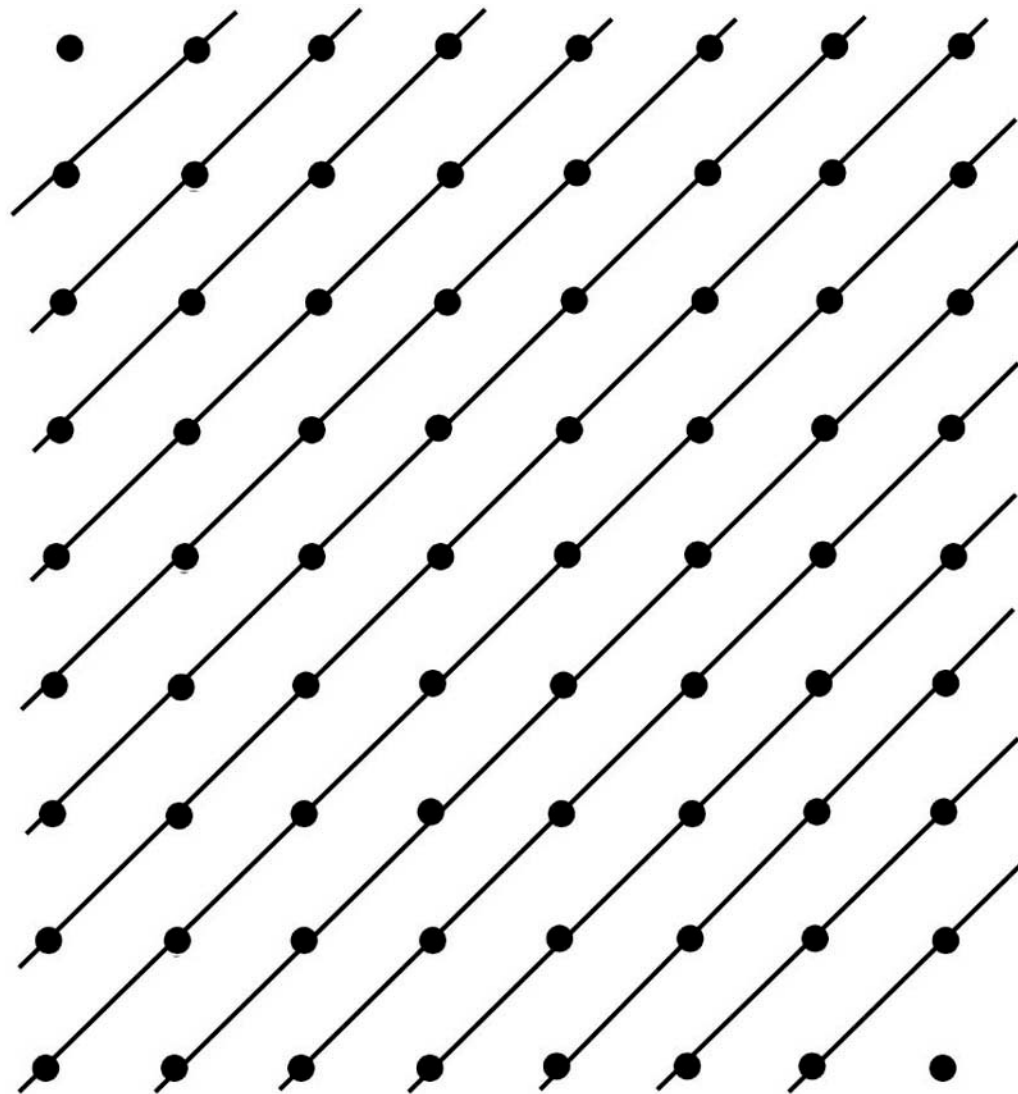
晶列上格点的分布具有周期性，不同晶列具有不同的周期性。





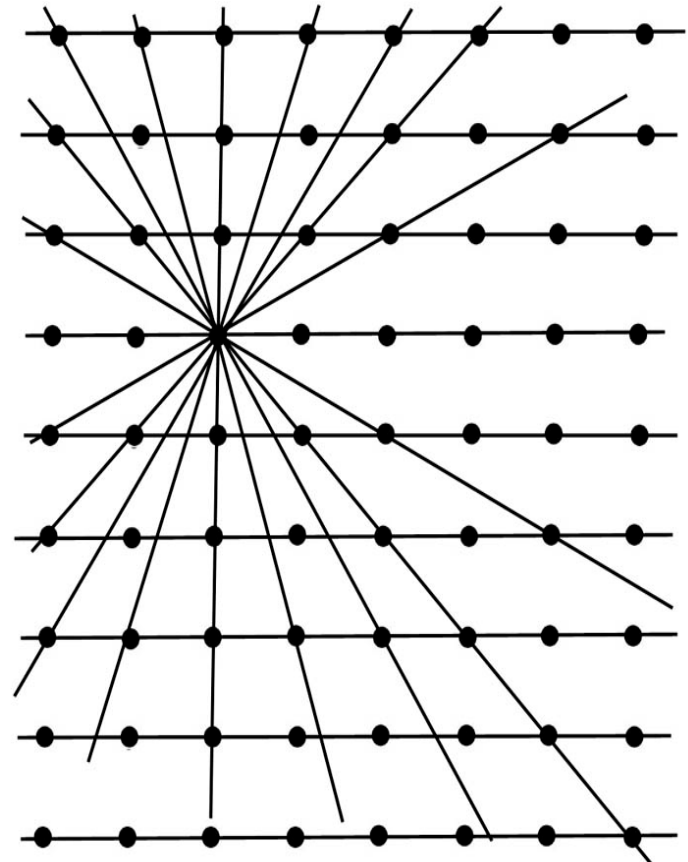
(2)、通过任何其他格点都有一
相同周期晶列与原晶列平行
-----晶列族。

一个晶列族包含了所有格点。





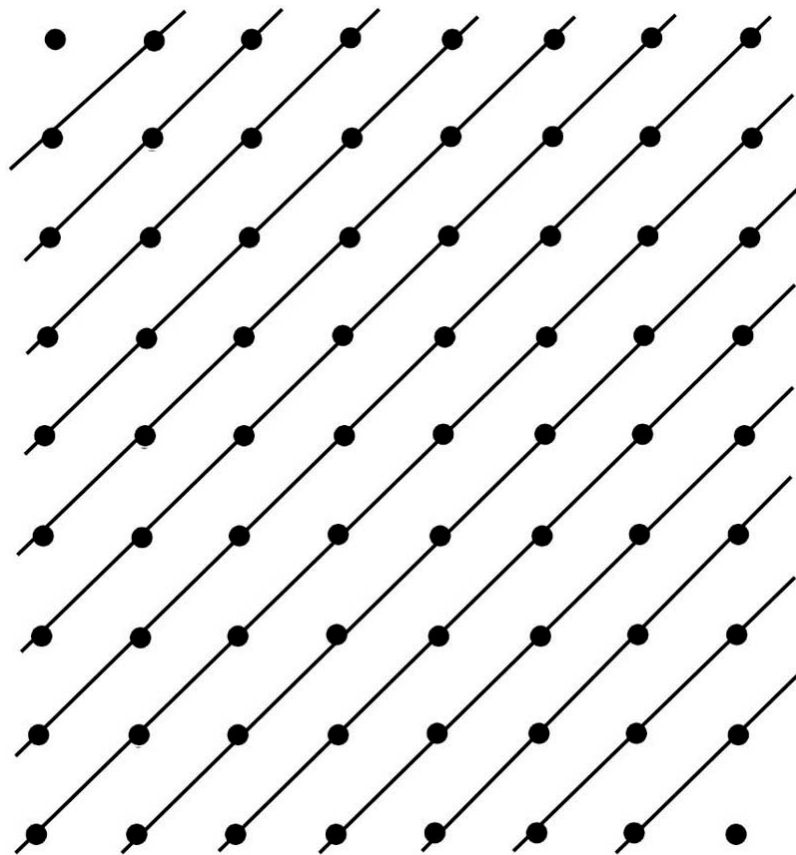
(3)、通过一个格点可以有无限多个晶列，其中，每一个晶列都有一族平行的晶列与之对应





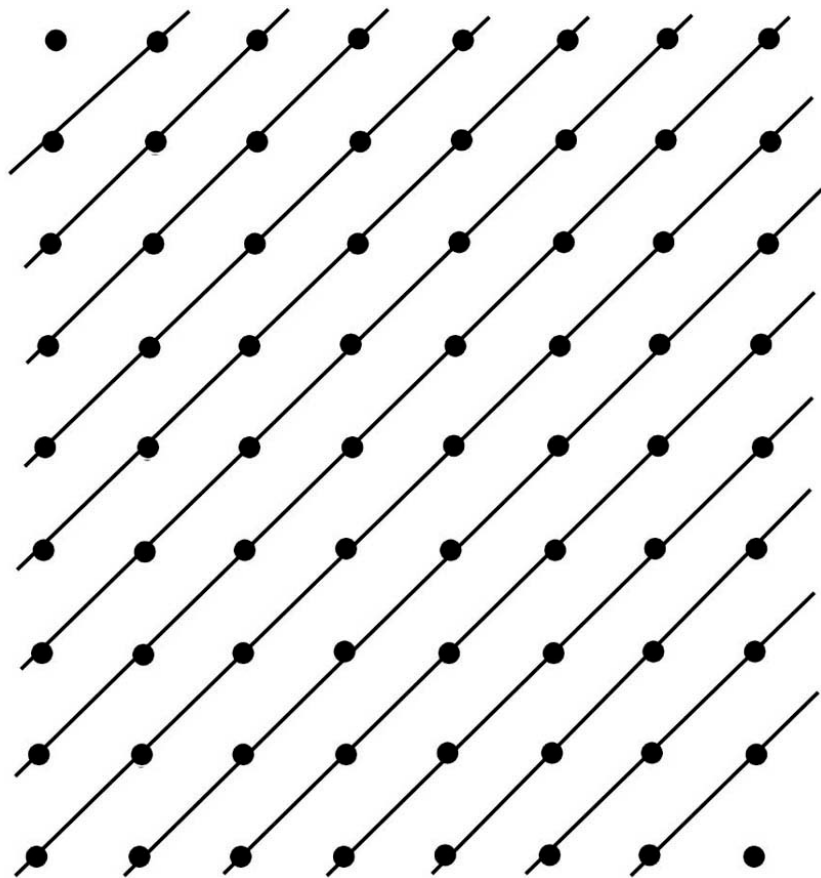
2、晶列的性质

- 所有彼此平行的晶列组成晶列族。



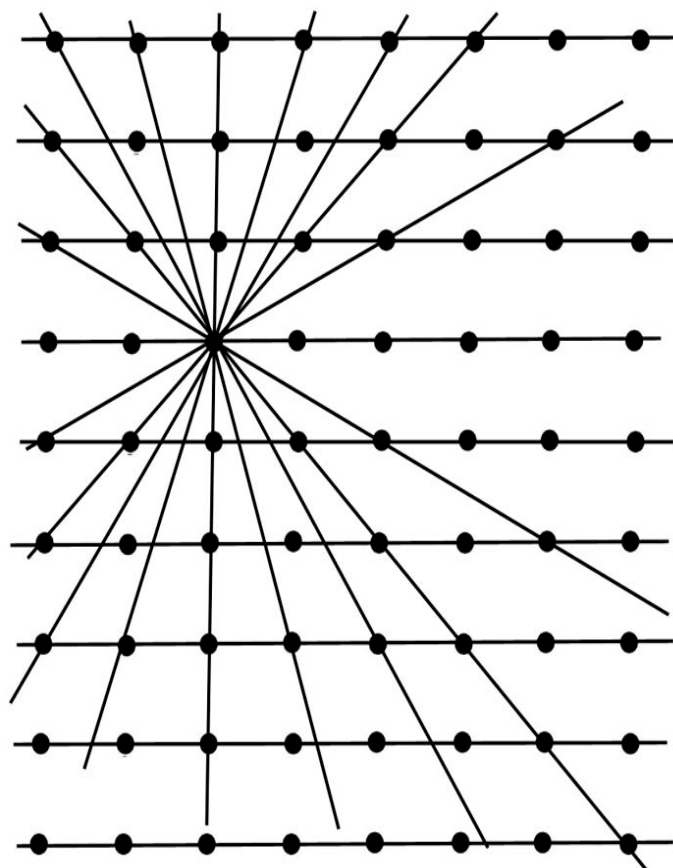


■ 点阵中的所有
结点均落在某一
晶列族上，且处
在同一晶列上的
结点具有相同的
周期性。





■ 晶格点阵包含无穷多个晶列族，
每个晶列族将所有结点包括在内。





■ 3、晶列的表示-----晶向指数

晶列的特征---晶列的方向----晶向.

表示晶列方向的一组数----晶向指数

-----表示晶列。

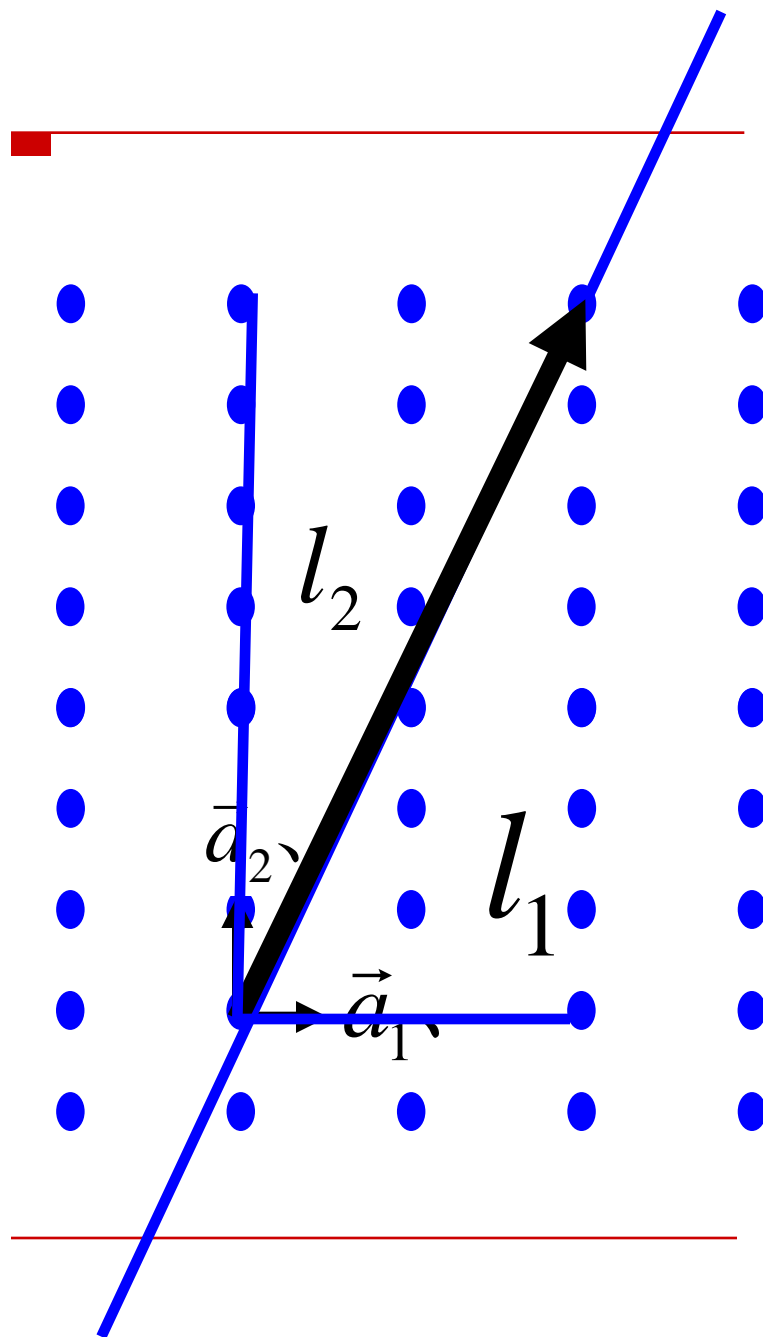
晶列指数总是互质的整数。



(1)、固体物理学
原胞基矢 \vec{a}_1 、 \vec{a}_2 、 \vec{a}_3
坐标原点O，
晶列中格点A的位
矢 \vec{R}_l 为：

$$\vec{R}_l = l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3$$

l_1 , l_2 , l_3 为整数。





■ 设 l_1, l_2, l_3 的最大公约数为 n ,

$$l_1 = nl_1^*$$

$$l_2 = nl_2^*$$

$$l_3 = nl_3^*$$

■ 则用 $[l_1^*, l_2^*, l_3^*]$ 表示晶列 OA



■ 取结晶学原胞基矢 \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} 为坐标轴的单位矢量, 晶格中任一点为原点O, 晶列中格点A的位矢为:

$$\vec{R}_l = m'\vec{a} + n'\vec{b} + p'\vec{c}$$

m' , n' , p' 为有理数,



设 m, n, p 为三个互质的整数，且

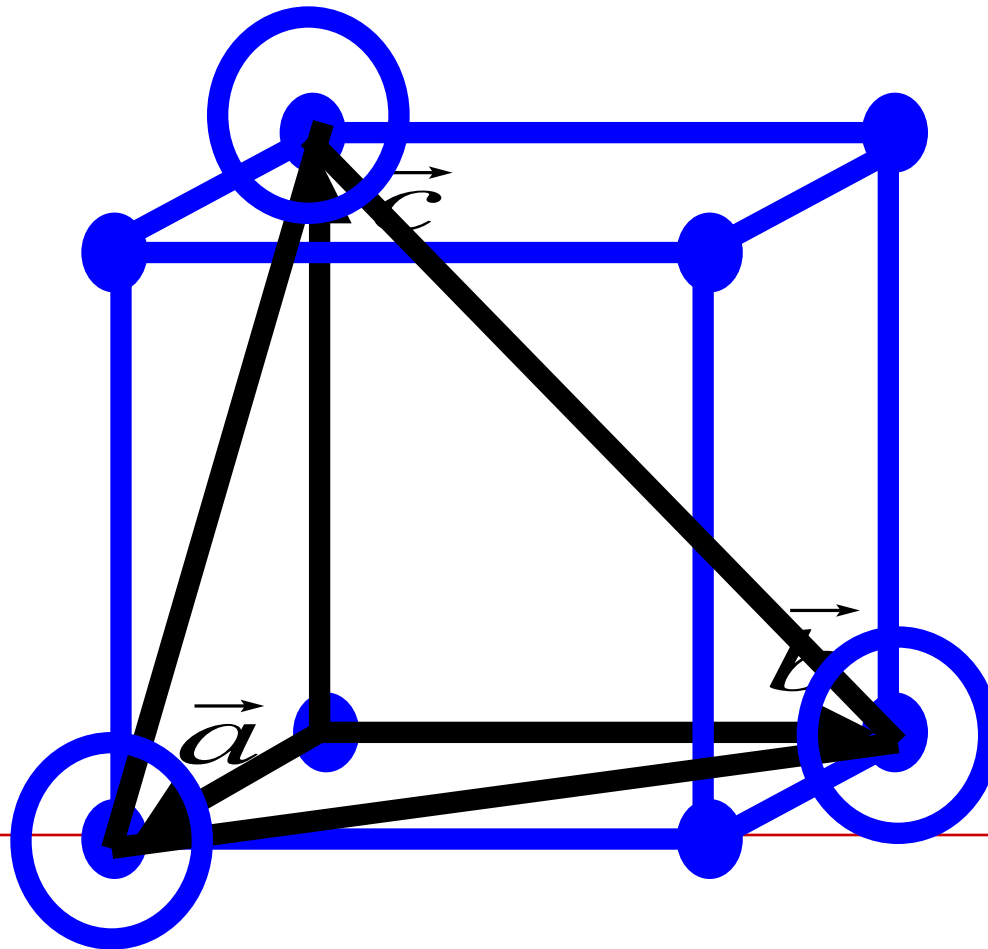
$$m:n:p = m':n':p',$$

则可用 $[m, n, p]$ 表示晶列 OA



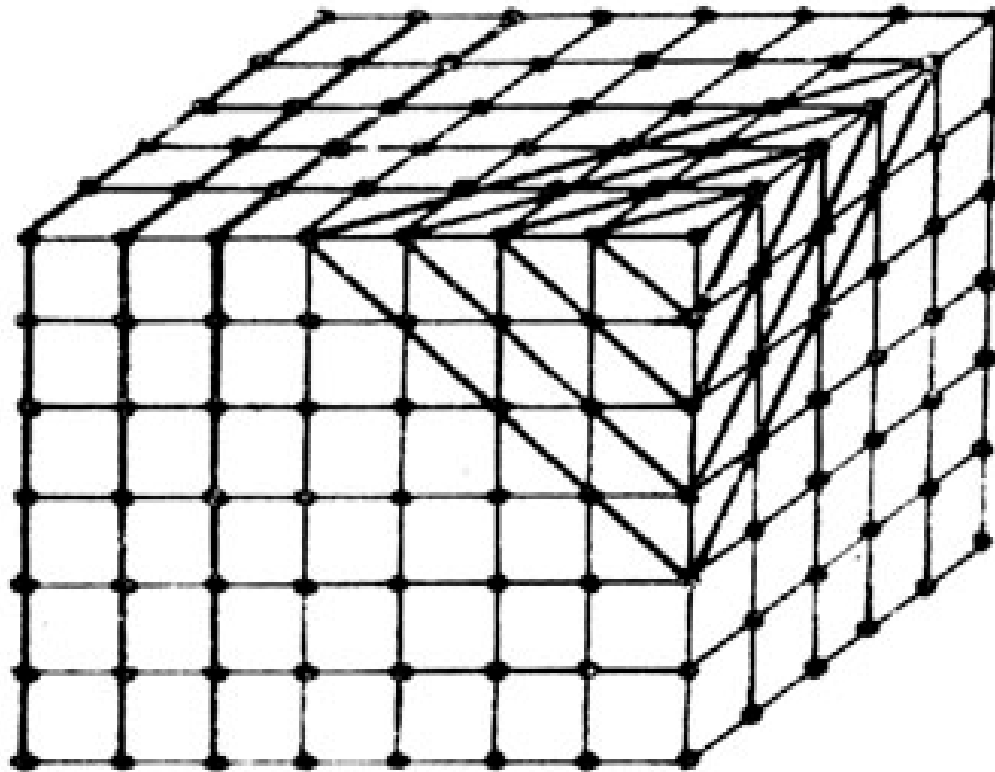
二. 晶面

通过任何三个**格点**的平面----晶面





晶面族---通过任一格点做全同晶面和某晶面平行， 构成一族平行晶面

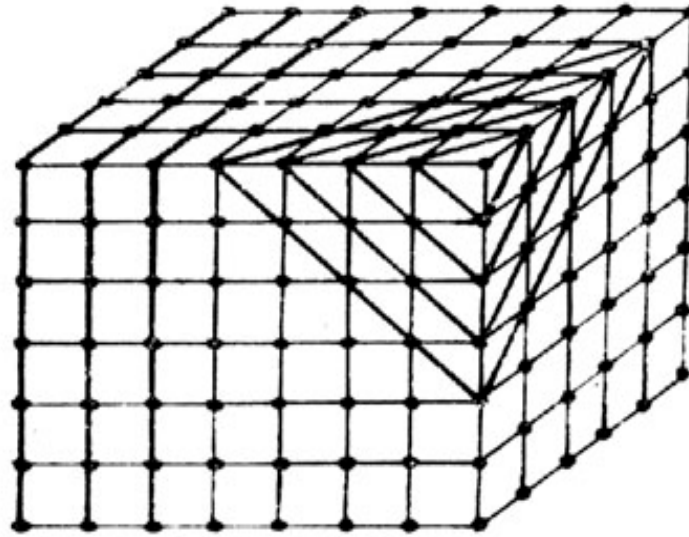




-
- 一个晶面族包含了所有格点，且
各晶面上格点分布情况完全相同
 - 一个晶面族包含了所有格点，且
各晶面上格点分布情况完全相同
-



■ 晶格中存在无限多族平行晶面族



■ 晶面族可用晶面的法线方向及晶面间距加以表征。



2. 晶面的性质:

(1)、通过任一格点可做全同晶面与某一晶面平行，构成一族晶面----晶面族。所有格点都在此晶面族上。



- (2)、对于某一特定晶面族，其所有晶面不仅平行，而且等距。
 - (3)、晶格中存在无限多族晶面族。
 - (4)、晶面族可用晶面的法线方向及晶面的面间距加以表征
-



3、晶面指数

- 怎么表示晶面？
 - 为什么可用一组互质整数表示？
 - 怎样求这组互质的整数？
-



晶面的表示:

(1)、晶面法线的方向----方向余弦。

(2)、晶面在三个基矢上的截距。



➤ 用三个互质整数表示晶面

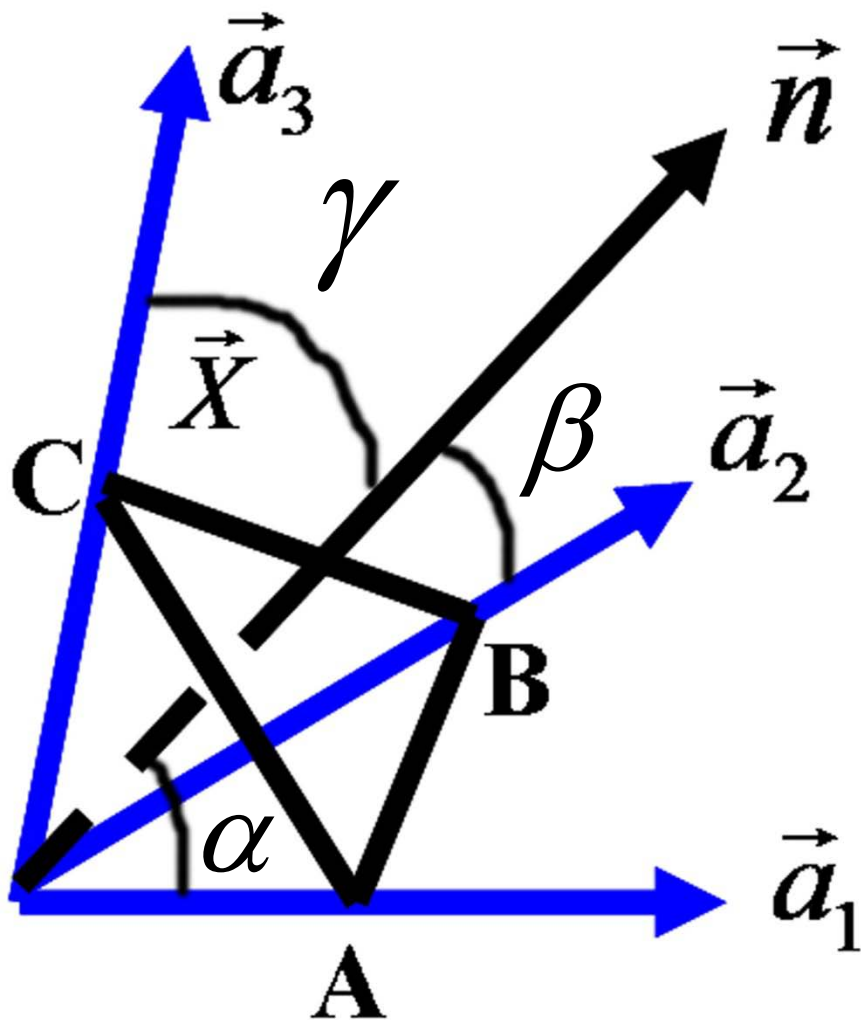
- 为什么可用三个互质整数表示晶面？

可以证明：

晶面法线方向余弦之比等于三个整数之比

$$\cos(\vec{a}, \vec{n}) : \cos(\vec{b}, \vec{n}) : \cos(\vec{c}, \vec{n})$$

$$= h_1 : h_2 : h_3$$



方向余弦:

$\cos \alpha$

$\cos \beta$

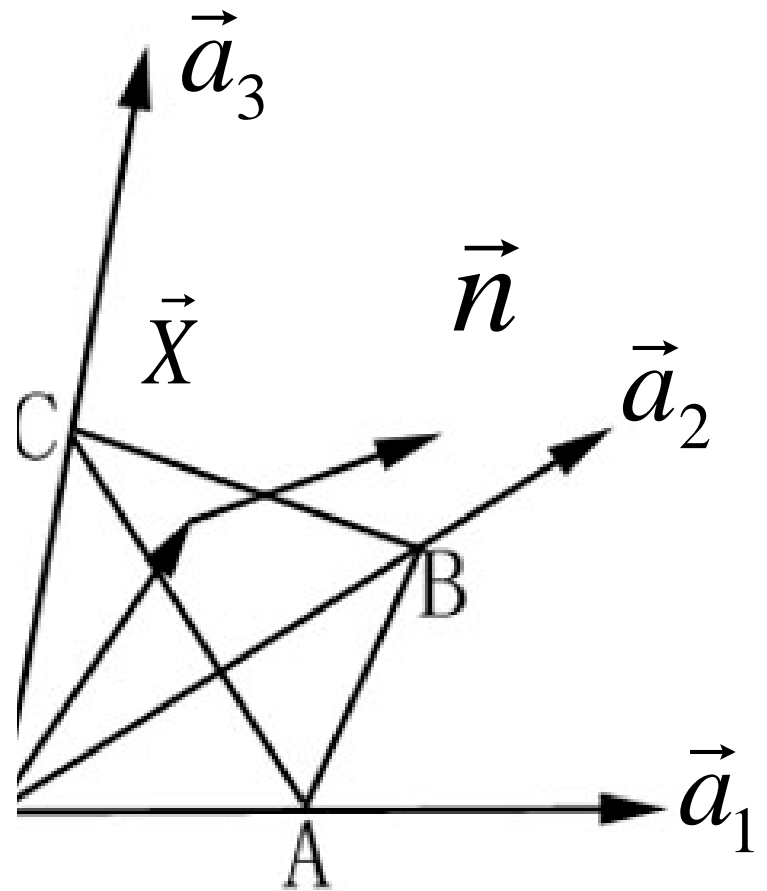
$\cos \gamma$



取某格点为坐标
原点，以固体物理
学原胞三个基矢

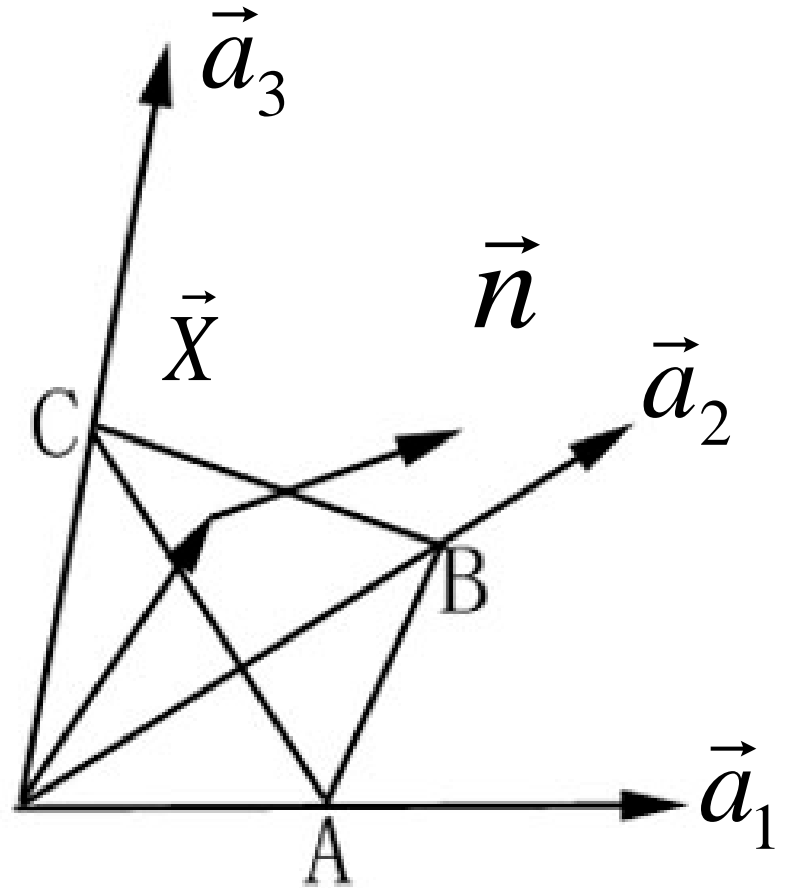
$$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$$

为坐标系坐标轴。





设晶面族的面间距
为 d ，晶面法线的
单位矢量为 \vec{n} ，
 \vec{X} 为晶面族中晶
面ABC上任一点
的位矢。

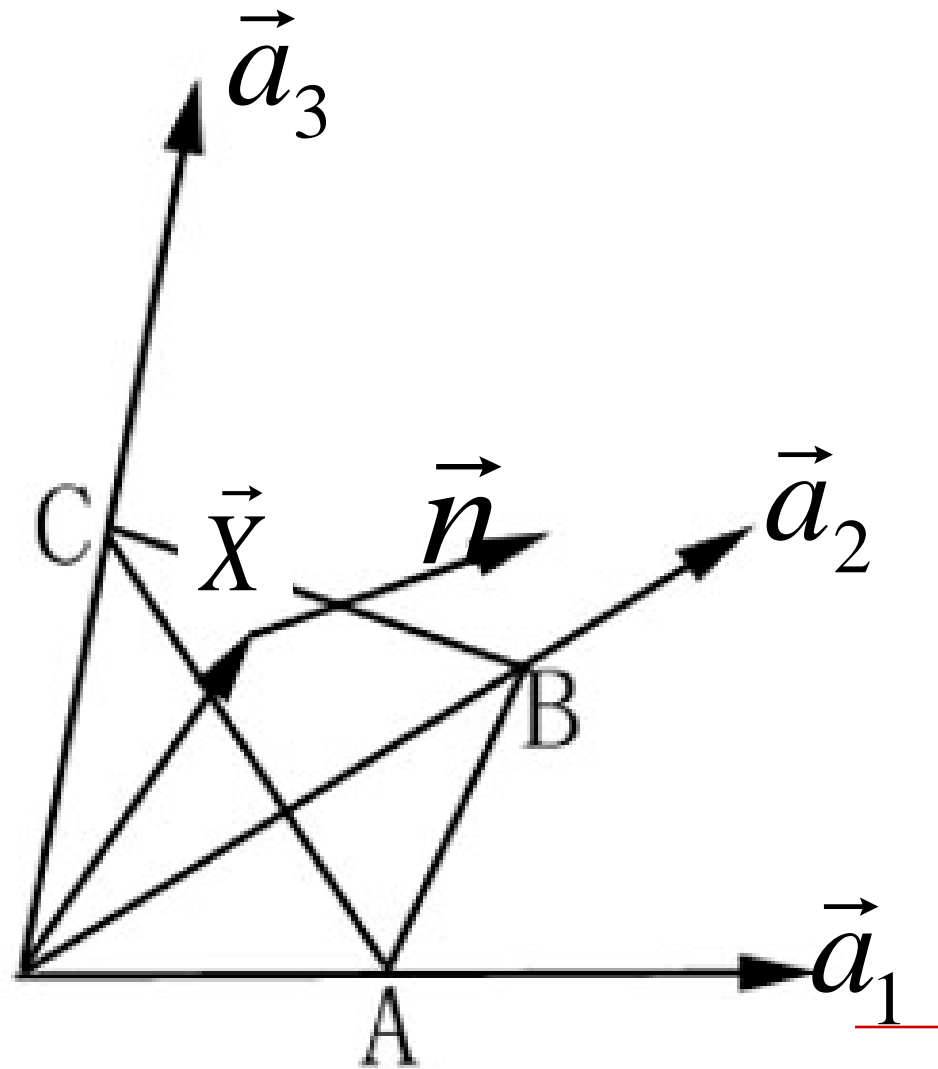




则:

$$\vec{X} \bullet \vec{n} = \mu d$$

μ 为整数

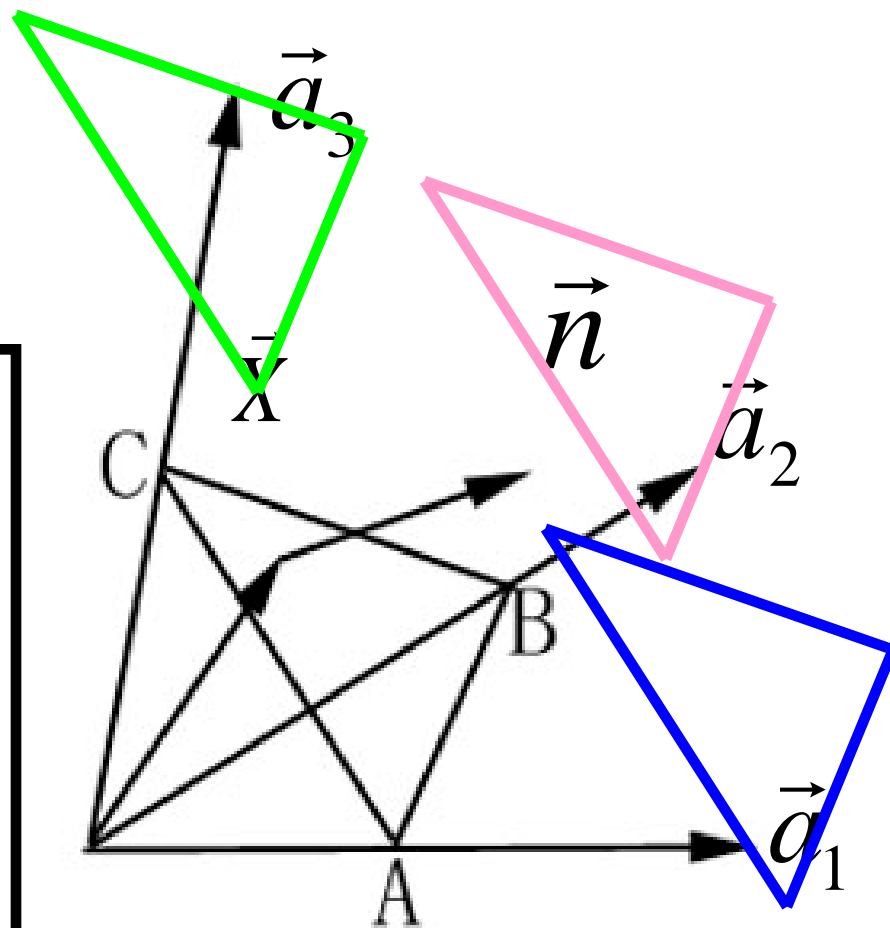




一族晶面包含了
晶格中所有格点

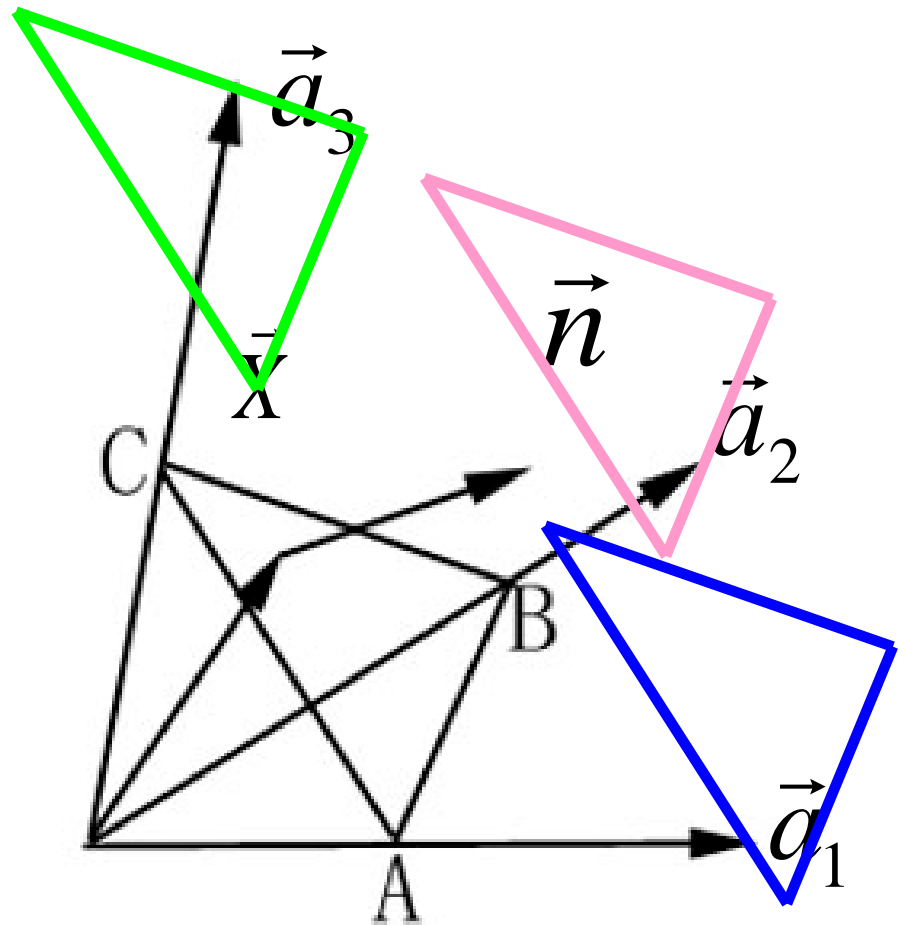


基矢 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 末端
的格点必然分别
落在这一晶面族
的不同晶面上



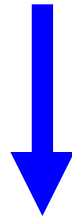


假设，基矢末端
处的格点分别落
在距离坐标原点
 h_1d, h_2d, h_3d 的
晶面上 ($h_1, h_2,$
 h_3 为整数)





根据 $\vec{X} \bullet \vec{n} = \mu d$



$$\vec{a}_1 \bullet \vec{n} = h_1 d$$

$$\vec{a}_2 \bullet \vec{n} = h_2 d$$

$$\vec{a}_3 \bullet \vec{n} = h_3 d$$



$$a_1 \cos(\vec{a}_1, \vec{n}) = h_1 d$$

$$a_2 \cos(\vec{a}_2, \vec{n}) = h_2 d$$

$$a_3 \cos(\vec{a}_3, \vec{n}) = h_3 d$$

由于 $a_1 = a_2 = a_3 = 1$, 所以



$$\cos(\vec{a}, \vec{n}) : \cos(\vec{a}, \vec{n}) : \cos(\vec{a}, \vec{n})$$

$$= h_1 : h_2 : h_3$$

——晶面法线的方向余弦之比等于三个整数之比。



晶面法线方向余弦之比等于三个整数之比



将这三个整数化成一组互质的整数



用这组互质整数表示晶面法线的方向余弦



可用这组互质整数来表征晶面



在固体物理学原胞基矢体系下：

用 $(h_1 h_2 h_3)$ 表示晶面族，

h_1, h_2, h_3 称为晶面指数

在结晶学原胞基矢体系下：

用 (hkl) 表示晶面族，

h, k, l 称为Miller(密勒)指数



➤ 怎样确定晶面指数

实际操作： 面在x, y, z轴上的截距分别为a, b, c

面方程：
$$\frac{x}{a} + \frac{y}{b} + \frac{z}{c} = 1$$

先求出晶面在三个基矢上的截距



再将这三个截距的倒数之比化成
一组互质的整数之比



可以证明：晶面在三个基矢上截距的倒数之比等于该晶面法线方向余弦之比。

$$\begin{aligned} & \cos(\vec{a}_1, \vec{n}) : \cos(\vec{a}_2, \vec{n}) : \cos(\vec{a}_3, \vec{n}) \\ &= \frac{1}{r} : \frac{1}{s} : \frac{1}{t} \end{aligned}$$

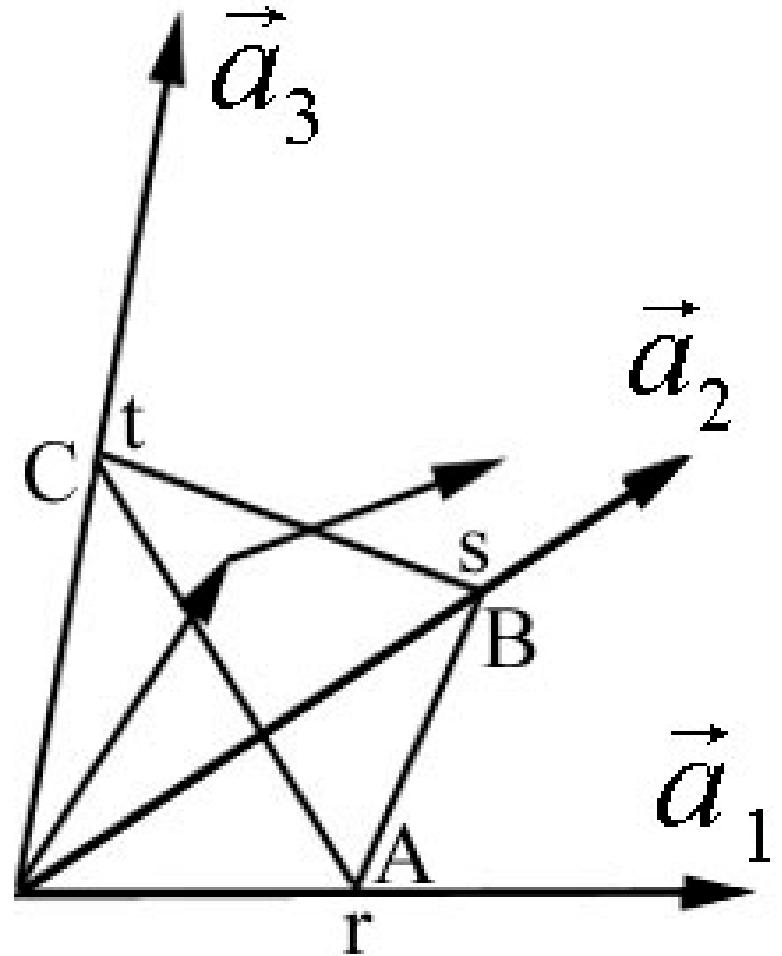


晶面ABC在三个
基矢上的截距为：

$$r, s, t$$

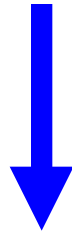
交点A、B、C的
位矢分别为：

$$r\vec{a}_1, s\vec{a}_2, t\vec{a}_3$$





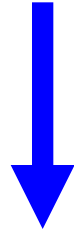
根据 $\vec{X} \cdot \vec{n} = \mu d$



$$r\vec{a}_1 \cdot \vec{n} = \mu d$$

$$s\vec{a}_2 \cdot \vec{n} = \mu d$$

$$t\vec{a}_3 \cdot \vec{n} = \mu d$$



$$ra_1 \cos(\vec{a}_1, \vec{n}) = \mu d$$

$$sa_2 \cos(\vec{a}_2, \vec{n}) = \mu d$$

$$ta_3 \cos(\vec{a}_3, \vec{n}) = \mu d$$



由于 $a_1 = a_2 = a_3 = 1$ ， 所以

$$\cos(\vec{a}_1, \vec{n}) = \frac{\mu d}{r}$$

$$\cos(\vec{a}_2, \vec{n}) = \frac{\mu d}{s}$$

$$\cos(\vec{a}_3, \vec{n}) = \frac{\mu d}{t}$$



$$\cos(\vec{a}_1, \vec{n}) : \cos(\vec{a}_2, \vec{n}) : \cos(\vec{a}_3, \vec{n})$$
$$= \frac{1}{r} : \frac{1}{s} : \frac{1}{t}$$

晶面法线方向余弦之比等于该晶面在三个基矢上截距的倒数之比。



实际操作：

先求出该晶面在三个基矢(坐标轴)上的截距，然后，将这三个截距的倒数之比化成一组互质的整数之比，这组互质整数----晶面指数。



若某晶面与某基矢上相截在负方向，则在晶面指数上面加一个负号表示。

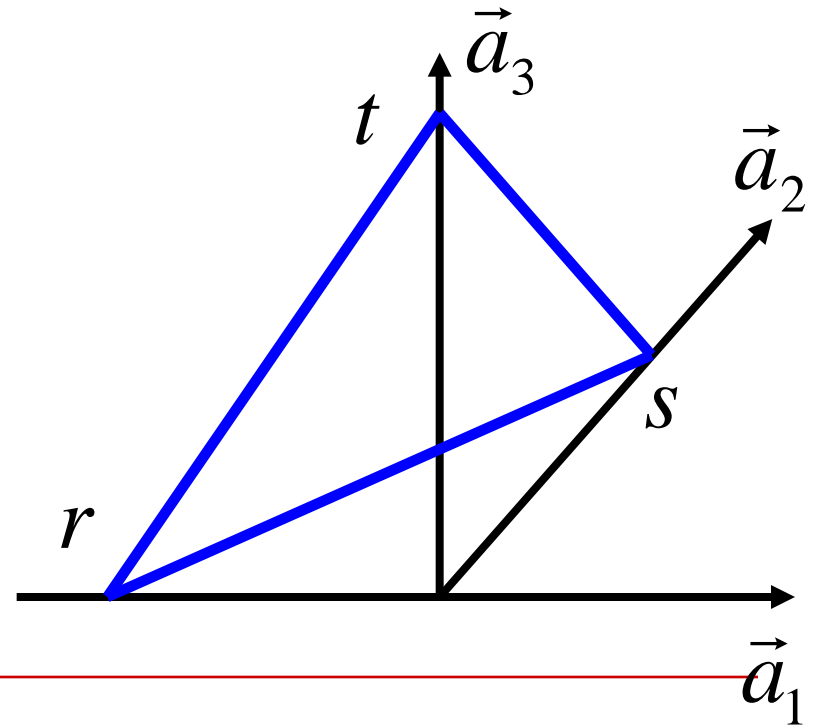
如：

$$r = -|r|$$

$$s = |s|$$

$$t = |t|$$

晶面指数 $(\bar{h}_1 h_2 h_3)$

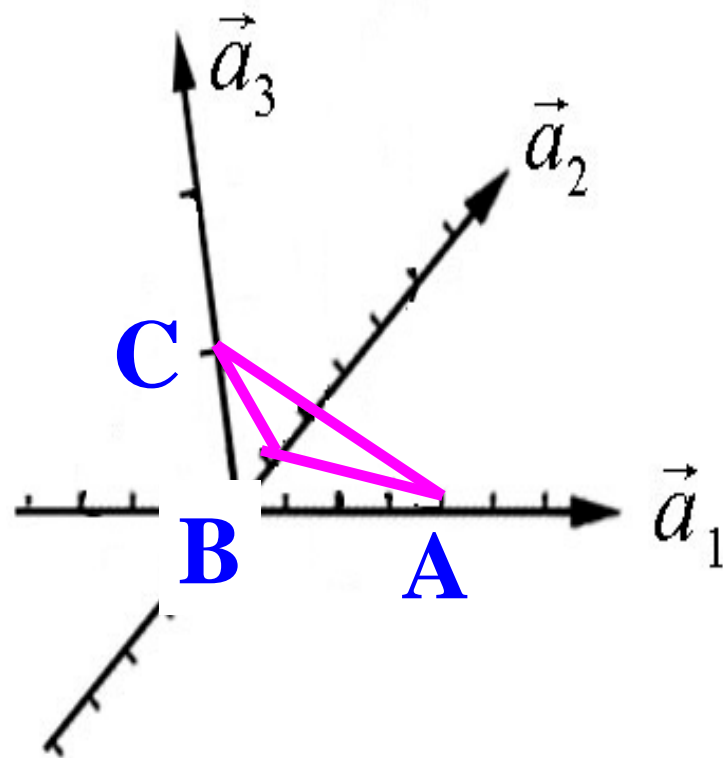




晶面ABC在三个基矢上的截距分别为：4, 1, 1

截距的倒数分别为：

1/4, 1, 1



晶面ABC的晶面指数为 (144)



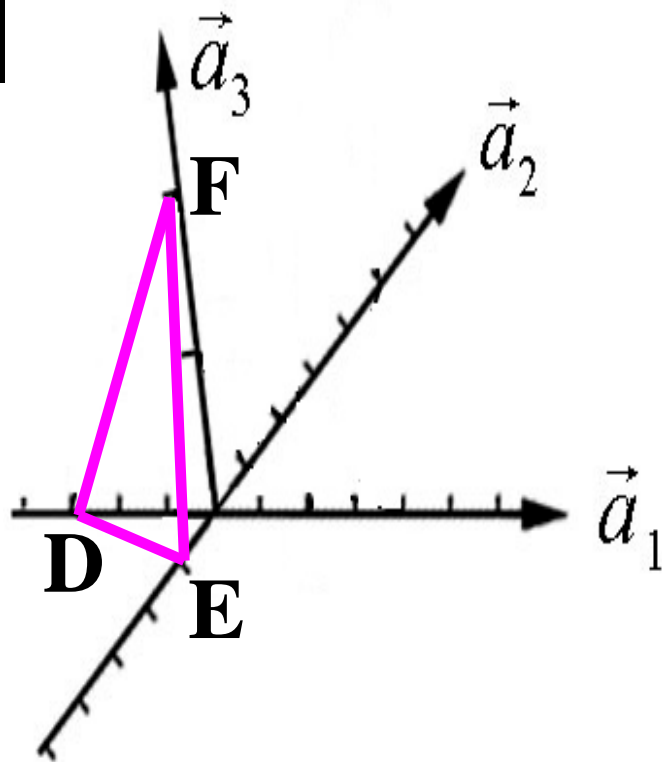
晶面DEF在三个基矢上的截距分别为：-3, -1, 2



截距的倒数分别为：
-1/3, -1, 1/2



晶面DEF的晶面指数为 $(\bar{2}\bar{6}3)$

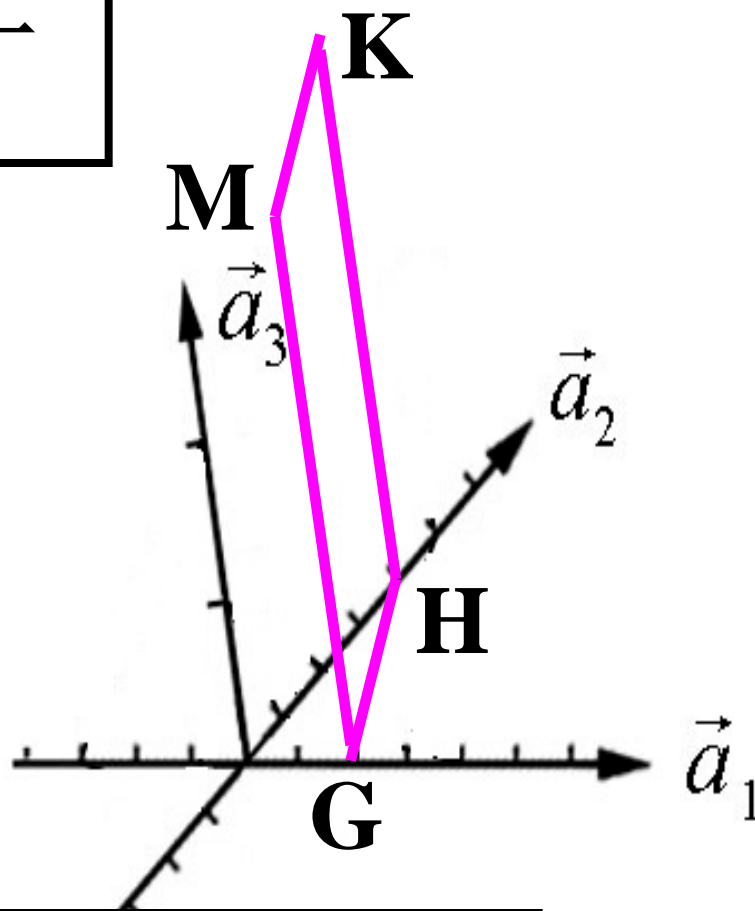




晶面**GHKM**在三个基矢上的
截距分别为： $2, 4, \infty$

截距的倒数分别为：
 $1/2, 1/4, 0$

晶面**GHKM**的晶面指数为 (210)





应掌握的知识点:

1. 晶列、晶面的定义和性质。
2. 确定晶向指数和晶面指数的方法。
3. 晶面法线余弦之比等于三个互质整数之比
(不仅应知道结论, 最好能证明)
4. 晶面在三个基矢上截距的倒数之比等于该晶面法线方向余弦之比。(不仅应知道结论, 最好能证明)



课堂练习

- 1、画出下列晶向： $[100]$, $[110]$, $[111]$, $[211]$, $[\bar{1}31]$, $[234]$
- 2、画出下列晶面： (100) , (110) , (111) , (211) , $(\bar{1}31)$, (234)
- 3、设某面心立方晶体晶格常数为 a ，求下列Miller指数晶面的面间距
 (100) , (110) , (111) , (211) , $(\bar{1}31)$, (234)
- 4、设某面心立方晶体晶格常数为 a ，求下列晶面指数晶面的面间距
 (100) , (110) , (111) , (211) , $(\bar{1}31)$, (234)

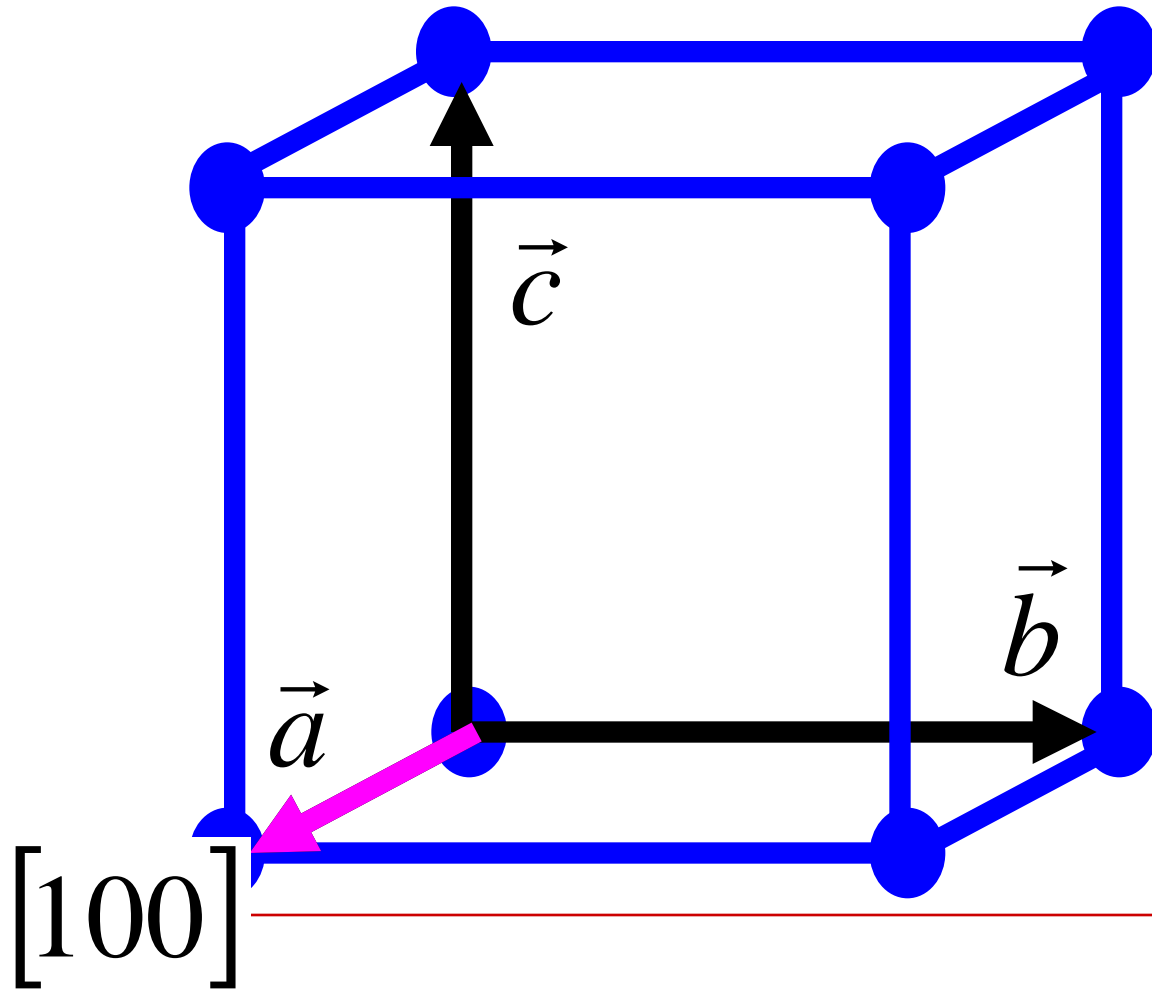


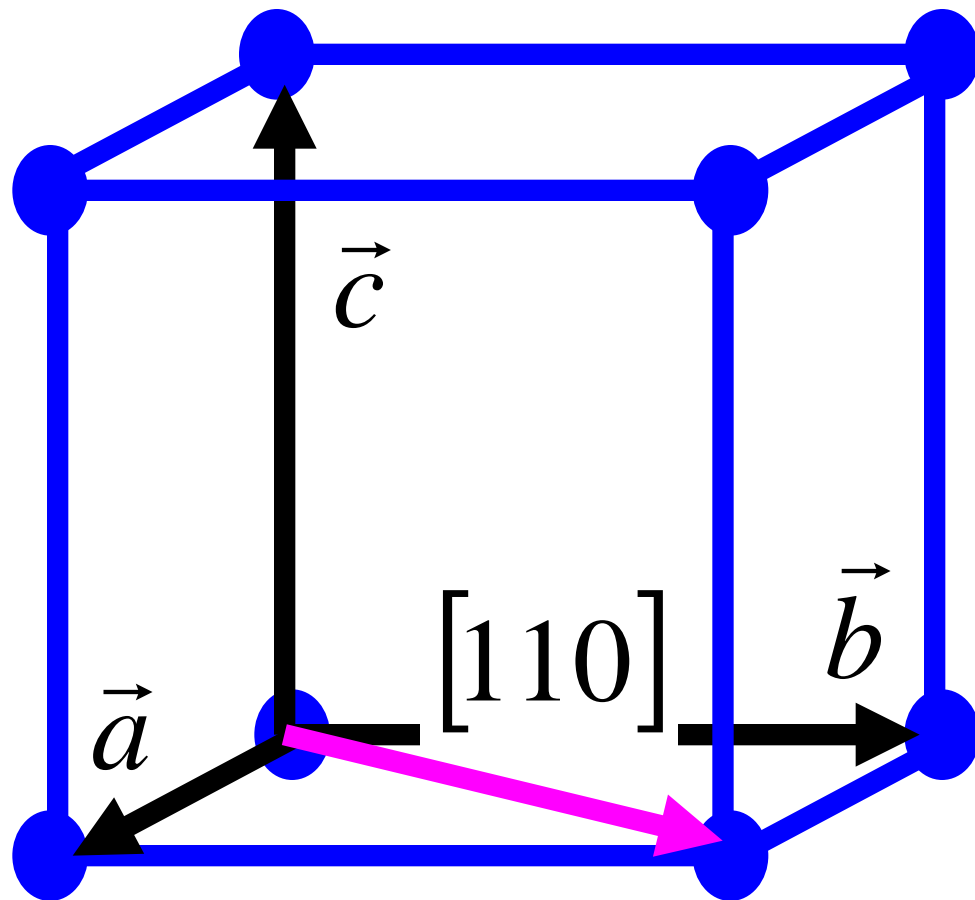
课堂练习

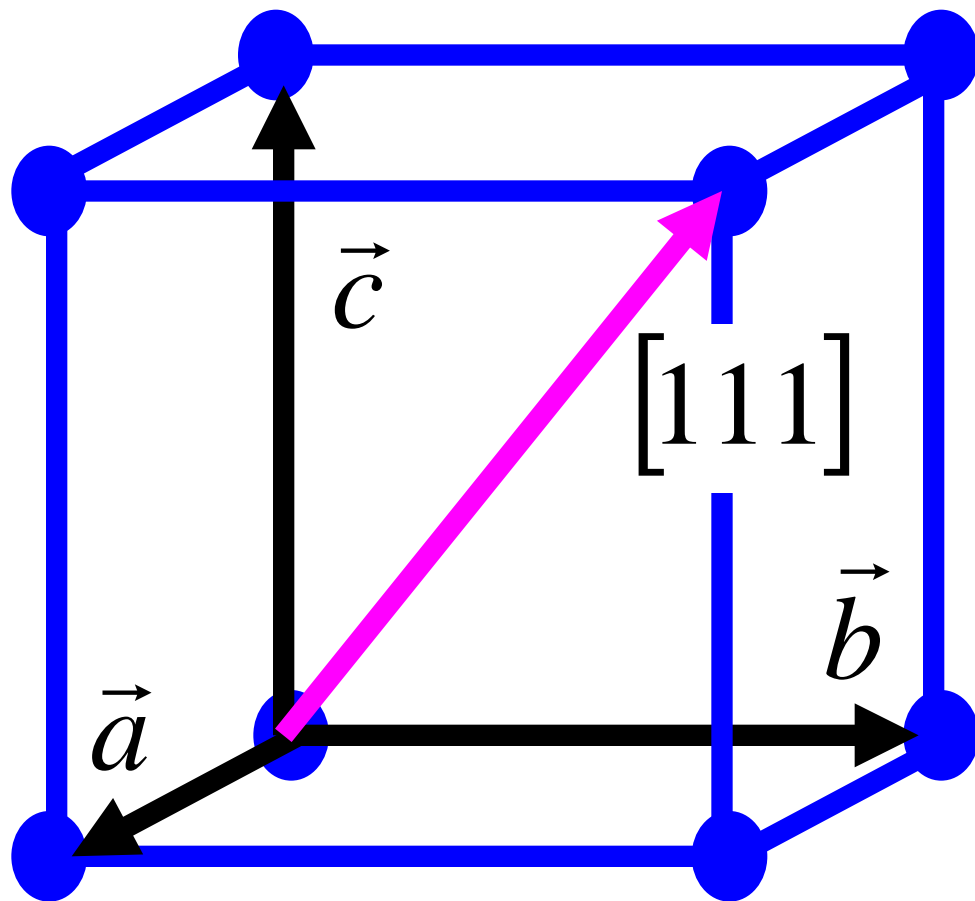
- 1、画出下列晶向： $[100]$, $[110]$, $[111]$, $[211]$, $[\bar{1}31]$, $[234]$
- 2、画出下列晶面： (100) , (110) , (111) , (211) , $(\bar{1}31)$, (234)
- 3、设某面心立方晶体晶格常数为 a ，求下列Miller指数晶面的面间距
 (100) , (110) , (111) , (211) , $(\bar{1}31)$, (234)
- 4、设某面心立方晶体晶格常数为 a ，求下列晶面指数晶面的面间距
 (100) , (110) , (111) , (211) , $(\bar{1}31)$, (234)

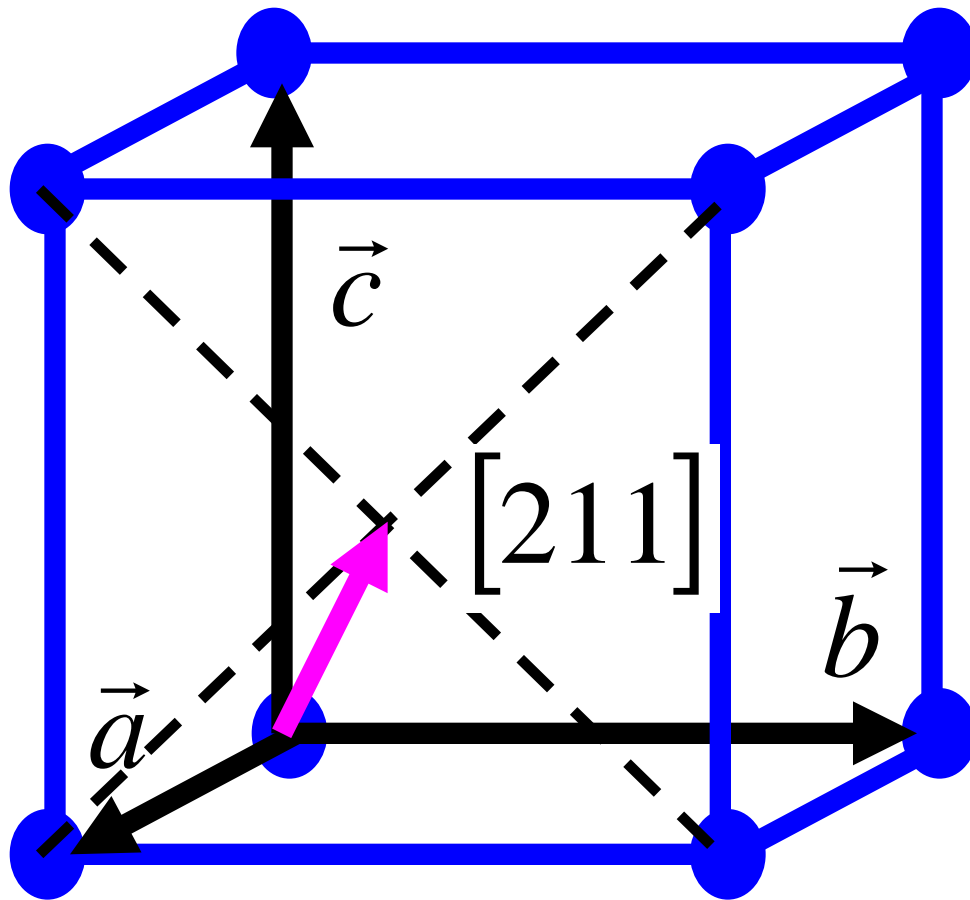


1、画出下列晶向： $[100]$, $[110]$, $[111]$, $[211]$, $[\bar{1}31]$, $[234]$

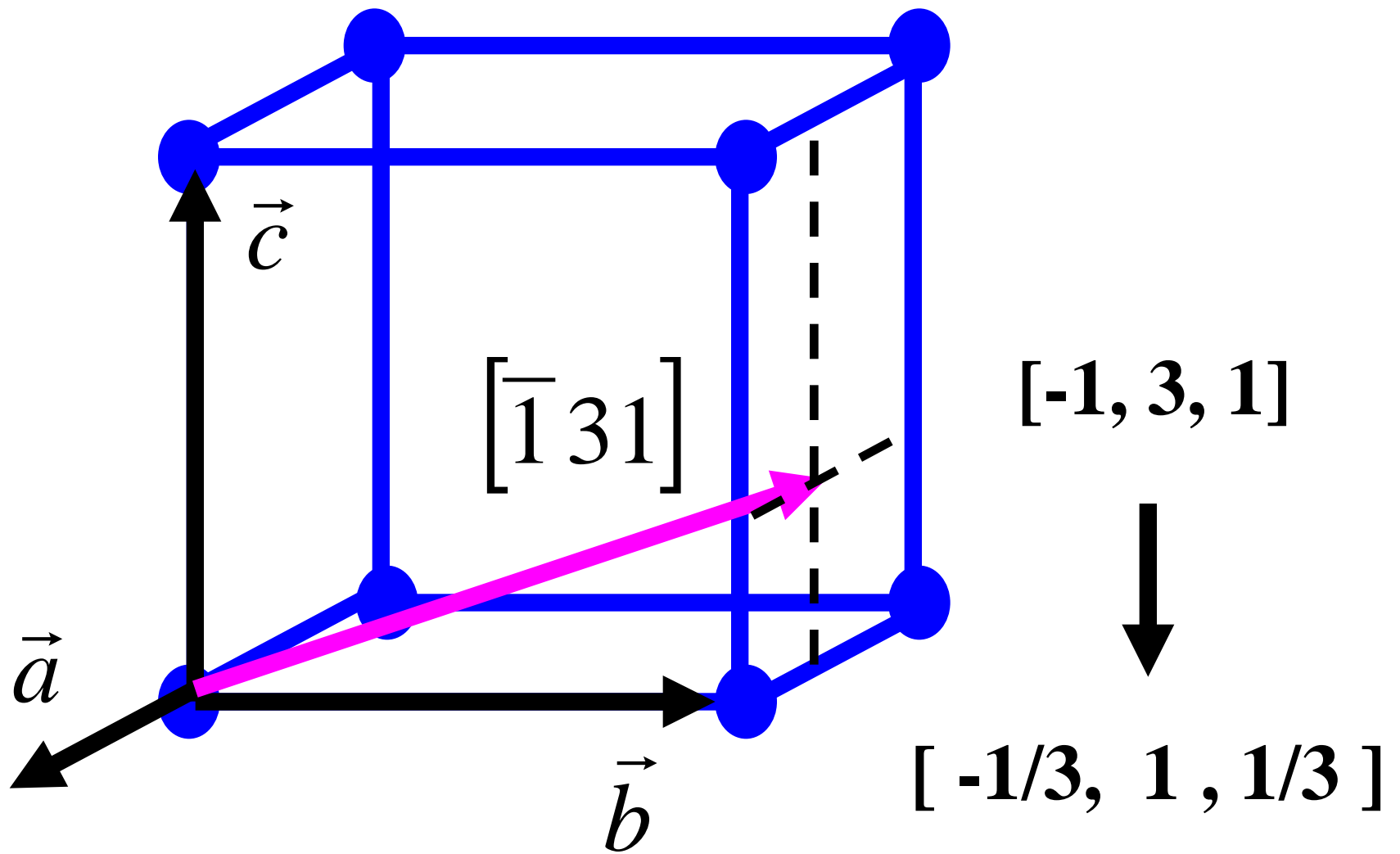


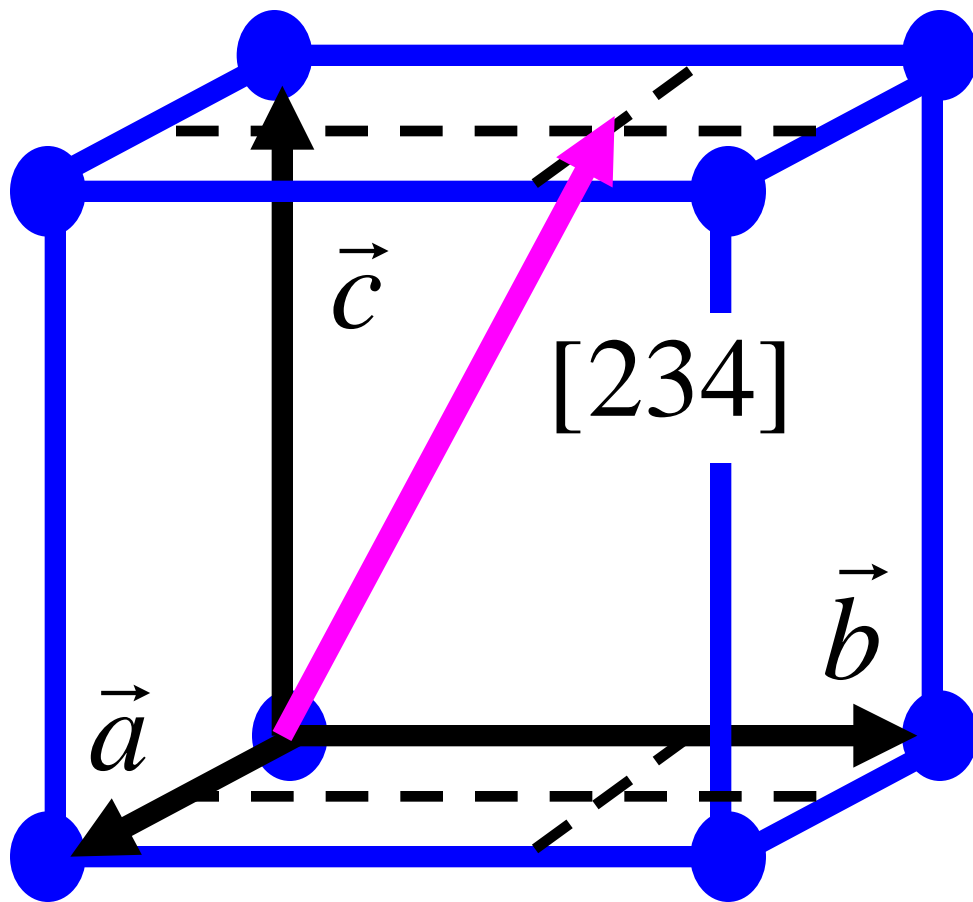






$$\begin{array}{c} [211] \\ \downarrow \\ [1, 1/2, 1/2] \end{array}$$





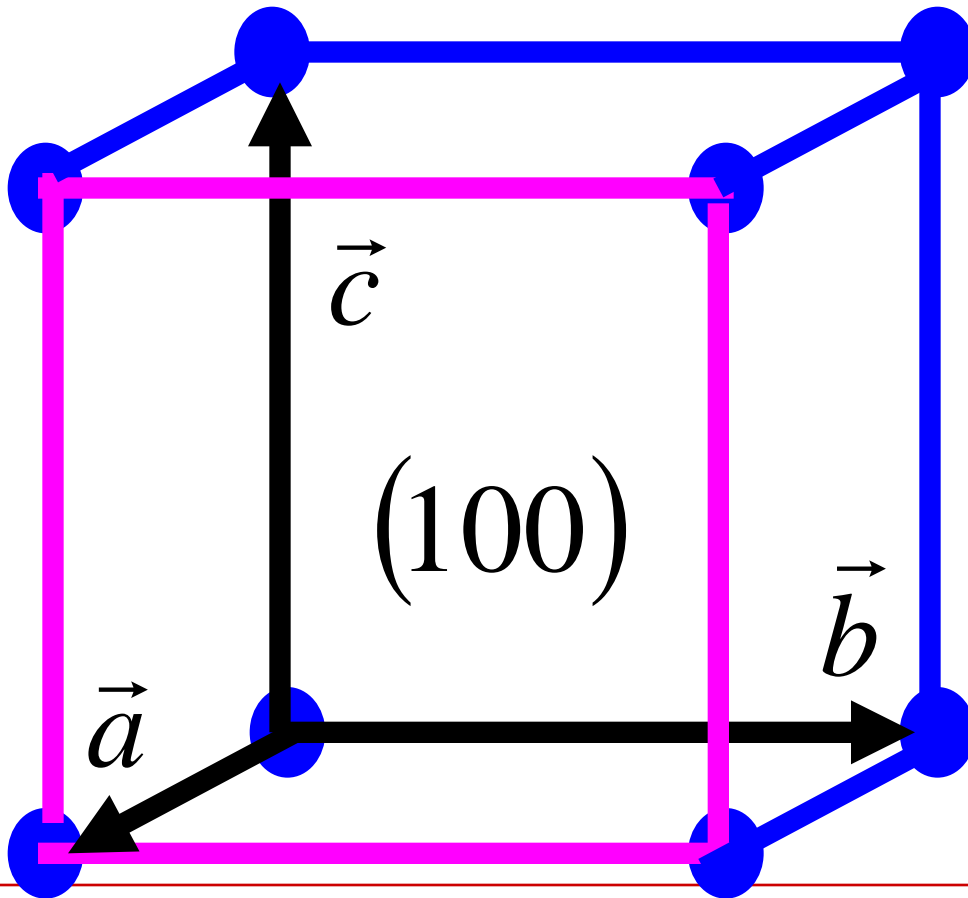
$[234]$



$[2/4, 3/4, 1]$

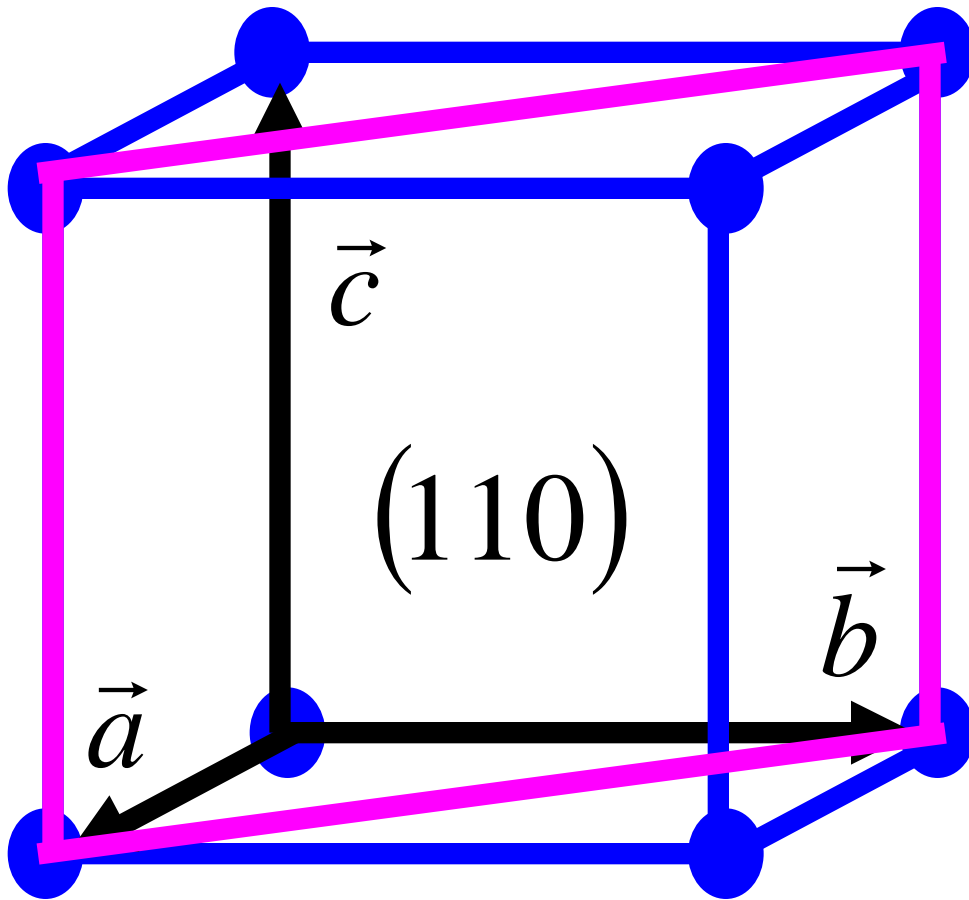


2、画出下列晶面： (100) , (110) , (111) , (211) , $(\bar{1}31)$, (234)



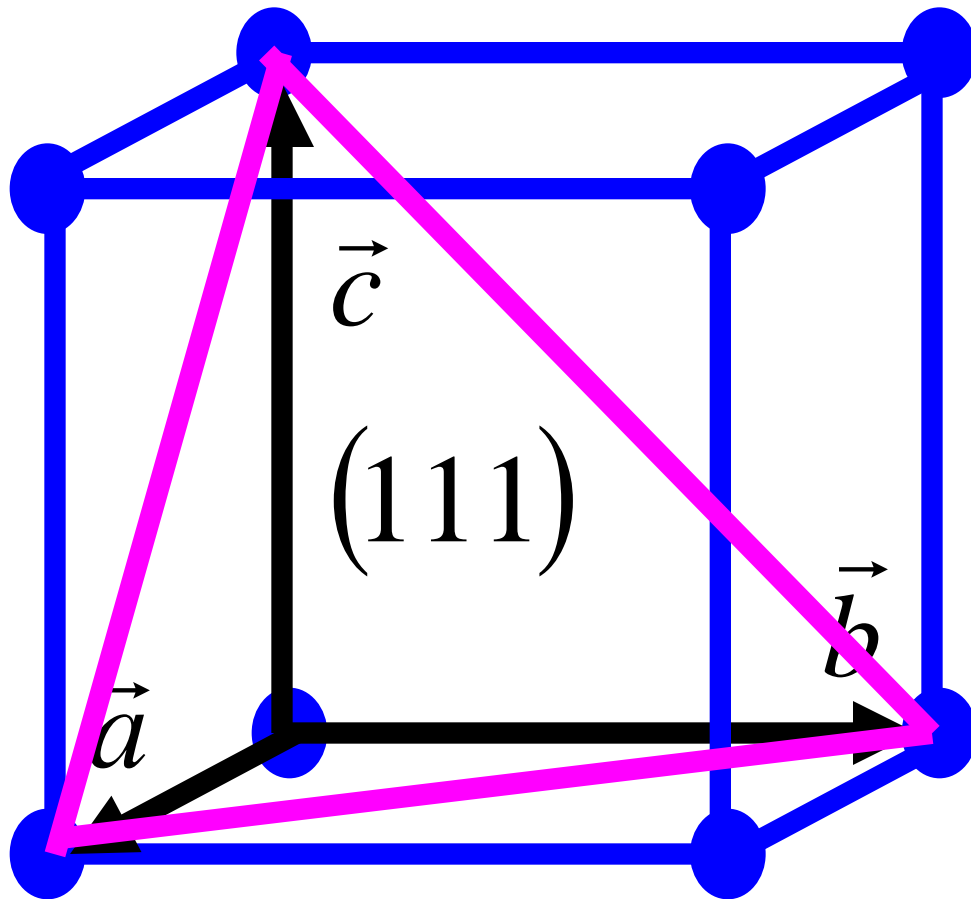
截距分别为：

$1, \infty, \infty$



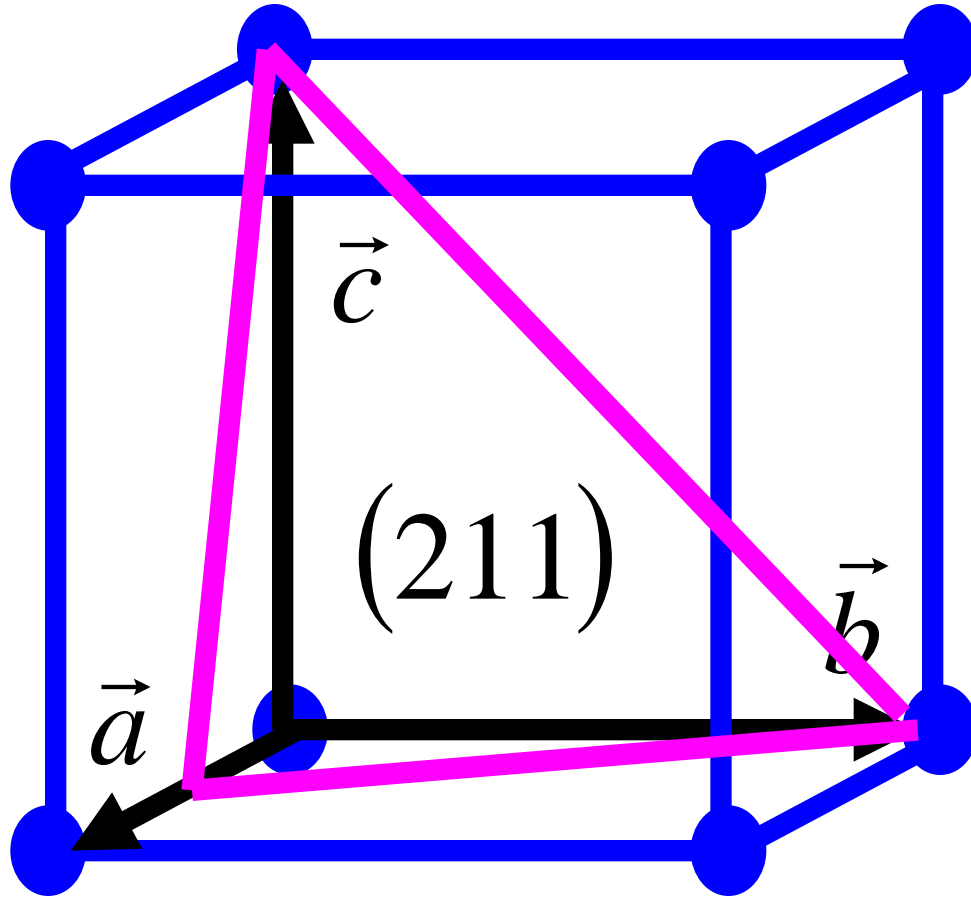
截距分别为

$1, 1, \infty$



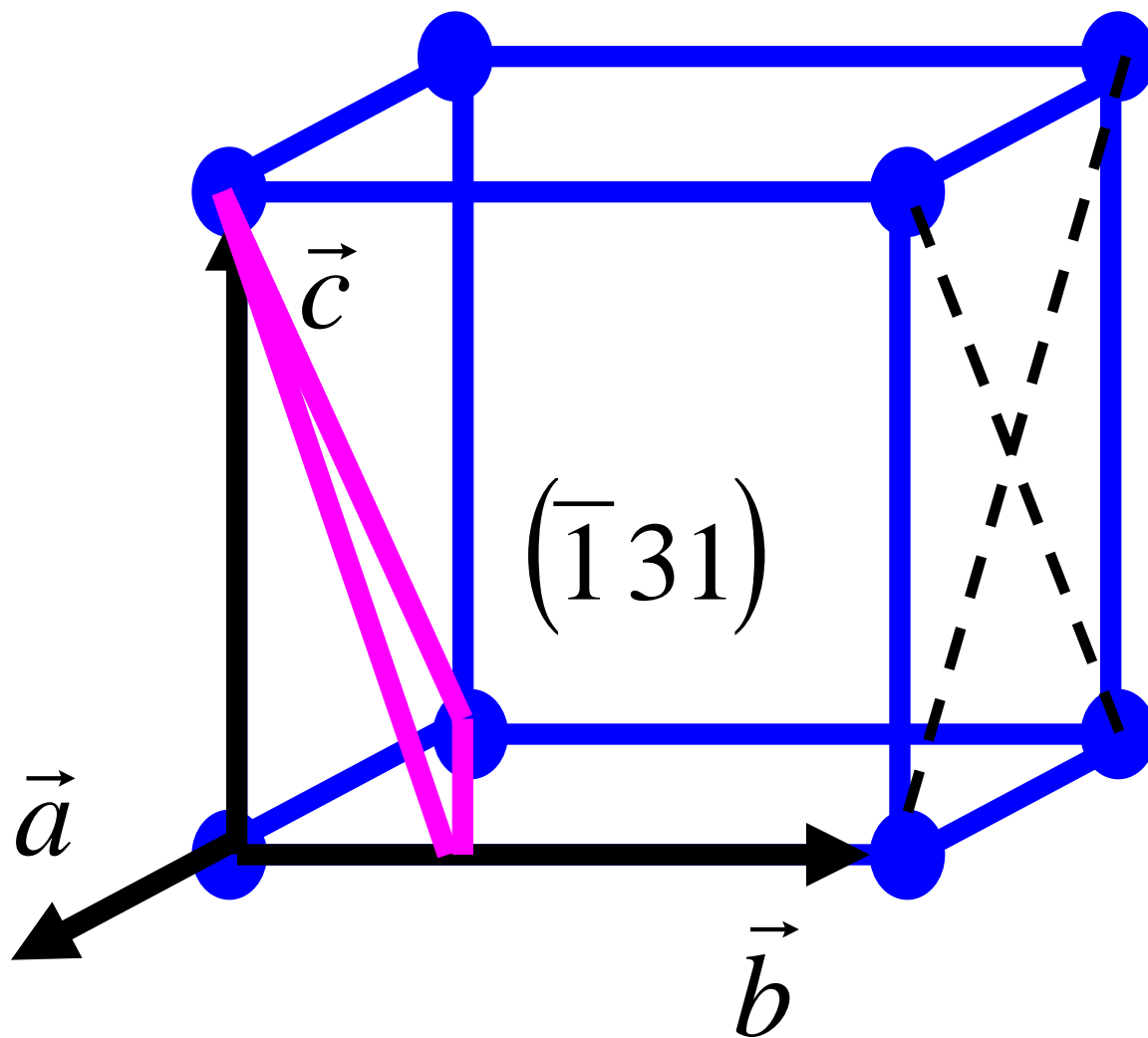
截距分别为

1, 1, 1



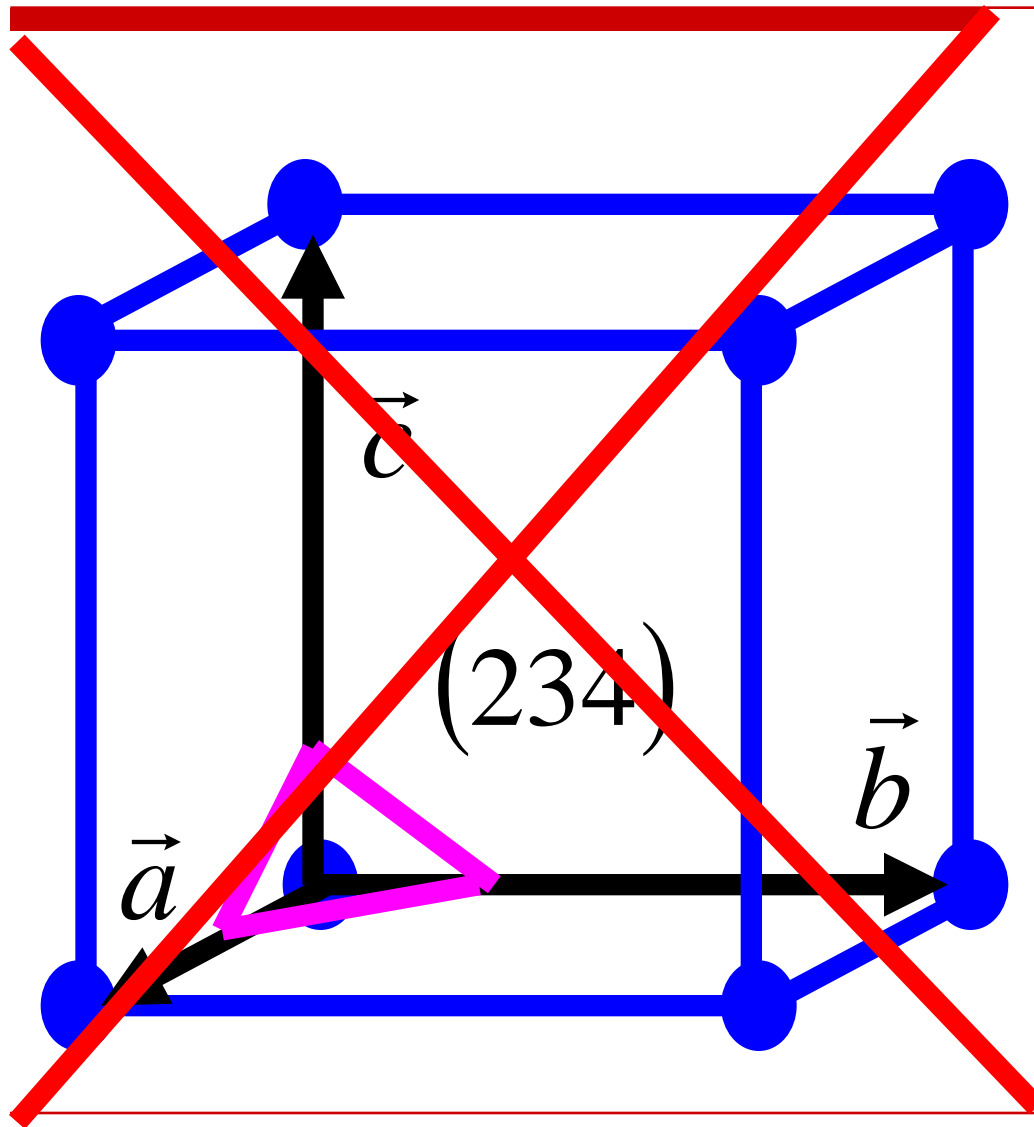
截距分别为

$1/2, 1, 1$



截距分别为

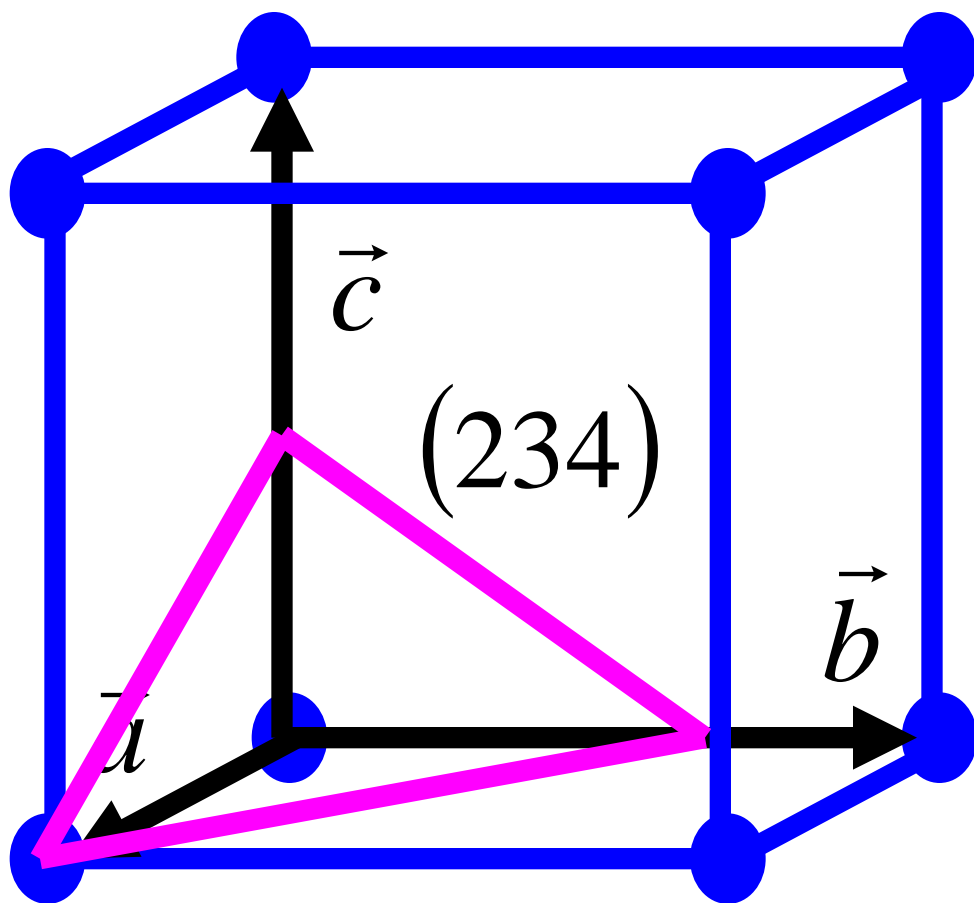
$-1, 1/3, 1$



截距分别为:

$1/2, 1/3, 1/4$

?



$(2, 3, 4)$



$(1, 3/2, 4/2)$

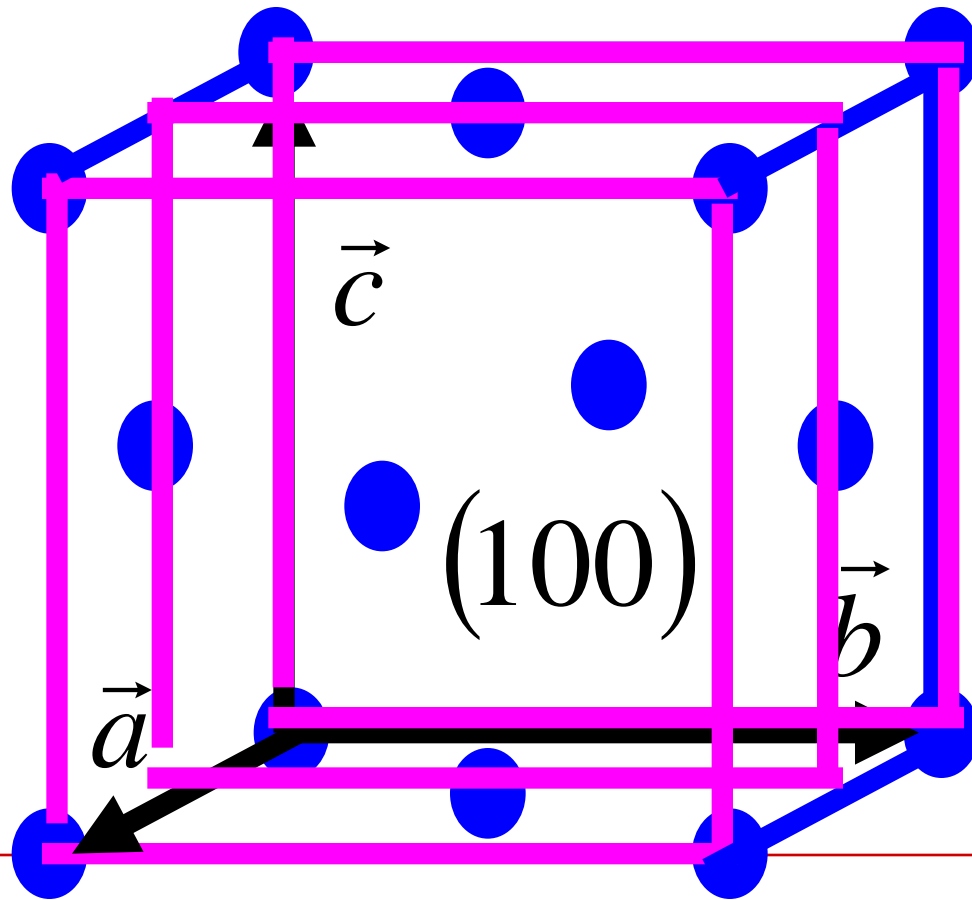
截距分别为:

$1, 2/3, 1/2$

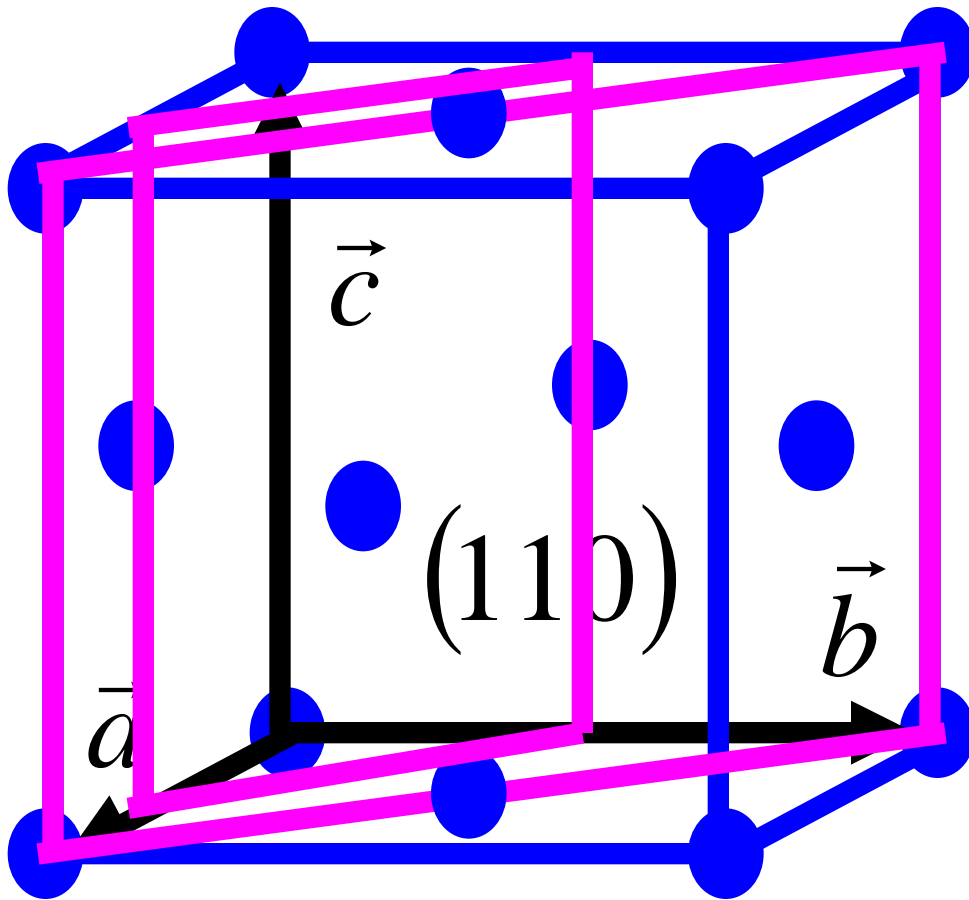


3、设某面心立方晶体晶格常数为 a ，求下列Miller指数晶面的面间距

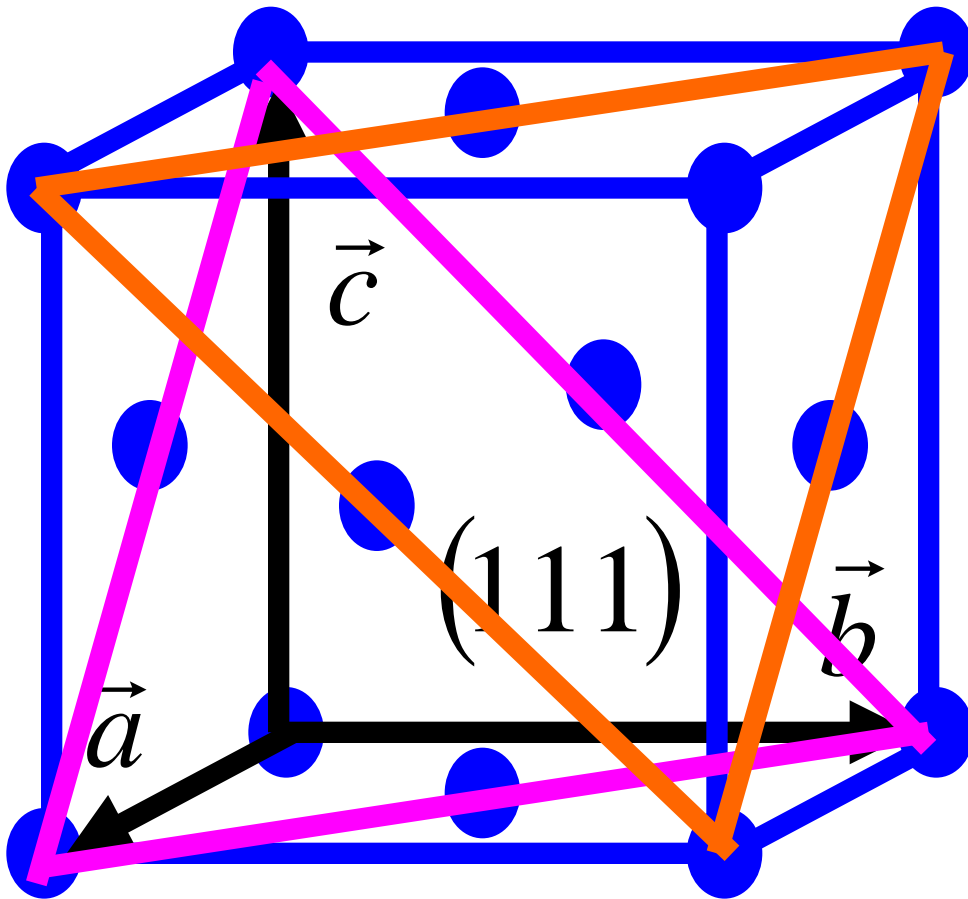
$$(100), (110), (111), (211), (\bar{1}31), (234)$$



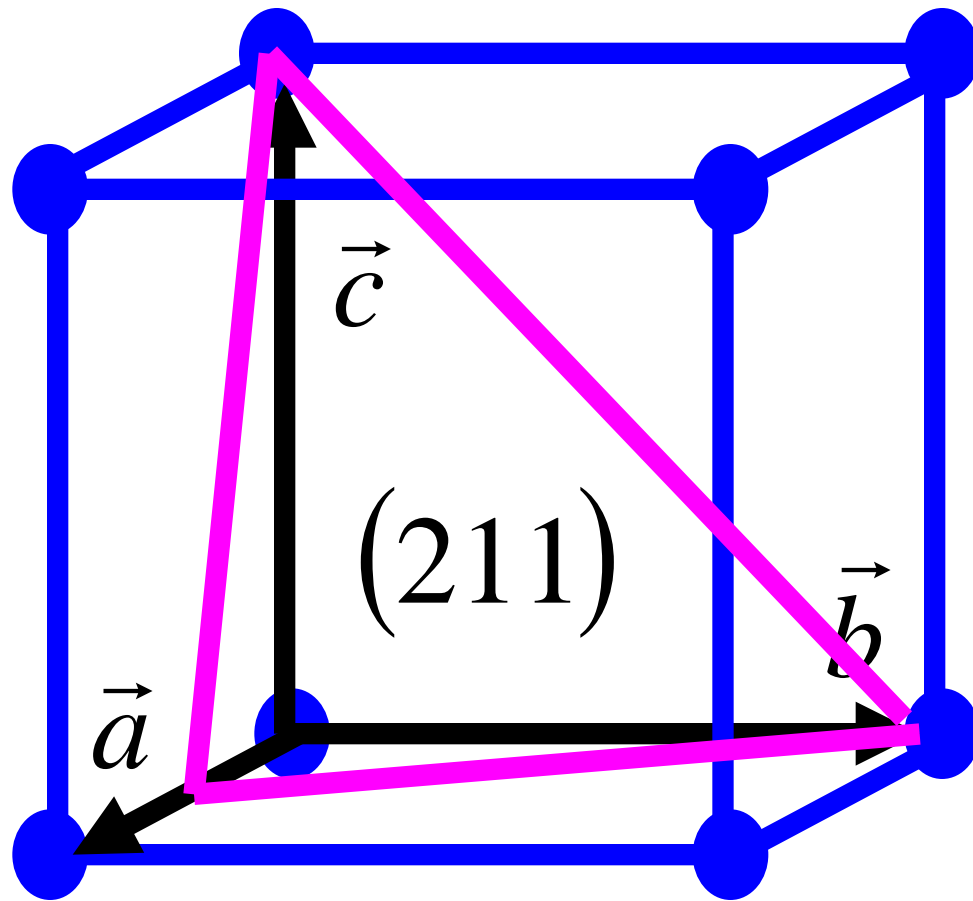
$$d_{100} = \frac{a}{2}$$

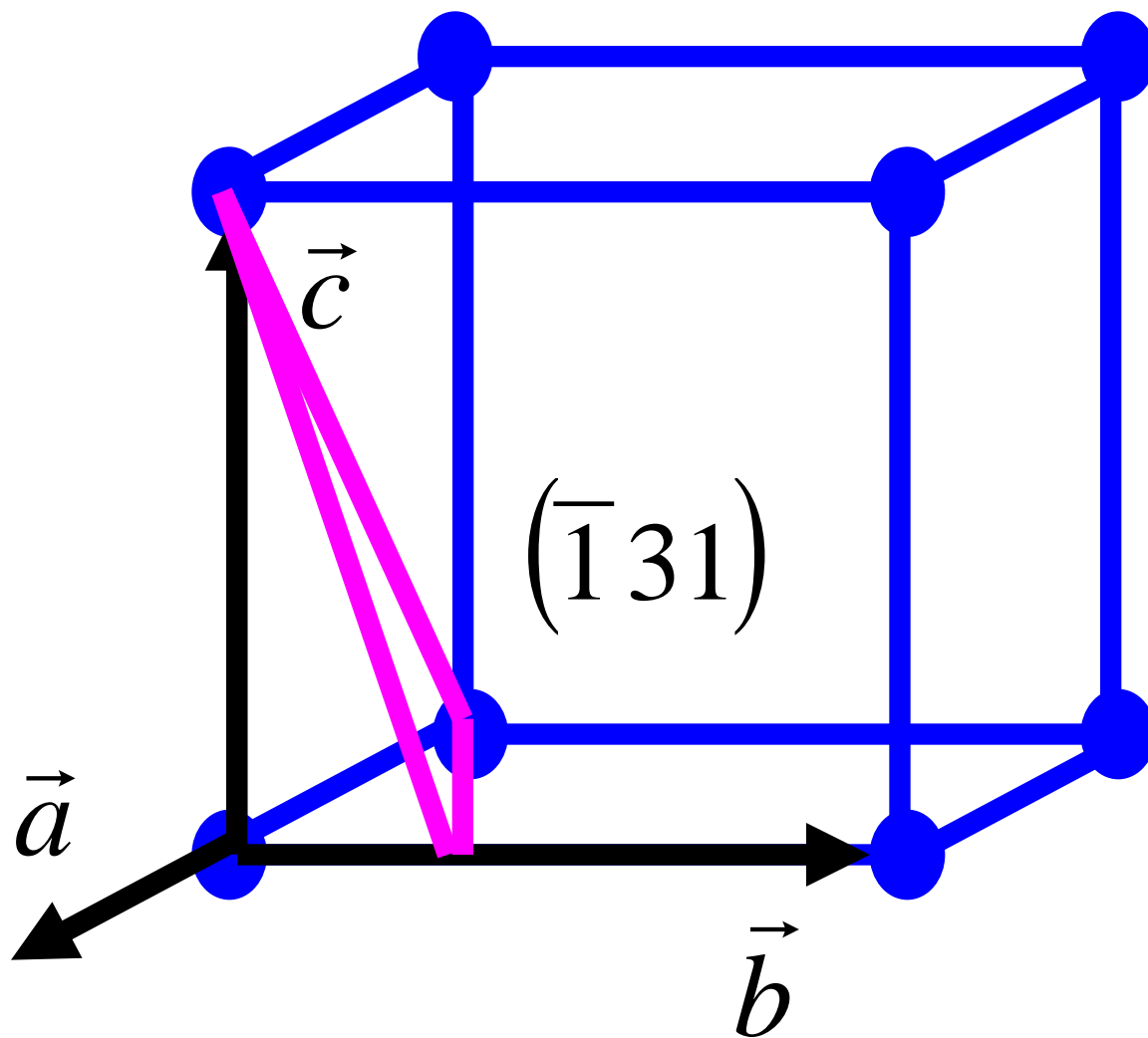


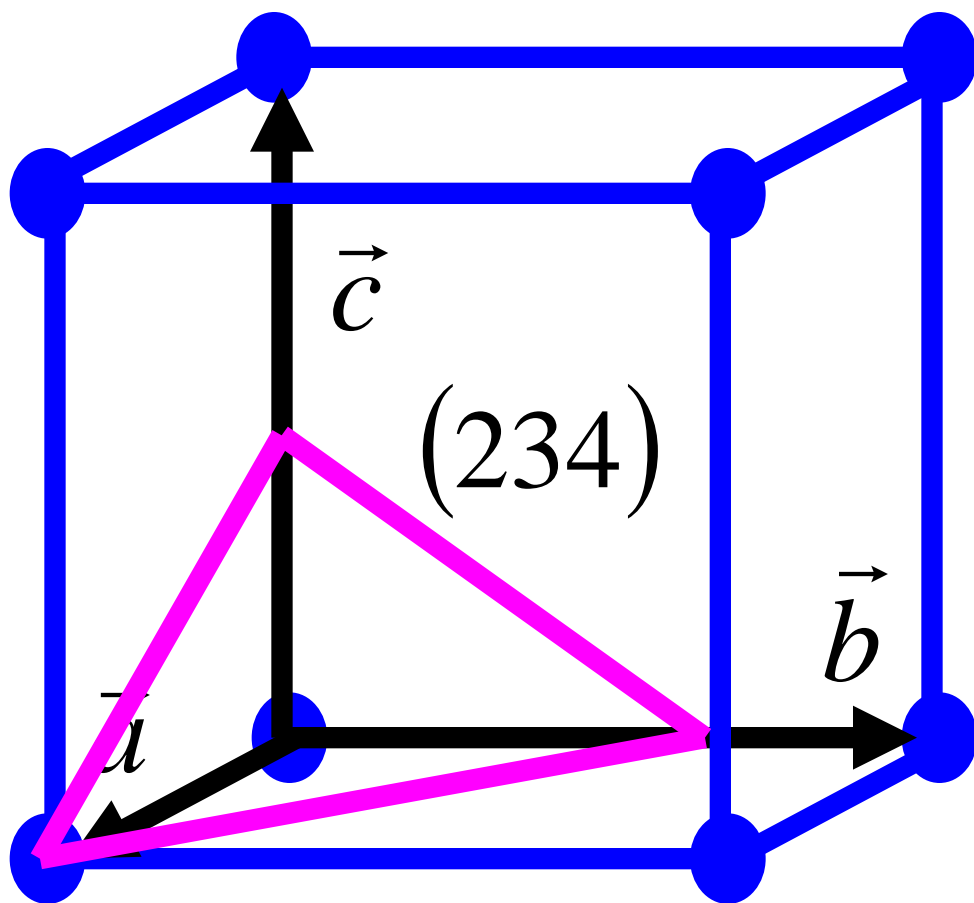
$$d_{110} = \frac{\sqrt{2}}{4} a$$



$$d_{111} = \frac{\sqrt{3}a}{3}$$



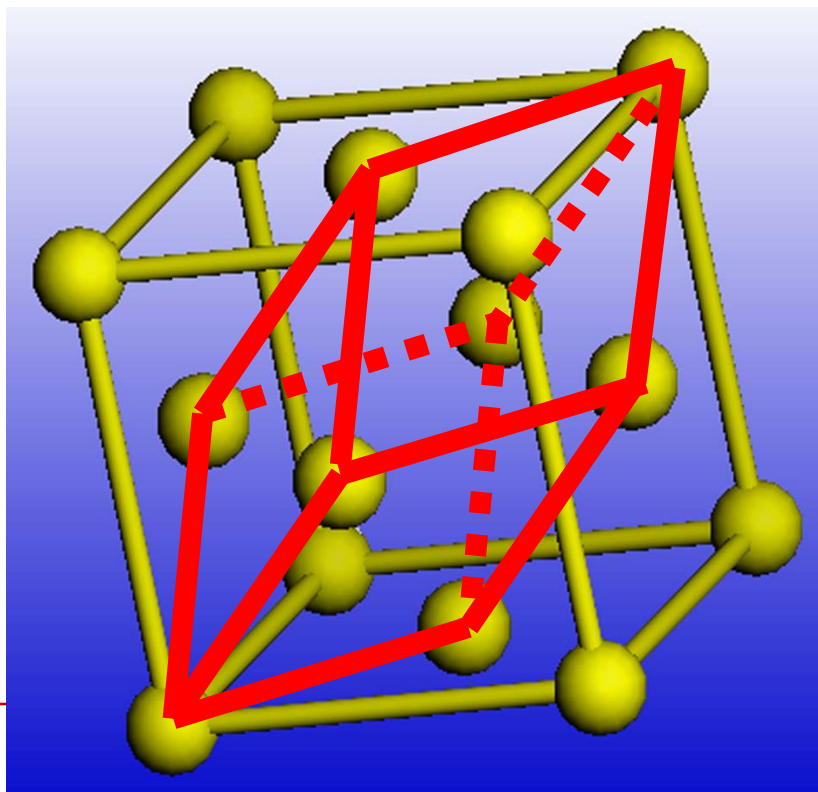






4、设某面心立方晶体晶格常数为 a ，求下列晶面指数晶面的面间距

$$(100), (110), (111), (211), (\bar{1}31), (234)$$



通过画图求解晶面

间距非常困难！