教学研究

以密勒指数(hkl)标志的晶面族面间距公式

北京师范大学　　吴英凯

摘要　本文对于结晶学单胞与固体物理学原胞不一致的布拉菲格子，给出了以密勒指数(hkl)标志的晶面族面间距公式．

一般固体物理教科书都给出并证明了以固体物理学原胞(初基原胞)基矢为坐标轴所表示的晶面指数($h_1h_2h_3$)所标志的晶面族面间距公式[1]

$$d_{h_1h_2h_3}=\frac{2\pi}{|K_{h_1h_2h_3}|} \tag{1}$$

其中　$K_{h_1h_2h_3}=h_1b_1+h_2b_2+h_3b_3$　　(2)

它是与晶面族($h_1h_2h_3$)垂直的最短倒格矢．b_1、b_2、b_3是原胞基矢 a_1、a_2、a_3 对应的倒格子基矢．然而，在实际工作中，常以结晶学单胞基矢 a、b、c 为坐标轴表示晶面指数，这样得到的表征晶面取向的互质整数(hkl)称为晶面族的密勒指数．由于 a、b、c 与 a_1、a_2、a_3 不一定全同，因而对于同一族晶面，其密勒指数(hkl)与面指数($h_1h_2h_3$)不一定一样；(hkl)与($h_1h_2h_3$)一样，也不一定表示同一晶面族．所以，(1)式并没有直接给出以(hkl)标志的晶面族面间距．仅当结晶学单胞与固体物理学原胞一致时(如简立方、简单正交布拉菲格子)，(1)式才可直接应用，此时(hkl)就是($h_1h_2h_3$)．

由于密勒指数(hkl)是常用的标志晶面族的方法，而晶面族面间距又是一个在很多问题中都很有用的参量，所以找出由(hkl)表示的面间距 d_{hkl} 的公式是必要的．在教学实践中，我们发现学生常常在计算体心立方、面心立方晶格的面间距一类问题中错误运用公式(1)，也说明有必要对这一问题进行澄清．文献[2]讨论了这一问题，但没有给出结论性公式．本文将对常遇到的正交晶系、四方晶系和立方晶系的布拉菲格子(简单晶格)给出由密勒指数(hkl)直接计算晶面族面间距的公式．

一、面心正交布拉菲格子

设结晶学单胞(长方体)三边长为 a、b、c，则单胞基矢为

$$a=a\hat{i},\ b=b\hat{j},\ c=c\hat{k} \tag{3}$$

原胞基矢为

$$a_1=\frac{1}{2}(b\hat{j}+c\hat{k}),\ a_2=\frac{1}{2}(c\hat{k}+a\hat{i}),\ a_3=\frac{1}{2}(a\hat{i}+b\hat{j}) \tag{4}$$

原胞体积为 $\Omega=abc/4$，单胞体积为 abc．倒格子基矢为

$$\left.\begin{aligned}
b_1&=\frac{2\pi}{\Omega}(a_2\times a_3)=-\frac{2\pi}{a}\hat{i}+\frac{2\pi}{b}\hat{j}+\frac{2\pi}{c}\hat{k}\\
b_2&=\frac{2\pi}{\Omega}(a_3\times a_1)=\frac{2\pi}{a}\hat{i}-\frac{2\pi}{b}\hat{j}+\frac{2\pi}{c}\hat{k}\\
b_3&=\frac{2\pi}{\Omega}(a_1\times a_2)=\frac{2\pi}{a}\hat{i}+\frac{2\pi}{b}\hat{j}-\frac{2\pi}{c}\hat{k}
\end{aligned}\right\} \tag{5}$$

与面指数($h_1h_2h_3$)标志的晶面族相垂直的最短倒格矢为

$$\begin{aligned}
K_{h_1h_2h_3}&=h_1b_1+h_2b_2+h_3b_3\\
&=\frac{2\pi}{a}(-h_1+h_2+h_3)\hat{i}+\frac{2\pi}{b}(h_1-h_2+h_3)\hat{j}\\
&\quad+\frac{2\pi}{c}(h_1+h_2-h_3)\hat{k}
\end{aligned} \tag{6}$$

以密勒指数(hkl)标志晶面族实际上是借用了简单正交布拉菲格子的结果，其原胞基矢由(3)式给出，因而相应的倒格子基矢为

$$a^*=\frac{2\pi}{a}\hat{i},\ b^*=\frac{2\pi}{b}\hat{j},\ c^*=\frac{2\pi}{c}\hat{k} \tag{7}$$

与晶面族(hkl)垂直的倒格矢为

$$\begin{aligned}
K_{hkl}&=ha^*+kb^*+lc^*\\
&=\frac{2\pi}{a}h\hat{i}+\frac{2\pi}{b}k\hat{j}+\frac{2\pi}{c}l\hat{k}
\end{aligned} \tag{8}$$

现在已知面心正交布拉菲格子的一族晶面由密勒指数(hkl)标志．因而只要能找到与之垂直的最短倒格矢[用 h_1、h_2、h_3表示，见(6)式]，则可由(1)式求出面间距．

令

$$K_{h_1h_2h_3}=K_{hkl} \tag{9}$$

将(6)、(8)式代人，即得到 h_1、h_2、h_3 与 h、k、l 的关系

$$\begin{cases} h=-h_1+h_2+h_3 \\ k=h_1-h_2+h_3 \\ l=h_1+h_2-h_3 \end{cases} \qquad \begin{cases} h_1=(k+l)/2 \\ h_2=(l+h)/2 \\ h_3=(h+k)/2 \end{cases} \tag{10}$$

然而，作为面指数的 h_1、h_2、h_3 必须为互质整数[这样才能保证 $K_{h_1h_2h_3}$ 是垂直于$(h_1h_2h_3)$晶面族的最短倒格矢]，(10)式给出的 h_1、h_2、h_3 并非总能满足这一条件，原因在于K_{hkl}是简单正交格子对应的倒格矢，它不一定是面心正交格子的倒格矢。我们分别不同情况讨论。

当 h、k、l 全为奇数时，由(10)式得到的 h_1、h_2、h_3 均为整数。注意 h、k、l 互质，由反证法易证 h_1、h_2、h_3 也互质。于是 $K_{h_1h_2h_3}$ 就找到了。由(9)式和(1)式，就得到面间距

$$d_{hkl}=\frac{2\pi}{|K_{hkl}|} \quad (当h、k、l全为奇数) \tag{11}$$

当 h、k、l 有奇数有偶数时，(10)式给出的 h_1、h_2、h_3 不全为整数。这时只须将h_1、h_2、h_3 分别乘2得到整数 h_1'、h_2'、h_3'。由反证法可证 h_1'、h_2'、h_3'互质。由(9)式可知 $K_{h_1'h_2'h_3'}=2K_{hkl}$。$K_{h_1'h_2'h_3'}$是与晶面族$(hkl)$垂直的最短倒格矢。所以，由(1)式

$$d_{hkl}=\frac{2\pi}{2|K_{hkl}|} \quad (当h、k、l有奇有偶) \tag{12}$$

将(8)式代入(11)、(12)式，得到

$$d_{hkl}\;(面心正交)=\begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{\left(\dfrac{h}{a}\right)^2+\left(\dfrac{k}{b}\right)^2+\left(\dfrac{l}{c}\right)^2}} & (当h、k、l全为奇数) \\ \dfrac{1}{2\sqrt{\left(\dfrac{h}{a}\right)^2+\left(\dfrac{k}{b}\right)^2+\left(\dfrac{l}{c}\right)^2}} & (当h、k、l有奇有偶) \end{cases} \tag{13}$$

二、体心正交布拉菲格子

单胞基矢及相应的倒矢量仍由(3)、(7)式给出。原胞基矢为

$$\left.\begin{aligned} a_1&=\frac{1}{2}(-a\hat{i}+b\hat{j}+c\hat{k}) \\ a_2&=\frac{1}{2}(a\hat{i}-b\hat{j}+c\hat{k}) \\ a_3&=\frac{1}{2}(a\hat{i}+b\hat{j}-c\hat{k}) \end{aligned}\right\} \tag{14}$$

原胞体积 $\Omega=abc/2$，倒格子基矢为

$$b_1=\frac{2\pi}{b}\hat{j}+\frac{2\pi}{c}\hat{k},\ b_2=\frac{2\pi}{c}\hat{k}+\frac{2\pi}{a}\hat{i},\ b_3=\frac{2\pi}{a}\hat{i}+\frac{2\pi}{b}\hat{j} \tag{15}$$

与面指数$(h_1h_2h_3)$标志的晶面族垂直的最短倒格矢为

$$K_{h_1h_2h_3}=h_1b_1+h_2b_2+h_3b_3 =\frac{2\pi}{a}(h_2+h_3)\hat{i}+\frac{2\pi}{b}(h_3+h_1)\hat{j}+\frac{2\pi}{c}(h_1+h_2)\hat{k} \tag{16}$$

欲求密勒指数(hkl)标志的晶面族面间距，应找到与之垂直的最短倒格矢 $K_{h_1h_2h_3}$。前已述，(8)式给出的 K_{hkl} 是与晶面族(hkl)垂直的。令(8)式与(16)式相等，得到

$$\begin{cases} h=h_2+h_3 \\ k=h_3+h_1 \\ l=h_1+h_2 \end{cases} \qquad \begin{cases} h_1=(-h+k+l)/2 \\ h_2=(h-k+l)/2 \\ h_3=(h+k-l)/2 \end{cases} \tag{17}$$

与前面的分析相似，我们可得到：当 $h+k+l$ 为偶数时，(17)式给出的 h_1、h_2、h_3 为互质整数，由其构成的倒格矢$K_{h_1h_2h_3}$即为所求。由于$K_{h_1h_2h_3}=K_{hkl}$，故由(1)式得到面间距

$$d_{hkl}=\frac{2\pi}{|K_{hkl}|} \quad (当h+k+l=偶数) \tag{18}$$

当 $h+k+l=$ 奇数时，将(17)式给出的 h_1、h_2、h_3（半整数）分别乘2，得到互质整数 h_1'、h_2'、h_3'，$K_{h_1'h_2'h_3'}$ 即为所求。由于 $K_{h_1'h_2'h_3'}=2K_{hkl}$，故由(1)式得到

$$d_{hkl}=\frac{2\pi}{2|K_{hkl}|} \quad (当h+k+l=奇数) \tag{19}$$

将(8)式代入(18)、(19)式，得到

$$d_{hkl}\;(体心正交)=\begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{\left(\dfrac{h}{a}\right)^2+\left(\dfrac{k}{b}\right)^2+\left(\dfrac{l}{c}\right)^2}} & (当h+k+l=偶数) \\ \dfrac{1}{2\sqrt{\left(\dfrac{h}{a}\right)^2+\left(\dfrac{k}{b}\right)^2+\left(\dfrac{l}{c}\right)^2}} & (当h+k+l=奇数) \end{cases} \tag{20}$$

三、底心正交布拉菲格子

原胞基矢及相应倒格子基矢分别为

$$a_1=\frac{a}{2}\hat{i}-\frac{b}{2}\hat{j},\ a_2=\frac{a}{2}\hat{i}+\frac{b}{2}\hat{j},\ a_3=c\hat{k} \tag{21}$$

$$b_1=\frac{2\pi}{a}\hat{i}-\frac{2\pi}{b}\hat{j},\ b_2=\frac{2\pi}{a}\hat{i}+\frac{2\pi}{b}\hat{j},\ b_3=\frac{2\pi}{c}\hat{k} \tag{22}$$

与面指数($h_1h_2h_3$)标志的晶面族相垂直的最短倒格矢为

$$K_{h_1h_2h_3}=h_1b_1+h_2b_2+h_3b_3$$
$$=\frac{2\pi}{a}(h_1+h_2)\hat{i}+\frac{2\pi}{b}(-h_1+h_2)\hat{j}+\frac{2\pi}{c}h_3\hat{k} \tag{23}$$

欲求密勒指数(hkl)标志的晶面族面间距，令(8)式与(23)式相等，得到

$$\begin{cases} h=h_1+h_2 \\ k=-h_1+h_2 \\ l=h_3 \end{cases} \qquad \begin{cases} h_1=(h-k)/2 \\ h_2=(h+k)/2 \\ h_3=l \end{cases} \tag{24}$$

与前面的分析相似，可知：当$h+k$为偶数时，h_1、h_2、h_3为互质整数，表明$K_{h_1h_2h_3}$即为所求，且$K_{h_1h_2h_3}=K_{hkl}$，故由(1)式得到

$$d_{hkl}=\frac{2\pi}{|K_{hkl}|} \quad (当h+k=偶数) \tag{25}$$

当$h+k=$奇数时，将(24)式给出的h_1、h_2、h_3分别乘以2，得到互质整数h_1'、h_2'、h_3'，并且$K_{h_1'h_2'h_3'}=2K_{hkl}$，于是由(1)式得到

$$d_{hkl}=\frac{2\pi}{2|K_{hkl}|} \quad (当h+k=奇数) \tag{26}$$

将(8)式代入(25)、(26)式，得到

$$\underset{(底心正交)}{d_{hkl}}=\begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2+\left(\frac{k}{b}\right)^2+\left(\frac{l}{c}\right)^2}} & (当h+k=偶数) \\ \dfrac{1}{2\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2+\left(\frac{k}{b}\right)^2+\left(\frac{l}{c}\right)^2}} & (当h+k=奇数) \end{cases} \tag{27}$$

四、体心四方、面心立方、体心立方布拉菲格子

与前面的分析完全相似，可得到

$$\underset{(体心四方)}{d_{hkl}}=\begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2+\left(\frac{k}{a}\right)^2+\left(\frac{l}{c}\right)^2}} & (当h+k+l=偶数) \\ \dfrac{1}{2\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2+\left(\frac{k}{a}\right)^2+\left(\frac{l}{c}\right)^2}} & (当h+k+l=奇数) \end{cases} \tag{28}$$

$$\underset{(面心立方)}{d_{hkl}}=\begin{cases} \dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} & (当h、k、l全为奇数) \\ \dfrac{a}{2\sqrt{h^2+k^2+l^2}} & (当h、k、l有奇有偶) \end{cases} \tag{29}$$

$$\underset{(体心立方)}{d_{hkl}}=\begin{cases} \dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} & (当h+k+l=偶数) \\ \dfrac{a}{2\sqrt{h^2+k^2+l^2}} & (当h+k+l=奇数) \end{cases} \tag{30}$$

五、结论与讨论

我们看到，对于有体心、面心或底心的正交、四方及立方布拉菲格子，以密勒指数(hkl)标志的晶面族面间距d_{hkl}，根据h、k、l的不同情况(注意h、k、l为互质整数)，都有两个表达式，其中之一恰好与相应的简单正交、简单四方、简单立方布拉菲格子的面间距公式完全一样，而另一表达式则恰好均为上述相应值的一半．为了便于记忆，我们将前述诸公式概括成更简洁的形式．令简单正交、简单四方和简单立方布拉菲格子的晶面族(hkl)的面间距用D_{hkl}表示，则

$$D_{hkl}=\frac{2\pi}{|K_{hkl}|} \quad (简单正交、四方、立方格子) \tag{31}$$

于是

$$\underset{(体心)}{d_{hkl}}=\begin{cases} D_{hkl} & (当h+k+l=偶数) \\ D_{hkl}/2 & (当h+k+l=奇数) \end{cases} \tag{32}$$

$$\underset{(底心)}{d_{hkl}}=\begin{cases} D_{hkl} & (当h+k=偶数) \\ D_{hkl}/2 & (当h+k=奇数) \end{cases} \tag{33}$$

$$\underset{(面心)}{d_{hkl}}=\begin{cases} D_{hkl} & (当h、k、l全为奇数) \\ D_{hkl}/2 & (当h、k、l有奇有偶) \end{cases} \tag{34}$$

其中K_{hkl}，对于正交格子由(8)式给出；对于四方格子由(8)式令$b=a$得到；对于立方格子由(8)式令$b=c=a$得到．由于单胞基矢的正交性，D_{hkl}很易计算因而晶面族(hkl)的面间距d_{hkl}可由(32)—(34)式立即得出．

上述结果还可以帮助我们理解这些布拉菲格子的X射线衍射情况．公式(32)—(34)中$d_{hkl}=D_{hkl}/2$的情况表明，这时面族(hkl)中晶面排列情况与相应的简单正交、简单四方、简单立方格子的(hkl)面族相比，多出了"中间插入面"．因而，当以D_{hkl}作为"面间距"来讨论X射线衍射问题时(实际工作中正是如此)，这些

(下转14页)

我们分别计算了 $a=0.8R$, $0.9R$ 和 $1.2R$ 时"亥姆霍兹线圈"的三种磁场均匀区，结果是 1% 和 0.2% 磁场均匀区的范围较 $a=R$ 时变小了，而0.02% 磁场均匀区则不存在了.

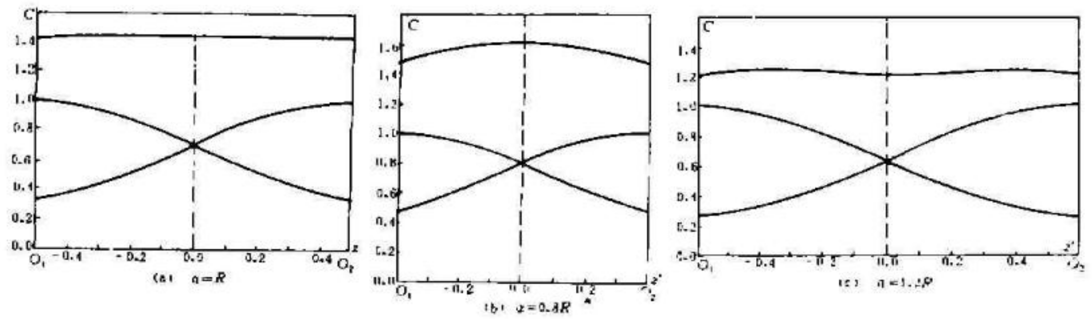

图 6

图 6 中分别画出了 $a=R$，$a=0.8R$ 和 $a=1.2R$ 三种情况下，$N=1$的一对线圈轴线上的磁场分布曲线. 由图可见，只有当 $a=R$ 时，轴线上的磁场分布才是均匀的.

需要指出，文献[4] 等教科书中的这三种情况下轴线上磁场分布图不够准确，应予纠正.

2. 线圈宽度 d 和厚度 t 的影响

如图 4 所示，取每组线圈为 9 匝，排成一行，它们的半径均为 R，线圈的宽度 $d=0.08R$. 9 对线圈的平均间距 $\overline{a}=R$. 我们计算了这样的亥姆霍兹线圈的三种均匀磁场区，结果与$N=1$ 和 $N=99$ 匝的均匀磁场区基本相同.

同时，我们取每组线圈为 5 匝，排成一列，它们的圆心分别在 O_1 和 O_2 (如图4 所示)，线圈的厚度 $t=0.04R$，$\overline{O_1O_2}=\overline{R}$. 我们计算出这样的亥姆霍兹线圈的三种均匀磁场区的范围与$N=1$ 和 $N=99$ 匝时的均匀磁场区亦基本相同.

上述计算结果说明：(1)线圈的间距 a 对亥姆霍兹线圈磁场的均匀性影响很大. (2)只要实际线圈的宽度和厚度比较小，它们对磁场均匀区的影响甚微.

(3)为了使亥姆霍兹线圈产生均匀性尽可能好的磁场，制作时应严格保证其平均半径$\overline{R}$ 等于平均间距$\overline{a}$. (4)采用两对以上的对置线圈的组合，可以获得均匀性更高的磁场.

参 考 文 献

[1] (日)义井胤景著，胡超等译，磁工学，国防工业出版社(1977).

[2] 曹昌祺，电动力学，人民教育出版社(1962).

[3] 彭中汉，大学物理，5(1985)，第 13 页.

[4] 潘人培，物理实验，南京工学院出版社(1986).

[5]《椭圆积分表》编写小组，椭圆积分表，机械工业出版社(1979).

(上接 9 页)

"中间插入面" 恰好使一级衍射消失而二级衍射存在. 也就是说，(32)—(34)式中 $d_{hkl}=D_{hkl}/2$ 的条件正是一级衍射消失的面族(hkl)中 h、k、l 满足的条件. 我们前面讨论的是(hkl)面族的真实面间距，不存在有无中间插入面的问题.

对于复式晶格，(31)—(34)式也可应用，但 d_{hkl} 表示的是基元代表点所构成的晶面面间距.

参考文献

[1] 方俊鑫、陆栋，《固体物理学》，上海科学技术出版社(1981).

[2] 陈金富，《固体物理学》，高等教育出版社(1986).