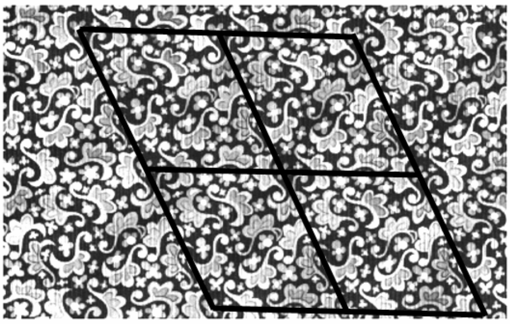
第 1 章 晶体学习题题解

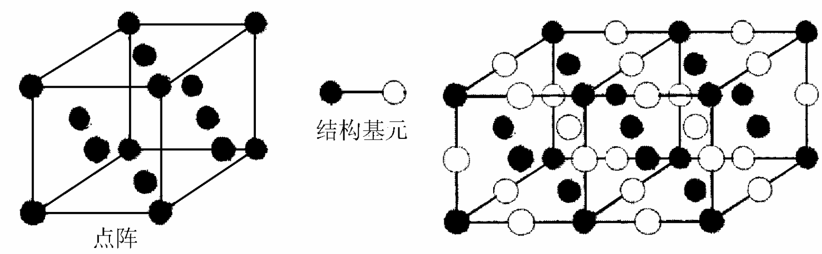
1. 把图 1-55 的图案抽象出一个平面点阵。

解：按照等同点的原则，右图(图 1-55)黑线勾画出的点阵就是由此图案抽象出的平面点阵。



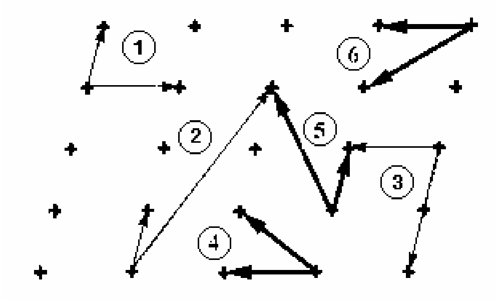
2. 图 1-56 的晶体结构中包含两类原子，把这个晶体结构抽象出空间点阵，画出其中一个结构基元。

解：下右图(图 1-56)的结构单元是由一个黑点和一个白点组成，按照等同点原则，抽象除的空间点阵如下左图所示，它的布拉喇菲点阵是面心立方。



3. 在图 1-57 的平面点阵中，指出哪些矢量对是初基矢量对。请在它上面再画出三个不同的初基矢量对。

解：根据初基矢量的定义，由它们组成的平面初基单胞只含一个阵点，右图(图 1-57)中的①和②是初基矢量对，③不是初基矢量对。右图的黑粗线矢量对，即④、⑤和⑥是新加的初基矢量对。



4. 用图 1-58a 中所标的 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 初基矢量来写出 $\boldsymbol{r}_1$，$\boldsymbol{r}_2$，$\boldsymbol{r}_3$ 和 $\boldsymbol{r}_4$ 的平移矢量的矢量式。用图 1-58b 中所标的初基矢量 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$ 和 $\boldsymbol{a}_3$ 来写出图中的 $\boldsymbol{r}$ 矢量的矢量式。

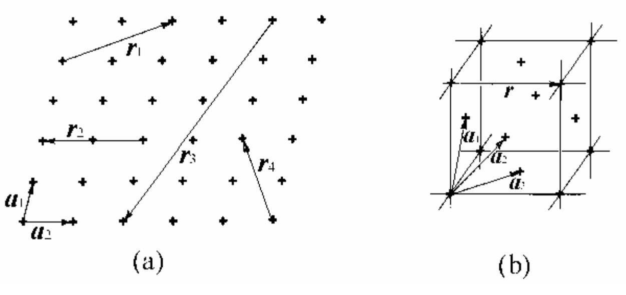
解：右图(图 1-58)a 中的 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 表示图中的各矢量：

$\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{a}_1+2\boldsymbol{a}_2$　　　$\boldsymbol{r}_2=-2\boldsymbol{a}_2$

$\boldsymbol{r}_3=-5\boldsymbol{a}_1-2\boldsymbol{a}_2$　　　$\boldsymbol{r}_4=2\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_2$

右图 b 中的 $\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$ 和 $\boldsymbol{a}_3$ 表示图中的 $\boldsymbol{r}$ 矢量：

$\boldsymbol{r}=-\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3$



5. 用矩阵乘法求出乘积$\{2_{[100]}\cdot 4_{[001]}\}$的等价操作，再求$\{4_{[001]}\cdot 2_{[100]}\}$的等价操作，这些结果说明什么?

解：因

$$\{2_{[100]}\}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix}\qquad \{4_{[001]}\}=\begin{bmatrix}0 & -1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

$\{2_{[100]}\cdot 4_{[001]}\}$的等价操作为

$$\{2_{[100]}\}\cdot\{4_{[001]}\}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}0 & -1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & -1 & 0\\ -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix}$$

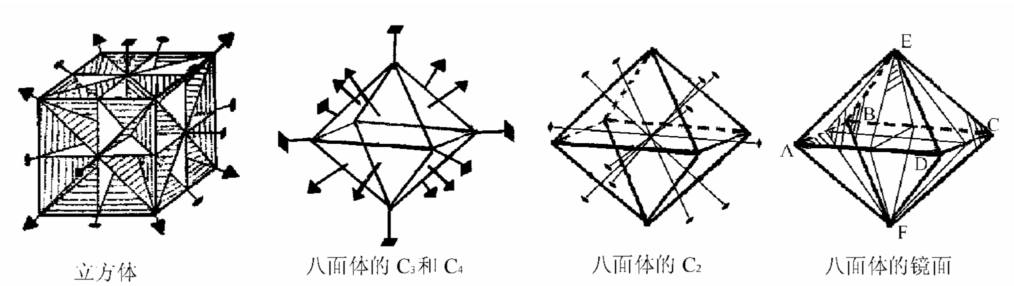
这组合的操作和$\{2_{[1\bar{1}0]}\}$操作等效。$\{4_{[001]}\cdot 2_{[100]}\}$的等价操作为

$$\{4_{[001]}\}\cdot\{2_{[100]}\}=\begin{bmatrix}0 & -1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix}$$

这组合的操作和$\{2_{[1\bar{1}0]}\}$操作等效。对比上面两个结果，操作的顺序不同，所得的操作结果不同。

6. 画出图 1-59 中各个形体所有的对称元素。其中 a)是立方体，b)是四面体，c)是八面体，d)是正六面柱体。

解：下图是立方体和八面体的对称元素示意图。

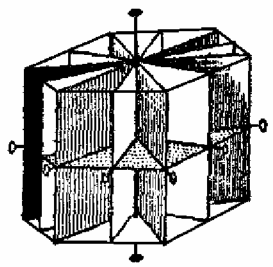


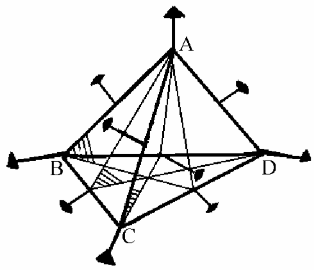
立方体有 4 个 3 次轴，它们是 4 个体对角线，即过立方体中心的 3 个<111>方向；有 3 个 4 次轴，它们是立方体三对平行面的中点连线，即过立方体中心的 3 个<100>方向；有 6 个 2 次轴，它们是过立方体中心的 6 个<110>方向；有 9 个镜面，即过立方体中心的 3 个{100}面和过立方体中心的 6 个{110}面；有一个对称中心，它就是立方体的中心。

立方体顶面和底面中心与过立方体中心并平行于顶面（和底面）的四边形四个顶点连接起来就是一个八面体，所以八面体的对称性质与立方体的相同。它有 4 个 3 次轴，3 个 4 次轴，见上图右 2 图；有 6 个 2 次轴，见上图的右 3 图；有 9 个镜面，上面最右边的图只画出了四个镜面，它们是过 E、F 点与 ABCD 四边形的两条中线连成的两个面以及 EAFC 面和 EBFC 面，按同样方法以 A、C 顶点和 B、D 顶点也可各得四个镜面，但是其中有三个是重复的，所以共有 9 个镜面；八面体中心是对称中心。

下右图是六面柱体和四面体的对称元素的示意图。六面柱体有 1 个 6 次轴，它是过六面柱体中心并垂直顶面和底面的轴；有 6 个 2 次轴，它们是过六面柱体中心的六边形的三个对角线和这个六边形对边中点连线；有 7 个镜面，它们是是过六面柱体中心的六边形面、六

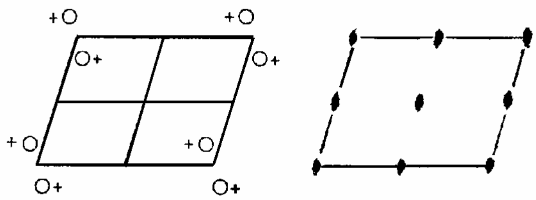
面柱体三对棱连成的三个面以及六面柱体三对柱面中线连成的三个面；有一个对称中心，它是六面柱体的中心。四面体有四个 3 次轴，它们是四个顶点与其对面的三角形中心的连线；有 3 个 2 次轴，它们是六条边两两中点的连线；有 6 个镜面，它们是每一个面(等边三角形)三条中线与这个面所对的顶角连成的三角形面，这样四个面共作出 12 个面，但它们有一半是重复的，所以共有 6 个镜面；四面体没有对称中心。

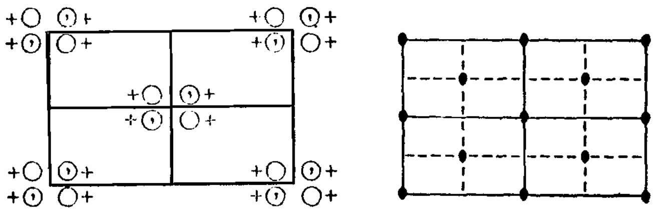




7. 画出适当的图形证明：在平行的 2 次轴通过的两个相邻阵点之间的中点上有另一个 2 次轴；在平行的镜面通过的两个相邻阵点之间的中点上有另一个镜面。

解 :右图 a 是在平行的 2 次轴通过的两个相邻阵点之间的中点上有另一个 2 次轴的例子。图中只画出这个平面点阵的一个单胞，在讨论时应记住整个点阵是由这个单胞无限重复平移得出的。可以看出，在原来的阵点上有 2 次轴，显然，阵点间的中点也是 2 次轴，如图 a 左边的图所示。右图 b 是在平行的镜面通过的两个相邻阵点之间的中点上有另一个镜面的例子。同样，图中只画出这个平面点阵的一个单胞。图中通过阵点的线是镜面(图中的黑线)，可以看出，在这些镜面的中点上，仍有平行于原来镜面的镜面存在，图 b 左图的虚线。

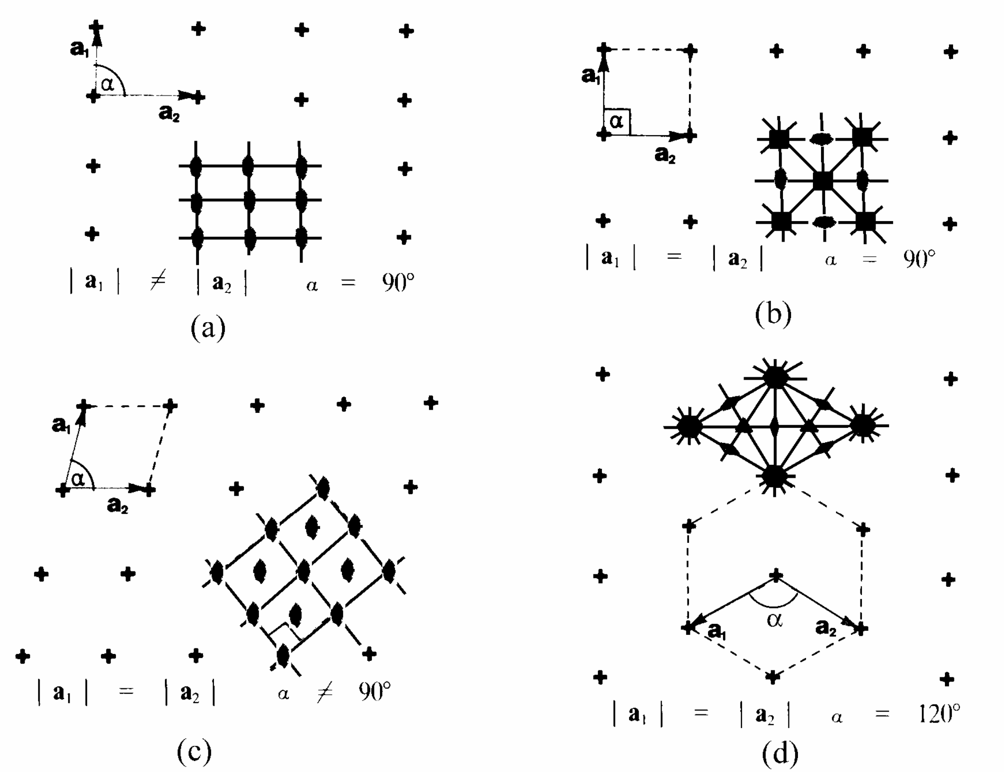

(a)


(b)

8. 画出图 1-60 中四种平面点阵（它是无限大的）除平移外的所有对称元素及其所在位置（在有限个阵点画出就可以了）。

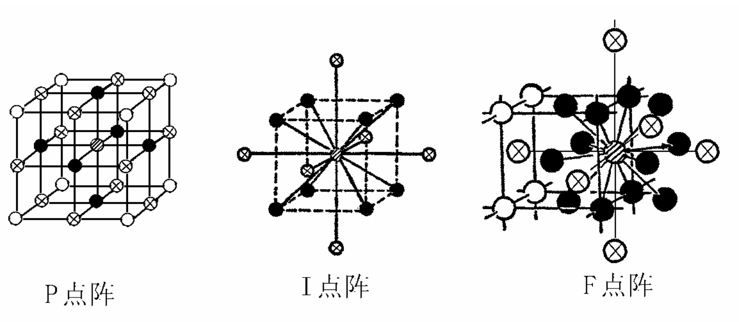
解：把对称元素直接画在图 1-60 中，如下图所示。图 a 中过每个阵点并垂直纸面的轴都是 2 次轴；根据上题的结果，在平行的 2 次轴中间又有 2 次轴，所以在四个相邻阵点中间出现新的 2 次轴；因为α=90°，所以过 $\mathbf{a}_1$ 以及过 $\mathbf{a}_2$ 轴并垂直纸面的面是镜面，根据上题的结果，在平行的 2 个镜面中间应是镜面，故在那里又出现新的镜面。图 c 中过每个阵点并垂直纸面的轴都是 2 次轴；因在平行的 2 次轴中间应是 2 次轴，所以在阵点中间出现新的 2 次轴，在这些新的 2 次轴之间又出现新的 2 次轴；在图中看到一个复式单胞的轴之间夹角是 90°，所以过复式单胞两根轴并垂直纸面的两个面是镜面，同样在每一组平行镜面之间又应是新的镜面。图 b 中 $\mathbf{a}_1$=$\mathbf{a}_2$，并且α=90°，所以过每个阵点并垂直纸面的轴都是 4 次轴，4 次轴隐含 2 次轴，因在平行的 2 次轴中间应是 2 次轴，故在两个 4 次轴的中间出现

新的 2 次轴；因为 $\mathbf{a}_1$ 和 $\mathbf{a}_2$ 构成正四边形，所以过四边形的边并垂直纸面的面以及过四边形对角线并垂直纸面的面都是镜面，同样在平行的镜面的中间又出现新的镜面；在过四边形中心有 4 个镜面，它们的夹角是 45°，根据定理，两个镜面的交线必是旋转对称轴，它的旋转角度是夹角的两倍，所以这交线是 4 次轴，结果过四边形中心又有一个新的 4 个次轴。图 d 中过每个阵点并垂直纸面的轴都是 6 次轴；6 次轴隐含 2 次轴，在平行的 2 次轴中间应是 2 次轴，所以在两个 6 次轴的中间出现 2 次轴；根据 6 次轴对称的性质，每三个阵点构成一个等边三角形，过这三角形的边并垂直纸面的面是镜面，过等边三角的三条中线并垂直纸面的面也是镜面；在等边三角形的中心有三个镜面通过，它们的夹角是 60°，根据定理，两个镜面的交线必是旋转对称轴，它的旋转角度是夹角的两倍，所以这交线是 3 次轴，结果过等边三角形的中心又有一个新的 3 个次轴。



9. 立方 P、I 和 F 点阵，单胞轴长为 a，给出这三种点阵的每一个阵点的最近邻、次近邻的点数，求出最近邻、次近邻的距离。

解：立方 P、I 和 F 点阵的阵点最近邻、次近邻的点数如右图所示。图中以影线的阵点作为中心，黑点是最近邻的阵点，带有×的阵点是次近邻阵点。P 点阵有 4 个最近邻，阵点与最近邻间的距离是 a；有 12 个次近邻，阵点与次近邻的距离是 $a\sqrt{2}$。



I 点阵有 8 个最近邻，阵点与最近邻间的距离是 $a\sqrt{3}/2$，6 个次近邻，阵点与次近邻的距离是 a；F 点阵有 12 个最近邻，阵点与最近邻间的距离是 $a\sqrt{2}/2$，6 个次近邻，阵点与次近邻的距离是 a。

10. 对于立方 P、I 和 F 点阵，如果每个阵点放上硬球，证明可以填充的最大体积依次为 0.52、0.68 和 0.74。

解：如果每个阵点放上硬球，最近邻之间的硬球是相切的，它们中心的距离是硬球的直径。P 点阵的硬球半径是 $a/2$，硬球体积是 $4\pi(a/2)^3/3$，每个 P 点阵含 1 个阵点硬球，单胞的体积是 a^3，故 P 点阵的填充率为

$$\text{填充率} = \frac{4\pi(a/2)^3}{3a^3} = 0.5235$$

I 点阵的硬球半径是 $a\sqrt{3}/4$，每个 P 点阵含 2 个阵点硬球，故 I 点阵的填充率为

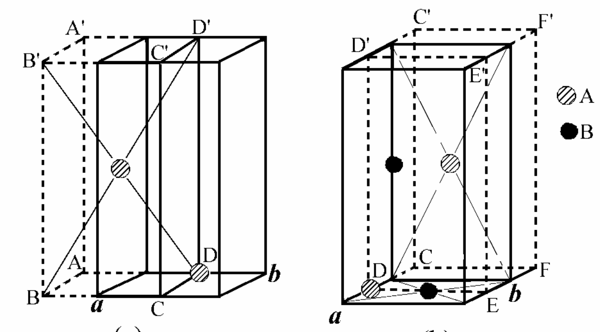
$$\text{填充率} = \frac{2\times 4\pi(a\sqrt{3}/4)^3}{3a^3} = 0.6802$$

F 点阵的硬球半径是 $a\sqrt{2}/4$，每个 P 点阵含 4 个阵点硬球，故 F 点阵的填充率为

$$\text{填充率} = \frac{4\times 4\pi(a\sqrt{2}/4)^3}{3a^3} = 0.7404$$

11.某正交晶系单胞中，在如下位置有单原子存在：①(0, 1/2, 0)，(1/2, 0, 1/2)两种位置都是同类原子；②([1/2, 0,0])，(0, 1/2, 1/2)上是 A 原子，(0, 0, 1/2)，(1/2, 1/2, 0)是 B 原子。问上两种晶胞各属于哪一种布喇菲点阵？

解：①右图 a 中黑实线是一个正交单胞，***a*** 和 ***b*** 分别是两个晶轴，两个带影线的圆代表给定的原子位置，应该注意到在与此等效的所有位置都有原子。根据题意，一个单胞含两个原子，如果把黑线所定的晶轴向-***b*** 平移 $b/2$，把现在的 ABCDD'A'B'C'六面体看成是单胞，可以知道这是 I 点阵。

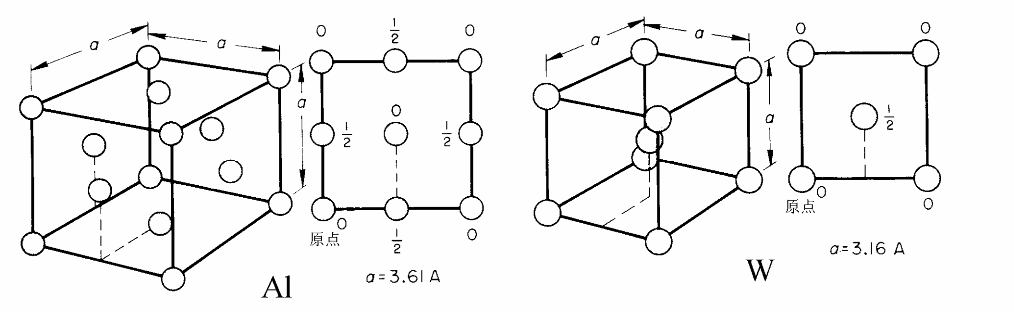


(a) (b)

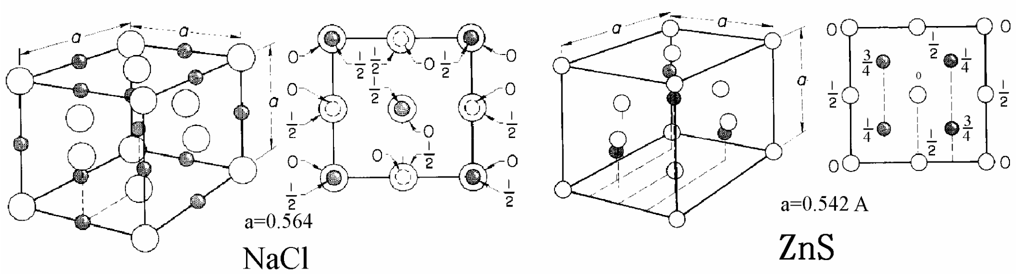
②右图 b 中黑实线是一个正交单胞，***a*** 和 ***b*** 分别是两个晶轴，两个带影线的圆代表 A 原子位置，两个黑色的圆代表 B 原子位置，应该注意到在与这些位置等效的所有位置都有相应的各类原子。如果把黑线所定的晶轴向-***a*** 平移 $a/2$，把现在的 CDEFF'C'D'E'六面体看成是单胞，看出这是 I 单胞，其中结构基元由一个 A 原子和一个 B 原子构成。

12．图 1-61 给出 Al、W、Nacl、ZnS、$MoSi_2$ 和 $BiLi_3$ 结构的晶胞，图中每种结构右边的图是投影图，其中数字表示原子的坐标位置。指出它们的结构基元（用坐标位置写出）和布拉维点阵。

解：下左图是 Al 的晶胞，它的结构基元是一个 Al 原子；因为三个晶轴的长度相等，轴之间的夹角为 90°，根据原子的分布位置知它的布喇菲点阵是面心立方点阵；每个晶胞有 4 个原子(结构基元)，它们的位置分别是[0,0,0]、[0,1/2,1/2]、[1/2,0,1/2]和[1/2,1/2,0]。下右图是 W 的晶胞，它的结构基元是一个 W 原子；因为三个晶轴的长度相等，轴之间的夹角为 90°，根据原子的分布位置知它的布喇菲点阵是体心立方点阵；每个晶胞有 2 个原子(结构基元)，它们的位置分别是[0,0,0]和[1/2,1/2,1/2]。

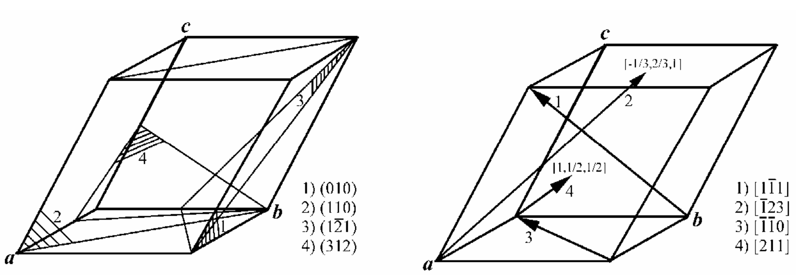


下左图是 NaCl 的晶胞，它的结构基元由相邻的一个 Na 原子和一个 Cl 原子构成，例如在[0,0,0]位置的 Na 原子和在[0,1/2,0]的 Cl 原子构成一个结构基元；因为三个晶轴的长度相等，轴之间的夹角为 90°，根据结构基元的分布位置知它的布喇菲点阵是面心立方点阵；每个晶胞有 4 个结构基元(8 个原子)，结构基元的位置分别是[0,0,0]、[0,1/2,1/2]、[1/2,0,1/2]和[1/2,1/2,0]。下右图是 ZnS 的晶胞，它的结构基元由相邻的一个他 Zn 原子和一个 S 原子构成，例如在[1,0,0]位置的 Zn 原子和在[3/4,1/4,1/4]的 S 原子构成一个结构基元；根据结构基元的分布位置知它的布喇菲点阵是面心立方点阵；每个晶胞有 4 个结构基元(8 个原子)，结构基元的位置分别是[0,0,0]、[0,1/2,1/2]、[1/2,0,1/2]和[1/2,1/2,0]。

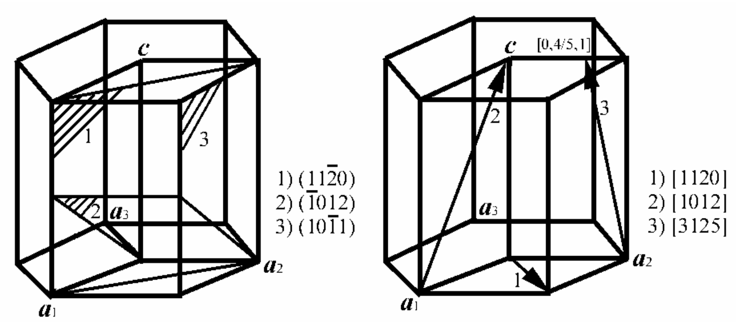


13. 在单胞中画出(010)、(110)、(1$\bar{2}$1)、(312)等晶面，画出[1$\bar{1}$1]、[$\bar{1}$23]、[$\bar{1}\bar{1}$0]和[211]等晶向。

解：在右图左边的单胞画出各个晶面；右边的单胞画出各个晶向，有两个晶向给出了箭头处的坐标数。



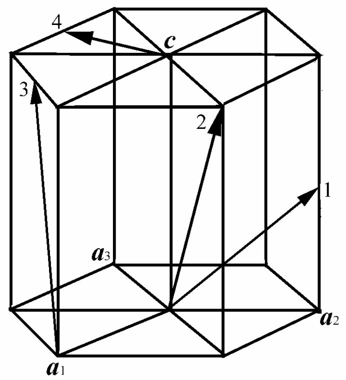
14. 用四轴坐标系画出六方晶系的 (11$\bar{2}$0)、($\bar{1}$012)、(10$\bar{1}$1) 等晶面及[11$\bar{2}$0]、[$\bar{2}$113]、[$\bar{3}$125]等晶向。



解：在右图左边的单胞画出各个晶面；右边的单胞画出各个晶向，有 1 个晶向给出了箭头处相应图中 Z 坐标轴的坐标数。

15.写出图 1-62 中晶向的四轴坐标晶向指数。

解：为了方便地定出四轴坐标晶向指数，先定出三轴坐标的晶向指数，然后再换算成四轴坐标的晶向指数。



晶向 1，三轴坐标指数是[021]，根据三轴坐标指数[UVW]与四轴坐标指数[$uvtw$]的换算关系，得

u=(2U-V)/3=(0-2)/3=-2/3　　v=(2V-U)/3=(2×2-0)/3=4/3

t=-(u+v)=-(-2/3+4/3)=2/3　　w=1

故晶向 1 的四轴坐标指数是 [$\bar{2}4\bar{2}3$]。

晶向 2，三轴坐标指数是[111]，根据三轴坐标指数[UVW]与四轴坐标指数[$uvtw$]的换算关系，得

u=(2U-V)/3=(2-1)/3=1/3　　v=(2V-U)/3=(2-1)/3=1/3

t=-(u+v)=-(1/3+1/3)=-2/3　　w=1

故晶向 1 的四轴坐标指数是 [11$\bar{2}$3]。

晶向 3，三轴坐标指数是[$\bar{1}\bar{1}$2]，根据三轴坐标指数[UVW]与四轴坐标指数[$uvtw$]的换算关系，得

u=(2U-V)/3=(-2+1)/3=-1/3　　v=(2V-U)/3=(-2+1)/3=-1/3

t=-(u+v)=-(-1/3-13)=2/3　　w=2

故晶向 1 的四轴坐标指数是 [$\bar{1}\bar{1}$26]。

晶向 4，三轴坐标指数是[$\bar{1}\bar{2}$0]，根据三轴坐标指数[UVW]与四轴坐标指数[$uvtw$]的换算关系，得

u=(2U-V)/3=(-2+2)/3=0　　v=(2V-U)/3=(-4+1)/3=-1

t=-(u+v)=-(0-1)=1　　w=0

故晶向 1 的四轴坐标指数是 [0$\bar{1}$10]。

16.列出三斜、单斜、正交及四方系中{210}面族包含面的数目及其指数；列出六方系中{21$\bar{3}$0}面族包含面的数目及其指数。

解：对于{210}面族，①三斜系的对称性最低，{210}面族只含一个(210)晶面。②单斜系的 $a \neq b \neq c$，$\alpha=\beta=90° \neq \gamma$，{$hkl$}晶面族中的等效晶面指数遵守的规则是：$h$ 和 k 可以同时换号，三个指数不能交换位置；(210)面中 2 和 1 同时换号的结果是一样的，所以{210}面族只含

一个(210)晶面。③正交系的 $a\neq b\neq c$，$\alpha=\beta=\gamma=90°$，$\{hkl\}$晶面族中的等效晶面指数遵守的规则是：三个指数不能交换位置，但可以单独换号；又因 0 的正号和负号是相同的，所以{210}面族含 2 个晶面：(210)和($\bar{2}10$)。④四方系的 $a=b\neq c$，$\alpha=\beta=90°\neq\gamma$，$\{hkl\}$晶面族中的等效晶面指数遵守的规则是：$h$ 和 k 可以交换位置，三个指数可以单独换号；又因 0 的正号和负号是相同的，所以{210}面族含 4 个晶面：(210)、($\bar{2}10$)、(120)和($\bar{1}20$)。

对于六方系中{hkil}面族中的等效晶面指数遵守的规则是：h、k 和 i 三个指数可以交换位置，但仍要保持 $h+k+i=0$ 的条件。$\{21\bar{3}0\}$面族中的 $l=0$，其正号和负号相同，故$\{21\bar{3}0\}$面族含 6 个晶面：($21\bar{3}0$)、($2\bar{3}10$)、($\bar{3}120$)、($\bar{3}210$)、($12\bar{3}0$)和($1\bar{3}20$)。

17. ($1\bar{1}0$)、($11\bar{2}$)、($\bar{3}12$)面是否同属一个晶带？如是，求出晶带轴的方向指数。

解：因为下面的行列式为 0：

$$\begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & -2 \\ -3 & 1 & 2 \end{vmatrix} = 0$$

所以($1\bar{1}0$)、($11\bar{2}$)、($\bar{3}12$)面同属一个晶带。它的晶带轴[uvw]的三个指数是

$$u:v:w = \begin{vmatrix} -1 & 0 \\ -2 & 1 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} = -1:-1:-1$$

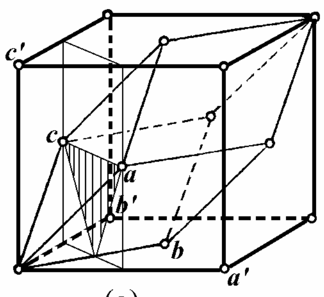
即其晶带轴的方向指数为[$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$]，利用晶带定律检验知道，它确实是这三个面的晶带轴。

18. 下列的晶面：(234)、($20\bar{1}$)、($1\bar{1}1$)、(241)、($\bar{2}\bar{2}1$)、($43\bar{2}$)、(101)、(010)和($4\bar{3}2$)中有哪些面属于同一个晶带？求出晶带轴。

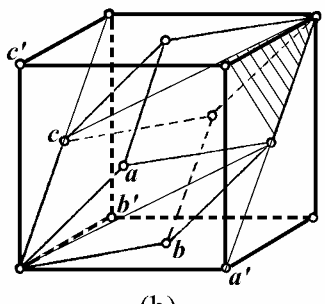
解：两个晶面一定有交线，交线一定是这两个晶面的晶带轴，这些情况在这里不讨论。不用计算的方法，可以用晶带定律试探求出晶带轴。试探得[102]是($20\bar{1}$)、($\bar{2}\bar{2}1$)、($43\bar{2}$)和(010)面的晶带轴。

19.画出面心立方点阵的 P 初基单胞，写出复式单胞的(110)和(011)在初基单胞中的面指数。从这个例子你能否看出为什么这种点阵通常采用复式单胞来描述

解：下图中的粗线是面心立方点阵的 F 单胞，细线是面心立方点阵的 P 初基单胞，***a′***、***b′*** 和 ***c′***是 F 单胞的晶轴，***a***、***b*** 和 ***c*** 是 P 初基单胞的晶轴。下图 a 画出 F 单胞的(220)面，它和(110)面平行，实际上也是(110)面。这个面和 P 单胞的三个晶轴相交构成图中影线三角形，它在 ***a***、***b*** 和 ***c*** 轴的截距分别是 1、1/2 和 1，因此它在 P 单胞中的面指数是(212)。下图 b 画出 F 单胞的(011)面，这个面和 P 单胞的三个晶轴相交构成图中影线所示的平行四



(a)

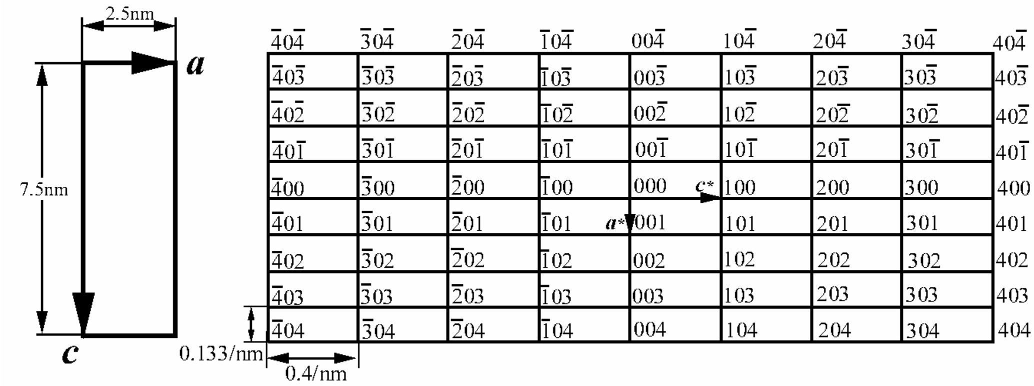


(b)

边形，它平行于 $\boldsymbol{c}$ 轴。如果把 P 单胞的原点平移 $\boldsymbol{b}$，得出此面在晶轴的截距分别为 1、-1 和∞，因此它在 P 单胞中的面指数是$(1\bar{1}0)$。由次看出，这两个面本质是等同的，在 F 单胞它们的面指数的三个数字相同，F 单胞反映了晶体的对称性，然而在 P 单胞的面指数的三个数字不相同，P 单胞不能反映晶体的对称性，所以一般采用 F 单胞而不采用 P 单胞。

20.四方点阵的初基单胞轴长 a=2.5nm、c=7.5nm，画出($h0l$)的倒易阵点（h 和 l≤±4）。

解：四方点阵 $a=b\neq c$，$\alpha=\beta=\gamma=90°$。($h0l$)面平行与(010)面，即其晶带轴是[010]，它们的倒易阵点构成的倒易面与正点阵的[010]轴垂直。下图左边是四方点阵(正点阵)初基单胞的(010)面，左边是($h0l$)的倒易阵点（h 和 l≤±4），因为正点阵的 $\boldsymbol{b}$ 轴垂直于纸面，所以倒易点阵的 $\boldsymbol{a}^*$轴在纸面上与正点阵的 $\boldsymbol{c}$ 轴垂直，长度是正点阵(100)面间距(即 a)的倒数，a^*=1/2.5nm=0.4/nm；$\boldsymbol{c}^*$轴在纸面上与正点阵的 $\boldsymbol{a}$ 轴垂直，长度是正点阵 (001)面间距(即 c)的倒数，c^*=1/0.75nm=0.133/nm。画出$[(100)]^*$及$[(001)]^*$倒易点后，把它们周期平移，直到 h 和 l 到±4 为止。



21.画出体心立方点阵[123]晶带的倒易点（各指数≤10），画出面心点阵$[11\bar{1}]$晶带的倒易点（各指数≤10）。

解：立方点阵的倒易点阵也是立方点阵。设立方点阵的点阵常数 a=1。

(1)体心立方点阵[123]晶带的倒易点都在$(123)^*$倒易面上。在倒易点阵中，$(123)^*$倒易面在三个轴相截均为阵点时在三个轴的截距分别是 6、3 和 2，即它们的阵点分别是$[(600)]^*$、$[(030)]^*$和$[(002)]^*$。为了画出过$[(000)]^*$的$(123)^*$倒易面，把此面在 $\boldsymbol{c}^*$平移-2c^*($c^*=a^*$)，这时，三个阵点的坐标变成：$[(60\bar{2})]^*$、$[(03\bar{2})]^*$和$[(000)]^*$。求出正点阵$(60\bar{2})$面与$(03\bar{2})$面的夹角以及$(60\bar{2})$和$(03\bar{2})$的面间距的倒数，就可以获得$[(60\bar{2})]^*$、$[(03\bar{2})]^*$和$[(000)]^*$三个倒易点，把它们周期平移，并考虑其消光效应，就可得出所求的倒易面。

$(60\bar{2})$面与$(03\bar{2})$面的夹角为

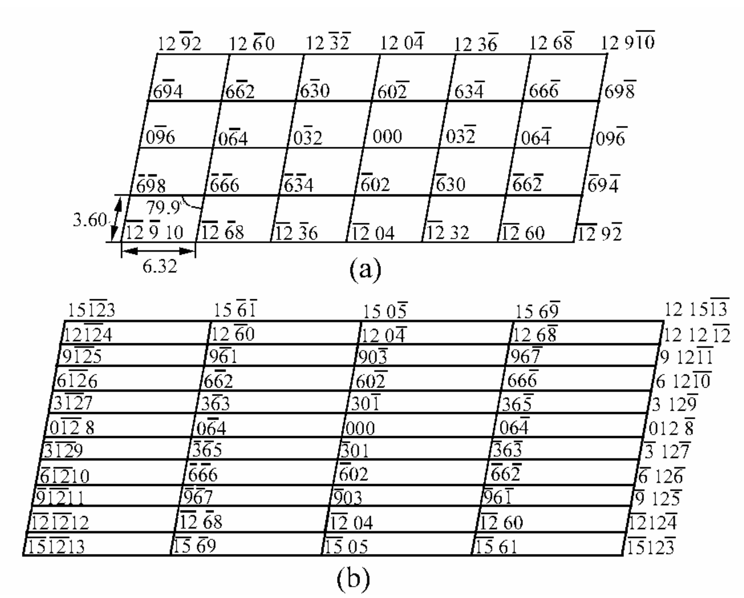
$$\cos\theta=\frac{-2\times-2}{\sqrt{6^2+2^2}\sqrt{3^2+2^2}}=0.1754 \qquad \theta=79.9^\circ$$

$(60\bar{2})$面的面间距 $d_{60\bar{2}}$ 是

$$\frac{1}{d_{60\bar{2}}}=(6^2+2^2)^{1/2}=6.32$$ ，

$(03\bar{2})$面的面间距 $d_{03\bar{2}}$ 是

$$\frac{1}{d_{03\bar{2}}}=(3^2+2^2)^{1/2}=3.60$$



(a)

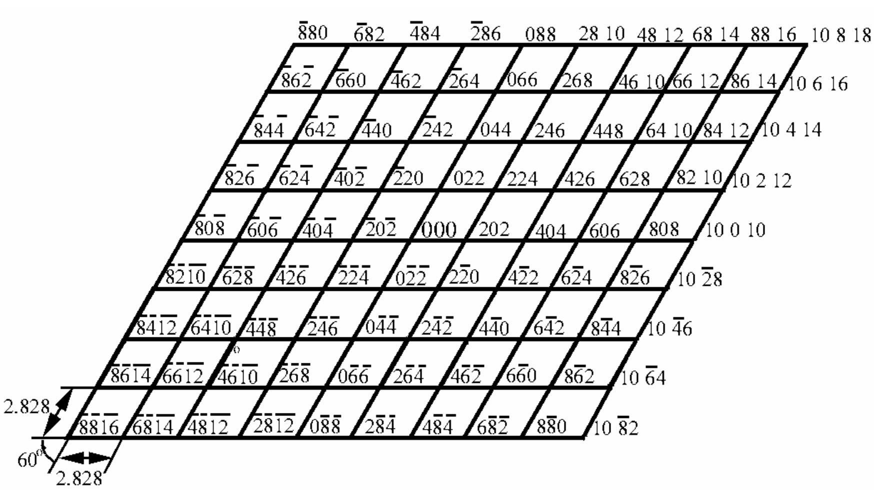
(b)

右图 a 是根据上面计算的结果画出$[(60\bar{2})]^*$、$[(03\bar{2})]^*$和$[(000)]^*$三个倒易点再把它们周期地平移所得的倒易点阵，图中各线的交点都是阵点。仔细分析这一点阵，在$[(000)]^*$和$[(60\bar{2})]^*$阵点之间应该还有$[(30\bar{1})]^*$阵点；另外，体心立方的倒易点阵的三个指数之和不等于偶数的阵点应消失，$[(03\bar{2})]^*$阵点不应存在，所以，$(123)^*$倒易面的阵点应由$[(000)]^*$、$[(30\bar{1})]^*$和$[(06\bar{4})]^*$阵点周期平移所得出，如上图 b 所示，图中各线的交点都是阵点。

(2)面心点阵$[11\bar{1}]$晶带的倒易点都在$(11\bar{1})^*$倒易面上。在倒易点阵中，$(11\bar{1})^*$倒易面在三个轴相截均为阵点时在三个轴的截距分别是 1、1 和 -1，即它们的阵点坐标分别是$[(100)]^*$、$[(010)]^*$和$[(00\bar{1})]^*$。为了画出过$[(000)]^*$的$(11\bar{1})^*$倒易面，把此面在 $\boldsymbol{c}^*$平移 c^*(c^*=a^*)，这时，三个阵点的坐标变成：$[(101)]^*$、$[(011)]^*$和$[(000)]^*$。因为面心立方的倒易点阵中阵点的三个指数必须同奇或同偶，否则阵点会消失，所以应以$[(202)]^*$、$[(022)]^*$和$[(000)]^*$作为倒易点阵的基点来讨论。求出正点阵(202)面与(022)面的夹角以及(202)和(022)面的面间距，就可以获得$[(202)]^*$、$[(022)]^*$和$[(000)]^*$三个倒易点，把它们周期平移，并进一步考虑消光效应，就可得出所求的倒易面。

(202)面与(022)面的夹角为

$$\cos\theta=\frac{2\times 2}{\sqrt{2^2+2^2}\sqrt{2^2+2^2}}=0.5 \qquad \theta=60^\circ$$



(202)面和(022)的面间距是相等的，d_{202} 的倒数是

$$\frac{1}{d_{202}}=(2^2+2^2)^{1/2}=2.828$$

上图是根据上面计算的结果画出$[(202)]^*$、$[(022)]^*$和$[(000)]^*$三个倒易点，再把它们周期地平移所得的倒易点阵，图中各线的交点都是阵点。仔细分析这一点阵，全部阵点都没有符合消光条件，所以都是倒易阵点。

22.求 Be（六方系，c/a=1.57）的$(11\bar{2}3)$与$(\bar{1}\bar{1}20)$的夹角和这两种面的面间距。

解：$(11\bar{2}3)$和$(\bar{1}\bar{1}20)$面的三轴坐标指数是(113)和$(\bar{1}\bar{1}0)$。根据六方系$(h_1k_1l_1)$与$(h_2k_2l_2)$晶面夹角θ的余弦 $\cos\theta$的式子：

$$\cos\theta=\frac{[h_1h_2+(h_1k_2+h_2k_1)/2+k_1k_2]4c^2/3a^2+l_1l_2}{\left[(h_1^2+h_1k_1+k_1^2)4c^2/3a^2+l_1^2\right]^{1/2}\left[(h_2^2+h_2k_2+k_2^2)4c^2/3a^2+l_2^2\right]^{1/2}}$$

(113)和$(\bar{1}\bar{1}0)$面的夹角θ的余弦 $\cos\theta$为

$$\cos\theta=\frac{[-1+(-1+-1)/2-1]\times4\times(1.57)^2/3}{[(1+1+1)\times4\times(1.57)^2/3+3^2]^{1/2}[(1+1+1)\times4\times(1.57)^2/3]^{1/2}}=-0.723$$

故θ=136.3°。根据六方系(hkl)面间距的式子

$$\frac{1}{d_{hkl}^2}=\frac{4}{3}\frac{(h^2+k^2+hk)}{a^2}+\frac{l^2}{c^2}$$

计算(113)面间距 d_{113}

$$\frac{1}{d_{113}^2}=\frac{4}{3}\frac{(1+1+1)}{a^2}+\frac{3^2}{(1.57)^2a^2}=7.65\frac{1}{a^2}\qquad d_{113}=\frac{1}{(7.65)^{1/2}}a=0.362a$$

计算(113)面间距 $d_{\bar{1}\bar{1}0}$

$$\frac{1}{d_{\bar{1}\bar{1}0}^2}=\frac{4}{3}\frac{(1+1+1)}{a^2}=\frac{4}{a^2}\qquad d_{\bar{1}\bar{1}0}=\frac{1}{(4)^{1/2}}a=0.5a$$

23. 证明 P 单胞中的(hkl)面在单胞各轴长上分别各有 h、k 和 l 个面截过。

解：设(hkl)面的法线单位矢量为 $\boldsymbol{n}$，(hkl)面的面间距为 d_{hkl}，$\boldsymbol{a}$ 轴在 a 长度截出(hkl)面的数目 m 应等于

$$m=\frac{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{n}}{d_{hkl}}$$

因为 $\boldsymbol{n}$ 与倒易点阵的 $\boldsymbol{H}_{hkl}=h\boldsymbol{a}^*+k\boldsymbol{b}^*+l\boldsymbol{c}^*$平行，并且 $\boldsymbol{H}_{hkl}$ 的模等于 $1/d_{hkl}$，故

$$\boldsymbol{n}=\boldsymbol{H}_{hkl}/|\boldsymbol{H}_{hkl}|=\frac{(h\boldsymbol{a}^*+k\boldsymbol{b}^*+l\boldsymbol{c}^*)}{1/d_{hkl}}$$

把它代回前面式子，得

$$m=\frac{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{n}}{d_{hkl}}=\frac{\boldsymbol{a}\cdot(h\boldsymbol{a}^*+k\boldsymbol{b}^*+l\boldsymbol{c}^*)}{d_{hkl}(1/d_{hkl})}=h$$

同理可证明在 b 和 c 长度上各有 k 和 l 个(hkl)截过。

24.证明立方系中的(hkl)面是按每隔$(h^2+k^2+l^2)$个面重复堆垛的。

解：立方系(hkl)面法线方向指数与面同名，即为[hkl]，法线从原点遇到第一个阵点，含这个阵点并平行于(hkl)的面就是(hkl)堆垛遇到的第一个重复的面。所以法线从原点遇到第一个阵点间的长度除以(hkl)面的面间距 d_{hkl} 所得的数目 m，它就是重复堆垛之间的面数。根据方向指数的定义，法线[hkl]从原点遇到第一个阵点间的长度为$(h^2+k^2+l^2)^{1/2}$，故

$$m=\frac{(h^2+k^2+l^2)^{1/2}}{d_{hkl}}=\frac{(h^2+k^2+l^2)^{1/2}}{1/(h^2+k^2+l^2)^{1/2}}=(h^2+k^2+l^2)$$

25.编制一个电算程序计算和画出任一种晶系的任一晶带的倒易阵点。

解：（略）

26. 四方系点阵的(111)面与(110)面的夹角为 26.81°，求它的轴比；再求(111)与(101)面的夹角。

解：四方晶系$(h_1k_1l_1)$面与$(h_2k_2l_2)$面的夹角式子为

$$\cos\theta=\frac{(h_1h_2+k_1k_2)c^2/a^2+l_1l_2}{\left[(h_1^2+k_1^2)c^2/a^2+l_1^2\right]^{1/2}\left[(h_2^2+k_2^2)c^2/a^2+l_2^2\right]^{1/2}}$$

把(111)面与(110)面以及其夹角θ=26.81°代入上式，得

$$\cos 26.81^\circ=\frac{(1+1)c^2/a^2}{\left[(1+1)c^2/a^2+1\right]^{1/2}\left[(1+1)c^2/a^2\right]^{1/2}}=\frac{2c^2/a^2}{[2c^2/a^2+1]^{1/2}\sqrt{2}\,c/a}$$

把上式整理，得

$$\frac{c}{a}=\left[\frac{-\cos^2 26.81^\circ}{2(\cos^2 26.81-1)}\right]^{1/2}=1.399$$

把(111)面与(101)面指数代入上面给出的夹角式子，得它们的夹角θ'余弦为

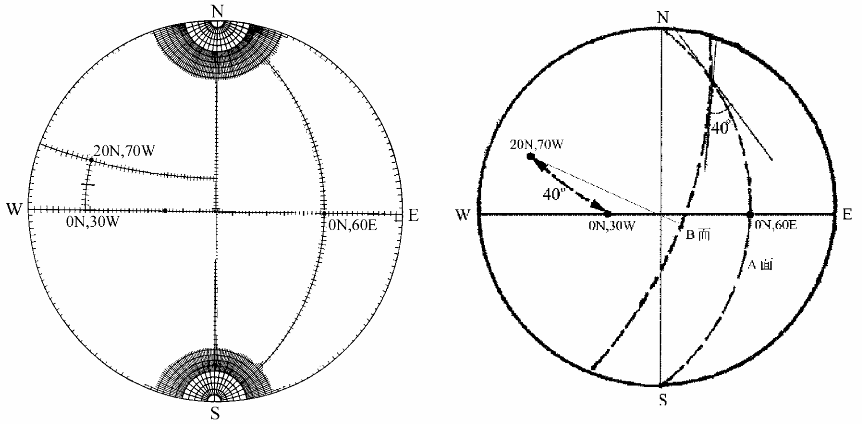
$$\cos\theta'=\frac{c^2/a^2+1}{\left[(1+1)c^2/a^2+1\right]^{1/2}\left[c^2/a^2+1\right]^{1/2}}=\frac{1.399^2+1}{[2\times1.399^2+1]^{1/2}[1.399^2+1]^{1/2}}=0.7757$$

即θ'=39.132°。

27. 某点在极射赤面投影图上的坐标用从投影圆中心开始量的纬度和经度来表示。例如：N 极为 90°N，0°E；E 极为 0°N、90°E；余类推。A 面的大圆通过 N、S 极，并通过 0°N，60°E，B 面的极点为 20°N，70°W。求两个面的夹角。画出 A 和 B 面大圆的投影，量这两个投影的夹角，验证极射赤面投影的保角性。

解：用吴氏网找出 0°N,60°E 极点，过这一极点并通过 N、S 极点得出 A 面，同时找出 20°N,70°W 极点，如下右图所示。因为 A 面通过 N、S 极点，所以 A 面的极点是在 W-N 极连线上，从 0°N,60°E 极点向左数 90°就获得 A 面的极点，它是 0N,30W。把 B 极点在吴氏网上转到 W-E 极的连线上，向右数出 90°得出一个极点，过这一极点以及 N 和 S 极的大圆就是 B 极点所对应的 B 面。得出的 A 面和 B 面如下右图所示。过 A 面和 B 面的交点

作切线，两切线的交角为 40°，同吴氏网量 A 极点和 B 极点的夹角也是 40°，这就说明极射赤面投影有保角性质。

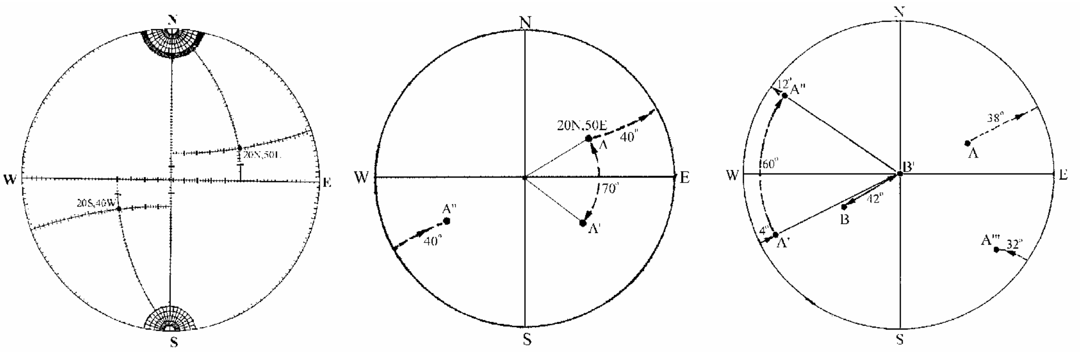


28. 极点 A 的坐标为 20°N，50°E，把它绕投影图的法线顺时针转动 70°；从 N 向 S 看，以逆时针方向绕 N-S 轴转动 80°；绕坐标为 20°S，40°W 的极点顺时针转动 60°。在上列每一种情况求出极点 A 转动后的位置，并画出转动路线。

解：用吴氏网找出坐标为 20°N,50°E 极点 A 以及坐标为 20°S，40°W 的极点 B，如下左图所示。A 极点绕投影图的法线顺时针转动 70°的操作是：以投影圆中心为圆心，把 A 极点顺时针转动 70°获得 A'极点，如下中图所示。

A 极点 N-S 轴转动 80°的操作是：把 A 极点沿 A 极点所在的吴氏网纬线向 E 方向转动，转动 40°后到达大圆边上，然后再向反方向转动 40°，因为此时极点在投影面下侧，以其反方向的极点表示，即下中图的 A"点。

A 极点绕 B 极点转动 60°的操作(上右图)是：把 B 极点转向投影图中心，相应 A 极点沿极



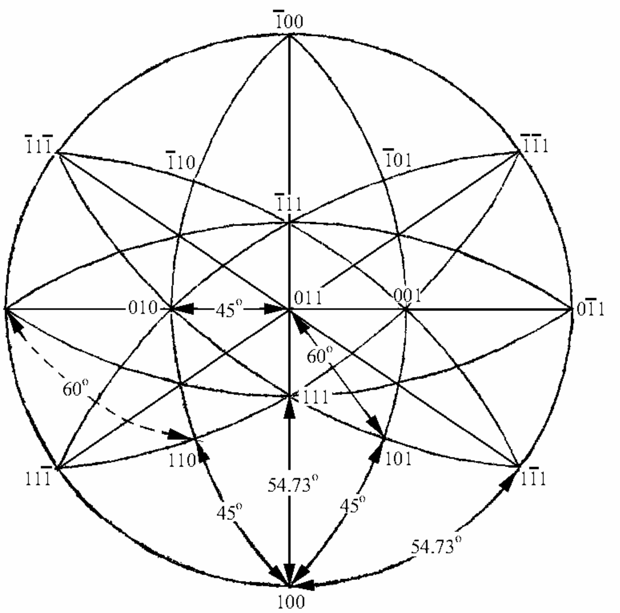
点所在的吴氏网纬线向 E 方向转动，转动了 38°后到达大圆边上，再反转 4°转到投影圆的下侧，以其反的极点 A'点表示；以投影圆中心为圆心，把 A'点顺时针方向转动 60°，到达 A"位置；最后把中心的 B'点转回原来 B 极点位置，相应 A"点沿所在的吴氏网纬线向 W 方向转动，转动了 4°后到达大圆边上，再反转 38°转到投影圆的下侧，以其反的极点 A'''点表示，A'''极点就是 A 极点绕 B 极点转动 60°的位置。

29. 画一张立方系晶体的标准(011)投影图，在图上标出{100}、{110}和{111}的所有晶面的极点以及这些晶面构成的晶带的晶带圆。在画出的图中，若$(\bar{1}00)$极点为 N 极，$(01\bar{1})$极点为 E 极，求坐标为 17°W，24.1°S 的晶面的面指数。

解：①以立方系的(011)面作为极射赤面的投影面，[011]为晶带轴的晶带的极点都在基圆圆周上。在(011)面上找出两个互相垂直的低指数方向，如[100]和$[01\bar{1}]$，这两个晶向的迹点一定在投影图的圆周上(如下图所示)。立方系晶面的法线方向指数与晶面指数同名，所以这两个方向的迹点也是(100)和$(01\bar{1})$面的极点，以(011)、(100)和$(01\bar{1})$三个互相垂直的面的极点作为参考坐标极点。因为垂直(011)面的晶向[011]是 2 次对称轴，所以只要标出投影面上由(011)、(100)和$(\bar{1}00)$三个极点连成的直径的一侧的极点，通过[011]2 次轴操作得出另一半的极点。在定出(*hkl*)极点的一般方法是，计算(*hkl*)面与三个参考坐标(011)、(100)和$(01\bar{1})$极点的夹角，再用吴氏网找出这个极点的位置。

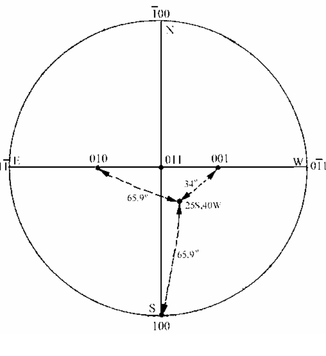
先标出除(100)以外的{100}的极点。(010)属于[100]晶带，所以它的极点一定在$(01\bar{1})$与(011)相连的投影圆的直径上，计算(010)与(011)及$(01\bar{1})$的夹角都为 45°，用吴氏网从(011)极点沿上述直径向$(01\bar{1})$极点方向量出 45°就得出(010)极点。

讨论{111}面的极点。(111)属于$[01\bar{1}]$晶带，所以它的极点一定在(100)与(011)相连的投影圆的直径上，计算知(111)与(100)间的夹角为 54.73°，用吴氏网从(100)极点沿上述直径量出 54.73°就得出(111)极点；$(11\bar{1})$属于[011]晶带，所以它的极点一定在投影圆的圆周上，计算$(11\bar{1})$与(100)及$(01\bar{1})$的夹角分别为 54.73°和 35.27°，用吴氏网从(100)极点沿圆周向$(01\bar{1})$极点方向量出 54.73°就得出$(11\bar{1})$极点。因为$(\bar{1}\bar{1}1)$极点应是$(11\bar{1})$极点的反向，所以它的极点位置是在过$(11\bar{1})$极点的直径在圆周的另一端的交点。



最后讨论除(011)和$(01\bar{1})$以外的{110}极点。(110)极点与三个参考坐标(011)、(100)和$(01\bar{1})$极点的夹角分别是 60°、45°和 60°，用吴氏网可量出它的位置；(101)极点与三个参考坐标(011)、(100)和$(01\bar{1})$极点的夹角分别是 60°、45°和 135°，用吴氏网可量出它的位置。

上面已标出了半个投影圆的{100}、{110}和{111}晶面的极点，通过[011]2 次轴操作得出另一半的极点。上面给出标准(011)投影图，图中的投影大圆以及一些大圆的迹径投影都分别属于一个晶带。



②在右图中以$(\bar{1}00)$极点为 N 极，$(01\bar{1})$极点为 E 极，用吴氏网量出坐标为 17°W，24.1°S 的极点位置，如右图所示。这个极点为(*hkl*)，用吴氏网量出该极点与(100)、(010)和(001)三个极点间的夹角，它们分别为 65.9°、65.9°和 34°，则

$$h:k:l = \cos 65.9^\circ : \cos 65.9^\circ : \cos 34^\circ$$
$$= 0.4083 : 0.8043 : 0.829 \approx 1:1:2$$

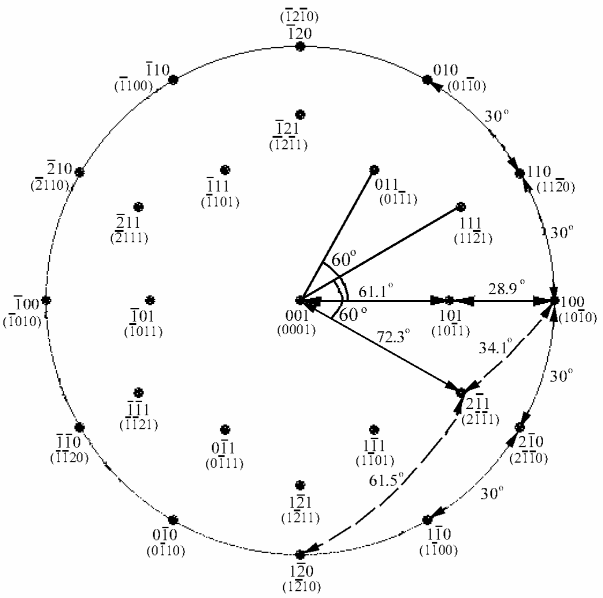
这个极点的面指数是(112)。

30.画一张 Be（六方晶系，c/a=1.57）的标准(0001)极射赤面投影图。在图上标出$\{2\bar{1}\bar{1}0\}$、$\{10\bar{1}0\}$、$\{2\bar{1}\bar{1}1\}$和$\{10\bar{1}1\}$所有晶面的极点以及它们构成的晶带圆。

解：(0001)面的三轴指数是(001)，六方系在面族中的四轴指数中第三个指数的位置不能改变，所以[001]轴$\{10\bar{1}0\}$面族和$\{2\bar{1}\bar{1}0\}$面族是的晶带轴。$\{10\bar{1}0\}$面族包含的面的三轴指数是(100)、(010)和$(1\bar{1}0)$，它们的极点全部都在标准(0001)极射赤面投影图的大圆圆周上。先在圆周上任意定出(100)极点，计算(100)和(010)面间的夹角是 60°，(100)和$(1\bar{1}0)$面间的夹角是-60°，选定(100)极点作为起始极点，沿大圆圆周量出相应的角度就可以定出(010)和$(1\bar{1}0)$以及它们反向的极点。

$\{2\bar{1}\bar{1}0\}$面族包含的面的三轴指数是$(2\bar{1}0)$、(110)和$(\bar{1}20)$，和上面讨论的道理相同，[001]轴也是它们的晶带轴，计算(100)和(110)面间的夹角是 30°，(100)和$(2\bar{1}0)$面间的夹角是-30°，(100)和$(\bar{1}20)$面间的夹角是 90°，这样，以(100)极点作为起始极点，沿大圆圆周量出相应的角度就可以定出$(2\bar{1}0)$、(110)和$(\bar{1}20)$以及它们反向的极点。

$\{2\bar{1}\bar{1}1\}$面的三轴指数是$(2\bar{1}1)$、(111)和$(\bar{1}21)$，根据六方晶系的面与面间夹角式子，并注意到 c/a=1.57，计算$(2\bar{1}1)$面和(001)面间夹角为 72.3°、$(2\bar{1}1)$面和(100)面间夹角为 34.4°、$(2\bar{1}1)$面和$(1\bar{2}1)$面间夹角为 61.5°，用吴氏网在上面定出的极点量出相应的角度，定出$(2\bar{1}1)$极点及其反向极点的位置；因为[001]是六次轴，所以，以投影圆为中心，把$(2\bar{1}1)$极点转动 60°得到这个面族的另一个极点(111)及其反向极点的位置；再转动 60°又得到这个面族的另一个极点$(\bar{1}21)$及其反向极点的位置。

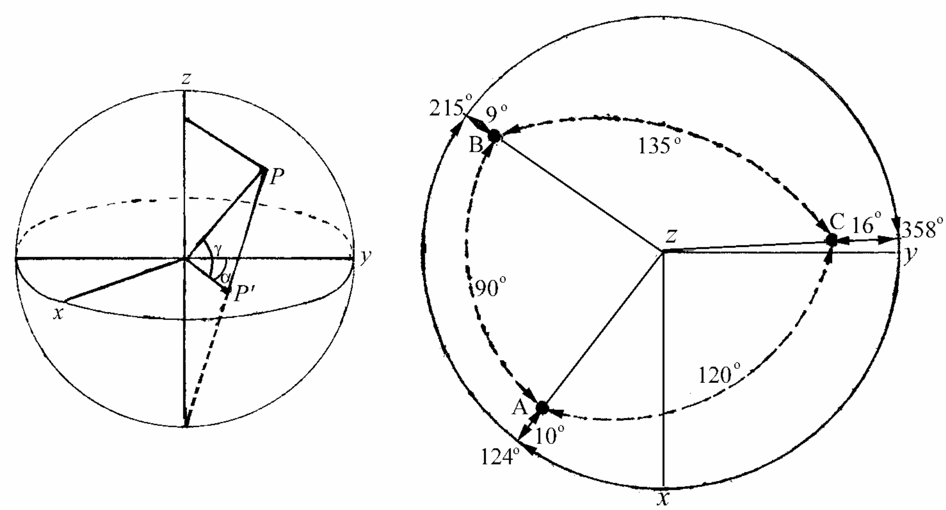


$\{10\bar{1}1\}$面的三轴指数是(101)、$(1\bar{1}1)$和(011)，计算(101)面和(001)面间夹角为 61.1°、(101)面和(100)面间夹角为 28.9°，在(001)及(100)极点连线上量出上述角度，得(101)极点及其反向极点位置，以投影圆为中心，把(101)极点转动 60°得到这个面族的另一个极点(011)及其反向极点的位置；再转动 60°又得到这个面族的另一个极点$(\bar{1}11)$及其反向极点的位置。

31. 测得一个立方晶系单晶体的三个低指数晶面的极点，设 Z 轴为投影面的法线，X 和 Y 轴在投影面上，X、Y、Z 构成右手坐标系，α是极点方向在投影面上与 Y 轴的夹角，从投影图上看，顺时针方向转动为正，γ是晶面极点方向(晶面法线方向)与 X-Y 面的夹角，极

点方向在投影图上方为正。三个极点的α和γ角为：124°，10°；215°，9°及 350°，16°。查看标准极图的低指数面间的夹角关系定出三个极点的面指数。(答案：(001)、(100)、(110))

解：下左图是按题意定义的α和γ角的示意图。以 A、B 和 C 表示α和γ角为：124°，10°；215°，9°及 350°，16°的极点。找出 A 的极点位置的操作是：用吴氏网从 y 极点沿大圆圆周顺时针方向量出 124°，这点与圆中心连线，把它与吴氏网的赤道重叠，沿赤道线向中心量出 10°所得的极点就是所求的极点位置；按同样办法找出 B 和 C 极点，如下右图所示。用吴氏网量出 A-B 极点间的夹角为 90°；B-C 极点间夹角为 135°；C-A 极点间夹角为 120°。



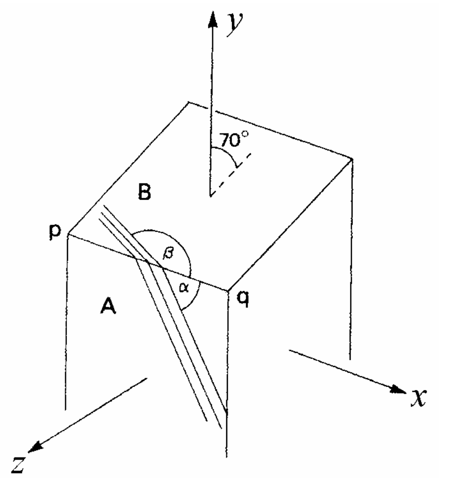
一些立方晶体$\{h_1k_1l_1\}$面族与$\{h_1k_1l_1\}$面族的夹角(度)在下表列出：

$\{h_1k_1l_1\}$	$\{h_1k_1l_1\}$		
	100	110	111
100	0 90		
110	45 90	0 60 90	
111	54.7	35.3 90	0 70.5 109.5

从上表看出，{100}面族与{110}面族各面之间的夹角可能是 45°(或 135°)，也可能是 90°；{110}面族中各面之间的夹角可能是 60°(或 120°)，所以 A 极点会是属于{100}面族，B 极点和 C 极点会是属于{110}面族。再在面族之中考虑，若确定 A 极点为(100)，则 B 极点应为($\bar{1}\bar{1}0$)，C 极点应为(011)。

32.图 1-63 是一个立方系单晶体，它的取向是上题标定的取向。晶体的 A 面和投影面平行，B 面和 Y 轴成 70°(如图示)，pq 是 A 面和 B 面的交线，与 X 轴平行。一个晶面和 A 面及 B 面相交的迹痕与 pq 的夹角分别是α=55°和β=157.5°，求此面的面指数(hkl)。

解：因为 A 面是投影面，而 Z 轴是 A 面的法线，所以投影圆的中心是 Z 轴的极点；在投影圆的圆周上定出 X 和 Y 轴的极点。

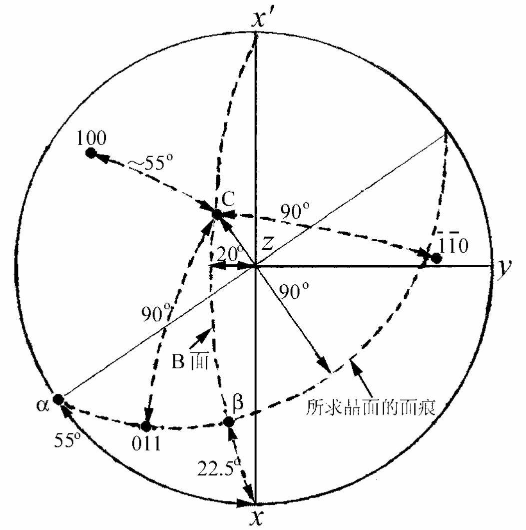


1)先找出 A 和 B 面在投影图中的迹线。投影圆是 A 面的投影，其迹线就是大圆；从右图看出，B 面的与 Z 轴夹角为 20°，把 XX'与吴氏网的 N-S 轴重合，B 面的迹线应是从 N-S 轴向负 Y 方向量 20°的经线，如下图所示。

2)找出所求的晶面与 A 面相交的痕迹(α线)的迹点。因α线在 A 面(投影面)上并与 X 轴成 55°，从 X 极点开始在大圆周顺时针量出 55°，这点就是α线的迹点。

3)找出所求的晶面与 B 面相交的痕迹(β线)的迹点。因β线在 B 面上，所以它的迹点一定在 B 面的迹线上，同时β线和 X 轴夹角为 180°-157°=22.5°。从 X 点开始在 B 面的迹线上量出 22.5°，它就是β线的迹点(见右图)。

4)因α线和β线都在所求的晶面上，所求的晶面的法线必与α线和β线垂直，所以，过α线的迹点和β线的迹点的大圆迹痕所对应的极点就是所求面的极点，右图中的 C 极点。



5)量出所求晶面(hkl)的极点 C 与上题定出的(100)、$(\bar{1}\bar{1}0)$和(011)极点间的角度，分别为~55°、90°和 90°。根据立方晶系计算晶面间夹角的关系，cos90°=0，由(hkl)与(011)间夹角为 90°得：$k+l=0$；由(hkl)与$(\bar{1}\bar{1}0)$间夹角为 90°得：$h+k=0$；这就得出所求晶面为$(1\bar{1}1)$。另外，因$[1\bar{1}1]$也是(011)的晶带轴，所以，(011)极点也在过α线的迹点和β线的迹点的大圆迹痕上