

如果单胞是**复式单胞**。倒易点阵的复式单胞的有心化型式不一定相同，即它们**不一定属同一种布喇菲点阵**。

在倒易点阵中，距原点最近的阵点，例如 $[(hkl)]^*$ ，它一定是正点阵中**真实**的面 $(hkl)$ 的倒易点。所以正点阵为P点阵的话，其倒易点阵中不会有含公因子的倒易点阵阵点，即**不会有 $[(200)]^*$ 、 $[(224)]^*$ ...**等倒易点。但**有心化**点阵则不同。例如体心点阵的 **$(200)$ 面却是真实的面**，所以，在倒易点阵中，最靠近原点的倒易阵点是 $[(200)]^*$ 而不是 $[(100)]^*$ ，这时 $[(100)]^*$ 阵点会**消失**。

先讨论各种**复式单胞**点阵的**消失规律**。

如果有心化点阵所加的阵点的坐标是 $[(xyz)]$ ，若 $(hkl)$ 面经过这一个点，根据平面方程，应有： $hx + ky + lz = 0$  （或整数）

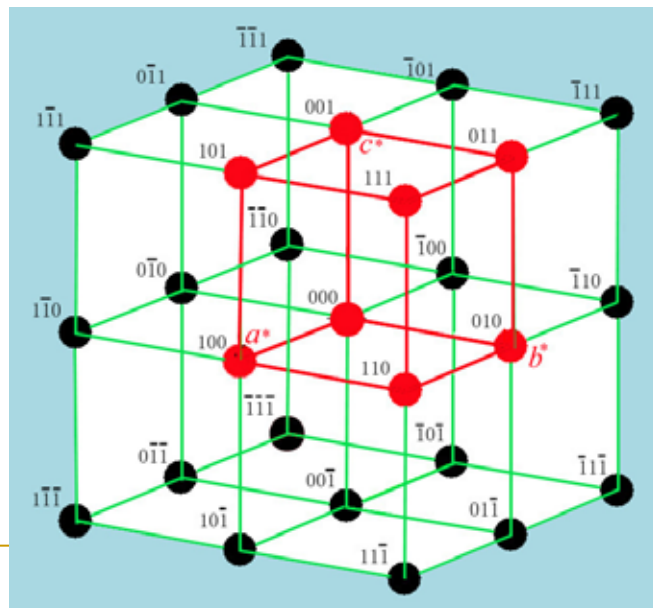
凡**不符合**上列关系的倒易阵点 $[(hkl)]^*$ 将**消失**。

**体心点阵**，有心化的点的坐标是 $[(1/2 \ 1/2 \ 1/2)]$ ，从上式可知道，倒易点 $[(hkl)]^*$ 的 **$h+k+l$ 必须等于偶数**，否则倒易阵点将消失。

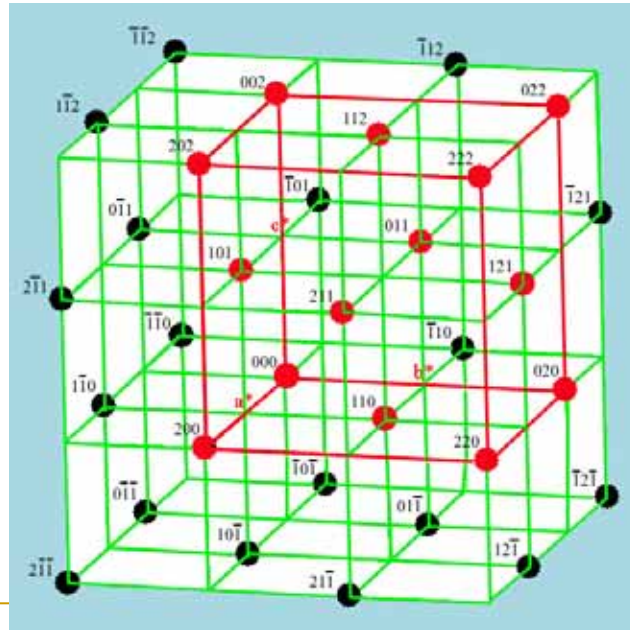
**面心点阵**，有心化的点的坐标是 $[(1/2 \ 1/2 \ 0)]$ 、 $[(1/2 \ 0 \ 1/2)]$ 和 $[(0 \ 1/2 \ 1/2)]$ ，从上式可知道，倒易点 $[(hkl)]^*$ 的 **$h$ 、 $k$ 和 $l$ 必须同时为奇数或同时为偶数**，否则倒易阵点将消失。

**面有心点阵**，有心化的阵点的坐标是 $[(1/2 \ 1/2 \ 0)]$ ，从上式可知道，倒易点 $[(hkl)]^*$ 的 **$h+k$ 应等于偶数**，否则倒易阵点将消失。

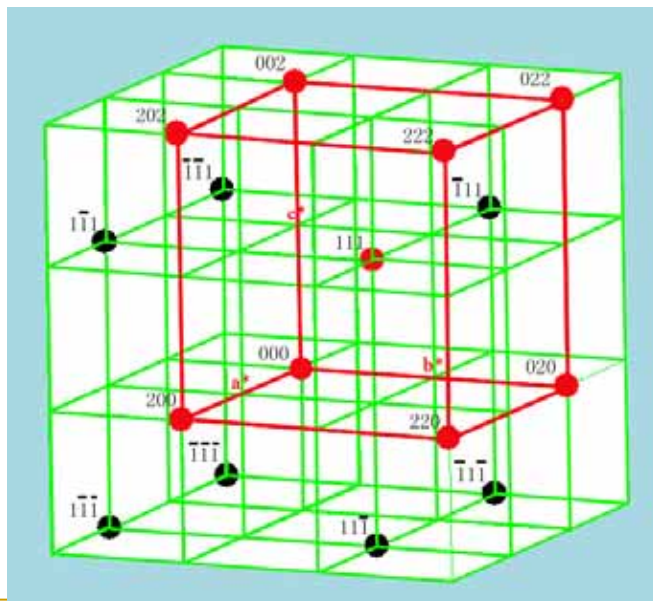
P点阵的倒易点阵仍为P点阵，没有消光效应，全部倒易点都会出现。



正点阵是**体心**，  
它的倒易复式单胞是**面心**单胞。  
单胞的四个阵点，分别是  
 $[(000)]^*$ 、 $[(011)]^*$ 、  
 $[(101)]^*$ 、 $[(110)]^*$ 。  
同时可以看到，  
复式单胞的棱长已不是 $a^*$ 、 $b^*$ 、 $c^*$   
而是 $2a^*$ 、 $2b^*$ 、 $2c^*$ ，单胞体积  
变为 $8\Omega^*$ 。



正点阵是**面心**，  
它的倒易复式单胞是**体心**单胞。  
单胞的两个阵点，分别是  
 $[(000)]^*$ 、 $[(1/2 \ 1/2 \ 1/2)]^*$ 。同时可以  
看到，复式单胞  
的棱长已不是 $a^*$ 、  
 $b^*$ 、 $c^*$  而是 $2a^*$ 、  
 $2b^*$ 、 $2c^*$ ，单胞体  
积变为 $8\Omega^*$ 。



#### 1.4.7.5 晶带与倒易面

在正点阵中晶带轴为 $[uvw]$ 的晶面 $(hkl)$ ，在倒易点阵中成为在 $(uvw)^*$ 面上的 $[(hkl)]^*$ 阵点。所以，同属一个晶带的所有晶面的倒易点应分布在一个过原点的倒易面上。反过来说，**倒易点阵中一个过原点的平面，代表正点阵中的一个晶带。**

正点阵晶带轴 $[uvw]$ 与其晶带面 $(hkl)$ 对应的倒易矢量一定**垂直**： $[uvw] \perp [hkl]^*$ ，即

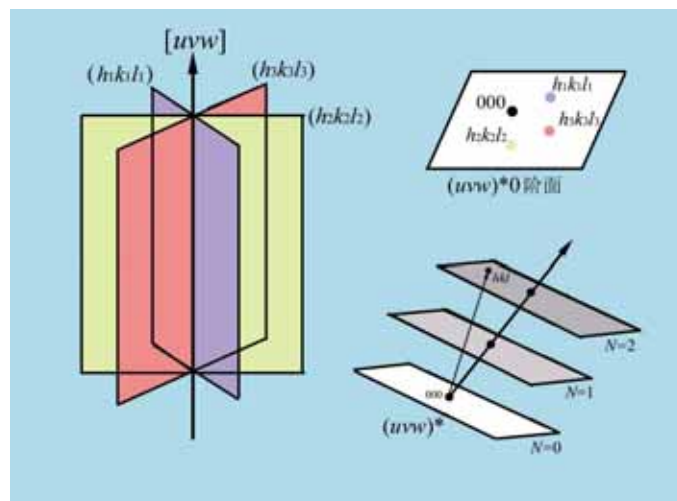
$$(ua + vb + wc) \cdot (ha^* + kb^* + lc^*) = 0$$

上式展开就是**晶带方程**：

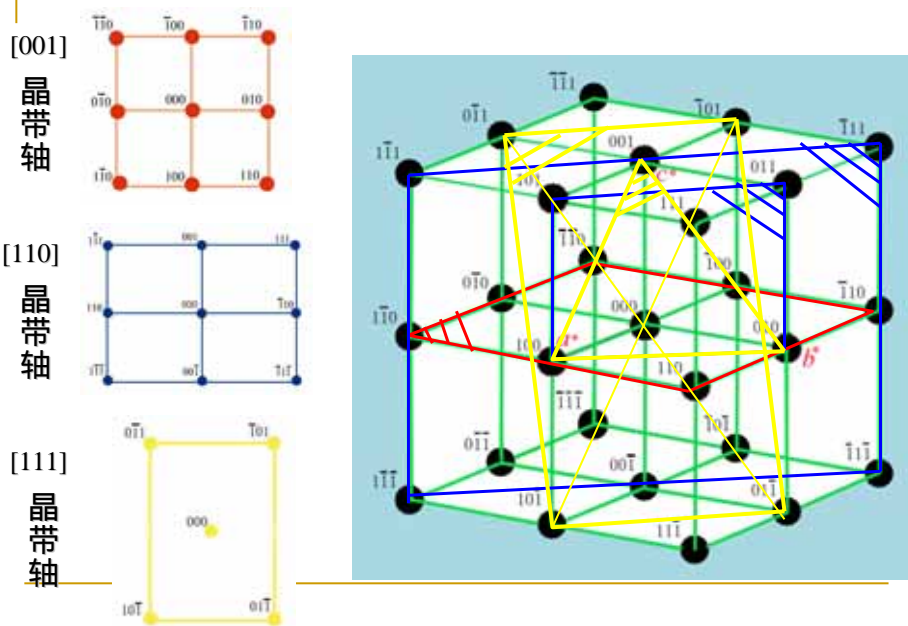
$$uh + vk + lw = 0$$

倒易点阵中的面 $(uvw)^*$ 也是一个面列，它的面间距 $d_{uvw}^* = 1/|r_{uvw}|$ 。过原点的面称为**零阶面**，依次按距倒易点阵原点的距离分别有一阶、二阶...等 $N$ 阶面。

#### 晶带与倒易面的几何关系说明



### 一个立方P点阵的晶带的倒易点例子



## 1.4.8 倒易矢量在晶体学中几何关系的应用

### 1.4.8.1 点阵平面间距公式

把 $\mathbf{H}_{hkl}$ 自我点乘，得

$$\mathbf{H}_{hkl} \cdot \mathbf{H}_{hkl} = \frac{1}{d_{hkl}^2}$$

故  $\frac{1}{d_{hkl}^2} = (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) \cdot (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*)$

$$= h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^*b^* \cos \gamma^* + 2lhc^*a^* \cos \beta^* + 2klb^*c^* \cos \alpha^*$$

把 $\mathbf{a}^*$ 、 $\mathbf{b}^*$ 、 $\mathbf{c}^*$ 、 $\alpha^*$ 、 $\beta^*$ 、 $\gamma^*$ 换成正点阵的 $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{b}$ 、 $\mathbf{c}$ 、 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 就获得计算点阵平面面间距的普遍公式：

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{\frac{h}{a} \begin{vmatrix} h/a & \cos \gamma & \cos \beta \\ k/b & 1 & \cos \alpha \\ l/c & \cos \alpha & 1 \end{vmatrix} + \frac{k}{b} \begin{vmatrix} 1 & h/a & \cos \beta \\ \cos \gamma & h/b & \cos \alpha \\ \cos \beta & l/c & 1 \end{vmatrix} + \frac{l}{c} \begin{vmatrix} 1 & \cos \gamma & h/a \\ \cos \gamma & 1 & k/b \\ \cos \beta & \cos \alpha & l/c \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \cos \gamma & \cos \beta \\ \cos \gamma & 1 & \cos \alpha \\ \cos \beta & \cos \alpha & 1 \end{vmatrix}}$$

根据各晶系的点阵常数的关系，可以得出各晶系的面间距公式。例如立方系， $a=b=c$ ， $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ ，所以，有

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



#### 1.4.8.2 求点阵平面的法线方向指数

正点阵中的面 $(hkl)$ 与其法线 $[uvw]$ 一般不同名。但是， $(hkl)$ 一定和它同名的倒易矢量 $[hkl]^*$ 垂直，即 $[uvw] \perp [hkl]^*$ 。因为只讨论方向，所以不考虑矢量的绝对长度，有

$$ha^* + kb^* + lc^* = ua + vb + wc$$

用 $a^*$ 、 $b^*$ 、 $c^*$ 分别对上式同时点乘两端得：

$$u = a^* \cdot a^* h + a^* \cdot b^* k + a^* \cdot c^* l$$

$$v = b^* \cdot a^* h + b^* \cdot b^* k + b^* \cdot c^* l$$

$$w = c^* \cdot a^* h + c^* \cdot b^* k + c^* \cdot c^* l$$

把上面三个式子写成矩阵形式：

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a^* \cdot a^* & a^* \cdot b^* & a^* \cdot c^* \\ b^* \cdot a^* & b^* \cdot b^* & b^* \cdot c^* \\ c^* \cdot a^* & c^* \cdot b^* & c^* \cdot c^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}$$

同理，可按下式求出与方向指数为 $[uvw]$ 的方向相垂直的面的面指数 $(hkl)$ ：

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \cdot a & a \cdot b & a \cdot c \\ b \cdot a & b \cdot b & b \cdot c \\ c \cdot a & c \cdot b & c \cdot c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix}$$

例如，对立方系， $a^* \cdot a^* = b^* \cdot b^* = c^* \cdot c^* = 1/a^2$ ； $a^* \cdot b^* = b^* \cdot c^* = c^* \cdot a^* = 0$ 。则

$$\begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = \frac{1}{a^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = \frac{1}{a^2} \begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}$$

$u:v:w = h:k:l$ 。所以， $(hkl)$ 面的法线指数和面指数同名，即为 $[hkl]$ 。对于其它晶系，由于单胞的三个棱长不完全相等，所以，晶面法线的方向指数中三个指数不可能化为互质的整数。从晶体点阵的角度看，这样的指数是没有意义的。有时为了特殊需要，也可以求法线指数。

### 1.4.8.3 点阵平面的法线间的夹角

设两个面 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$ ，因为  $H_{h_1k_1l_1}$  与  $n_{h_1k_1l_1}$  平行， $H_{h_2k_2l_2}$  与  $n_{h_2k_2l_2}$  平行，所以， $n_{h_1k_1l_1}$  与  $n_{h_2k_2l_2}$  的夹角就是  $H_{h_1k_1l_1}$  与  $H_{h_2k_2l_2}$  的夹角。

设 $(h_1k_1l_1)$ 和 $(h_2k_2l_2)$ 的夹角为 $\theta$ ，则

$$\begin{aligned}\cos\theta &= \frac{H_{h_1k_1l_1} \cdot H_{h_2k_2l_2}}{|H_{h_1k_1l_1}| |H_{h_2k_2l_2}|} \\ &= \frac{(h_1a^* + k_1b^* + l_1c^*) \cdot (h_2a^* + k_2b^* + l_2c^*)}{|h_1a^* + k_1b^* + l_1c^*| |h_2a^* + k_2b^* + l_2c^*|}\end{aligned}$$

根据各晶系的点阵常数的关系，可以得出各晶系的面夹角（同面法线夹角）公式。例如立方系， $a=b=c$ ， $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ ， $\Omega=a^3$ ；并且 $a^*=b^*=c^*=1/a$ ，所以，有

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

又如六方晶系，由于 $a=b \neq c$ ， $\alpha=\beta=90^\circ$ ， $\gamma=120^\circ$ ， $\Omega=\sqrt{3}a^2c/2$ ， $a^*=b^*=2\sqrt{3}/3a$ ， $c^*=1/c$ ，故

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

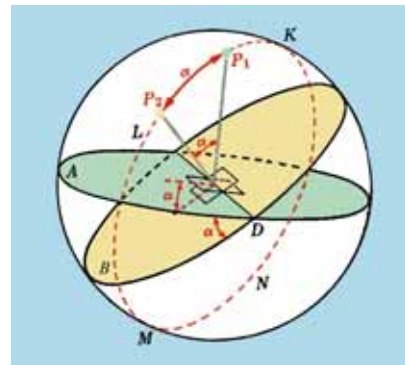
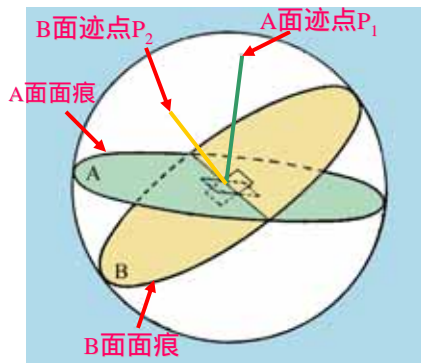
## 1.5 极射赤面投影

### 1.5.1 球面投影

把晶体的晶面、晶向以及它们之间的关系在一个球面上表达，这个球称**参考球**（Reference Sphere），这种表达方式就是球面投影。

迹点（极点）和迹径（面痕）

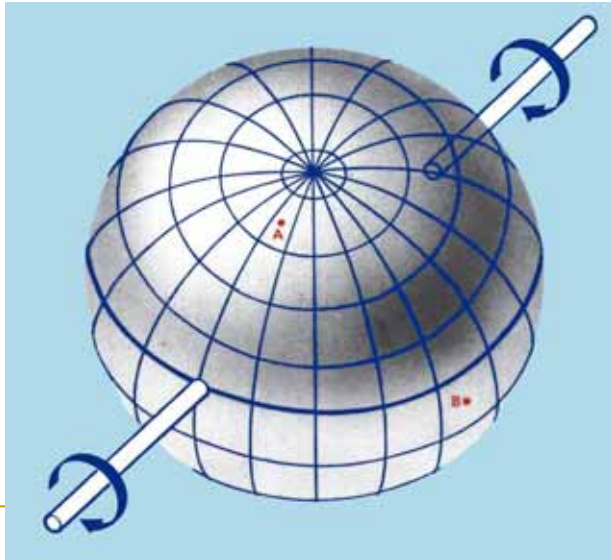
迹点和面夹角的测量





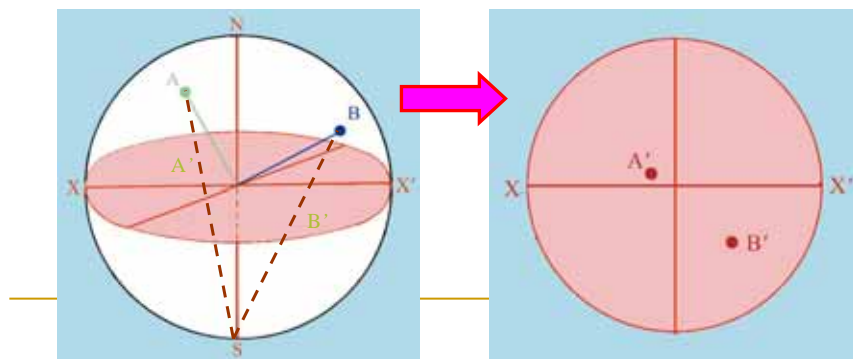
为了方便量度，可以在参考球面上引入**参考网格**（Reference Grid）。参考网格类似于地球的经线（Longitude）和纬线（Latitude），经线是过球两极点（Two Antipodal Points）的大圆，它们将赤道（Equator）等分为360份（或等间距的不同份数）；纬线是平行于赤道的一系列小圆，相邻两个小圆之间夹角相等（一般为一度），这样将经线大圆为360份。

测量时，将参考网格转动，使测量的两个极点落在**同一条经线上**，读出两极点之间的纬度，就是这两极点之间的夹角。



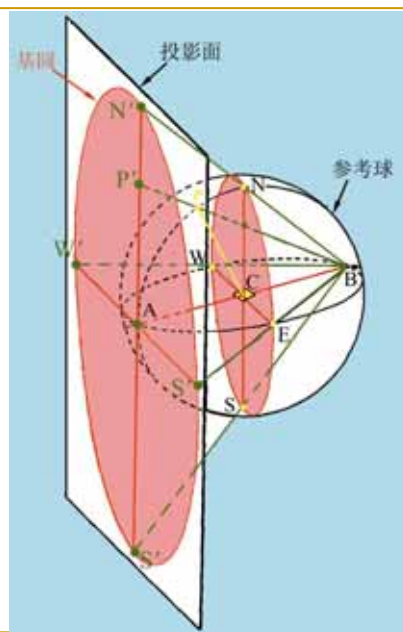
### 1.5.2 极射赤面投影

把球面转化为一种平面关系。常用极射赤面投影，以过参考球球心作一平面作为投影面，投影面和参考球相交的大圆称为**基圆**（Basic Circle），又称为**赤道平面**（Equator Plane）。垂直于投影面并过球心的轴  $NS$  为**投影轴**（Projection Axis）。投影轴在参考球上的两个交点  $S$  和  $N$  是**南极**和**北极**（South and North Poles），又称**下目测点**和**上目测点**。处于上半球面上的极点（迹点）和**下目测点**相连，处于下半球面上的极点（迹点）和**上目测点**相连，它们的**连线**和**投影面**的交点就是这个极点（迹点）的极射赤面投影点。



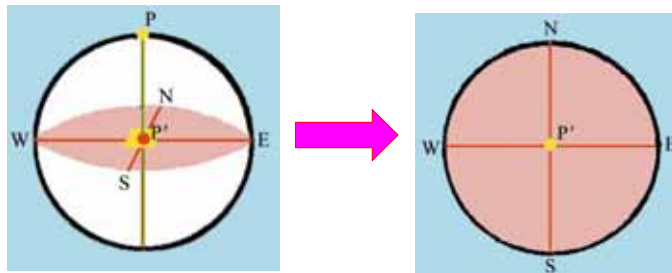
极射投影有时选取和视点另一侧（另一视点）相切的面作为投影面，投影时从视点和球面上极点相连线延长至投影面，所得交点就是投影点。

这样的极射投影图和选择赤道面作投影面的完全一样的，只是尺寸大小改变罢了。

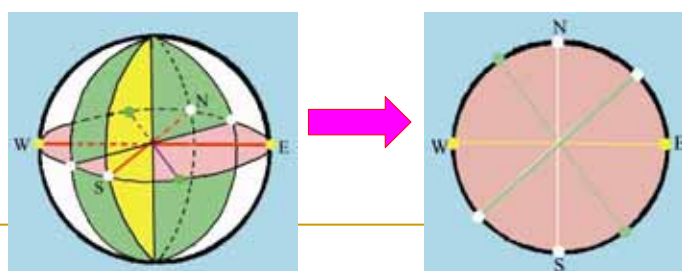


### 极射投影的一些性质

和赤道面平行的晶面，它的极射投影点必在基圆中心。

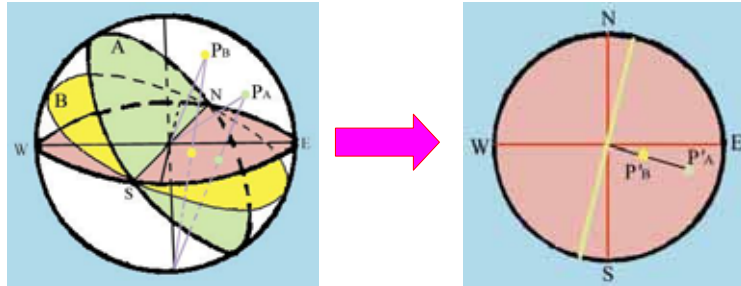


垂直于赤道面的晶面，它们的极点的投影必在基圆的圆周上。

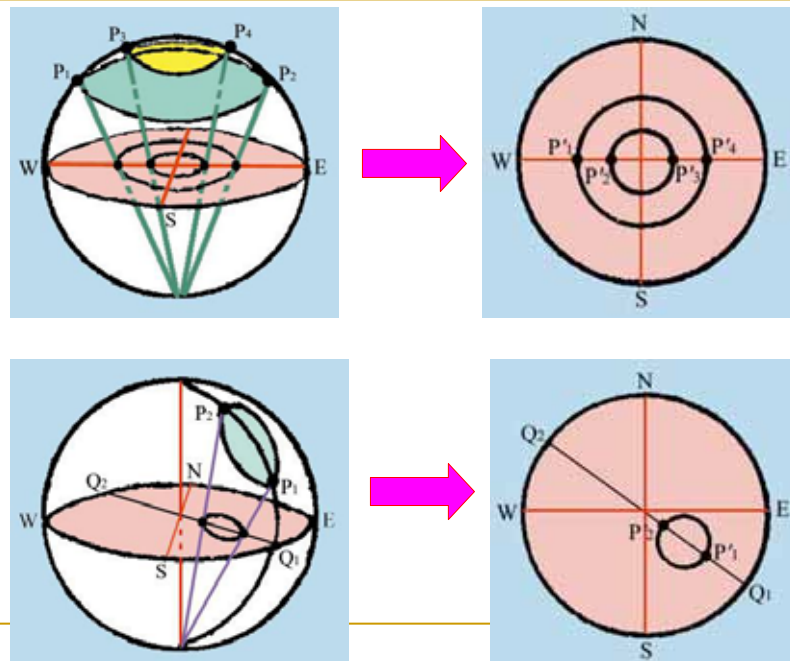
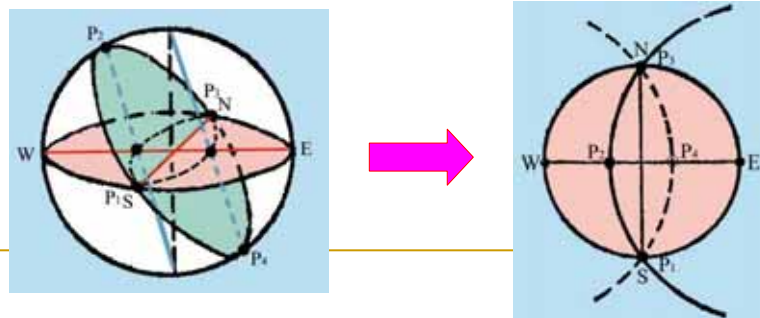




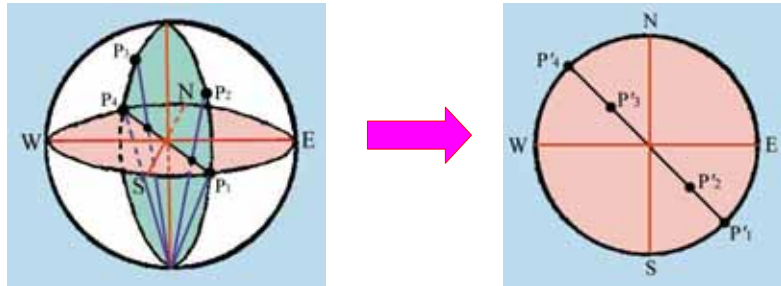
倾斜晶面的极点的极射投影必在基圆内，晶面法线与投影轴的夹角越小，则投影点距基圆中心越近；反之，就越趋向于基圆圆周。



投影球上的任意圆，不论是大圆或小圆，它们的极射投影一般是圆或圆弧。

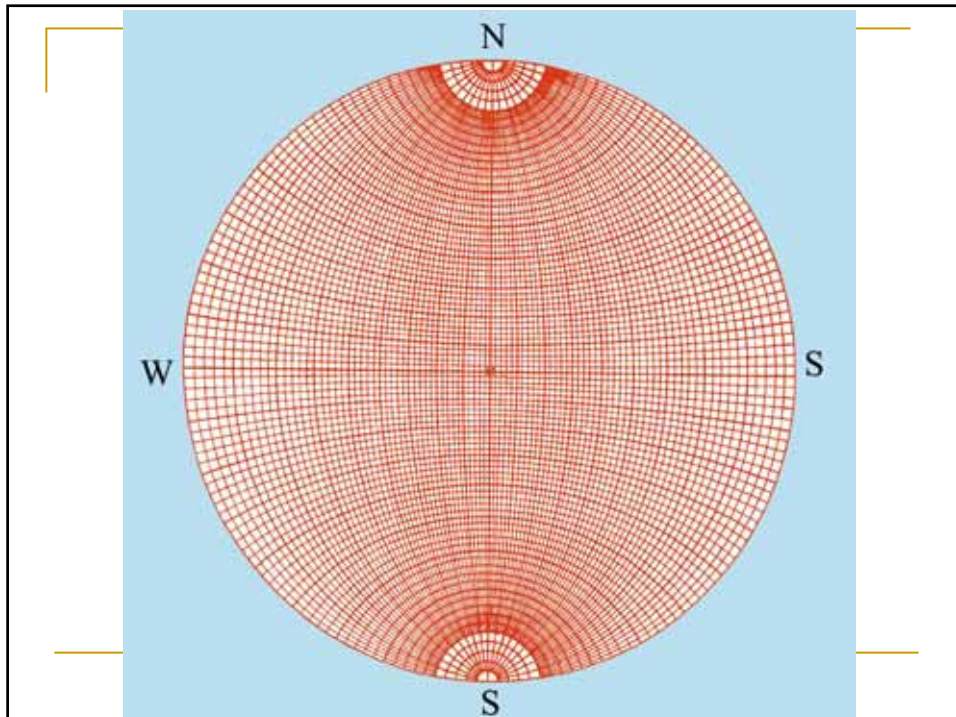
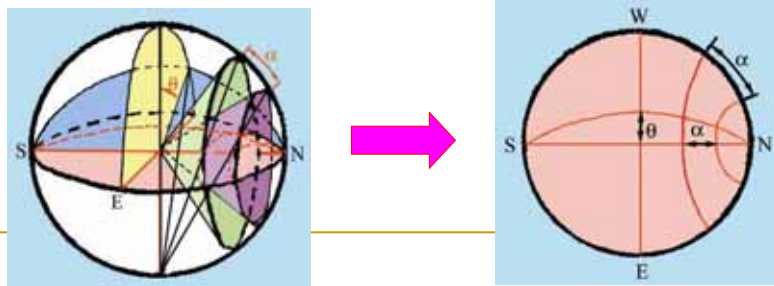


和投影面垂直的大圆的极射投影是过基圆圆心的直线。



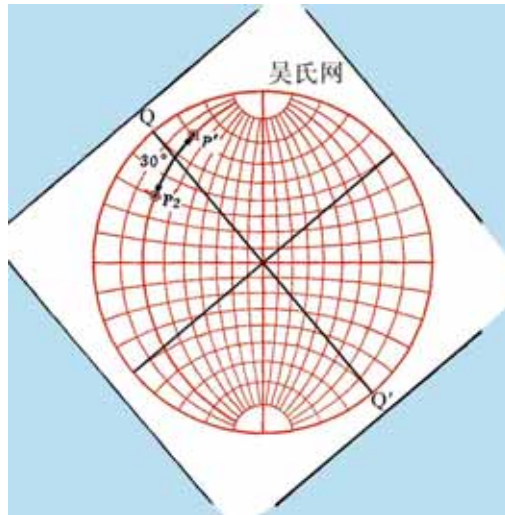
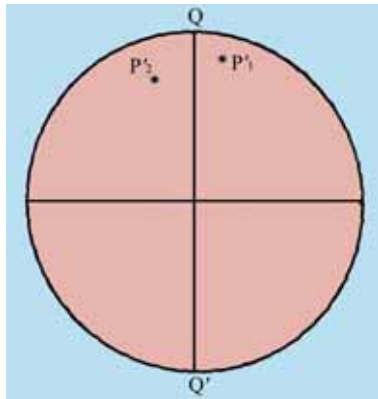
### 1.5.3 吴氏网 (俄国矿物学家Y V Wulff)

吴氏网是极射投影的量度工具。

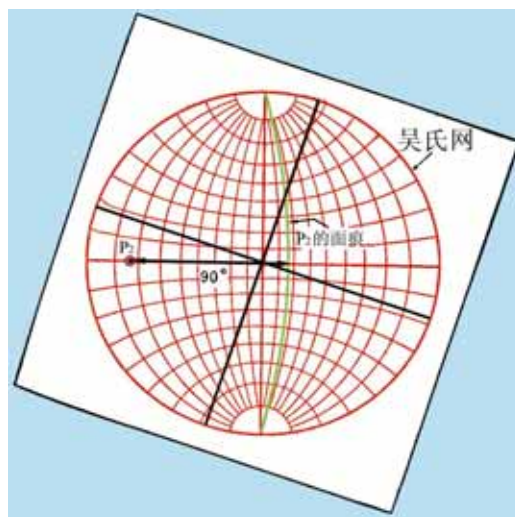
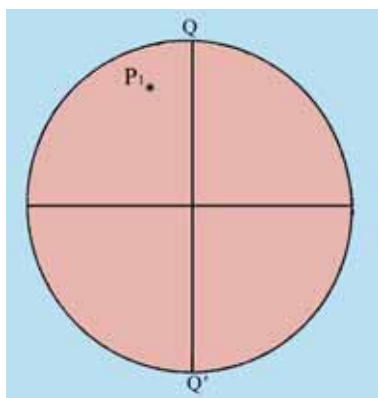


### 吴氏网应用的例子

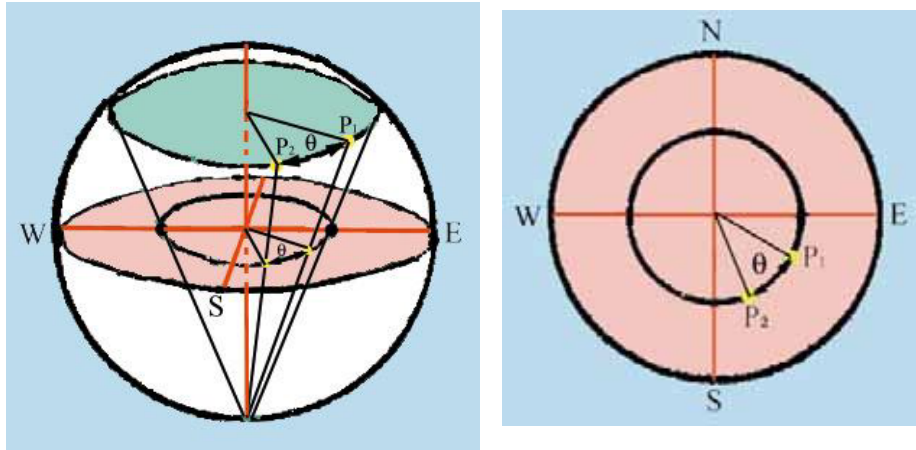
两极点（或迹点）之间角度测量



### 极点所对应的面痕

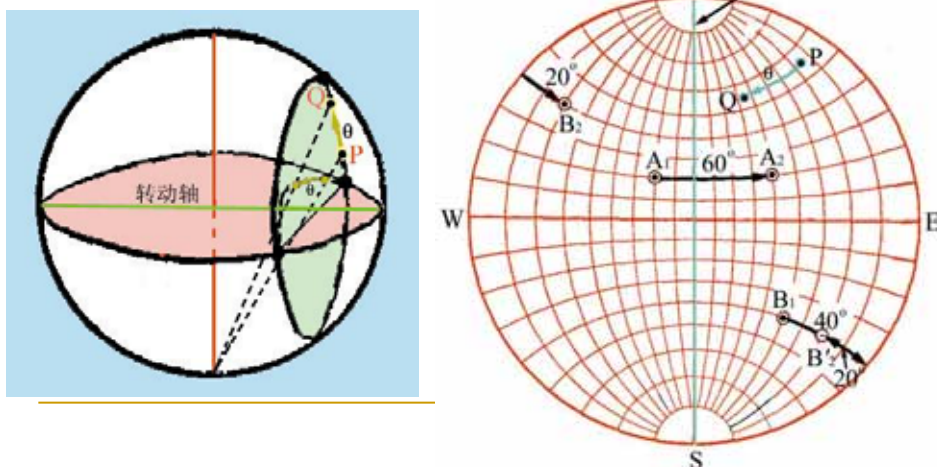


### 极点绕投影面法线转动



### 极点绕位于投影面上的轴转动

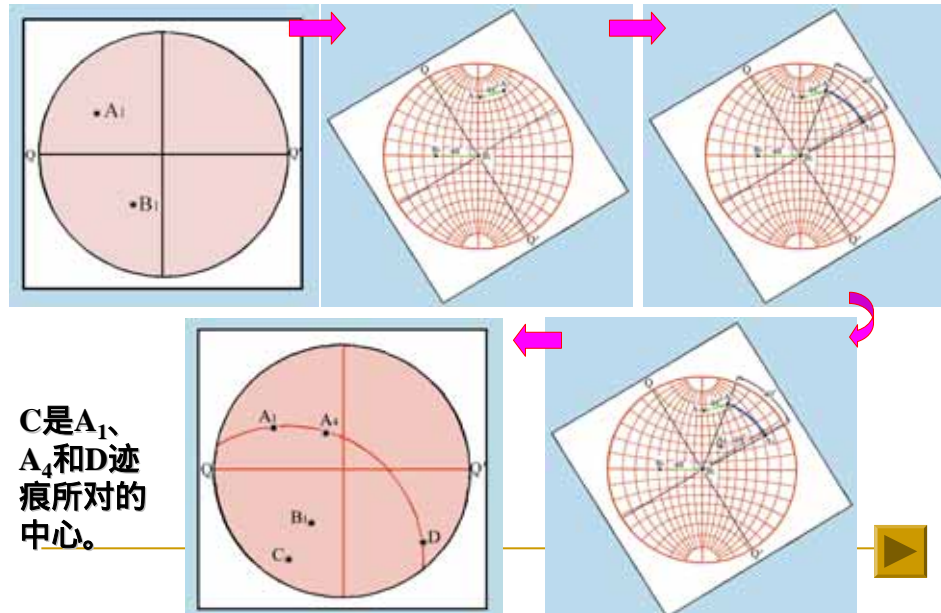
因为绕位于投影面上的轴转动的轨迹的面是与投影面垂直的，所以先把转动轴转到与吴氏网的NS轴重合，然后从极点沿纬线转动所需转的角度即可。





### 极点绕倾斜轴转动

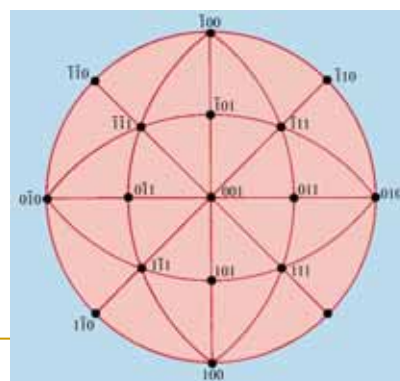
例:要求下图中的 $A_1$ 极点绕 $B_1$ 轴以顺时针方向转动 $40^\circ$ 。

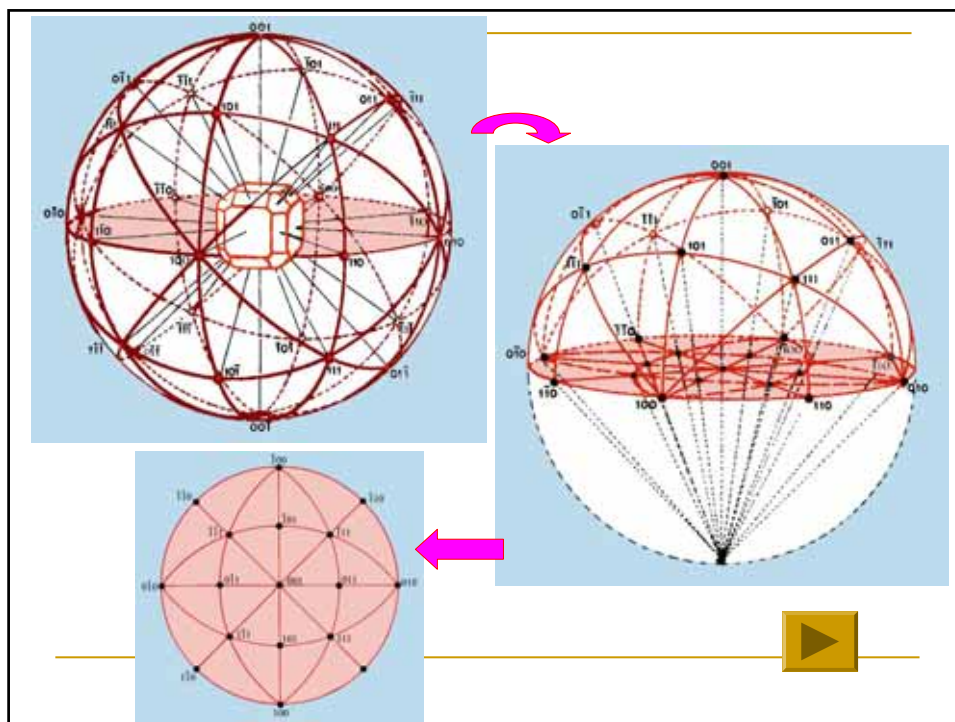


### 1.5.4 标准投影图、标准极图 (Standard Projection)

为了一目了然地看出晶体中所有重要晶面的相对取向，通常制作**标准投影图**（或称**标准极图**）。制作这种投影图时，一般选择某个低指数晶面（例如 $(100)$ 、 $(110)$ 、 $(111)$ 等）作为投影面，将其它重要的晶面（重要晶面的数目视具体需要而定）的极点投影到这个面上。如果所选的投影面是 $(hkl)$ ，则此投影图就称作 $(hkl)$ 标准投影图。

标准极图的例子  
立方系 $001$ 极图





作出 $h_0k_0l_0$ 标准极图：

把 $h_0k_0l_0$ 极点放在投影图中心；任意找出与 $h_0k_0l_0$ 垂直的极点： $h_1k_1l_1$ 和 $h_2k_2l_2$ ，并且 $h_1k_1l_1$ 和 $h_2k_2l_2$ 也相互垂直，它们必在大圆圆周上。

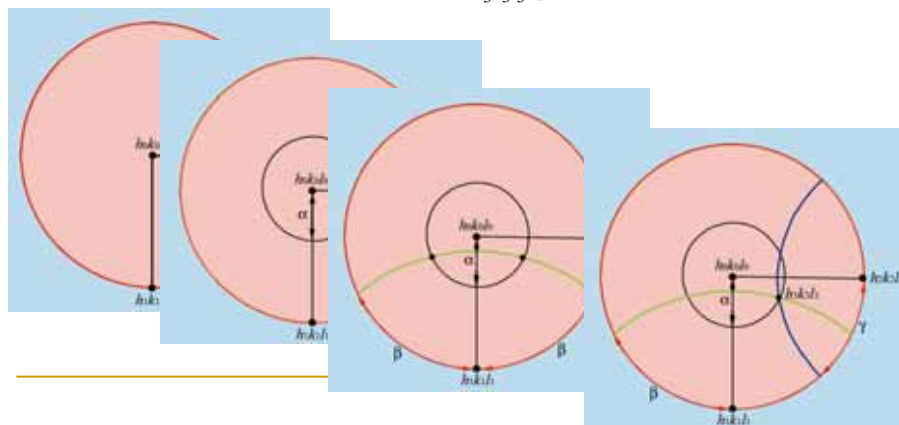
计算 $h_3k_3l_3$ 与 $h_0k_0l_0$ 、 $h_1k_1l_1$ 和 $h_2k_2l_2$ 间的夹角，设为 $\alpha$ 、 $\beta$ 和 $\gamma$ 。

找出与 $h_0k_0l_0$ 角度为 $\alpha$ 的轨迹，它是以中心为圆心的圆。

找出与 $h_1k_1l_1$ 角度为 $\beta$ 的轨迹，它是一条弧。它与 $h_0k_0l_0$ 角度为 $\alpha$ 的圆相交两点。

找出与 $h_2k_2l_2$ 角度为 $\gamma$ 的轨迹，它是一条弧。它与 $h_0k_0l_0$ 角度为 $\alpha$ 的圆也相交两点。

三条轨迹相交的点就是所求的极点 $h_3k_3l_3$ 。





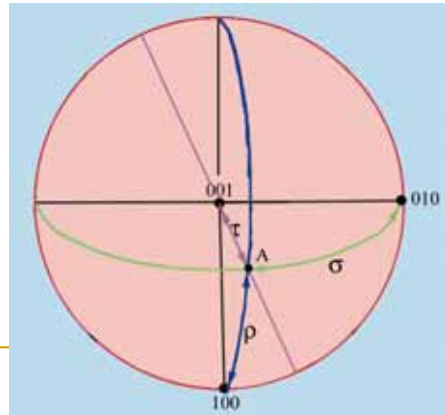
### 在投影图上任一个极点对应的密勒指数的确定：

一个晶面在空间的取向可以由它的法线与三个晶轴[100]、[010]、及[001]的夹角确定。在投影图上任一点对应的密勒指数可以(用吴氏网)量度它们与投影图上(100)、(010)和(001)三个极点的夹角来确定。用吴氏网量出所求极点与(100)、(010)及(001)的夹角分别为 $\rho$ 、 $\sigma$ 和 $\tau$ 。因为

$$h:k:l = a \cdot n : b \cdot n : c \cdot n = a \cos \rho : b \cos \sigma : c \cos \tau$$

就可求出该点对应的密勒指数 $hkl$

注意：因为量度两个极点间的角度，都是过两个极点的经线来量度。



### 用计算机编程绘制标准极图：

若选定 $(h_1k_1l_1)$ 为投影面，则极射投影图中心极点就是 $(h_1k_1l_1)$ 。再选另一个与 $(h_1k_1l_1)$ 垂直的面 $(h_2k_2l_2)$ ，它的极点必然在投影基圆圆周上，以圆心到这 $(h_2k_2l_2)$ 极点的连线作Y轴，相应以正交关系在投影基圆上作出X轴。这样，只要求出任一个晶面 $(h_3k_3l_3)$ 极点在投影图上的坐标 $(x, y)$ ，则可绘制 $(h_1k_1l_1)$ 标准极图。

设投影基圆半径为1，则 $(h_3k_3l_3)$ 极点P点的空间坐标 $(x', y', z')$ ，为  
 $(\sqrt{1 - (\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta)}, \cos \beta, \cos \alpha)$ ，  
 其中 $\alpha$ 是 $(h_3k_3l_3)$   $(h_1k_1l_1)$ 的夹角， $\beta$ 是 $(h_3k_3l_3)$   $(h_2k_2l_2)$ 的夹角，因为是极射投影，所以投影的径向长度缩小为原来的 $1/(1 + \cos \alpha)$ ，所以 $P_1$ 点在投影图上的投影 $P'_1$ 点的坐标 $(x, y)$ 为

$$\left. \begin{aligned} x &= \frac{[1 - (\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta)]^{1/2}}{1 + \cos \alpha} \\ y &= \frac{\cos \beta}{1 + \cos \alpha} \end{aligned} \right\}$$

