

材料科学基础

第一稿

北京科技大学 材料科学与工程学院

第一章

晶体学

(Crystallography)

引言

对晶体的认识;

•1912年以前,从外形
经典晶体学;

•劳厄的发现,
X线衍射,
现代晶体学;

•本章涉及内容

外表特征

点阵与结构

对称性

晶系/布拉菲点阵

点阵几何

晶体投影

天然晶体
规则外形
宏观对称性

结晶态的本质特征:
结构基元在空间
规则周期排列

决定

晶体的宏/微观
特征和物理性质

已发展成多个分枝
晶体几何学
晶体结构学
晶体生成学
晶体物理学
晶体化学

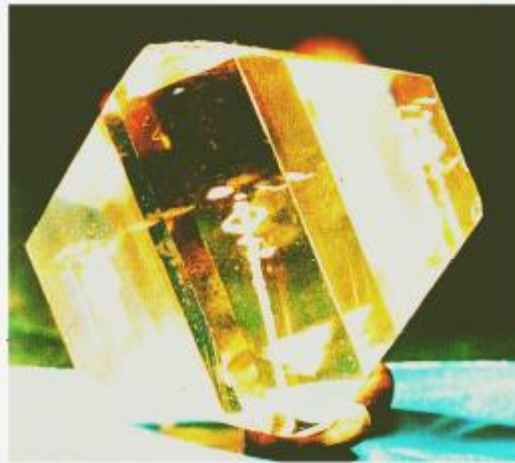
外: 表观
内: 本质
规律, 工具
划分/归纳/总结
定量化表征
形象化表示

现代使用的材料绝大部分是晶态（Crystalline）材料。晶态材料包括单晶材料、多晶材料、微晶材料和液晶材料等。我们日常使用的各种金属材料大部分是多晶材料。

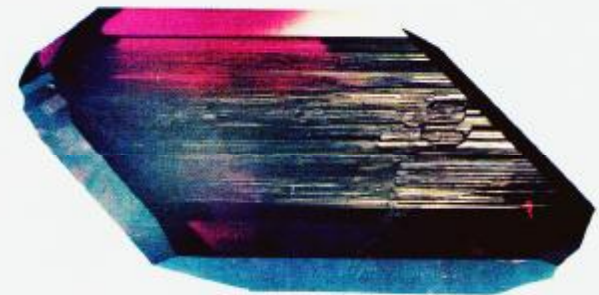
天然晶体具有规则外形和宏观对称性



四硼酸铝铍钒晶体

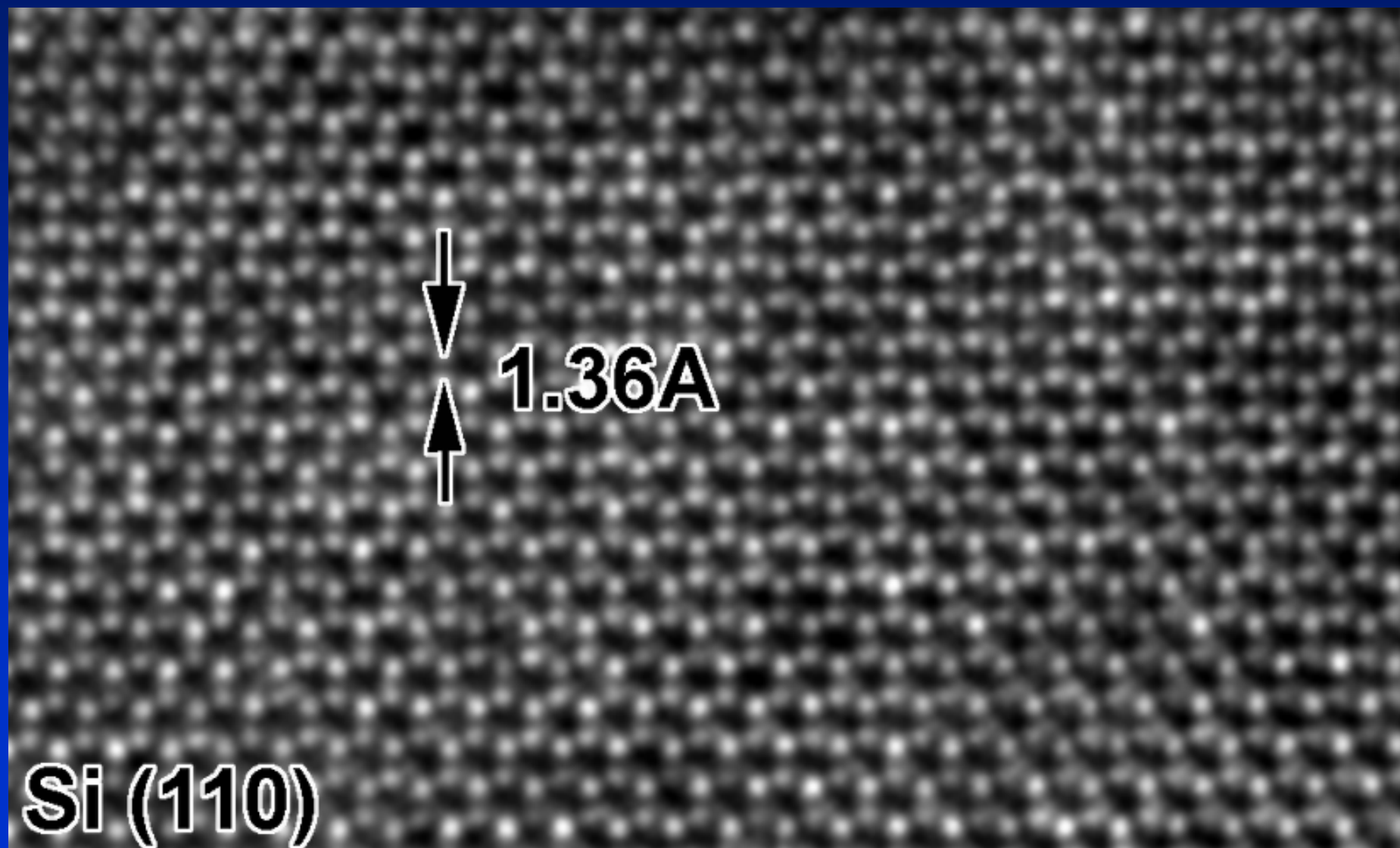


磷酸钛氧钾晶体



四硼酸铝钒晶体

高分辨率电镜（High Resolution Electron Microscopy, HREM）直接观察晶体中原子的规则排列。



晶体科学既是很多学科的基础，又是很多学科的边缘和交叉，它包含广泛的内容：

- (1)晶体几何学 (Geometrical Crystallography)，研究晶体的外表几何形状及它们之间的规律性；
- (2)晶体结构学 (Crystallogy)，研究晶体内部质点排列的规律性以及晶体结构的不完整性；
- (3)晶体生成学 (Crystallogeny)，研究天然以及人工晶体的发生、成长和变化过程及其机制；
- (4)晶体物理学 (Crystallophysis)：研究晶体的光学、电学、力学等物理性质以及和它们相关的结构对称性；
- (5)晶体化学 (Crystallochemistry)，研究晶体的化学组成和晶体结构与晶体物理化学性质间的关系。

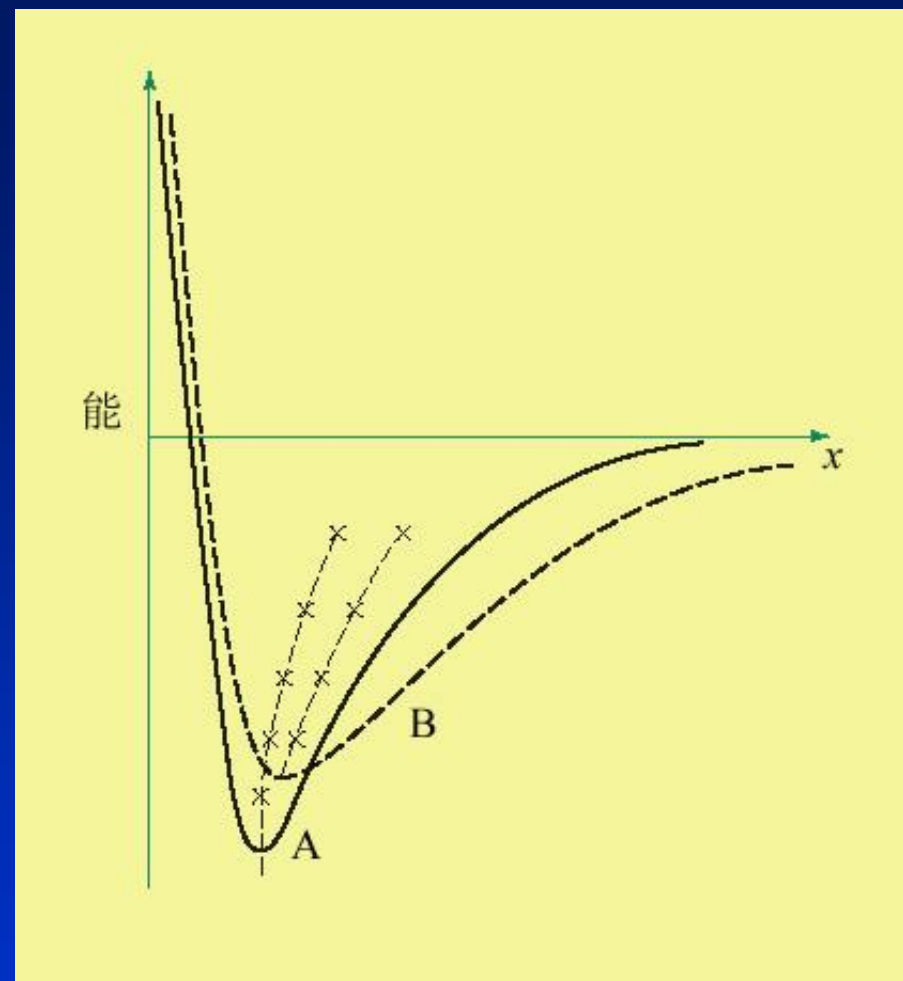
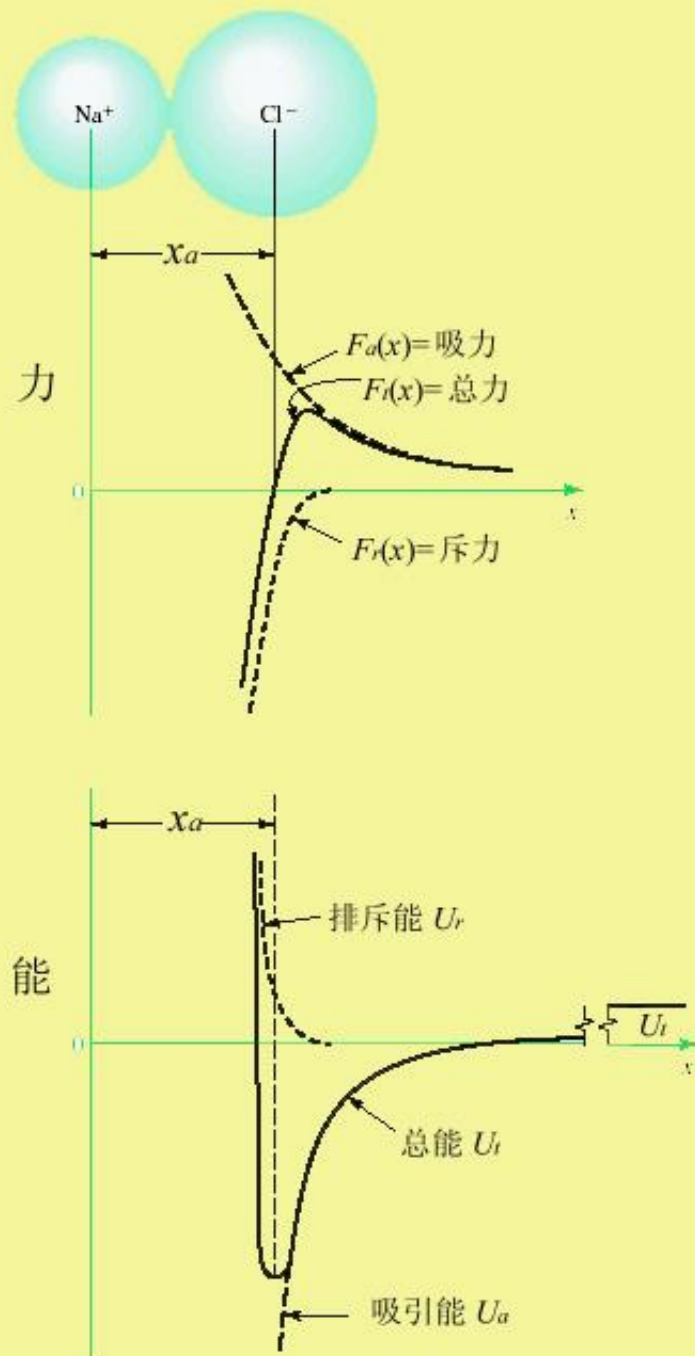
1.1 结晶状态及晶体的宏观特性

物质结晶状态的本质特征是：结构基元在空间呈不随时间变化的三维周期排列，它决定了晶体的宏观和微观物理性质。

不具有这种特性的物质例如石蜡、玻璃等是非晶态物质。

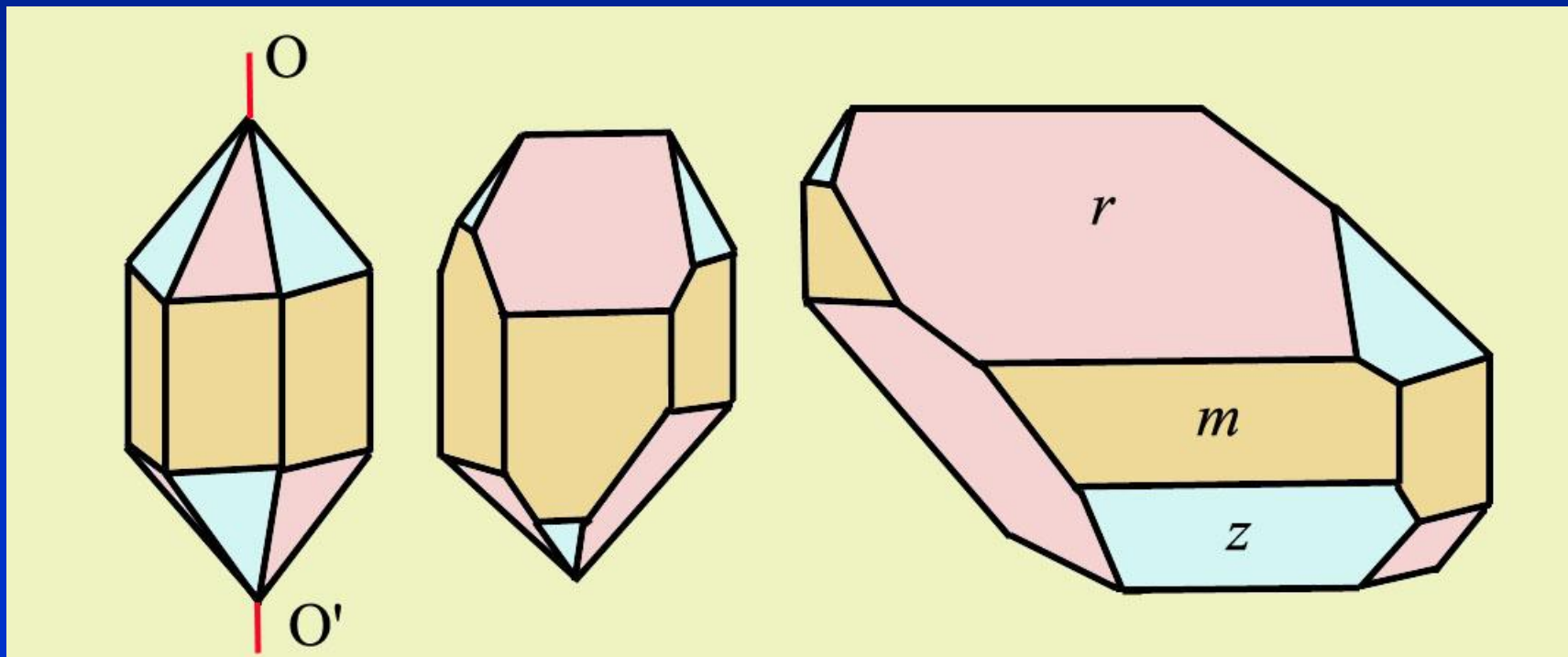
有一些有机高聚合物，它们的结构基元具有一维或二维的近似长程有序排列，其性质介于晶体和非晶体之间，这种物质称为液态晶体，简称液晶（Liquid-crystal）。

晶态物质可以由多个晶体组成，由许多取向不同单晶体晶粒随机排列的组合称多晶体（Polycrystal），各个晶粒之间有晶界分隔开。当晶粒颗粒尺度很小（约为微米级）时称为微晶（Crystallite）。



晶体中结构基元的三维周期排列使晶体在宏观上具有一些共同的性质，它们是：

(1) 晶体的棱角——面和棱的存在以及它们之间的规则性是晶体的宏观特性之一。晶体自发生长成规则几何外形的性质称**自限性**。互相平行的面之间的夹角是守恒的。这些平行的面称为对应面，对应面的这种关系称为**面角守恒定律**。



(2) 均匀性 (Homogeneity) — 晶态物质任意部分的所有性质是完全相同的，这就是均匀性。

(3) 各向异性 (Anisotropy) — 晶体的标量性质 (例如相对密度、热容量等) 和晶体的取向无关；矢量或更普遍情况下的张量性质 (例如热导率、磁导率、光折射率等) (例如介电系数、弹性系数、扩散系数等) 和晶体的取向有关，就是各向异性。

(4) 对称性 (Symmetry) — 晶体的各向异性是指晶体的性质在某些不同的、不连续变化或间断的方向上存在着有规律的等同性，这就是晶体对称性的表现。对称性的概念是自然科学中最普遍最基本的概念之一，它贯穿于整个晶体学研究中，是晶体学的基础。

1.2 点阵、晶体结构 (lattice, Crystal Structure)

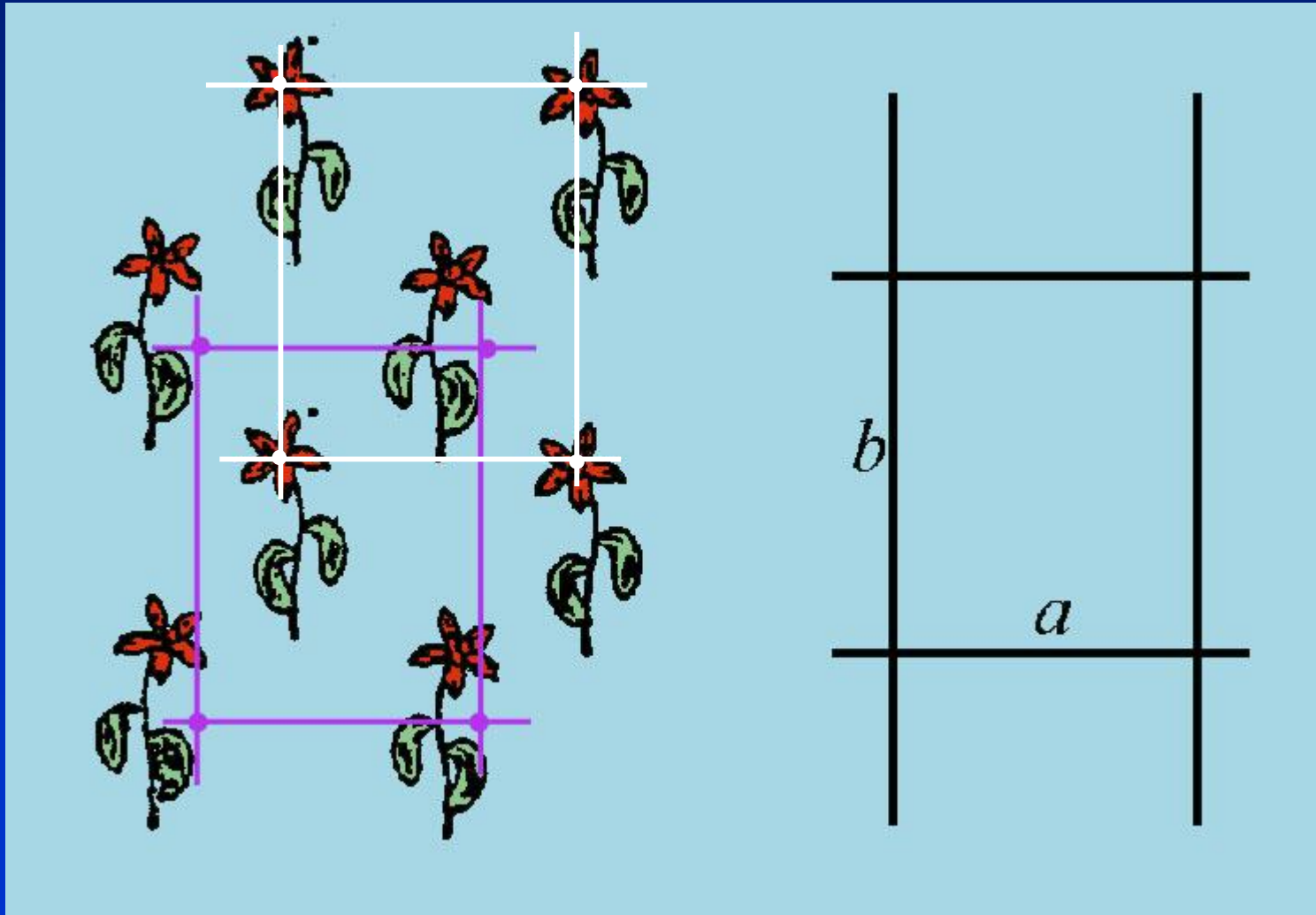
晶体是由结构基元在空间呈不随时间变化的规则的三维周期排列而形成的，因此，研究晶体微观结构的首要任务就是研究周期排列的规律性。

在研究结构基元周期排列的规律性时，往往把结构基元抽象为一个几何点。这样，结构基元的三维周期排列就被抽象为点的三维周期排列（称空间点阵）。研究结构基元的三维周期排列规律就可以转化为研究点的三维周期排列规律。

我们把晶体结构看成是结构基元组成的空间图案，这些图案基元按一定的周期平移能自身重合（在以后的讨论将会知道，这叫作平移对称）。若把每个基元抽象为一个点，显然，这些点也必须具有这种平移重合的特性。

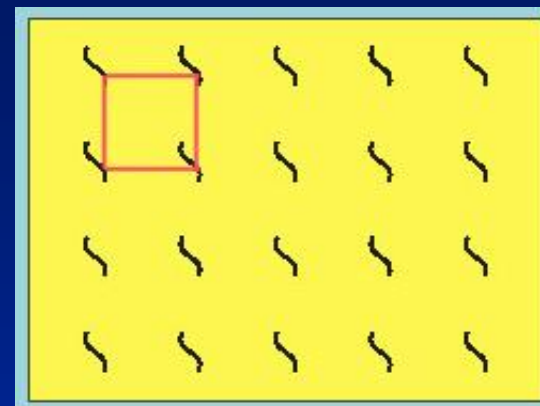
一个晶体周期结构抽象为点阵的基本规则是：

它们各自的物理和几何环境应该完全相同，这些点称为等同点（Equivalent Point）。

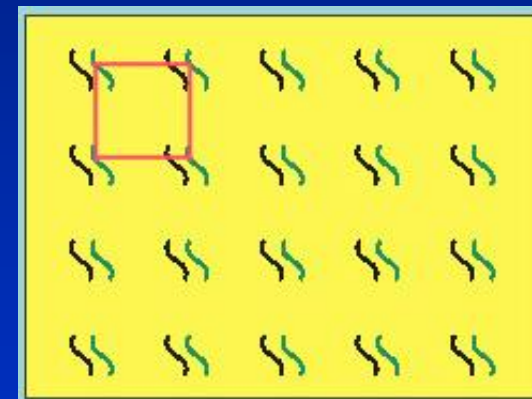


三种2-D花样的例子，它们由相同的矩形点阵构成，但基元不同：

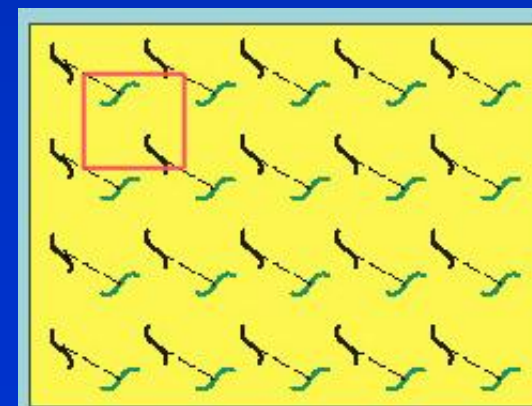
(a) 基元是单一符号



(b) 基元包含重复的符号



(c) 基元包含两种不同取向的符号



空间点阵 (Space Lattice) 的完整的严格的定义:

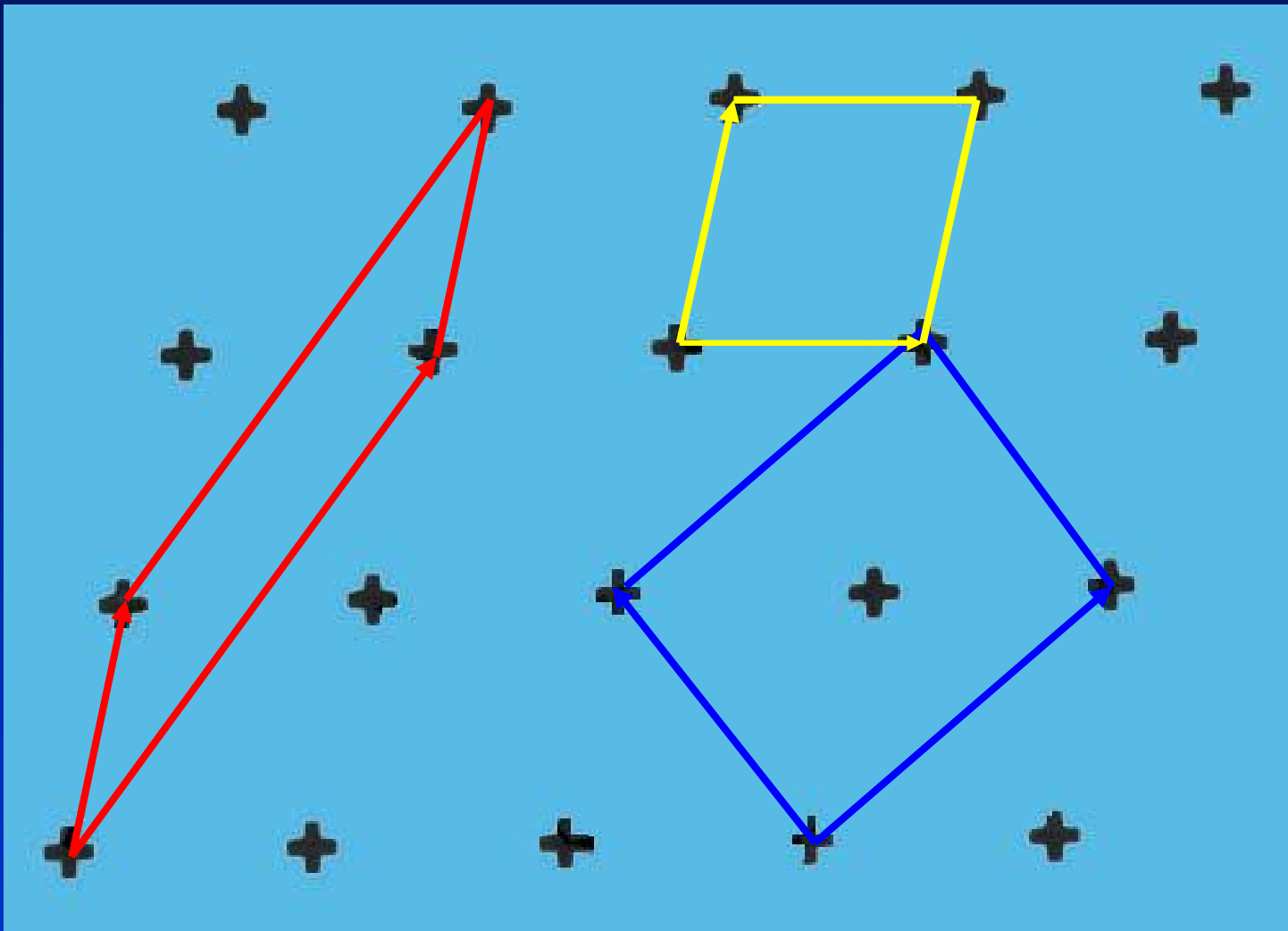
在空间由点排列成的无限阵列, 其中每一个点都和其它所有的点具有相同的环境, 这种点的排列就称为空间点阵。

点阵中任意两个点连接的矢量称为点阵平移矢量 (Lattice Translation Vector)。根据点阵的平移对称性, 可以选取初基矢量 (Primitive Translation Vector 简称基矢) 来描述点阵平移矢量或点阵中的任意点。

对于二维点阵, 则必须选择两个不共线的方向上连接最近邻点的矢量 a , b 作初基矢量来描述点阵, 这两个基矢构成的平行四边形称为初基胞 (Primitive Cell, 它只包含一个点)。点阵的任意点 (任意平移矢量 r) 可以选取任意阵点作原点用两个基矢来描述。

$$r = p_1 a + p_2 b \quad p_1, p_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \Lambda$$

选取基矢：

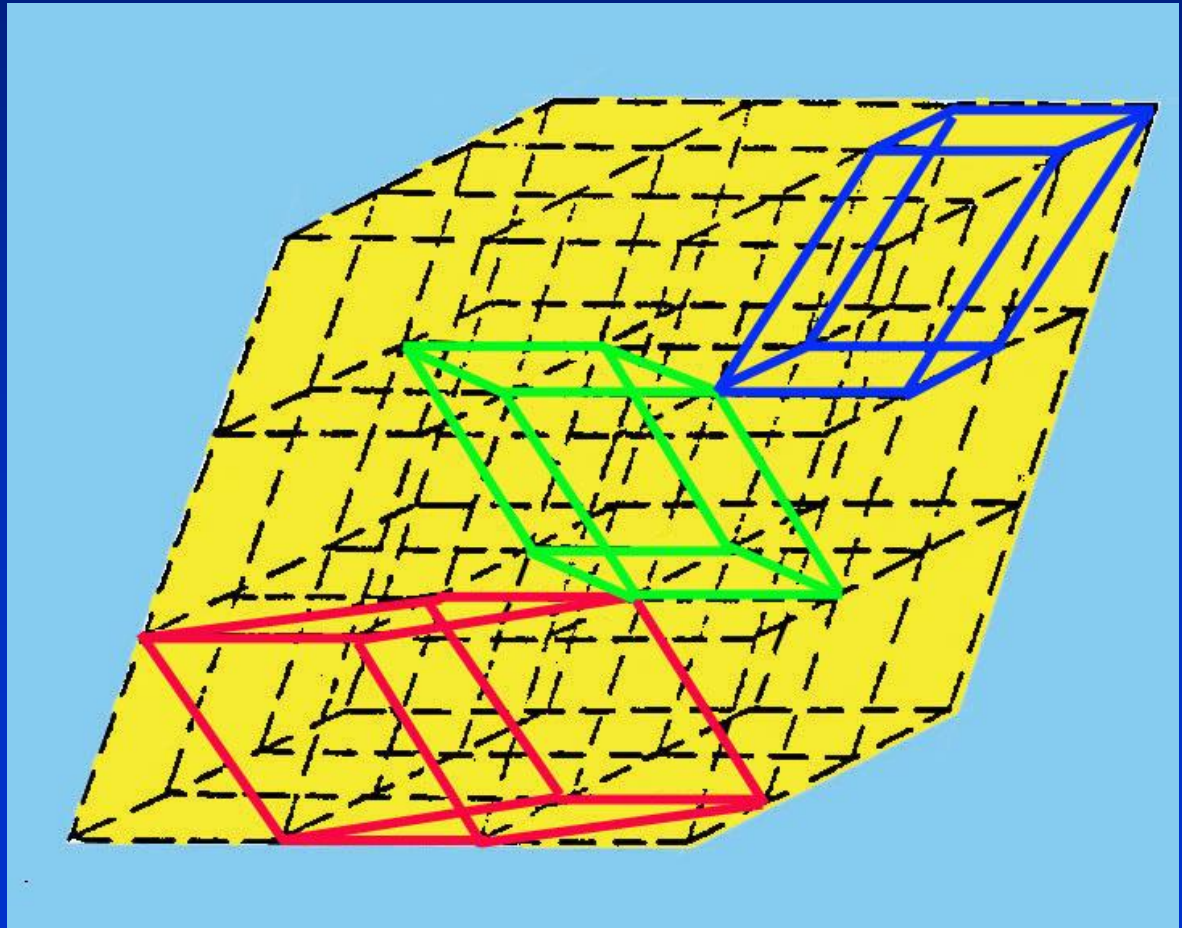


蓝的的不是初基胞，红的和黄的是初基胞。

三维点阵应选择非共面、非共线的三个方向上的最近邻点的矢量 \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} 来描述点阵。这三个基矢构成的平行六面体也称为初基胞（它只包含一个点）。

点阵中任一点（任一平移矢量 \mathbf{r} ）可以选定任一阵点作原点用这三个基矢来描述：

$$\mathbf{r} = p_1\mathbf{a} + p_2\mathbf{b} + p_3\mathbf{c}$$
$$p_1, p_2, p_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$



初基胞（又称 P 单胞，对二维点阵简化为一个平面，对一维点阵简化为一个线段）及初基矢量选择的原则是：

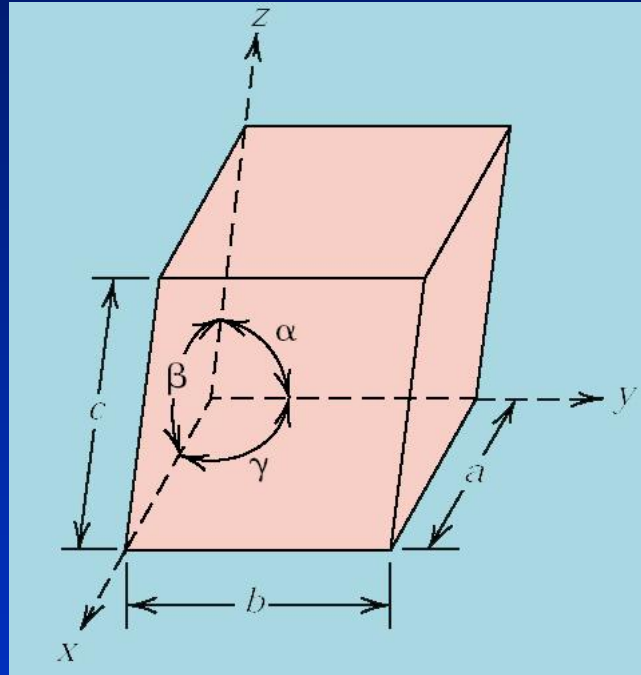
初基单胞只包含一个阵点，初基胞的非平行边是初基矢量。

根据这个原则，初基胞必有如下性质：

- (1) 每一个初基胞只包含一个阵点；
- (2) 以一个阵点作原点，以初基胞作周期平移，可以覆盖整个点阵；
- (3) 不管初基胞如何选择，它们的体积（二维的是面积，一维的是线段长）相等。

包含不止一个阵点的平行六面体（平行四边形），这些都是非初基胞，称它们为复式初基胞（Multiple-Primitive Cell）。

单胞的三个矢量（三个棱） a ， b ， c 的长度 a ， b ， c 以及三个棱之间的夹角 $\alpha(b \wedge c)$ ， $\beta(c \wedge a)$ ， $\gamma(a \wedge b)$ 这6个参数称为点阵常数 (Lattice Parameter)，它们是描述单胞特征的基本参数。



点阵是由晶体的结构基元抽象出来的，可以由下式来说明点阵和晶体结构的关系：

$$\text{点阵} + \text{结构基元} = \text{晶体结构}$$

结构基元可以是一个或多个原子（分子）构成。

1.3 对称性, 空间变换 (Symmetry, Space Translation)

任何物体 (几何图形, 晶体, 函数) 都可以在描述它的变量空间对它的整体作适当的变换, 如果这种变换使物体本身重合 (即它在变换后不变亦即转换成自己), 这样的物体就是对称的, 这样的变换就是对称性变换。

对称性还可以有另外一种说法: 物体可以分割成等同的部分。

概括地说对称性就是在描述物体变量的空间中物体经过某种变换后的不变性。

1.3.1 对称变换(操作) (Symmetry Translation (Operation))

对称变换实际上就是一种对称操作。从几何意义考察物体的对称性就是考察变换前后物体是否自身重合, 如果重合了, 这种变换就是一种对称操作。

以 g 表示对空间坐标 $r(x_1, x_2, x_3)$ 的变换, 变换后的空间坐标变为 r' , 即

$$g[x_1, x_2, x_3] = x'_1, x'_2, x'_3 \quad g[r] = r'$$

如果物体 F 在 g 作用于它的变量后所得的结果不变, 即

$$F(x_1, x_2, x_3) = F(g[x_1, x_2, x_3]) = F(x'_1, x'_2, x'_3) \\ F(r) = F(g[r]) = F(r')$$

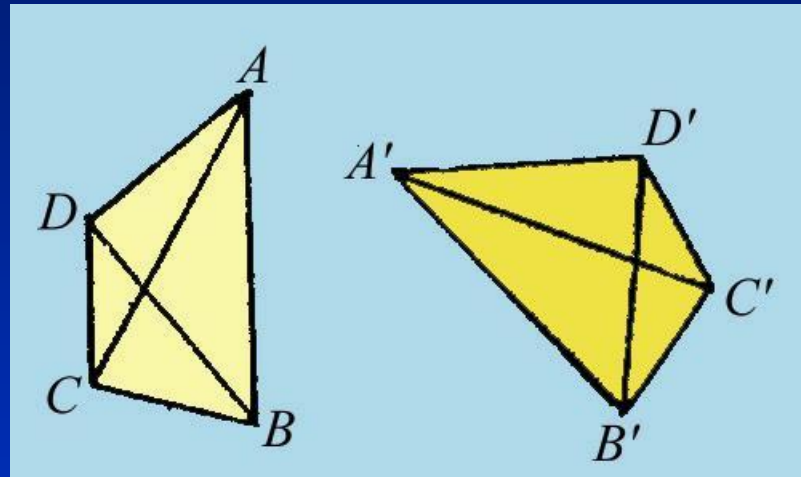
称 F 是对称物体, g 是对称变换(操作)。

对一个物体可以有若干个对称操作, 由两个或更多个相继的相同或不同的对称操作构成的操作也是对称操作。对给定的物体的对称操作的集合就是对称群 (Symmetry Group)。

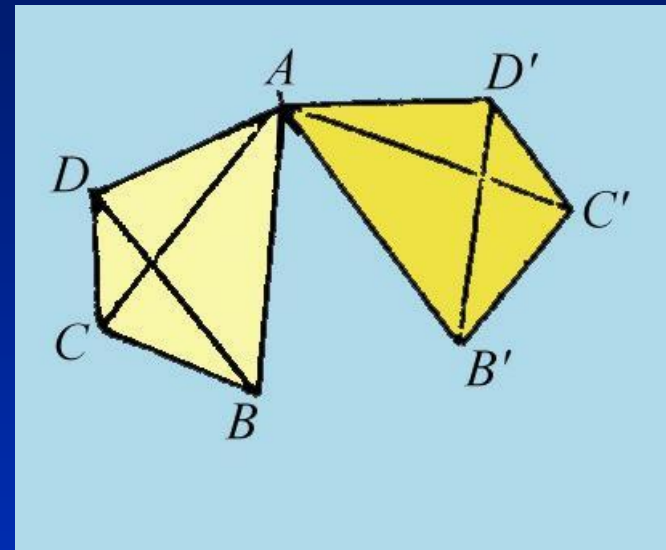
在操作作用下, 物体空间各点和全部位矢都相对一组固定参考轴移动, 称主动操作 (Active Operation)。

在操作作用下, 保持物体空间各点和全部位矢都固定不动而使坐标移动, 称被动操作 (Passive Operation)。

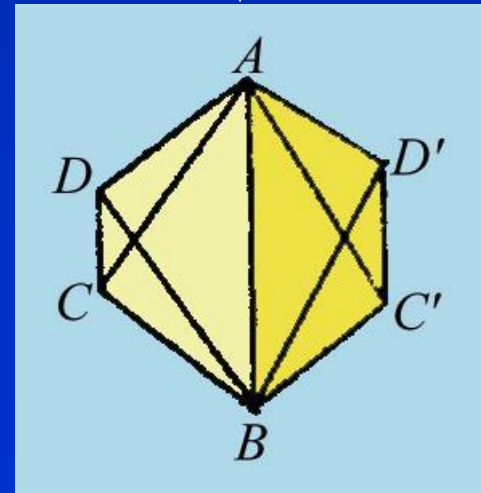
空间物体可看作是点的集合，经对称变换前后点的集合会完全重合。对称变换保持空间的度规性质不变，它是一种等体积变换，变换过程中空间不延伸，不扭曲，任何二点间距离保持不变。



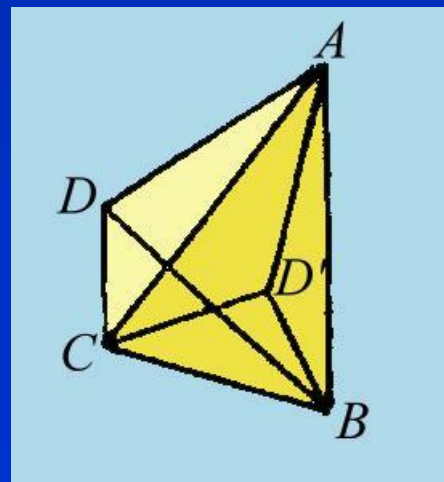
平移
→



↓
绕A点转动



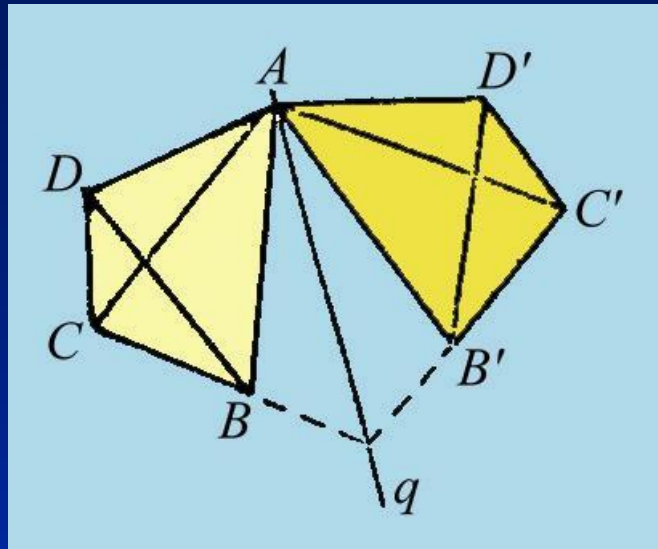
绕AB轴
转动
←



最后以
ABC为镜
面操作
就完全
重合

另一种操作方法

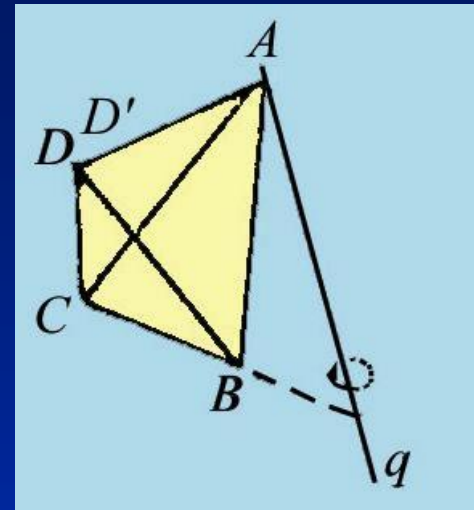
平移后



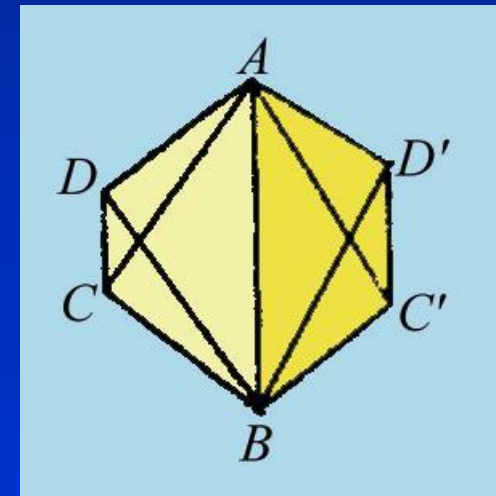
以ABC面和A'B'C'面的交线Aq转动



或



从这个例子可以看出，任何保持空间度规的变换都可以分解为平移、旋转、反映或这些变换的组合。只包含平移和旋转变换及其组合的变换称为第一类变换或本征运动或简称运动，包含反映变换的称为第二类变换或非本征运动。



1.3.2 对称变换的解析式

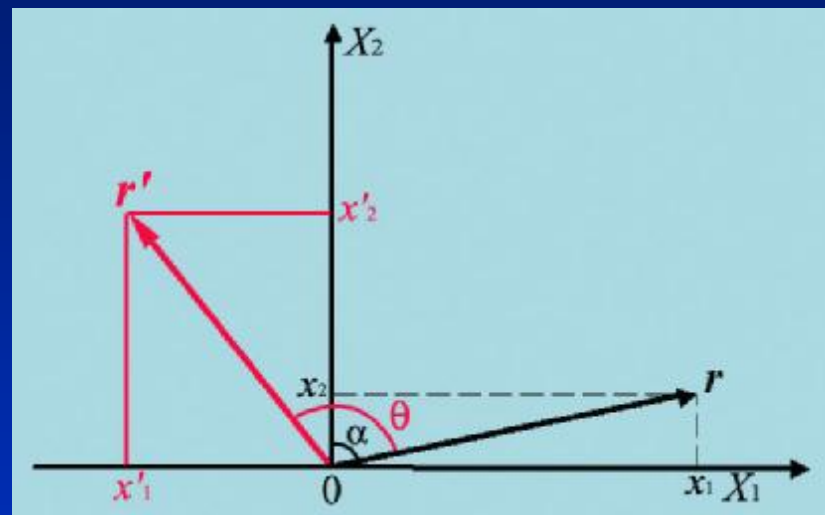
平移对称：设平移矢量为 t ，对称变换 $r'=G[r]$ 描写为

$$r' = r + t$$

物体绕某个轴转动的变换（主动操作）

在 X 坐标系有一点 $r(x_1, x_2, x_3)$ ，它也是从原点到此点的矢量。

如果这一矢量绕 e_3 轴转动 q 角，点到达的新位置为 $r'(x'_1, x'_2, x'_3)$ 。新位置的坐标为：



$$x'_1 = -|r| \sin(q - a) = -|r|(\sin q \cos a - \cos a \sin q)$$

$$x'_2 = -|r| \cos(q - a) = |r|(\cos q \cos a + \sin a \sin q)$$

因 $\cos \alpha = x_2/|r|$ 及 $\sin \alpha = x_1/|r|$ ，即

$$x'_1 = x_1 \cos q - x_2 \sin q$$

$$x'_2 = x_1 \sin q + x_2 \cos q$$

因此, r 到 r' 变换的解析式是:

$$\begin{pmatrix} \hat{e}_{x'_1} \\ \hat{e}_{x'_2} \\ \hat{e}_{x'_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{e} \cos q & -\hat{e} \sin q & 0 \\ \hat{e} \sin q & \cos q & 0 \\ \hat{e} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{e}_{x_1} \\ \hat{e}_{x_2} \\ \hat{e}_{x_3} \end{pmatrix}$$

又可写成: $r' = Rr$, 式中 R 是变换矩阵

$$R = \begin{pmatrix} \hat{e} \cos q & -\hat{e} \sin q & 0 \\ \hat{e} \sin q & \cos q & 0 \\ \hat{e} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

更一般的情况, r 绕任意方向的单位矢量 $S = ue_1 + ve_2 + we_3$ (把 S 记作 $[uvw]$) 转动 q 角到达 r' 的变换矩阵是:

$$R = \cos q \begin{pmatrix} \hat{e} 1 & 0 & 0 \\ \hat{e} 0 & 1 & 0 \\ \hat{e} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + (1 - \cos q) \begin{pmatrix} \hat{e} u \times u & u \times v & u \times w \\ \hat{e} v \times u & v \times v & v \times w \\ \hat{e} w \times u & w \times v & w \times w \end{pmatrix} + \sin q \begin{pmatrix} \hat{e} 0 & -w & v \\ \hat{e} w & 0 & -u \\ \hat{e} -v & u & 0 \end{pmatrix}$$

1.3.3 点对称变换(操作)

点对称操作保证操作前后最少有一点保持不动，因此也可能会有线或面保持不动甚至还可能整体不动。

在操作过程保持不动的点、线或面都是对称元素 (Symmetry Elements)。对称元素通常用两种符号表示，一种是国际符号 (International Notation)，另一种是熊夫利斯符号 (Schoenflies Notation)。

旋转操作 (Rotation Operation)

旋转操作是绕某一轴 $[uvw]$ 反时针方向旋转 $2\pi/n=q$ 角度的对称操作， n 为正整数，是旋转轴 (Rotation Axes) 的轴次。旋转轴就是这个操作过程中不动的线，它就是这个操作的对称元素。旋转操作的国际符号为 $n_{[uvw]}$ ，熊夫利斯符号为 $C_{n[uvw]}$ 。

$n(C_n)$ 连续操作了 m 次，则记作 $n^m(C_n^m)$ 。它的变换矩阵也相应于原操作矩阵自乘了 m 次。一般 $m \leq n$ ，当 $m=n$ 时，实际上旋转了共 360° ，即回到原来位置，是下面讨论的恒等操作。

①恒等操作 (Identity, 又称单位操作)

这操作后与没有操作一样, 从旋转的角度看, $n=1$, $q=2\pi$ 。
所以国际符号是 1 , 能夫利斯符号是 E 。合在一起记作 $1(E)$ 。它的
操作矩阵

②二次

$n=2$,

$2(C_2)$ 。

$2(C_2)$

一起记作

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

连续进行两次二次旋转轴操作，即 $2 \times 2 = 2^2$ 或 $C_2 \times C_2 = C_2^2$ ，所得结果是恒等操作：

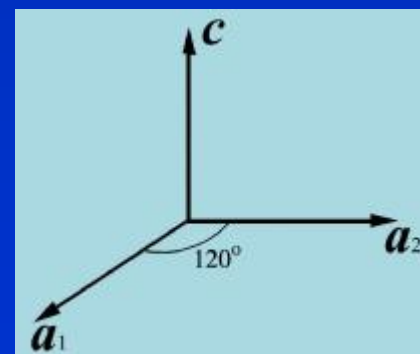
$$\{2_{[001]}^2\} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \{1(E)\}$$

③ 三次轴 (Three-fold Axes, Triad)

$n=3$, $q=2\pi/3$, 国际符号是 3 , 熊夫利斯符号是 C_3 , 合在一起记作 $3(C_3)$ 。

$$\{3_{[001]}\} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \{3_{[001]}^2\} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \{3^3\} = 1(E)$$

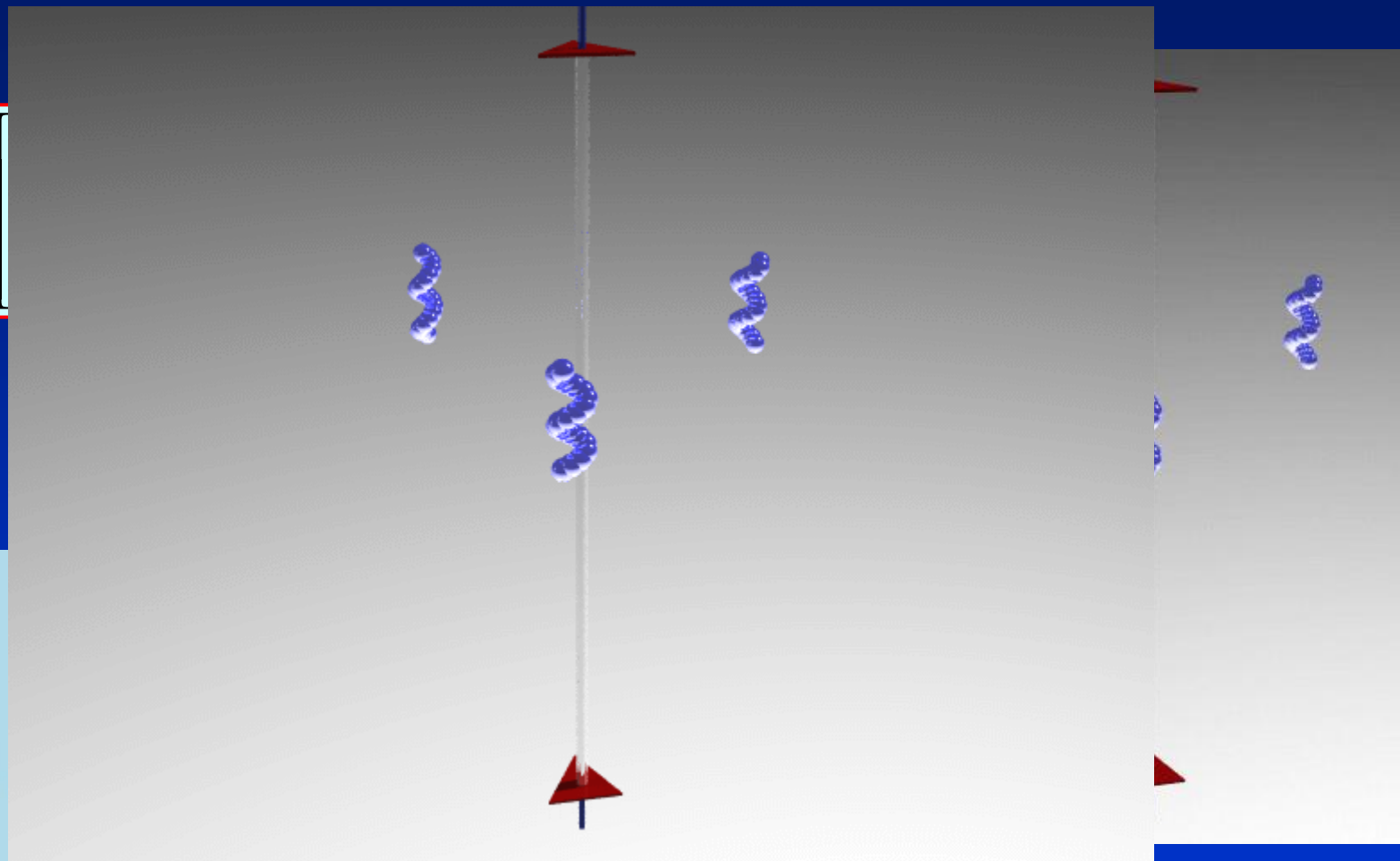
因为三次旋转轴也常选用仿射坐标系：
 a_1 、 a_2 轴的单位矢量长度相同夹角为 120° ，
 a_1 、 a_2 轴都垂直于 c 轴。



在这种坐标下以 c 轴作三次旋转轴的变换矩阵为

$$\{3(C_3)\} =$$

$$3(C_3)$$



④ 四次轴 (Four-fold Axes, Tetrad)

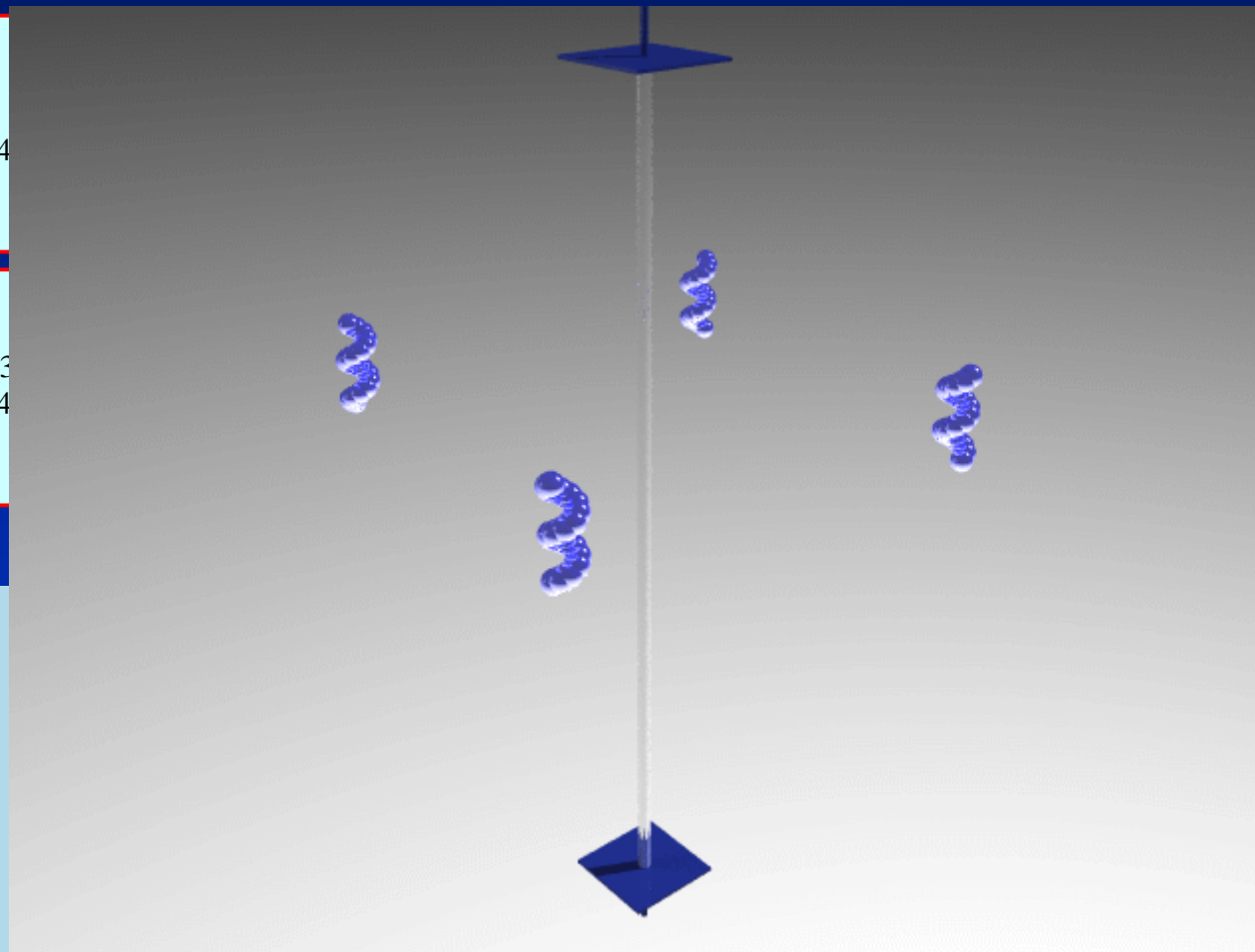
$n=4$, $q=\pi/2$, 国际符号是 4 , 熊夫利斯符号是 C_4 , 合在一起记作 $4(C_4)$ 。

$$\{4_{[001]}(C_4$$

$$\{001]\}$$

$$\{4_{[001]}^3(C_4^3$$

$4(C_4)$



⑤ 六次轴 (Six-fold Axes, Hexad)

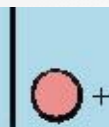
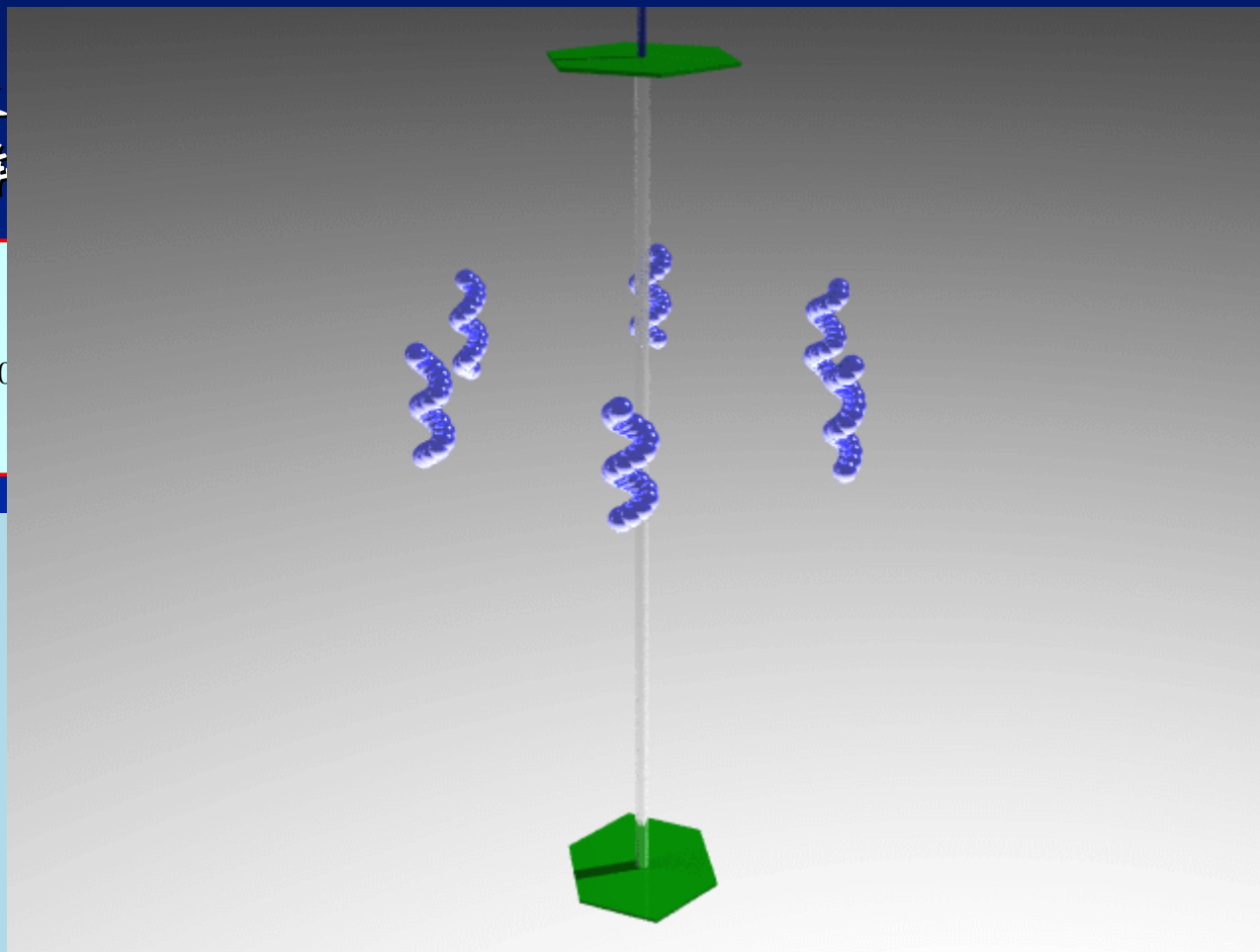
$n=6$, $q=\pi/3$, 国际符号是 **6**, 熊夫利斯符号是 **C_6** , 合在一起记作 **$6(C_6)$** 。

由于六次
这时以 c 轴

坐标系,

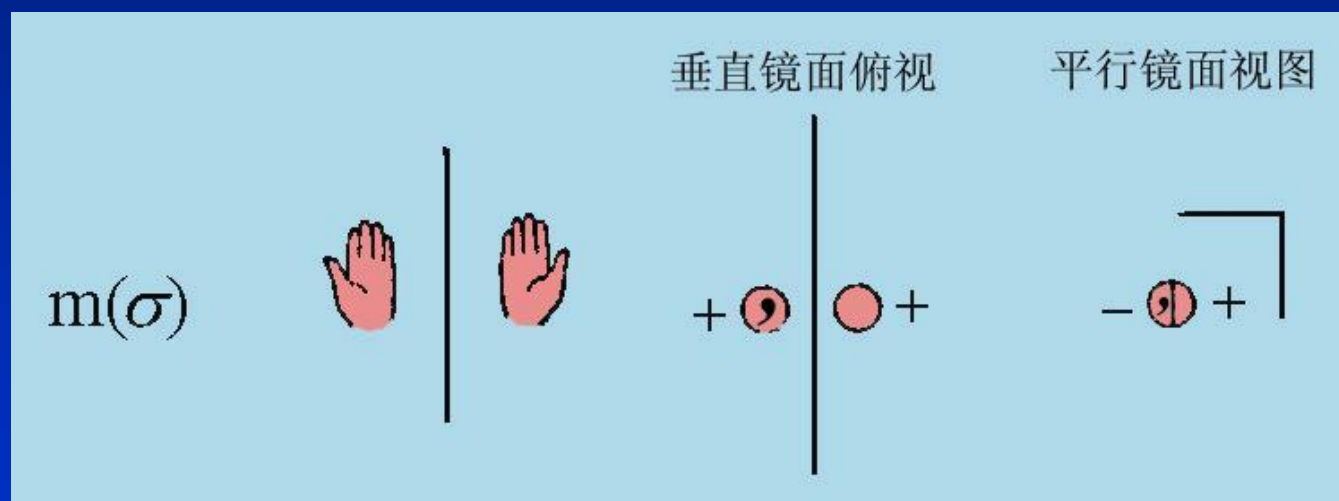
$\{6_C\}$

$6(C_6)$



平面反映 (Reflection Across a Plane, 又称镜象反映)

操作过程中, 在**镜面** (Mirror Plane) 上所有点都不动, 所以镜面就是对称元素。平面反映操作的国际符号是 **m** , 熊夫利斯符号是 **S** , 合在一起记作 **$m(S)$** 。镜面的熊夫利斯符号 **S** 通常还带有下标。垂直于这个主轴的镜面记为 **S_h** , 包含主轴并包含另一轴的镜面记为 **S_v** ; 包含主轴并包含其它两个轴的对角线的镜面记为 **S_d** 。



镜面操作结果使手性相反。右手与左手的这一关系称为对形关系 (Enantiomorphic Relation)。旋转操作永远不能使右手系和左手系相互交换而彼此等价。如果两个物体具有相同的手性, 称它们彼此同宇 (Congruent), 否则是非同宇的。

$$n^2\} \equiv \{1(E)\}$$

反演

某一
点距离相
对称关系

metry)

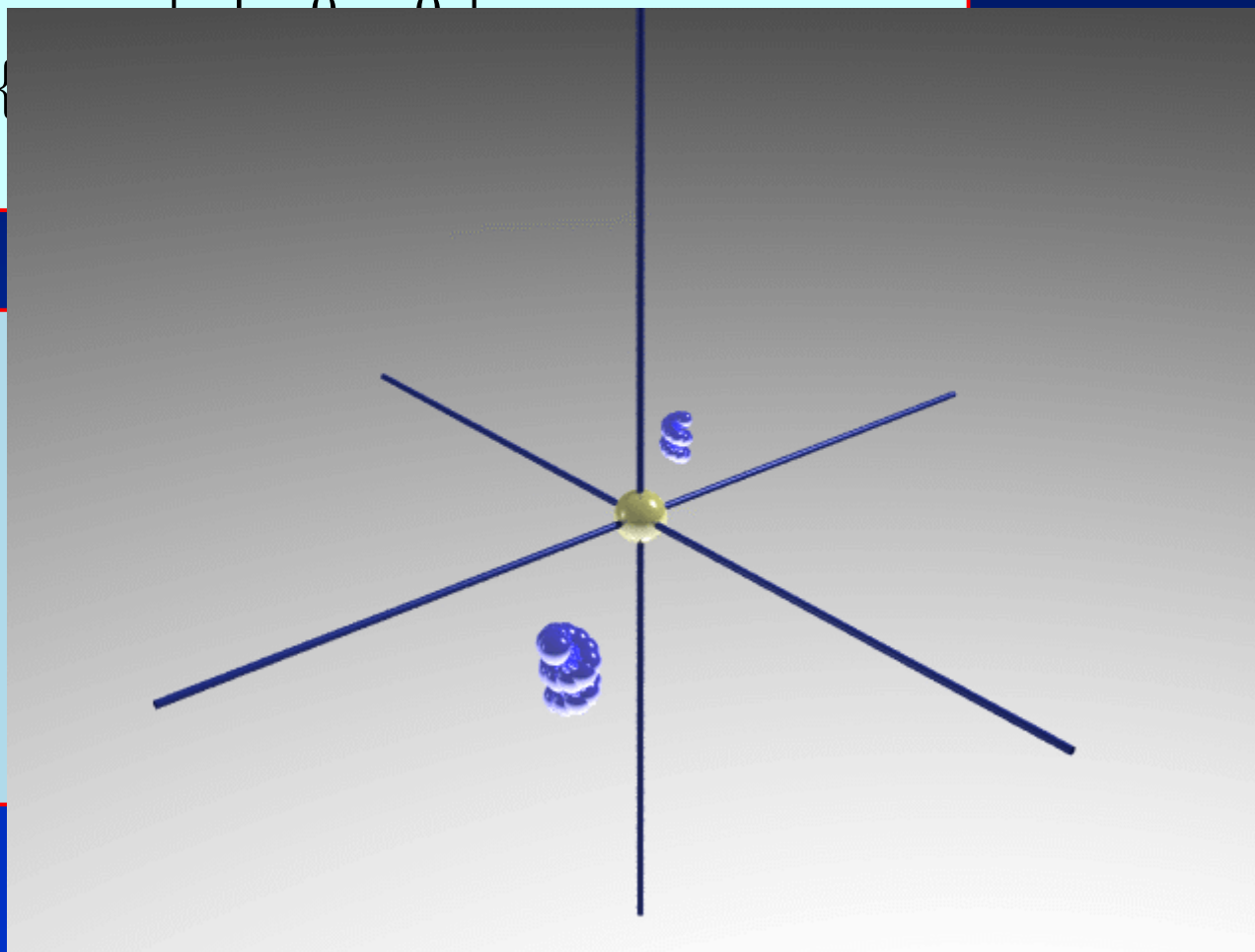
点到中心
具有反演

反演操作的国际符号是 \bar{i} ，熊夫利斯符号是 i ，合在一起记作 $\bar{i}(i)$ 。

如果坐标原点放在对称中心点，则反演的变换矩阵是：

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\bar{1}(i) \bullet$$



注意，这种操作结果是非同字的。

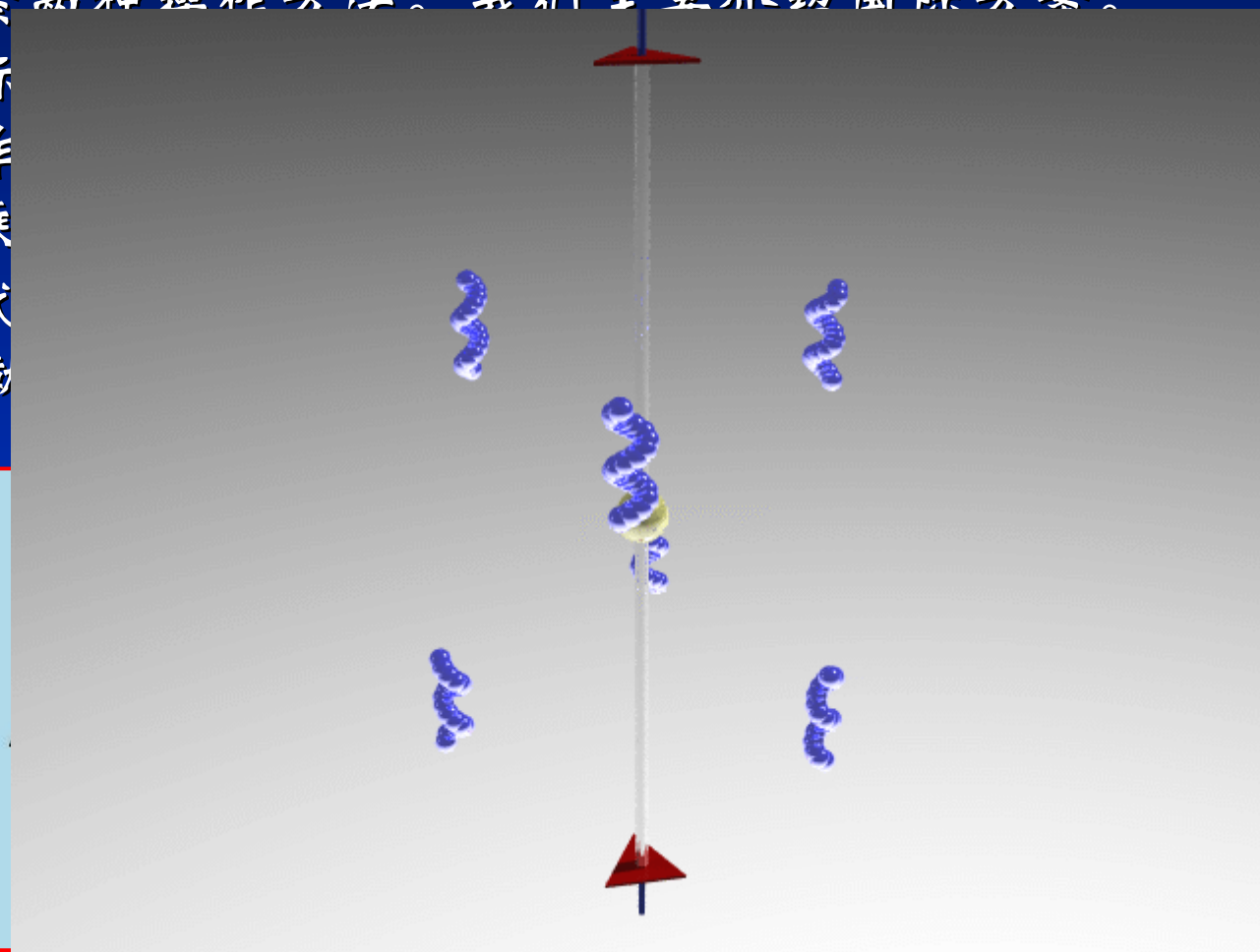
旋转反演 (Rotation-Inversion, 非真旋转 Improper Rotation)

这种操作由两种不同的操作复合而成的，有国际方案和熊夫利斯方案两种操作方法。我们主要介绍国际方案。

国际
反演操作
操作的乘
际符号代
 $\bar{1}(i)$ 就

着再进行
写成两个
简略的国
 $\bar{2} = m(S)$ 。

$\bar{3}$



特别注到，要连续经过六次（而不是三次）这样的操作才能回到原位。以 c 作为旋转轴的操作的变换矩阵为：

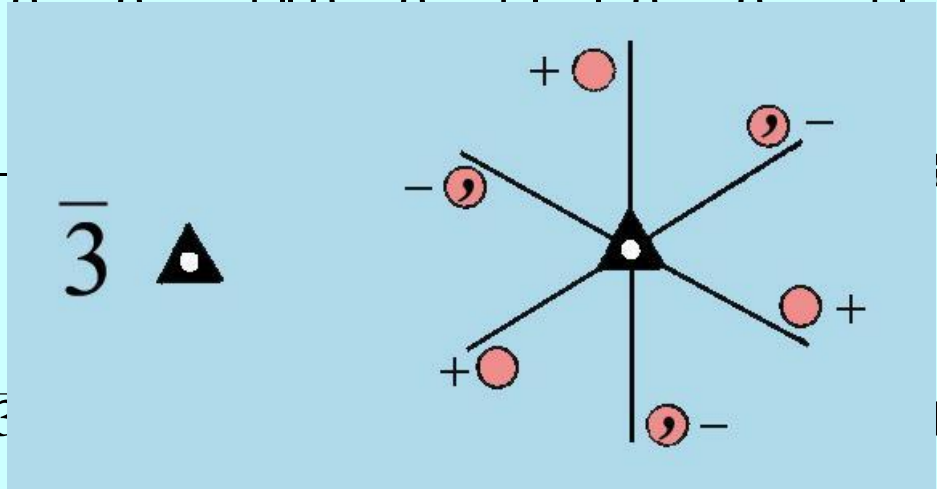
$$\{\bar{3}_{[001]}\} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

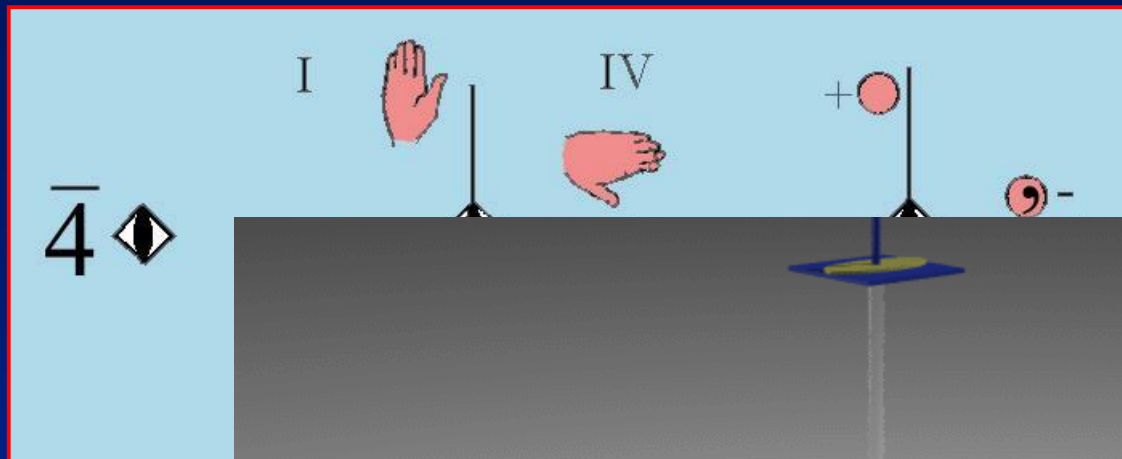
$$\{\bar{3}_{[001]}^2\} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\{\bar{3}_{[001]}^3\} = \{\bar{3} \cdot \bar{3}^2\} = \{\bar{3} \cdot \bar{1}\} = \{\bar{1}\}$$

$$\{\bar{3}_{[001]}^4\} = \{\bar{3} \cdot \bar{3}^3\} = \{\bar{3} \cdot \bar{1}\} = \{\bar{3}\}$$

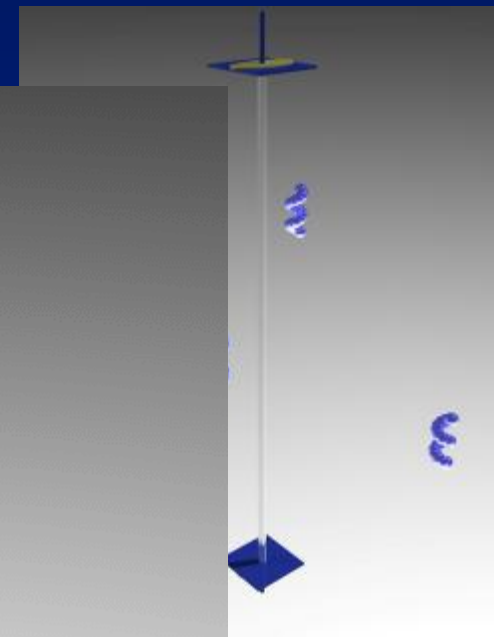
$$\{\bar{3}_{[001]}^5\} = \{\bar{3} \cdot \bar{3}^4\} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\{\bar{3}_{[001]}^6\} = \{1(E)\}$$




$$\begin{aligned} \{\bar{4}_{[001]}\} &= \left[\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\ \{\bar{4}_{[001]}^2\} &= \left[\begin{array}{c} -1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\ \{\bar{4}_{[001]}^3\} &= \left[\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\ \{\bar{4}_{[001]}^4\} &= \{1(\mathbf{E})\} \end{aligned}$$

$$\left[\begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \end{array} \right] \left[\begin{array}{ccc} 0 & 0 & -1 \end{array} \right]$$

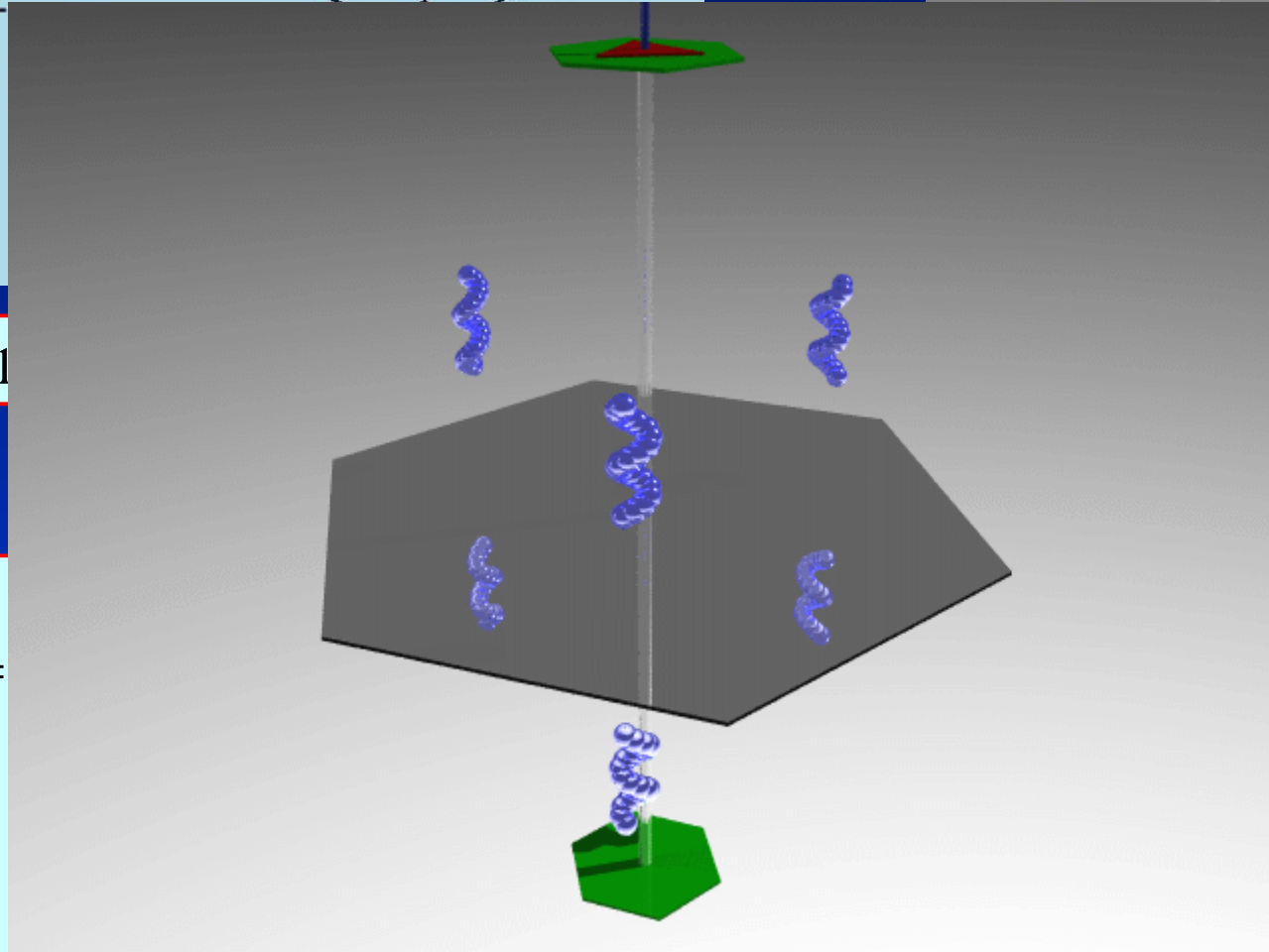


6

$$\bar{6}^6 = 1$$

$$\{\bar{6}_{[001]}\} =$$

$$\{\bar{6}_{[001]}^5\} = \{\bar{6} \cdot \bar{6}^4\} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$



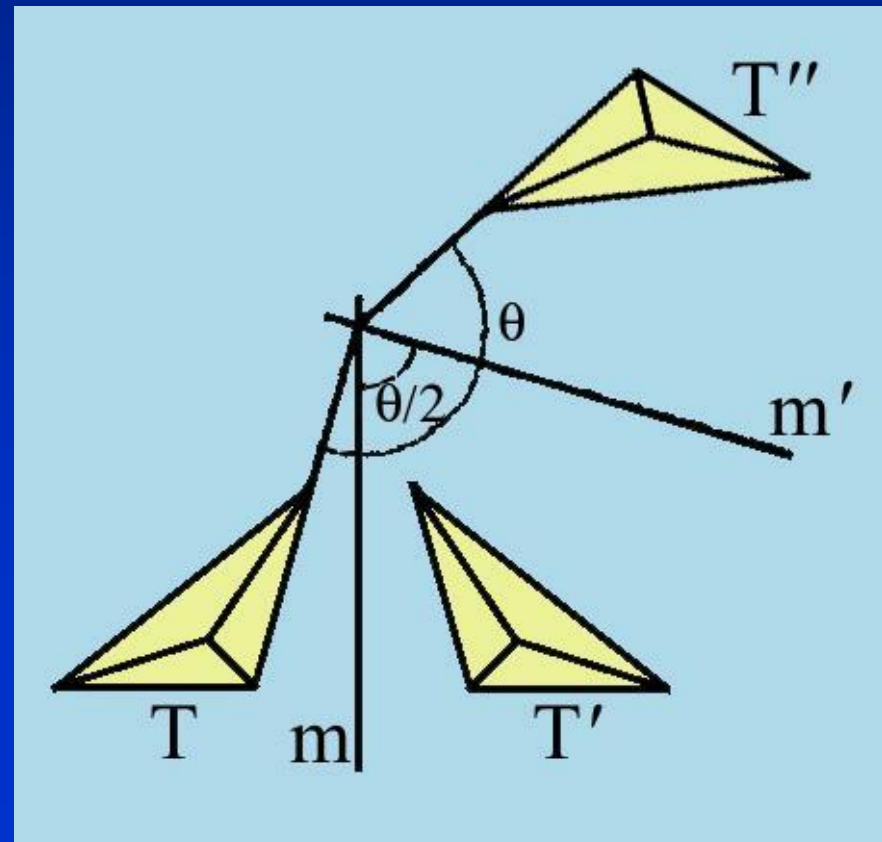
第一类操作和第二类操作的联系和区别

任意多个第一类操作的乘积仍是第一类操作。也就是说转动的乘积最终还是转动，不可能由第一类操作组合得到第二类操作。偶数次第二类操作的乘积是第一类操作，而奇数次第二类操作的乘积仍是第二类操作。

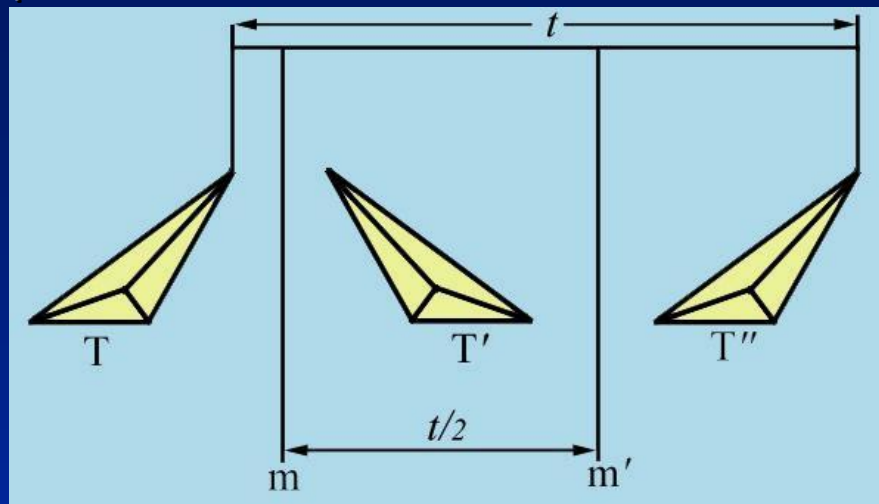
定理1 夹角为 $q/2$ 的两个镜面 m 和 m' ，它们的交线一定是以 q 为旋转角的对称旋转轴。即

$$(m \cdot m)(\angle \theta/2) = n \quad n = \frac{2\pi}{\theta}$$

T 和 T'' 的手性是相同的。
由这一定理可知，若有一个镜面 m 通过 n 旋转轴，则必有 n 个镜面同时通过此旋转轴。

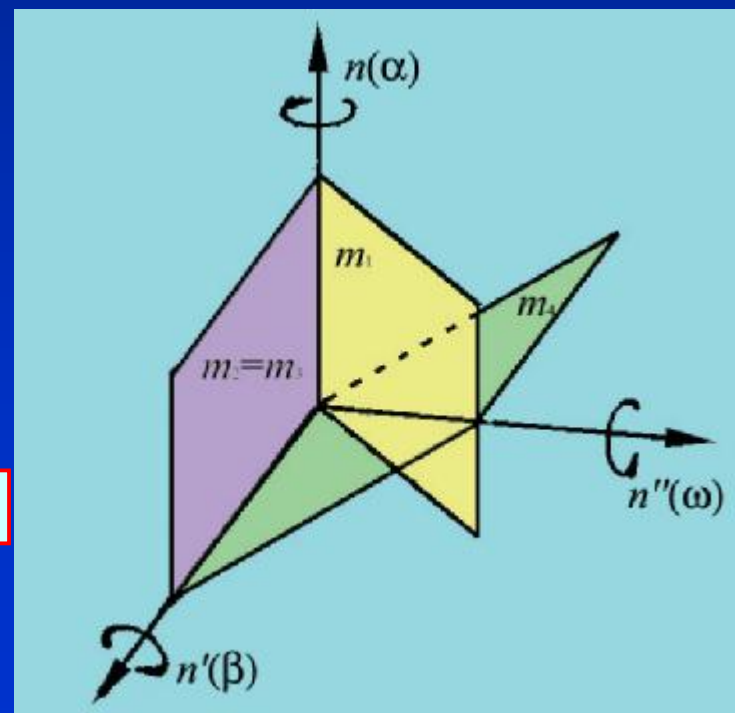


定理II 通过两个平行的相距为 $t/2$ 的镜面 m 和 m' 相继反映，等于一次平移为 t 的操作。



定理III 通过两个旋转轴 $n(a)$ 和 $n'(b)$ 的交点必然能找到第三个对称轴 $n''(w)$ ，后者的操作等于前二者之组合： $n(a) \cdot n'(b) = n''(w)$ 。

$$n(\alpha) \cdot n(\beta) = (m_1 \cdot m_2) \cdot (m_3 \cdot m_4) = m_1 \cdot E \cdot m_4 = n''(\varpi)$$



1.4 晶系及布喇菲点阵

晶体点阵的初基单胞周期平移必须填满整个空间。为此，旋转轴次(非真旋转轴次)只能是1、2、3、4和6五种。下面证明这一点。

$$t' = -2t \cos q + t = mt$$

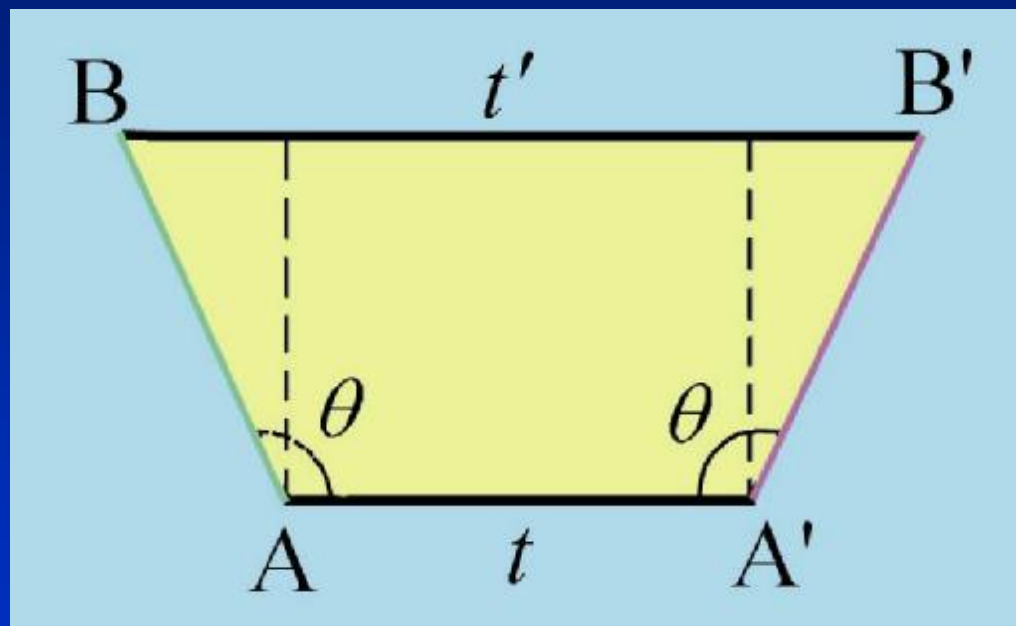
这样就获得

$$\cos q = \frac{(1-m)}{2}$$

m 是整数, $(1-m)=M$ 也是整数。在给定的 G 变换作用下, 为了使结果具有封闭性, q 角必在 $0^\circ \sim 180^\circ$ 之间, 即 $\cos q$ 在-1和+1之间, 而 $|\cos q| \leq 1$ 。则

$$|M| \leq 2$$

于是 M 可以是-2、-1、0、1、+2几种值。把这几个值代回上式, q 值分别对应为 π 、 $2\pi/3$ 、 $\pi/2$ 、 $\pi/3$ 、0。所以, 旋转轴次 $n=2\pi/q$ 只能是2、3、4、6、1等几种。



确定空间点阵类型，首先是在空间点阵中如何选取单胞。同一种空间点阵，可以有无限多种划分单胞的方式。

以前已经讨论过选取初基单胞的原则。在这里突出强调的是，最重要和最首要的原则是这个单胞必须能充分地反映出空间点阵的对称性。在满足这个条件的前提下，再使单胞的棱和棱之间的角度尽可能为直角，最后考虑选取单胞的体积最小。这些原则是法国晶体学家布喇菲（A.Bravais）提出来的。

根据布喇菲的这些原则，首先把旋转对称应用到点阵上，讨论它对单胞点阵常数的限制，从而得到七种晶系（Crystal Systems），但是，这七种晶系只是对晶体作的最粗略的分类。同一晶系的晶体，不管其微观对称性的高低，它们相应的点阵的对称性是一样的。

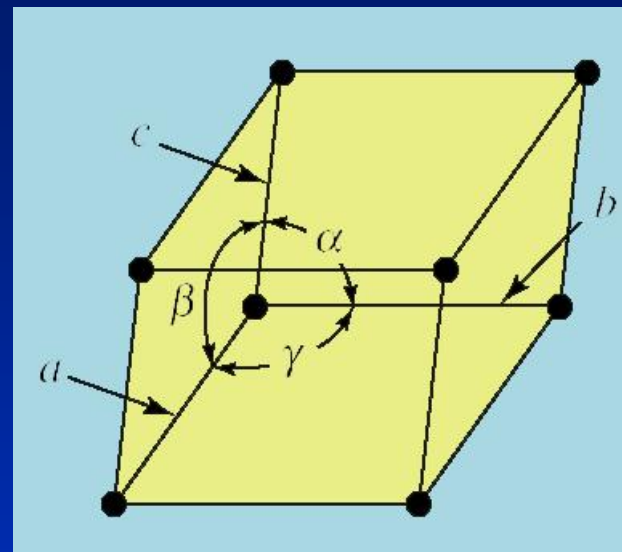
下面按对称操作导出七种晶系。

1.4.1 空间点阵类型 (晶系)

① 三斜晶系 (Triclinic System)

除了1(E)或 $\bar{1}$ 之外单胞再没有其它的旋转对称性, 在这种情况下, 单胞各个轴都不具有对称性, 轴之间也无任何固定关系, 所以单胞的几何形状没有特别的限制, 点阵常数间的关系为

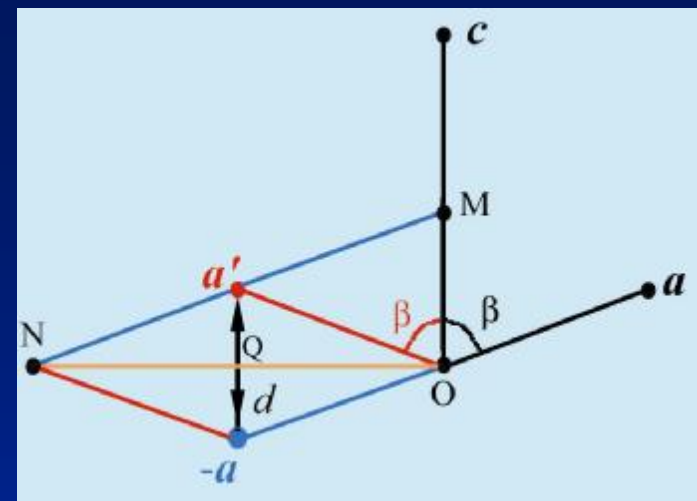
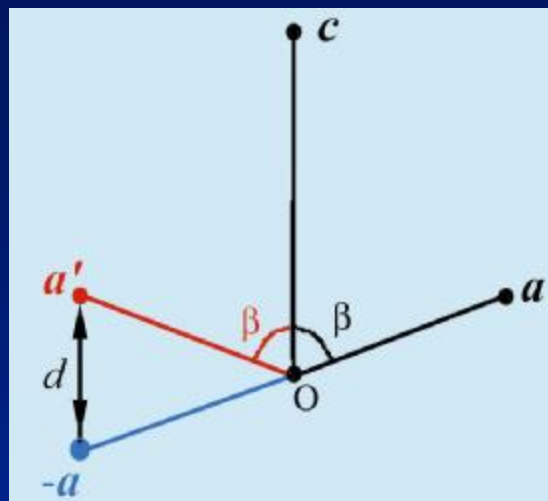
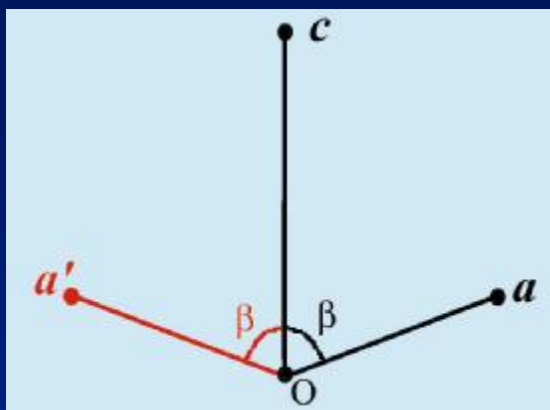
$$a \neq b \neq c \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma$$



② 单斜晶系 (Monoclinic System)

这种晶系的对称元素是二次旋转轴 $2(C_2)$ 或镜面 $m(S)$ 。若把对称轴放在单胞的 c 方向, 称**第一种定向**; 若把对称轴放在单胞的 b 方向, 称**第二种定向**。

现按第一种定向来看二次旋转轴加到单胞上所带来的限制。



$$d = 2a \cos b = nc \quad \text{式中 } n \text{ 为整数}$$

如果 $n=0$, b 就等于 $\pi/2$, 按单胞选轴的原则, 所选的轴就是真实晶系的 a 轴。

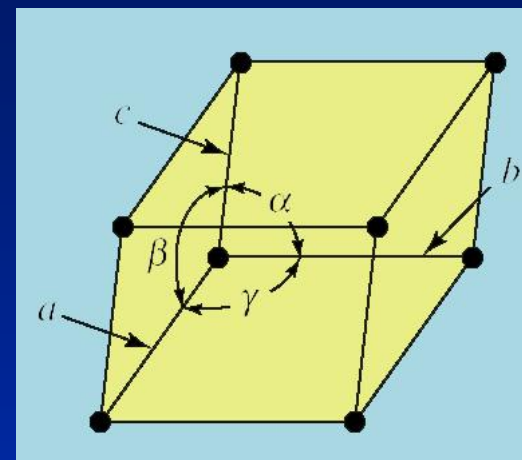
若 $n=1$, 则 $d=c$ 。从原点 O 沿 c 轴引 d 长度到 M 点, M 点应是阵点。由 M 向 a' 端点引线并延伸相同距离到 N 点, N 点也应是阵点。很容易看出 ON 和 c 垂直。按单胞选轴原则, 应选 ON 作真实晶系的 a 而不是开始选的那个“ a ”轴, 因而 a 和 c 垂直。

若 $n=2$, 则 $d=2c$, 显然在 d 的中点 Q 应是一个阵点。因 OQ 和 c 轴垂直, 根据选择单胞的原则, 也应选 OQ 作真实的 a 。

当 n 为其它整数时，也可按类似方法同样证明 a 轴一定和 c 轴垂直。同理也可证明 b 轴和 c 轴垂直。除此以外，单胞参数不受其它限制。点阵常数间的关系关系为：

第一定向 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ \neq 90^\circ$

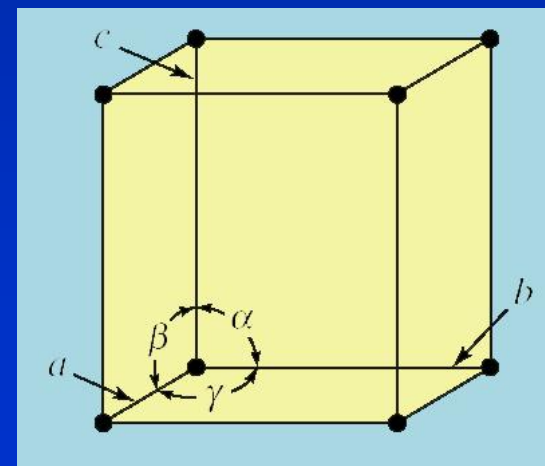
第二定向 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ \neq 90^\circ$



③正交晶系（斜方晶系，Orthogonal System）

在这种晶系中的对称元素有两个或两个以上的 $2(C_2)$ 或 $\bar{2}$ 轴（即镜面）。前已说明，若晶胞的一个棱是二次轴，则它一定和晶胞的另外两个轴垂直，现在有两个放在单胞两个轴上的二次轴，很显然，要求三个轴互相垂直。点阵常数间的关系为：

$$a \neq b \neq c; \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



④四方晶系（正方晶系，Tetragonal System）

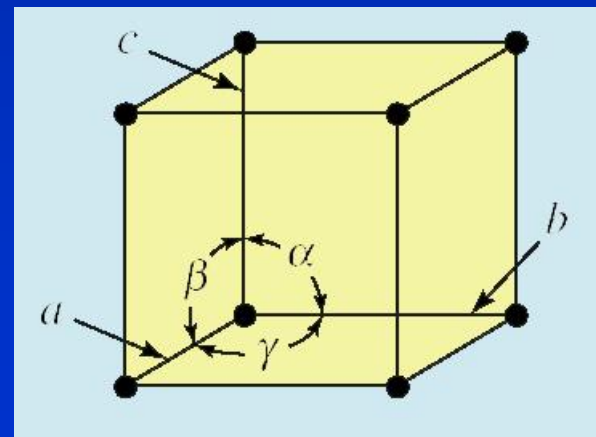
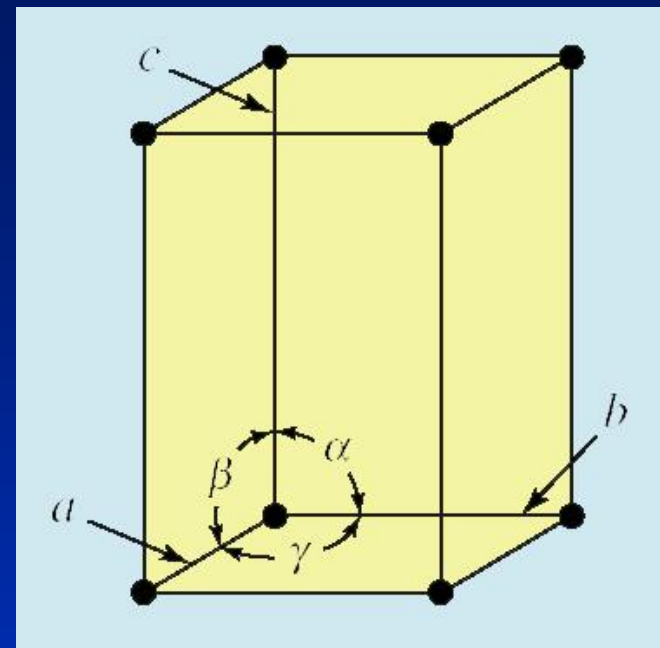
考察一个 $4(C_4)$ 或一个 $\bar{4}$ 操作对单胞的限制。把 $4(C_4)$ 轴放在单胞的 c 轴上，因为 $4(C_4)$ 隐含 $2(C_2)$ ，从讨论单斜晶系知道，这时的 a 和 b 轴一定垂直于 c 轴。为了不产生多余的单胞轴，四次操作一定依次使 a 转动到 b ， b 转动到 $-a$ ，而 $-a$ 运动到 b ，这就要求 a 和 b 轴垂直，并且这两个轴单位矢量的长度应相等。

$$a = b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

⑤立方晶系（Cubic System）

从直观看，一个立方系的单胞就是一个立方体。点阵常数间的关系为：

$$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



本质上，决定立方系的主要对称元素是四个在体对角线方向的三次轴 $3(C_3)$ 。立方系晶体中可以没有四次旋转对称，但一定不能有对角线的四个三次旋转对称。

这是一个属于立方系只有三次轴而没有四次轴的形的例子。

下面给出证明：

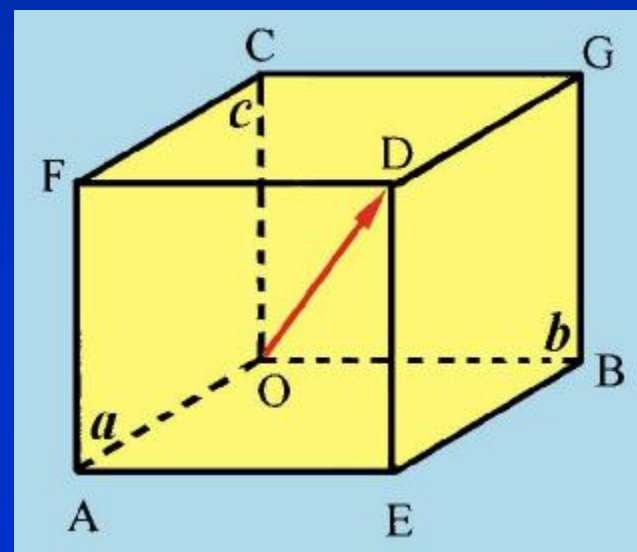
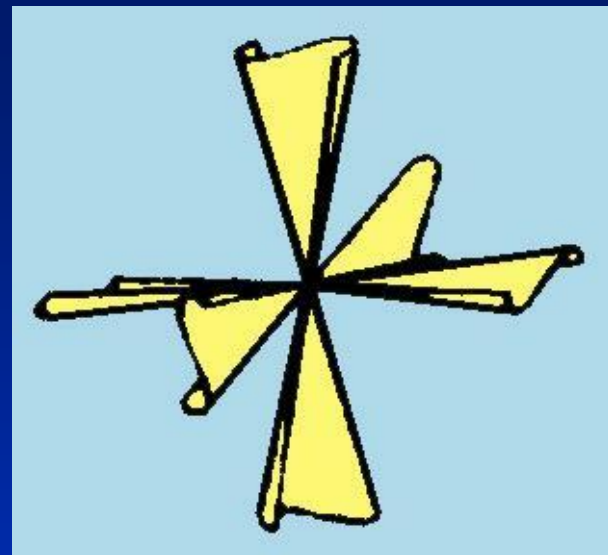
一个三次轴 OD 和矢量 a 相交于 O 点。因为 OD 为三次轴，所以必会导出另外两个矢量 b 和 c 。这三个矢量 a 、 b 、 c 的长度相等： $a=b=c$ ；它们与 OD 间的夹角相等：

$$\angle AOD = \angle BOD = \angle COD$$

它们间两两的夹角也相等

$$\angle AOC = \angle COB = \angle BOA$$

用 a 、 b 、 c 构成一平行六面体，即可以构成一个单胞。



若单胞的另一体对角线 CE 也是一个三次轴，则 CF 、 CO 和 CG 的长度应相等，它们和三次轴 CE 间的夹角也应该相等，很易知道：

$$\angle FCO = \angle COA = 90^\circ$$

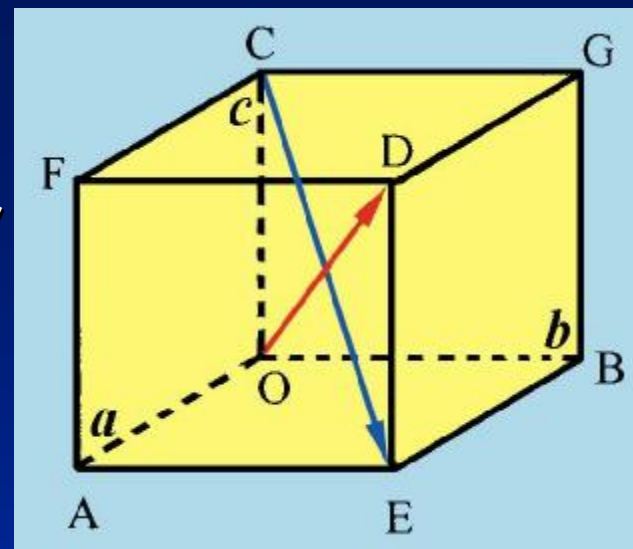
即 这是一个立方体。

若把坐标系三个轴放在 a 、 b 、 c 上，体对角线 OD 的矢量 $d = a + b + c$ 。以 OD 为旋转轴， $q = 2\pi/3$ ，导出变换矩阵：

$$\{3_{[111]}\} = \begin{pmatrix} \hat{e}_0 & 0 & 1 \\ \hat{e}_1 & 0 & 0 \\ \hat{e} & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{u} \\ \hat{u} \\ \hat{u} \end{pmatrix}$$

体对角线 CE 方向的矢量 $d = a + b - c$ ，以 $[11\bar{1}]$ 表示这个矢量。以它为三次轴操作一次， a 到 $-c$ 位置， b 到 a 位置 $-c$ 到 b 位置。所以，其变换矩阵是

$$\{3_{[11\bar{1}]}\} = \begin{pmatrix} \hat{e} & 0 & 1 \\ \hat{e} & 0 & 0 \\ \hat{e} & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{u} \\ \hat{u} \\ \hat{u} \end{pmatrix}$$

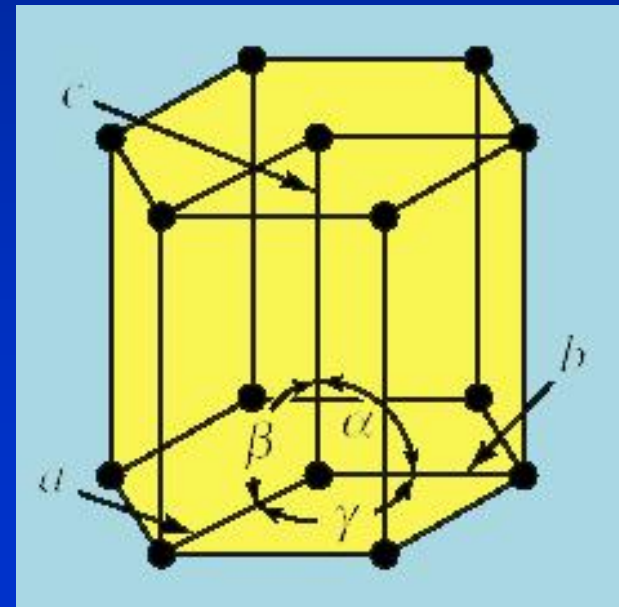


由这两个三次轴，必然导出另外两个体对角线亦为三次轴。三次轴的组合，可以得到三个二次轴。但是，无论三次轴如何组合，也得不到四次轴。所以，立方系晶体不一定有四次轴。相反，如果有三个互相垂直的四次轴，它们一定能组合出三次轴。

⑥六方晶系 (Hexagonal System)

这种晶系具有单一的 $6(C_6)$ ，一般六次轴放在 c 轴上。可以证明，六方系的单胞的点阵常数遵循如下关系

$$a=b \neq c \quad \alpha=\beta=\gamma=120^\circ$$

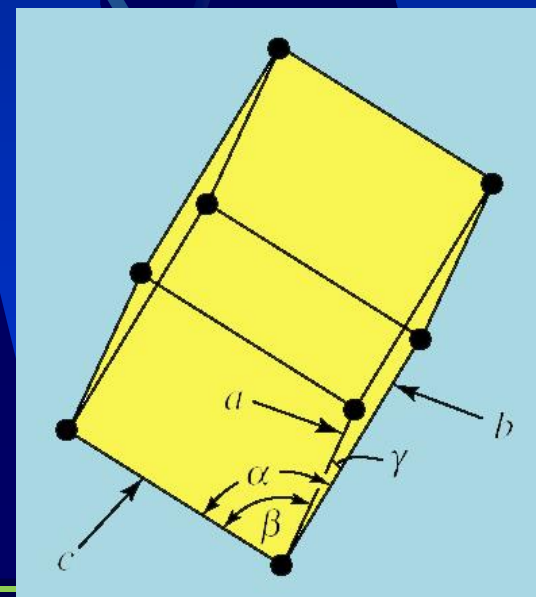


⑦菱形晶系 (Rhombohedral System)

当具有单一的 $3(C_3)$ 轴时，对称轴和单胞的一个轴（设 a 轴）夹角为某一角度 α ，经 $3(C_3)$ 操作后产生另外两个轴，它们和轴夹角亦为 α 并且长度相等。这三个轴构成的六面体就是一个菱形单胞。

菱形晶系点阵常数间的关系为

$$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma$$



七种晶系的对称性及点阵常数间的关系

晶系	对称性	轴长关系	轴夹角关系
三斜	1 (E)	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq g$
单斜	2 (C_2)	$a \neq b \neq c$	第一定向: $a = b = 90^\circ \neq g$ 第二定向: $a = g = 90^\circ \neq b$
正交	两个2 (C_2)	$a \neq b \neq c$	$a = b = g = 90^\circ$
四方	4 (C_4)	$a = b \neq c$	$a = b = g = 90^\circ$
立方	四个3 (C_3)	$a = b = c$	$a = b = g = 90^\circ$
六方	6 (C_6)	$a = b \neq c$	$a = b = 90^\circ, g = 120^\circ$
菱方	3 (C_3)	$a = b = c$	$a = b = g \neq 90^\circ$

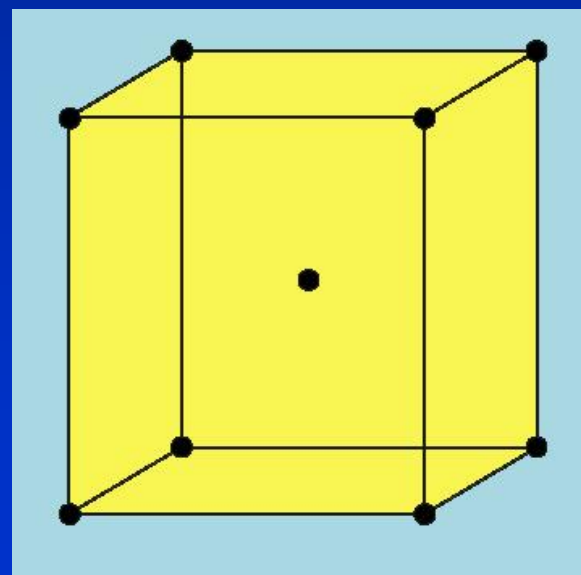
1.4.2 布喇菲点阵 (Bravais lattice)

把平移对称加入，即在这七种单胞中的特殊位置加入阵点，如果加入新的阵点后不破坏原来点阵的对称性，而且又构成新的点阵，这就是一种新的布喇菲点阵。在初基单胞（P单胞）中加入了新的阵点，它就变成了复式初基单胞。

只有在P单胞中的高对称位置上加入新的阵点才有可能不破坏原来点阵的对称性，才有可能构成实际的新布喇菲点阵。构成新布喇菲点阵的过程实际上就是点阵的有心化（Centering of Lattices）过程。

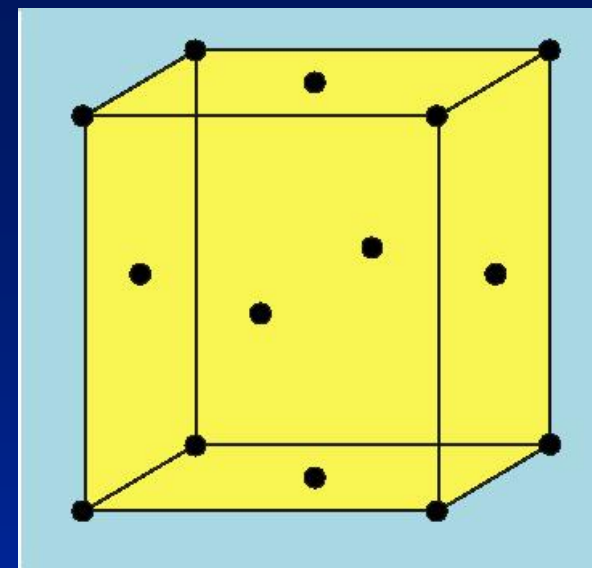
体心化 (Body Centering)

把阵点加到 $(a+b+c)/2$ 矢量端点上。这样的点阵用符号I表示，这种点阵的单胞含有两个阵点，它们的位置分别是 $(0,0,0)$ 及 $(1/2,1/2,1/2)$ 。



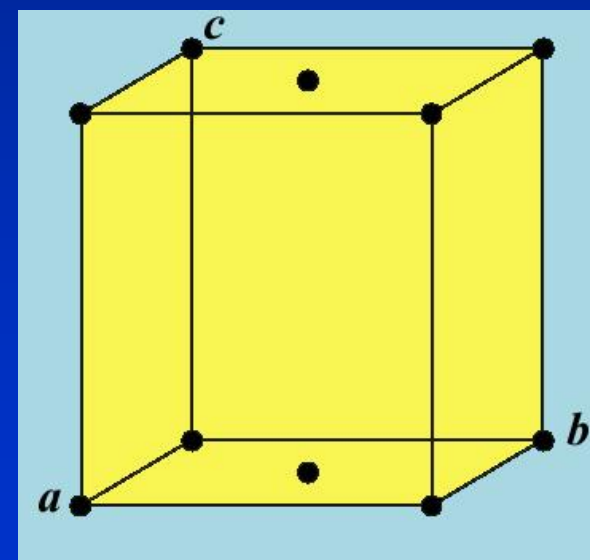
面心化 (Face Centering)

把三个新的阵点加进P单胞每个面的中心,即放在 $(a+b)/2$, $(b+c)/2$ 和 $(c+a)/2$ 矢量的端点上, 这样的点阵用符号F表示。这种点阵的单胞含有四个阵点, 它们的位置分别是 $(0,0,0)$, $(0,1/2,1/2)$, $(1/2,0,1/2)$, $(1/2,1/2,0)$ 。



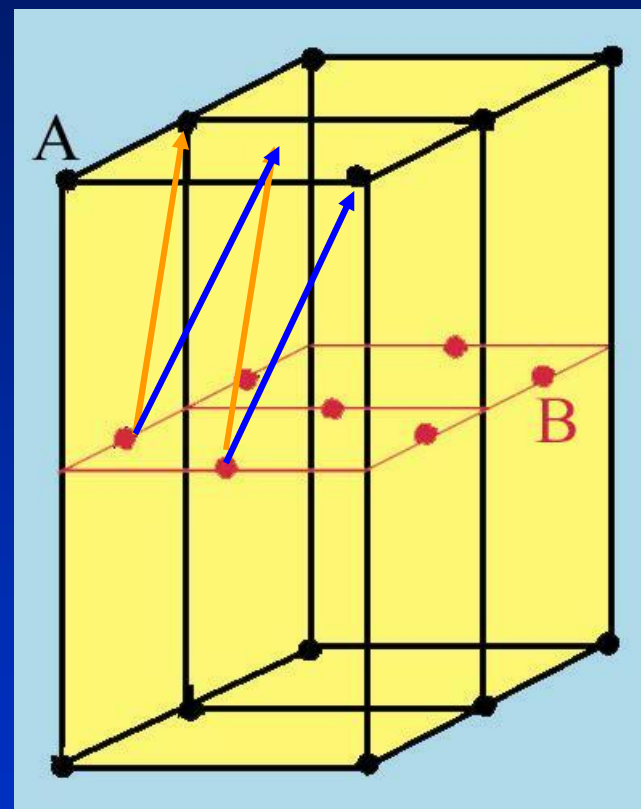
底心化 (单面心化, Base Centering, One-Face Centering)

只在单胞的一对面 (三对面中的一对) 的中心上附加新阵点, 这种点阵的单胞含有两个阵点。加到 ab 面上, 用符号C表示, 加到 bc 面上, 用符号A表示, 加到 ca 面上, 用符号B表示。

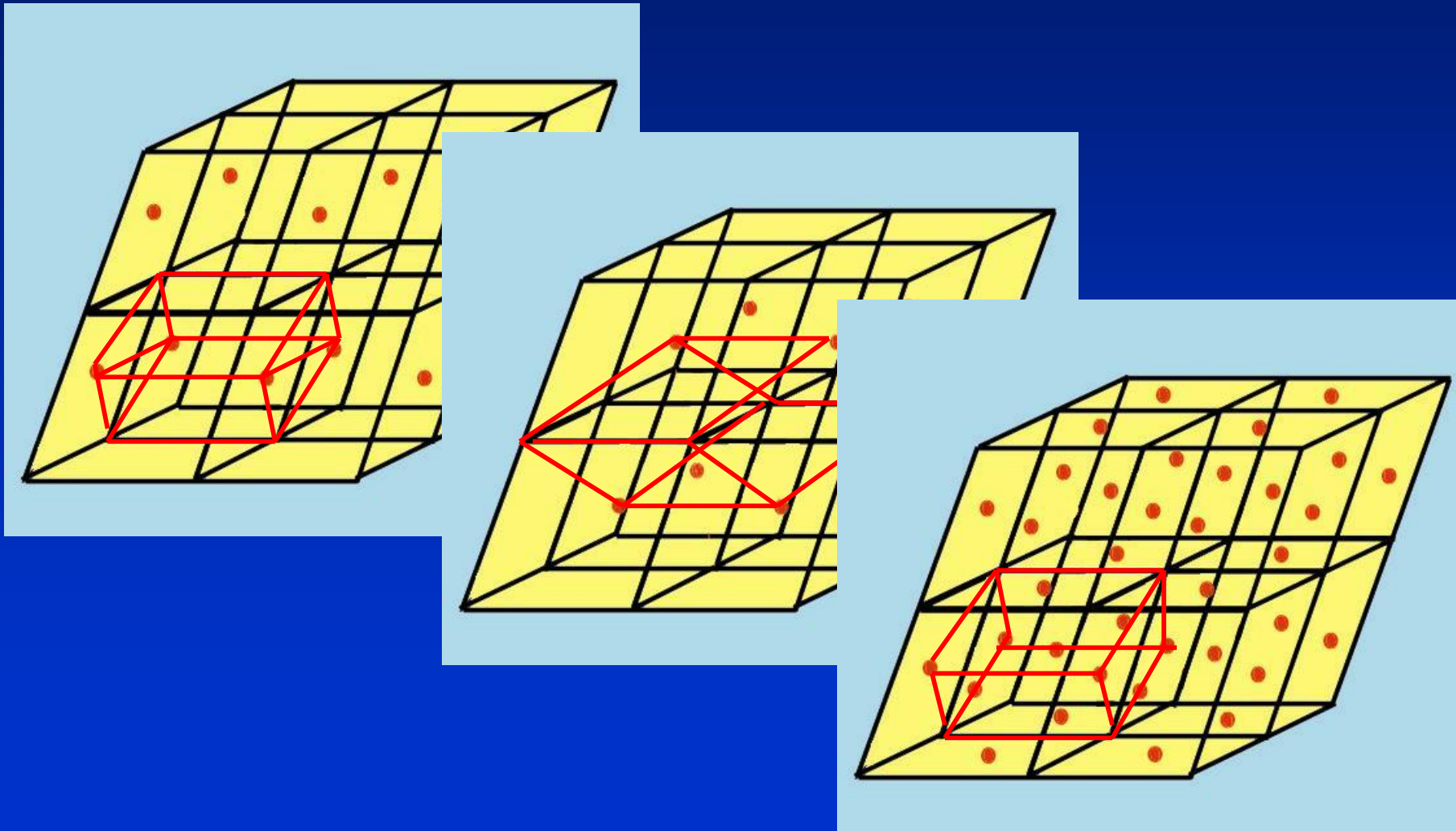


注意：不可能在两个独立面附加阵点而构成点阵，即不会有双面心的点阵。

A和B这两个阵点的几何环境是不同的，它们不符合点阵条件，所以并不可能形成点阵。

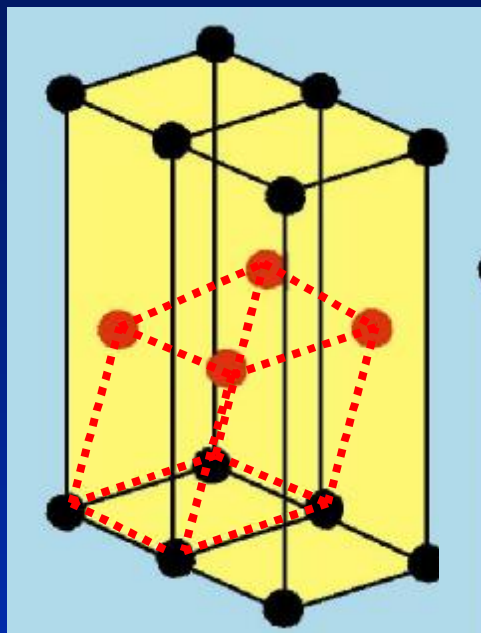


三斜系 这种晶系除了 $1(E)$ 或 $\bar{1}(i)$ 外，无其它点对称性，其单胞的点阵常数无任何限制。任何方式的有心化，最终也只构成三斜系点阵，只不过它的单胞的棱长、棱夹角及单胞体积改变罢了。所以，三斜晶系只有一种布喇菲点阵，P点阵。

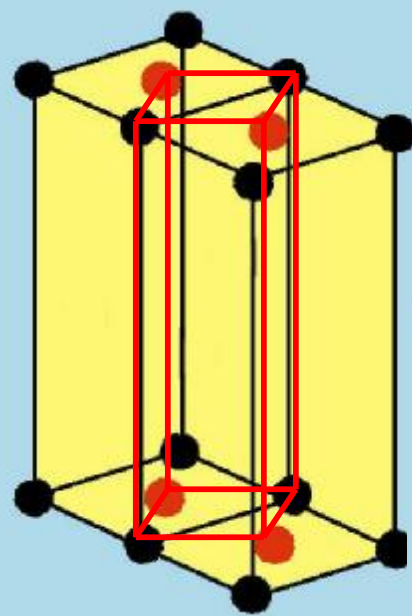


单斜系 采用第一种定向讨论，以 c 轴作为唯一的 $2(C_2)$ 轴。

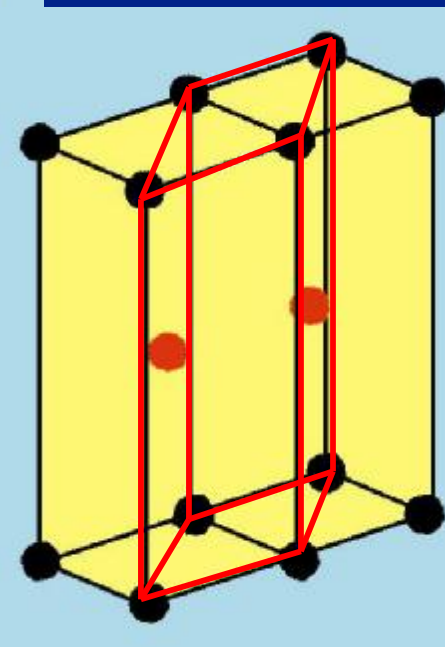
$$a \neq b \neq c \quad a = b = 90^\circ \neq \gamma$$



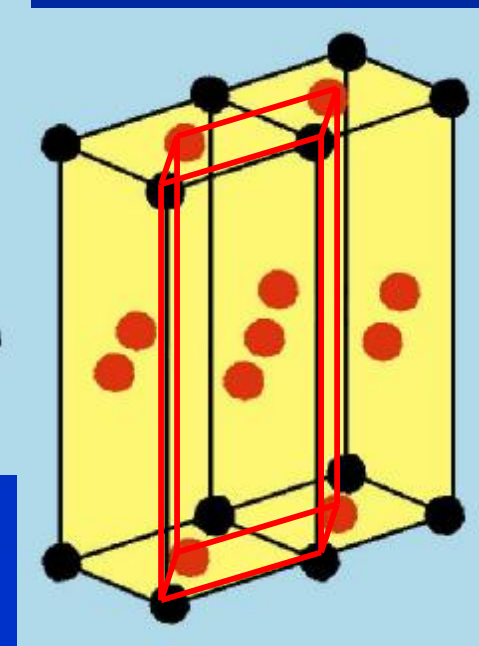
可以是底心单胞



仍然是P单胞



同底心



同底心

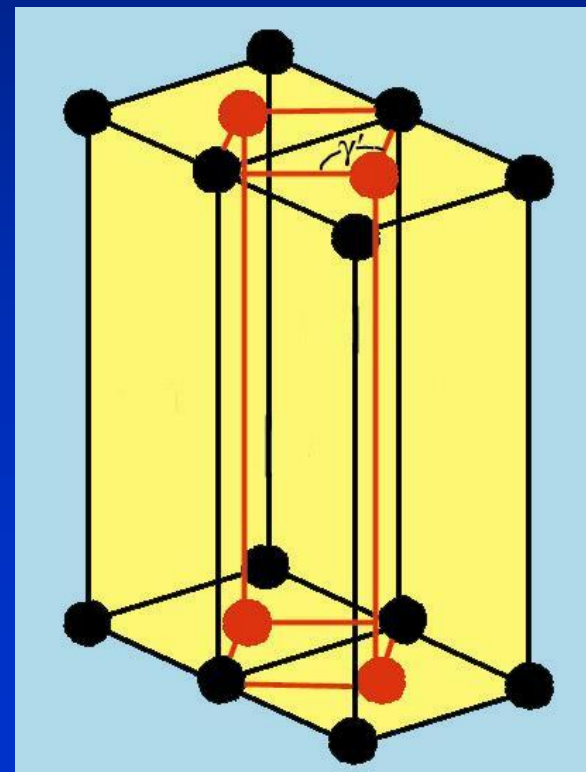
单斜系只有P单胞和不在与单胞棱垂直的面上有心化的底心单胞

正交系 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

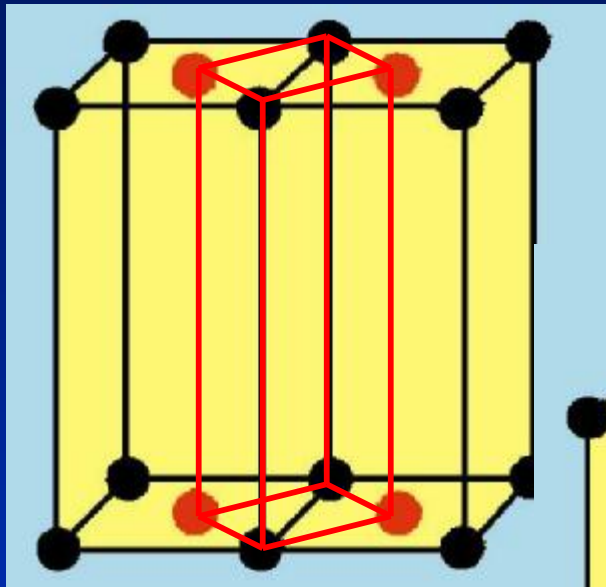
在单斜系中，如果在和单胞棱垂直的面上有心化不可能构成新的点阵，因为它仍然可以简化成P点阵。但是，在正交系，由于有 $a \neq b \neq c$ 的限制，而 γ 并不等于 90° ，故在和单胞棱垂直的面上有心化后不能简化为P点阵，所以在任何面上的有心化都是新的点阵。

根据同样的理由，正交系的体心和面心有心化都不能简化为底心点阵，它们都是新的点阵。

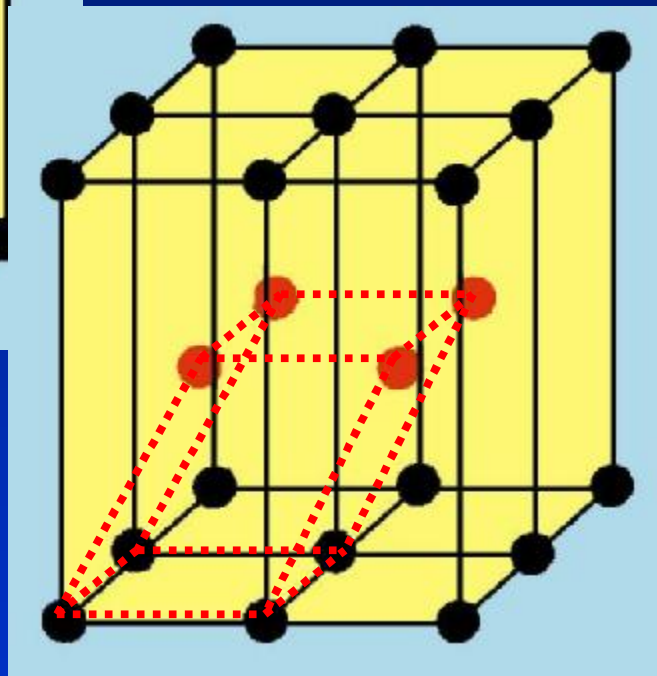
正交系中，除了P单胞外，无论体心有心化和面心有心化都构成新的点阵。



四方系 $a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



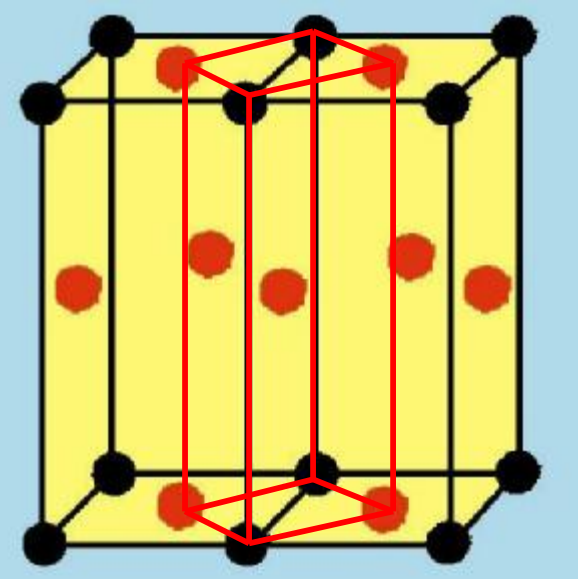
可以简化为更小的
P单胞



如连成一个P单胞则破坏原来的对称性，所以
I单胞是真实的单胞。

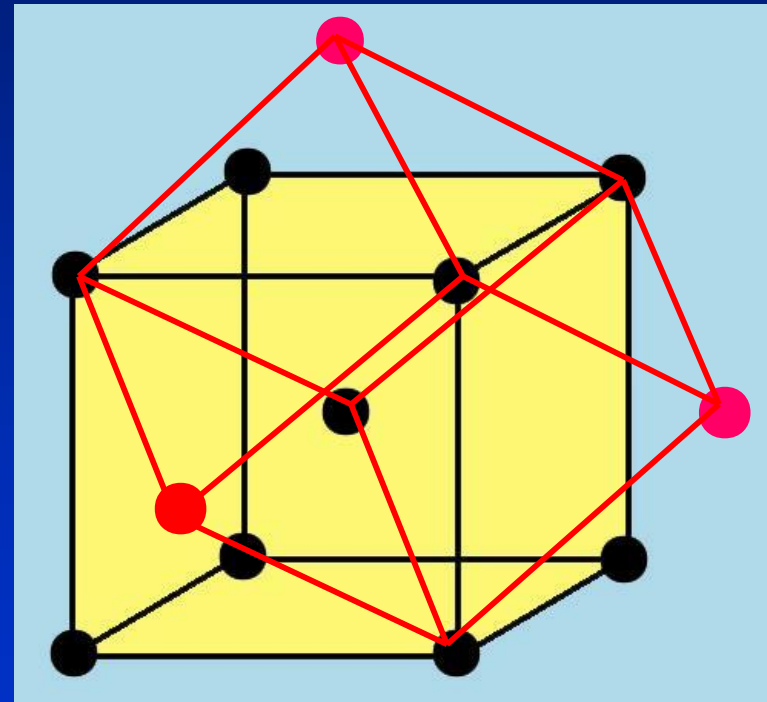
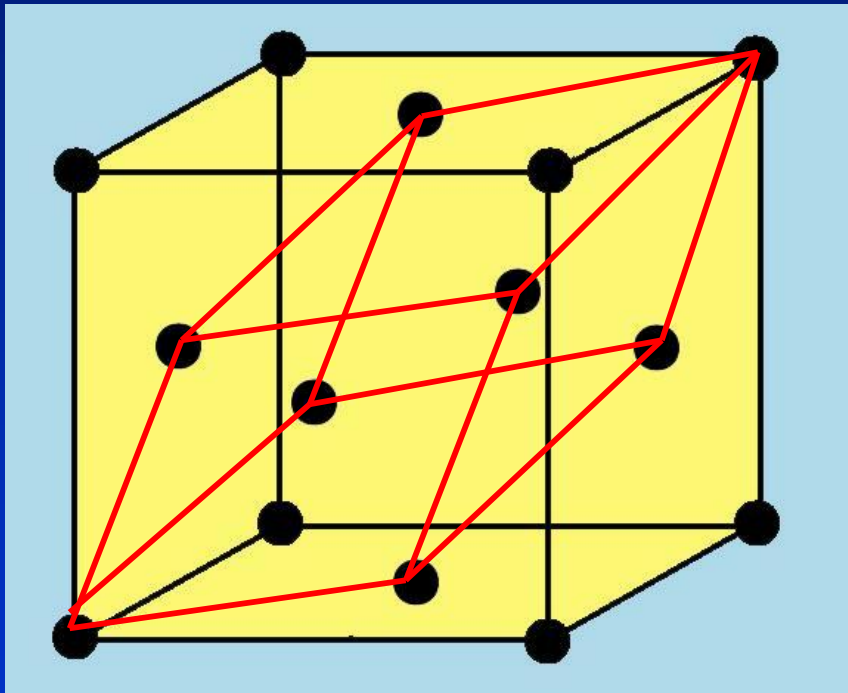
四方系可以有P和I点阵

同体心



立方系 $a=b\neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$

在单胞任何一个面的单面心化都破坏体对角线的三次轴的旋转对称性。所以，立方系不可能有底心点阵。体心化和全面心化并不破坏三次对称性，并且确实是一种新的点阵。

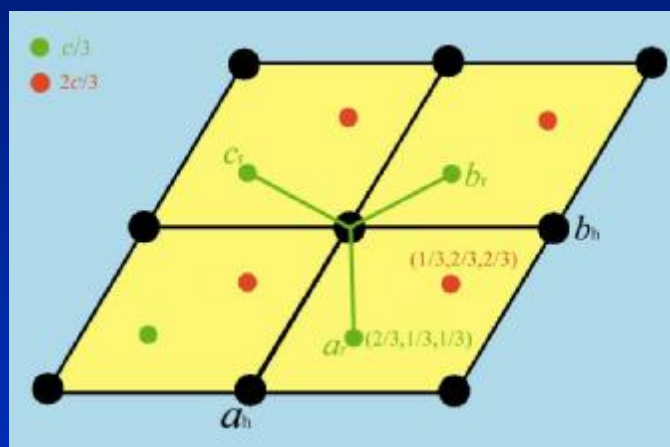


虽然可以取P单胞，但他没有立方系的对称性，故仍取复式单胞作为这些点阵的单胞。

六方系和菱方系

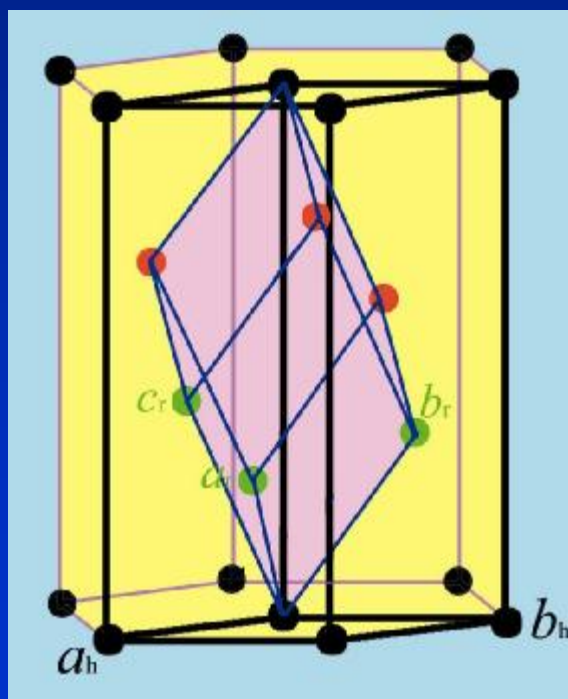
由于这两种晶系联系密切，放在一起讨论。这两种晶系都不可能有任何一种形式的底心、体心和全面心化，因为在这些位置放进阵点都会破坏晶系原有的旋转对称性。

现在讨论它们的特殊有心化问题。

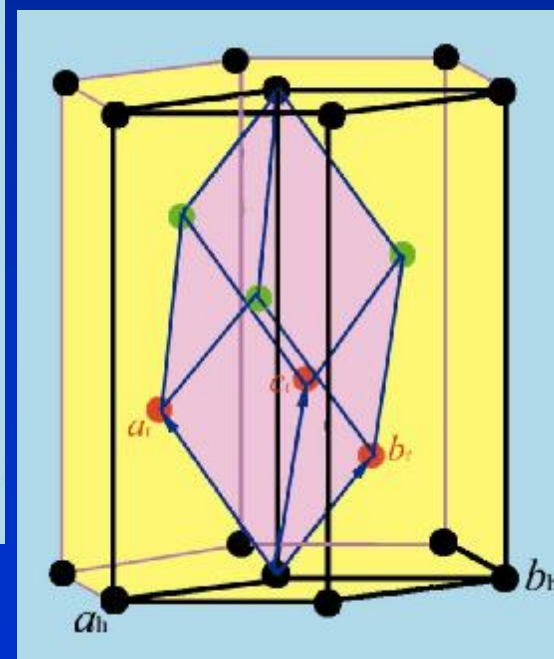


加进阵点后，每一个点都具有相同的环境，因而这仍然是一个点阵，但这时已失去6(C_6)对称性，而仍有3对称性。这种新点阵就是菱形晶系。

正定向



反定向

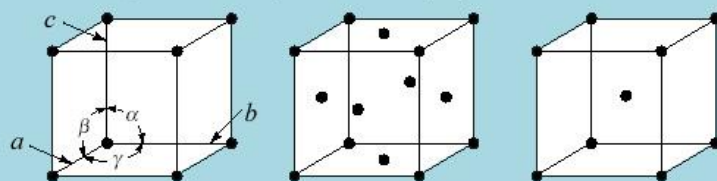


各种晶系可能具有的布喇菲点阵(共14种)

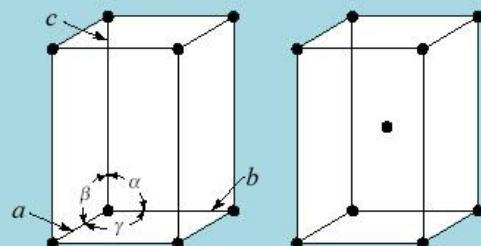
晶系	可能具有的布喇菲点阵			
	初基(P)	底心	体心(I)	面心(F)
三斜	★	同P点阵	同P点阵	同P点阵
单斜	★	★	同底心点阵	同底心点阵
正交	★	★	★	★
四方	★	不可能	★	同I点阵
立方	★	不可能	★	★
六方	★	不可能	不可能	不可能
菱方	★	不可能	不可能	不可能

十四种布喇菲点阵

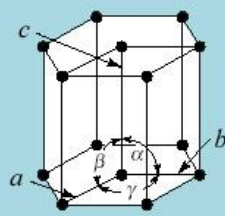
I 立方点阵 (Cubic lattices) $a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



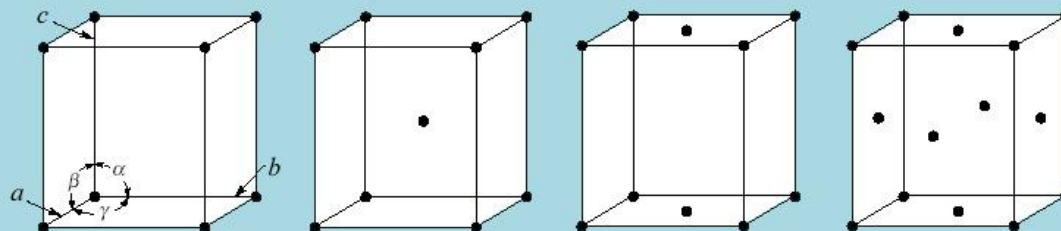
IV 四方点阵 (Tetragonal lattices)
 $a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



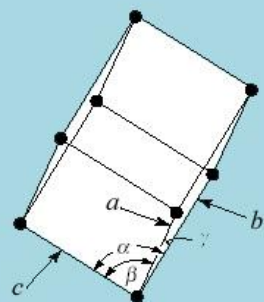
III 六方点阵 (Hexagonal lattices)
 $a=b \neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ$ $\gamma=120^\circ$



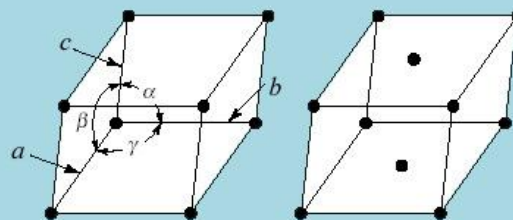
IV 正交点阵 (Orthorhombic lattices) $a \neq b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



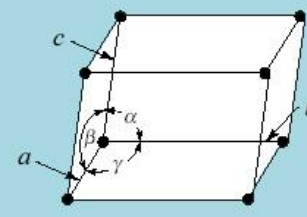
V 菱方点阵 (Rhombohedral lattices)
 $a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$



VI 单斜点阵 (Monoclinic)
 $a \neq b \neq c$ $\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$



VII 三斜点阵 (Triclinic lattices)
 $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$



1.5 点阵几何

1.5.1 点阵的阵点直线、方向指数 (Directional Indices)

点阵中任何两个阵点的连线（及其延线）构成点阵直线。点阵直线方向在非严格意义上又称之为晶向 (Crystal Directions)。点阵中由原点到任一阵点的矢量 r 都表示为：

$$\mathbf{r}_{(p_1 p_2 p_3)} = p_1 \mathbf{a} + p_2 \mathbf{b} + p_3 \mathbf{c}$$

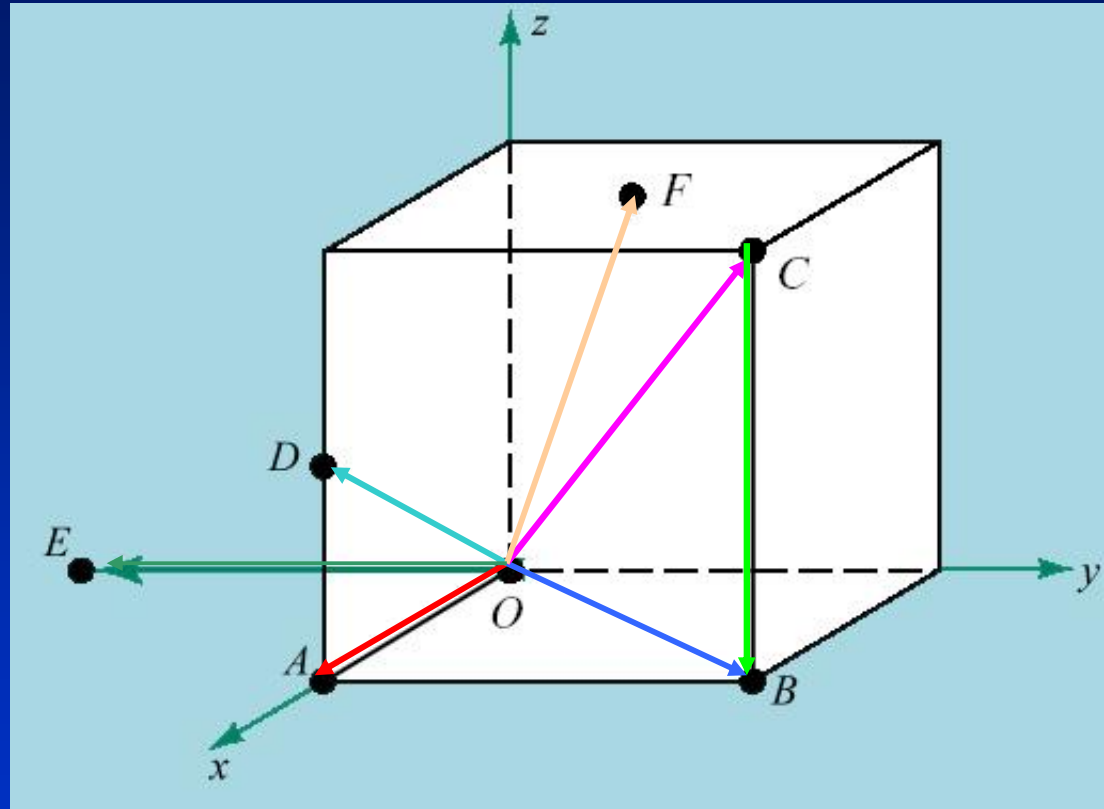
式中 a 、 b 、 c 是单胞的三个基矢。 p_1 、 p_2 、 p_3 必然为有理数，并且也一定是整数。把 p_1 、 p_2 、 p_3 简化成三个互质的整数 u 、 v 、 w ，使 $u:v:w = p_1:p_2:p_3$ ，再把 u 、 v 、 w 写进方括号内即 $[uvw]$ ，它就是 r 矢量方向的方向指数。如果 u 、 v 、 w 这三个数中有负数，在写方向指数时，在这个数字上面加一横线。例如：

$$1, -2, 3 \Rightarrow [\bar{1}23]$$

$$1, -1, 2 \Rightarrow [1\bar{1}2]$$

简言之，在要确定的方向上找出两个最邻近的点，选定一个点作原点，求出邻近点的坐标数，它们就是方向指数。

例子



$$OA-[1\ 0\ 0]$$

$$OB-[1\ 1\ 0]$$

$$OC-[1\ 1\ 1]$$

$$OD-[2\ 0\ 1]$$

$$OE-[0\ \bar{1}\ 0]$$

$$OF-[1\ 1\ 2]$$

$$CB-[0\ 0\ \bar{1}]$$

$[uvw]$ 和 $\overline{[uvw]}$ 是指向相反的另一方向。

由于点阵的对称性，使得一些非平行的阵点直线经对称操作后完全重合，这些阵点直线在几何上是完全等价的。把等价的阵点直线合归为同一种阵点线型，称为**方向族**，用 $\langle uvw \rangle$ 表示。对称性越高，方向族所含的方向越多。

三斜系——只含两个（包括指向）。

单斜系——单胞的三个棱长不等，方向族指数的三个指数不能交换位置， c 方向的2次轴只把 a 和 b 转到自身的反向，所以，同时改变 u 和 v 的正负号所得的方向是等价的。单斜系的 $\langle uvw \rangle$ 方向族包含有四个方向（指向）：

$[uvw]$ $\overline{[uvw]}$ $[u\bar{v}w]$ $\overline{[u\bar{v}w]}$

正交系——单胞的三个棱长不等，方向族的三个指数不能交换位置。但三个棱都是2次轴，使得方向指数中的三个数字可以独立地改变正负号。结果，正交系的 $\langle uvw \rangle$ 方向族包含有八个方向（指向）：

$[uvw]$ $\overline{[uvw]}$ $[u\bar{v}w]$ $\overline{[u\bar{v}w]}$ $[\bar{u}vw]$ $\overline{[\bar{u}vw]}$ $[\bar{u}\bar{v}w]$ $\overline{[\bar{u}\bar{v}w]}$

四方系—因为 c 轴是四次轴 ($a=b$)，所以一个方向族的三个指数的前两个指数 u 和 v 可以交换位置。单胞三个棱的垂面都是镜面，故一个方向族的三个指数都可以独立地改变正负号。结果，四方系方向族 $\langle uvw \rangle$ 包含十六个方向（指向）：

$$[uvw] \quad [\bar{u}vw] \quad [u\bar{v}w] \quad [uv\bar{w}] \quad [vuw] \quad [\bar{v}uw] \quad [v\bar{u}w] \quad [uv\bar{w}]$$

及其反向。

立方系—对称性很高，方向族的3个指数可以任意交换位置，它们也可以独立地改变正负号。如果三个指数 u 、 v 、 w 的顺序不变，每个指数独立地改变正负号就有：

$$[uvw] \quad [\bar{u}vw] \quad [u\bar{v}w] \quad [uv\bar{w}]$$

及它们的反向共有8个指向。 u 、 v 、 w 3个指数互换共有六组，结果，立方系 $\langle uvw \rangle$ 方向族包含 $6 \times 4 = 24$ 个等价方向， $6 \times 8 = 48$ 个等价指向。

六方系留在后面讨论。

几种晶系中 $\langle uvw \rangle$ 方向等价指向的数目的规律

晶系	点阵常数的限制	$\langle uvw \rangle$ 中 u 、 v 、 w 的交换方式	$\langle uvw \rangle$ 的指向数
三斜	$a \neq b \neq c \quad a \neq b \neq g$	u, v, w 不能交换位置, 它们的正负号不能单独改变, 只能同时改变	2
单斜	$a \neq b \neq c \quad a = b = 90^\circ \neq g$	u, v, w 不能交换位置, u 和 v 可以同时改变正负	4
正交	$a \neq b \neq c \quad a = b = g = 90^\circ$	u, v, w 不能交换位置, 但可以单独改变正负号	8
四方	$a = b \neq c \quad a = b = g = 90^\circ$	只有 u 和 v 可以交换位置, u, v, w 都可以单独改变正负号	16
立方	$a = b = c \quad a = b = g = 90^\circ$	u, v, w 都可以交换位置, 并且都可以单独改变正负号	24

如果三个指数中出现**相同数字**, 而相同的数字又处在可交换位置上的话, 它们的交换就不会出现新的方向; 如果指数中**出现零**, 零是没有正负之分的, 所以当零处在可单独改变正负号的位置上时, 改变正负号也不会出现新的指向。结果, 当指数出现相同或零时, 等价指向的数目是会减少的。

1.5.2 点阵的阵点平面及平面指数 (Crystal-plane Indices)

点阵中由阵点组成的平面在非严格意义上又称为晶面 (Crystal Plane)。任何一个阵点平面相对于坐标原点作平行移动 (或坐标系相对平面移动), 总能使阵点平面在坐标的三个参考轴上的截点是阵点, 即平面在三个轴 (它们的单位长度分别是 a 、 b 和 c) 的截距分别是 p_1a 、 p_2b 和 p_3c 。其中 p_1 、 p_2 和 p_3 (称外斯指数) 均为整数。这个面的方程为

$$\frac{x}{p_1a} + \frac{y}{p_2b} + \frac{z}{p_3c} = 1$$

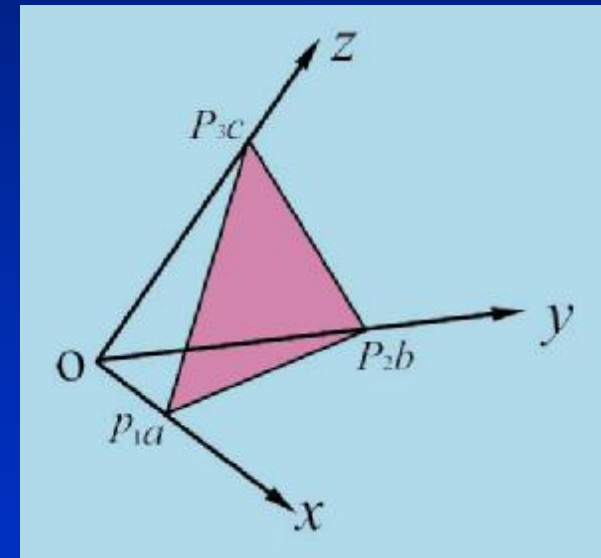
如果以坐标轴单位长度表示, $x'_1 = x_1/a$, $x'_2 = x_2/b$, $x'_3 = x_3/c$, 则得

$$\frac{x'}{p_1} + \frac{y'}{p_2} + \frac{z'}{p_3} = 1$$

此式改写成

$$h'x' + k'y' + l'z' = p$$

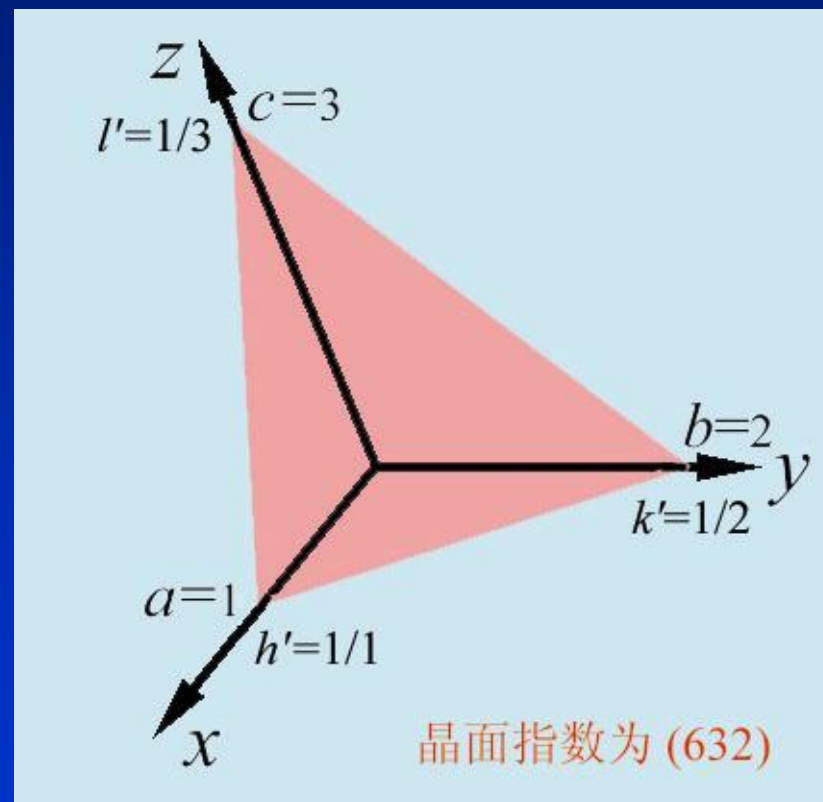
其中 $p = p_1p_2p_3$, $h' = p_2p_3$, $k' = p_3p_1$, $l' = p_1p_2$ 。因 p_1 、 p_2 和 p_3 为整数, 故 h' 、 k' 和 l' 也必为整数。把 h' 、 k' 和 l' 的公因子抽出, 把它们简化为互质的整数 h 、 k 和 l , 把 h 、 k 和 l 写进圆括号内, 即 (hkl) 就是晶面指数。



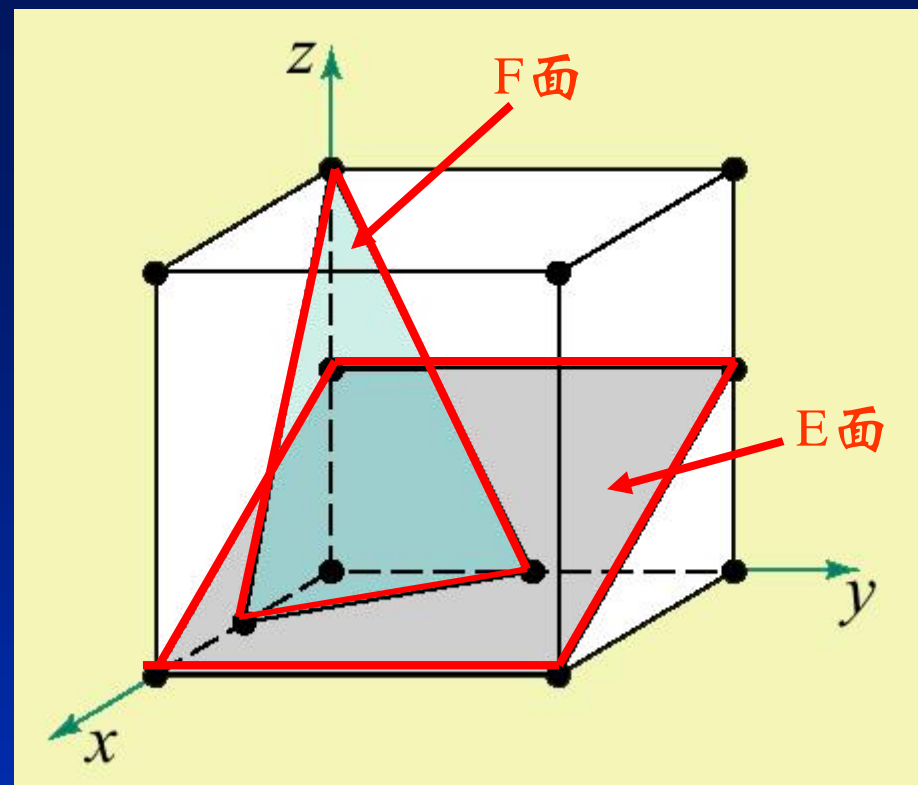
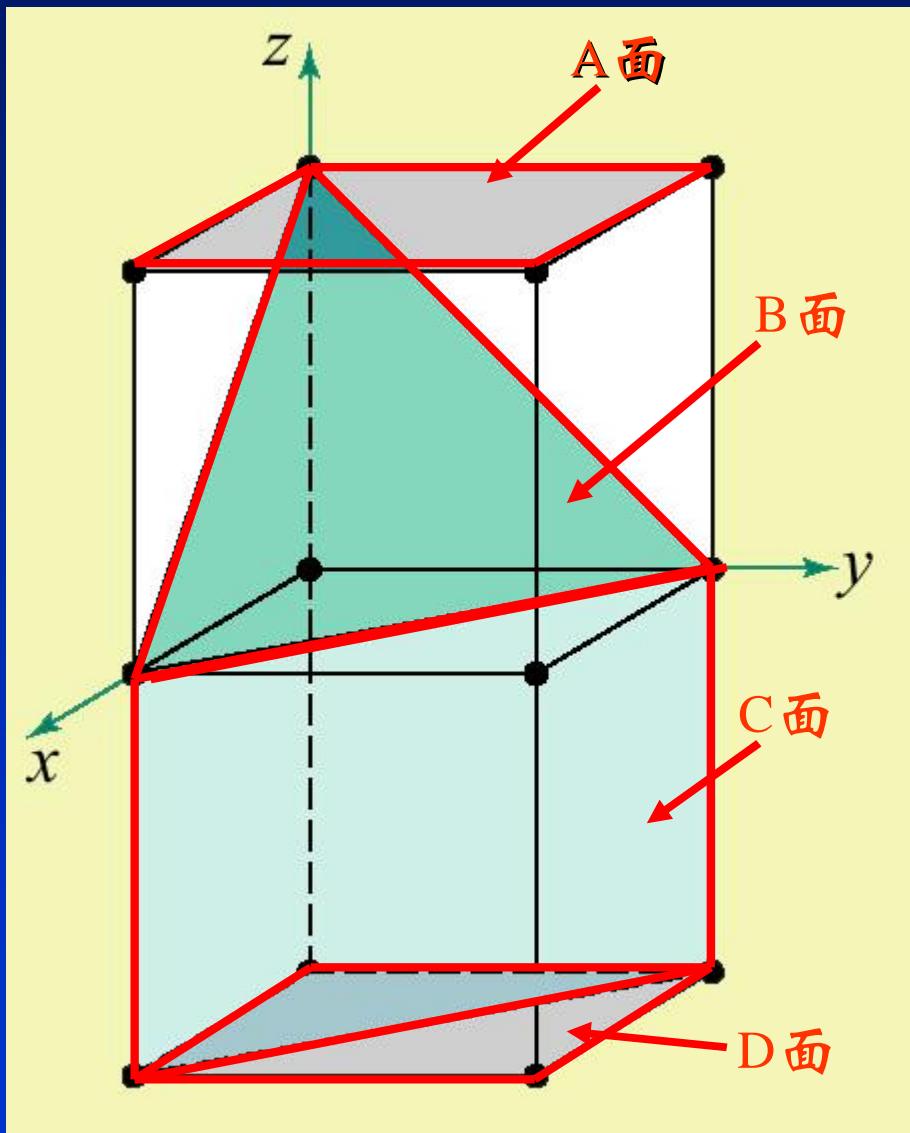
相对给定坐标系而言，如果不考虑一个面对于原点的距离，定义这个面的基本量就是这个面的单位法线矢量。以单位法线矢量在三个坐标轴的分量来表示这个面。据此，晶面指数按如下程序得出：

- ①选择坐标系（以单胞轴作坐标系）
- ②找出此面与坐标轴的截距。如右例中的面，截距分别为 $a=1, b=2, c=3$ 。
- ③求出截距的倒数。如右例中的面，截距倒数分别为 $h'=1/1, k'=1/2, l'=1/3$ 。
- ④把 h' 、 k' 、和 l' 的公因子抽出，把它们简化为互质的整数 h 、 k 和 l ，写进圆括号内，即 (hkl) ，作为此面的晶面指数。如右例中的面，为

$$1/1:1/2:1/3=6:3:2=h:k:l$$



例子



面	截距	指数
A	$\infty, \infty, 1$	(001)
B	$1, 1, 1$	(111)
C	$1, 1, \infty$	(110)
D	$\infty, \infty, -1$	(00 $\bar{1}$)
E	$1, \infty, 1/2$	(102)
F	$1/2, 1/2, 1$	(221)

一个点阵平面的指数和坐标原点的选择无关；平行面的面指数相同；如果不考虑面的极性（即不考虑面法线指向的方向），则：

$$(hkl) \equiv (\bar{h}\bar{k}\bar{l})$$

由于点阵的对称性，一些非平行的阵点平面经对称操作后会完全重合，即这些面在几何上是完全等价的，把这些等价面归属同一种面型，称为**面族**（Form of Plane），用 $\{hkl\}$ 表示。

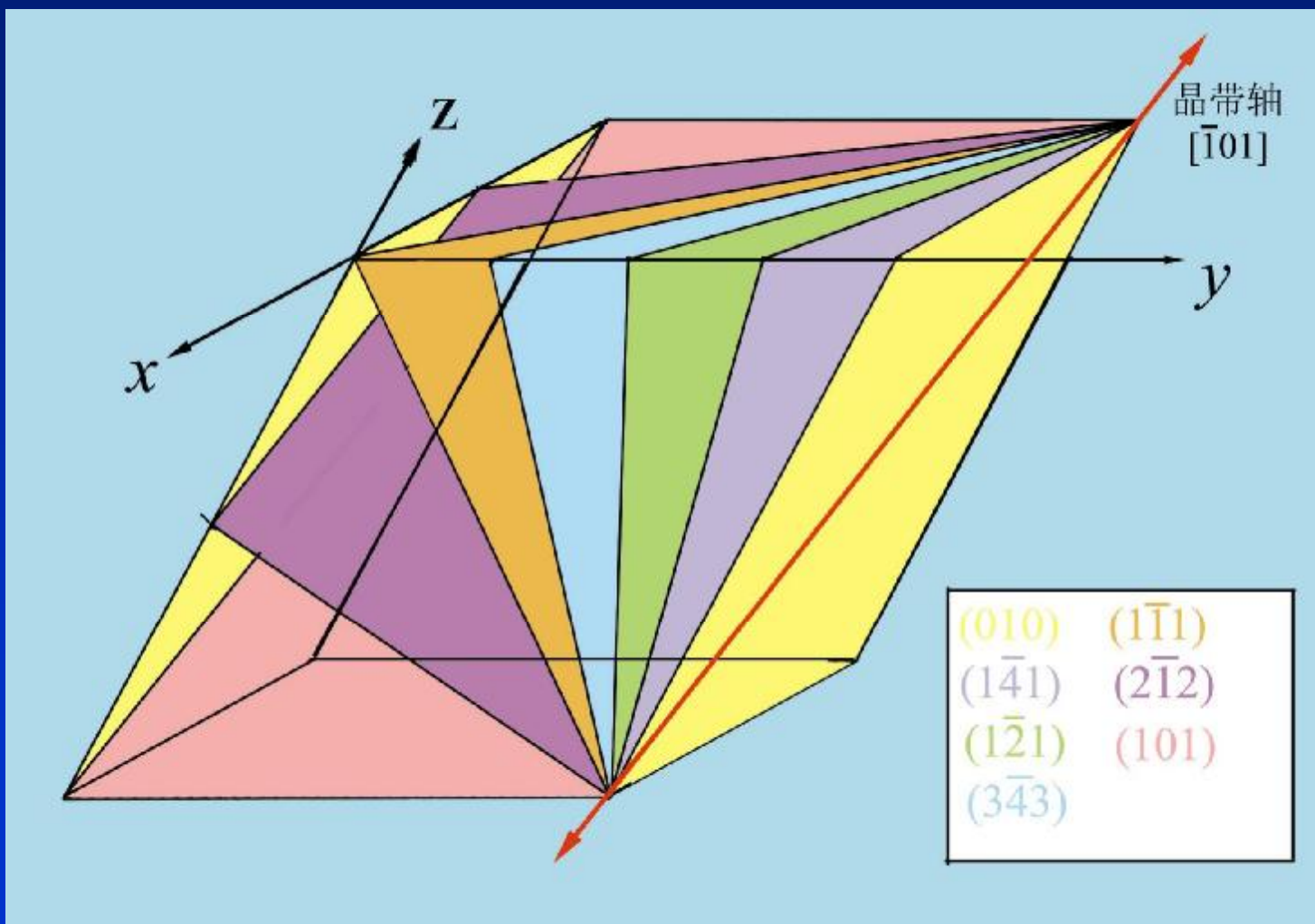
讨论面族的等价面的数目的方法和讨论方向族的一样，所得结果也是相同的。但是，如果不考虑面的极性，认为 (hkl) 和完全等同，则一个面族所包含的等价面的数目是相同指数的晶向指数的数目的一半。

看一些立方系面族的例子。



1.5.3 晶带 (Zone) 及晶带定律

两个晶面相交于一个晶棱，当晶面相交的棱彼此平行时，所有这些晶面构成一个晶带。晶面相交棱的直线称为晶带轴。以晶带轴作为晶带的标志，以晶带轴的方向指数表示该晶带的指数。



属于同一晶带轴的所有晶面 (hkl) 和晶带轴 $[uvw]$ 间的关系。从平面程知当 $p=0$ 时，即 (hkl) 面过原点：

$$hx + ky + lz = 0$$

在这面上的任一阵点坐标 (x, y, z) 都满足上式，从原点到这个面上某一阵点其矢量的方向指数 $[uvw]$ 中的 u 、 v 和 w 就是阵点的坐标分量。所以，在 (hkl) 面上任何 $[uvw]$ 方向（亦可理解为平行于 (hkl) 面的任何 $[uvw]$ 方向）的 u 、 v 和 w 都满足上式，故

$$hu + kv + lw = 0$$

这称为**晶带方程**。利用这一方程可以得出一些有用的关系：

①**求晶带轴的方向指数** 已知 $(h_1 k_1 l_1)$ 和 $(h_2 k_2 l_2)$ 同属一个晶带，设晶带轴为 $[uvw]$ 。根据上式得：

$$\begin{cases} h_1 u + k_1 v + l_1 w = 0 \\ h_2 u + k_2 v + l_2 w = 0 \end{cases}$$

可求出晶带轴三个指数 u 、 v 和 w 的连比关：

$$u:v:w = \begin{vmatrix} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} l_1 & h_1 \\ l_2 & h_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{vmatrix}$$

②求两个晶向构成的面的面指数 已知晶带轴 $[u_1v_1w_1]$ 和 $[u_2v_2w_2]$ ，可按上面相同的方法得出同属于这两个晶带轴的面（即 $[u_1v_1w_1]$ 和 $[u_2v_2w_2]$ 构共面的面）的面指数 (hkl) ：

$$h:k:l = \begin{vmatrix} v_1 & w_1 \\ v_2 & w_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} w_1 & u_1 \\ w_2 & u_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} u_1 & v_1 \\ u_2 & v_2 \end{vmatrix}$$

③三个面同属于一个晶带的条件 设 $(h_1k_1l_1)$ ， $(h_2k_2l_2)$ 和 $(h_3k_3l_3)$ 同属于一个晶带，其晶带轴为 $[uvw]$ 。按照晶带方程，得

$$\begin{cases} h_1u + k_1v + l_1w = 0 \\ h_2u + k_2v + l_2w = 0 \\ h_3u + k_3v + l_3w = 0 \end{cases}$$

若上式的 u 、 v 和 w 有非零解，要求下面的行列式为零

$$\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{vmatrix} = 0$$

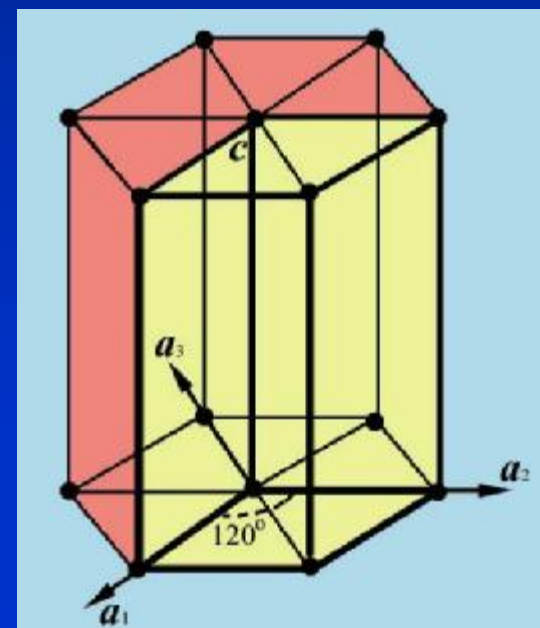
这就是三个共线的面的面指数遵守的条件。

④三个点阵直线共面的条件 设三个点阵直线 $[u_1v_1w_1]$ 、 $[u_2v_2w_2]$ 、 $[u_3v_3w_3]$ 共面的面为 (hkl) ，即 (hkl) 同属于上述三个方向为晶带轴的晶带，按上面相同的方法得出直线指数应遵守的条件：

$$\begin{vmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{vmatrix} = 0$$

1.5.4 六方（和三方）晶系的四轴坐标系的方向指数及面指数

六方(和三方)系的单胞不能反映点阵的对称性，为了适应对称配置，为了方便，常把三个单胞拼成一个六面柱体(它并不是真正的单胞)来讨论问题。把原来的 a 和 b 轴标成 a_1 和 a_2 轴， c 轴保持不变，增加一个 $a_3=-(a+b)$ 轴。用四轴坐标来描述六方系的晶面和晶向指数。直线方向指数用 $[uvtw]$ 、晶面指数用 $(hkil)$ 表示。



用四个轴分量来表示一个空间矢量的方法有无穷多种，现在的方法的困难来自共面的三个轴。

看**OA**矢量，两轴的唯一表示是 $[-2,-1]$ 。但三轴则有无限多种：

$[-1,0,1]$ $[0,1,2]$

$[-2,-1,0]$ $[1,2,3]$

看**OB**矢量，两轴的唯一表示是 $[-4,-3]$ ，但三轴则有

$[-1,0,3]$ $[-4,-3,0]$

一定要附加一个约束条件，才能是指数唯一。因

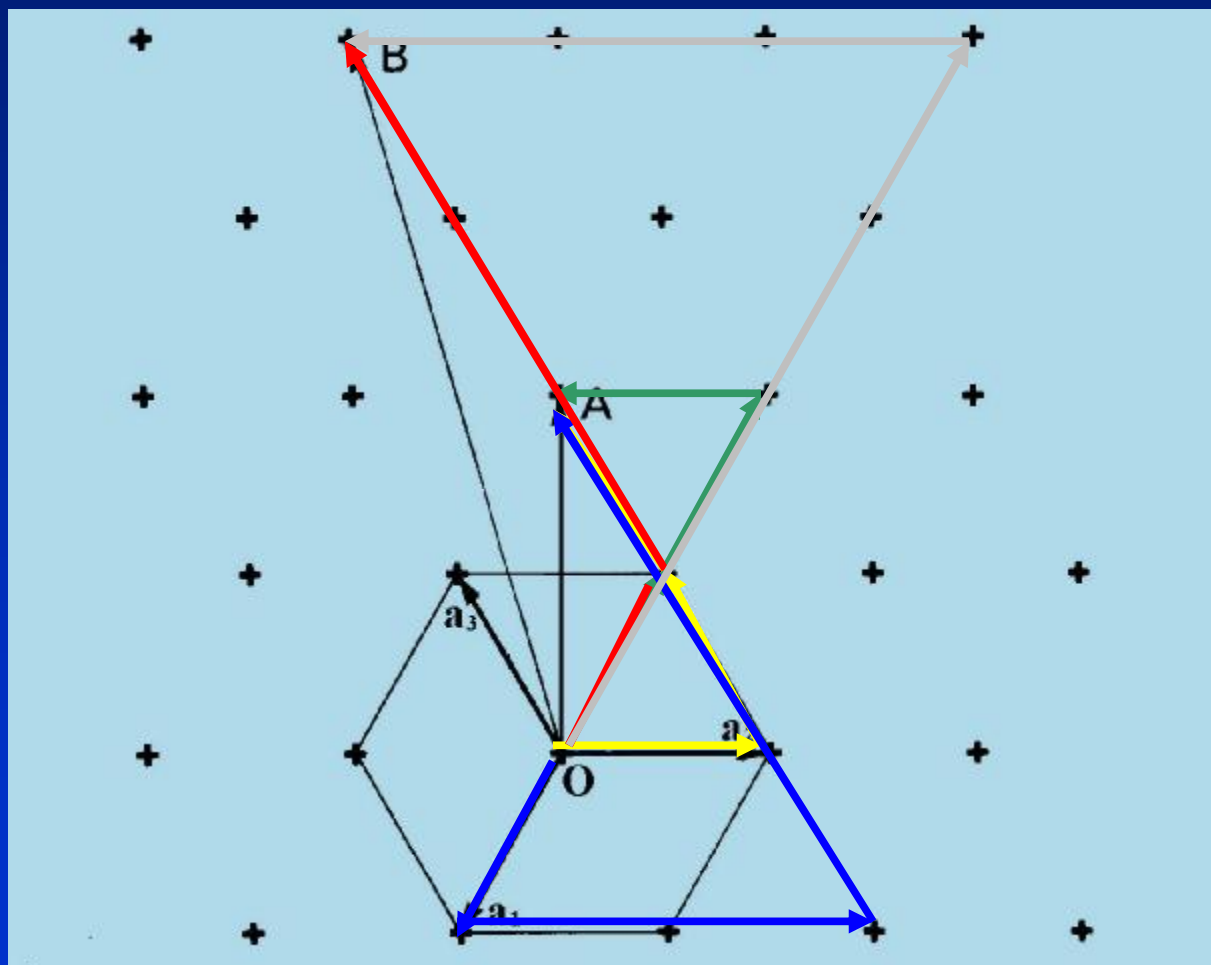
$$a_1 + a_2 + a_3 = 0$$

所以约束条件是：

$$u + v + t = 0$$

这样，正确的指数是

OA是 $[\bar{1}01]$ ，OB是 $[\bar{5}27]$



用“凑步”的方法来定出正确的指数是很麻烦的。三轴坐标方向指数比较容易确定，而四轴坐标方向指数又常用，因而，要找出三轴坐标方向指数和四轴坐标方向指数间的关系，设三轴坐标方向指数 $[UVW]$ ，四轴坐标方向指数 $[uvw]$ 。某一矢量 OP 在三轴坐标和四轴坐标下分别表示为：

$$OP = Ua_1 + Va_2 + Wc$$

$$OP = ua_1 + va_2 + ta_3 + wc$$

根据 $a_1 + a_2 + a_3 = 0$ 和 $u + v + t = 0$ 的关系，上两式合并为：

$$Ua_1 + Va_2 + Wc = ua_1 + va_2 + (u + v)(a_1 + a_2) + wc$$

整理后得

$$\begin{cases} U = 2u + v \\ V = u + 2v \\ W = w \end{cases}$$

或者反过来得：

$$\begin{cases} u = \frac{1}{3}(2U - V) \\ v = \frac{1}{3}(2V - U) \\ t = -(u + v) \\ w = W \end{cases}$$

前面的例子：三轴坐标指数是 $[\bar{4}30]$

则 $u = [2 \times (-4) - (-3)]/3 = -5/3$; $v = [2 \times (-3) - (-4)]/3 = -2/3$; $t = -(-3 - 4) = 7/3$

故四轴坐标指数是： $[\bar{5}270]$

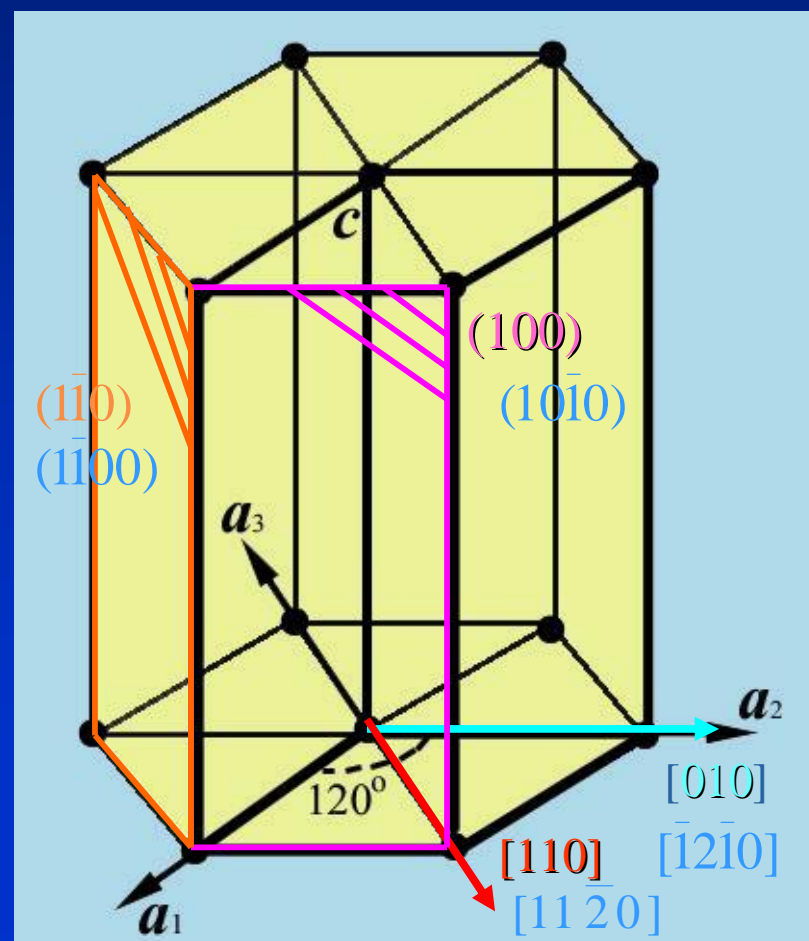
确定一个面的面指数的方法和三轴系统的一样：先找出该面在四个坐标轴上的截距长度（以轴基矢长作单位长度），求它们的倒数后，再抽取公因子使其化为互质的整数，最后就获得四个指数 h 、 k 、 i 和 l 。四轴坐标定出的面指数称为**密勒-布喇菲**指数。用下图的几何关系很容易知道三轴面指数为 (hkl) 的四轴面指数为 $(hkil)$ ，并且 h 、 k 和 i 间有如下关系：

$$h+k+i=0$$

图中**兰色**和**红色**两个方向在晶体学上是等效的，但在三轴坐标指数的数字却不完全相同，而在四轴坐标指数的数字却是相同的。

图中**紫色**和**桔黄色**的两个面在晶体学上是等效的，但在三轴坐标指数的数字却不完全相同，而在四轴坐标指数的数字却是相同的。

这说明为什么引入四轴指数的原因。它可以反映其对称性。



由六方系对称性可看出，很难从三轴坐标指数找出等价面指数间的规律性。而四轴坐标指数却有规律性，即指数中的 h 、 k 和 i 三个数可以互换位置，这正反映了六方系六次轴的特点，同时也可以看出四轴坐标指数的优点。

虽然 $\{hkil\}$ 指数中的 h 、 k 和 i 可以互换位置，但注意到 $h+k+i=0$ 的关系， h 、 k 和 i 不能单独改变正负号。指数中的 l 不能和其它指数换位但可以单独改变正负号。结果， $\{hkil\}$ 面族含12个等价面。由同样的道理可知，对于四轴坐标的指向族 $\langle uv tw \rangle$ 含24个等价指向。同样应该注意到，如果指数出现重复或出现0，则等价面或指向的数目减少。

例如， $(1\bar{1}00)$ 面，因为有两个0，每个0使等价数目减少一半，所以其等效数目由12个减为 $12/(2 \times 2)=3$ 个。虽然有两个重复的0，因它们处在不能换位的位置，不能减少等效数目。这三个等效晶面为：

$$(1\bar{1}00) \quad (10\bar{1}0) \quad (10\bar{1}0)$$

又例如， $(1\bar{1}\bar{2}0)$ 面，又为有两个1，相同数字是等效数目减少一半，其等效数目由12个减为 $12/2=6$ 个，因为有一个0，等效数目又减少一半，最终等效晶面数目为3个：

$$(1\bar{1}\bar{2}0) \quad (1\bar{2}10) \quad (\bar{2}110)$$

1.5.5 倒易点阵 (Reciprocal lattice)

1.5.5.1 倒易点阵的定义

点阵参数分别是 a 、 b 、 c 、 a 、 b 、 g 和 a^* 、 b^* 、 c^* 、 a^* 、 b^* 、 g^* 两个点阵的基矢间存在如下关系：

$$\begin{cases} a \cdot a^* = b \cdot b^* = c \cdot c^* = 1 \\ a \cdot b^* = a \cdot c^* = b \cdot a^* = b \cdot c^* = c \cdot a^* = c \cdot b^* = 0 \end{cases}$$

这两个点阵互为倒易。设 Ω 为正点阵单胞的体积，则

$$W = c \cdot (a \times b)$$

而

$$c \cdot c^* = 1 = \frac{W}{W} = \frac{c \cdot (a \times b)}{W}$$

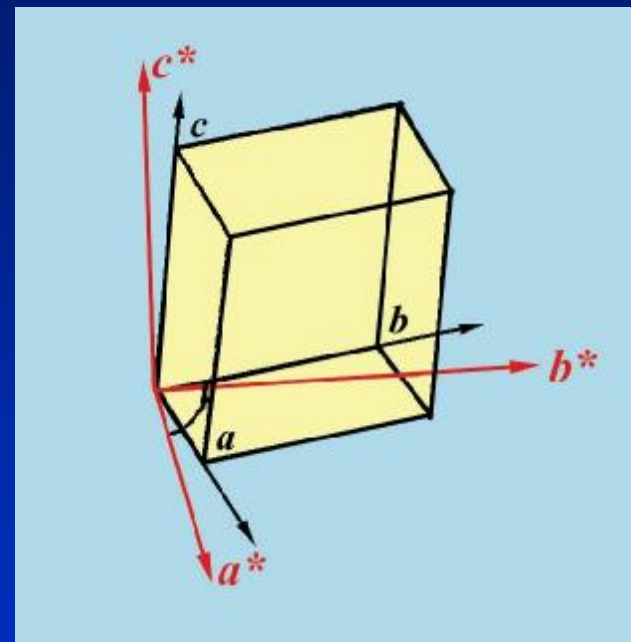
因为 $(a \times b) \parallel c^*$ ，所以

$$c^* = \frac{1}{W} (a \times b)$$

$$\text{同理有：} b^* = \frac{1}{W} (c \times a); \quad a^* = \frac{1}{W} (b \times c)$$

如果设 Ω^* 为倒易点阵的单胞体积，同样有如下关系：

$$c = \frac{1}{W^*} (a^* \times b^*) \quad b = \frac{1}{W^*} (c^* \times a^*) \quad a = \frac{1}{W^*} (b^* \times c^*)$$



正点阵单胞的体积 Ω 和倒易点阵单胞的体积 Ω^* 之间也存在倒易关系

$$W = \frac{1}{W^*} \quad W^* = \frac{1}{W}$$

1.5.5.2 正点阵基矢间夹角和倒易点阵基矢间夹角间的关系

根据基矢之间的夹角的定义，有

$$\cos a^* = \frac{b^* \cdot c^*}{|b^* \cdot c^*|}$$

把正点阵基矢与倒易点阵基矢的关系代入，得

$$\cos a^* = \frac{(c \times a) \cdot (a \times b)}{cba^2 \sin b \sin g} = \frac{(c \cdot a)(a \cdot b) - (c \cdot b)(a \cdot a)}{cba^2 \sin b \sin g}$$

最后得

$$\cos a^* = \frac{\cos b \cos g - \cos a}{\sin b \sin g}$$

同理

$$\cos b^* = \frac{\cos g \cos a - \cos b}{\sin g \sin a} \quad \cos g^* = \frac{\cos a \cos b - \cos g}{\sin a \sin b}$$

按同样的方法可用倒易点阵的 a^* 、 b^* 、 g^* 来表达正点阵的 a 、 b 、 g ：

$$\cos a = \frac{\cos b^* \cos g^* - \cos a^*}{\sin b^* \sin g^*} \quad \cos b = \frac{\cos g^* \cos a^* - \cos b^*}{\sin g^* \sin a^*} \quad \cos g = \frac{\cos a^* \cos b^* - \cos g^*}{\sin a^* \sin b^*}$$

1.5.5.3 倒易点阵两个重要的基本性质

①在倒易点阵中，从原点指向阵点 $[(hkl)]^*$ 的倒易矢量 $H_{hkl} = ha^* + kb^* + lc^*$ 必和正点阵的 (hkl) 面垂直，即倒易点阵的阵点方向 $[hkl]^*$ 和正点阵的 (hkl) 面垂直： $[hkl]^* \perp (hkl)$ 。

下面给出证明。

一个阵点平面和三个参照轴相截于A、B、C。从原点O引向平面ABC垂线为OD。根据点阵的性质可知，任一个点阵面的所有平行面，它们将把点阵中所有的阵点包括无遗。OD一定是ABC面面间距 d 的整数倍： $OD=md$ ，其中 m 为整数。从原点引向面上任一点的矢量和此面法线单位矢量 n 的点乘都等于，即等于 md 。即

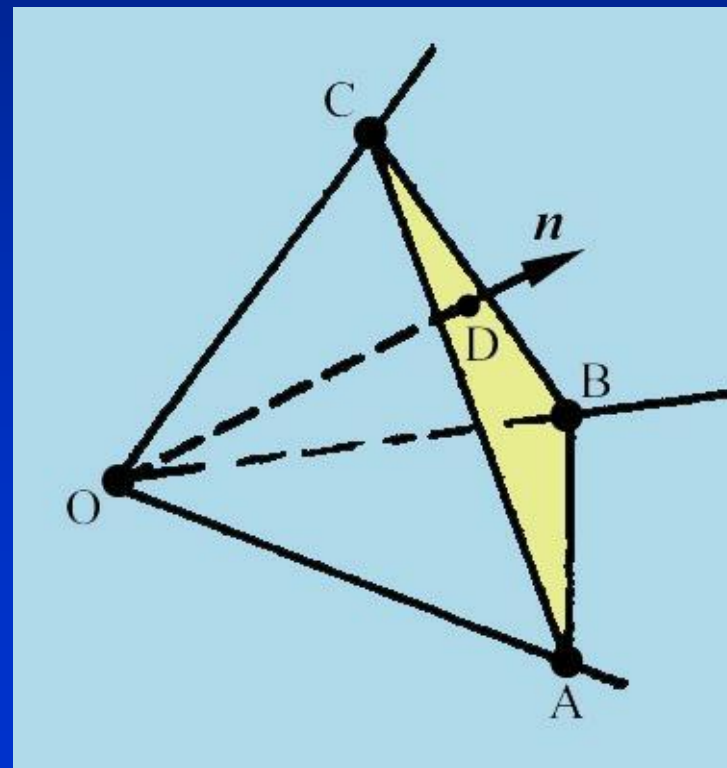
$$OA \cdot n = OB \cdot n = OC \cdot n = md$$

上式又可写成

$$\frac{OA}{a} a \cdot n = \frac{OB}{b} b \cdot n = \frac{OC}{c} c \cdot n$$

即

$$h:k:l = \frac{a}{OA} : \frac{b}{OB} : \frac{c}{OC} = a \cdot n : b \cdot n : c \cdot n$$



这是我们前面说晶面指数的三个分量是这个面的单位法线矢量在三个坐标轴的分量。

据此， (hkl) 面的法线单位矢量和三个基矢 a 、 b 、 c 点乘的结果分别是 d_{hkl} 的 h ， k ， l 倍，即：

$$a \cdot n_{hkl} = h d_{hkl} \quad b \cdot n_{hkl} = k d_{hkl} \quad c \cdot n_{hkl} = l d_{hkl}$$

上面三个等式分别乘以 a^* 、 b^* 、 c^* 后相加

$$(a \cdot n_{hkl})a^* + (b \cdot n_{hkl})b^* + (c \cdot n_{hkl})c^* = d_{hkl}(ha^* + kb^* + lc^*)$$

用 a 、 b 、 c 分别点乘上式左端，获得 $a \cdot n_{hkl}$ 、 $b \cdot n_{hkl}$ 、 $c \cdot n_{hkl}$ ，这说明点乘前的矢量确为 n_{hkl} 。而上式右端的方向是 H_{hkl} 方向，所以 H_{hkl} 平行于 n_{hkl} ，即 H_{hkl} 和晶面 (hkl) 面垂直。这就证明了这个基本性质。

② H_{hkl} 的模等于正点阵 (hkl) 面的面间距 d_{hkl} 的倒数。

如上讨论，上式实际上可以写为：

$$n_{hkl} = d_{hkl} H_{hkl}$$

即：

$$|H_{hkl}| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

这就证明了这个基本性质。

因为正点阵和倒易点阵是完全互为倒易的，所以正点阵的 $[uvw]$ 方向和倒易点阵的 $(uvw)^*$ 垂直； $r_{uvw}=ua+vb+wc$ 模是 $(uvw)^*$ 面的面间距 d_{uvw}^* 的倒数，即：

$$[uvw] \perp (uvw)^*$$

$$|r_{uvw}| = \frac{1}{d_{uvw}^*}$$

倒易点阵中一个阵点 $[(hkl)]^*$ 代表了正点阵 (hkl) 面列，所以，倒易点阵中阵点的分布就代表着正点阵中一系列面列的分布。

1.5.5.4 由正点阵导出倒易点阵

根据倒易点阵的两个基本性质，很容易从正点阵导出其倒易点阵。

倒易点阵的三个基矢 a^* 、 b^* 、 c^* 分别垂直正点阵的 (100) 、 (010) 、 (001) 面，它们的夹角分别是正点阵中这三个面的夹角，它们的模分别是 $1/d_{100}$ ， $1/d_{010}$ ， $1/d_{001}$ ，如果 d_{hkl} 的单位是nm，则 a^* 、 b^* 、 c^* 的单位是 nm^{-1} 。求出了 a^* 、 b^* 、 c^* 的长度和它们间的夹角后，就确定了 $[(100)]^*$ 、 $[(010)]^*$ 、 $[(001)]^*$ 三个倒易点，把 a^* 、 b^* 、 c^* 周期平移就获得相应的倒易点阵。

一个例子：由单斜点阵导出其倒易点阵。

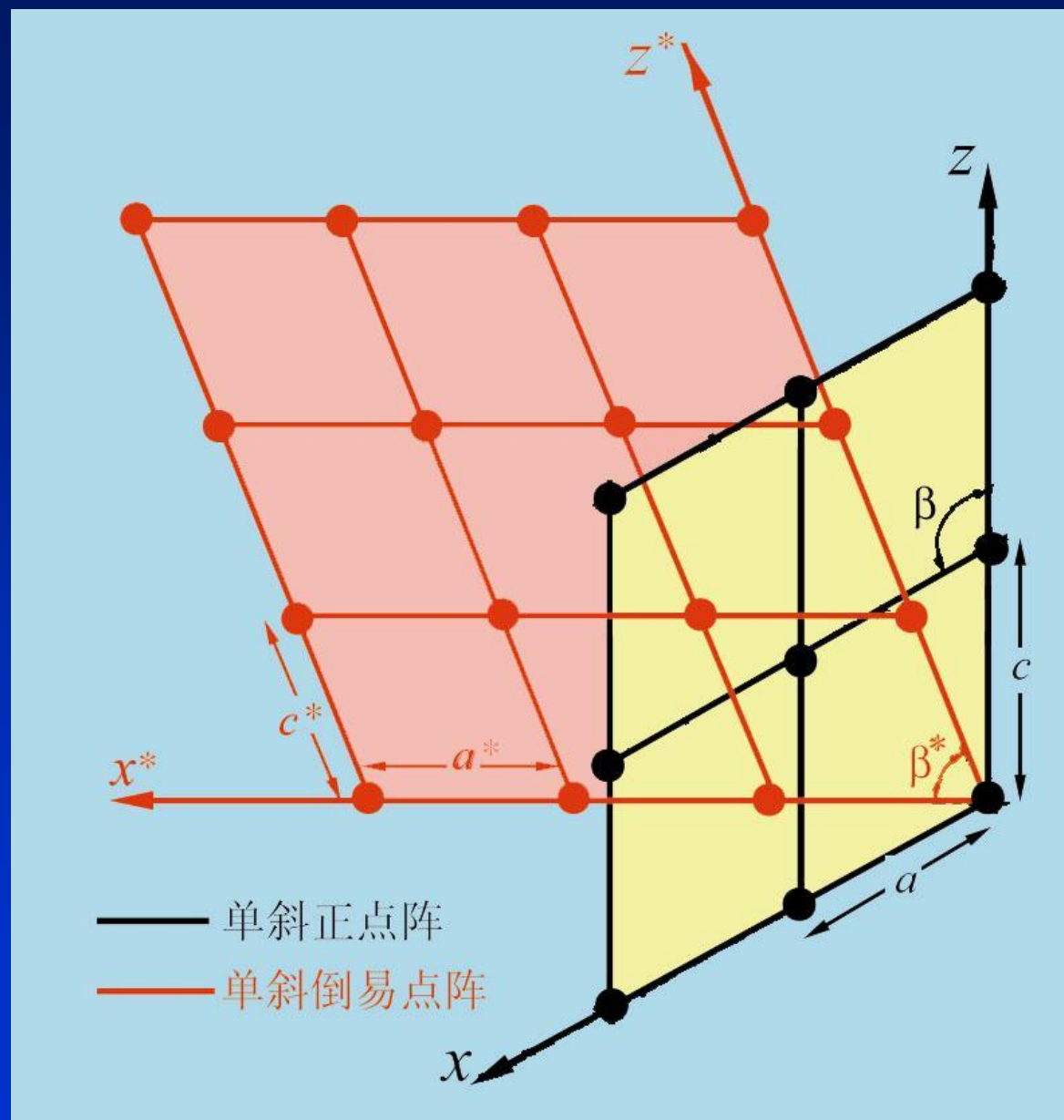
单斜点阵： b 轴垂直于 a 和 c 轴。

右图图面是(001)面。

$$a^* = 1/d_{100} = 1/(a \sin b)$$

$$c^* = 1/d_{001} = 1/(c \sin b)$$

从作图可以看到，正点阵和对应的倒易点阵同属一种晶系。



点阵	单斜	正交	六方	菱方	正方	立方
正点阵	单胞特征 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	单胞特征 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	单胞特征 $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	单胞特征 $a = b = c$ $90^\circ \neq \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ$	单胞特征 $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	单胞特征 $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
	单胞体积 $abc \sin \beta$	单胞体积 abc	单胞体积 $(\sqrt{3} a^2 c)/2$	单胞体积 $a^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}$	单胞体积 $a^2 c$	单胞体积 a^3
倒易点阵	a^*	$\frac{1}{a \sin \beta}$	$\frac{1}{a}$	$\frac{2}{a \sqrt{3}}$	$\frac{\sin \alpha}{a \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}}$	$\frac{1}{a}$
	b^*	$1/b$	$\frac{1}{b}$	$\frac{2}{a \sqrt{3}}$	$\frac{\sin \alpha}{a \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}}$	$\frac{1}{b}$
	c^*	$\frac{1}{c \sin \beta}$	$\frac{1}{c}$	$\frac{1}{c}$	$\frac{\sin \alpha}{a \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}}$	$\frac{1}{c}$
	α^*	90°	90°	90°	$\cos^{-1}(-\frac{\cos \alpha}{1 + \cos \alpha})$	90°
	β^*	$180^\circ - \beta$	90°	90°	$\cos^{-1}(-\frac{\cos \alpha}{1 + \cos \alpha})$	90°
	γ^*	90°	90°	60°	$\cos^{-1}(-\frac{\cos \alpha}{1 + \cos \alpha})$	90°
	单胞体积	$\frac{1}{abc \sin \beta}$	$\frac{1}{abc}$	$\frac{2}{\sqrt{3} a^2 c}$	$\frac{\sin \alpha}{a^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}}$	
	单胞特征	$a^* \neq b^* \neq c^*$ $\alpha^* = \gamma^* = 90^\circ \neq \beta^*$	$a^* \neq b^* \neq c^*$ $\alpha^* = \gamma^* = \beta^* = 90^\circ$	$a^* = b^* \neq c^*$ $\alpha^* = \beta^* = 90^\circ$ $\gamma^* = 120^\circ$	$a^* = b^* = c^*$ $\alpha^* = \gamma^* = \beta^* \neq 90^\circ$	$a^* = b^* \neq c^*$ $\alpha^* = \gamma^* = \beta^* = 90^\circ$

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 $[(200)]^*$ 、 $[(224)]^*$...等类似的倒易点阵阵点。但是，有心化的点阵则不同。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。

我们从普遍意义上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：

$$hx + ky + lz = 0 \quad (\text{或整数})$$

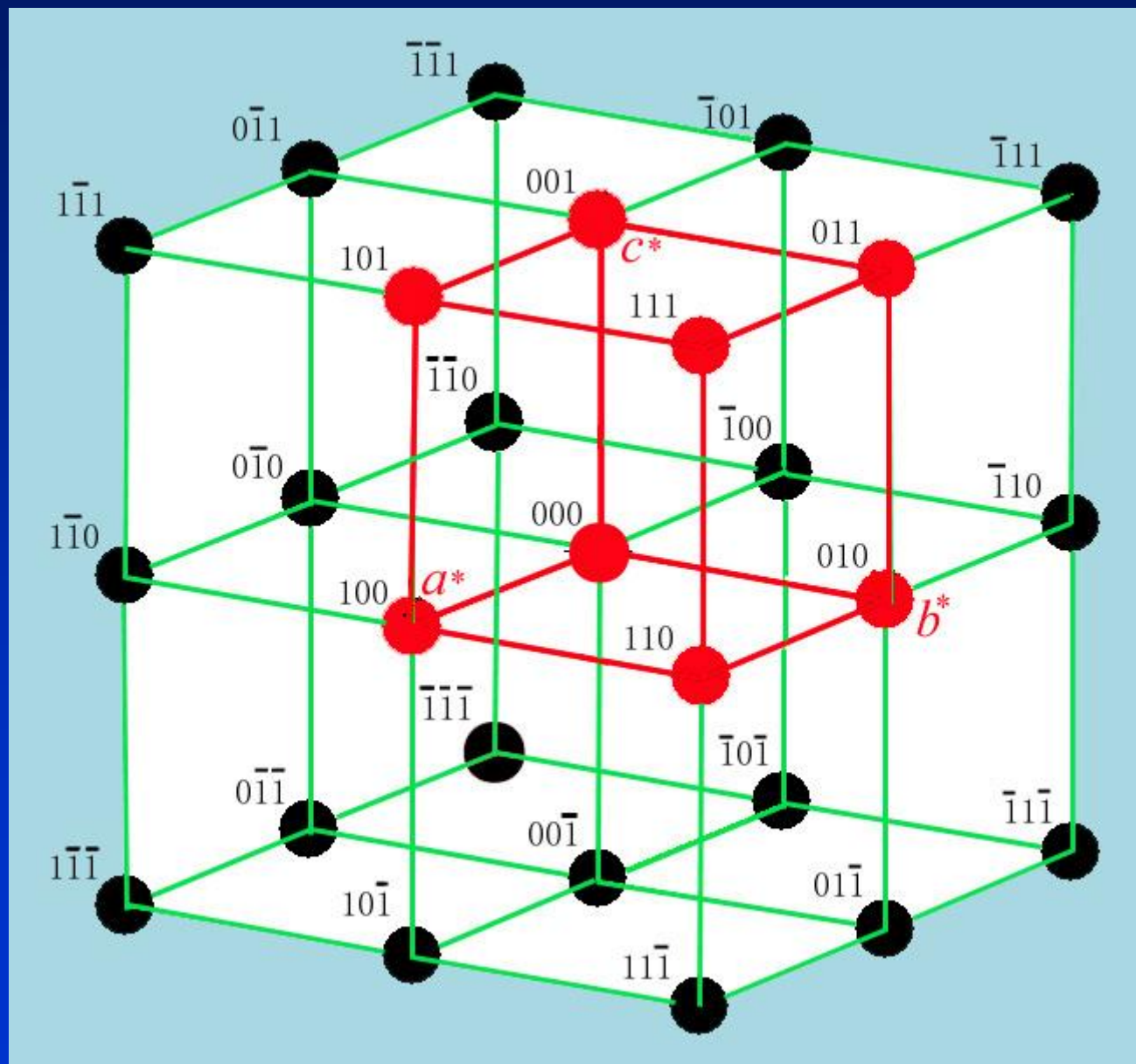
凡不符合上列关系的倒易阵点 $[(hkl)]^*$ 将消失。

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。

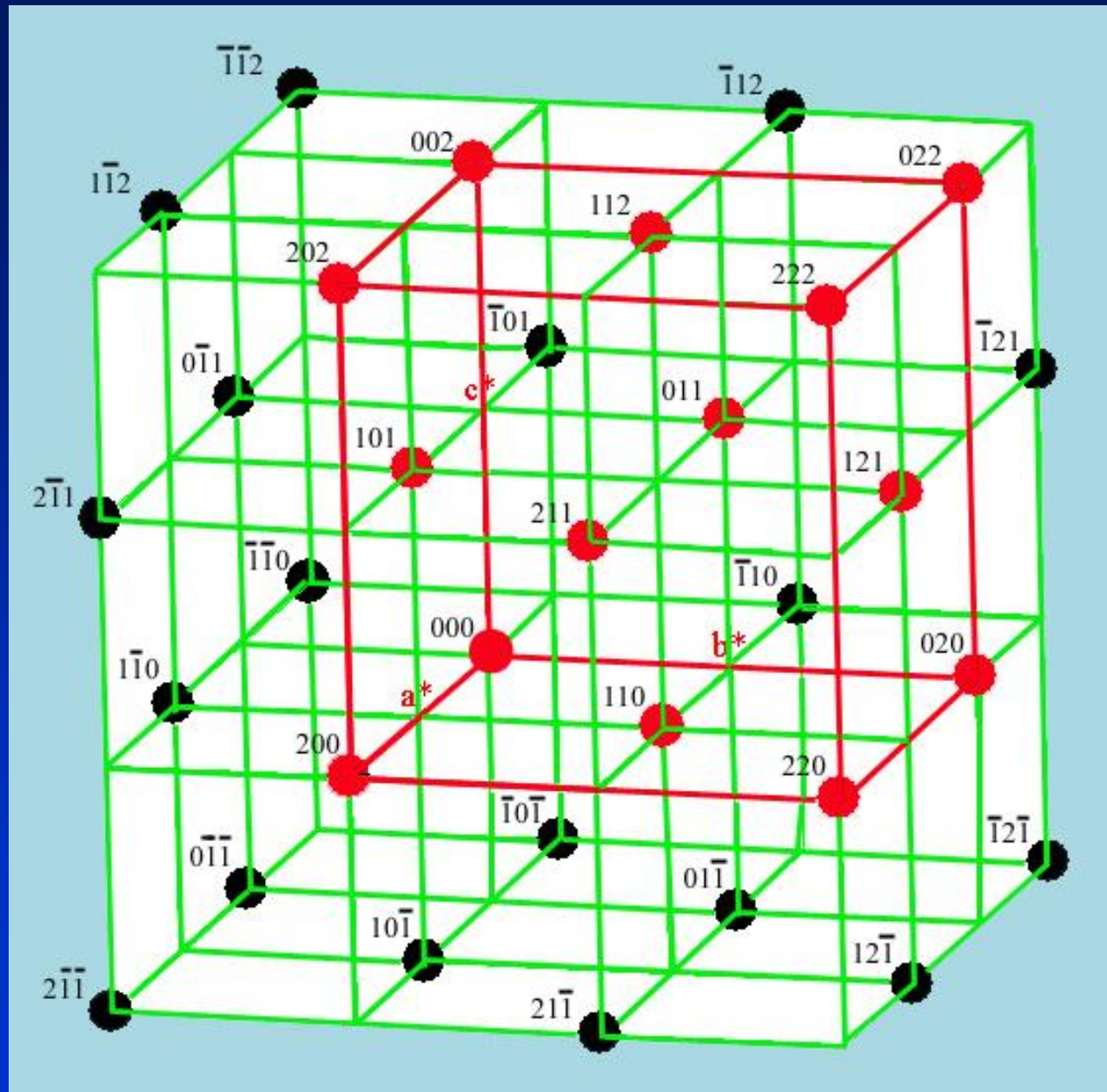
面心点阵，有心化的点的坐标是 $[(1/2 \ 1/2 \ 0)]$ 、 $[(1/2 \ 0 \ 1/2)]$ 和 $[(0 \ 1/2 \ 1/2)]$ ，从上式可知道，倒易点 $[(hkl)]^*$ 的 h 、 k 和 l 必须同时为奇数或同时为偶数，否则倒易阵点将消失。

C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。

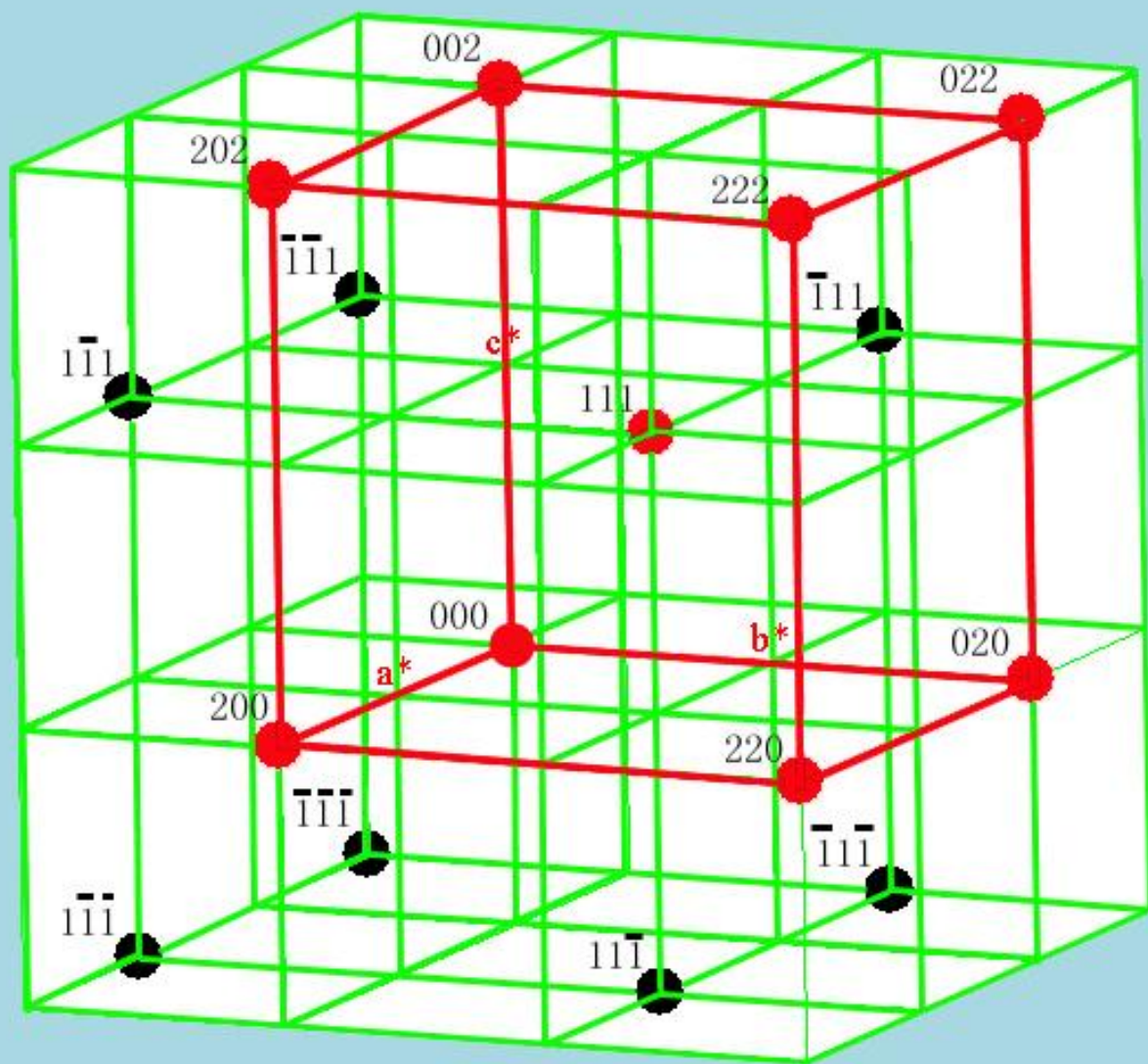
P点阵的倒易点阵仍为P点阵，没有消光效应，全部倒易点都会出现。



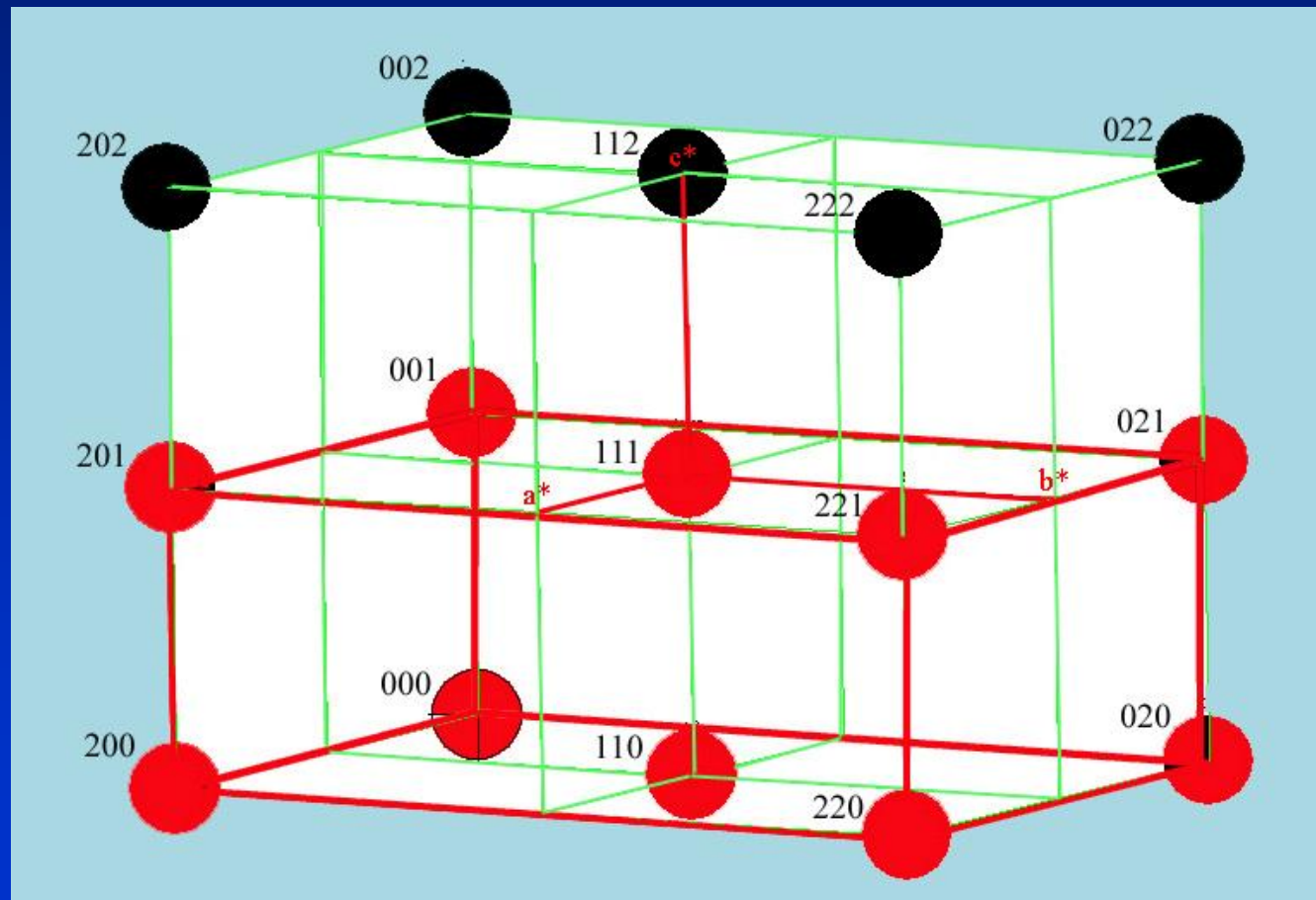
正点阵是体心，它的倒易复式单胞是面心单胞。单胞的四个阵点，分别是 $[(000)]^*$ 、 $[(011)]^*$ 、 $[(101)]^*$ 、 $[(110)]^*$ 。同时可以看到，复式单胞的棱长已不是 a^* 、 b^* 、 c^* 而是 $2a^*$ 、 $2b^*$ 、 $2c^*$ ，单胞体积变为 $8W^*$ 。



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
 $8W^*$ 。



底心点阵的倒易点阵仍是底心点阵，如果是 c 面有心化，因为倒易点 $[(hkl)]^*$ 的 $h+k$ 应等于偶数，这时单胞棱长变为 $2a^*$ 、 $2b^*$ 、 c^* ，单胞体积变为 $4W$ 。



1.5.5.5 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。因为 $(uvw)^*$ 面与 $[hkl]^*$ 方向也应有平行关系，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：

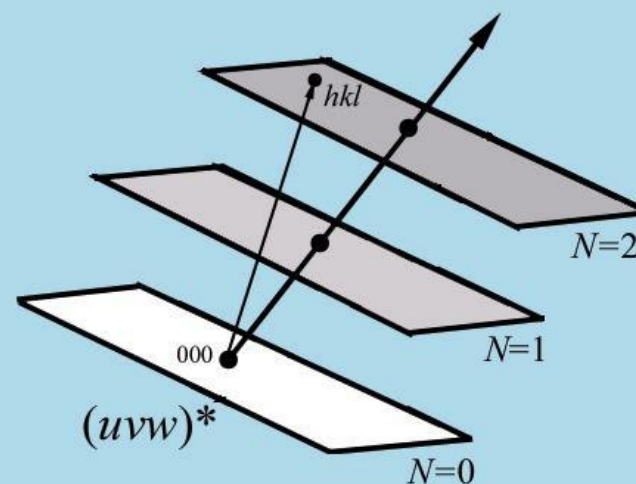
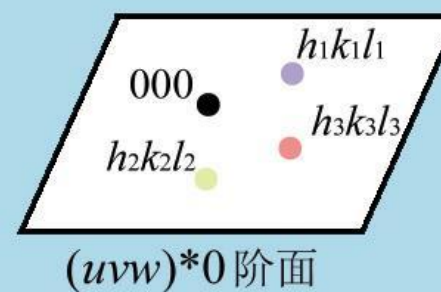
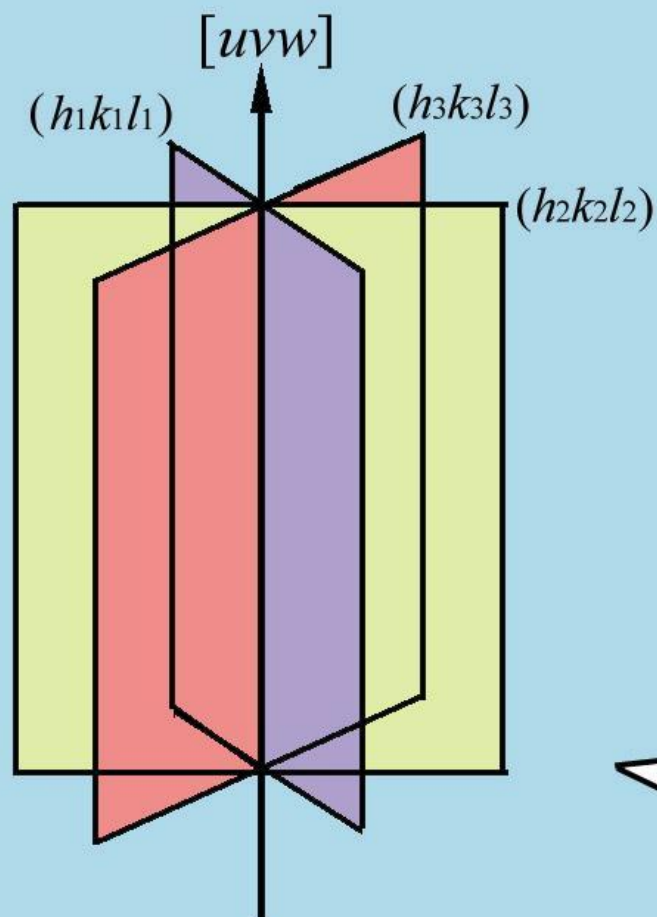
$$uh + vk + lw = 0$$

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。零阶 $(uvw)^*$ 面代表正点阵的一个晶带。若认为 $(uvw)^*$ 面列所有面都代表 $[uvw]$ 晶带，这时的晶带称广义晶带。广义晶带只有在倒易点阵中才有明确意义。

设在 N 阶倒易面上有倒易阵点 $[(hkl)]^*$ ，则

$$\frac{\mathbf{H}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_{uvw}}{|\mathbf{r}_{uvw}|} = Nd^*$$

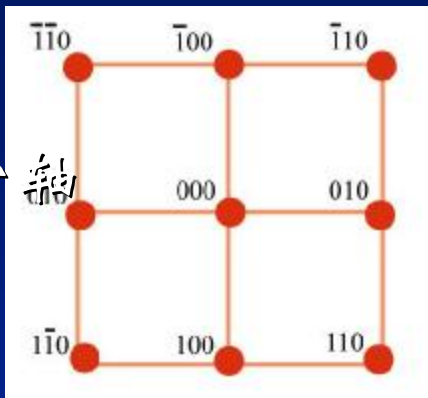
所以，有如下关系： $hu + kv + lw = N$ 这称为广义晶带方程。



一个立方P点阵的晶带的倒易点例子

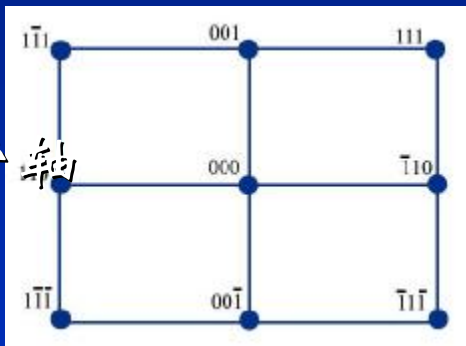
[001]

晶帶軸



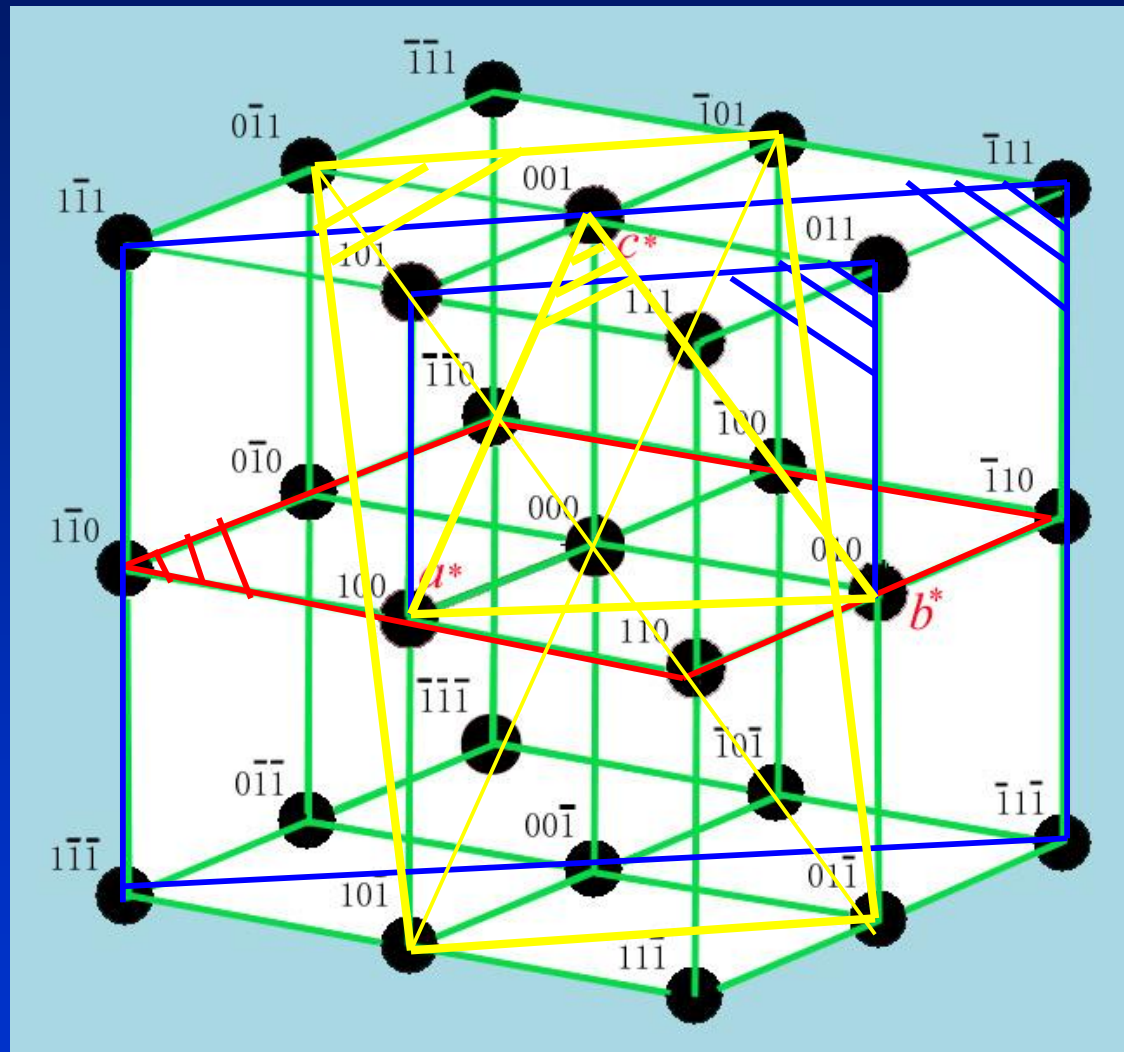
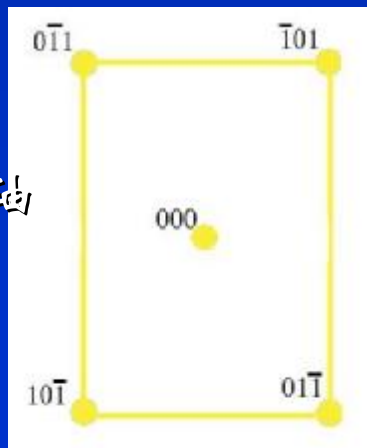
[110]

晶帶軸



[111]

晶带轴



要画出正点阵某一晶带的晶面的倒易点的方法是：尽量找出最靠近原点的两个倒易点（如果不是最靠近的点，则按规律、补上中间的点），根据这两个面的面间距的倒数，得出这两个倒易点到原点的距离；再求这两个面的面夹角，确定它们的相对位置；把两个点周期平移就得所求。

例：求面心立方点阵 $[121]$ 晶带的倒易点分布。

①在倒易空间画出 $(121)^*$ 面

②把面平移 b^* ，令其过原点。

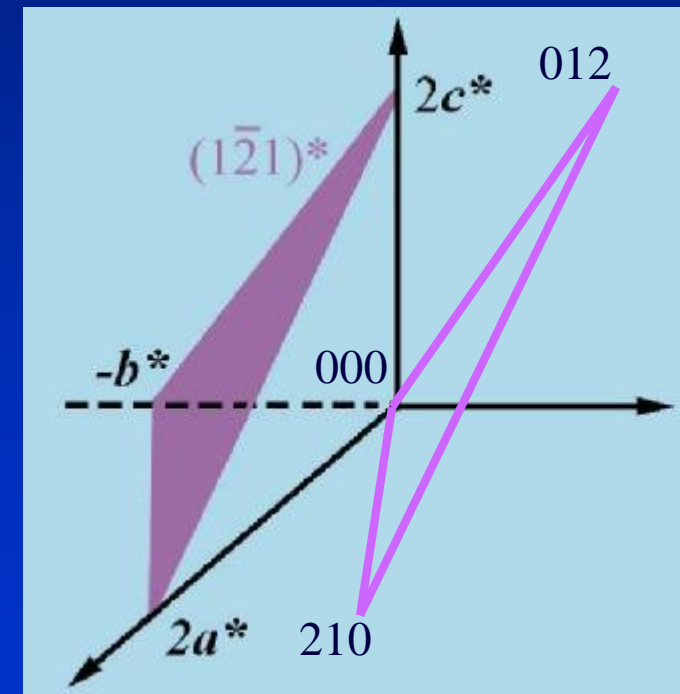
得 $[(000)]^*$ 、 $[(210)]^*$ 和 $[(012)]^*$ 。

③在 $(121)^*$ 面上确定这三点的相对位置：

$[(000)]^*$ 与 $[(210)]^*$ 的距离为 $1/d_{210}$ ；

$[(000)]^*$ 与 $[(012)]^*$ 的距离为 $1/d_{021}$ ；

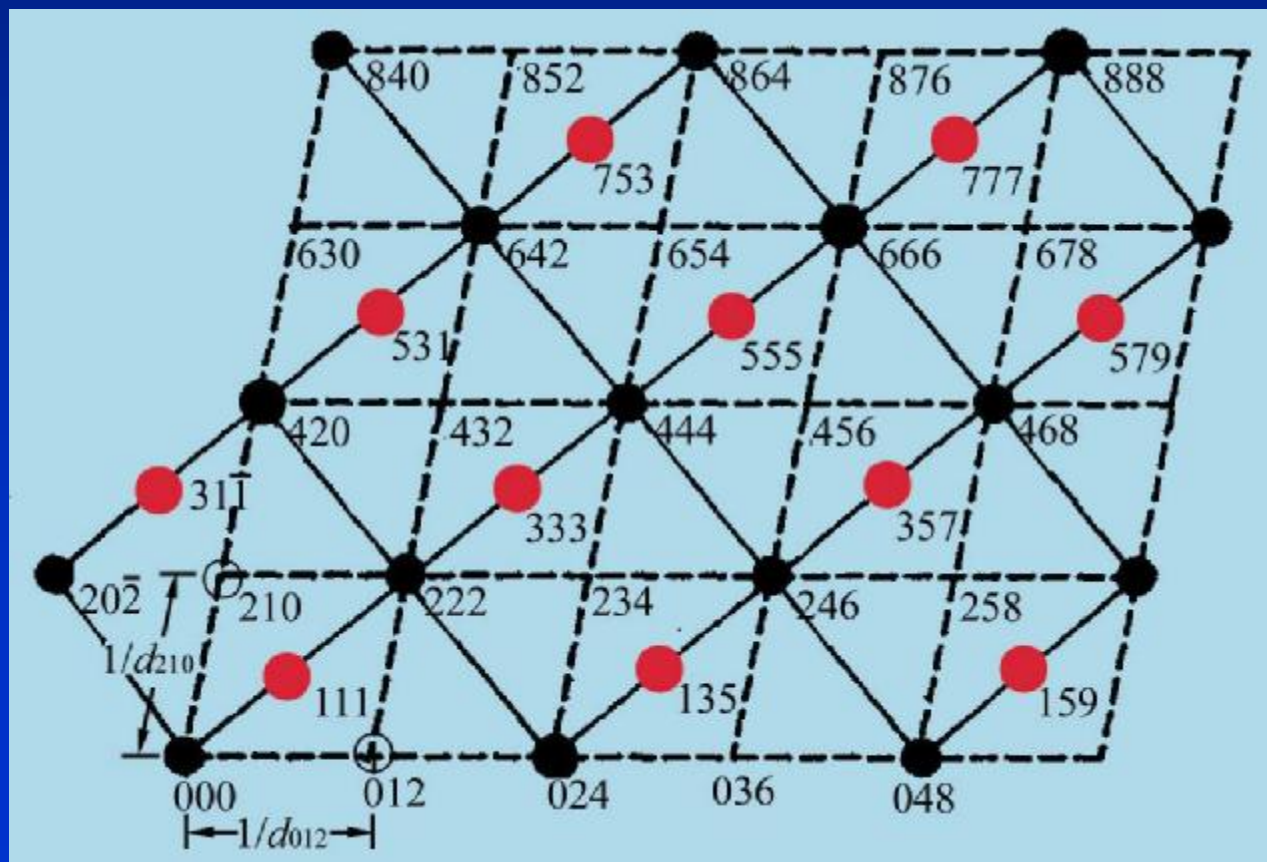
$[(210)]^*$ 和 $[(012)]^*$ 之间的夹角为 q
($q=78.46^\circ$)



④把 $[(210)]^*$ 和 $[(012)]^*$ 两点周期平移，得出所有可能的点；

⑤检查是否有消光的点，因为正点阵是面心立方，所以，倒易点的数字应同时为奇数或同时为偶数，故要消除那些点。

⑥在检查是否会遗漏可能的点，因为开始选择的点不一定完全合适。现在的例子，发现在 $[(000)]^*$ 和 $[(222)]^*$ 之间应该有符合规则的 $[(111)]^*$ 点，按这个规律补上其他所有的点。



1.5.6 倒易矢量在晶体学中几何关系的应用

1.5.6.1 点阵平面间距公式

把 H_{hkl} 自我点乘，得

$$H_{hkl} \cdot H_{hkl} = \frac{1}{d_{hkl}^2}$$

故

$$\begin{aligned} \frac{1}{d_{hkl}^2} &= (ha^* + kb^* + lc^*) \cdot (ha^* + kb^* + lc^*) \\ &= h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^*b^* \cos g^* + 2lhc^*a^* \cos b^* + 2klb^*c^* \cos a^* \end{aligned}$$

把 a^* 、 b^* 、 c^* 、 a^* 、 b^* 、 g^* 成正点阵的 a 、 b 、 c 、 a 、 b 、 g 就获得计算点阵平面间距的普遍公式：

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

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

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



1.5.6.2 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 $[uvw] \parallel [hkl]^*$ 。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：

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

把上面三个式子写成矩阵形式：

$$\begin{pmatrix} \hat{e}_u \\ \hat{e}_v \\ \hat{e}_w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{e}_a^* \times \hat{e}_b^* & \hat{e}_a^* \times \hat{e}_c^* & \hat{e}_b^* \times \hat{e}_c^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}$$

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) ：

$$\begin{pmatrix} \hat{e}_h \\ \hat{e}_k \\ \hat{e}_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{e}_a \times \hat{e}_b & \hat{e}_a \times \hat{e}_c & \hat{e}_b \times \hat{e}_c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}$$

例如，对立方系， $\hat{e}_a^* \cdot \hat{e}_a^* = \hat{e}_b^* \cdot \hat{e}_b^* = \hat{e}_c^* \cdot \hat{e}_c^* = 1/a^2$ ； $\hat{e}_a^* \cdot \hat{e}_b^* = \hat{e}_b^* \cdot \hat{e}_c^* = \hat{e}_c^* \cdot \hat{e}_a^* = 0$ 。则

$$\begin{pmatrix} \hat{e}_u \\ \hat{e}_v \\ \hat{e}_w \end{pmatrix} = \frac{1}{a^2} \begin{pmatrix} \hat{e}_1 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{e}_2 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{e}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \hat{e}_h \\ \hat{e}_k \\ \hat{e}_l \end{pmatrix} = \frac{1}{a^2} \begin{pmatrix} \hat{e}_1 \\ \hat{e}_2 \\ \hat{e}_3 \end{pmatrix}$$

$u:v:w=h:k:l$ 。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。

1.5.6.3 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 q ，则

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

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， $a=b=c$ ， $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ ， $V=a^3$ ；并且 $a^*=b^*=c^*=1/a$ ，所以，有

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

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

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

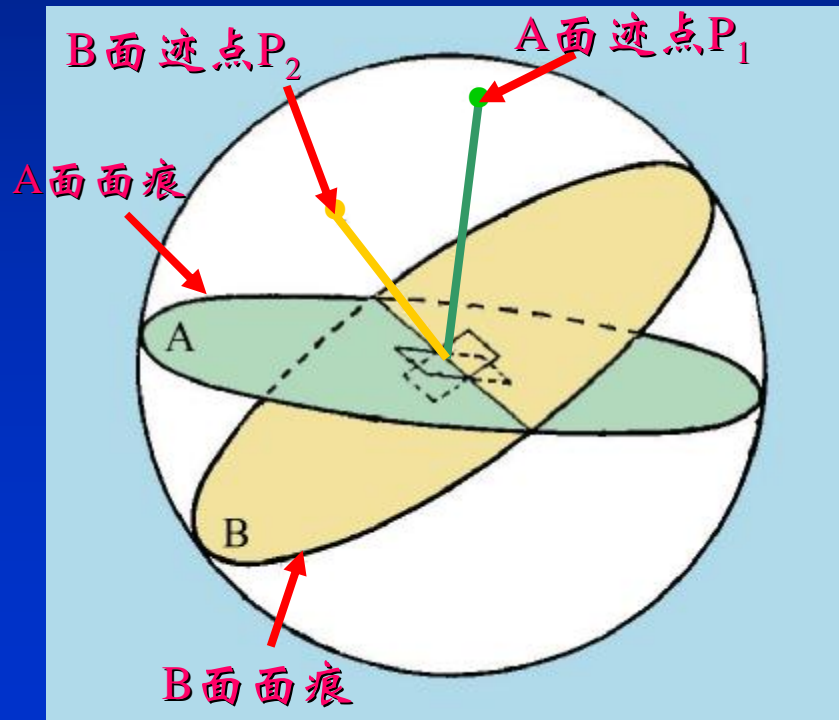


1.6 晶体投影

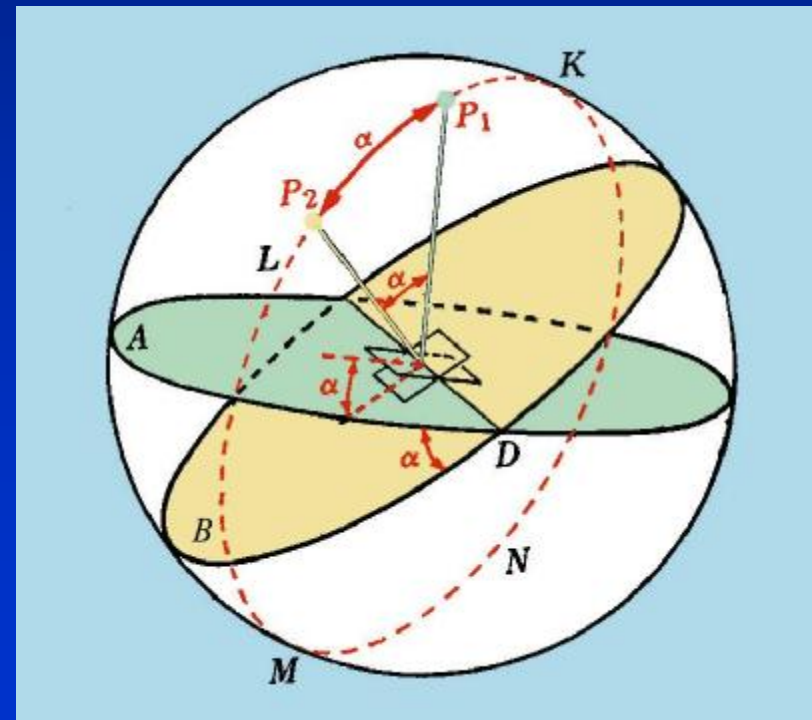
1.6.1 球面投影

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）

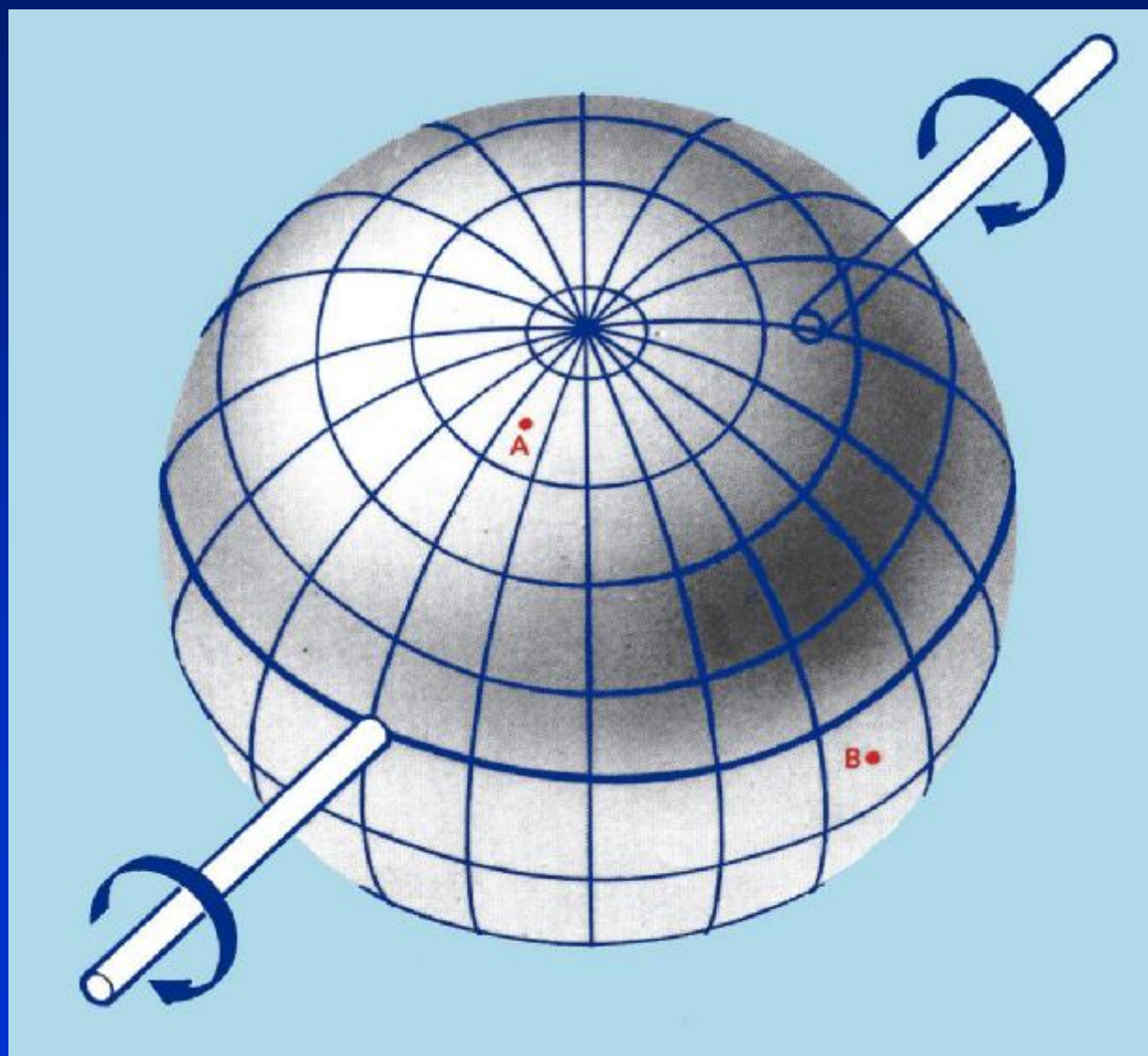


迹点和面夹角的测量



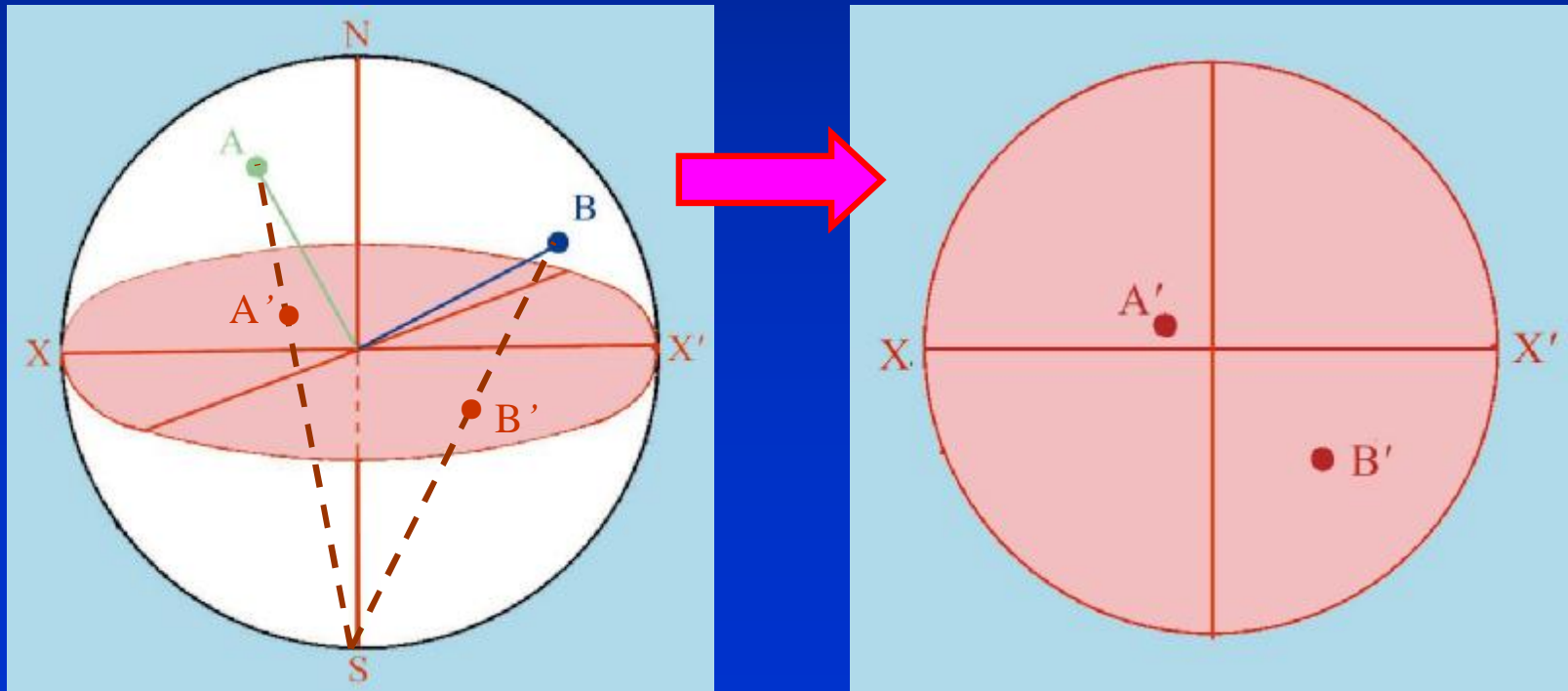
为了方便量度，可以在参考球面上引入参考网格（Reference Grid）。参考网格类似于地球的经线（Longitude）和纬线（Latitude），经线是过球两极点（Two Antipodal Points）的大圆，它们将赤道（Equator）等分为360份（或等间距的不同份数）；纬线是平行于赤道的一系列小圆，相邻两个小圆间夹角相等（一般为一度），这样将经线大圆为360份。

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。



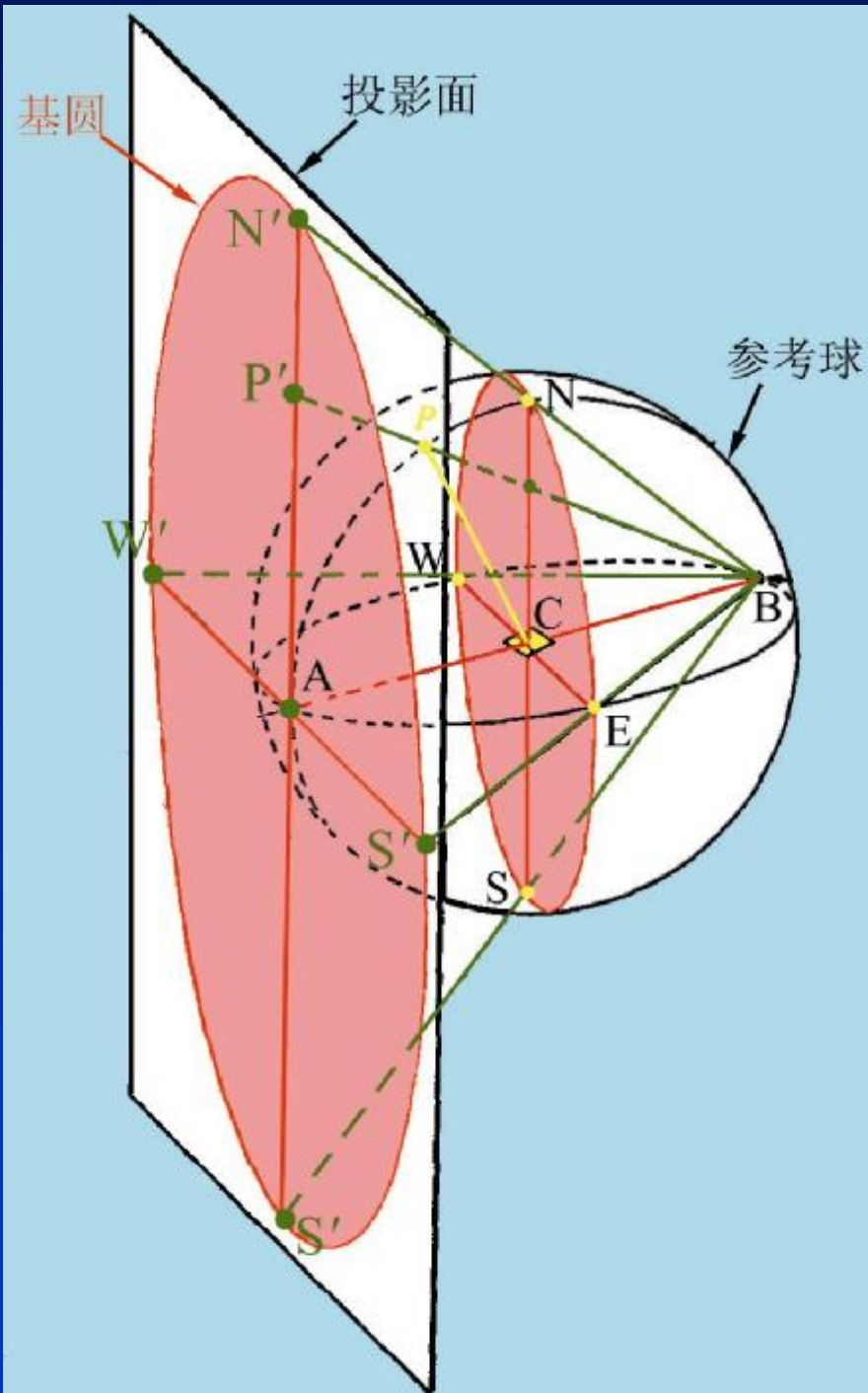
1.6.2 极射赤面投影

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。



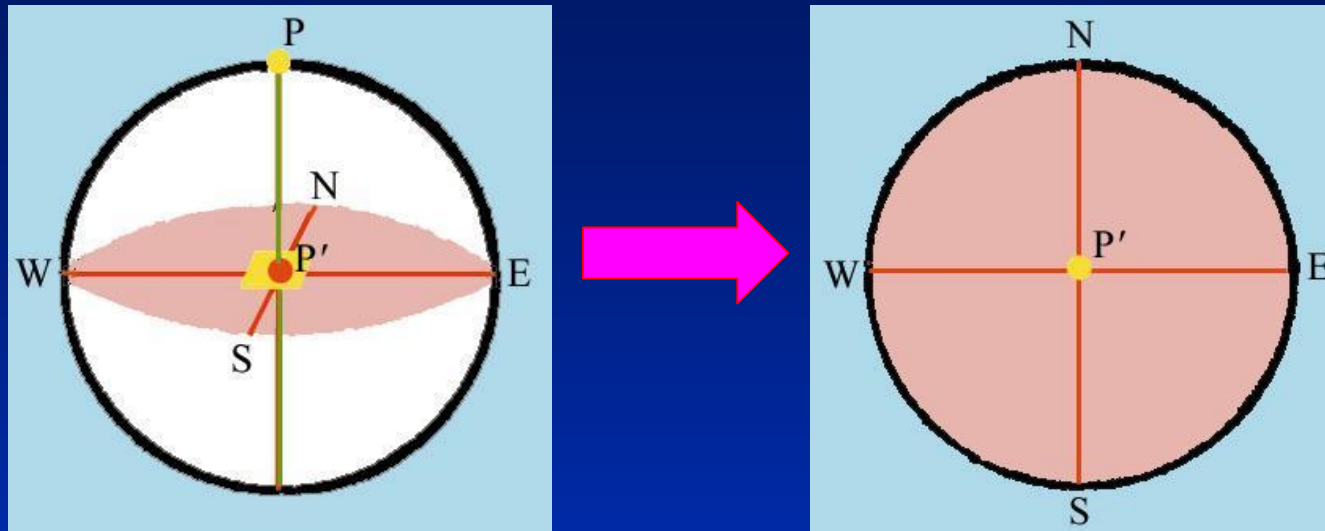
极射投影有时选取和视点另一侧（另一视点）相切的面作为投影面，投影时从视点和球面上极点相连线延长至投影面，所得交点就是投影点。

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。

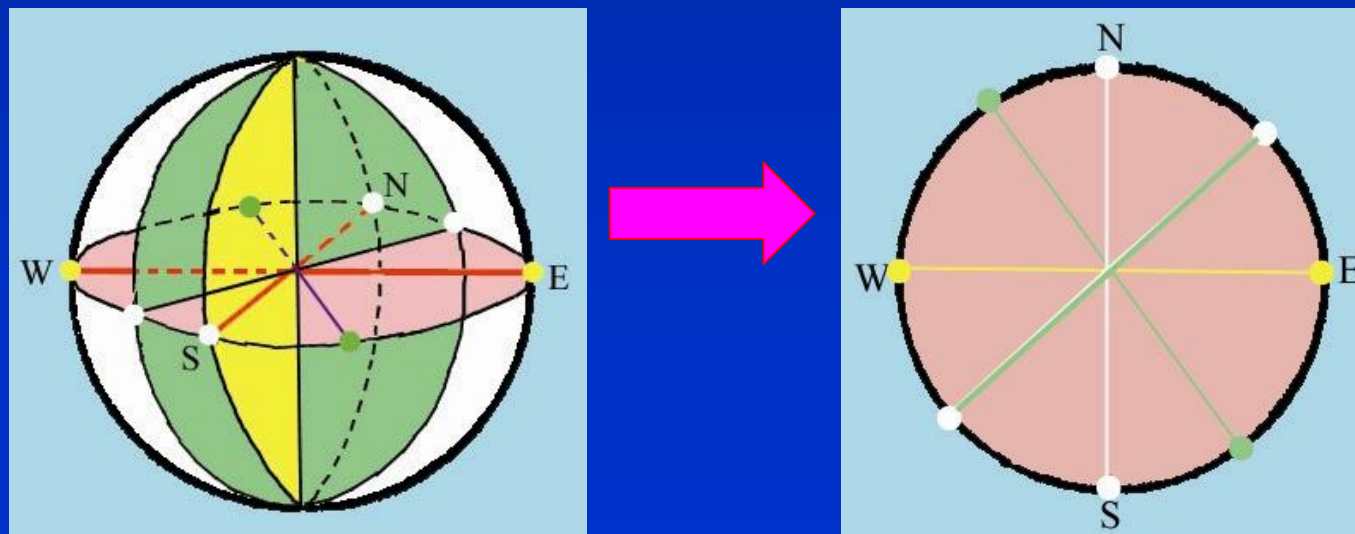


极射投影的一些性质

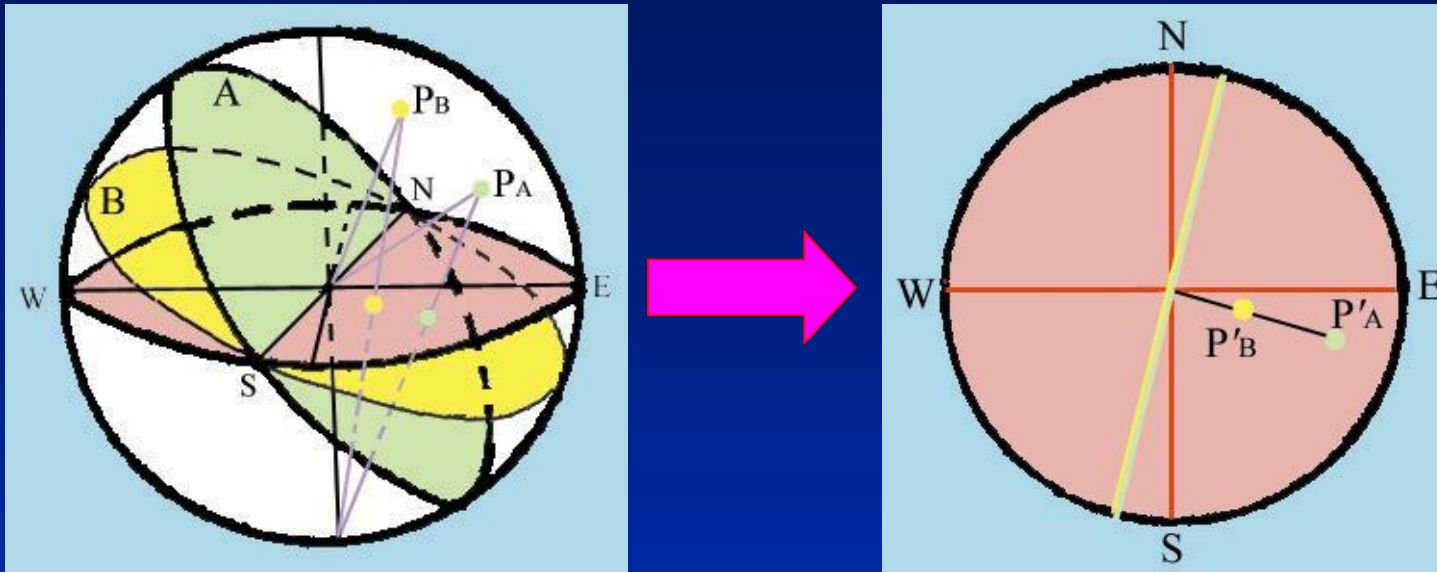
①和赤道面平行的晶面，它的极射投影点必在基圆中心。



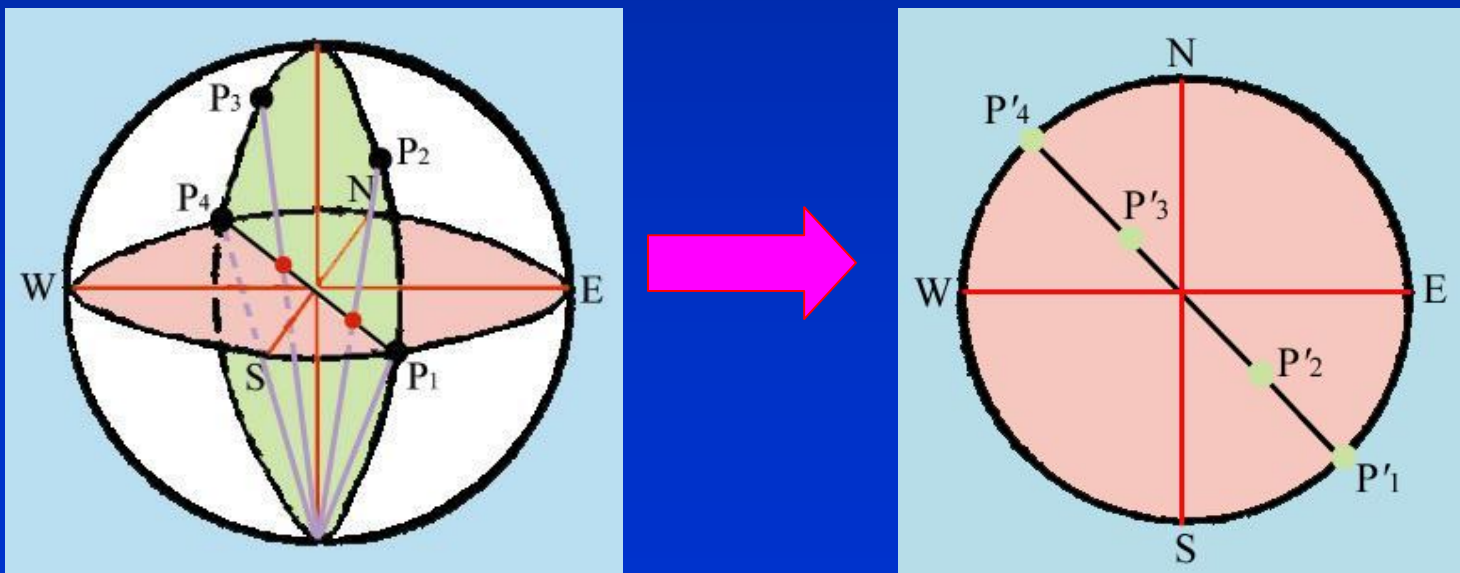
②垂直于赤道面的晶面，它们的极点的投影必在基圆的圆周上。

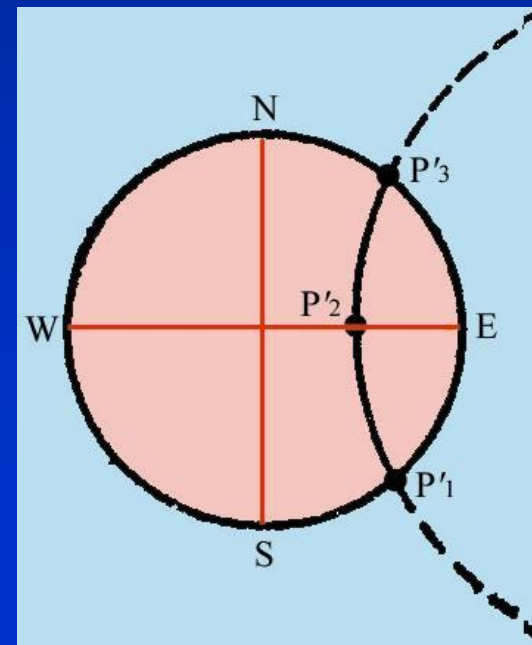
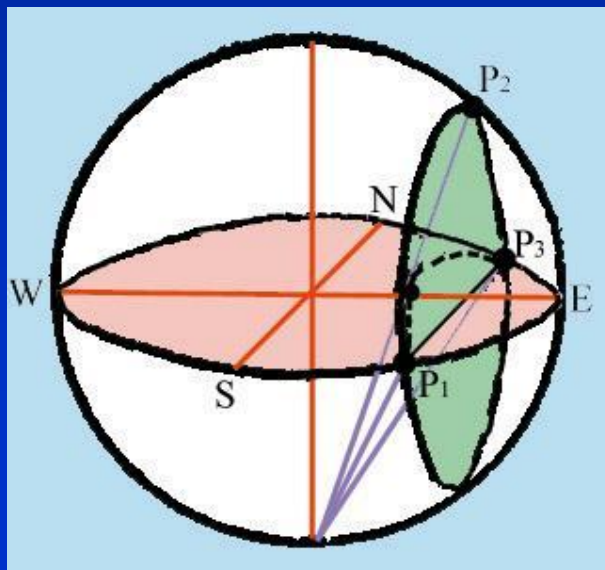
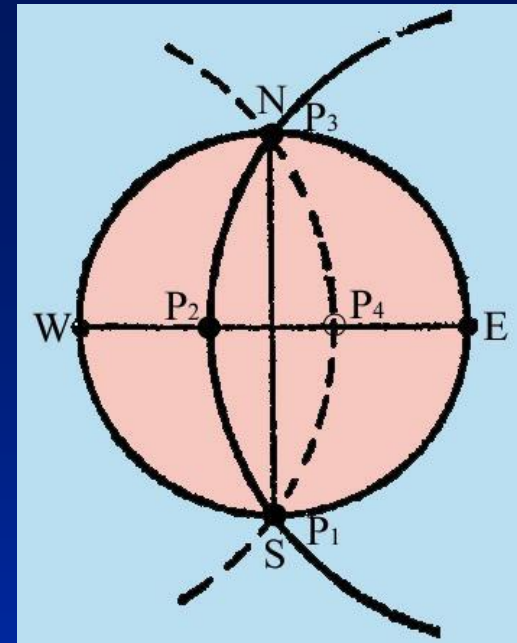
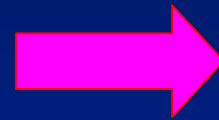
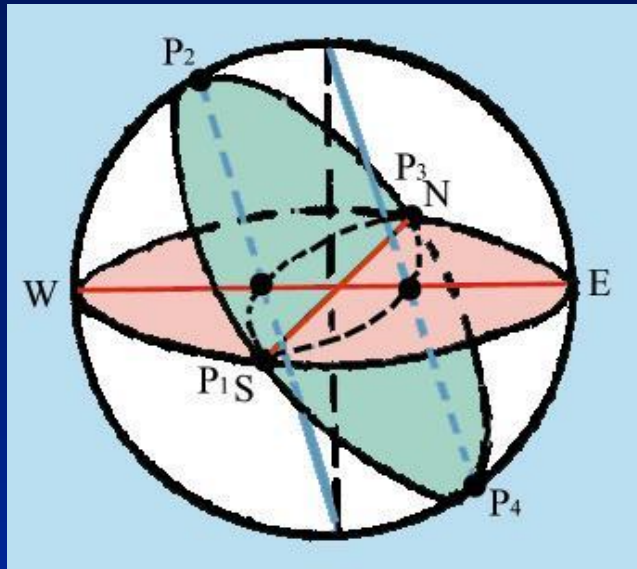


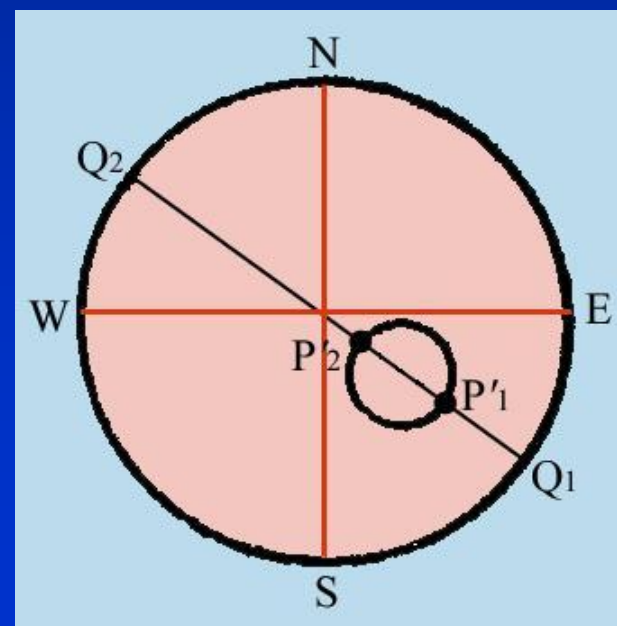
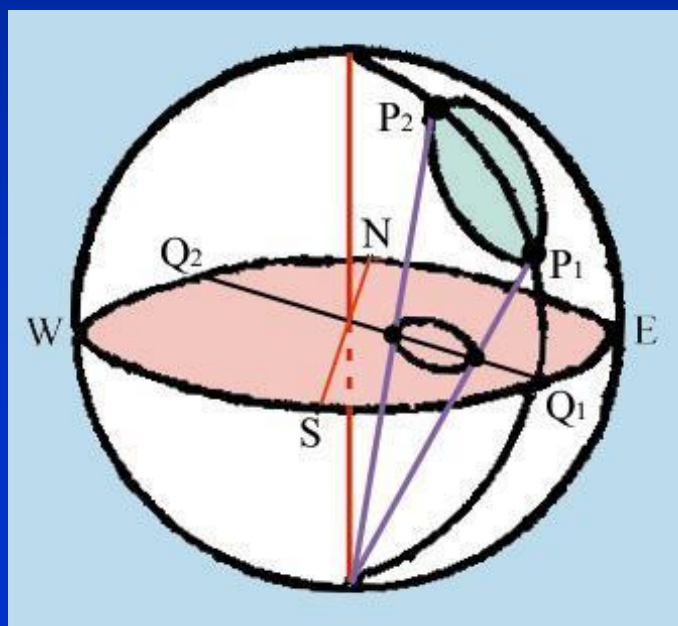
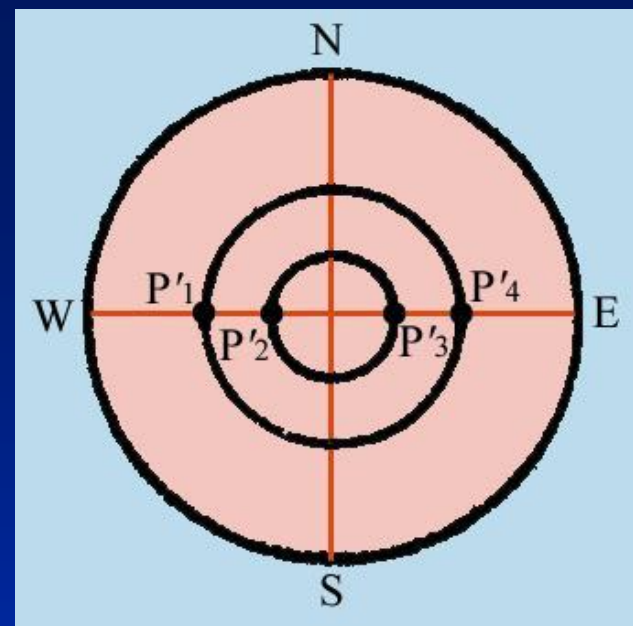
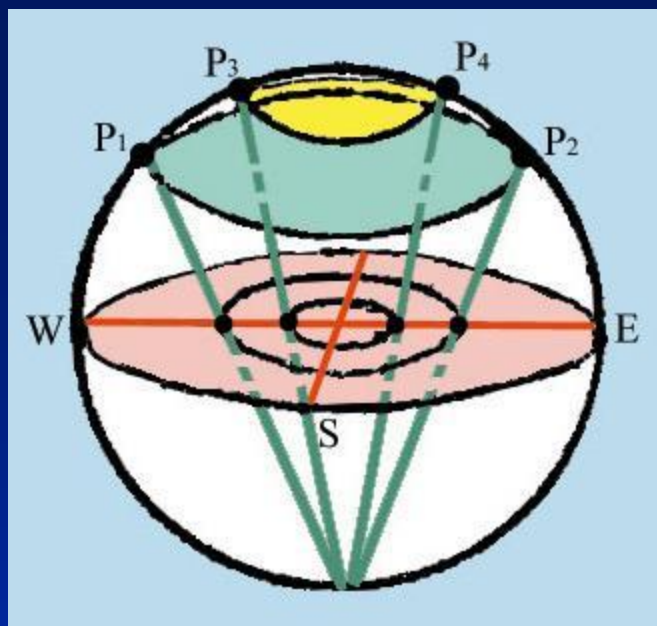
③倾斜晶面的极点的极射投影必在基圆内，晶面法线与投影轴的夹角越小，则投影点距基圆中心越近；反之，就越趋向于基圆圆周。



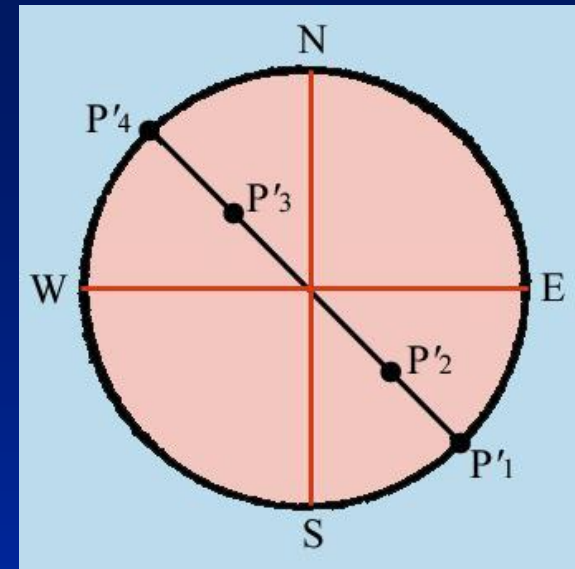
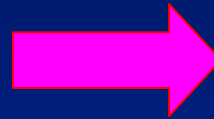
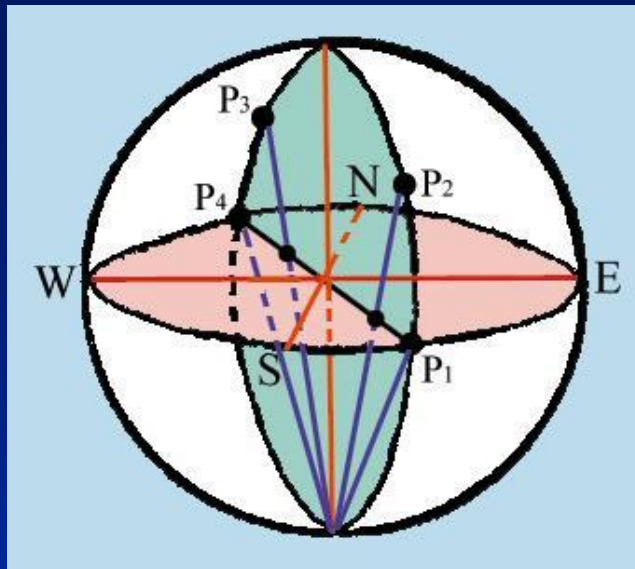
④投影球上的任意圆，不论是大圆或小圆，它们的极射投影一般是圆或圆弧。





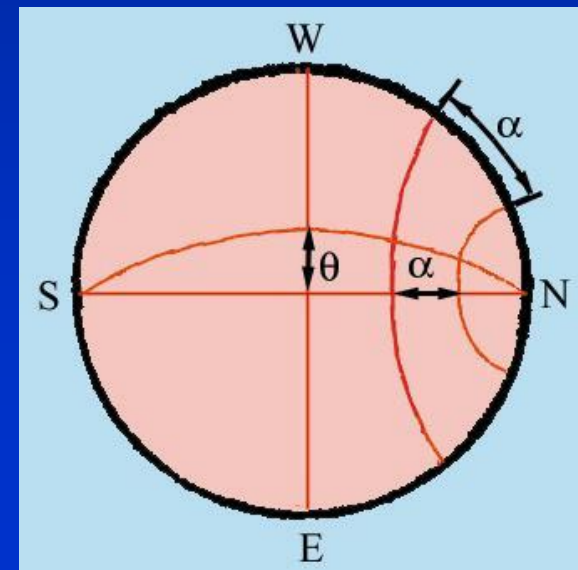
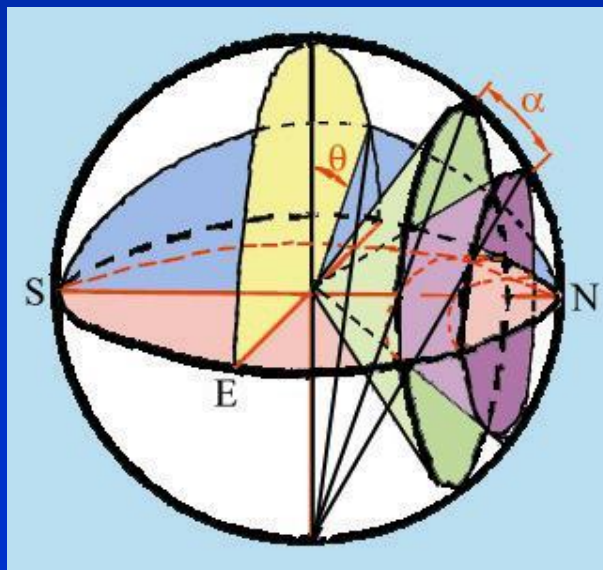


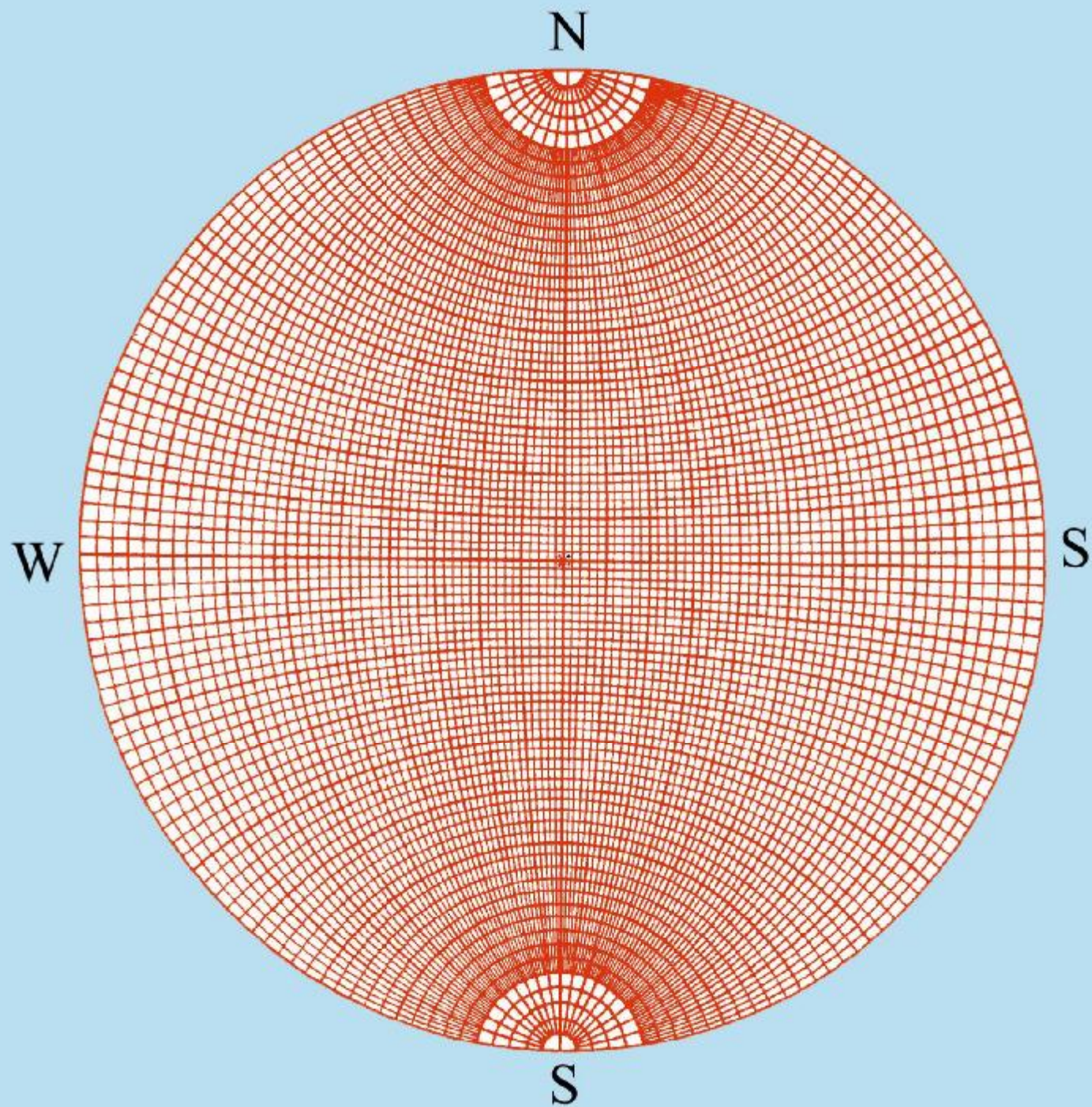
⑤和投影面垂直的大圆的极射投影是过基圆圆心的直线。



1.6.3 吴氏网 (Wulff Net)

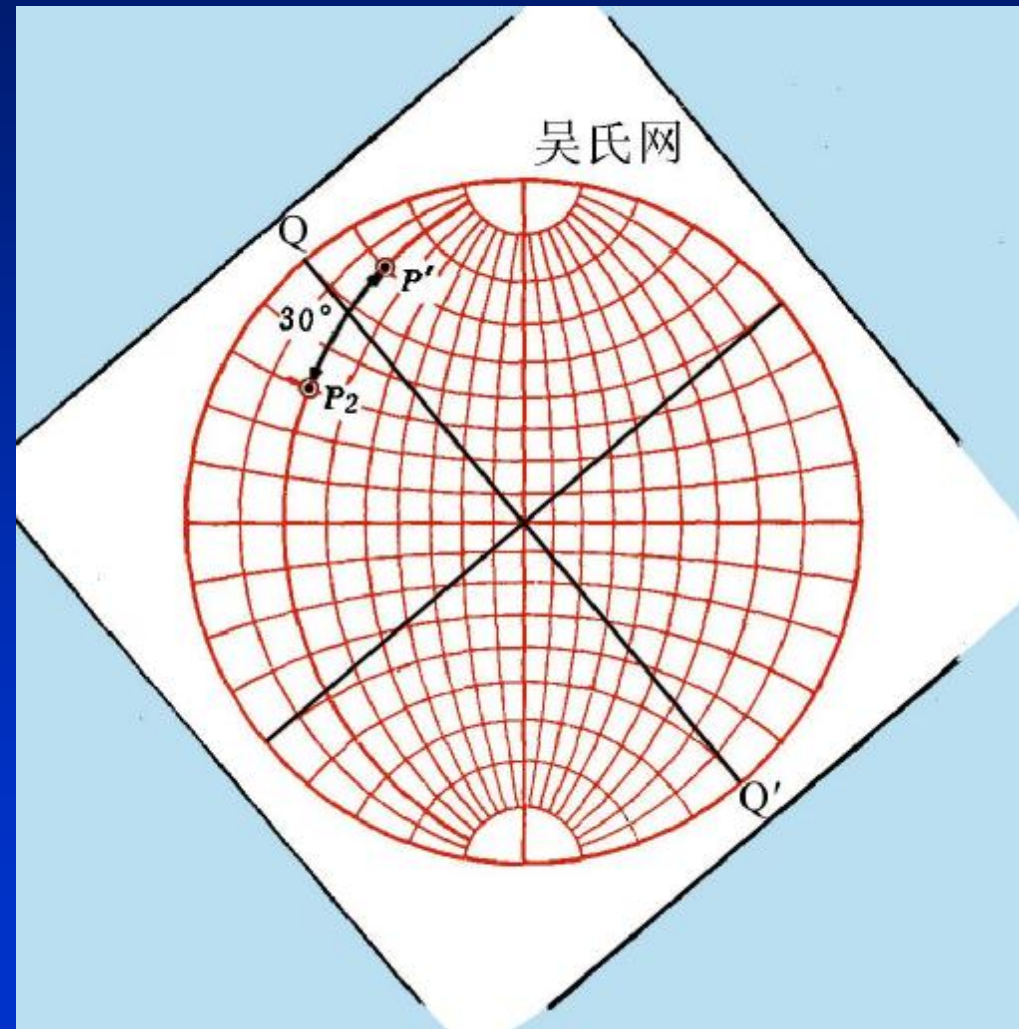
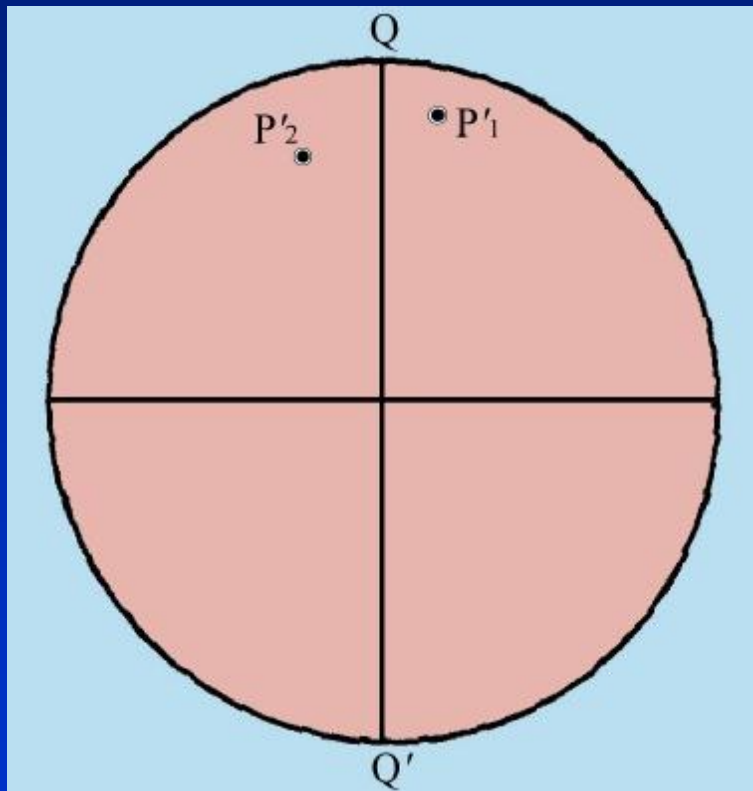
吴氏网是极射投影的量度工具。



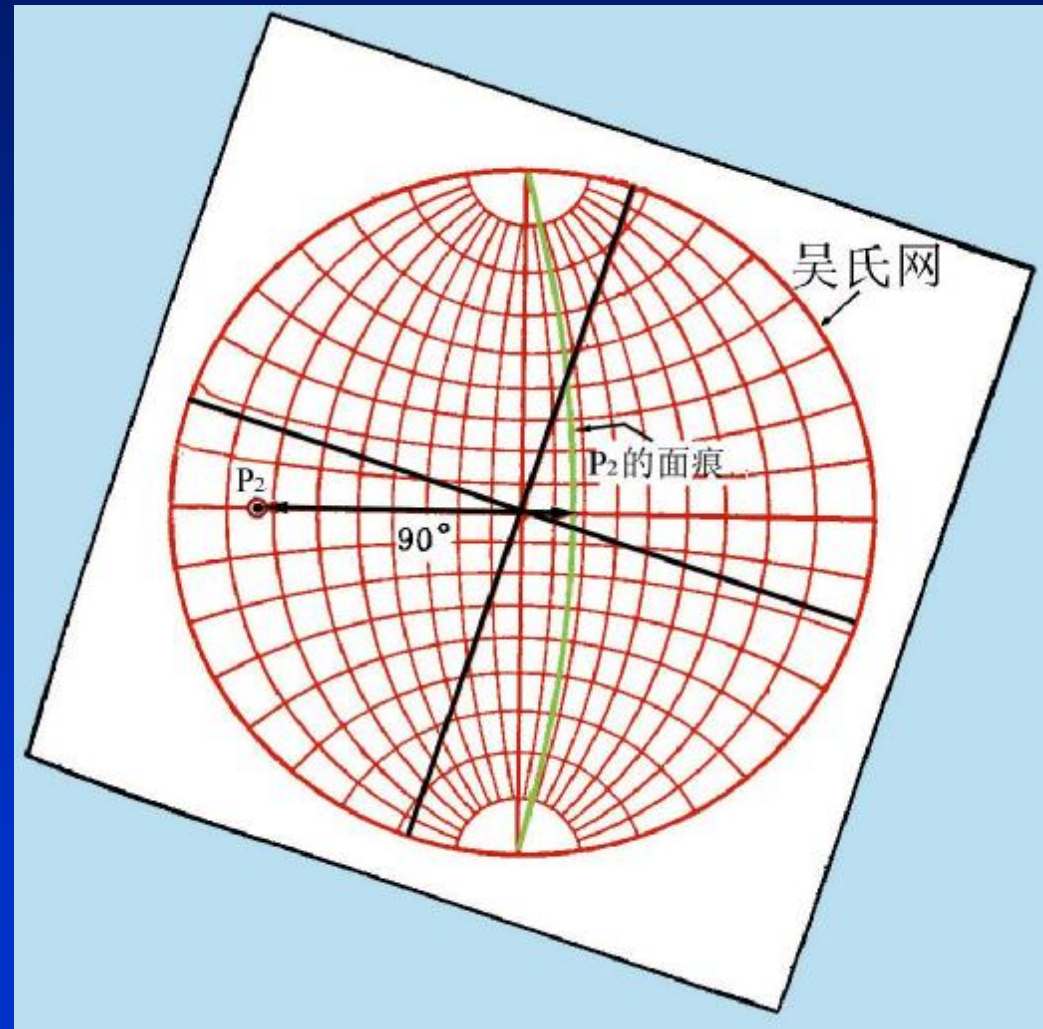
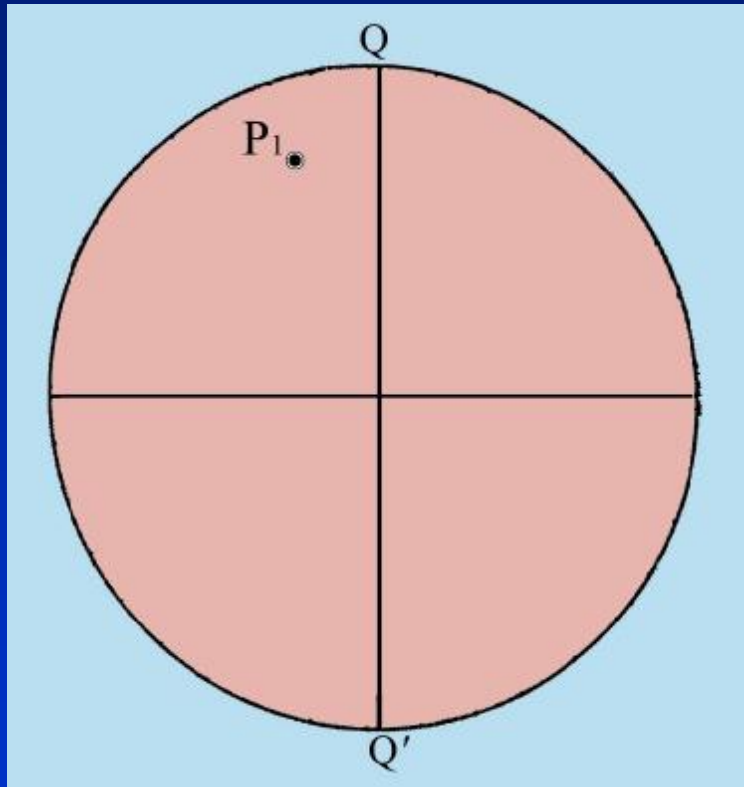


吴氏网应用的例子

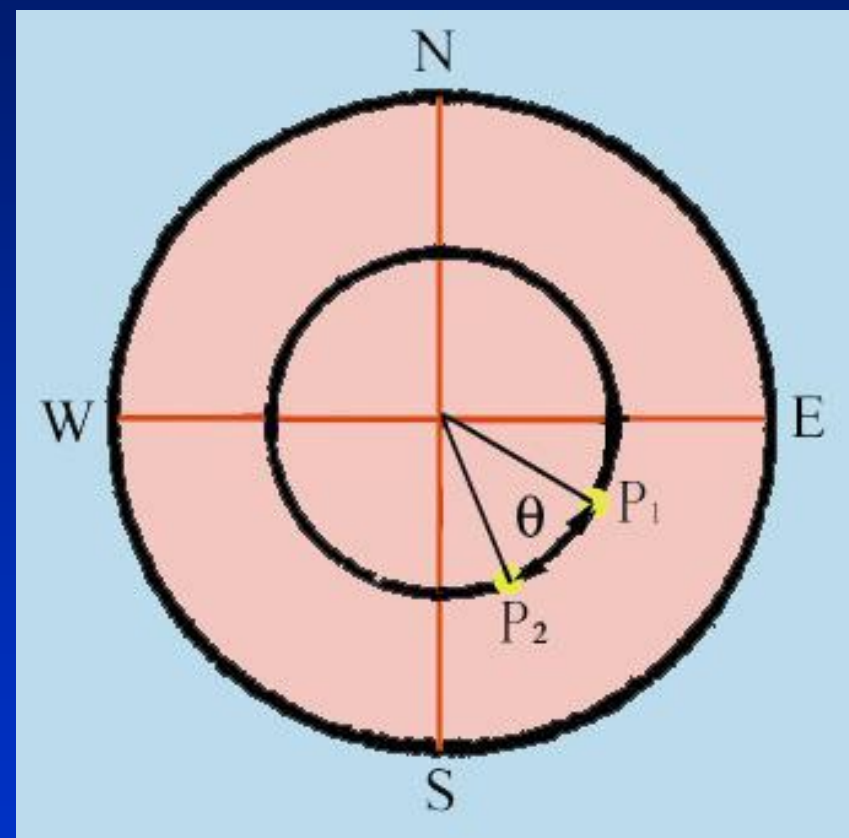
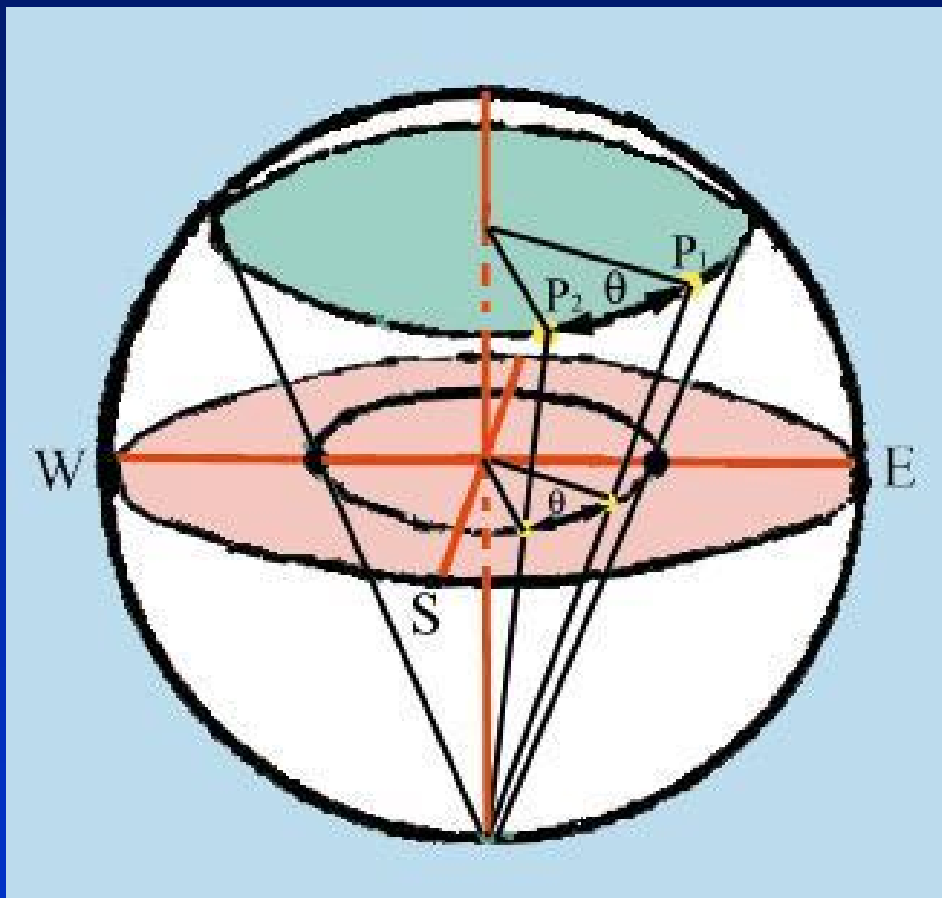
①两极点（或迹点）之间角度测量



②极点所对应的面痕

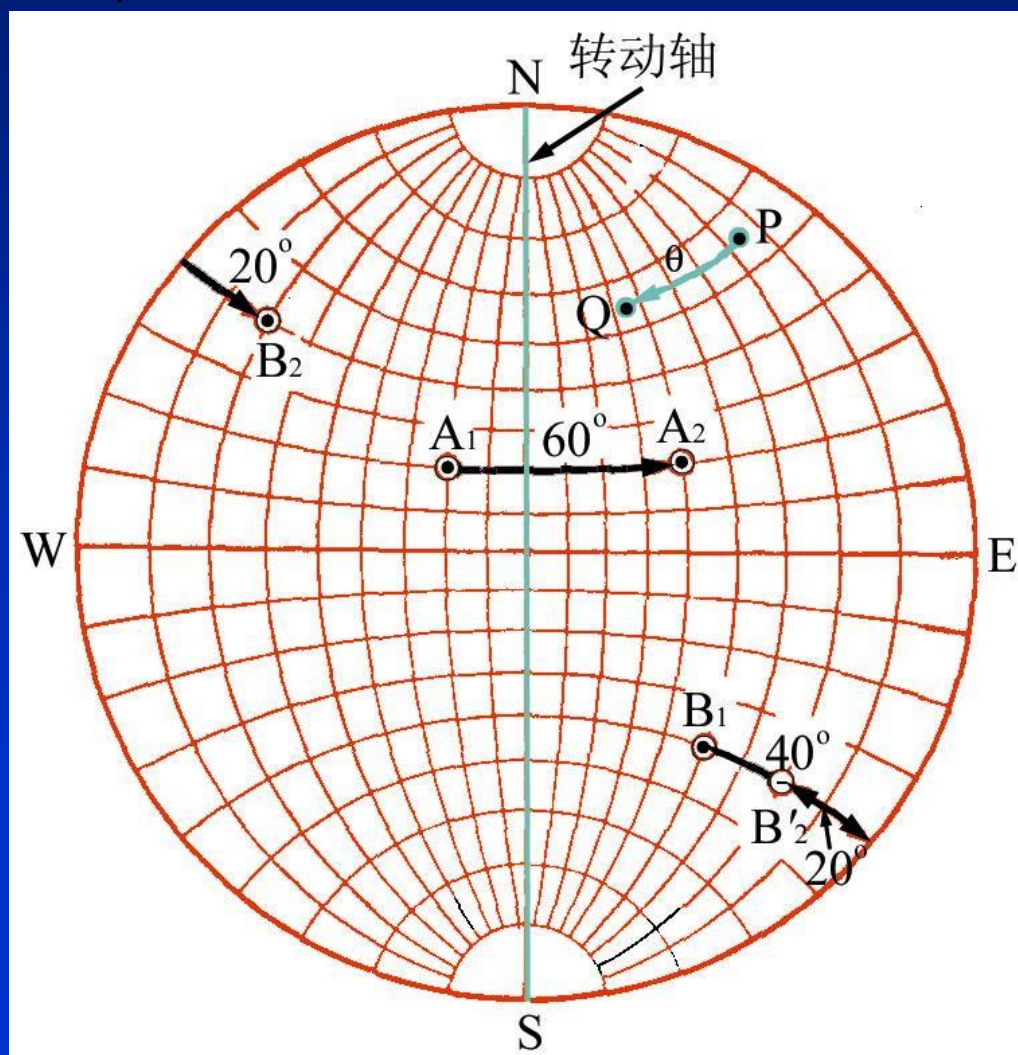
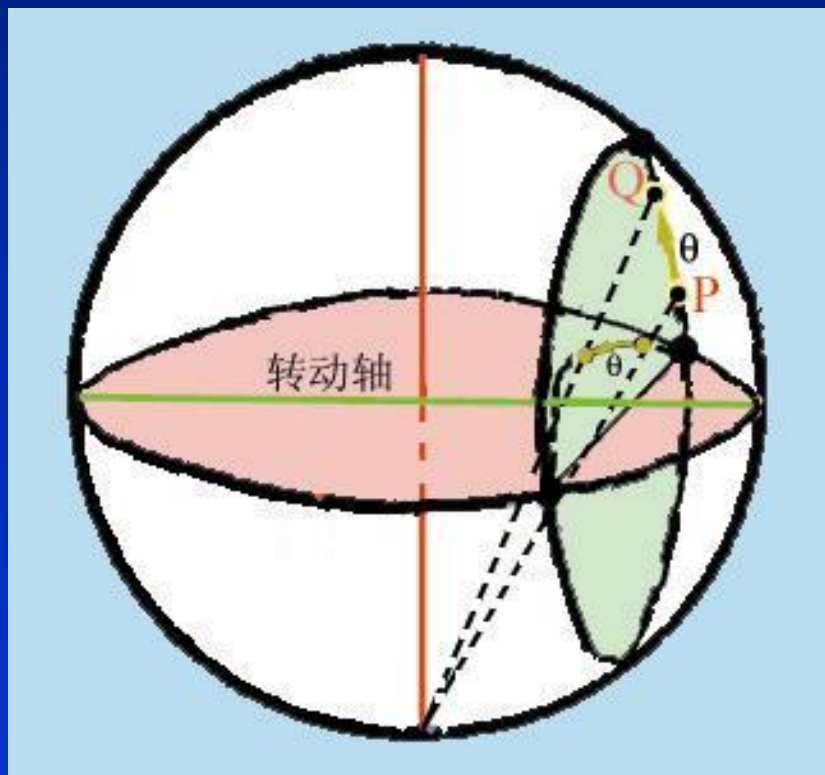


③极点绕投影面法线转动



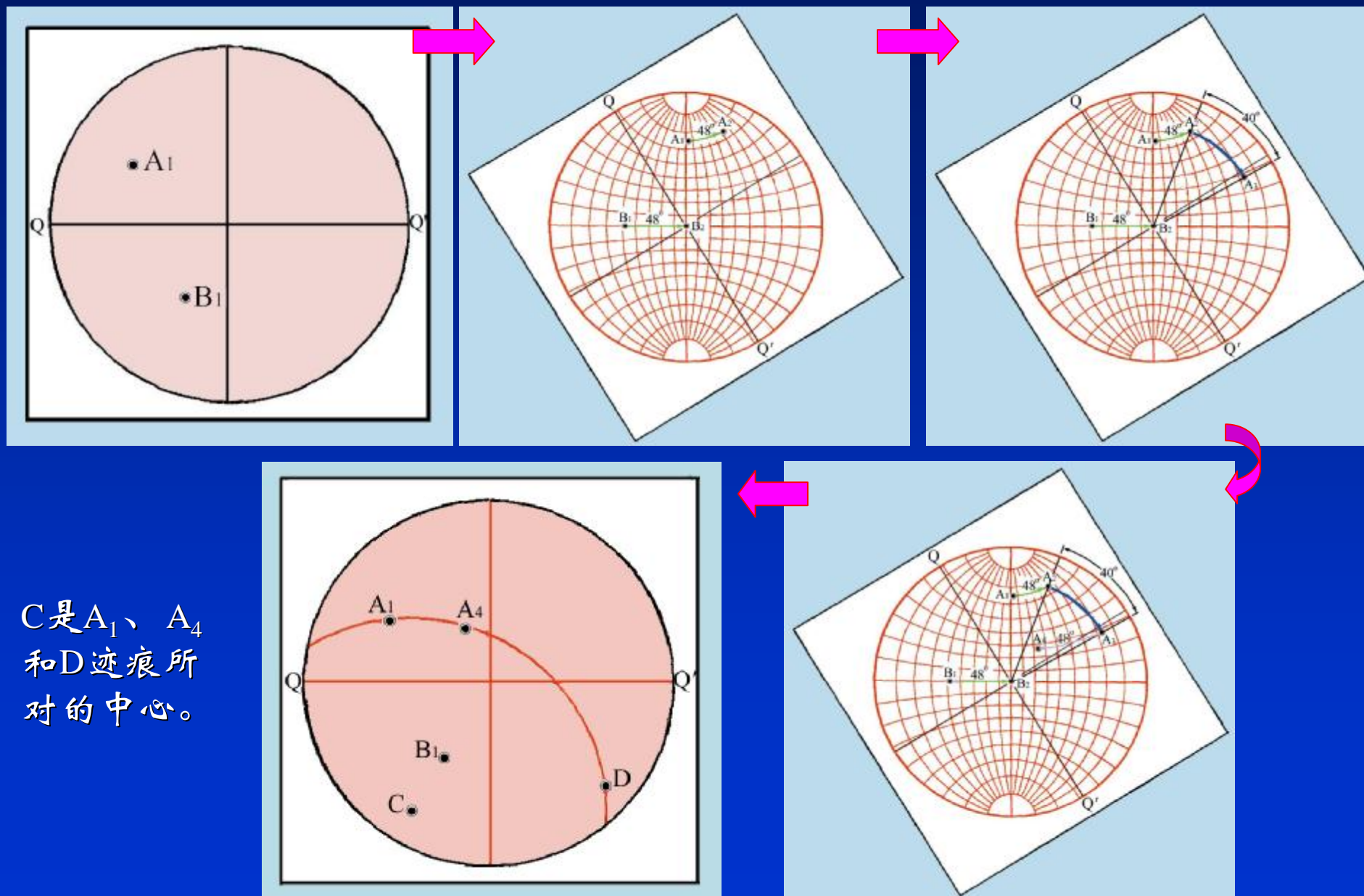
④极点绕位于投影面上的轴转动

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。



⑤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°

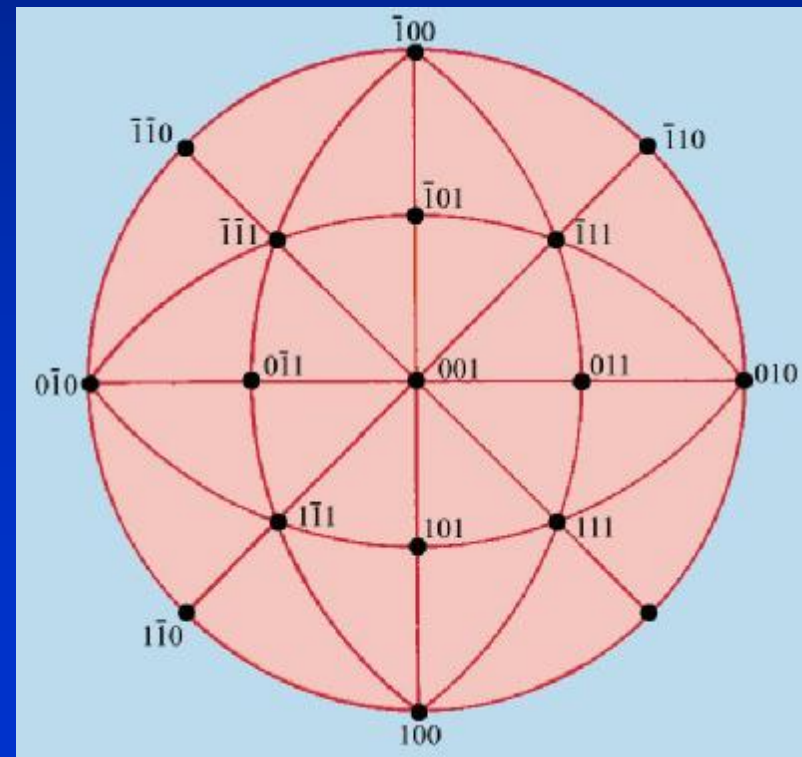


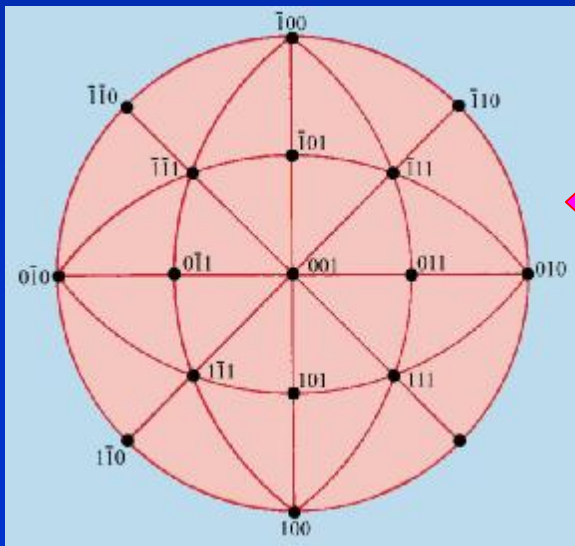
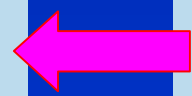
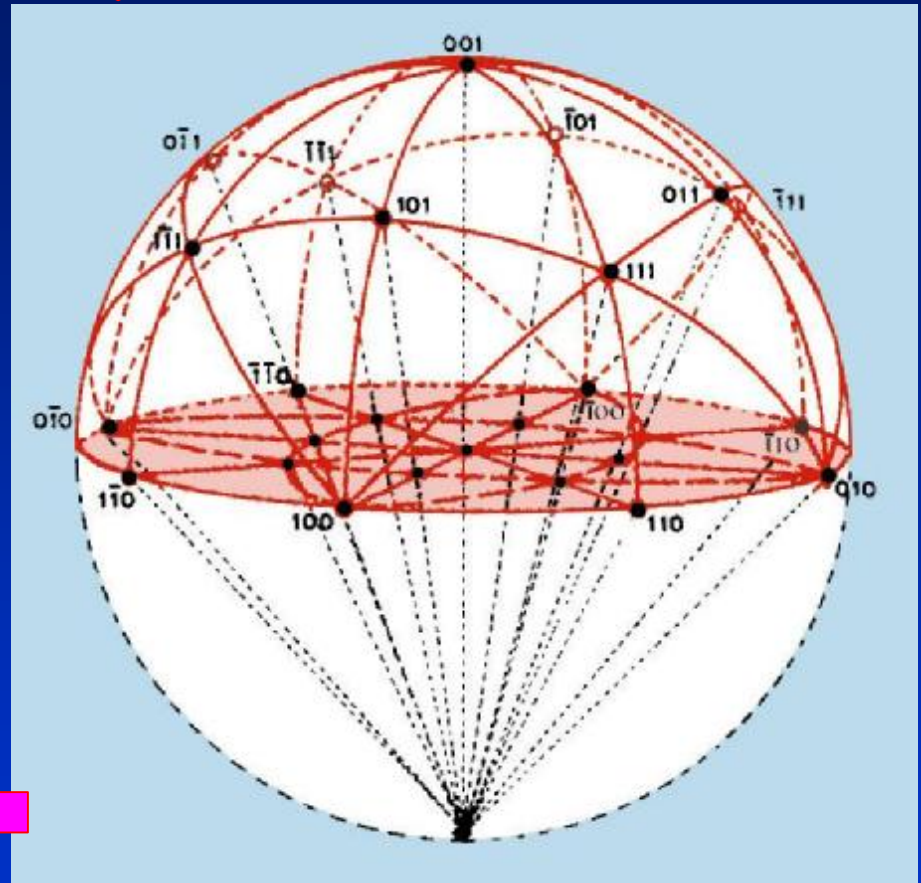
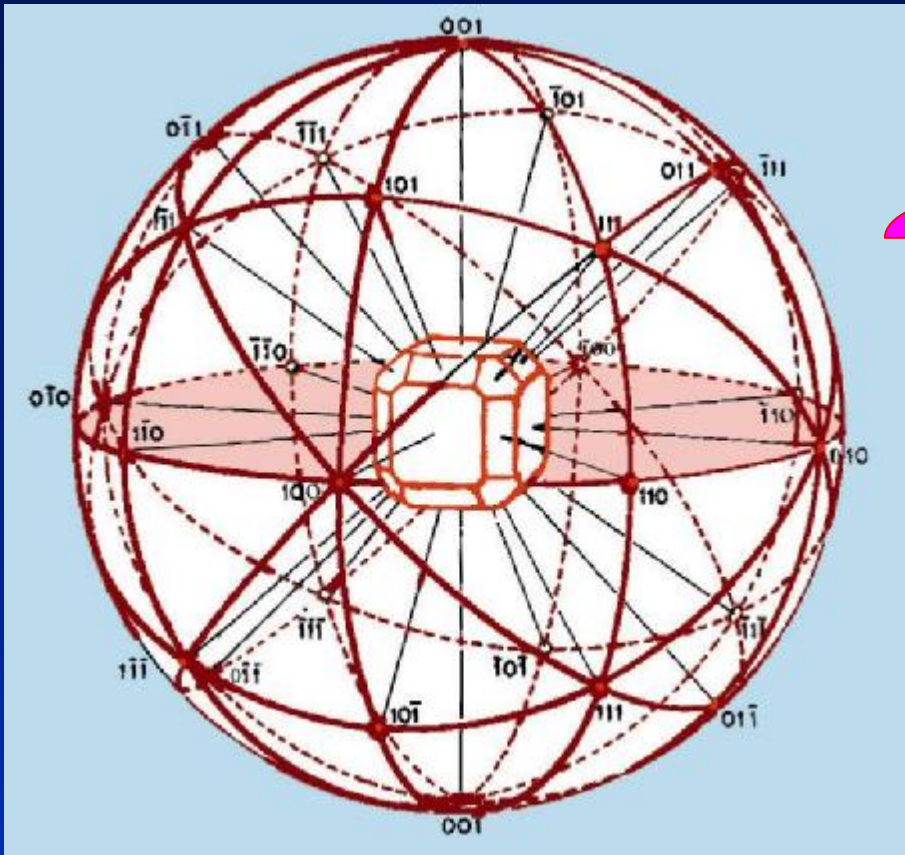
C是 A_1 、 A_4
和D迹痕所
对的中心。

1.6.4 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 (Orientation)，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。

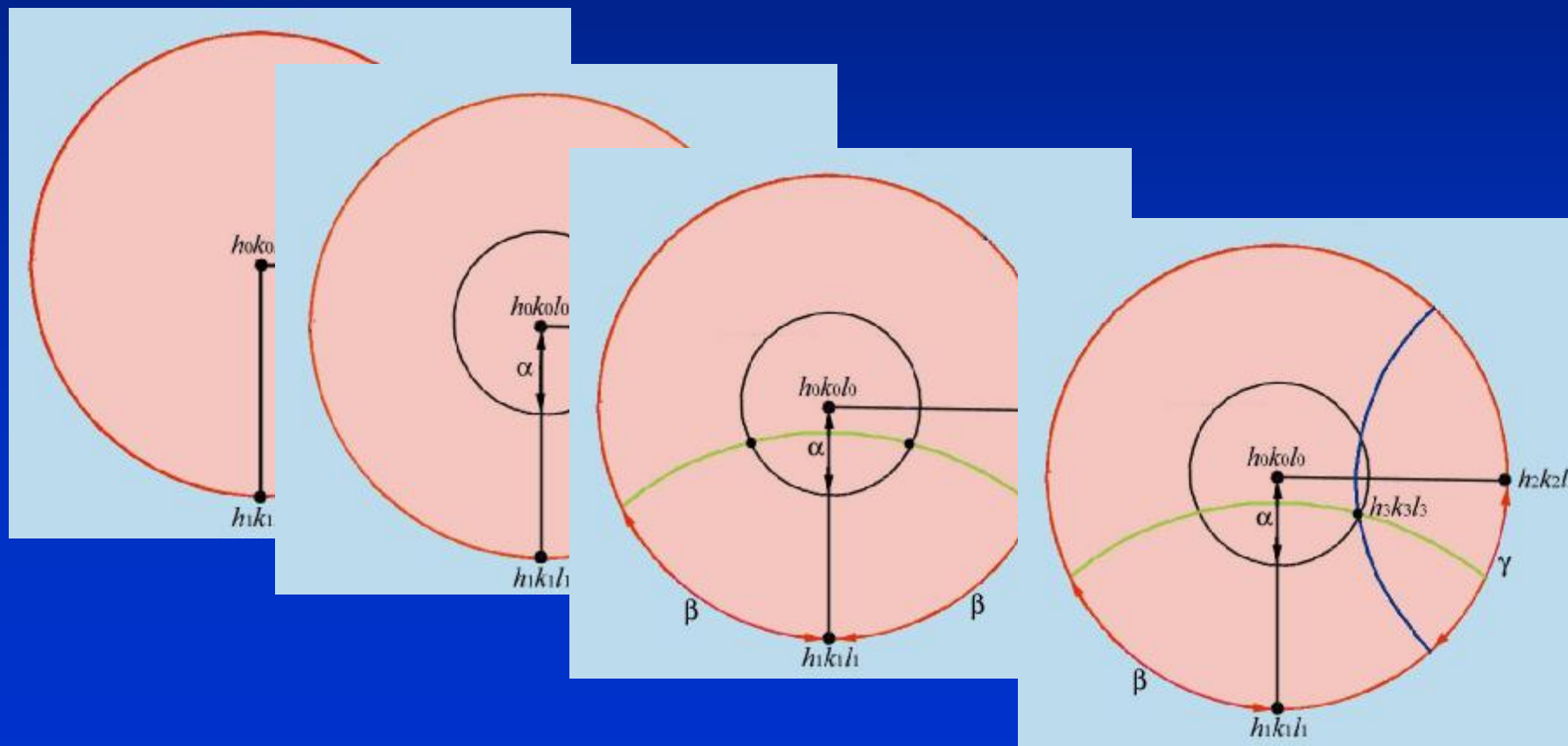
标准极图的例子
立方系001极图





作出 $h_0k_0l_0$ 标准极图：

- ①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，它们在大圆圆周上。
 - ②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 a 、 b 和 g 。
 - ③找出与 $h_0k_0l_0$ 角度为 a 的轨迹，它是以中心为圆心的圆。
 - ④找出与 $h_1k_1l_1$ 角度为 b 的轨迹，它是一条弧。它与 $h_0k_0l_0$ 角度为 a 的圆相交两点。
 - ⑤找出与 $h_2k_2l_2$ 角度为 g 的轨迹，它是一条弧。它与 $h_0k_0l_0$ 角度为 a 的圆也相交两点。
- 三条轨迹相交的点就是所求的极点 $h_3k_3l_3$ 。



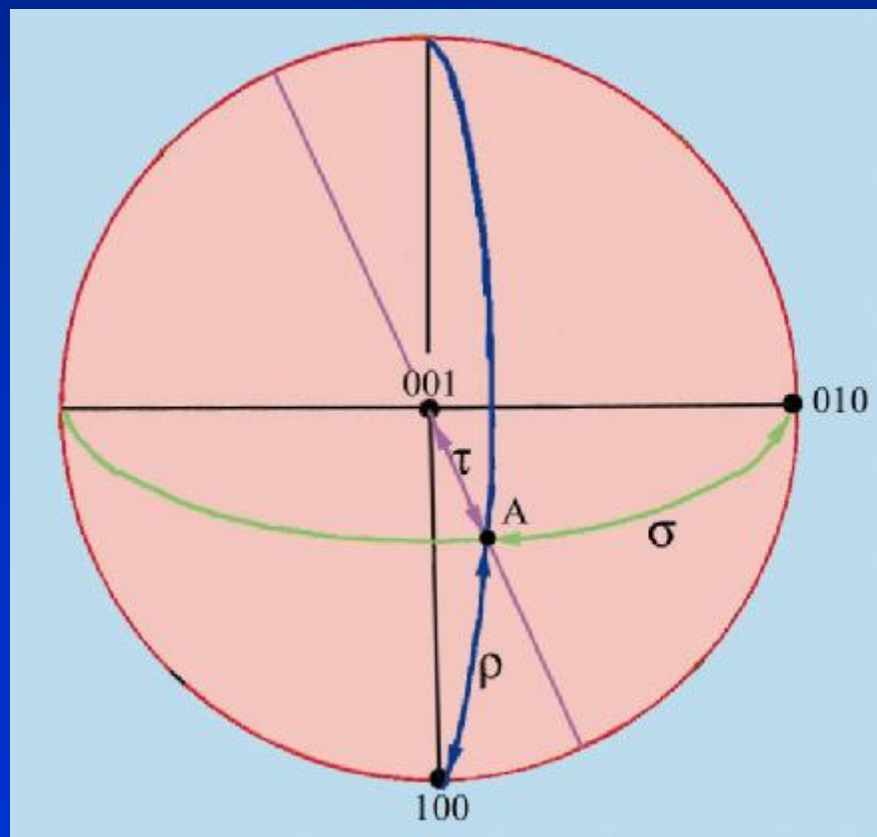
在投影图上任一个极点对应的密勒指数的确定：

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 r 、 s 和 t 。因为

$$h:k:l = a \cdot n:b \cdot n:c \cdot n = a \cos r : b \cos s : c \cos t$$

这样，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。

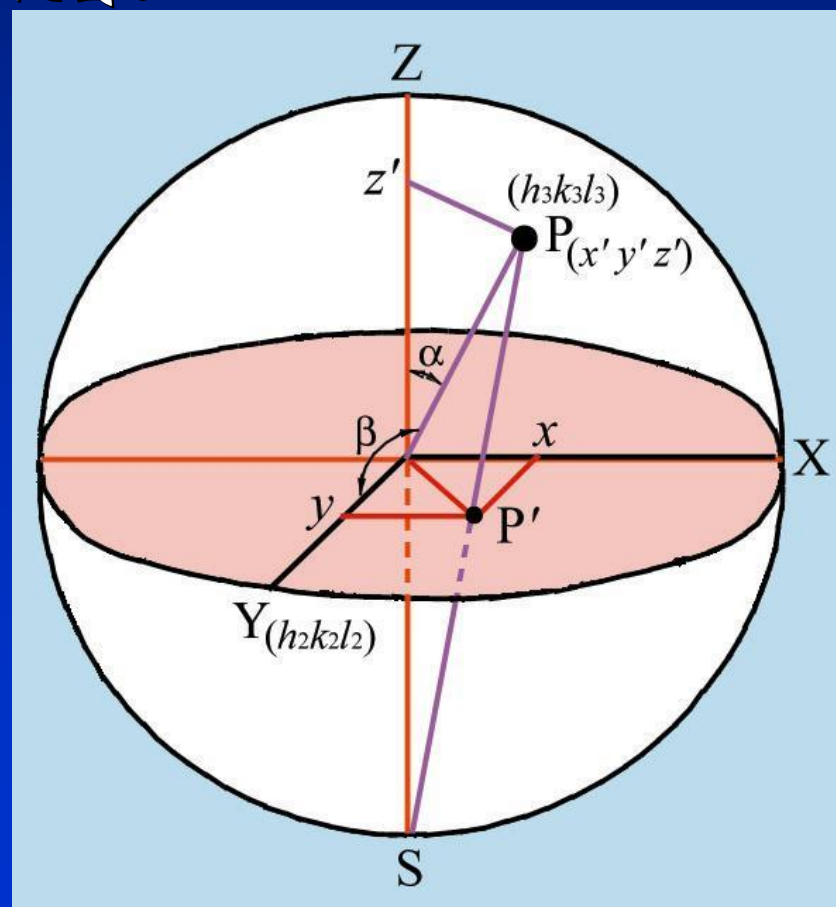


用计算机编程绘制标准极图：

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 $(\sqrt{1 - (\cos^2 a + \cos^2 b)}, \cos b, \cos a)$ ，其中 a 是 $(h_3k_3l_3) \wedge (h_1k_1l_1)$ 的夹角， b 是 $(h_3k_3l_3) \wedge (h_2k_2l_2)$ 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 $1/(1 + \cos a)$ ，所以 P_1 点在投影图上的投影 P'_1 点的坐标 (x, y) 为

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



本章小结

晶体的宏观特性

→ 为何如此?

原子的规则排列

点阵结构

规则排列的差异/特殊性

对称性/要素

规则排列的分类

晶系/布拉菲点阵

三维描述

代数

几何

数字描述:
点阵几何

图形描述:
晶体投影

从外形引入本质;
规则外形
/对称
/各向异性
/均匀

力图总结排列的规律性.
找出以对称性分类。

有哪些?
有多少?
数学问题
我们需要的部分。

7/14,
两者差异?
能否再分?

晶面/向
意义
面间距
法线夹角
倒易点阵

极射赤面
投影
制作/用途