北京航空航天大学学报
Journal of Beijing University of Aeronautics and Astronautics
1991年 第1期　　　　№1 1991

关于FCC和BCC点阵晶面间距计算式的证明

宫秀敏* 朱 勇 周一志

（武汉工学院）

摘 要：复杂立方点阵晶面间距的计算式只与晶面指数的奇偶性有关，本文从数学上证明了这一规律的正确性和普适性。

关键词：面心点阵，体心点阵，面间距，晶面指数。

0 前 言

经几何学推导，人们得出了简单立方点阵的面间距计算式为

$$d^S_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \tag{1}$$

然而元素周期表中的大多数金属元素具有体心立方(BCC)和面心立方(FCC)点阵，在计算这些复杂立方点阵的面间距时，要考虑由体心和面心原子组成的附加原子面。根据文献[1,2]及本作者在长期实践中进行的对比分析计算得出：上述点阵的面间距计算式只与晶面指数的奇偶性有关，而与由体心和面心原子所产生的晶体几何学上的复杂性无关。在BCC点阵中，晶面的三个指数为一偶二奇，即 $h+k+l=$ 偶数时，面间距计算式的形式与简单立方点阵相同(式1)；当三个指数为二偶一奇或都是奇数，即 $h+k+l=$ 奇数时，则面间距计算式为

$$d^B_{hkl} = \frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \tag{2}$$

在FCC点阵中，当晶面的三个指数都是奇数时，其面间距计算式的形式与简单立方点阵相同(式1)；当三个指数为二偶一奇或一偶二奇时，则面间距计算式为

$$d^F_{hkl} = \frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \tag{3}$$

本文旨在通过数学证明，确认FCC和BCC点阵的晶面间距计算规律的正确性和普适性。

本文于1990年8月11日收到
*本文作者宫秀敏、朱勇、周一志同志系校友

1　FCC和BCC点阵晶面间距计算规律的数学证明

前述FCC和BCC晶面间距的计算规律可以借助作图法通过大量的实际计算而得出，但是鉴于用作图法求高指数晶面的面间距时，操作过程较复杂，并且准确性和可靠性差，因此我们通过数学方法证明上述规律的可靠性。

1.1　FCC点阵面间距计算规律的证明

以晶胞的三个晶轴为x,y,z轴，以晶胞的边长为坐标轴上的单位长度，则晶体中位于顶角处原子的坐标(x,y,z)必有x,y,z为整数；反之，任意三个整数x,y,z构成的坐标(x,y,z)的相应位置必是一个顶角原子。

位于晶胞各面的面心原子的坐标(x,y,z)中恰好有一个是整数，而其它两个是分母为2的既约分数；反之，任何具有这种特性的三数x,y,z所构成的坐标(x,y,z)必是一个面心原子的位置。

对于任何一个晶面指数$(h\ k\ l)$都存在着三种情况：①h,k,l均为奇数；②h,k,l中有两个奇数；③h,k,l中有一个奇数。

因晶面$(h\ k\ l)$在三个晶轴x,y,z上的截距必定形似

$$\frac{c}{h},\frac{c}{k},\frac{c}{l}\qquad (c\text{为任意实数})$$

这时相应晶面的方程为

$$\frac{x}{\frac{c}{h}}+\frac{y}{\frac{c}{k}}+\frac{z}{\frac{c}{l}}=1$$

即

$$hx+ky+lz=c \tag{4}$$

特别$c=1$必在其中。

若方程(4)确定的晶面中有顶角原子，则c必须是整数。

若由方程(4)确定的晶面中有面心原子，如$[(2l_1+1)/2,(2l_2+1)/2,l_3]$，$l_1,l_2,l_3$为整数，则它应满足方程。即

$$h\cdot\frac{2l_1+1}{2}+k\cdot\frac{2l_2+1}{2}+ll_3=c$$

$$\Rightarrow\quad (hl_1+kl_2+ll_3)+\frac{h+k}{2}=c$$

①当h,k,l均为奇数时，c必须是整数。

②当h,k,l中有两个奇数或一个奇数时，c可能是整数，也可能是分母为2的既约分数。

(1) 若h,k,l均为奇数，这时晶面方程必形似

$$hx+ky+lz=m\qquad (m\text{是整数}) \tag{5}$$

性质1　对任何一个整数m，平面方程(5)必是晶面方程。

证明　因$hx+ky+lz=1$是晶面方程，对于在这一晶面上的任一原子(x_0,y_0,z_0)有

$$hx_0+ky_0+lz_0=1$$

这个原子可能是顶角处原子，也可能是面心原子，$\Rightarrow h(mx_0)+k(my_0)+l(mz_0)=m$.

当m是偶数时，(mx_0,my_0,mz_0)必定是顶角原子；当m是奇数时，若(x_0,y_0,z_0)是顶角原子，则(mx_0,my_0,mz_0)同样是顶角原子。若(x_0,y_0,z_0)是面心原子，则(mx_0,my_0,mz_0)同样是面心原子。

所以方程(5)是晶面方程。

证毕

这时晶面$(h\ k\ l)$的全体晶面方程形似

$$hx+ky+lz=m \qquad (m\text{ 取一切整数})$$

而任意两个相邻的晶面

$$hx+ky+lz=m$$

与

$$hx+ky+lz=m+1$$

的晶面间距 $d_{hkl}^{F}=\dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ （a 为点阵常数）。

(2) 若 h,k,l 三个中有两个奇数或只有一个奇数

性质 2 对于任何一个整数 m，方程

$$hx+ky+lz=m \tag{6}$$

是晶面方程。

证明 因 $hx+ky+lz=m$ 是晶面方程，若

①顶角处原子(x_0,y_0,z_0)在这晶面上，与上面同样可得(mx_0,my_0,mz_0)是顶角处原子，且在平面 $hx+ky+lz=m$ 上，所以这个平面是晶面；

②$hx+ky+lz=1$ 上只有面心原子，设(x_0,y_0,z_0)是其中的一个面心原子(x_0,y_0,z_0 中一个是整数，其它两个是分母为 2 的既约分数)，则有

$$h(mx_0)+k(my_0)+l(mz_0)=m$$

当 m 为偶数时，(mx_0,my_0,mz_0)是顶角处原子，所以方程(6)是晶面方程。若 m 为奇数时，(mx_0,my_0,mz_0)仍为面心原子，所以方程(6)仍是晶面方程。

证毕

性质 3 对于任何一个整数 m，方程

$$hx+ky+lz=\frac{2m+1}{2} \tag{7}$$

是晶面方程。

证明 ①若 h,k,l 中有两个奇数，设 h,k 是奇数，l 是偶数，则面心原子$\left(\frac{1}{2},1,\frac{1}{2}\right)$在晶面

$$hx+ky+lz=\frac{2k+(h+l)}{2}$$

上。假设$(2m+1)-(2k+h+l)=2n$，由性质 2 知，$hx+ky+lz=n$ 是晶面方程。设原子(x_0,y_0,z_0)在晶面上，则不论这是顶角原子(x_0,y_0,z_0 均是整数)还是面心原子(x_0,y_0,z_0 中有一个是整数，二个是分母为 2 的既约分数)，$\left(x_0+\frac{1}{2},y_0+1,z_0+\frac{1}{2}\right)$仍是原子，且满足关系式

$$h\cdot\left(x_0+\frac{1}{2}\right)+k\cdot(y_0+1)+l\cdot\left(z_0+\frac{1}{2}\right)=n+\frac{2k+h+l}{2}=\frac{2m+1}{2}$$

所以方程(7)是晶面方程。

② 若 h,k,l 中有一个是奇数，不妨设 k,l 为偶数，h 为奇数，则面心原子$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},1\right)$在晶面

$$hx+ky+lz=\frac{h+k+2l}{2}$$

上，假设$(2m+1)-(h+k+2l)=2s$，设原子(x_0,y_0,z_0)在晶面 $hx+ky+lz=s$ 上，与上同理，

$\left(x_0+\frac{1}{2},y_0+\frac{1}{2},z_0+1\right)$仍是原子，且满足关系式

$$h\cdot\left(x_0+\frac{1}{2}\right)+k\cdot\left(y_0+\frac{1}{2}\right)+l\cdot(z_0+1)=s+\frac{h+k+2l}{2}=\frac{2m+1}{2}$$

所以方程(7)是晶面方程。

综合性质2和3得到以下结论：当h,k,l中有二个奇数或只有一个奇数时，晶面$(h\ k\ l)$的全体晶面方程形似

$$hx+ky+lz=\frac{m}{2}\qquad(\text{对一切整数 } m)$$

而两个任意相邻的晶面

$$hx+ky+lz=\frac{m}{2}$$

与

$$hx+ky+lz=\frac{m+1}{2}$$

的晶面间距$d_{hkl}=\frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$.

1.2 BCC点阵晶面间距计算规律的证明

以晶胞的三个晶轴为x,y,z轴，以晶胞的边长为坐标轴上的单位长度，则晶体中位于顶角处各原子所在位置的坐标(x,y,z)必有x,y,z为整数；反之，任意三个整数x,y,z构成的坐标(x,y,z)相应位置上必是上述形式的一个原子。

位于晶胞体心处的原子的坐标必为$[(2l_1+1)/2,(2l_2+1)/2,(2l_3+1)/2]$，其中$l_1,l_2,l_3$为整数；反之，任意三个整数$l_1,l_2,l_3$构成的上述坐标处必有一个体心原子。

在体心立方中，由原子排列构成的许多不同方位的晶面，设其中任意一个晶面的晶面指数为$(h\ k\ l)$，由于h,k,l被选择的是最小的简单整数，所以它们的最大公约数是1，这样，这三个数只有三种可能选择：①h,k,l均是奇数；②h,k,l中恰有二个奇数；③h,k,l中只有一个奇数.

因晶面$(h\ k\ l)$在三个晶轴x,y,z上的截距必定形似

$$\frac{c}{h},\ \frac{c}{k},\ \frac{c}{l}\qquad(c\text{ 为任意实数})$$

这时相应的晶面方程为

$$hx+hy+lz=c\tag{8}$$

特别$c=1$必在其中。

若由方程(8)确定的晶面中有顶角原子(x_0,y_0,z_0)，则x_0,y_0,z_0应满足方程(8)

$$hx_0+ky_0+lz_0=c$$

由于h,k,l,x_0,y_0,z_0均为整数，则c必须是整数。

若由方程(8)确定的晶面中有体心原子$[(2l_1+1)/2,(2l_2+1)/2,(2l_3+1)/2]$，则三个坐标应满足方程(8)，即

$$h\cdot\frac{2l_1+1}{2}+k\cdot\frac{2l_2+1}{2}+l\cdot\frac{2l_3+1}{2}=c$$

$$\Rightarrow(hl_1+kl_2+ll_3)+\frac{h+k+l}{2}=c$$

①若h,k,l中三个均为奇数或其中只有一个奇数，则上述c必须是分母为2的既约分数。

②若 h,k,l 中恰好有两个奇数，则上述 c 必须是整数。

(1) 若 h,k,l 三个均为奇数或只有一个奇数，则晶面

$$hx + ky + lz = 1 \tag{9}$$

上仅含有顶角原子。

性质 4 过顶角原子且与晶面(9)平行的晶面必形似

$$hx + ky + lz = m \qquad (m\text{ 是整数}) \tag{10}$$

反之，形似(10)的方程(对任何整数 m)必是过顶角处原子，且与晶面(9)平行的晶面方程。

证明 因为与晶面(9)平行的晶面方程形似

$$hx + ky + lz = c$$

而这晶面若过顶角原子，则 c 必为整数。反之，任意一个形似(10)的方程，因 $hx+ky+lz=1$ 是晶面方程，假设某顶角原子(x_0,y_0,z_0)在这晶面上，即

$$hx_0 + ky_0 + lz_0 = 1$$

$$\Rightarrow h(mx_0) + k(my_0) + l(mz_0) = m$$

$\Rightarrow$原子(mx_0,my_0,mz_0)在由方程 $hx+ky+lz=m$ 所确定的平面上。所以，这个平面是一个晶面。

证毕

显然，体心原子$\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$在平面

$$hx + ky + lz = \frac{h+k+l}{2} \tag{11}$$

上，因此平面(11)是一个晶面。

性质 5 过体心原子、且与晶面(9)平行的晶面方程必形似

$$hx + ky + lz = \frac{2m+1}{2} \qquad (m\text{ 是整数}) \tag{12}$$

反之，任何一个形似(12)的方程必是过体心原子且与晶面(9)平行的晶面方程。

证明 因与晶面(9)平行的晶面方程形似

$$hx + ky + lz = c$$

由于该晶面过体心原子，推得 c 必须是分母为 2 的既约分数，即 c 形似$(2m+1)/2$；反之，对于任意一个形似(12)的方程，假定

$$(2m + 1) - (h + k + l) = 2n$$

由性质 4 知 $hx+ky+lz=n$ 是晶面方程，所以必有顶角原子(x_1,y_1,z_1)在这晶面上，即

$$hx_1 + ky_1 + lz_1 = n$$

则体心原子$\left(x_1+\frac{1}{2},y_1+\frac{1}{2},z_1+\frac{1}{2}\right)$的三个坐标满足方程(12)

$$h\cdot\left(x_1+\frac{1}{2}\right)+k\cdot\left(y_1+\frac{1}{2}\right)+l\cdot\left(z_1+\frac{1}{2}\right)=n+\frac{h+k+l}{2}=\frac{2m+1}{2}$$

所以平面(12)是晶面方程。

证毕

综合性质 4 和 5，得到以下结论：

当 h,k,l 均为奇数或只有一个奇数时，晶面$(h\ k\ l)$的全体晶面方程形似

$$hx + ky + lz = \frac{m}{2} \qquad (\text{对一切整数 } m)$$

当 m 是偶数时，该晶面上的原子均是顶角原子；当 m 是奇数时，该晶面上的原子均是体心原子。而任意两个相邻的晶面

$$hx + ky + lz = \frac{m}{2}$$

与

$$hx + ky + lz = \frac{m+1}{2}$$

间的距离即晶面间距 $d_{hkl}^{B}=\frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ （a 为点阵常数）。

（2）若 h,k,l 三个中有两个奇数，则晶面方程必形似

$$hx + ky + lz = m \qquad (m \text{ 为整数}) \tag{13}$$

性质 6 对于任何一个整数 m，平面方程(13)必是晶面方程。

证明 因为 $hx+ky+lz=1$ 是晶面方程，对于在这晶面上的任何一个原子(x_0,y_0,z_0)（这原子可能是顶角原子，也可能是体心原子）有

$$hx_0 + ky_0 + lz_0 = 1$$

$$\Rightarrow h(mx_0) + k(my_0) + l(mz_0) = m$$

由于(mx_0,my_0,mz_0)仍是原子的坐标，所以方程(13)仍是晶面方程。

证毕

这时，晶面$(h\ k\ l)$的全体晶面方程形似

$$hx + ky + lz = m \qquad (\text{对一切整数 } m)$$

而任意两个相邻的晶面

$$hx + ky + lz = m$$

与

$$hx + ky + lz = m + 1$$

间的距离即晶面间距 $d_{hkl}^{B}=\frac{1}{2}\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$.

2 结 论

通过数学证明得出 FCC 和 BCC 点阵中晶面间距的计算式与晶面指数的奇偶性有关：

（1）对于 FCC 点阵，当晶面的三个指数都为奇数时，面间距为

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

当三个指数为二奇一偶或一奇二偶时，面间距为

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

（2）对于 BCC 点阵，当三个指数为二奇一偶时，面间距为

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

当 $h+k+l=$奇数时，面间距为

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

参 考 文 献

1 徐祖耀等.材料科学导论.上海:上海科学技术出版社,1986.45
2 包永千.金属学基础.北京:冶金工业出版社,1986.20

DEMONSTRATION OF THE EXPRESSIONS FOR THE INTERPLANAR SPACING IN FCC AND BCC LATTICES

Gong Xiumin Zhu Yong Zhou Yizhi

(Wuhan Institute of Technology)

ABSTRACT

The expressions for the interplanar spacing are only related to the odd-even feature of miller indices in FCC and BCC lattices. These expressions are proved mathematically to be validity and generality.

Key words: face-centered lattice, body-centered lattice, interplanar spacing, miller index.

·补白·

书名号（《》）的用法

书名号标明书名、篇名、报刊名等。例如：

(1)《红楼梦》

《孔乙己》

《人民日报》

《中国语文》

《红楼梦》是书名，《孔乙己》是篇名，《人民日报》是报纸名称，《中国语文》是刊物名称。

书名号的里边还要用书名号时，外边一层用双书名号，里边一层用单书名号。例如：

(2)《〈中国工人〉发刊词》