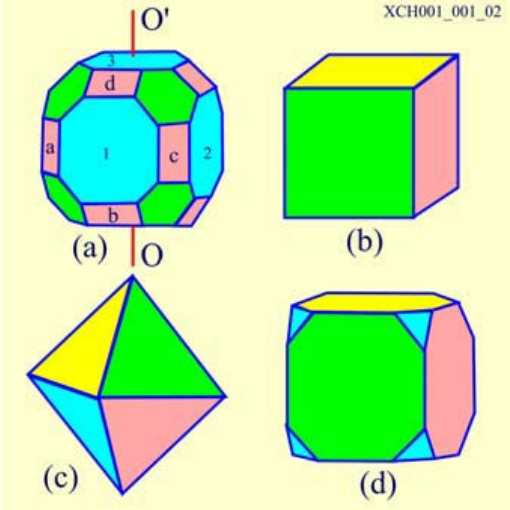
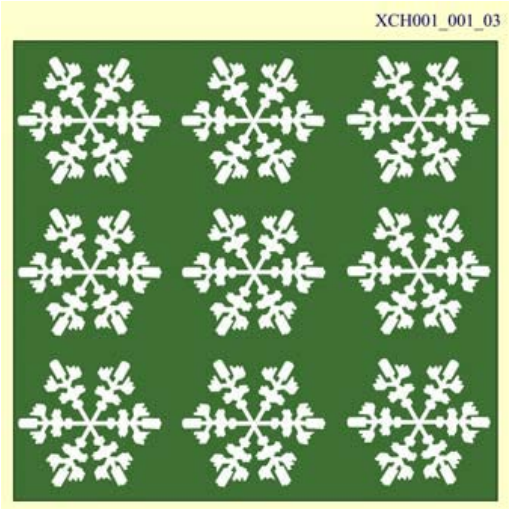
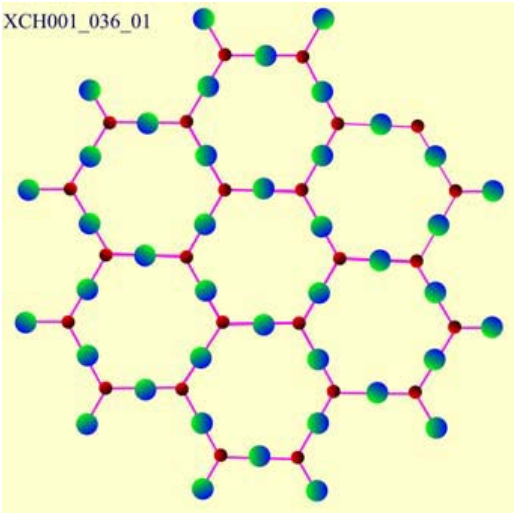
第一章 晶体结构





晶体（单晶）：微米量级范围内，三维空间方向上的有序排列的原子构成，长程有序。有固定的熔点。

非晶体：微米量级范围内，三维空间方向上原子无序排列构成的固体，短程有序。没有固定的熔点。

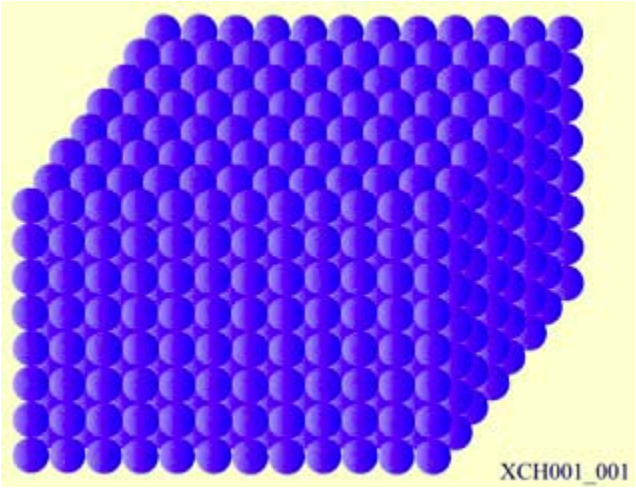


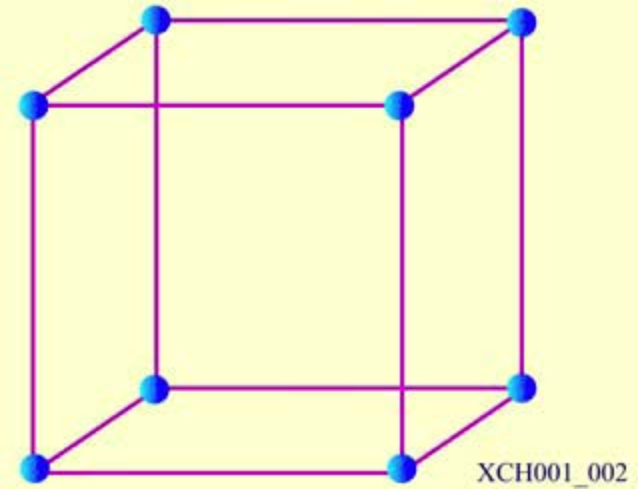
Be2O3 晶体 与 Be2O3玻璃的内部结构

§ 1-1 晶体的实例

晶格定义 —— 晶体中原子排列的具体形式

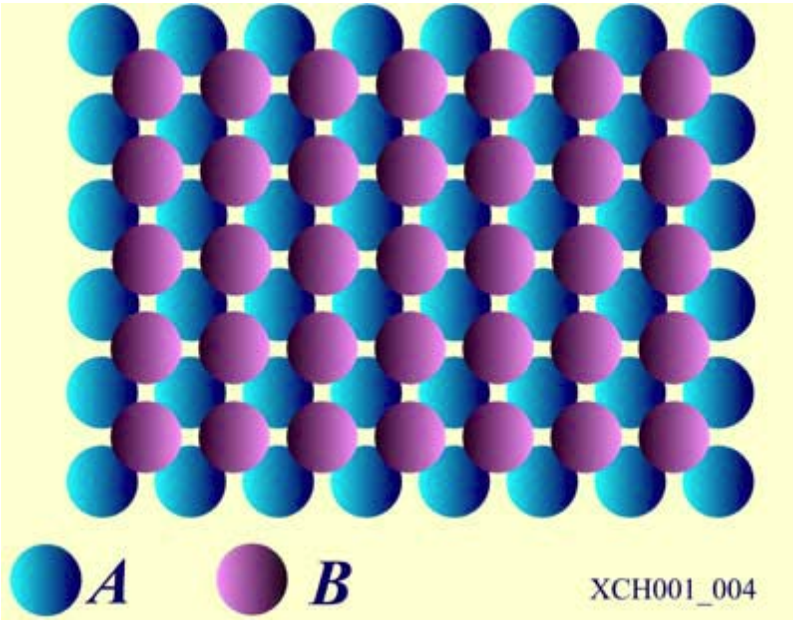
1. 简单立方晶格

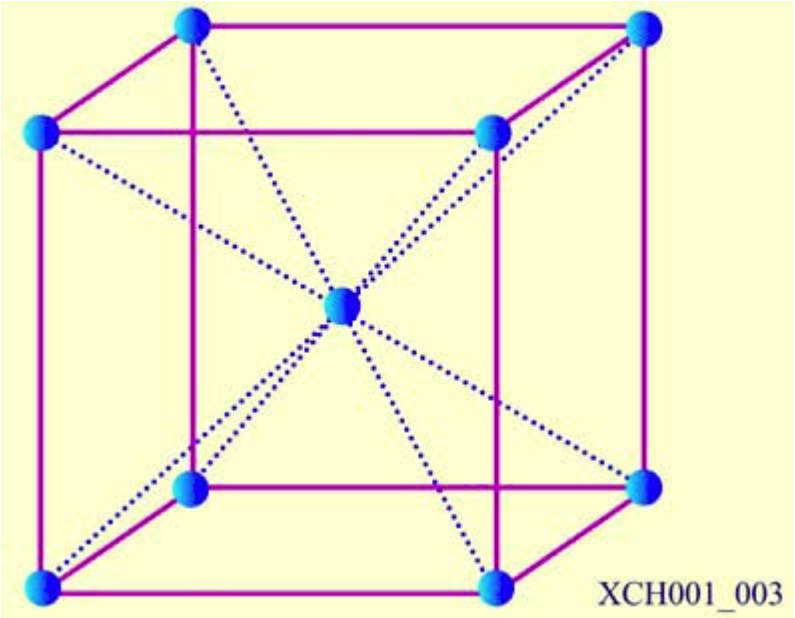




没有实际的晶体具有简单立方晶格

2. 体心立方晶格

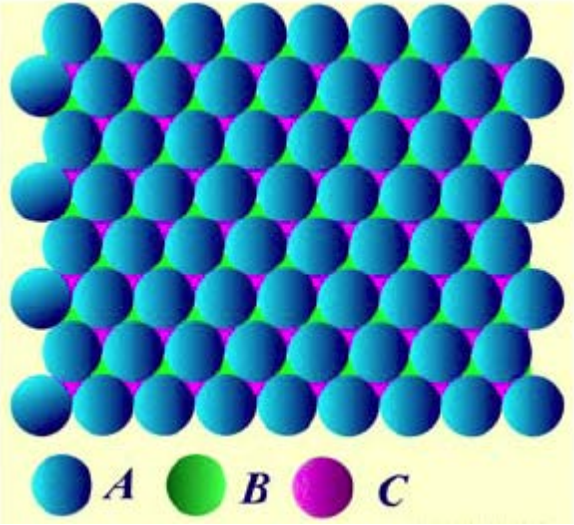


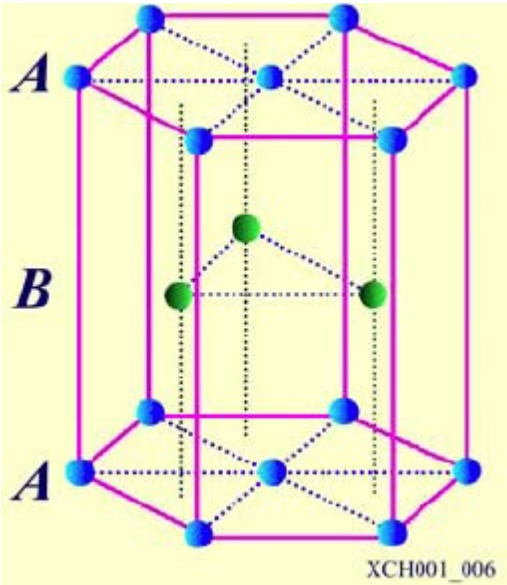


A层原子球间隙：$\Delta=0.31r_0$

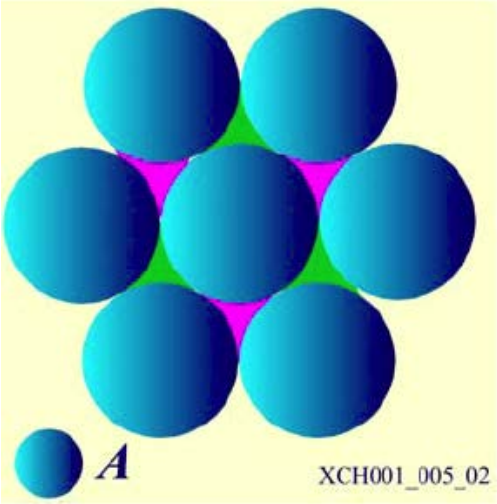
具有体心立方的金属：Li、Na、K、Rb、Cs、Fe

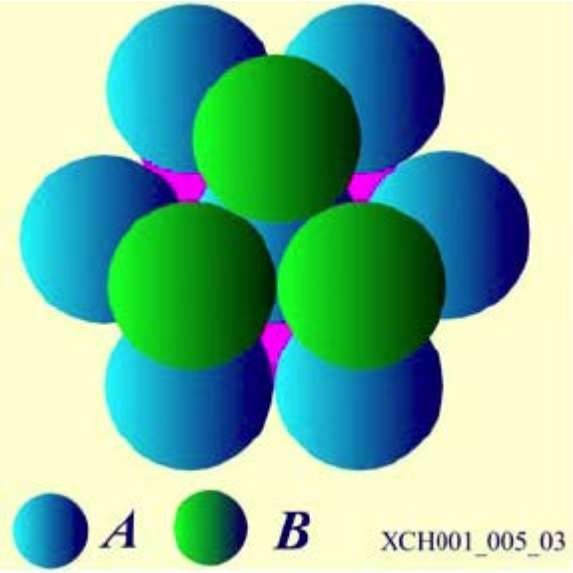
3. 六角密排晶格

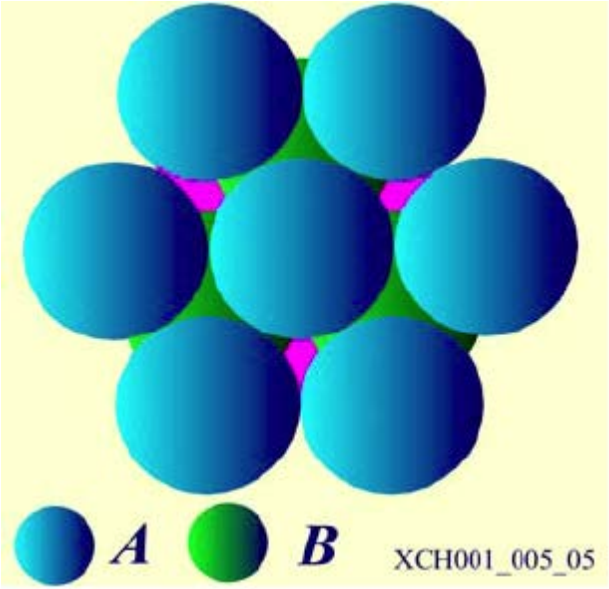




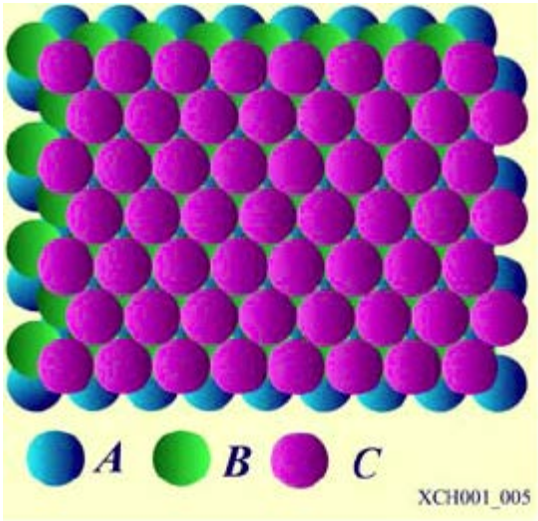
具有六角密排的金属：Be、Mg、Zn、Cd、Co

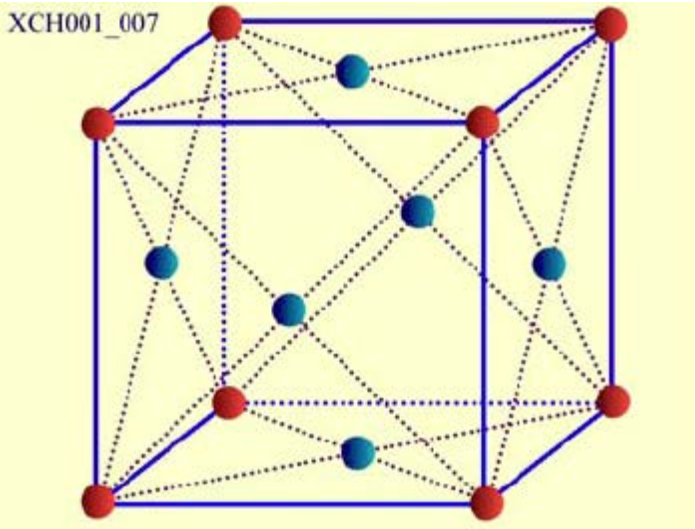


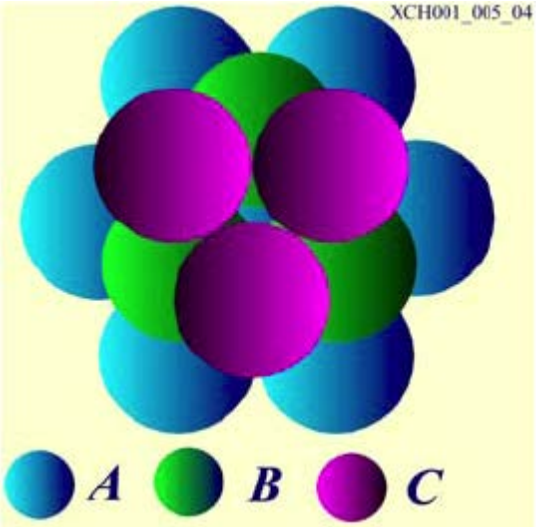




4. 面心立方晶格

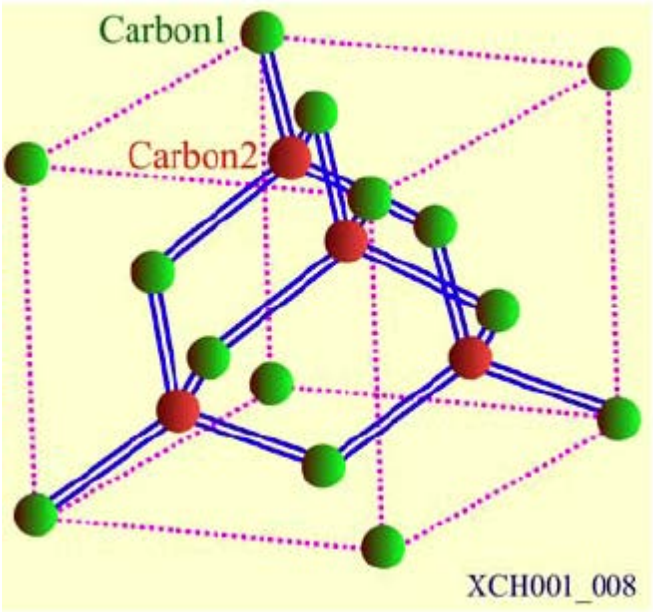


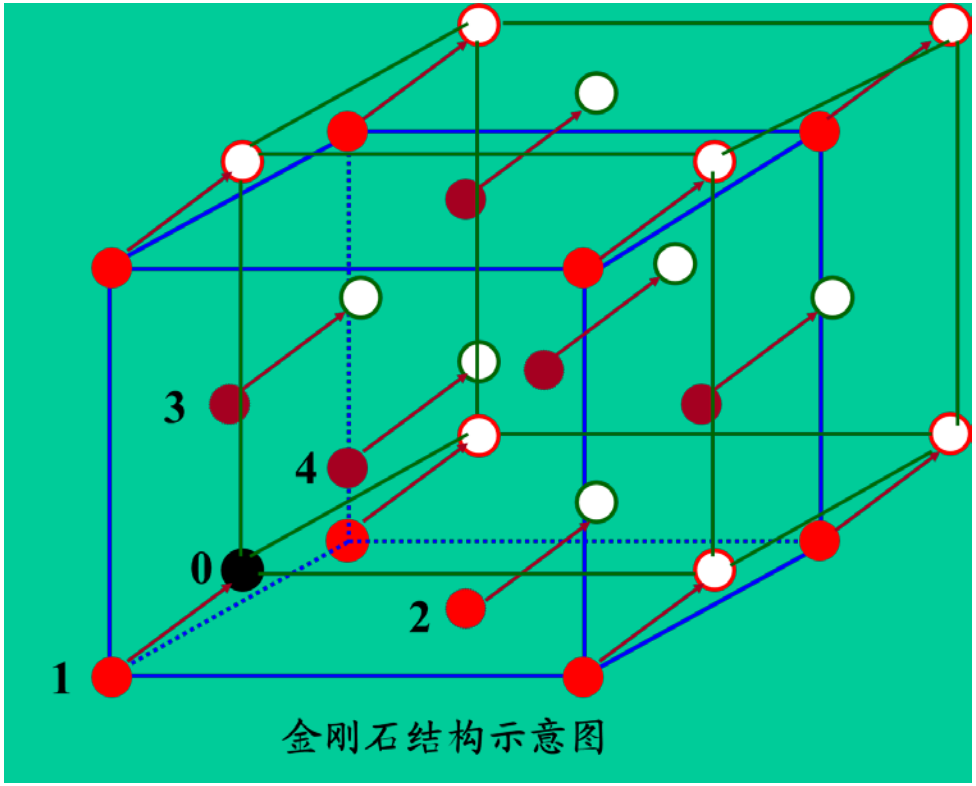




具有面心立方的金属：Cu、Ag、Au、Al、Ni

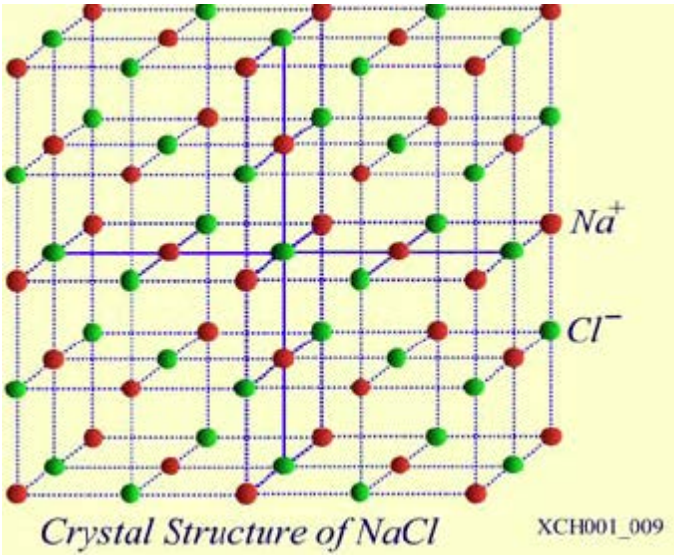
5. 金刚石晶格

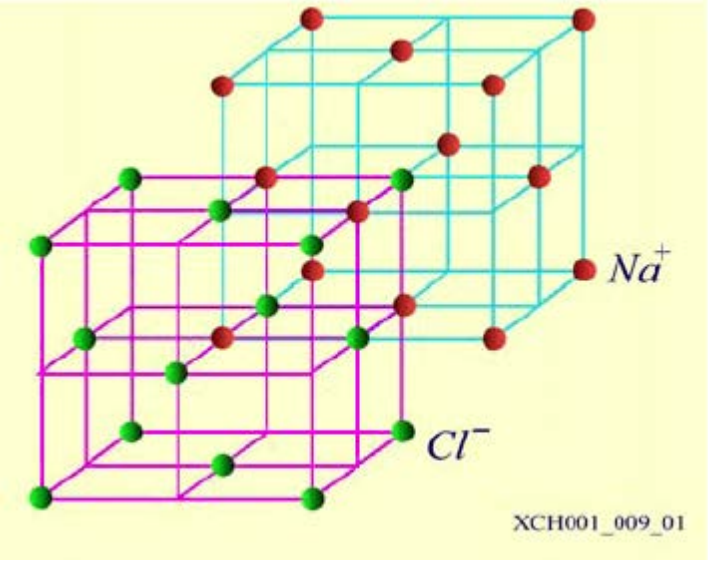




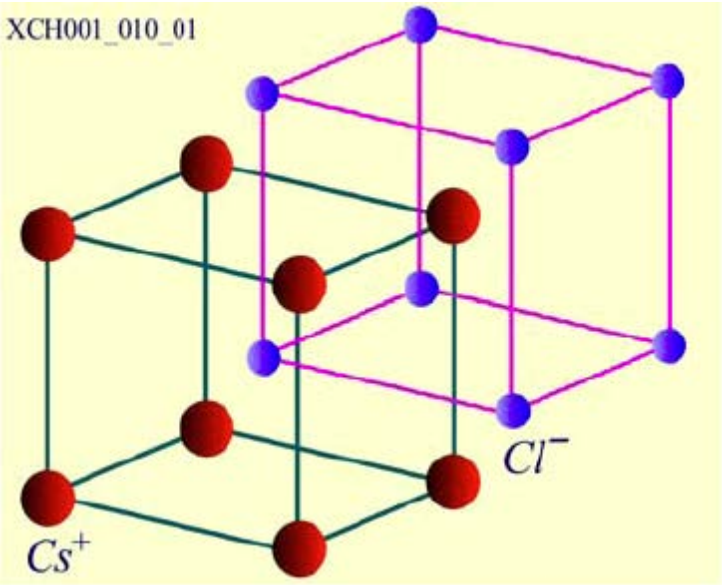
具有面心立方的金属：C、Ge、Si

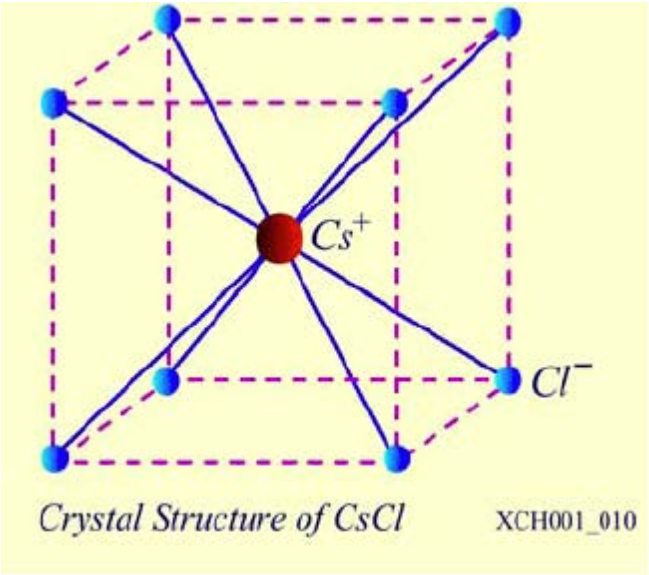
5. NaCl晶格


Na^+
Cl^-
Crystal Structure of NaCl
XCH001_009

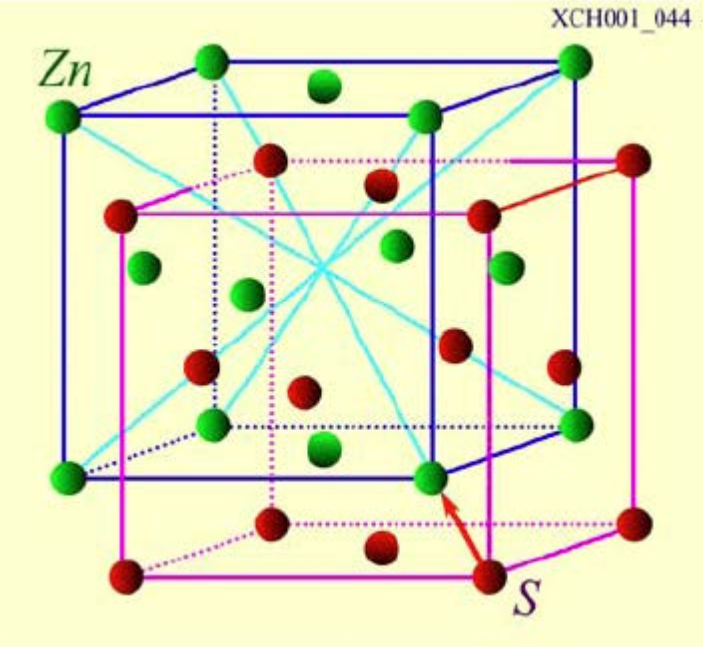

Na^+
Cl^-
XCH001_009_01

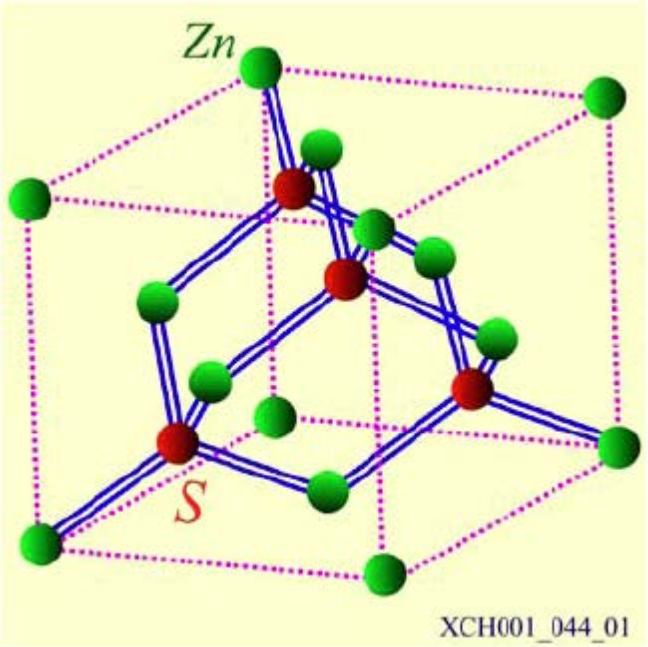
6. CsCl晶格


XCH001_010_01
Cl^-
Cs^+


Cs^+
Cl^-
Crystal Structure of CsCl
XCH001_010

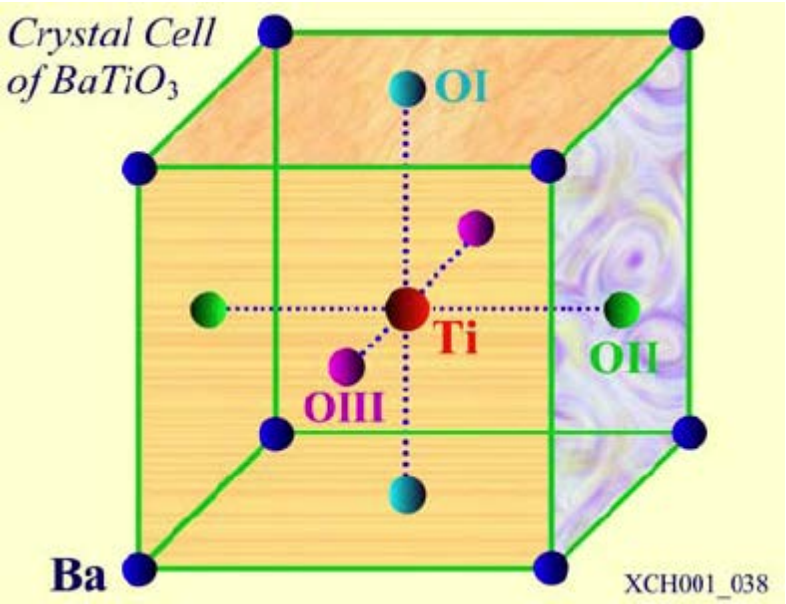
7. 闪锌矿晶格

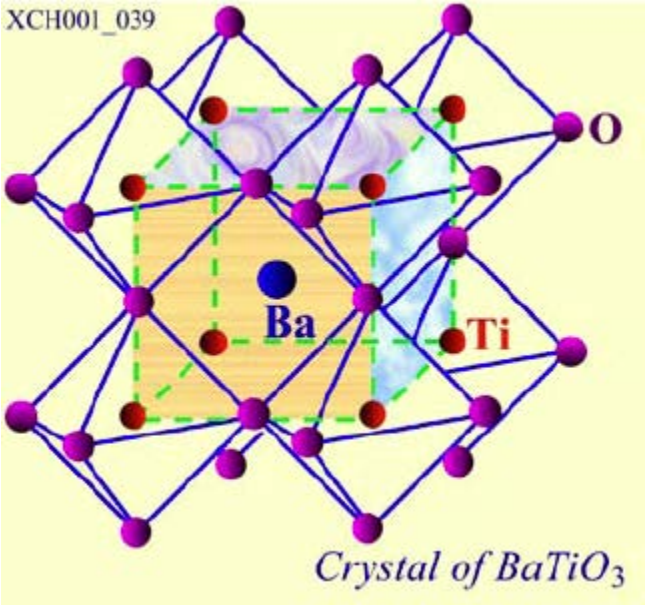




化合物半导体：锑化铟、砷化镓等

8. 钙钛矿晶格


Crystal Cell
of $BaTiO_3$
OI
Ti
OII
OIII
Ba
XCH001_038


XCH001_039
O
Ba
Ti
Crystal of $BaTiO_3$

§1-2晶格的周期性

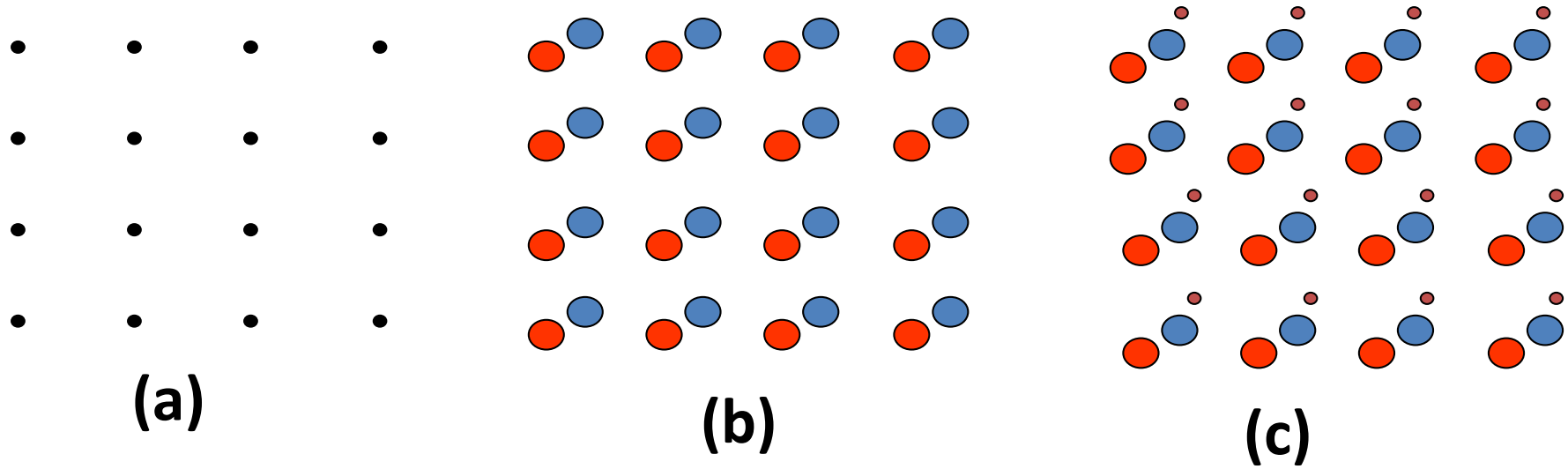
学习内容:

1.2.1 晶体结构的周期性

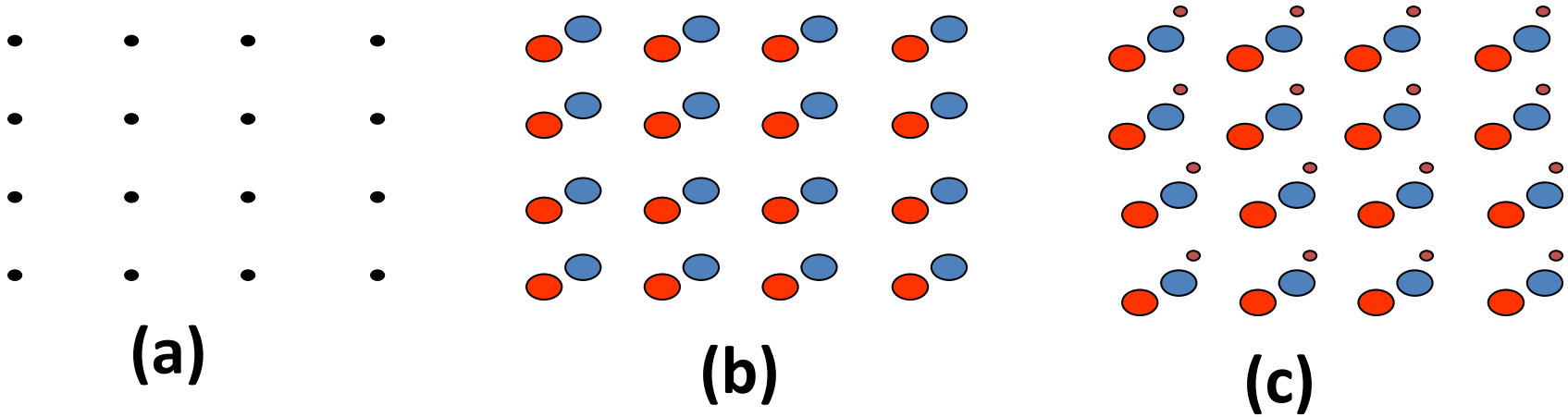
1.2.2 原胞

1.2.3 密堆积、配位数和致密度

§1.2 晶体结构



(a)、(b)、(c)为二维晶体结构示意图，它们有何异同?

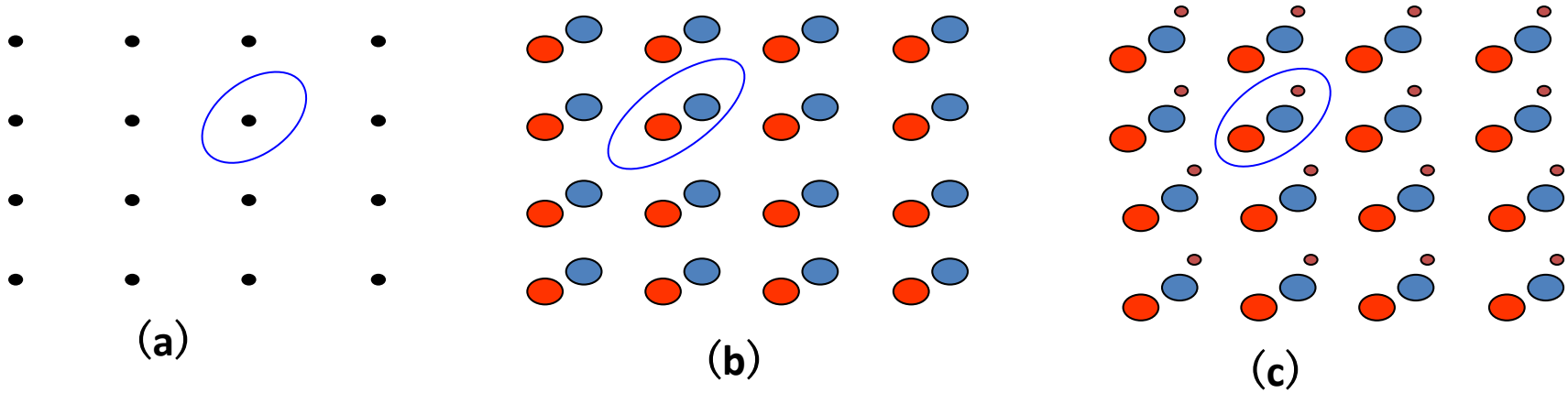


1.2.1 晶体结构的周期性（Periodic arrays）

一个理想的晶体是由完全相同的结构单元在空间周期性重复排列而成的。

所有晶体的结构可以用晶格来描述，这种晶格的每个格点上附有一群原子，这样的一个原子群称为基元，基元在空间周期性重复排列就形成晶体结构。

1. 基元、格点和晶格

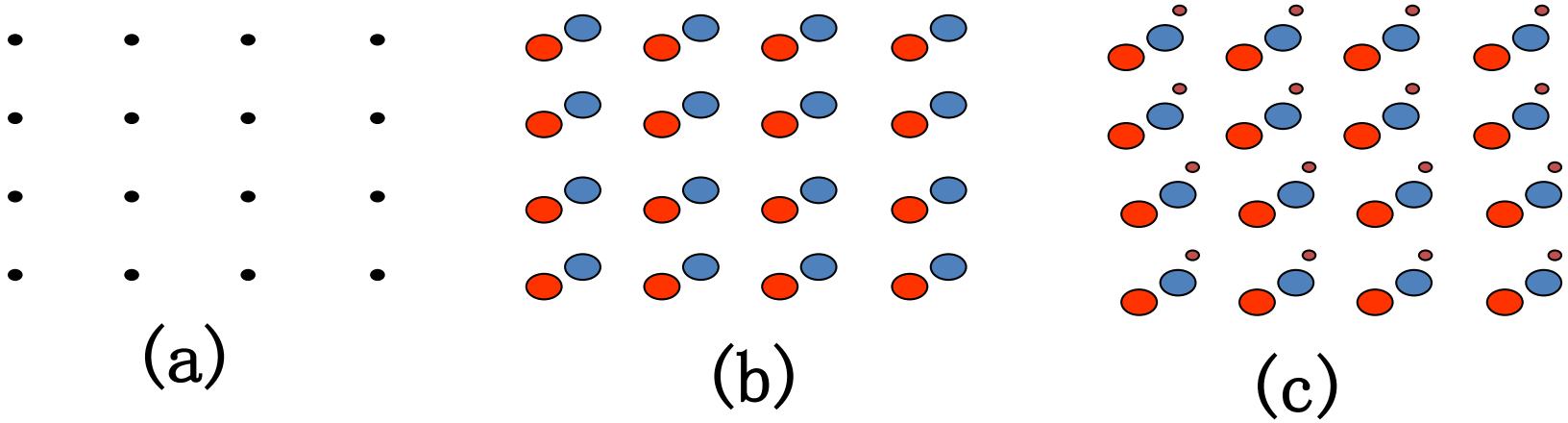


(1) 基元（basic）

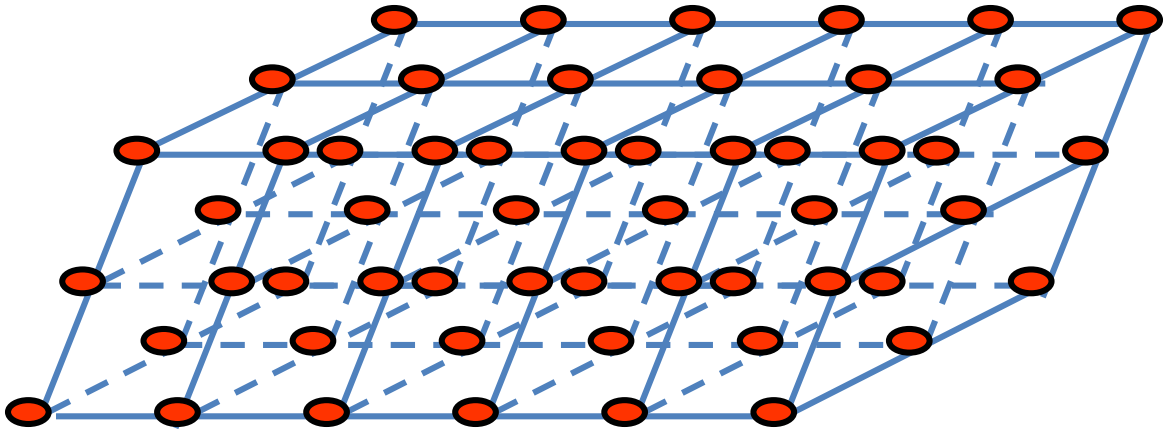
在晶体中适当选取某些原子作为一个*基本结构单元*，这个基本结构单元称为基元，基元是晶体结构中*最小*的重复单元，基元在空间周期性重复排列就形成晶体结构。

任何两个基元中相应原子周围的情况是相同的，而每一个基元中不同原子周围情况则不相同。

(2) 晶格 (lattice)



晶体的内部结构可以概括为是由一些相同的点子在空间有规则地做*周期性无限*分布，通过这些点做三组不共面的平行直线族，形成一些网格，称为晶格(或者说这些点在空间周期性排列形成的骨架称为晶格)。



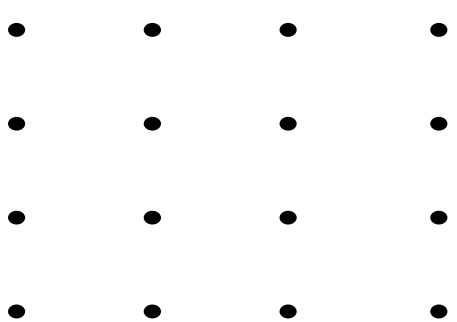
用矢量 $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ (n_1, n_2, n_3取整数) 表示格点的排列。

晶格是晶体结构周期性的数学抽象，它忽略了晶体结构的具体内容，保留了晶体结构的周期性。

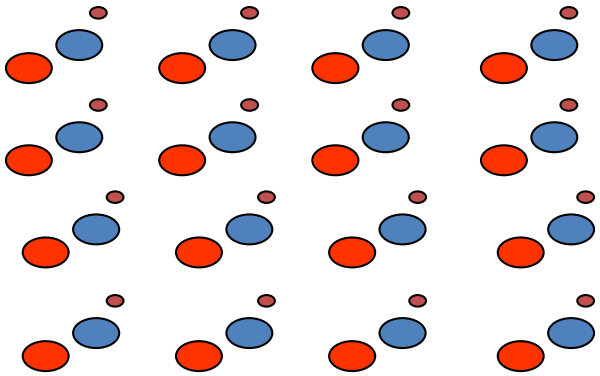
(3)格点(lattice point)

晶格中的点子代表着晶体结构中相同的位置，称为格点。

一个格点代表一个基元，它可以代表基元重心的位置，也可以代表基元中任意的点子。



(a)



(b)

晶格+基元=晶体结构

lattice+basis=crystal structure

2. 布拉维晶格、简单晶格和复式晶格

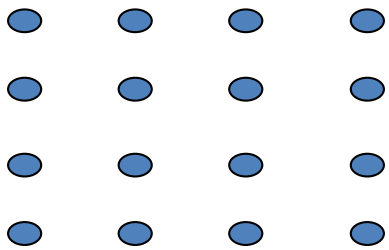
(1) 布拉维晶格(**Bravais lattice**)

格点的总体称为布拉维晶格，这种格子的特点是*每点周围的情况完全相同*。

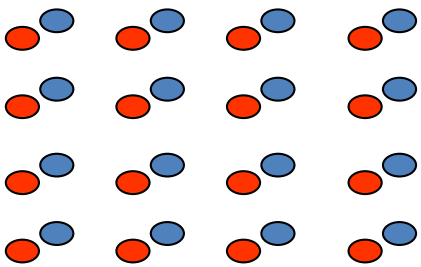
(2) 简单晶格和复式晶格

简单晶格：如果晶体由完全相同的一种原子组成，且*每个原子周围的情况完全相同*，则这种原子所组成的网格称为简单晶格。

复式晶格：如果晶体由两种或两种以上原子组成，同种原子各构成和格点相同的网格，称为子晶格，它们相对位移而形成复式晶格。



简单晶格

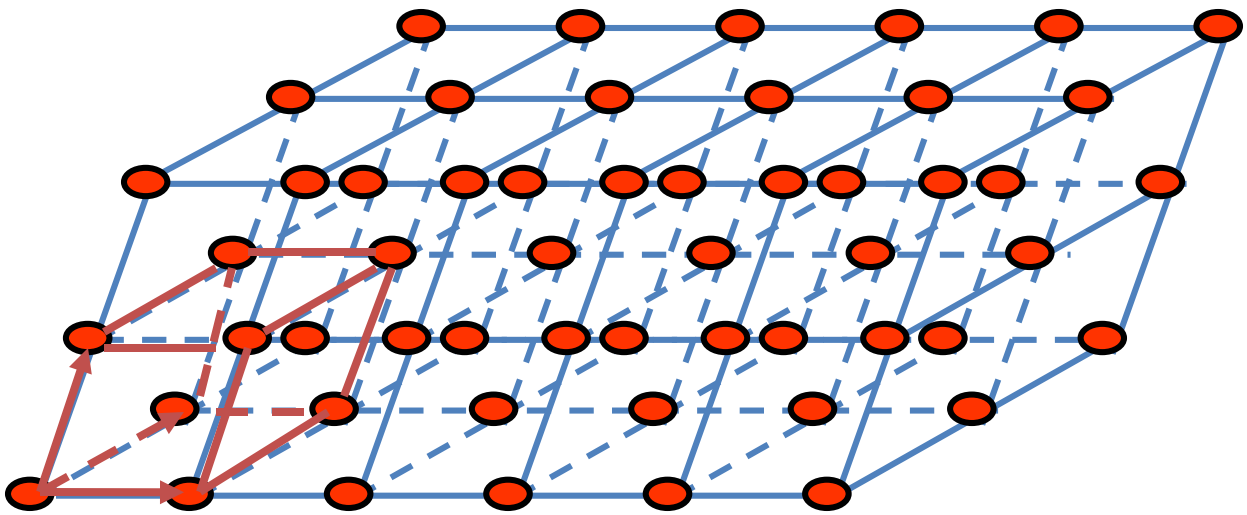


复式晶格

1.2.2 原胞

在晶格中取*一个格点为顶点，以三个不共面的方向上的周期为边长形成的平行六面体*作为重复单元，这个平行六面体沿三个不同的方向进行周期性平移，就可以充满整个晶格，形成晶体，这个平行六面体即为原胞，代表原胞三个边的矢量称为*原胞的基本平移矢量*，简称基矢。

在晶格中取*一个格点为顶点，以三个不共面的方向上的周期为边长形成的平行六面体*作为重复单元，这个平行六面体沿三个不同的方向进行周期性平移，就可以充满整个晶格，形成晶体，这个平行六面体即为原胞，代表原胞三个边的矢量称为*原胞的基本平移矢量*，简称基矢。



1. 原胞的分类

(1) 固体物理学原胞(简称原胞) (primitive lattice cell)

构造：取一格点为顶点，由此点向*近邻*的三个格点作三个不共面的矢量，以此三个矢量为边作平行六面体即为固体物理学原胞。

特点：格点只在平行六面体的顶角上，*面上和内部均无格点*，平均每个*固体物理学原胞包含1个格点*。它反映了晶体结构的周期性。

基矢：固体物理学原胞基矢通常用$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 表示。

体积为：
$$\Omega = \vec{a}_1 \cdot \left(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right)$$

原胞内任一点的位矢表示为：

$$\vec{r} = x_1\vec{a}_1 + x_2\vec{a}_2 + x_3\vec{a}_3 \quad (0 \le x_1, x_2, x_3 \le 1)$$

在任意两个原胞的相对应点上，晶体的物理性质相同。

$\Gamma(\vec{r}) = \Gamma(\vec{r} + \vec{R})$ 其中$\vec{R}$为某一格点的位矢，

$$\vec{R}_l = l_1'\vec{a}_1 + l_2'\vec{a}_2 + l_3'\vec{a}_3 \quad (l_1', l_2', l_3'\text{为整数})$$

(2) 结晶学原胞（简称单胞） (unit cell)

构造：使三个基矢的方向尽可能地沿着空间对称轴的方向，它具有明显的对称性和周期性。

特点：结晶学原胞不仅在平行六面体顶角上有格点，面上及内部亦可有格点。其体积是固体物理学原胞体积的整数倍。

基矢：结晶学原胞的基矢一般用 $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ 表示。

体积为： $v=\vec{a}\cdot\left(\vec{b}\times\vec{c}\right)=n\Omega$

(3) 维格纳--塞茨原胞(Wigner-Seitz cell)

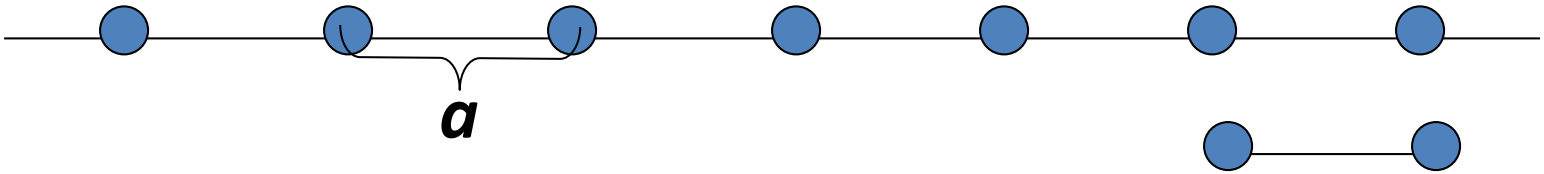
构造：以一个格点为原点，作原点与其它格点连接的中垂面(或中垂线)，由这些中垂面(或中垂线)所围成的最小体积(或面积)即为W--S原胞。

特点：它是晶体体积的最小重复单元，每个原胞只包含1个格点。其体积与固体物理学原胞体积相同。

2. 几种晶格的实例

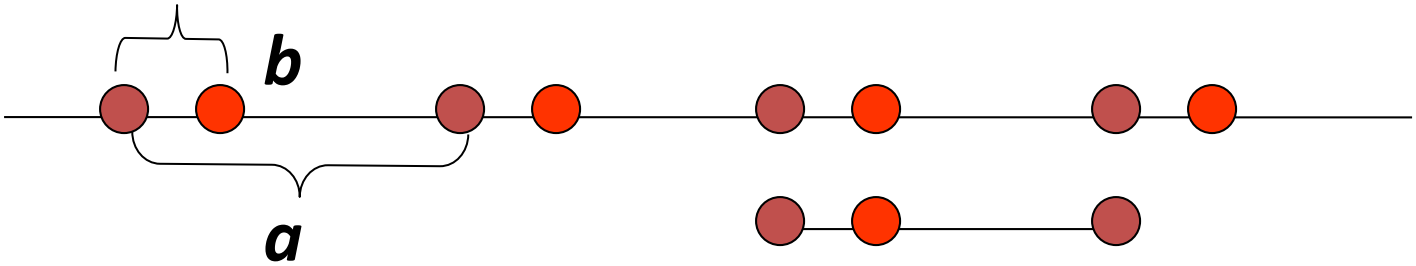
(1) 一维原子链

一维单原子链

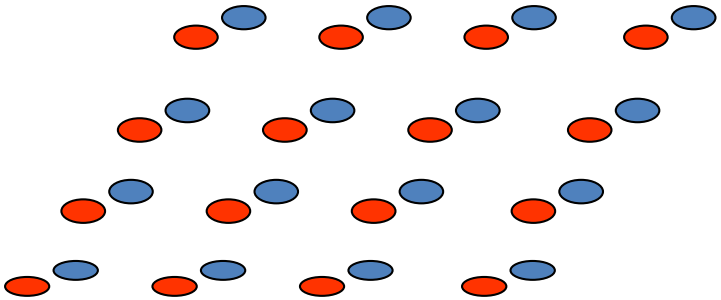


$$\Gamma(x+na)=\Gamma(x) \quad (0 \le x \le a)$$

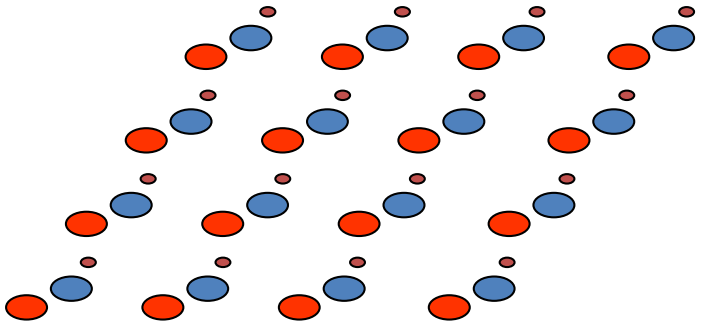
一维双原子链



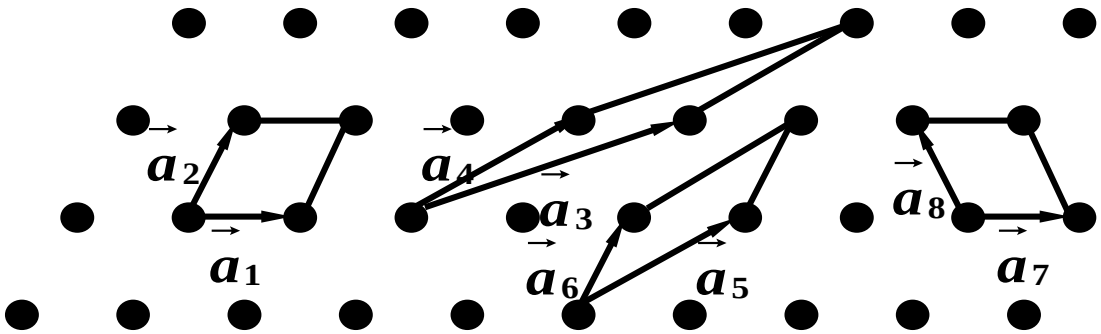
(2)二维



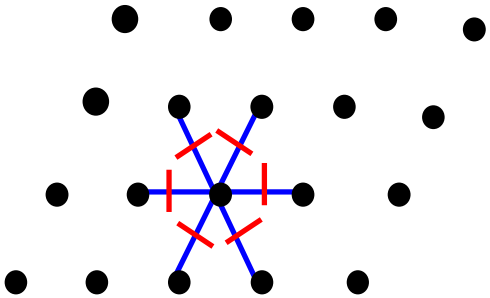
(a)



(b)



固体物理学原胞



维格纳--塞茨单胞

(3) 三维

立方晶系 $\vec{a}\perp\vec{b}$ $\vec{b}\perp\vec{c}$ $\vec{c}\perp\vec{a}$ $a=b=c$

取 $\vec{i},\vec{j},\vec{k}$为坐标轴的单位矢量,

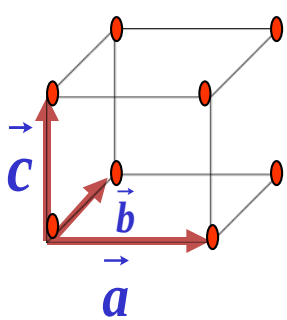
设晶格常量(*布拉维原胞棱边的长度*)为a,

即立方体边长为a, $\vec{a}=a\vec{i},\vec{b}=a\vec{j},\vec{c}=a\vec{k}$

布拉维原胞的体积: $V=a^3$

布拉维晶格(简单格)

(a) 简立方

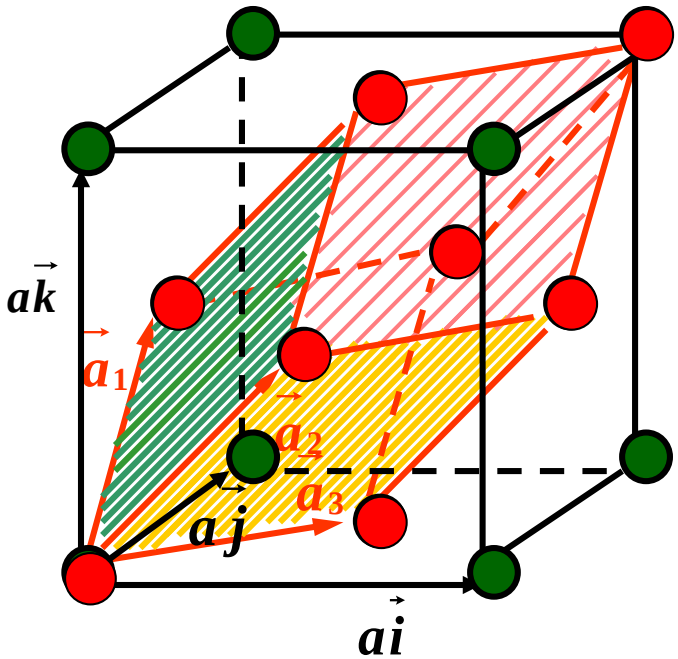


$$\begin{cases}\vec{a}_1=a\vec{i}\\ \vec{a}_2=a\vec{j}\\ \vec{a}_3=a\vec{k}\end{cases}$$

每个布拉维原胞包含*1个格点*。

固体物理学原胞的体积 $\Omega=a^3$

(b) 面心立方

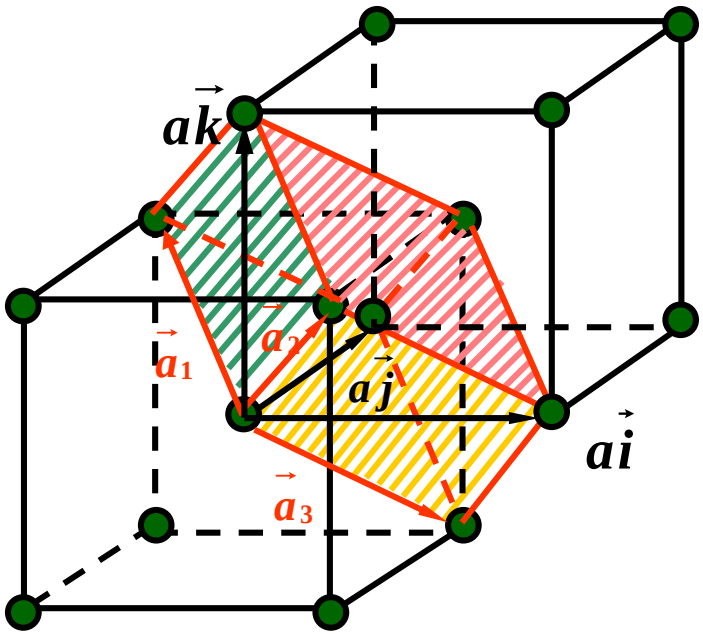


$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \dfrac{a}{2}\left(\vec{j} + \vec{k}\right) \\ \vec{a}_2 = \dfrac{a}{2}\left(\vec{i} + \vec{k}\right) \\ \vec{a}_3 = \dfrac{a}{2}\left(\vec{i} + \vec{j}\right) \end{cases}$$

平均每个布拉维原胞包含4个格点。

固体物理学原胞的体积 $\Omega = \vec{a}_1 \cdot \left(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right) = \dfrac{1}{4}a^3$

(c) 体心立方



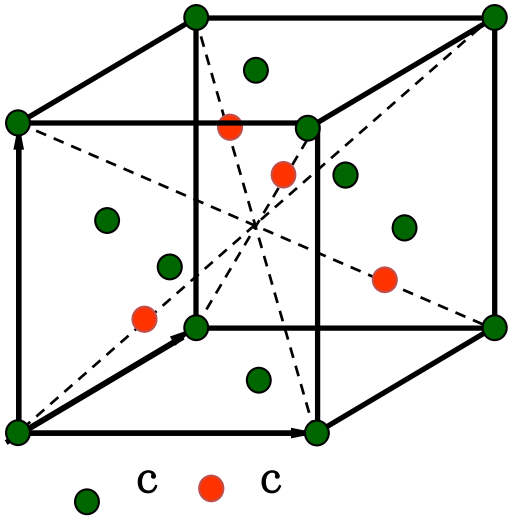
$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \dfrac{a}{2}\left(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k}\right) \\ \vec{a}_2 = \dfrac{a}{2}\left(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k}\right) \\ \vec{a}_3 = \dfrac{a}{2}\left(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k}\right) \end{cases}$$

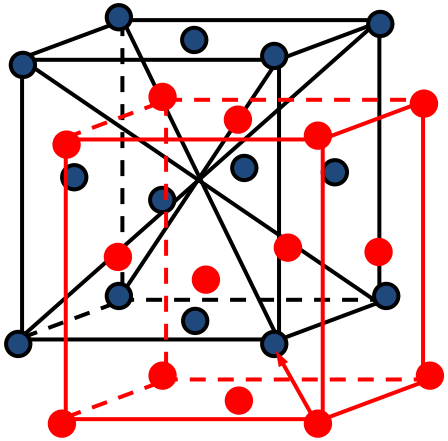
平均每个布拉维原胞包含**2**个格点。

固体物理学原胞的体积 $\Omega = \vec{a}_1 \cdot \left(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\right) = \dfrac{1}{2}a^3$

复式格

(a)金刚石结构

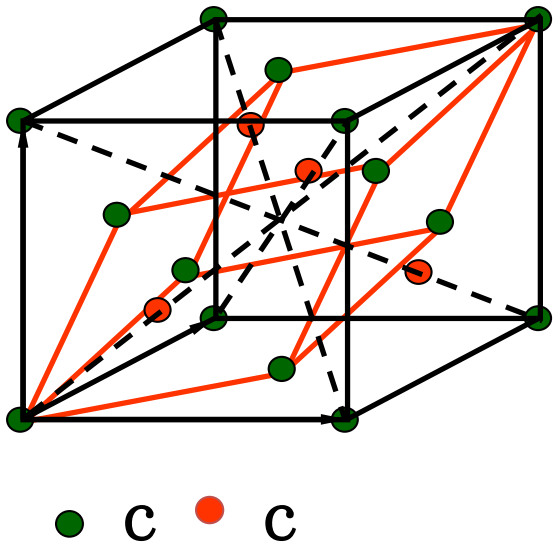




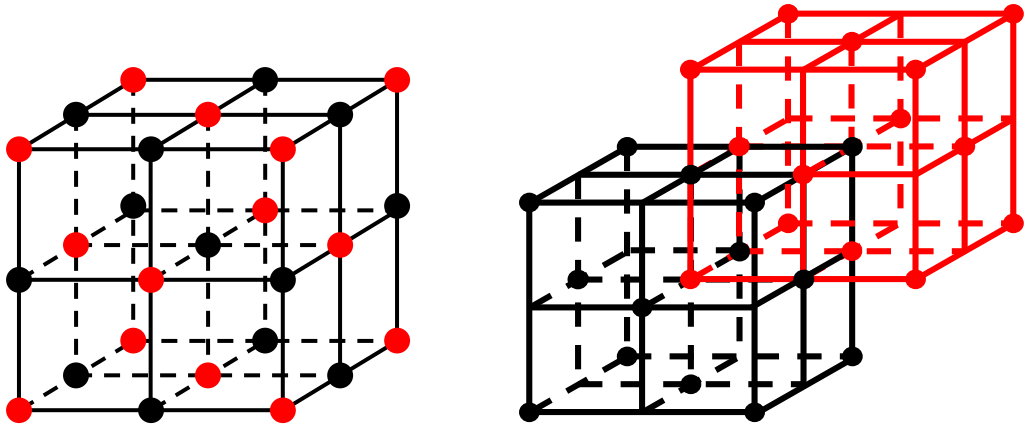
金刚石结构是由两个面心立方子晶格沿体对角线位移1/4的长度套构而成，其布拉维晶格为面心立方。

*金刚石结构属面心立方，*每个结晶学原胞包含4个格点。

金刚石结构每个固体物理学原胞包含1个格点，基元由两个碳原子组成，位于（000）和 $\left(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}\right)$ 处。



(b) 氯化钠结构

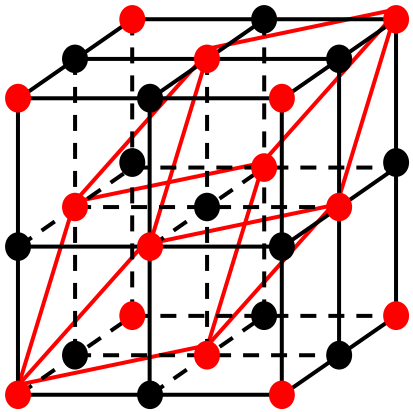


氯化钠结构由两个面心立方子晶格沿体对角线位移1/2的长度套构而成。

Cl^-和Na^+分别组成面心立方子晶格。

其布拉维晶格为面心立方。

氯化钠结构属面心立方。



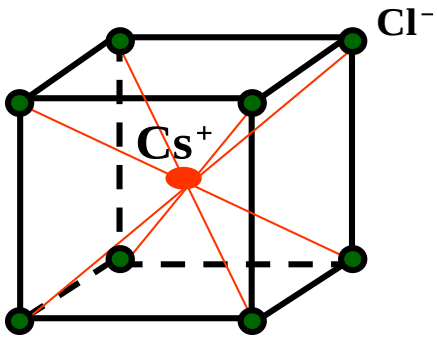
氯化钠的固体物理学原胞选取方法与面心立方简单格子的选取方法相同。

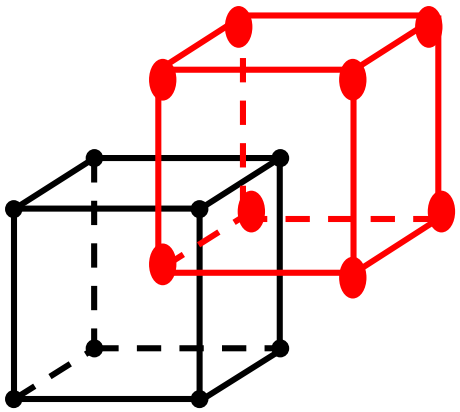
每个固体物理学原胞包含1个格点，每个结晶学原胞包含4个格点。

基元由一个Cl^-和一个Na^+组成。

Cl^-的坐标为 $\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)$，　Na^+的坐标为（000）。

(c) 氯化铯结构



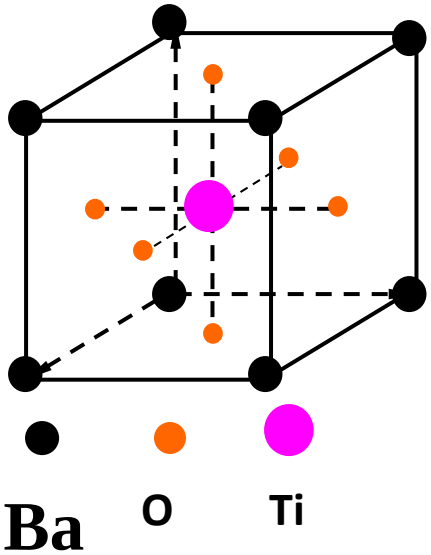


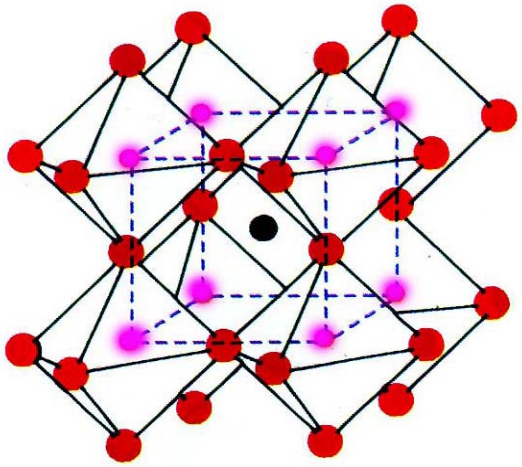
氯化铯结构是由两个简立方子晶格沿体对角线位移1/2的长度套构而成。 Cl^-和Cs^+分别组成简立方格子，其布拉维晶格为简立方，*氯化铯结构属简立方*。

每个固体物理学原胞包含1个格点，每个结晶学原胞包含1个格点。基元由一个Cl^-和一个Cs^+组成。

Cl^-的坐标为 $\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)$， Cs^+的坐标为（000）。

(d) 钙钛矿结构





钙钛矿的氧
八面体结构

钡、钛和3个氧各组成简立方子晶格，钛酸钡是由5个简立方子晶格套构而成的。

一个晶胞包含1个钡原子、1个钛原子和3个氧原子。

钙钛矿结构常写成ABO_3的形式。

1.2.3　密堆积、配位数和致密度

1. 配位数

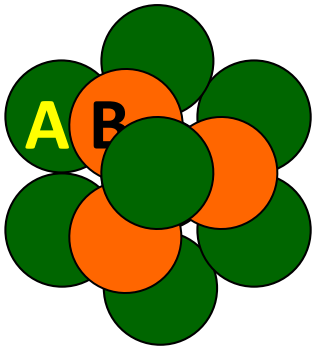
一个粒子周围*最近邻的粒子数*称为配位数.

它可以描述晶体中粒子排列的紧密程度，粒子排列越紧密，配位数越大。

2. 密堆积

如果晶体由*完全相同*的一种粒子组成，而粒子被看作小圆球，则这些全同的小圆球最*紧密的堆积*称为密堆积。

(1)六角密积



第一层：每个球与6个球相切，有6个空隙，如编号1, 2, 3, 4, 5, 6。

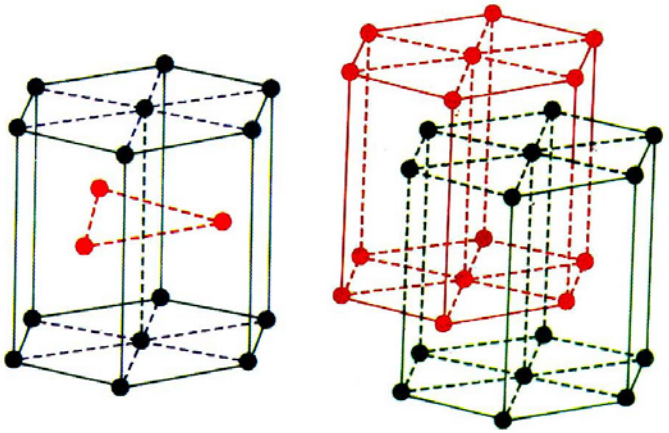
第二层：占据1, 3, 5空位中心。

第三层：在第一层球的正上方形成ABABAB……排列方式。

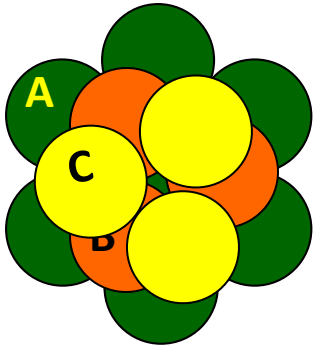
六角密积是复式格，其布拉维晶格是简单六角晶格。

基元由两个原子组成，一个位于(000)，另一个原子位于 $\left(\frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{2}\right)$，

即： $\vec{r}=\frac{2}{3}\vec{a}+\frac{1}{3}\vec{b}+\frac{1}{2}\vec{c}$



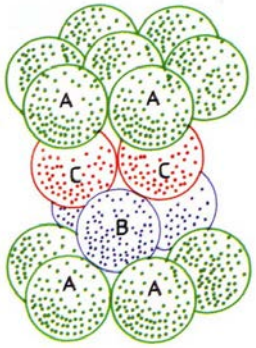
(2) 立方密积

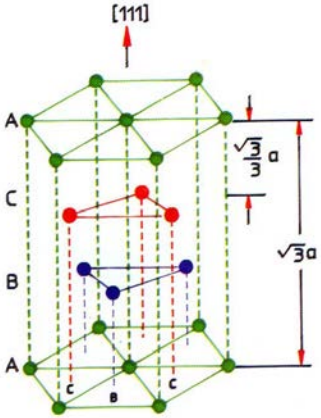


第一层：每个球与6个球相切，有6个空隙，如编号为1, 2, 3, 4, 5, 6。

第二层：占据1，3，5空位中心。

第三层：占据2，4，6空位中心，按ABCABCABC……方式排列，形成面心立方结构，称为立方密积。





密堆积特点：结合能低，晶体结构稳定；配位数最大为12。

(3). 配位数的可能值

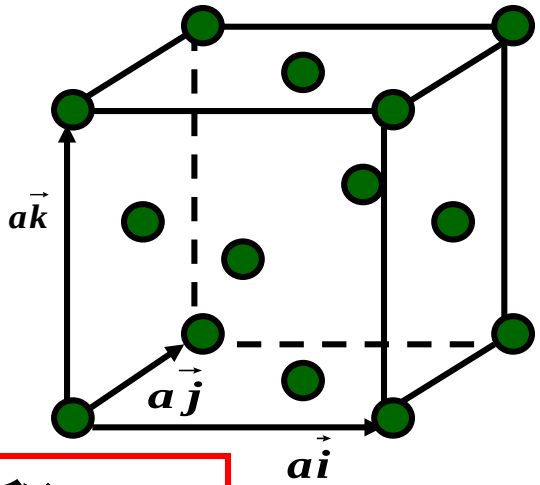
配位数的可能值为：12(密堆积)，8(氯化铯型结构)，6(氯化钠型结构)，4(金刚石型结构)，3(石墨层状结构)，2(链状结构)。

3. 致密度：

如果把*等体积的硬球*放置在晶体结构中原子所在的位置上，球的体积取得尽可能大，以*使最近邻的球相切*，我们把一个晶胞中被硬球占据的体积和晶胞体积之比称为致密度(*堆积比率或最大空间利用率*)。

例1：求面心立方的致密度.

设晶格常量为a，原子半径为R，则



$$\begin{cases} V = a^3 \\ v = N\dfrac{4}{3}\pi R^3 \\ 4R = \sqrt{2}a \end{cases}$$

单胞体积

单胞中原子所占体积

N是单胞中原子个数

$$N = n_i + \frac{1}{2}n_f + \frac{1}{4}n_e + \frac{1}{8}n_c$$

内部原子数

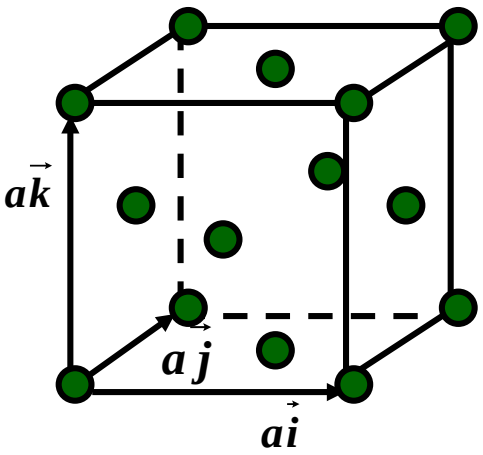
面上原子数

棱上原子数

顶角上原子数

$$N = n_i + \frac{1}{2}n_f + \frac{1}{4}n_e + \frac{1}{8}n_c$$

$$N = \frac{1}{2}\times 6 + \frac{1}{8}\times 8 = 4$$



致密度：$\rho = \dfrac{v}{V}$

$$= 4\times\frac{4}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{2}}{4}\right)^3$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{6}\pi$$

$$\begin{cases} V = a^3 \\ v = N\dfrac{4}{3}\pi R^3 \\ 4R = \sqrt{2}a \end{cases}$$

典型的晶体结构

结构型	单胞中的原子个数	原子在单胞中的位置	最近邻距离	配位数
fcc（Cu）	4	(000) $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$ $(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$ $(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$\frac{\sqrt{2}a}{2}$	12
bcc（W）	2	(000) $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$\frac{\sqrt{3}a}{2}$	8
CsCl	Cs^+ 1 Cl^- 1	(000) $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$	$\frac{\sqrt{3}a}{2}$	8

典型的晶体结构

结构型	单胞中的原子个数	原子在单胞中的位置	最近邻距离	配位数
金刚石	8	(000) $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$ $(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$ $(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$ $(\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4})$ $(\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4})$ $(\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4})$	$\frac{\sqrt{3}a}{4}$	4
NaCl	Na^+ 4 Cl^- 4	(000) $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$ $(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ $(\frac{1}{2}00)$ $(0\frac{1}{2}0)$ $(00\frac{1}{2})$	$\frac{a}{2}$	6

§1-3晶向、晶面和它们的标志

学习内容:

1.3.1 晶向及晶向指数

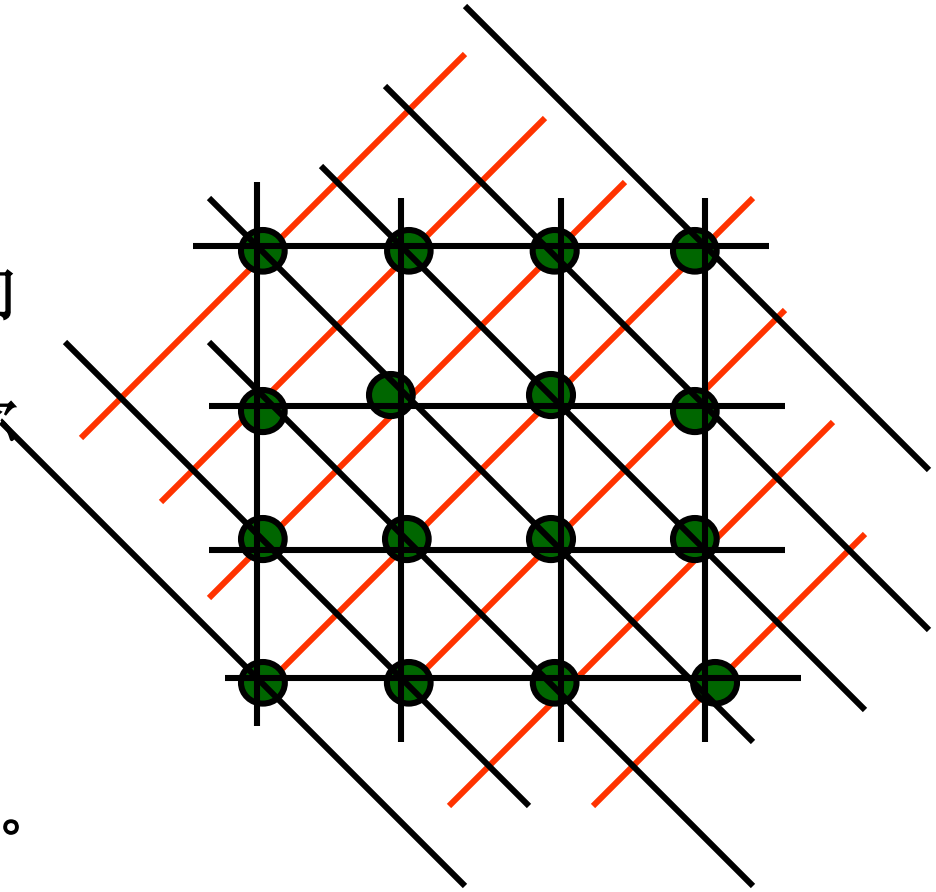
1.3.2 晶面及密勒指数

§1.3　晶向、晶面和它们的标志

1.3.1　晶向及晶向指数

1. 晶向

通过晶格中任意两个格点连一条直线称为晶列，晶列的取向称为晶向，描写晶向的一组数称为晶向指数(或晶列指数)。



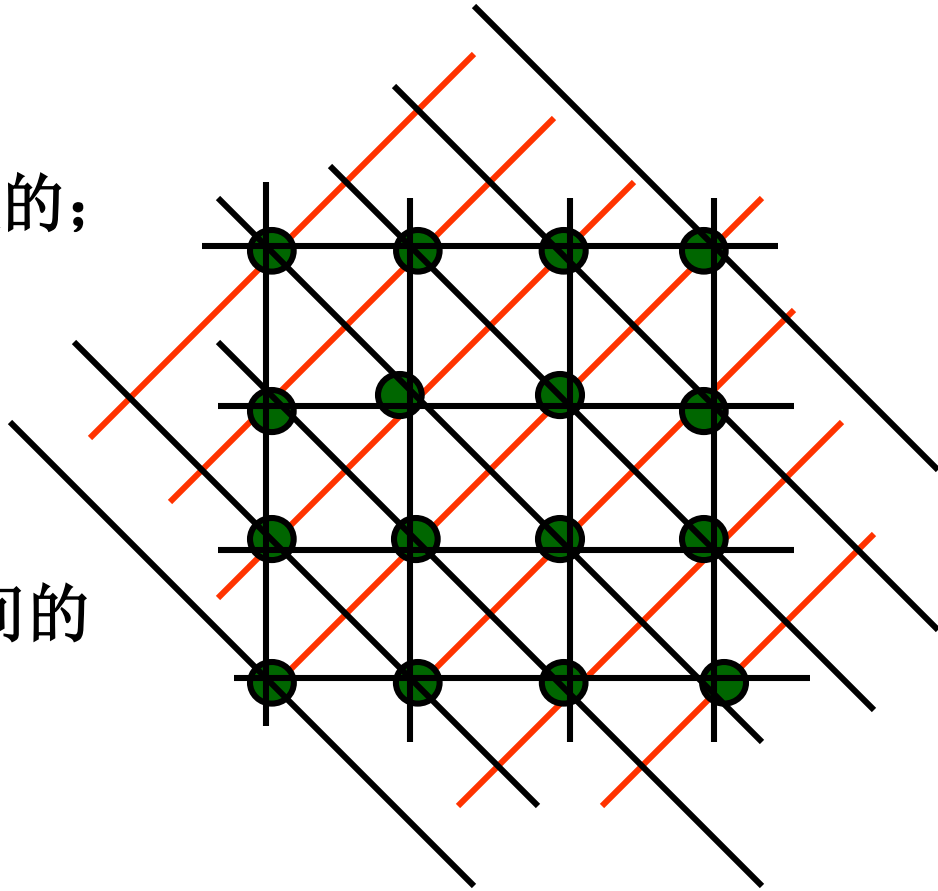
过一格点可以有无数晶列。

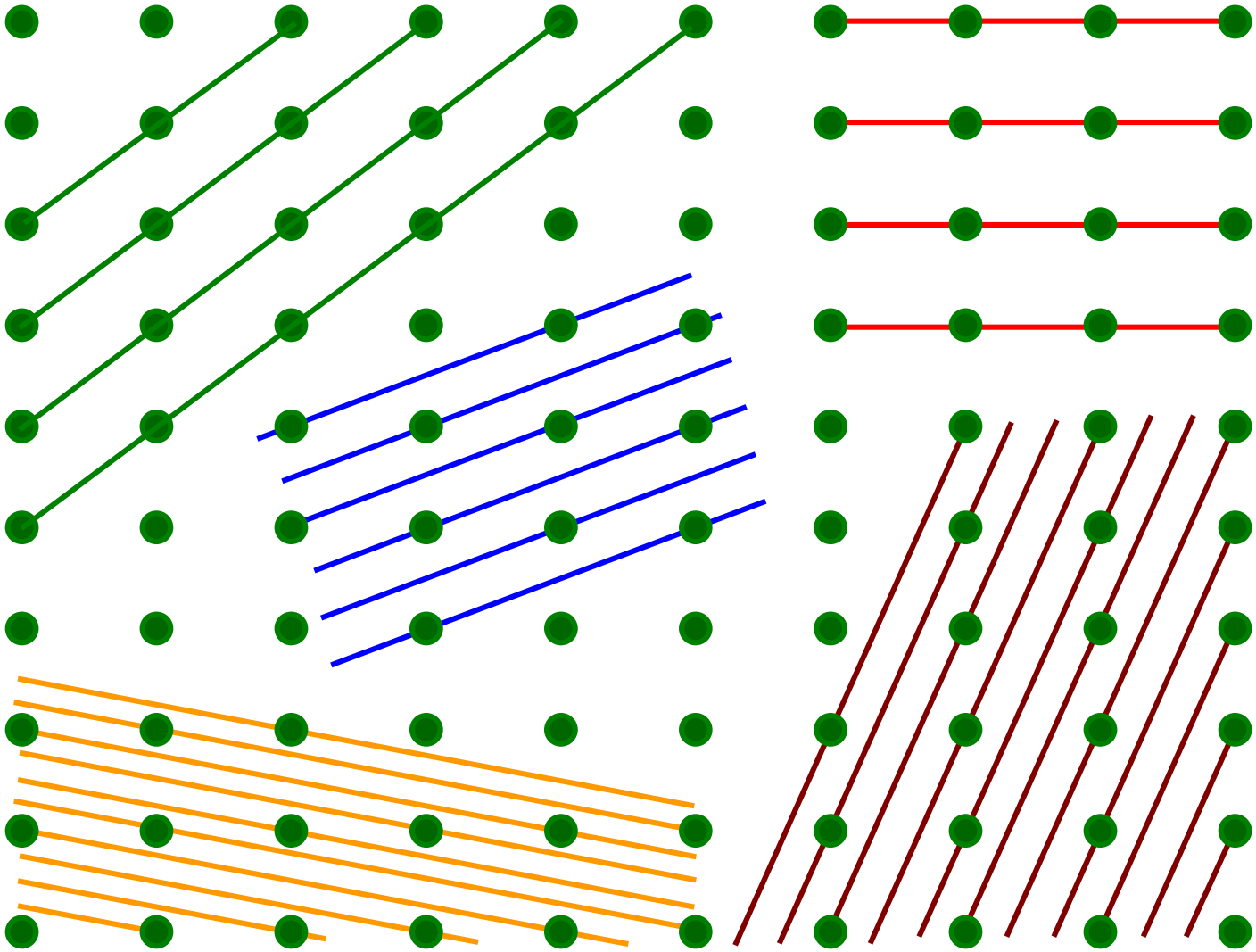
(1)平行晶列组成晶列族，晶列族包含所有的格点；

(2)晶列上格点分布是周期性的；

(3)晶列族中的每一晶列上，格点分布都是相同的；

(4)在同一平面内，相邻晶列间的距离相等。





晶列的特点

2. 晶向指数

(1) 用固体物理学原胞基矢表示

如果从晶列上一个格点沿晶向到任一格点的位矢为

$$\vec{R} = l_1'\vec{a}_1 + l_2'\vec{a}_2 + l_3'\vec{a}_3$$

$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 为固体物理学原胞基矢

其中 l_1', l_2', l_3' 为整数，将 l_1', l_2', l_3' 化为互质的整数 l_1, l_2, l_3，记为 $[l_1 l_2 l_3]$， $[l_1 l_2 l_3]$ 即为该晶列的晶列指数。

如遇到负数，将该数的上面加一横线。

如 $[1\bar{2}1]$ 表示 $l_1 = 1, l_2 = -2, l_3 = 1$

(2) 以布拉维原胞基矢表示

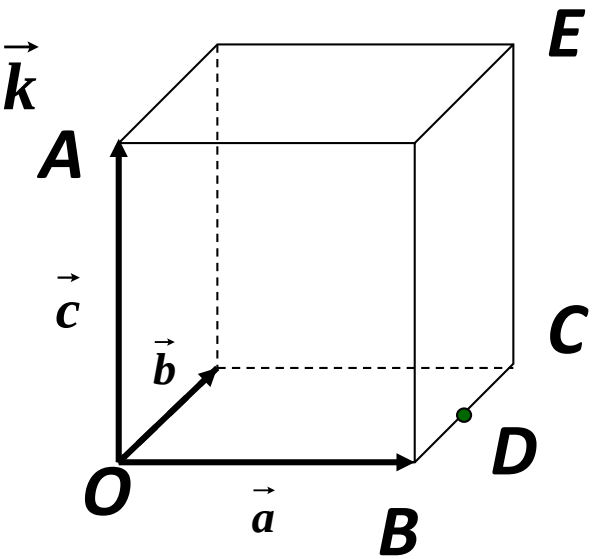
如果从晶列上一个格点沿晶向到任一格点的位矢为

$$\vec{R} = m'\vec{a} + n'\vec{b} + p'\vec{c} \quad \left(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \text{ 为布拉维原胞基矢}\right)$$

其中 m', n', p' 为有理数, 将 m', n', p' 化为*互质的整数* **m, n, p**, 记为[***mnp***]，[***mnp***]即为该晶列的晶列指数.

例1：如图在立方体中, $\vec{a} = \vec{i}, \vec{b} = \vec{j}, \vec{c} = \vec{k}$

D是***BC***的中点，求***BE***, ***AD***的晶列指数。



解：

$$\overrightarrow{OB} = \vec{i}, \quad \overrightarrow{OE} = \vec{i} + \vec{j} + \vec{k},$$

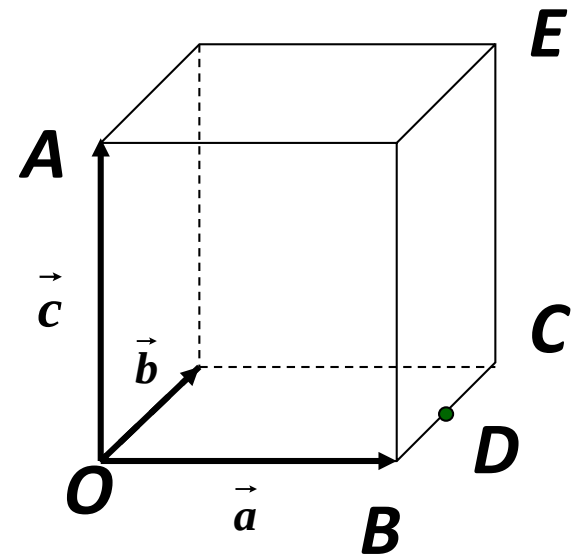
$$\overrightarrow{BE} = \overrightarrow{OE} - \overrightarrow{OB} = \vec{j} + \vec{k}$$

晶列***BE***的晶列指数为：[**011**]

求*AD*的晶列指数。

$$\overrightarrow{OA}=\vec{k},\qquad \overrightarrow{OD}=\vec{i}+\frac{1}{2}\vec{j},$$

$$\overrightarrow{AD}=\overrightarrow{OD}-\overrightarrow{OA}=\vec{i}+\frac{1}{2}\vec{j}-\vec{k}$$



*AD*的晶列指数为：$[21\bar{2}]$

注意：

(1) 晶列指数一定是一组互质的整数；

(2) 晶列指数用方括号表示[　　]；

(3) 遇到负数在该数*上方*加一横线。

(4) 等效晶向。

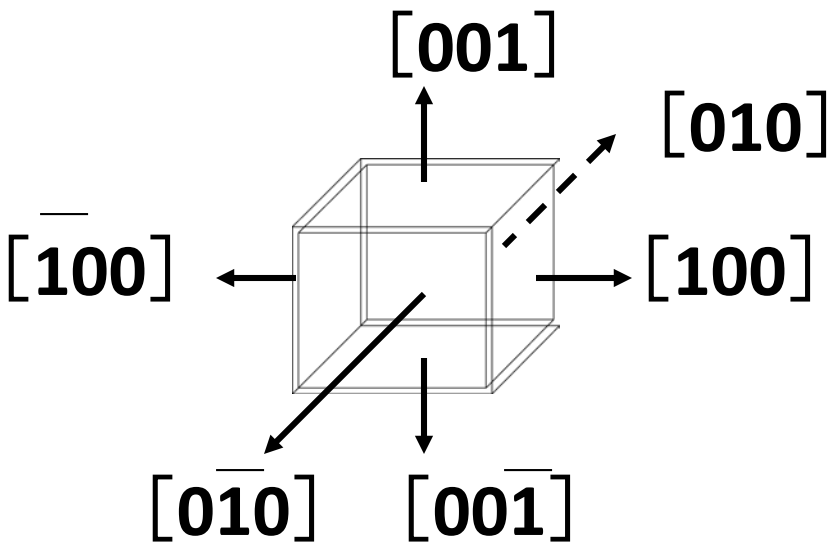
~~晶列(11−1)~~

~~晶列[11−1]~~

~~晶列$(11\bar{1})$~~

晶列$[11\bar{1}]$ √

在立方体中有，沿立方边的晶列一共有6个不同的晶向，由于晶格的对称性，这6个晶向并没有什么区别，晶体在这些方向上的性质是完全相同的，统称这些方向为等效晶向，写成〈100〉。



简单立方晶格的晶向标志

立方边OA的晶向 [100]

立方边共有6个不同的晶向

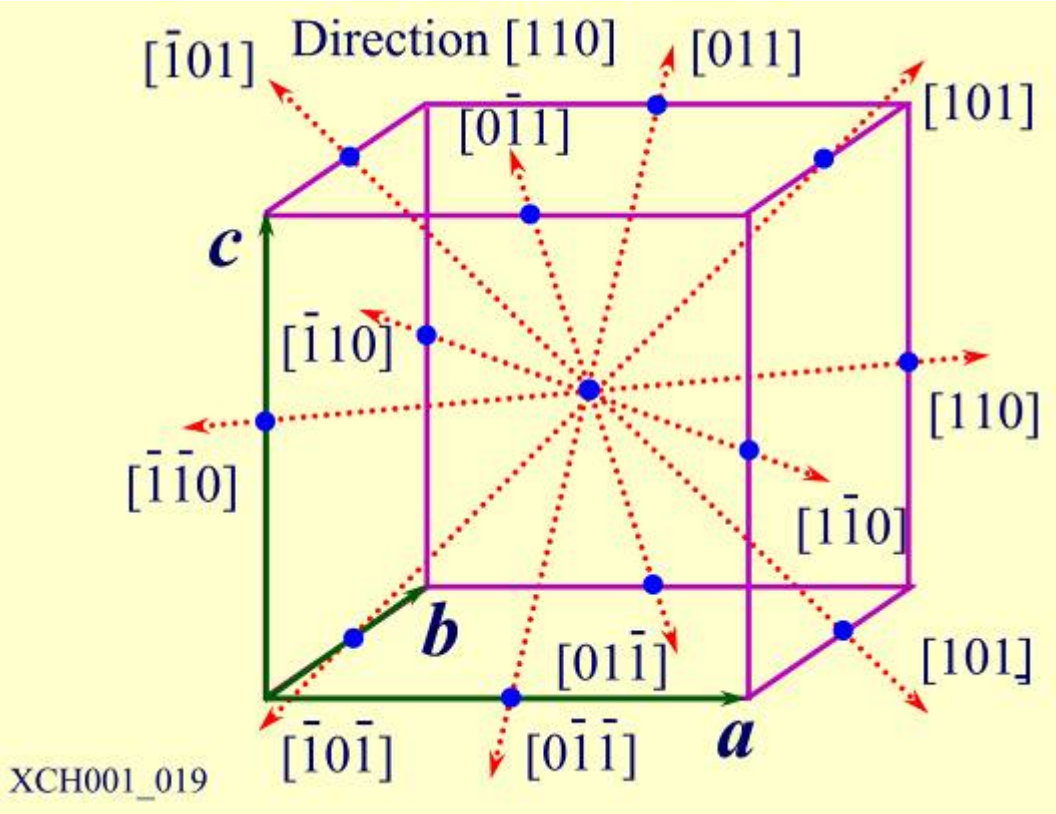
$[100], [\bar{1}00], [010]$

$[0\bar{1}0], [001], [00\bar{1}]$

面对角线OB的晶向

[110]

—— 面对角线晶向共有12个



对角线OC的晶向 [111]

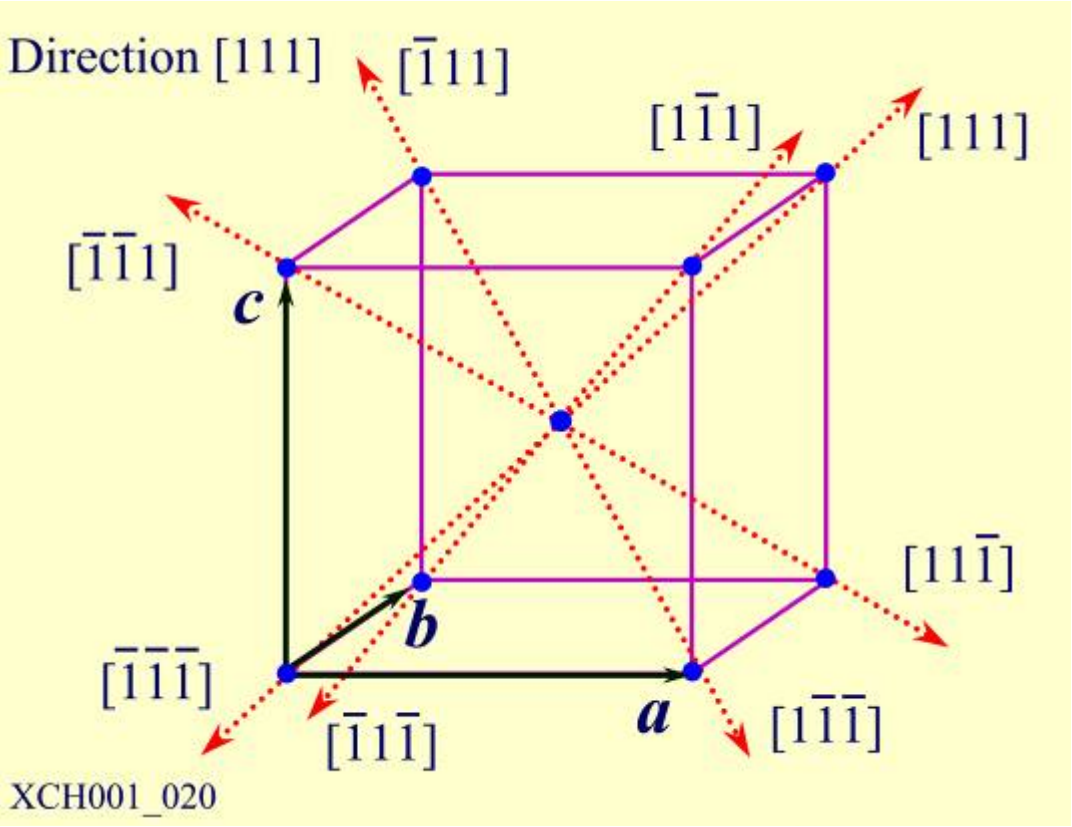
对角线晶向共有8个

—— 由于立方晶格的对称性，以上3组晶向是等效的，表示为

<100>

<110>

<111>



1.3.2 晶面及密勒指数

1. 晶面

在晶格中，通过任意三个不在同一直线上的格点作一平面，称为晶面，描写晶面方位的一组数称为晶面指数。

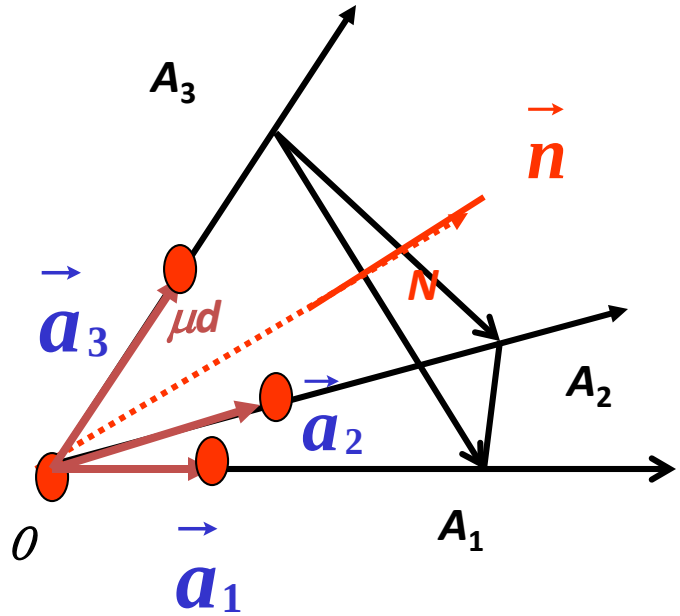
(1) 平行的晶面组成晶面族，晶面族包含所有格点；
(2) 晶面上格点分布具有周期性；
(3) 同一晶面族中的每一晶面上，格点分布(情况)相同；
(4) 同一晶面族中相邻晶面间距相等。

2. 晶面指数

晶面方位 $\begin{cases} \text{晶面的法线方向(法线方向与三个坐标轴夹角)} \\ \text{晶面在三个坐标轴上的截距} \end{cases}$

(1) 以固体物理学原胞基矢表示

如图*取一格点为顶点*，原胞的三个基矢$\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3$为坐标系的三个轴，设某一晶面与三个坐标轴分别交于$A_1, A_2, A_3$，设晶面的法线$ON$交晶面$A_1A_2A_3$于$N$，$ON$长度为$\mu d$，$d$为该晶面族相邻晶面间的距离，$\mu$为整数，该晶面法线方向的单位矢量用$\vec{n}$表示，则晶面$A_1A_2A_3$的方程为：

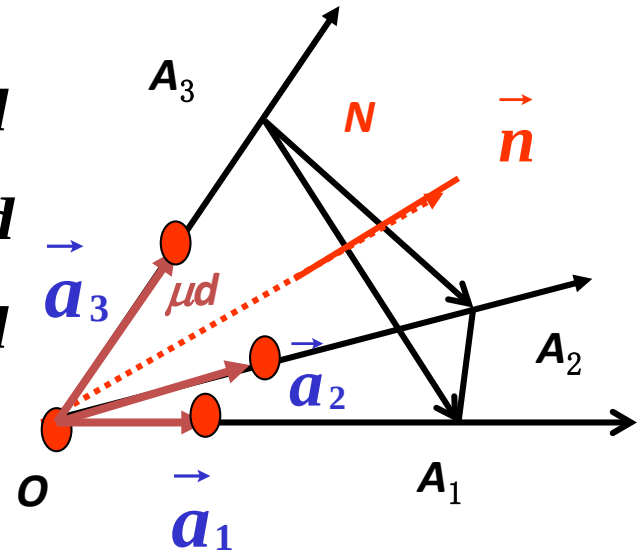


$$\vec{X}\cdot\vec{n}=\mu d$$

$$\boxed{\vec{X}\cdot\vec{n}=\mu d}$$

设$\overrightarrow{OA_1}=r\vec{a}_1,\overrightarrow{OA_2}=s\vec{a}_2,\overrightarrow{OA_3}=t\vec{a}_3$

$$\begin{cases} r\vec{a}_1\cdot\vec{n}=\mu d \\ s\vec{a}_2\cdot\vec{n}=\mu d \\ t\vec{a}_3\cdot\vec{n}=\mu d \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} r\,a_1\cos\left(\vec{a}_1,\vec{n}\right)=\mu d \\ s\,a_2\cos\left(\vec{a}_2,\vec{n}\right)=\mu d \\ t\,a_3\cos\left(\vec{a}_3,\vec{n}\right)=\mu d \end{cases}$$



取a_1,a_2,a_3为天然长度单位，则得：

$$\cos\left(\vec{a}_1,\vec{n}\right):\cos\left(\vec{a}_2,\vec{n}\right):\cos\left(\vec{a}_3,\vec{n}\right)=\frac{1}{r}:\frac{1}{s}:\frac{1}{t}$$

晶面的法线方向与三个坐标轴(基矢)的夹角的余弦之比，等于晶面在三个轴上的截距的倒数之比。

$$\cos(\vec{a}_1,\vec{n}):\cos(\vec{a}_2,\vec{n}):\cos(\vec{a}_3,\vec{n})=\frac{1}{r}:\frac{1}{s}:\frac{1}{t}$$

可以证明：*r, s, t必是一组有理数*---阿羽依的有理数定理。

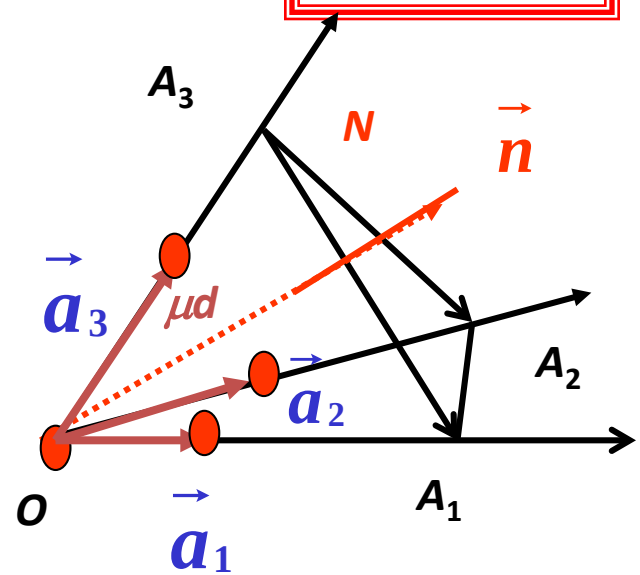
设$\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3$的末端上的格点分别在离原点距离$h_1d$、$h_2d$、$h_3d$的晶面上，这里 h_1、h_2、h_3为整数 。

(1) *所有格点都包容在一族晶面上*；因此给定晶面族中必有一个晶面通过坐标系的原点；在基矢 $\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3$ 末端上的格点也一定落在该晶面族的晶面上；

(2) *同一晶面族中的晶面平行且相邻晶面间距相等*, 故在原点与基矢的末端间一定只有整数个晶面。

$$\boxed{\vec{X}\cdot\vec{n}=\mu d}$$

$$\begin{cases}\vec{a}_1\cdot\vec{n}=h_1 d\\ \vec{a}_2\cdot\vec{n}=h_2 d\\ \vec{a}_3\cdot\vec{n}=h_3 d\end{cases}\Longrightarrow\begin{cases}a_1\cos\left(\vec{a}_1,\vec{n}\right)=h_1 d\\ a_2\cos\left(\vec{a}_2,\vec{n}\right)=h_2 d\\ a_3\cos\left(\vec{a}_3,\vec{n}\right)=h_3 d\end{cases}$$



取a_1,a_2,a_3为天然长度单位得：

$$\cos(a_1,n):\cos(a_2,n):\cos(a_3,n)=h_1:h_2:h_3$$

晶面的法线与三个基矢的夹角余弦之比等于三个整数之比。

又 $$\cos(a_1,n):\cos(a_2,n):\cos(a_3,n)=\frac{1}{r}:\frac{1}{s}:\frac{1}{t}$$

$$\boxed{h_1:h_2:h_3=\frac{1}{r}:\frac{1}{s}:\frac{1}{t}}$$

$$\boxed{h_1 : h_2 : h_3 = \frac{1}{r} : \frac{1}{s} : \frac{1}{t}}$$

因为h_1、h_2、h_3为整数，所以r、s、t必为有理数。

任一晶面在坐标轴上的截距r，s，t必是一组有理数。

可以证明h_1，h_2，h_3一定是互质的，称它们为该晶面族的面指数，记为$(h_1h_2h_3)$。

综上所述，晶面指数$(h_1h_2h_3)$表示的意义是；

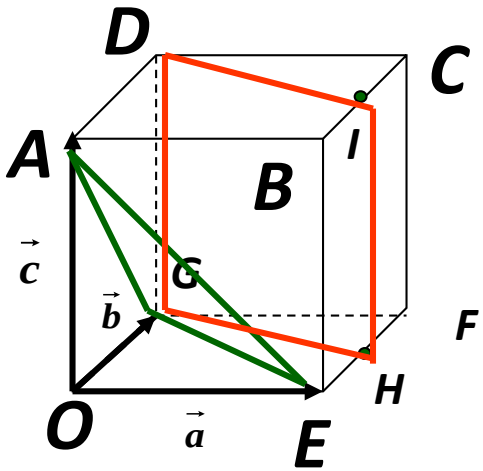
(1)基矢$\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3$被平行的晶面等间距的分割成$h_1$、$h_2$、$h_3$等份；

(2)以a_1,a_2,a_3为各轴的长度单位所求得的晶面在坐标轴上的截距倒数的互质比；

(3)晶面的法线与基矢夹角的方向余弦的比值。

以布拉维原胞基矢 $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ 为坐标轴来表示的晶面指数称为密勒指数，用(*hkl*)表示。

例2：如图所示 $\vec{a}\perp\vec{b}\perp\vec{c}$，*I*和*H*分别为*BC*，*EF*之中点，试求晶面*AEG*，*ABCD*，*OEFG*，*DIHG*的密勒指数。



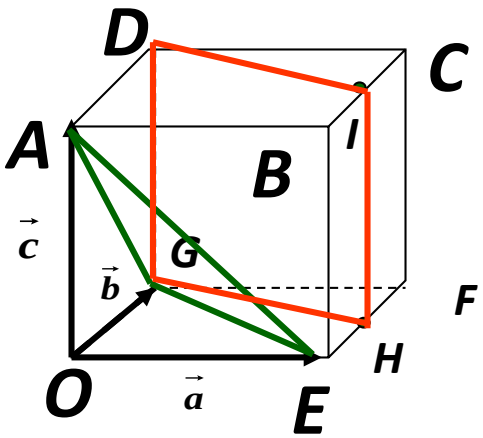
		AEG	*ABCD*	*DIHG*
在三个坐标轴上的截距	*h'*	1	∞	2
	k'	1	∞	1
	l'	1	1	∞

		AEG	ABCD	DIHG
在三个坐标轴上的截距	h'	1	∞	2
	k'	1	∞	1
	l'	1	1	∞
$h:k:l=\frac{1}{h'}:\frac{1}{k'}:\frac{1}{l'}$		1:1:1	$\frac{1}{\infty}:\frac{1}{\infty}:\frac{1}{1}$	$\frac{1}{2}:\frac{1}{1}:\frac{1}{\infty}$
(*hkl*)		(111)	(001)	(120)

AEG 的密勒指数是(111)；

*OEFG*的密勒指数是(001)；

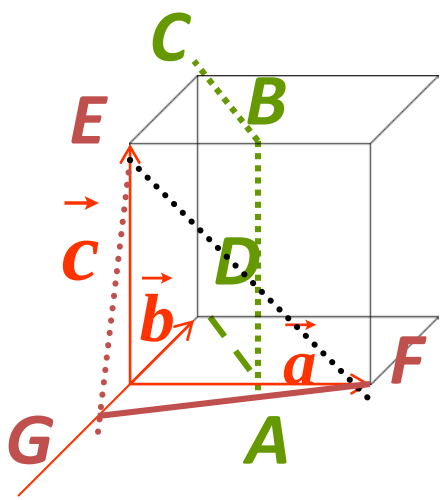
*DIHG*的密勒指数是(120)。



例3:　在立方晶系中画出(210)、$(1\bar{2}1)$ 晶面。

晶面在三个坐标轴上的截距分别为：

	$\vec{a}$	$\vec{b}$	$\vec{c}$
(210)	$\frac{1}{2}$	1	∞
$(1\bar{2}1)$	1	$-\frac{1}{2}$	1



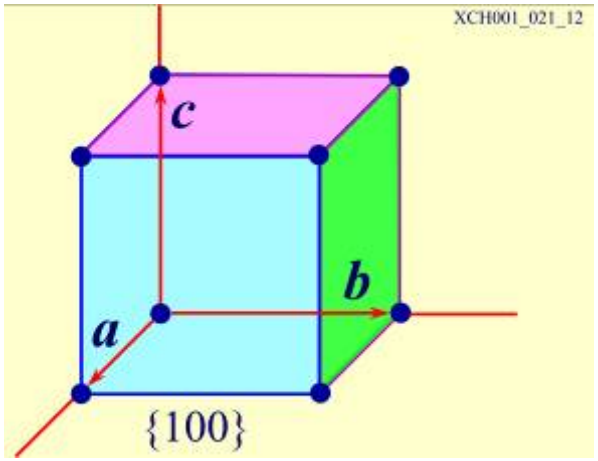
密勒指数是(210) 的晶面是*ABCD*面；

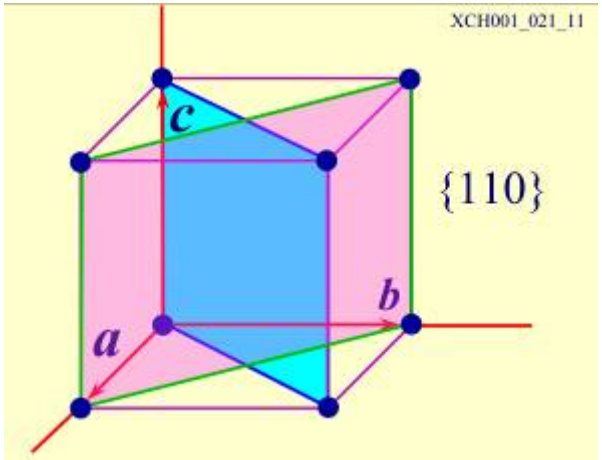
密勒指数是 $(1\bar{2}1)$的晶面是*EFG*面；

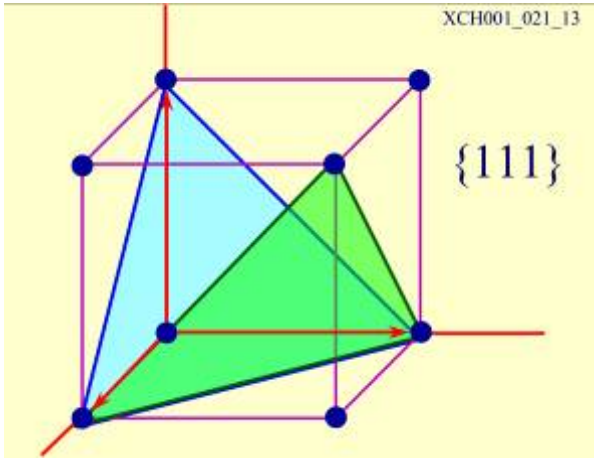
(100) 面等效的晶面数分别为：3个　表示为 {100}

(110) 面等效的晶面数分别为：6个　表示为 {110}

(111) 面等效的晶面数分别为：4个　表示为 {111}







—— 符号相反的晶面指数只是在区别晶体的外表面时才有意义, 在晶体内部这些面都是等效的