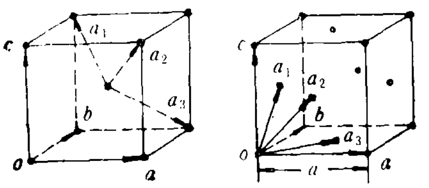
立方晶系两套晶列、晶面指数的转换

王 矜 奉

（山东大学物理系）

晶列和晶面的指数与坐标系的选择有关．以布喇菲晶胞基矢为坐标系时，晶面密勒指数记为 (hkl)[1]，立方晶系的晶列指数记为 $[hkl]$；以初基原胞基矢为坐标系时，晶面指数记为 $(h_1h_2h_3)$，而晶列指数记为 $[l_1l_2l_3]$[2]．坐标系不同，同一晶面族的晶面指数和密勒指数一般都不相同．晶列的情况也是如此．本文仅就体心立方和面心立方点阵的两套指数的转换关系加以讨论．

体心立方和面心立方的晶胞基矢 $\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$，$\boldsymbol{c}$ 与初基原胞基矢 $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$ 和 $\boldsymbol{a}_3$ 的习惯选取方法如图 1 所示．由图 1 不难求出两套基矢间的转换关系．



体心立方　　　面心立方

图 1　体心立方和面心立方基矢的选取

对于体心立方点阵，

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 \\ \boldsymbol{a}_2 \\ \boldsymbol{a}_3 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{a} \\ \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{c} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{a} \\ \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 \\ \boldsymbol{a}_2 \\ \boldsymbol{a}_3 \end{bmatrix}. \tag{1}$$

对于面心立方点阵，

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 \\ \boldsymbol{a}_2 \\ \boldsymbol{a}_3 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{a} \\ \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{c} \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{a} \\ \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 \\ \boldsymbol{a}_2 \\ \boldsymbol{a}_3 \end{bmatrix}. \tag{2}$$

倒格基矢的转换也有类似的结果．我们把对应 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}$ 的倒格基矢记为 $\boldsymbol{a}^*$，$\boldsymbol{b}^*$，$\boldsymbol{c}^*$，对应 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3$ 的倒格基矢记为 $\boldsymbol{b}_1$，$\boldsymbol{b}_2$，$\boldsymbol{b}_3$．对于体心立方点阵，两套倒格基矢间的转换关系为

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{b}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^* \\ \boldsymbol{b}^* \\ \boldsymbol{c}^* \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^* \\ \boldsymbol{b}^* \\ \boldsymbol{c}^* \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{b}_3 \end{bmatrix}. \tag{3}$$

对于面心立方点阵，有

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{b}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^* \\ \boldsymbol{b}^* \\ \boldsymbol{c}^* \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^* \\ \boldsymbol{b}^* \\ \boldsymbol{c}^* \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{b}_3 \end{bmatrix}. \tag{4}$$

一、晶列指数的转换

对于体心立方点阵，若已知 $[l_1l_2l_3]$，以行阵 $[l_1l_2l_3]$ 乘以(1)式中的左式两端，得到

$$l_1\boldsymbol{a}_1 + l_2\boldsymbol{a}_2 + l_3\boldsymbol{a}_3 = \frac{1}{2}[(-l_1 + l_2 + l_3)\boldsymbol{a} + (l_1 - l_2 + l_3)\boldsymbol{b} + (l_1 + l_2 - l_3)\boldsymbol{c}].$$

由上式即可得到晶列指数 $[hkl]$ 为

$$[hkl] = \frac{1}{p}[(-l_1 + l_2 + l_3) \cdot (l_1 - l_2 + l_3)(l_1 + l_2 - l_3)], \tag{5}$$

其中 p 是一整数，它的引入是为了保证 h，k，l 为互质数，它等于 $(-l_1 + l_2 + l_3)$，$(l_1 - l_2 + l_3)$ 和 $(l_1 + l_2 - l_3)$ 的公因数

若已知 $[hkl]$，以行阵 $[hkl]$ 乘以(1)式中的右式两端，则得到

$$[l_1l_2l_3] = \frac{1}{p'}[(k + l)(l + h)(h + k)]. \tag{6}$$

同理，对于面心立方点阵，有

$$[hkl]=\frac{1}{p}[(l_2+l_3)(l_3+l_1)(l_1+l_2)], \quad (7)$$

$$[l_1l_2l_3]=\frac{1}{p'}[(-h+k+l)(h-k+l)\cdot(h+k-l)]. \quad (8)$$

二、晶面指数的转换

对于体心立方点阵，若已知晶面指数$(h_1h_2h_3)$，以行阵 $[h_1h_2h_3]$ 乘以(3)式中的左式两端，得

$$h_1\boldsymbol{b}_1+h_2\boldsymbol{b}_2+h_3\boldsymbol{b}_3=(h_2+h_3)\boldsymbol{a}^*+(h_3+h_1)\boldsymbol{b}^*+(h_1+h_2)\boldsymbol{c}^*.$$

由上式即得对应$(h_1h_2h_3)$晶面族的密勒指数为

$$(hkl)=\frac{1}{p}((h_2+h_3)(h_3+h_1)(h_1+h_2)). \quad (9)$$

若已知(hkl)，以行阵$[hkl]$乘以(3)式中的右式，则得到

$$(h_1h_2h_3)=\frac{1}{p'}((-h+k+l)(h-k+l)\cdot(h+k-l)). \quad (10)$$

同样，对于面心立方点阵，有

$$(hkl)=\frac{1}{p}((-h_1+h_2+h_3)(h_1-h_2-h_3)\cdot(h_1+h_2-h_3)), \quad (11)$$

$$(h_1h_2h_3)=\frac{1}{p'}((k+l)(l+h)(h+k)). \quad (12)$$

三、面间距和衍射级数

对于体心立方点阵，利用公式

$$d_{h_1h_2h_3}=2\pi/|h_1\boldsymbol{b}_1+h_2\boldsymbol{b}_2+h_3\boldsymbol{b}_3|$$

和(3)式中的左式，可得到初基原胞坐标系中的晶面间距为

$$d_{h_1h_2h_3}=\frac{a}{\sqrt{(h_2+h_3)^2+(h_3+h_1)^2+(h_1+h_2)^2}}. \quad (13)$$

对于面心立方点阵，同理可得

$$d_{h_1h_2h_3}=a/[(-h_1+h_2+h_3)^2+(h_1-h_2+h_3)^2+(h_1+h_2-h_3)^2]^{\frac{1}{2}}. \quad (14)$$

将(10)式代入(13)式，(12)式代入(14)式，均可得到

$$d_{h_1h_2h_3}=\frac{p'a}{2\sqrt{h^2+k^2+l^2}}.$$

因为

$$\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}=d_{hkl} \quad (15)$$

是立方晶系布喇菲晶胞坐标中的面间距，所以对于立方晶系，面间距的关系为

$$d_{h_1h_2h_3}=\frac{p'}{2}d_{hkl}. \quad (16)$$

对于体心立方点阵，p' 是 $(-h+k+l)$，$(h-k+l)$，$(h+k-l)$ 的公因数，对于面心立方点阵，p' 是 $(k+l)$，$(l+h)$，$(h+k)$ 的公因数。

将(16)式代入初基原胞坐标中的布喇格反射公式

$$2d_{h_1h_2h_3}\sin\theta=n'\lambda \quad (17)$$

中，得到 $2d_{hkl}\sin\theta=2n'\lambda/p'$，将该式与布喇菲晶胞坐标中的布喇格反射公式

$$2d_{hkl}\sin\theta=n\lambda \quad (18)$$

相比较，即可得到两套衍射级数间的关系为

$$n=\frac{2n'}{p'}. \quad (19)$$

为说明以上转换关系的应用，下面讨论面心立方简单点阵的密勒指数为$(\bar{1}21)$的晶面族的衍射情况．将$(\bar{1}21)$代入(12)式，得

$$(h_1h_2h_3)=(301),\quad p'=1.$$

再由(19)式可知，$n=2n'$．这说明，对于$(\bar{1}21)$晶面族来说，初基原胞坐标系中的一级衍射正对应布喇菲晶胞坐标系中的二级衍射，也就是说，对于面心立方简单点阵的$(\bar{1}21)$晶面族，衍射极大的最小级数不是1而是2．

[1] [美] C. 斯特尔著，杨顺华等译，固体物理导论，科学出版社，(1979)，17—20.
[2] 方俊鑫、陆栋，固体物理学，上海科学技术出版社，(1980)，22—26.