



石家莊鐵道大學  
SHIJIAZHUANG TIEDAO UNIVERSITY

在线开放课程

X射线衍射技术

晶体结构

主讲：杨治刚

# 目录



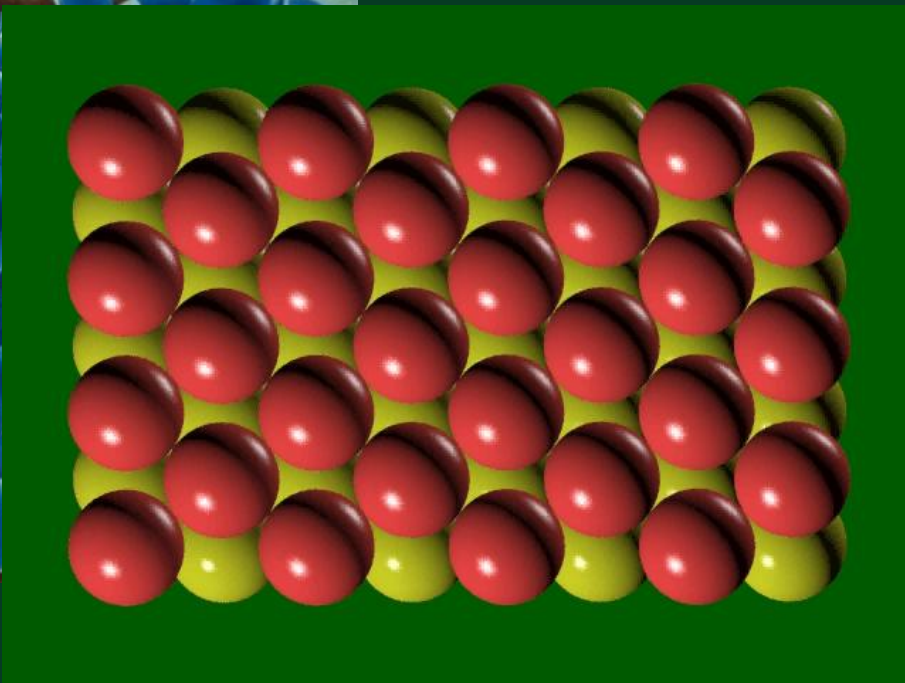
在线开放课程

1 晶体结构

2 晶向和晶面指数

3 晶带

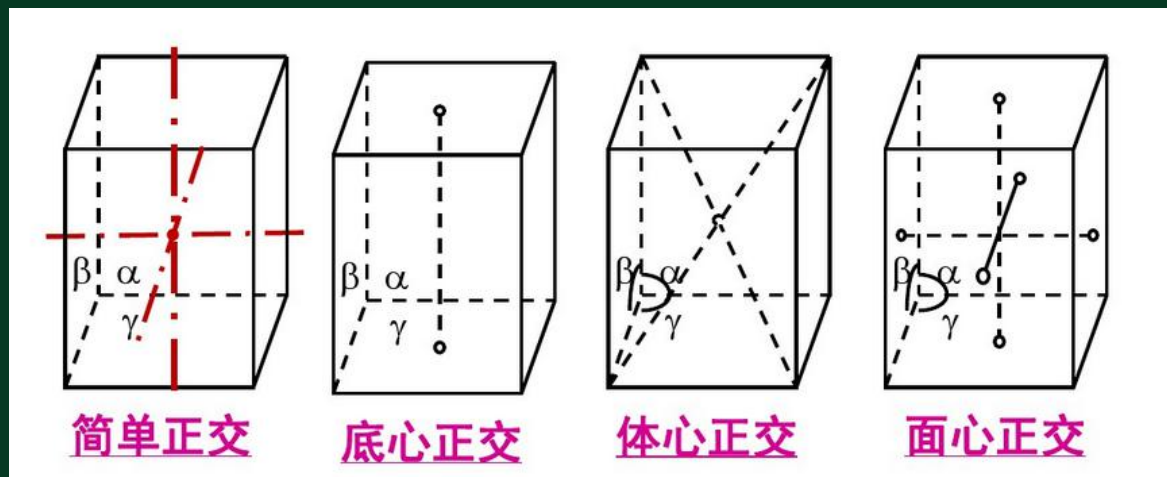
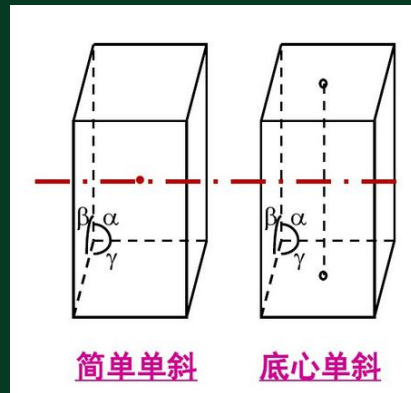
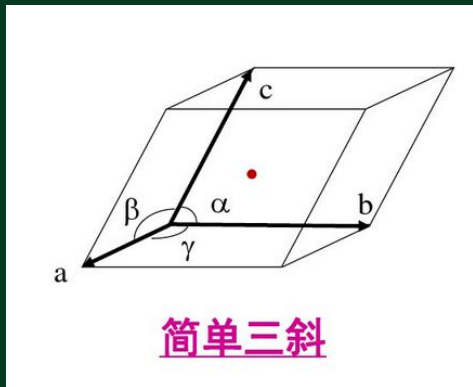
# 1. 晶体结构

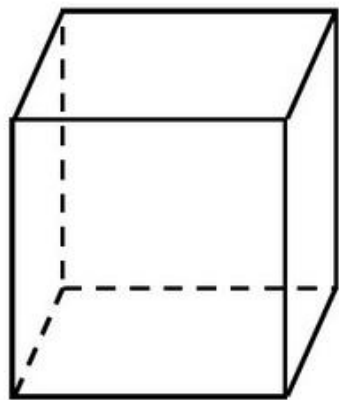
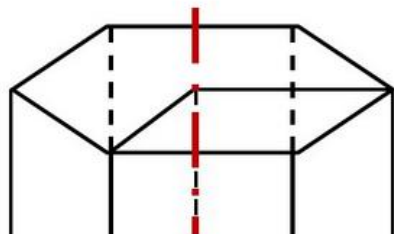
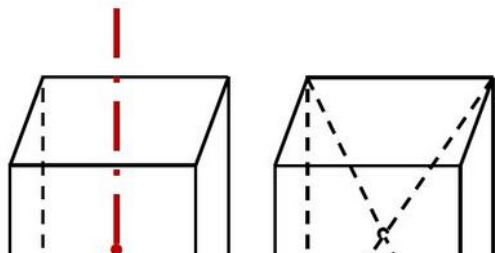
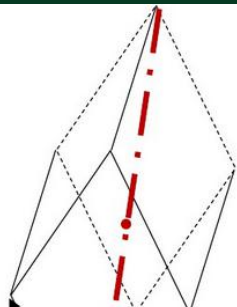


晶体结构：三维空间呈规则排列的点阵，  
又称空间点阵。

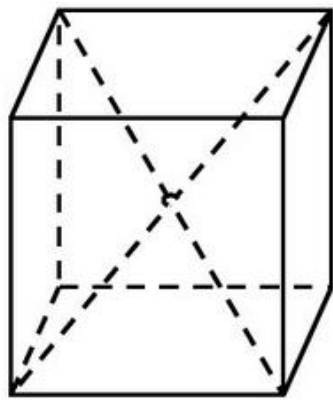
# 七大晶系（反应周期性和对称性）

级别	晶系	布拉伐格子	对称特征 (基本对称元素)	晶胞基矢的特性	所属 点群
低级	三斜	简单三斜	没有对称轴或只有一个反演中心	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	$C_1$ 、 $C_i=S_2$
	单斜	简单单斜, 底心单斜	一个2度轴或1个对称面	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta \neq 90^\circ$	$C_2$ 、 $C_{2h}$ 、 $C_s=C_{1h}=C_{1v}$
	正交	简单正交, 底心正交, 体心正交, 面心正交。	有3个互相垂直的2度轴	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$D_2$ 、 $D_{2h}$ 、 $C_{2v}$
中级	三方	三方/三角	一个3度轴	$a=b=c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$C_3$ 、 $C_{3i}=S_6$ 、 $C_{3v}$ 、 $D_3$ 、 $D_{3d}$
	四方	简单四方, 体心四方	一个4度轴	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$C_4$ 、 $C_{4h}$ 、 $C_{4v}$ 、 $D_4$ 、 $D_{4h}$ 、 $D_{2d}$ 、 $S_4$
	六方	六方/六角	一个6度轴	$a=b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	$C_6$ 、 $C_{6h}$ 、 $C_{6v}$ $C_{3h}$ 、 $D_{3h}$ 、 $D_6$ 、 $D_{6h}$ 、
高级	立方	简单立方, 体心立方, 面心立方	四个3度轴	$a=b=c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$T$ 、 $T_h$ 、 $T_d$ 、 $O$ 、 $O_h$

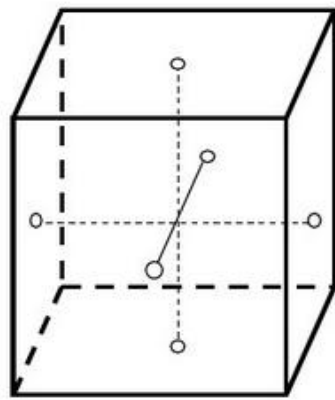




简单立方



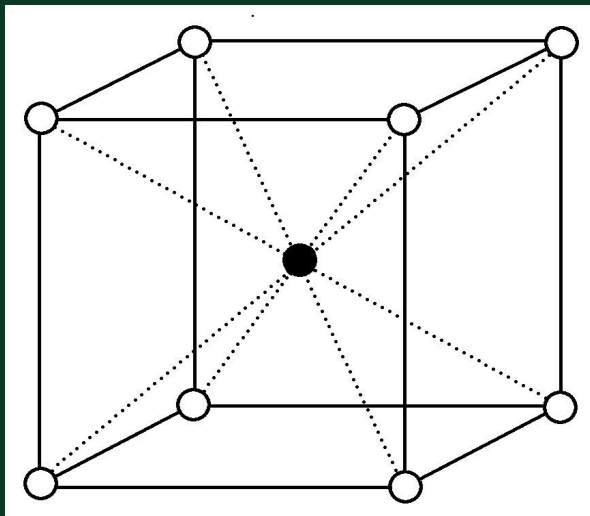
体心立方



面心立方

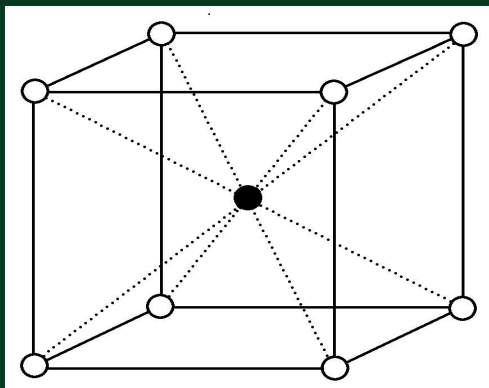
## 2.晶向指数与晶面指数

- 在晶格中，穿过两个以上结点的任一直线，都代表晶体中一个原子列在空间的位向，称为晶向；
- $[uvw]$ ：确定晶向的一组数，表示所有相互平行、方向一致的晶向。



## 2. 晶向指数与晶面指数

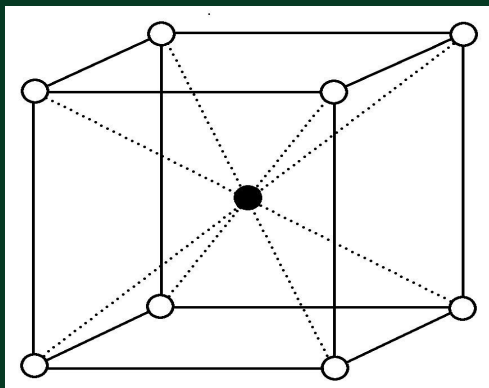
- 由**结点组成的任一平面**都代表晶体的原子平面，称为晶面。
- $(hkl)$  : 晶面在3个结晶轴上的**截距系数的倒数比**，当化为最简单的**整数比**后，所得出的3个整数  $h$ 、 $k$ 、 $l$  称为该晶面的米勒指数 (Miller indices) 。





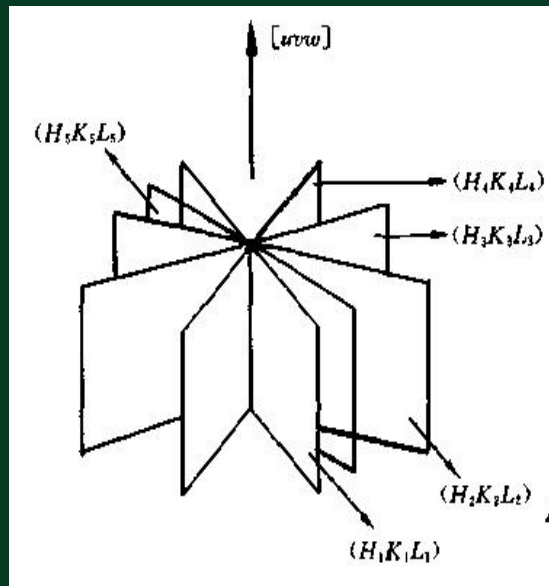
## 2. 晶向指数与晶面指数

- 晶面指数所代表的**不仅是某一晶面**，而是代表着一组**相互平行的晶面**。
- 另外，在晶体内凡**晶面间距和晶面上原子的分布完全相同**，只是**空间位向不同**的晶面可以归并为同一**晶面族**，以  $\{h\ k\ l\}$  表示，它代表由对称性相联系的若干组等效晶面的总和。



### 3.晶带定理

- 晶体中，与某一晶向 $[uvw]$ 平行的所有 $(HKL)$ 晶面属于同一晶带，称为 $[uvw]$ 晶带。
- 晶向 $[uvw]$ 中过（点阵坐标）原点的直线称为晶带轴，其矢量坐标表达式为



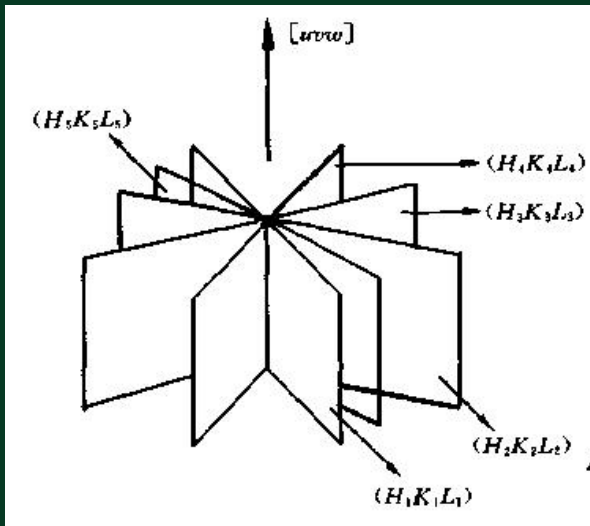
$[uvw]$ 晶带

$$\vec{r}_{uvw} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

- 由于同一 $[uvw]$ 晶带各  
 ( $hkl$ ) 晶面中法线与  
 晶带轴垂直, 也即各  
 ( $hkl$ ) 面对应的倒易  
 矢量 $r^*_{hkl}$ 与晶带轴垂  
 直, 故有

$$Hu + Kv + Lw = 0$$

- 得到晶带定理



$[uvw]$ 晶带

$$\vec{r}_{uvw} \bullet \vec{r}^*_{hkl} = (u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}) \bullet (H\vec{a}^* + K\vec{b}^* + L\vec{c}^*) = 0$$

# 晶带及表征

所有平行或相交于某一直线的晶面构成一个晶带，此直线称为晶带轴。属此晶带的晶面称为共带面。

晶带轴 $[u\ v\ w]$ 与该晶带的晶面 $(h\ k\ l)$ 之间存在以下关系： $hu + kv + lw = 0$

凡满足此关系的晶面都属于以 $[u\ v\ w]$ 为晶带轴的晶带，故此关系式也称作晶带定律。

# 晶带定律的应用

已知晶带中任意两晶面  $(H_1K_1L_1)$  与  $(H_2K_2L_2)$ ，  
求晶带轴指数  $[uvw]$ 。

解：根据晶带定理，有  $H_1u + K_1v + L_1w = 0$

$$H_2u + K_2v + L_2w = 0$$

解此联立方程，得

$$u : v : w = \begin{vmatrix} K_1 & L_1 \\ K_2 & L_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} L_1 & H_1 \\ L_2 & H_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} H_1 & K_1 \\ H_2 & K_2 \end{vmatrix}$$
$$= (K_1L_2 - K_2L_1) : (L_1H_2 - L_2H_1) : (H_1K_2 - H_2K_1)$$

# 求属于两个晶带的平面

求包含 $[u_1v_1w_1]$ 与 $[u_2v_2w_2]$ 晶带轴的晶面(HKL)。

解：根据晶带定理

$$Hu_1 + Kv_1 + Lw_1 = 0$$

$$Hu_2 + Kv_2 + Lw_2 = 0$$

解此联立方程，得

$$H : K : L = \begin{vmatrix} v_1 w_1 \\ v_2 w_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} w_1 u_1 \\ w_2 u_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} u_1 v_1 \\ u_2 v_2 \end{vmatrix}$$

# 小结



在线开放课程

1. 七大晶系

2. 晶向，晶面，晶带指数