第七课：倒易点阵的矢量分析

Friday, October 11, 2019 1:58 AM

1. 标积：$\vec{a}\cdot\vec{b}=ab\cos\gamma$，$\vec{a}\cdot\vec{b}=\vec{b}\cdot\vec{a}$；
2. 矢积：$\vec{a}\times\vec{b}=ab\sin\gamma$，$\vec{a}\times\vec{b}=-(\vec{b}\times\vec{a})$；
3. 混合积：$[\vec{a}\vec{b}\vec{c}]=(\vec{a}\times\vec{b})\cdot\vec{c}=\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})$；
   a. 混合积的几何意义：
      矢量的混合积的绝对值表示以矢量$\vec{a},\vec{b},\vec{c}$为棱的平行六面体的体积。如果矢量$\vec{a},\vec{b},\vec{c}$组成一个右手系，那么积的符号是正的。如果组成一个左手系，则符号负的；
4. 如果晶体点阵中有三个晶轴矢量$\vec{a}$，$\vec{b}$，$\vec{c}$ (一组素向量)，则相应的倒易点阵晶轴矢量为$\overrightarrow{a^*},\overrightarrow{b^*},\overrightarrow{c^*}$(一组素向量)：
   a. $\overrightarrow{a^*}\cdot\vec{b}=\overrightarrow{a^*}\cdot\vec{c}=\overrightarrow{b^*}\cdot\vec{a}=\overrightarrow{b^*}\cdot\vec{c}=\overrightarrow{c^*}\cdot\vec{a}=\overrightarrow{c^*}\cdot\vec{b}=0$(决定方向)；
   b. $\overrightarrow{a^*}\cdot\vec{a}=\overrightarrow{b^*}\cdot\vec{b}=\overrightarrow{c^*}\cdot\vec{c}=1$(决定长度)；
5. 倒格基矢：$\overrightarrow{a^*}=\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{[\vec{a}\vec{b}\vec{c}]},\overrightarrow{b^*}=\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{[\vec{a}\vec{b}\vec{c}]},\overrightarrow{c^*}=\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{[\vec{a}\vec{b}\vec{c}]}$；
6. 晶面间距：凡是一组平行晶面中最相邻的两个晶面间的距离。在晶体中晶面指数最低的晶面总数有最大的晶面间距。对于晶面$(h\ k\ l)$，最相邻晶面间距记作d_{hkl}；
7. 利用倒格子推导晶面距离：
   $\vec{H}=h\overrightarrow{a^*}+k\overrightarrow{b^*}+l\overrightarrow{c^*}$
   $\vec{H}=\frac{1}{d_{hkl}}$
   $\frac{1}{d_{hkl}^2}=\vec{H}^2=\vec{H}\cdot\vec{H}=\left(h\overrightarrow{a^*}+k\overrightarrow{b^*}+l\overrightarrow{c^*}\right)\cdot\left(h\overrightarrow{a^*}+k\overrightarrow{b^*}+l\overrightarrow{c^*}\right)$
   $=h^2\overrightarrow{a^*}^2+k^2\overrightarrow{b^*}^2+l^2\overrightarrow{c^*}^2+2hk\left[\overrightarrow{a^*}\cdot\overrightarrow{b^*}+2hl\left(\overrightarrow{a^*}\cdot\overrightarrow{c^*}\right)+2kl\left(\overrightarrow{b^*}\cdot\overrightarrow{c^*}\right)\right]$
   对于立方晶系：$d_{hkl}=\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$；
8. 晶面夹角：不平行晶面间的夹角；
   a. 简约的晶面指数：把晶面指数除以最大公约数而获得的晶面指数最简整数比。
      i. 平行的晶面具有相同的简约晶面指数；
9. 晶向夹角：不平行的两个晶向之间的夹角(晶向指数不同)；
   a. 不同晶系的夹角计算方式不同；
10. 在立方晶系中，具有相同指数的晶向与晶面相垂直；
11. 晶带：在晶体中如果许多晶面同时平行于一个晶向时，则这些晶面称为晶带，这个晶向称为晶带轴；
    a. 如果晶带轴为$[u\ v\ w]$，任何晶面具有$(h\ k\ l)$符合：$hu+kv+lw=0$，则这个$(h\ k\ l)$晶面属于以$[u\ v\ w]$为晶带轴的一个晶带；
    b. 如果两个晶面和属于以为晶带轴的晶带，则有：
    $$\begin{cases}u=\begin{vmatrix}k_1 & k_2\\ l_1 & l_2\end{vmatrix}\\ v=\begin{vmatrix}l_1 & l_2\\ h_1 & h_2\end{vmatrix}\\ w=\begin{vmatrix}h_1 & h_2\\ k_1 & k_2\end{vmatrix}\end{cases};$$
    c. 如果一个晶面$(h\ k\ l)$同时属于两个晶带，其晶带轴分别为$[u_1\ v_1\ w_1]$和$[u_2\ v_2\ w_2]$，则晶面指数为：