



晶体的结构

3. 晶面和晶向, 米勒指数, 倒格子

冯济

2026 年 3 月 17 日

北京大学 物理学院
量子材料科学中心

1. 晶面和晶向, 米勒指数
2. 倒格子和倒空间



晶面和晶向, 米勒指数

晶列

布拉维点阵的格点可以看成分列在一系列相互平行的直线族上，这些直线族称为**晶列**



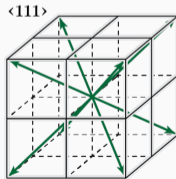
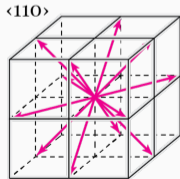
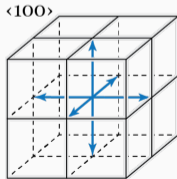
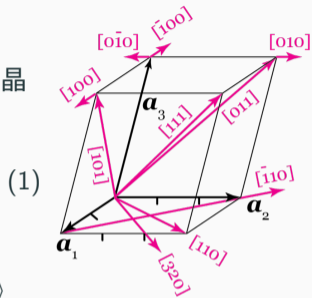
晶向 crystallographic direction

- 各向异性：晶体性质随方向变化, 弹性模量、电导率、热导率等
- 每个非零格矢定义一个晶向. 如果 $\vec{R} = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$ 沿着某晶向的最短非零格矢, 则该晶向记作有序数组

$$[u_1 u_2 u_3]$$

如果 $u_i < 0$, 写作 $\overline{|u_i|}$. 例如, $[\bar{1}20] = \vec{a}_1 - 2\vec{a}_2$.

- 由晶体对称性联系起来的等效方向集合成为晶向族, 记作 $\langle u_1 u_2 u_3 \rangle$



简单立方晶格

六方晶系的晶向的指数表示

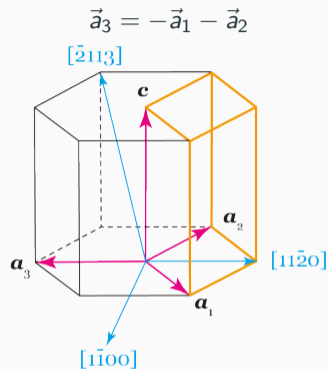
- 六方晶系 (或者采用六方晶胞的菱方结构) 通常引入 4 基矢 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3, \vec{c}$, 晶向记号需 4 个指标 (对晶向描述这是笨拙的)
- 首先假装只有三个基矢, $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{c}$, 确定晶向记号的 3 个数字 $[u_1 u_2 u_3]$, 则 4 指标的晶向记号为 $[uv tw]$

$$u = \frac{1}{3}(2u_1 - u_2), \quad v = \frac{1}{3}(2u_2 - u_1), \quad t = -(u + v), \quad w = u_3. \quad (2)$$

满足 $u\vec{a}_1 + v\vec{a}_2 + t\vec{a}_3 + w\vec{c} \parallel u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{c}$. 反之

$$u_1 = u - t, \quad u_2 = v - t, \quad u_3 = w. \quad (3)$$

- 最后通分简化, 得到整数晶向指标 $[uv tw]$



$$\vec{a}_1 = [100] \mapsto \left[\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{3} 0 \right] \mapsto [2\bar{1}\bar{1}0]$$

$$\vec{a}_2 = [010] \mapsto \left[\frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{3} 0 \right] \mapsto [\bar{1}2\bar{1}0]$$

$$\vec{a}_3 = [0\bar{1}0] \mapsto \left[\frac{1}{3} \frac{1}{3} \frac{2}{3} 0 \right] \mapsto [\bar{1}\bar{1}20]$$

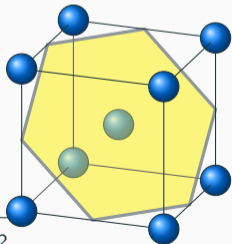
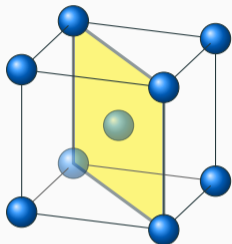
- 任选三个不共线的格点，通过这些点的平面称为**晶面**
- 我们同样希望构建一种表示晶面的记号，适用于所有的布拉维格子，且不依赖于具体的晶胞参数
- 定义：给定晶格基矢 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ ，晶面的**米勒指标** (hkl) – **注意圆括弧** – 对应的晶面在三个基矢上的截距为

$$\vec{a}_1/h, \vec{a}_2/k, \vec{a}_3/l, \quad h, k, l \in \mathbb{Z} \quad (4)$$

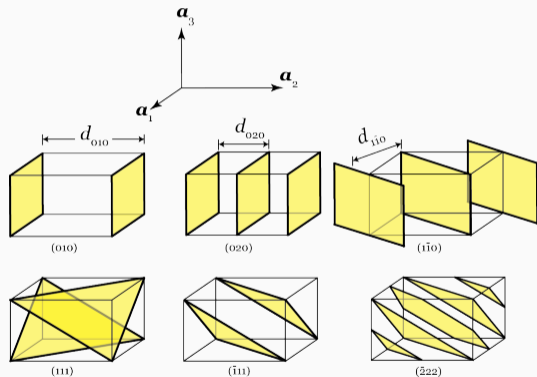
如果 h, k, l 其中之一为零，则该晶面为平行于对应基矢。

- 为什么可以这么做？考虑原来的截距 $\alpha\vec{a}_1, \beta\vec{a}_2, \gamma\vec{a}_3$ ($\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{Q}$) 的晶面，经如下变换可以转化为平移等价的平面

$$\alpha = \frac{q_1}{p_1}, \beta = \frac{q_2}{p_2}, \gamma = \frac{q_3}{p_3} \mapsto \alpha' = \frac{1}{p_1 q_2 q_3}, \beta' = \frac{1}{p_2 q_1 q_3}, \gamma' = \frac{1}{p_3 q_1 q_2}$$



米勒指标



确定米勒指标的步骤:

1. 如果晶面通过原点, 平移到过原点
2. 确定晶面在三个基矢上的截距
 $\alpha\vec{a}_1, \beta\vec{a}_2, \gamma\vec{a}_3$
3. 有序数组 $(\frac{1}{\alpha} \frac{1}{\beta} \frac{1}{\gamma})$, 取 $\frac{1}{\infty} \mapsto 0$
4. 约化到最小整数比 (hkl) . 负号写头顶

注意:

- 指数越小, 面间距也越大
- (hkl) 指定了一组等间距的平行晶面
- 虽然上面的构造过程得到的 h, k, l 互质, 但是将其同时扩大整数倍, $h' = nh, k' = nk, l' = nl$ ($n \neq 0$) 仍有意义

关于米勒指数互质与否的问题

and (200) planes, for $n = 1$. The (100) plane intercepts the X axis at a , and is parallel to the Y and Z axes. This plane and all the remaining ones in the (100) family pass through lattice points in planes parallel to the (\mathbf{b}, \mathbf{c}) plane. The (200) plane intercepts the X axis at $a/2$, and is also parallel to the Y and Z axes. However, *it does not pass through any lattice point*. We would find the same result for the (222) plane and, in general, for any plane (hkl) (with $n = 1$) for which the indices h , k , and l are not relatively prime. The above argument serves the purpose of an illustration, but does not constitute a rigorous proof that the indices h , k , and l represent a family of lattice planes *if and only if* h , k , and l are relatively prime integers. Such a proof, employing number-theoretical arguments, can be found in the article of Deas and Hamill (1957) but is outside the scope of our treatment.

Uri Shmueli. *Theories and Techniques of Crystal Structure Determination* (OUP 2007), pp. 10



关于米勒指数互质与否的问题

set of parallel, equally spaced planes. This is illustrated in Fig. 2.8 for some simple examples. The symbol (hkl) may be taken to mean one individual plane or the whole set.⁷ Unlike crystal direction indices, where the scaling integer is used to reduce u , v , and w to minimum integer values, Miller indices are used unscaled. \hookrightarrow This is because different sets of planes may be parallel (e.g. $(1\ 1\ 0)$, $(2\ 2\ 0)$, $(3\ 3\ 0)$, etc.), but the Miller indices also define the relative spacing between the planes. That is, the spacing of $(nh\ nk\ nl)$ is $1/n$ times the spacing of (hkl) . We will later call this the d -spacing of (hkl) and define a reciprocal lattice made from points separated by d along

Erich H. Kisi and Christopher J. Howard. *Applications of Neutron Powder Diffraction* (OUP 2008), pp. 27

我认为主要问题是所取的基矢是否为初基基矢？

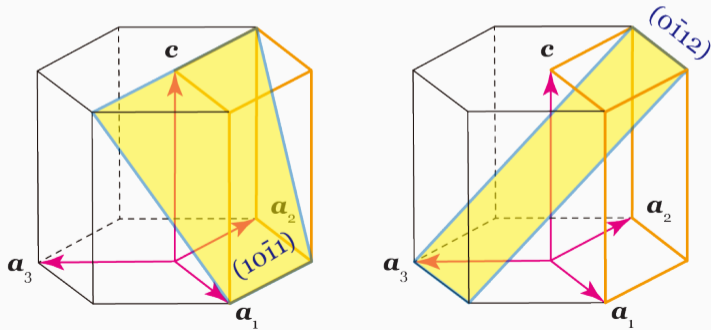
- 如果所取的基矢为初基基矢，则互质的 (hkl) (公约数只有 ± 1) 就可以指定所有可以通过平移联系的等价晶面
- 如果所取的基矢不是初基基矢，例如惯用晶胞加心的情形，则需要引入不互质的 (hkl)



六方晶胞的米勒-布拉维指数

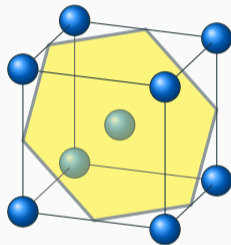
- 对于六方晶胞 (六方或者菱方晶系), 同样也使用 4 基矢体系
- 对应的米勒-布拉维指数为 $(hkil)$, 其中 h, k, l 与通常的米勒指数一样,

$$i = -(h + k) \quad (5)$$



米勒指数

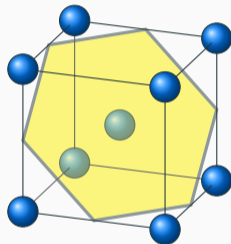
- 晶面族: 由晶体对称性等价的一系列晶面组成**晶面族**, 记作 $\{hkl\}$
- 例如: 体心立方单原子晶体, $\{222\}$ 晶面族包含 $(222), (\bar{2}22), (2\bar{2}2), (2\bar{2}\bar{2}), (\bar{2}\bar{2}\bar{2}), (2\bar{2}\bar{2}), (2\bar{2}\bar{2}), (\bar{2}\bar{2}\bar{2})$.
- 六方晶胞:
 $\{11\bar{2}0\} = \{(11\bar{2}0), (1\bar{2}10), (\bar{2}110), (\bar{1}\bar{1}20), (\bar{1}2\bar{1}0), (2\bar{1}\bar{1}0)\}$
- 一个晶面族包含的独立晶面数量称为简并度 (multiplicity). 晶面族的简并度与晶体对称性有关. 一般而言, 对称性越高, 简并度越高



米勒指数 (hkl) 描述晶面的取向. 有序数组 (hkl) 可以看作一个向量吗? 如果可以, 它和法向量有什么关系?

米勒指数

- 晶面族: 由晶体对称性等价的一系列晶面组成**晶面族**, 记作 $\{hkl\}$
- 例如: 体心立方单原子晶体, $\{222\}$ 晶面族包含 $(222), (\bar{2}22), (2\bar{2}2), (22\bar{2}), (\bar{2}\bar{2}\bar{2}), (2\bar{2}\bar{2}), (22\bar{2}), (\bar{2}\bar{2}\bar{2})$.
- 六方晶胞:
 $\{11\bar{2}0\} = \{(11\bar{2}0), (1\bar{2}10), (\bar{2}110), (\bar{1}120), (\bar{1}2\bar{1}0), (2\bar{1}\bar{1}0)\}$
- 一个晶面族包含的独立晶面数量称为简并度 (multiplicity). 晶面族的简并度与晶体对称性有关. 一般而言, 对称性越高, 简并度越高



米勒指数 (hkl) 描述晶面的取向. 有序数组 (hkl) 可以看作一个向量吗? 如果可以, 它和法向量有什么关系?

倒格子和倒空间

晶面的方程

- 给定在三个晶轴方向上截点为 $\vec{a}_1/h, \vec{a}_2/k, \vec{a}_3/l$ 的晶面, 其方程为

$$\vec{r} \cdot \vec{\xi} = 1$$

则矢量 $\vec{\xi}$ 满足 $\vec{\xi} \cdot \vec{a}_1 = h, \vec{\xi} \cdot \vec{a}_2 = k, \vec{\xi} \cdot \vec{a}_3 = l$.

- 那么, 可以把 $\vec{\xi}$ 写作 $\vec{\xi} = h\vec{e}_1 + k\vec{e}_2 + l\vec{e}_3$, 其中基矢 $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ 满足如下正交关系

$$\vec{a}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij}.$$

- 在固体物理中, 通常在以上正交关系中引入 2π 因子, 要求基矢 $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ 满足如下正交关系

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (6)$$



法向量，晶面间距

- 对应晶面 (hkl) 方程

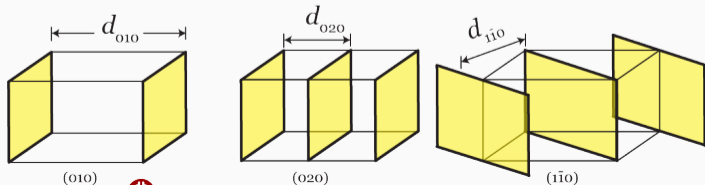
$$\vec{r} \cdot \vec{g} = n2\pi, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (7)$$

- 按以上正交关系(6), 晶面的法向量为

$$\vec{g} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3, \quad (8)$$

- 两个相邻的晶面对应 n 和 $n+1$. 取 $n=0$ 则其间距为 (WLOG, 取 $h \neq 0$)

$$d(hkl) = \frac{\vec{a}_1}{h} \cdot \hat{g} = \frac{\vec{a}_1}{h} \cdot \frac{\vec{g}}{g} = \frac{2\pi}{g} \quad (9)$$



怎么计算 \vec{g} ?

- 计算 \vec{g} 的模长

$$g = \sqrt{\vec{g} \cdot \vec{g}} = \sqrt{g_i g_j \vec{b}_i \cdot \vec{b}_j} = \sqrt{g_i g_j \omega_{ij}}$$

- 其中引入 \vec{b}_i 基的度规 ω_{ij}

$$\omega_{ij} = b_i b_j \cos(\theta_{ij})$$

$$\omega = \begin{bmatrix} b_1^2 & b_1 b_2 \cos \gamma^* & b_1 b_3 \cos \beta^* \\ b_1 b_2 \cos \gamma^* & b_2^2 & b_2 b_3 \cos \alpha^* \\ b_1 b_3 \cos \beta^* & b_2 b_3 \cos \alpha^* & b_3^2 \end{bmatrix}$$

- 例如

$$\omega_{\text{正交}} = (2\pi)^2 \begin{bmatrix} \frac{1}{a_1^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{a_2^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{a_3^2} \end{bmatrix} \quad (10)$$



晶面间距

下面给出一些晶系的晶面距离通式 (基于惯用晶胞)

$$\text{立方晶系: } d(hkl) = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad (a = b = c)$$

$$\text{四方晶系: } d(hkl) = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + \left(\frac{a}{c}\right)^2 l^2}}, \quad (a = b \neq c)$$

$$\text{正交晶系: } d(hkl) = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}, \quad (a \neq b \neq c)$$

$$\text{六方晶系: } d(hkl) = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2 + hk + k^2) + \left(\frac{a}{c}\right)^2 l^2}}, \quad (a = b \neq c)$$

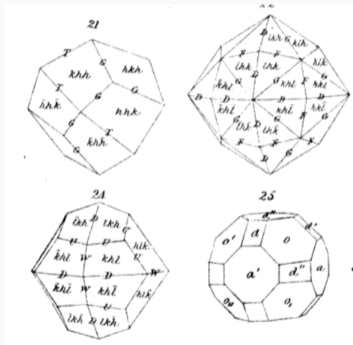


历史：威廉·霍勒斯·米勒



图源：维某基

威廉·霍勒斯·米勒 (William Hallowes Miller, 1801–1880 年, 图 5.11(b)) 是一位英国矿物学家与晶体学家。虽然所谓的米勒指数 (Miller indices) 早先已由其他晶体学家提出, 但因米勒在其著作与教学实践中广泛运用该指数, 故这一命名被归功于他。米勒指数与所谓的魏斯指数 (Weiss indices) 互为倒数关系。米勒还创立了沿用至今的 (hkl) 符号体系来指代这些指数。此外, 米勒于 1839 年研制出首台双圆测角仪。



A Treatise on Crystallography.
W. H. Miller (Cambridge 1839).

倒格子

- 重新考虑晶面的法向量 \vec{g} , 考虑所有可能的整数组合 h, k, l .

$$\vec{g} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3, \quad h, k, l \in \mathbb{Z}. \quad (11)$$

这定义一套新的布拉维格子, 称为**倒格子**, \vec{g} 称为**倒格矢**. 原布拉维格子称为**正格子**.

- 基矢 $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ 满足正交关系(6), 可以显式写为 (V_c 为格子**单胞**体积)

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3, \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_3 \times \vec{a}_1, \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2. \quad (12)$$

- 倒格子存在的空间成为**倒空间**, 或者称为**波矢空间**或 **\vec{k} -空间**, 因为 \vec{b}_i 具有波矢量纲

$$\vec{k} = \sum_{i=1}^d k_i \vec{b}_i, \quad k_i \in \mathbb{R}. \quad (13)$$



倒格子与正格子

- 倒格子原胞的体积为

$$V_c^* = \vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2 \times \vec{b}_3 = \frac{(2\pi)^3}{V_c}. \quad (14)$$

- 引入正格子和倒格子的基矢矩阵

$$A = [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3] = \begin{bmatrix} a_{x1} & a_{x2} & a_{x3} \\ a_{y1} & a_{y2} & a_{y3} \\ a_{z1} & a_{z2} & a_{z3} \end{bmatrix}, \quad B = [\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3] = \begin{bmatrix} b_{x1} & b_{x2} & b_{x3} \\ b_{y1} & b_{y2} & b_{y3} \\ b_{z1} & b_{z2} & b_{z3} \end{bmatrix}. \quad (15)$$

- 正交关系: $A^T B = B^T A = I_{3 \times 3}$. 因此 $B^T = 2\pi A^{-1}$.
- 例: 面心立方晶格的倒格子是体心立方, 反之体心立方格子的倒格子是面心立方.

$$A = \frac{a}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad B = \frac{2\pi}{a} \begin{bmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$



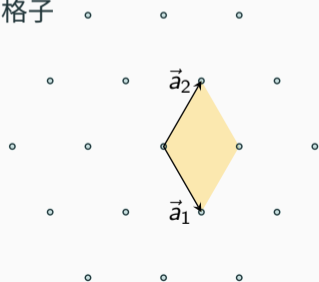
倒格子: 推广到 d 维

- 对于 d 维布拉维格子, 可以通过正交关系引入其倒格子基矢

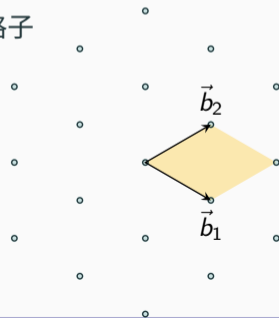
$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad i = 1, \dots, d. \quad (16)$$

$$\vec{g}_i = \sum_{i=1}^d h_i \vec{b}_i, \quad h_i \in \mathbb{Z}. \quad (17)$$

二维六方格子



倒格子



为何引入到空间的概念？ 矢量内积

- 在笛卡尔基下, 由于基矢正交归一, 矢量内积可以计算如下

$$\vec{u} \cdot \vec{v} = \sum_{ij} \tilde{u}_i \tilde{v}_j \hat{e}_i \cdot \hat{e}_j = \sum_i \tilde{u}_i \tilde{v}_i,$$

- 但是晶格的基矢不一定正交, 度规 $\omega_{ij} = \vec{a}_i \cdot \vec{a}_j$ 不是单位矩阵, 没有正交基下的简化

$$\vec{u} \cdot \vec{v} = \sum_{ij} u'_i v'_j \hat{a}_i \cdot \hat{a}_j = \sum_{ij} u'_i v'_j \omega_{ij}$$

- 如果对于两个矢量分别用正基矢和倒基矢 (互为对偶基矢, 合称双正交体系) 展开

$$\vec{r} = \sum_{i=1}^d x_i \vec{a}_i, \quad \vec{k} = \sum_{i=1}^d k_i \vec{b}_i \quad (18)$$

则矢量内积可写为

$$\vec{k} \cdot \vec{r} = 2\pi \sum_i k_i x_i$$



为何引入到空间的概念？傅立叶变换

- 理想晶体具有空间周期性, 因此傅里叶变换在处理晶体问题时是重要的工具.
- 对于可积函数 $f(\vec{r})$, 傅里叶变换由如下关系给出

$$f_{\vec{k}} = \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} f(\vec{r}), \quad f(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} f_{\vec{k}}. \quad (19)$$

$$\int d\vec{r} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} = (2\pi)^d \delta(\vec{k}-\vec{k}'). \quad (20)$$

- 如果 $f(\vec{r})$ 为周期函数, $f_{\vec{k}} = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} f_{\vec{k}}$, 傅立叶分量 $f_{\vec{k}}$ 仅在 \vec{k} 为倒格矢时非零
- 因此, 给定布拉维格子 (正格子) $DL = \{\vec{R}\}$, 可以定义倒格子 (RL) 如下

$$RL = \{\vec{k} | e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1, \forall \vec{R} \in DL\}. \quad (21)$$

- 推论: DL(格子, 不是晶体) 和 RL 具有相同的点群对称性



傅立叶级数

晶体中的许多物理量是周期函数, 例如电荷密度、电势等, 可以写为傅里叶级数

$$\begin{aligned} f(\vec{r}) &= \sum_{\vec{g}} f_{\vec{g}} e^{i\vec{g}\cdot\vec{r}}, \\ f_{\vec{g}} &= \frac{1}{V_c} \int_{\text{单胞}} d\vec{r} e^{-i\vec{g}\cdot\vec{r}} f(\vec{r}). \end{aligned} \quad (22)$$

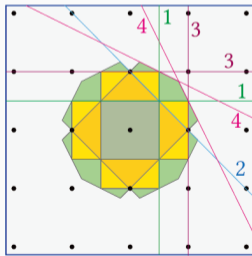
$$\begin{aligned} f_{\vec{g}} &= \frac{1}{V_c} \int_{\text{uc}} d\vec{r} e^{-i\vec{g}\cdot\vec{r}} f(\vec{r}) = \frac{1}{V_c} \sum_{\vec{g}'} \int_{\text{uc}} d\vec{r} e^{-i(\vec{g}-\vec{g}')\cdot\vec{r}} f_{\vec{g}'} \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{g}'} \sum_{\vec{R}} \int_{\text{uc}(\vec{R})} d\vec{r} e^{-i(\vec{g}-\vec{g}')\cdot\vec{r}} f_{\vec{g}'} \\ &= \sum_{\vec{g}'} \frac{(2\pi)^d}{V} \delta(\vec{g}-\vec{g}') f_{\vec{g}'} = \sum_{\vec{g}'} \delta_{\vec{g},\vec{g}'} f_{\vec{g}'} = f_{\vec{g}} \end{aligned}$$



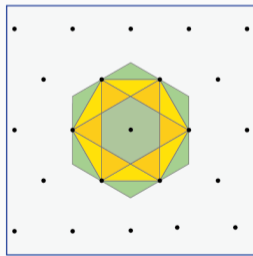
布里渊区

- 倒格子的魏格纳-赛茨原胞称为 (第一) 布里渊区.
- 可以推广到高阶布里渊区: 第 n 布里渊区是从到空间原点出发需要跨越 $n - 1$ 个布拉格面才能到达的点的集合.
- 布拉格面是原点和倒格点 \vec{g} 连线的垂直平分面, 也称为布里渊区边界 (zone boundary)

$$\vec{r} \cdot \vec{g} = \frac{1}{2} g^2 \quad (23)$$



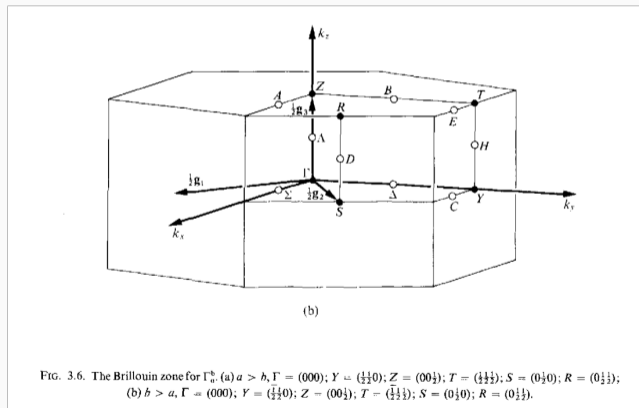
二维方格子



二维六方格子

布里渊区

布里渊区的形状、高对称点和路径等信息: *Mathematical theory of the symmetry in solids.*
Bradley and Cracknell. (OUP 2010)



谢谢!