

結晶面の指数

(hkl) 面とは...

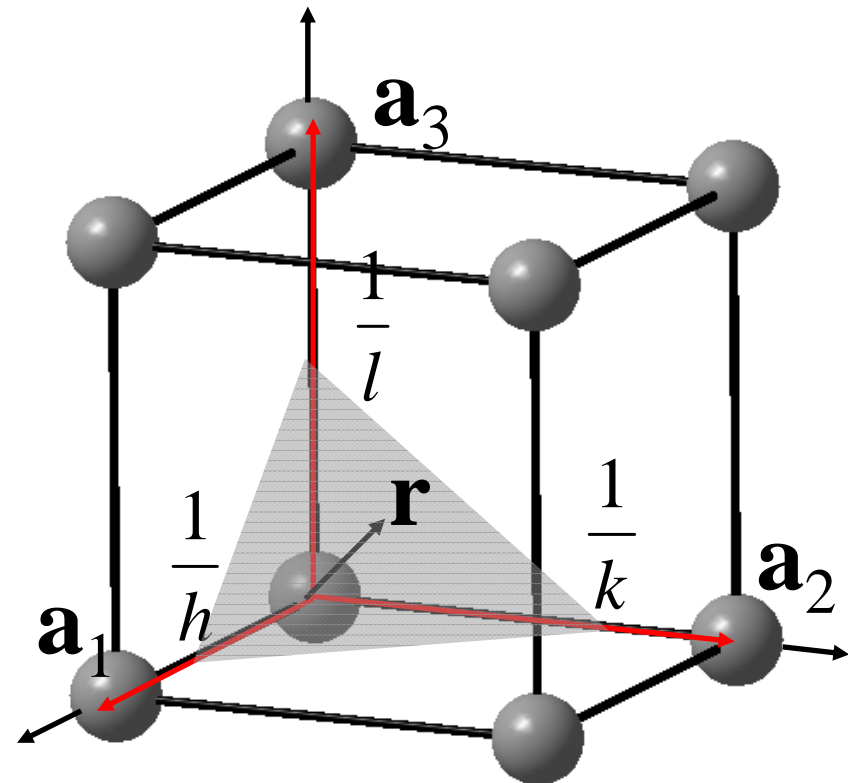
\mathbf{a}_1 方向に $1/h$,
 \mathbf{a}_2 方向に $1/k$,
 \mathbf{a}_3 方向に $1/l$,
で定義される3点を含む平面

$[hkl]$ 方向とは...

$$\mathbf{r} = h\mathbf{a}_1 + k\mathbf{a}_2 + l\mathbf{a}_3$$

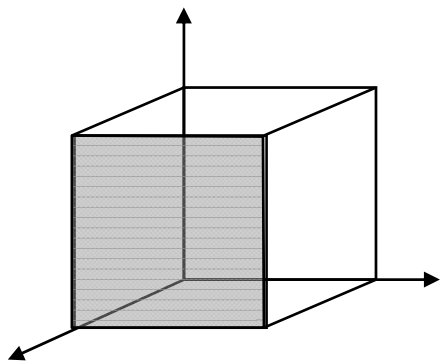
ベクトル \mathbf{r} の方向

$|\mathbf{r}|$ に意味はない

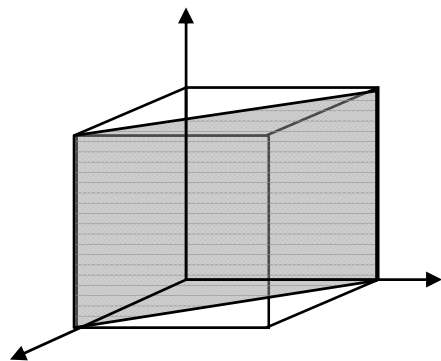


$[hkl]$ 方向と (hkl) 面は垂直

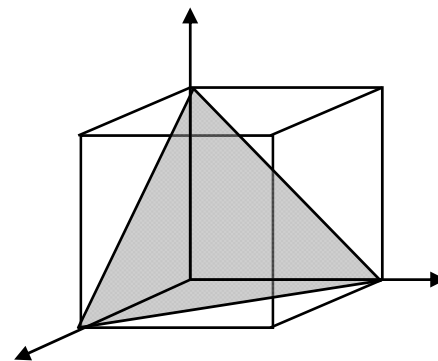
例



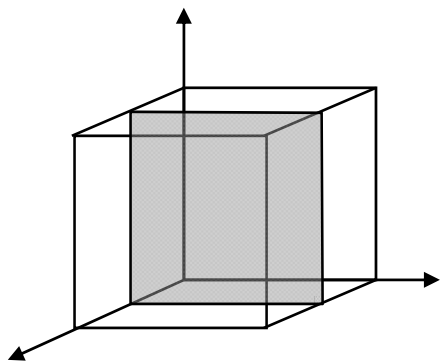
(100)



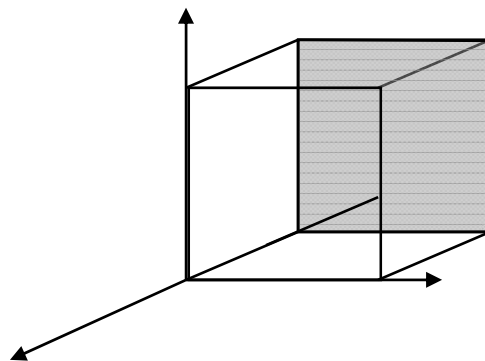
(110)



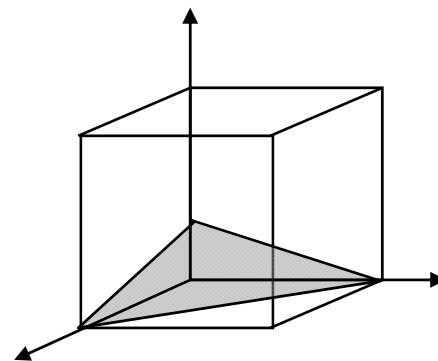
(111)



(200)



($\bar{1}$ 00)



(113)

括弧(かっこ)の定義

面を表す場合

(hkl)

$\{hkl\} \rightarrow (hkl)$ と等価な面をまとめて表す場合

$$\{100\} = (100), (010), (00\bar{1}), \dots$$

方向を表す場合

$[hkl]$

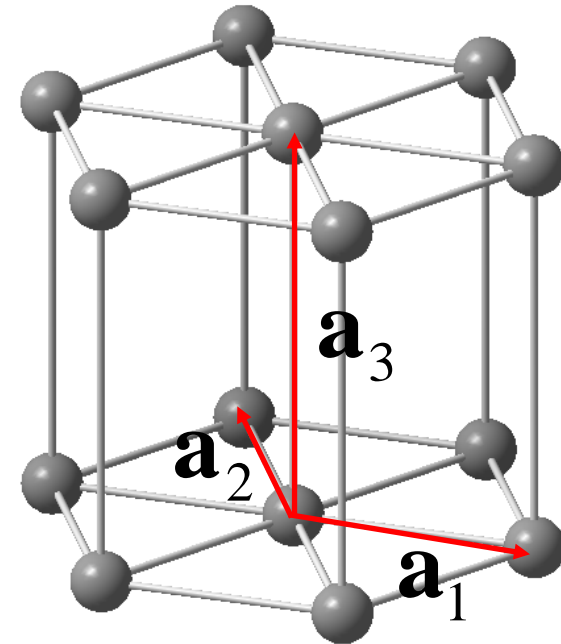
$\langle hkl \rangle \rightarrow \langle hkl \rangle$ と等価な方向をまとめて表す場合

$$\langle 100 \rangle = [100], [010], [00\bar{1}], \dots$$

六方晶の場合

底面だけで3個、高さ方向に1個
の指数を用いる

$$\underbrace{(10\bar{1}0)}_{\text{底面}}, \underbrace{(11\bar{2}0)}_{\text{高さ}}, (0001), \dots$$



平面上で独立なベクトルは2個しかないので、
3番目の指数は独立ではない

$$(h \ k \ -h-k \ l)$$

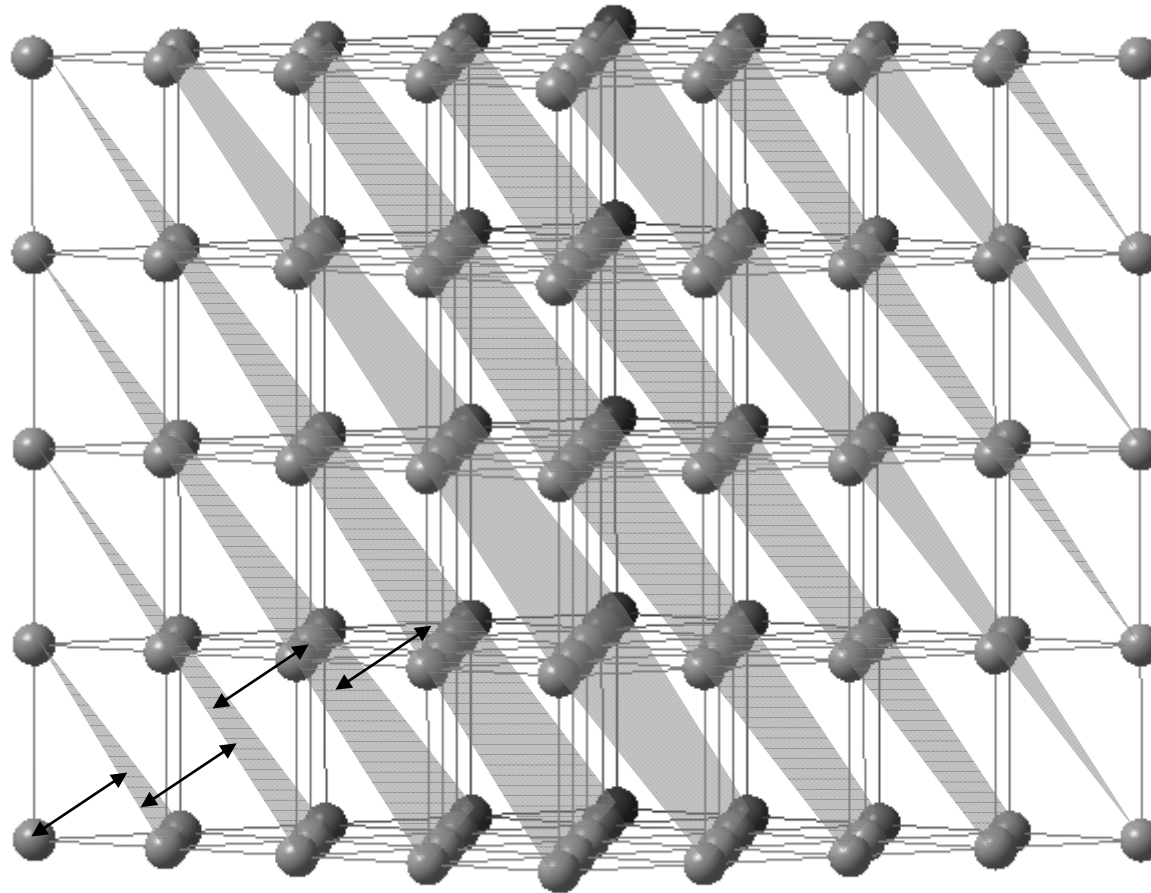
$$(h \ k \ \cdot \ l)$$

$$(h \ k \ l)$$

さまざまな表記法がある

面間隔

(111)面の場合



各面間の間隔 = 原点と原点に最も近い面までの距離

面間隔

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}|} \quad \text{ただし } \mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$$
$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}$$

立方晶の場合

$$d_{hkl}^2 = \frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2}$$

六方晶の場合

$$d_{hkl}^2 = \frac{a^2}{\frac{4}{3}(h^2 + k^2 + hk) + \left(\frac{a}{c}\right)^2 l^2}$$